

晶体的生长习性^{*}

李文军, 施尔畏, 郑燕青, 殷之文

(中国科学院上海硅酸盐研究所, 上海, 201800)

Growth Habit of Crystal

LI Wen-jun, SHI Er-wei, ZHENG Yan-qing, YIN Zhi-wen

(Shanghai Institute of Ceramics Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China)

晶体的生长习性是在一定条件下经常出现的晶体形貌。它不仅由晶体的内部结构决定, 而且受其外部条件的影响。

有关晶体生长习性的实验工作已经作了大量报道。但是其理论研究工作却存在许多问题。BFDH 法则从晶体的面网密度角度预测晶体的生长习性; PBC 理论从键链角度给出了晶体的理论生长习性, 但上述模型在解释晶体生长习性的问题上存在着一定的不足, 例如不能合理地解释极性晶体(如 ZnO, SiO₂)以及一些非极性晶体(如 α -Al₂O₃)的生长习性。

1994 年仲维卓教授首先提出负离子配位多面体生长基元模型。解决了晶体生长过程中生长基元的存在问题。

本文在此基础上提出一种新的生长习性判断法则——配位多面体生长习性法则。其主要内容为: 晶体各面族的界面上的生长速度与晶体中配位多面体在各界面上显露的元素(包括顶点、棱、面)有关。如配位多面体在各面族的界面上显露的元素种类不同, 则显露配位多面体顶点的生长速度快, 显露配位多面体的棱的生长速度次之, 显露配位多面体的面的生长速度最小。如配位多面体在界面上显露的元素(包括顶点、棱、面)种类相同, 则各面族的生长速度与配位多面体在界面上显露的元素的数目有关, 配位多面体在界面上显露的元素的数目多的面族的生长速度快。采用此法则成功地解释了各种氧化物晶体(ZnO, α -Al₂O₃ 和 TiO₂)及非氧化物晶体的生长习性。

关键词: 生长习性; ZnO; α -Al₂O₃; TiO₂; 负离子配位多面体

Key words: growth habit; ZnO; α -Al₂O₃; TiO₂; anion coordination polyhedra

^{*} 国家自然科学基金资助项目(编号: 59832080 和 59772002)。