

# 2H<sub>1</sub> 型辉钼矿微结构研究

杨宜坪<sup>1,2,3</sup>, 陈爱清<sup>1,2,3</sup>, 陶奇<sup>1,2</sup>, 朱建喜<sup>1,2</sup>, 何宏平<sup>1,2,3\*</sup>

(1.中国科学院 矿物学与成矿学重点实验室/中国科学院 广州地球化学研究所, 广东 广州 510640;

2. 广东省矿物物理与材料研究开发重点实验室, 广东 广州 510640; 3. 中国科学院大学, 北京 100049)

矿物的多型是层状结构矿物的固有特征, 由于层与层之间的滑移和旋转使其堆垛重复方式的不同而形成多型。多型普遍存在于辉钼矿、石墨、硅灰石、云母、伊利石、绿泥石、高岭石等层状结构矿物中, 对于探究矿物和地质体的成因和寻找有用元素具有一定的标型意义。例如白云母产出在花岗岩和喷出岩中多为 1M 型, 伟晶岩中多为 2M<sub>1</sub> 型, 热液矿床中为 1M<sub>d</sub>、1M 和 2M<sub>1</sub> 型, 沉积岩中主要为 1M 和 1M<sub>d</sub> 型, 变质岩中为 1M、3T 和 2M<sub>1</sub> 型 (薛君治, 1991; 罗谷风, 2014)。

辉钼矿 (MoS<sub>2</sub>) 有 2H<sub>1</sub>、3R 和 1T 三种多型, 天然常见 2H<sub>1</sub> 型, 其次为 2H<sub>1</sub>+3R 型, 3R 型少见, 1T 型仅见合成报道 (Lin et al., 2014)。理论计算表明辉钼矿 2H<sub>1</sub> 多型的能量低于 3R 多型 (Coutinho et al., 2017), 所以天然辉钼矿多以 2H<sub>1</sub> 型产出 (Fron del and Wickman, 1970)。自 20 世纪 60 年代以来, 人们都是借助 X 射线单晶和粉晶衍射来研究辉钼矿的多型, 在 X 射线衍射谱中, 由于层状矿物的择优取向, 很难借助衍射峰的强度来准确鉴定衍射峰位置相同的多型, 如 2H<sub>1</sub> 和 2H<sub>2</sub> 型, 并且一些长周期的多型是难以用 X 射线衍射鉴定出来的。利用透射电镜 (TEM) 研究辉钼矿的微结构, 能从更微观的尺度准确来鉴定辉钼矿的多型, 在原子尺度观察上不同多型的堆垛和转变方式, 更直观观察辉钼矿的晶体缺陷, 位错和层错。

本研究分别利用原子力显微镜 (AFM) 和利用透射电镜 (TEM) 对大湖塘石英脉型辉钼矿进行表面微形貌和多型研究, 通过选取整表面生长痕迹未被破坏的辉钼矿, 在 AFM 下进行微形貌观察, TEM 下进行微结构研究。从 AFM 图中可以看出, 该颗粒为六方片状, 晶面夹角为 120 度为六次对称, 透射电镜下沿 [010] 方向的选区电子衍射 (SAED) 和快速傅里叶变换图 (FFT) 判断为 2H 多型, 扫描透射 (HRSTEM) 的原子相进一步判断为 2H<sub>1</sub> 型, 同时在高分辨透射电镜下 (HRTEM) 观察到了一些晶体缺陷。TEM 能够更直观地进行辉钼矿的微结构观察, 是研究辉钼矿生长过程的产生的缺陷以及不同多型的堆垛和转换方式的有效手段。

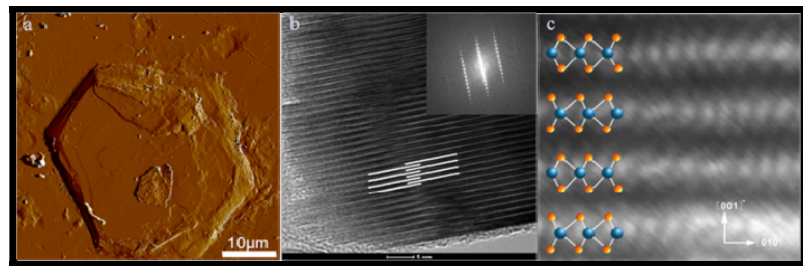


图 1 大湖塘辉钼矿的微形貌和微结构: (a) 原子力显微镜下六方片状结构; (b) 高分辨透射电镜 (HRTEM) 图和快速傅里叶变换图 (右上); (c) 高分辨扫描透射电镜 (HRSTEM) 的原子相判断为 2H<sub>1</sub> 型 (蓝色-Mo 原子, 橙色-S 原子)

## 参 考 文 献:

罗谷风. 2014. 结晶学导论 (第三版) [M]. 北京: 地质出版社, 1-230.

薛君治. 1991. 成因矿物学 (修订版) [M]. 中国地质大学出版社, 1-179

Coutinho S S, Tavares M S, Barboza C A, et al. 2017. 3R and 2H polytypes of MoS<sub>2</sub>: DFT and DFPT calculations of structural, optoelectronic, vibrational and thermodynamic properties [J]. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 111: 25-33.

Fron del J W and Wickman F E. 1970. Molybdenite Polytypes in Theory and Occurrence. II. Some Naturally-Occurring Polytypes of Molybdenite [J]. American Mineralogist, 55(11-1): 1857-1875.

Lin Y C, Dumcenccon D O, Huang Y S, et al. 2014. Atomic mechanism of the semiconducting-to-metallic phase transition in single-layered MoS<sub>2</sub> [J]. Nature Nanotechnology, 9(5): 391-396.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (Nos. 41530313, 41772039)

作者简介: 杨宜坪, 男, 1989 年生, 博士研究生, 研究方向: 矿物生长机制. E-mail: yyp2012@126.com

\* 通讯作者, E-mail: hehp@gig.ac.cn