

晶体的微观生长机理及其应用^{*}

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)

Microcosmic Growth Mechanism of Crystal and Its Application

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

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

从宏观角度看, 晶体的生长过程可以看成是固液界面层不断向液相中推进的过程, 主要涉及界面的结构特性和界面的动力学。有关晶体生长机理的理论主要有完整光滑面理论, 非完整光滑面理论和粗糙面理论。但是以上理论都建立在热力学理论上。热力学函数在处理实际问题时一般只考虑反应前后体系的 Gibbs 自由能的变化, 忽略了晶体生长的微观机制, 而且热力学函数很难测量, 因此, 尽管晶体生长动力学理论的内容相当丰富, 但是上述理论能在实际中得到有效应用的很少。

从微观角度看, 晶体的生长机理包括生长基元的形成和生长基元从流体相中不断通过界面而进入晶格座位, 问题的关键是生长基元以何种形式存在, 以及如何受界面制约。有关晶体的微观机理的研究起步较晚。

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。但是上述模型只解决了生长基元的存在问题, 没有考虑生长基元在界面上的行为。本文在此基础上提出了配位多面体生长机理模型。即晶体的微观形成过程主要包括: 生长基元的形成, 生长基元之间的氧桥合作用和阴离子基团的质子化过程。并采用此模型解释了氧化物晶体的晶粒粒度的变化规律, 以及在多元氧化物晶体制备中的生长条件的选择。

关键词: 生长习性; 生长机理; 配位多面体; 生长基元

Key words: growth habit; growth mechanism; coordination polyhedron; growth units

^{*}国家自然科学基金资助项目(59832080; 59772002)。