

晶体的习性机制与实际形态控制^{*}

王步国 施尔畏 仲维卓 夏长泰 田明原 李文军 殷之文

(中国科学院上海硅酸盐研究所, 上海 201800)

Understanding and Controlling the Morphology of Crystal

Wang Buguo Shi Erwei Zhong Weizhuo Xia Changtai

Tian Mingyuan Li Wenjun Yin Zhuwen

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

晶体的结晶习性是指晶体在一定的物理化学条件下所表现出的形态特征。晶体的最终形态是由晶体各晶面相对生长速率所决定的,生长快的晶面易消失,生长慢的晶面易显露。晶体的形态主要是由晶体的内部结构所决定的,而生长时物理化学条件也有重要的影响;在忽略外在因素影响的情况下,晶体的形态特征从布拉维法则和唐纳-哈克定律(又称 BFDH 法则)。反之,则可以使用 BFDH 法则对晶体的理论习性进行预测并和晶体的实际形态进行比较来考察物理化学条件对晶体生长的影响,也就是说,晶体的形态特征反映了生长时的物理化学条件。如果某一晶面理论上生长快应消失或显露面积应该小,而最终显露面积大,说明该晶面生长过程中受到“禁阻”;或者是其它的晶面生长受到“促进”使得晶体习性发生改变。设晶面 1 的生长速率 K_1 大于晶面 2 的生长速率 K_2 , 那么晶面 1 的显露面积 S_1 应小于晶面 2 的显露面积 S_2 ; 当晶面 1 的生长受到禁阻时, 则有 $K_1 < K_2$, $S_1 > S_2$, 晶体习性发生了改变。假如对所要生长的晶体结构进行分析并掌握了晶体的界面性质, 则可以根据晶体的界面性质寻找或设计出生长溶剂(或杂质)与所要禁阻的晶面发生作用, 以实现禁阻目的, 这样就可以使晶体的形态得到人为控制和实现晶体习性的人工调制。

本文将水热条件下若干晶体的生长为例, 研究水热条件下晶体生长的结晶习性与形态控制问题。人们通过对“晶体结晶相貌——晶体结构——生长时的物理化学条件”三者关系的研究, 就可以根据晶体的习性规律, 并通过改变晶体生长的物化条件实现晶体生长的“人为控制”和晶体形态的“人工调制”。

现以氧化锌晶体为例。氧化锌晶体是极性晶体, 属六方纤锌结构, 纤锌矿晶体结构表明, Zn, O 原子在 C 方向上以 $A-B-A-B$ 层状排列, 而且两个极面上的界面结构不同, 正极面上为锌离子显露面, 负极面上为氧原子显露面。根据晶体习性调制的基本思想和氧化锌晶体的结构特点, 可以在不同碱度的水热介质中制备形态各异的氧化锌超细晶粒。

水热法是制备优质陶瓷粉体(微晶)的湿化学方法之一。但是, 晶粒的形态却随着晶粒生长时的水热条件的不同而不同, 控制陶瓷粉体具有一定的形态是提高陶瓷烧结活性和制备高性能陶瓷的基础。水热法制备陶瓷粉体(微晶粒)是一个晶体生长的过程。本文报道具有重要应用的氧化锌、氧化铝、硫化锌等晶粒的水热制备, 通过研究水热条件下晶粒习性的形成机制, 选择不同的水热条件和添加剂以实现晶粒形态的人为控制, 制备出形态各异的(如纤维状、颗粒状等)满足不同应用的晶粒, 成功实现水热条件下晶体形态的人为制调制。

关键词: 晶体生长, 晶体习性, 形态控制

Key words: crystal growth, crystal habit, controlling morphology

* 国家自然科学基金重点项目