
科学家揭示五重孪晶融合生长机制

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/34714.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

科学家揭示五重孪晶融合生长机制。成核和生长是结晶的两个重要阶段，对晶体的晶相、尺寸、形貌、性能等起着关键的控制作用。中国科学院新疆理化技术研究所研究员李俊杰团队联合美国劳伦斯国家实验室、欧洲伊比利亚国际纳米实验室利用球差矫正的透射电子显微术及分子动力学模拟，揭示了缺陷密度及接触方式影响的晶体融合生长机制。近日，相关研究成果发表于《美国化学会志》。

晶体成核、生长是个多因素控制的复杂过程，各因素之间相互关联制约，研究挑战性较高。李俊杰告诉《中国科学报》，受尺寸效应影响，当晶体尺寸减小到纳米级别时，其物理、化学和机械性能将发生显著变化。如果在更小的原子尺度下，如何实现晶体的有序堆垛，获得低缺陷、高质量的单晶？在攻读硕士、博士学位期间，李俊杰逐渐萌生了这一想法。

突破的关键在于原子尺度的结晶动力学观察。2016年，李俊杰在欧洲伊比利亚国际纳米技术实验室从事博士后研究，借助先进的电镜表征平台，他正式开始本项目的探索。在尺寸效应基础上，进一步引入缺陷密度、五重孪晶接触方式等变量，在原子尺度揭示晶体尺寸、缺陷密度及接触方式共同影响的晶体融合生长机制。

李俊杰举例称，晶体融合就像在微观世界内建筑施工，化学势是建筑工人，化学键可视作具有自适应特性的水泥，传统方式是将常规的长方体纳米晶进行规整堆砌，本项研究则尝试通过动态调整水泥的用量和分布，即进行原子与化学键的重新排列，将非规则多面体严丝合缝地融合成完美晶面。

原子尺度的动力学研究表明，不同于以往单晶的整体融合机制，当一个五重孪晶与更小的纳米晶体相遇，或两个五重孪晶以面对面的接触方式时，会通过接触孪晶单元快速融合及重排形成一个新的五重孪晶；而当以顶角接触顶角的方式相遇，其融合动力学过程则明显滞后且缓慢，不利于五重孪晶的形成。此外，本研究还揭示了由于缺陷的存在，原子柱逐个迁移导致的弯曲晶界形成机制。

这些结果完善了晶体生长理论的普遍认知，并为晶体的融合生长提供了原子尺度信息。李俊杰表示，目前研究集中在单元素的研究体系，未来团队将向更加复杂的化合物拓展，进一步完善结晶学领域的成核及生长理论。（来源：中国科学报 赵宇彤）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/jacs.5c06375>

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发