

科学家发现一种新的晶体生长模式——反应导向的取向聚集

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/5424.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！

科学家发现一种新的晶体生长模式——反应导向的取向聚集。近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所研究员秦晓英课题组与研究员杨勇、曾雉以及中南大学、西安交通大学、中国科学技术大学、广东工业大学、日本东北大学等科研机构研究人员合作，发现了一种新的晶体生长模式，相关结果在Cell Press旗下的期刊Matter (DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matt.2019.05.001>) 在线发表。

晶莹剔透的水晶，千奇百怪的钟乳石，下雪时窗户上美丽的六角形冰花：在这些令人感叹的自然界的造化之功的背后，有一个共同的物理过程在发生作用——结晶过程。不仅如此，自然界以及人工合成的晶体在现代科学技术的各个领域有着广泛的应用：例如，半导体工业的核心材料——单晶硅，在激光器以及量子光学实验中极为重要的非线性光学晶体——偏硼酸钡 (BBO) 晶体。此外，高品质的单晶样品经常是实验上观测和研究各种新奇量子现象所必需的。因此，关于晶体生长的研究不论在科学上还是在实际应用中都是非常重要的。

事实上，人们对晶体生长的微观机制的研究已经有超过100年的历史。传统的观点(经典形核理论)认为，晶体生长的微观过程是这样的：构成晶体的原子或者分子在热运动的驱动下，发生随机的碰撞并键联在一起，逐渐形成一个小团簇；当小团簇的尺寸大于某个临界尺度(临界晶核)之后，它就会倾向于不断地吸收更多的原子/分子同伴而继续长大，直到成为宏观尺度的晶体，这就是经典模式。这一观点在最近20年受到了挑战。人们在实验上发现，用水热法合成一些纳米晶体的过程中，一些尺寸较小的纳米晶粒，会沿着特定的方向互相靠近，通过界面熔合彼此连接在一起，形成大尺度的单晶。这一过程直接越过了传统观点所认为的原子/分子逐个连接的过程。这种不同于传统观点的晶体生长模式被命名为取向聚集(Oriented Attachment, 简称为OA)。这种模式在最近十多年引起了广泛的关注。一直以来，人们认为取向聚集主要有两种形式：1.

由于纳米颗粒表面/界面应力驱动，使之沿着晶格匹配的特定取向聚集和长大；2. 加入表面活性剂，使得纳米颗粒沿着特定取向聚集和长大。这两种形式有一个共同点，就是聚集前后颗粒的晶体结构和化学成分不变，即为一个物理过程(图1(A, B))。

那么，有没有可能在发生取向聚集的过程中，组分颗粒与其所处环境中的可溶性物质之间发生化学反应，最后形成具有不同(更复杂的)化学成分及不同相结构的新的晶体呢？最近，固体所研究人员通力合作，从实验和理论两方面证实了：纳米颗粒在取向聚集之后，可以形成新的晶体。这一工作对上述问题给出了肯定的回答。研究人员在稳定的碳酸钇 ($Y_2(CO_3)_3$)

纳米颗粒悬浮液中，加入电解质 $NaHCO_3$ (或者 NH_4HCO_3)，在适当温度经过反应之后，形成微米级的片状单晶体。X射线衍射的数据分析表明，得到的产物为复盐 $NaY(CO_3)_2$

· 6H₂O(或者NH₄Y(CO₃)₂ · H₂O)。他们进一步采用高分辨透射电镜(HRTEM)、场发射扫描电镜(FESEM)、原子力显微镜(AFM)、小角度X射线散射(SAXS)、同步辐射扩展X射线吸收精细结构(EXAFS)等先进的实验手段对反应前后的产物的颗粒微观形貌以及局域原子结构进行表征;结合第一性原理计算,在理论上分析了经典和OA模式的反应速率,从而令人信服地证明了这是一种新的取向聚集(OA)模式。由于伴随颗粒取向聚集过程发生化学反应(图1(C)),故这一晶体生长模式被称为化学反应导向的取向聚集(Chemical Reaction-directed Oriented Attachment, 简称为CROA)。CROA模式的发现,将会加深对自然界矿物形成机理的认识,为合成新材料提供新的思路和途径,具有重要的理论和实践意义。

上述工作获得国家自然科学基金的资助。

晶体取向聚集(OA)模式示意图:(A)传统形式1:纳米颗粒直接界面融合形成单晶;(B)传统形式2:纳米颗粒在表面活性剂帮助下形成单晶;(C)化学反应导向的取向聚集模式。

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](https://www.iikx.com)转发