[Highlight]

doi: 10.3866/PKU.WHXB201702172

www.whxb.pku.edu.cn

原子尺度原位揭示纳米粒子相变微观机制

赵进才

(中国科学院化学研究所, 北京 100190)

In situ Atomically Revealing the Microscopic Mechanism of Phase Transition in Single Nanoparticles

ZHAO Jin-Cai

(Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P. R. China)

凝固和熔化是自然界普遍存在的现象, 广泛涉及到工业生产及物理、化学、生命、材料和环境等科学研究领域。但是, 由于缺乏直接实验依据, 目前关于液态、固态之间相变的微观机制认识尚不十分清楚。为此, 在原子尺度观察材料相变过程中的成核、生长等微观动力学过程则是认识相变微观机制的关键。由于相变过程的不连续性、瞬时性且发生的空间范围往往在原子尺度等特点, 实验上很难实现在操控材料相变的同时对其微观动力学过程进行全面和详细记录。因此, 相变微观动力学研究至今仍是一项具有挑战性的工作。为了克服这一困难, 在实验上, 目前普遍利用胶体粒子(粒径一般在微米量级)模拟实际物质中的原子来构建胶体体系作为研究对象¹, 在该体系中相变速率较慢且基本粒子粒径较大, 容易观察到体系的相变过程。但是, 这种模拟体系相变与实际相变仍可能存在较大差别。在纳米粒子中, 一个独立的成核、生长过程通常能导致整个纳米粒子的相变。因此, 单个纳米粒子是用来揭示物质相变微观机制较为理想的研究对象。

中国科学院新疆理化技术研究所王传义、李英宣等与美国犹他大学臧冷教授等合作, 在前期Bi纳米粒子制备和生长机制研究基础上^{2,3}, 通过原位高分辨透射电镜, 利用固态和液态Bi导热性的差异, 巧妙地实现了Bi纳米粒子在SrBi₂Ta₂O₉基底上温度的自我调控, 进而实现了固态和液态Bi的

可逆相变。在原子尺度上原位实时观察到了固态和液态可逆相变在成核之前、成核、生长的整个微观动力学过程。在固-液相变过程中发现了以缺陷作为成核位点的异相成核生长机制。在实验上验证了Samanta等⁴通过理论计算提出的固-液转变微观过程。在液-固相变中观察到了通过一种有序液体中间态的两步机制, 为经典的一步机制提供了有效补充。在原位观察基础上, 研究者进一步提出了一种“作用-松弛”的介尺度相变模型。该研究为液固可逆相变提供了一个新的微观结构演化的物理图像, 为今后在理论和实验上深入理解相变这一重要的科学问题提供了借鉴。相关研究成果发表在*Nature Communications*上⁵。题目为*In situ* study on atomic mechanism of melting and freezing of single bismuth nanoparticles。

References

- (1) Wang, Z.; Wang, F.; Peng, Y.; Zheng, Z.; Han, Y. *Science* **2012**, 338, 87. doi: 10.1126/science.1224763
- (2) Li, Y.; Zang, L.; Li, Y.; Liu, Y.; Liu, C.; Zhang, Y.; He, H.; Wang, C. *Chem. Mater.* **2013**, 25, 2045. doi: 10.1021/cm400065x
- (3) Li, Y.; Bunes, B. R.; Zang, L.; Zhao, J.; Li, Y.; Zhu, Y.; Wang, C. *ACS Nano* **2016**, 10, 2386. doi: 10.1021/acsnano.5b07197
- (4) Samanta, A.; Tuckerman, M. E.; Yu, T. Q.; Weinan, E. *Science* **2014**, 346, 729. doi: 10.1126/science.1253810
- (5) Li, Y.; Zang, L.; Jacobs, D. L.; Zhao, J.; Yue, X.; Wang, C. *Nat. Commun.* **2017**, 8, 14462. doi: 10.1038/ncomms14462