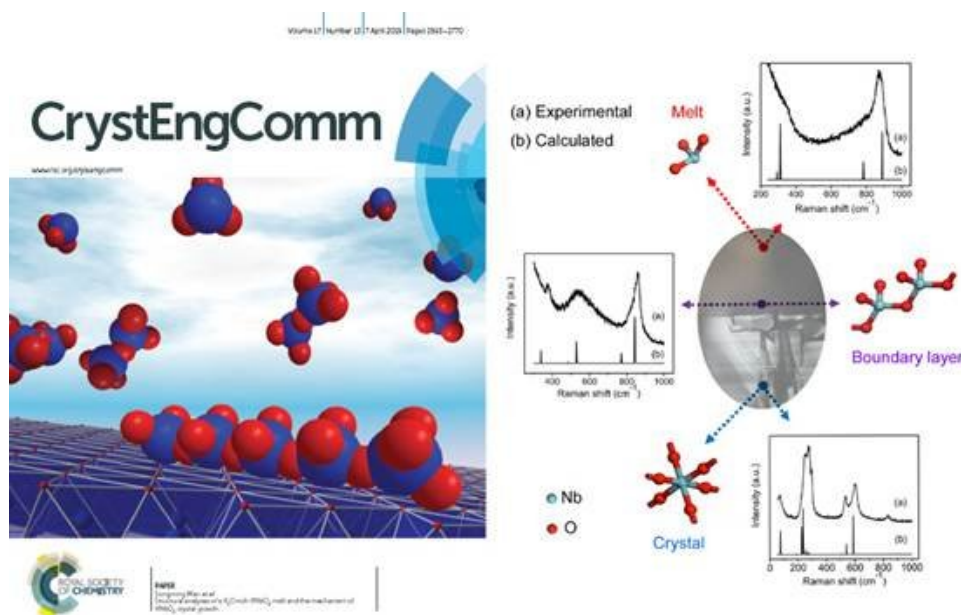


中科院高温熔体结构研究获得新进展

来源：中国科学院 日期：2015-04-01

内容摘要：中国科学院合肥物质科学研究院在高温熔体结构研究中再次获得进展。为解决在研究过程中，熔体结构的复杂性、实验技术和理论分析方法的不完善等因素的制约，研究人员创新了熔体结构研究方法，为认识复杂氧化物熔体的结构、性质和微观过程奠定了坚实基础。



近期，中国科学院合肥物质科学研究院安徽光学精密机械研究所高温熔体结构研究再次受邀作为封面文章刊登在国际晶体学杂志 CrystEngComm (《晶体工程通讯》) 上。

高温熔体结构关系熔体的微观过程和宏观性质，是现代地学和材料制备科学研究最重要的基础和前沿问题之一。但受到熔体结构的复杂性、实验技术和理论分析方法的不完善等因素的制约，目前学界对熔体结构的认识十分有限。可以说，这一研究一向是晶体生长研究的技术难点。

安徽光机所晶体材料研究室成功突破这一难点，创新了熔体结构研究方法：提出了基于晶体结构及其熔化过程中的结构转变来认识熔体结构的新思路；通过高温 Raman 光谱技术发现了晶体熔化过程中所伴生的配位数转变现象；提出了描述复杂熔体的链状聚合物结构模型；建立了新的、基于密度泛函理论的熔体结构分析方法。为认识复杂氧化物熔体的结构、性质和微观过程奠定了坚实基础。

近期，该研究室研究员万松明等人将上述观点和方法进一步应用于铌酸盐高温溶液结构研究。依据 KNbO₃ 晶体实际生长过程，建立了晶体与 KNbO₃ 高温溶液 (K₂O 过量约 5mol%) 平衡体系。通过高温 Raman 光谱技术和第一性原理计算方法发现：在 KNbO₃ 高温溶液本体中存在的主要结构单元是 K 离子和孤立的 [NbO₃] 基团。在晶体-溶液界面附近存在厚度约为 5μm 的结构边界层，在边界层内相邻的 [NbO₃] 基团通过共享氧原子形成 NbO₂O₂ (O = 桥氧) 链。在 KNbO₃ 晶体表面，这些 NbO₂O₂ 链进一步聚合形成 NbO₆ 八面体，即 KNbO₃ 晶体的基本结构单元。上述结果是有关铌酸盐晶体生长边界层及其结构的首次报道，它为认识 KNbO₃ 晶体生长体系的宏观性质、K₂O 助溶剂的作用机理以及 KNbO₃ 晶体中缺陷的形成提供了科学依据。

此项工作得到了国家自然科学基金重点和面上项目的资助。