

---

# 福建物构所晶体生长习性调控研究取得新进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/8382.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！**

晶体生长习性对晶体的物理化学特性和药物活性有重大影响，因此对化学工业及药物生产研发具有重要意义。目前使用添加剂调控晶体生长习性已经取得了较好的发展，但多数研究对调控机理的解释缺少理论计算支撑，仅有少数研究涉及NaCl、KCl等立方结构晶体习性调控的理论计算。

中国科学院福建物质结构研究所光电材料化学与物理重点实验室庄欣欣课题组在实验室开放基金项目的支持下，首次使用尿素添加剂调控五水硫酸铜晶体生长习性，并利用第一性原理计算研究了添加剂分子在不同晶面的吸附能及吸附状态，以解释其调控机理。在尿素水溶液中，硫酸铜的生长习性为斜六棱柱，与自然状态下生长的菱形相比，尿素的调控效果显著。在不同条件下，尿素对晶面生长起两种相反的作用：在低尿素浓度下（<15 wt%）促进晶体生长，在高尿素浓度下（>15 wt%）起阻碍作用，此现象可归因于热力学因素和动力学因素的综合影响。理论计算表明，尿素分子对（01-1）面表现出选择性吸附，C=O与Cu成键，阻碍H<sub>2</sub>O与Cu结合，该晶面生长速率减小，由此影响晶体生长习性。五水硫酸铜晶胞属PT空间群，相较现有研究的立方晶系，其晶面原子分布及相互作用更为复杂。此研究为有机添加剂调控晶体习性提供了新方法，为评估有机添加剂提供了新思路，促进了理论计算在晶体生长习性调控领域中的应用。相关研究成果发表在英国皇家化学会CrystEngComm 杂志，文章第一作者为在读硕士生郑石贵。

[文章链接](#)

研究团队单位：福建物质结构研究所

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