金纳米颗粒融合生长的理论机制研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/8343.html

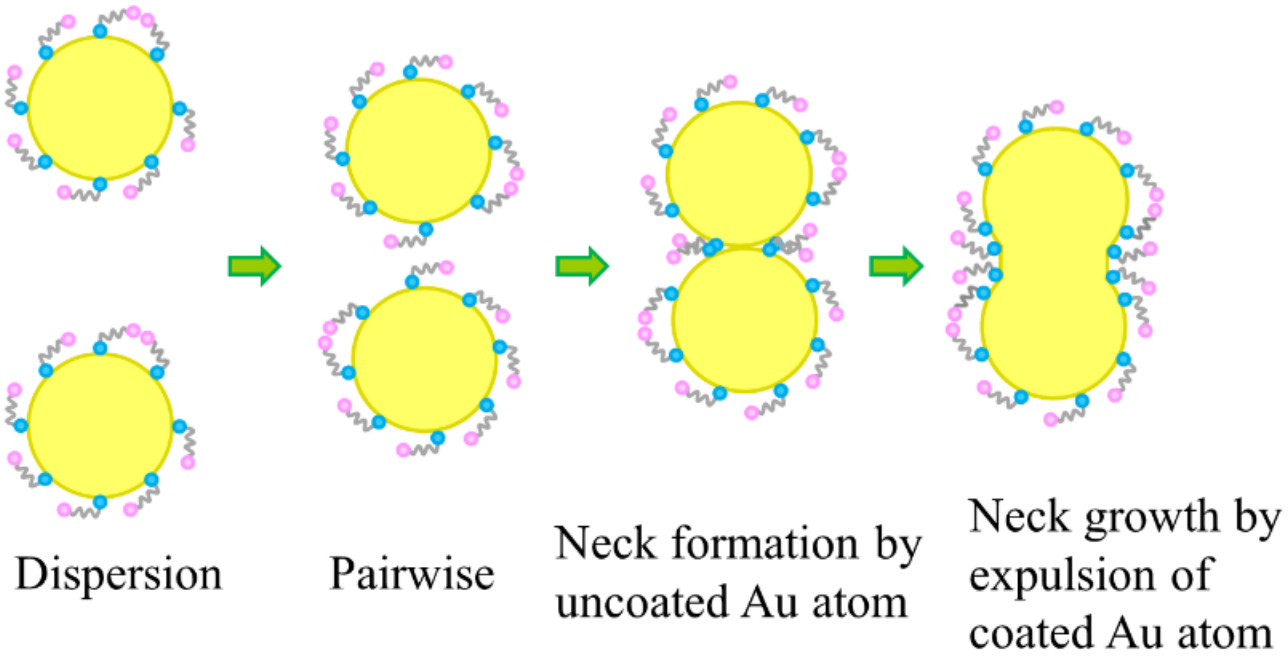
本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

金属、纳米颗粒在能量转换、催化、生物成像和传感器等领域具有广泛的应用价值。金属纳米颗粒的融合生长普遍存在于纳米颗粒的结晶和自组装过程中，对于操控纳米颗粒的结构具有独特的优势和应用潜质。近日，中国科学院上海高等研究院高嶷课题组在水溶液中金纳米颗粒的融合生长机制的理论研究方面取得新进展，相关结果发表于《物理评论快报》（*Physical Review Letter*，2020，124，066101）。

近年来，纳米科学领域关注的焦点正在从尺寸和形状均匀的单组分纳米颗粒转向具有增强性能和多功能性的多组分纳米颗粒，合成反应的复杂性的增加迫切需要对纳米颗粒的生长机制具有深入的研究。受限于目前实验无法观测到融合生长过程中纳米颗粒间接触界面的结构变化，包括表面原子、配体以及溶液，融合生长的内在物理机制仍有待被阐述。

目前普遍认为水溶液中金属纳米颗粒表面配体垂直站立，阻止金属内核接触融合，所以只有颗粒间接触面上的配体完全脱落之后融合生长才能发生。然而配体的脱落需要相对较高的温度并且会引起金属内核的严重变形，该观点无法解释实验中常温下巯基保护的金纳米颗粒的自发融合生长。中科院上海应用物理研究所博士郭盼在研究员高嶷（上海高研院）指导下，运用分子动力学模拟研究，提出了水溶液中巯基羧酸修饰的金纳米颗粒不需要配体脱落的融合生长机制。首先疏水相互作用促使配体包裹金纳米颗粒，同时配体之间的疏水相互作用主导纳米颗粒形成聚集状态。然后没有完全被配体覆盖的表面金原子发生接触，接触界面的原子以局部重排的方式把带配体的金原子排出到接触面以外实现完全的融合生长。该机制为金属纳米颗粒的合理设计和可控合成奠定了基础。

该项研究工作得到国家自然科学基金委、中国博士后科学基金、国家超级计算广州中心、天津中心、上海超级计算中心的共同资助和支持。



水溶液中巯基羧酸修饰的金纳米颗粒的融合生长机制示意图

研究团队单位：上海高等研究院

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转发