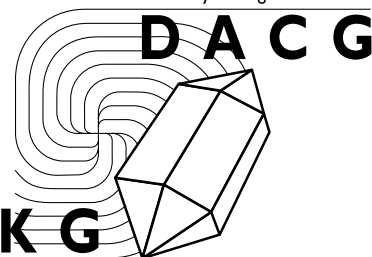


# FACET

dutch association for crystal growth



i n f o r m a t i e b l a d v a n d e

N V K G

nederlandse vereniging voor kristalgroei

13 februari 2006

nummer 1

## FACET

informatieblad van  
de NVKG, sectie van  
de KNCV en de NNV

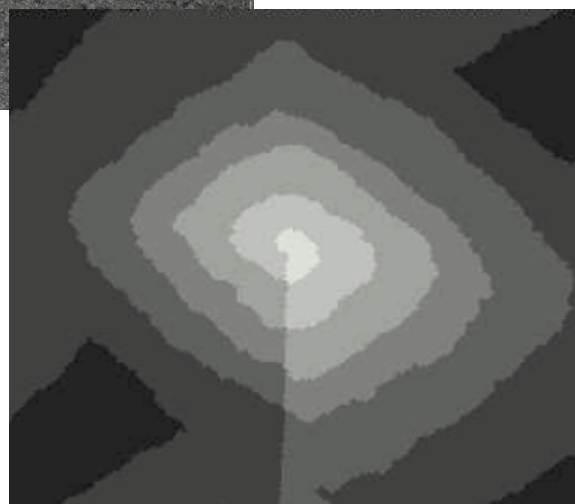
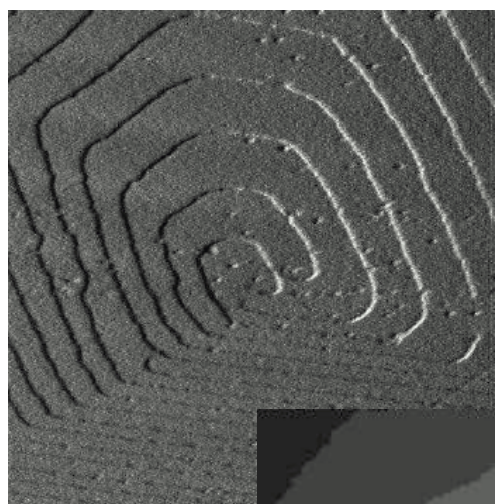
## redactie

R. van Gastel

## Redactieadres

dr. R. Van Gastel  
VasteStofFysica  
Universiteit Twente  
Postbus 217  
7500 AE Enschede  
tel (053) 4893106 (3147)  
fax (053) 4891101  
R.vanGastel@tnw.utwente.nl

## inhoud:



**Redactioneel en mededelingen 2**

**Verslag NVKG-prijs 2005 3**

**NVKG kristalgroeisymposium 2006 4**

**JANE-2006 6**

**BACG/DACG meeting 7**

**BIWIC-2006 8**

**Sitzung VDI-Kristallisation 10**

**Recente proefschriften 11**

**Congressen en symposia 12**

## Secretariaat NVKG

Prof.dr. J.P.J.M. van der Eerden  
Universiteit Utrecht  
Condensed Matter and Interfaces  
P.O. Box 80000  
3508 TA Utrecht  
Tel: 030 - 2533125  
Fax: 030 - 2532403  
E-mail: [J.P.J.M.vanderEerden@chem.uu.nl](mailto:J.P.J.M.vanderEerden@chem.uu.nl)

## Bestuur NVKG

<a href="#">prof.dr. E. Vlieg</a>	voorzitter
<a href="#">prof.dr. J. van der Eerden</a>	secretaris
<a href="#">dr. J. Arsic</a>	penningmeester
<a href="#">dr. R. van Gastel</a>	FACET/www
<a href="#">dr. J. ter Horst</a>	lid
<a href="#">dr.ir. L. van Oord</a>	lid
<a href="#">dr. G. Bögels</a>	lid

## Omslagfoto/Cover

Groeispiralen op tetraceen. Linksboven de experimentele vorm zoals waargenomen met behulp van een atomaire-kracht microscoop, rechtsonder de voorspelling via een computersimulatie. Verderop in deze FACET een uitgebreider beschrijving van de kristalgroeprij 2005. De figuur is aangeleverd door Herma Cuppen ([RU Nijmegen](#))

## Bestuursmededeling

Tijdens de jaarvergadering van de [NVKG](#), gehouden 11 november 2005 bij Albemarle te Amsterdam is door onvoorziene afwezigheid van Rob Geertman, de penningmeester niet formeel gedechargeerd. De kascommissie heeft de boeken van het afgelopen jaar voor de jaarvergadering wel reeds goedgekeurd. Het bestuur van de [NVKG](#) heeft bij de bestuursvergadering van 23 januari 2006 voorgesteld de penningmeester alsnog te dechargeren. Tegen dit voorstel kan tot 3 weken na dagtekening van deze FACET schriftelijk bezwaar worden aangetekend bij het secretariaat van de [NVKG](#).

## Wijziging verzending FACET

Met ingang van het tweede issue van de FACET van 2006 zal de verzendwijze van de FACET aangepast worden. In plaats van de huidige "opt-in policy" voor elektronische verzending van de FACET zal nu een "opt-in policy" voor een papieren kopie gehanteerd worden. Indien U de FACET op dit moment elektronisch ontvangt, staat U reeds op onze email-verzendlijst en hoeft U niets te doen.

Ontvangt U de FACET op de traditionele manier per post, dan is bij ons geen emailadres van U bekend. In dat geval vragen wij U om aan de [redactie](#) van de FACET een geldig emailadres door te geven, danwel kenbaar te maken of U de FACET in papieren vorm wilt blijven ontvangen. Bij de contributieheffing later dit jaar, zal nogmaals aandacht aan deze wijziging gegeven worden.

## Staat u nog niet op onze elektronische verzendlijst, geef uw e-mail adres dan a.u.b. even aan ons door!

De FACET verschijnt uiteraard ook nog altijd gelijktijdig met de emailversie op de website van de NVKG. De meest recente FACET kan daar te allen tijde uit het FACETtenarchief gedownload worden.

Net zoals de vorige elektronische FACETten, bevat ook dit exemplaar weer handige, automatische links voor web en e-mail.

## Redactioneel

Voor u ligt de eerste FACET van het jaar 2006. Na de succesvolle afsluiting van het jaar 2005 met het door 30 leden goed bezochte [NVKG](#) najaarssymposium en de uitreiking van de kristalgroeprij 2005 aan Herma Cuppen, belooft ook 2006 weer een mooi jaar te worden voor de Nederlandse kristalgroei met om te beginnen in maart de Japans Nederlandse [JANE-2006](#) bijeenkomst, het jaarlijkse [NVKG](#) kristalgroei-symposium ditmaal gehouden te Nijmegen, de gezamenlijke [bijeenkomst van de DACG/BACG te Edinburgh](#), de [BIWIC-2006](#) conferentie en de najaarsbijeenkomst van de [NVKG](#), die dit jaar gehouden zal worden op 17 november 2006, bij FrieslandFoods te Deventer..

Een vast item op deze plek is de oproep voor input voor de FACET. Wat kunt u bijdragen ?

- Aankondigingen van lezingen, symposia en congressen (niet alleen de activiteiten die u zelf organiseert, maar ook activiteiten waarover u langs andere weg bent geïnformeerd)
- Verslagen van (kristalgroei)-conferenties
- Artikelen (mag ook heel kort zijn!) over een opmerkelijke ontdekking
- Advertenties: bijvoorbeeld i.v.m. vacature
- Omslagfoto's (met toelichting). Telkens zal de beste ingezonden foto op de omslag

van de FACET worden afgedrukt samen met een korte toelichting aan de binnenzijde van het blad. Bovendien zullen de foto's op de fotogalerij van onze webstek worden gepost.

De drempel voor uw bijdragen is zeer laag: aanleveren kan per brief, fax, e-mail, of telefoon. En we staan natuurlijk open voor alle direct of indirect met de NVKG verwante onderwerpen. De volgende FACET verschijnt begin oktober 2006.

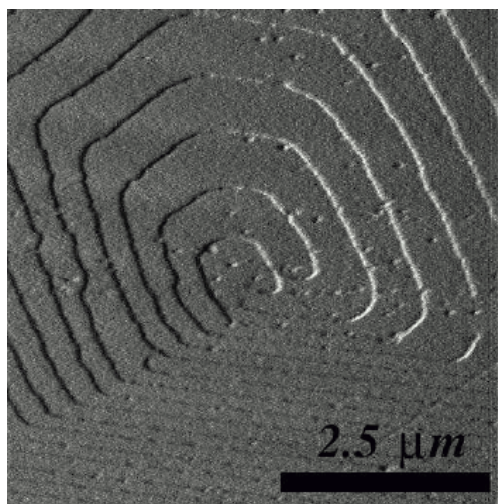
*Raoul van Gestel*

### Dr Herma Cuppen wint NVKG kristalgroei prijs 2005



Tijdens de jaarvergadering op 11 november 2005 is de NVKG kristalgroei prijs 2005 uitgereikt aan Dr. Herma Cuppen. Zij heeft deze prijs, bestaande uit een oorkonde en een geldbedrag van € 1000,

gekregen voor haar proefschrift "*Theory and simulations of crystal growth – Fundamental steps in morphology prediction*". Dit werk is uitgevoerd aan de Radboud Universiteit Nijmegen in de IMM groep Vaste Stof Chemie onder begeleiding van Dr. H. Meekes, Dr. W.J.P. van Enckevort en Prof. E. Vlieg. De jury was bijzonder onder de indruk van de veelzijdigheid van het onderzoek en van de



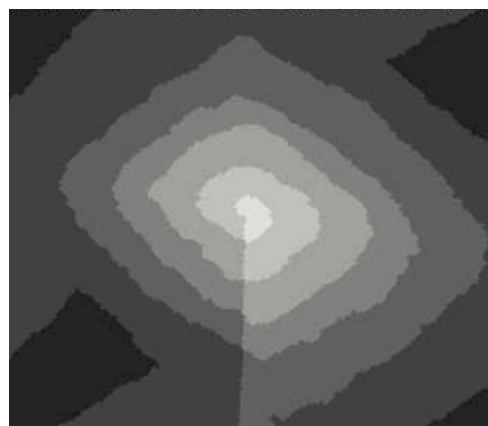
grote hoeveelheid resultaten van hoge kwaliteit. Vanwege haar huidige verblijf in de VS, werd de prijs in ontvangst genomen door Dr. H. Meekes, die ook de bijbehorende lezing gaf.

De subtitel van het proefschrift, "Fundamental steps in morphology prediction", geeft aan dat het in het onderzoek van Herma Cuppen zowel gaat om een aantal stappen te zetten om tot betere morfologievoorspelling te komen, als ook om tot een beter begrip van stappen op een kristaloppervlak te komen. Het onderzoek betreft vooral theorie en computersimulaties, maar Herma Cuppen heeft ook een bescheiden aantal experimenten verricht. Het is bijzonder dat Herma Cuppen op twee verschillende terreinen zeer goede resultaten heeft behaald. Aan de ene kant heeft ze zeer fundamentele vraagstukken uit de kristalgroei in detail uitgewerkt en getoetst aan Monte Carlo simulaties van modelsystemen, waarbij sommige onderdelen in samenwerking met theoretisch fysici en chemici zijn uitgevoerd. Aan de andere kant heeft zij ook simulaties uitgevoerd aan 'echte' kristallen en heeft zij daarmee de experimentele morfologie van deze systemen kunnen verklaren. Op dit gebied heeft Herma Cuppen veel met experimentatoren samengewerkt.

Dr. Herma Cuppen is momenteel werkzaam als postdoc in de groep van Prof. E. Herbst in Ohio State University, USA.

Voor nadere informatie: [e.vlieg@science.ru.nl](mailto:e.vlieg@science.ru.nl).

*Figuur: Groeispiralen op tetraceen. Links de experimentele vorm zoals waargenomen met behulp van een atomaire-kracht microscoop, rechts de voorspelling via een computersimulatie.*



## NVKG Kristalgroeisymposium 2006

- Datum:** Vrijdag, 12 mei 2006
- Venue:** Radboud Universiteit Nijmegen  
Faculteit NWI  
kamer A3012
- Aanmelding:** Via het aanmeldingsformulier op de [NVKG-website](#), uiterlijk 1 mei 2006 i.v.m. catering.
- Bijdragen:** Deelnemers zijn hierbij uitgenodigd om voorstellen voor bijdragen (voordrachten van 20 min.) met abstract voor 15 april 2006 te mailen naar [H.Meekes@science.ru.nl](mailto:H.Meekes@science.ru.nl)

### PROGRAMMA (zie NVKG website voor definitieve programmering)

10:00	Ontvangst Koffie / Thee	
10:30	Welkomstwoord	Prof. Dr. Elias Vlieg RU
10:35	presentatie	
11:30	presentatie	
11:50	Metal hydrides for a sustainable future	Dr. Bernard Dam VU
12:10	Lunch	
13:30	presentatie	
13:50	presentatie	
14:10	presentatie	
14:30	presentatie	
14:50	Thee / Koffie	
15:15	Rondleiding HFML <sup>*)</sup>	Drs. Paul Poodt RU Drs. Maurits Heijna RU
16:00	Borrel + Afsluiting	

<sup>\*)</sup>HFML = High Field Magnet Laboratory ([www.hfml.science.ru.nl/](http://www.hfml.science.ru.nl/))

### Metal hydrides for a sustainable future

Dr. Bernard Dam

#### Abstract

Metal hydrides show a metal-to-insulator (MI) transition upon hydrogenation. In thin films, this transition is reversible. Capping e.g. an yttrium film with Pd we can observe the MI-transition from a change in the optical properties: the films change from reflective to transparent. We apply this effect to develop smart window coatings and hydrogen sensors. In a completely different perspective we use the MI effect to find new complex metal hydrides, assuming that all metal hydrides are insulators. In this way the optical properties provide a means to quickly probe the hydrogen sorption properties over a whole range of compositions in a gradient thin film sample. This so-called combinatorial approach allows to search for new light-weight hydrogen storage materials with appropriate properties for automotive applications. I will show that the solid-state transformation processes involve a number of interesting crystal growth phenomena.



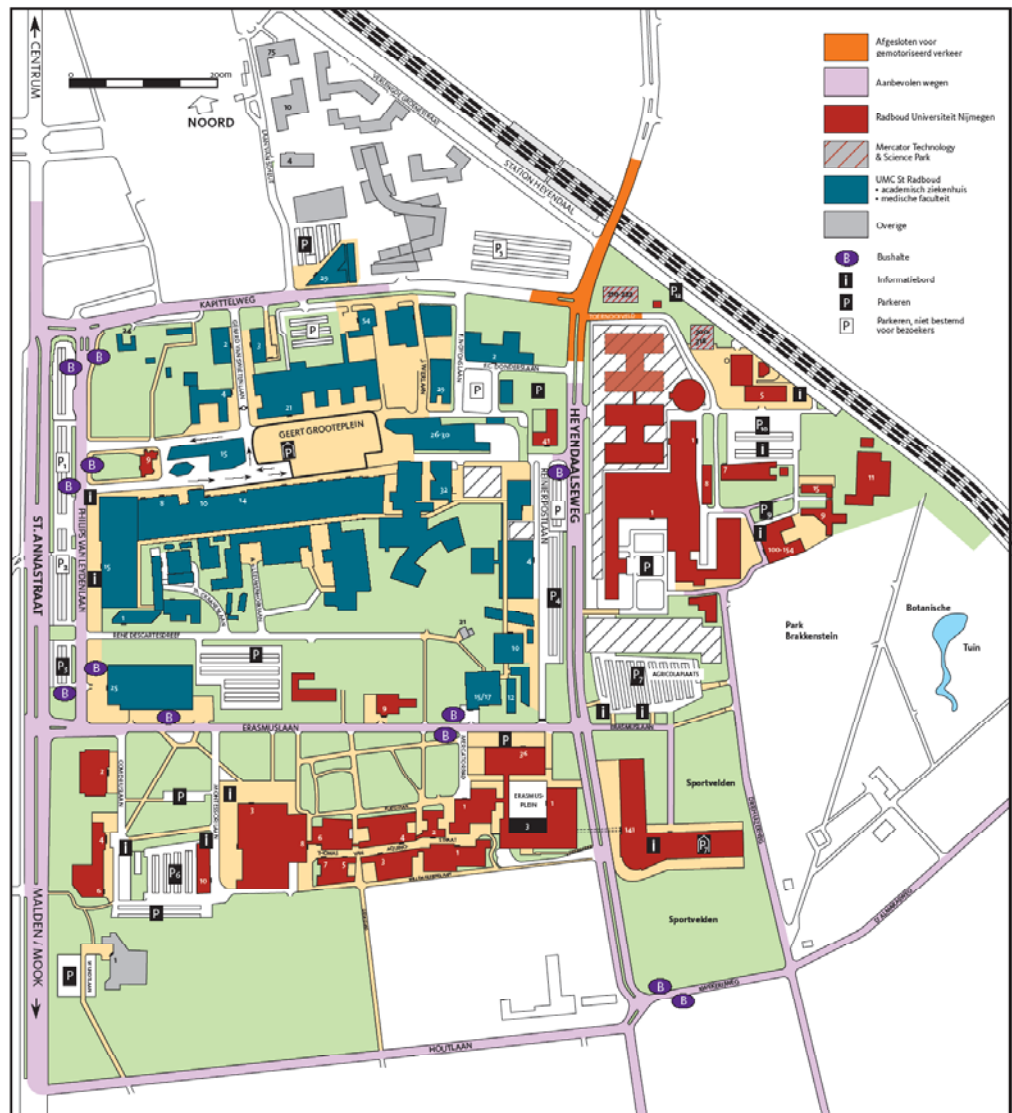
## Route (LET OP i.v.m. wegwerkzaamheden)

Van 16 januari tot en met half mei 2006 zijn er grote wegwerkzaamheden aan het kruispunt Heijendaalseweg - Kapittelweg, nabij de Radboud Universiteit en het UMC. Hierdoor is deze kruising afgesloten voor gemotoriseerd verkeer.

Automobilisten worden vanaf de invalswegen in Nijmegen omgeleid. Houdt er rekening mee dat de omleiding tot vertraging kan leiden. Vooral in de spitsuren kan uw rit naar de Radboud Universiteit extra tijd kosten.

Meer informatie over de omleidingsroutes vindt u op de website van de gemeente Nijmegen:

[www.nijmegen.nl](http://www.nijmegen.nl).



### Auto

Vanaf alle invalswegen in Nijmegen zijn de Radboud Universiteit Nijmegen en het Universitair Medisch Centrum St Radboud aangegeven op de ANWB-wegwijzers. Op de campus Heyendaal moet betaald worden voor parkeren.

### Trein

Treinen stoppen op station Nijmegen Centraal en station Nijmegen Heyendaal. Station Nijmegen Heyendaal ligt op loopafstand van de universiteit; vanaf Nijmegen Centraal rijden bussen in ongeveer tien minuten naar het universiteitsterrein. Tweemaal per uur vertrekken er treinen vanaf het centraal station naar station Heyendaal (stoptreinen richting Boxmeer en Venray).

### Bus

Op het universiteitsterrein zijn bushaltes aan de Philips van Leydenlaan en de Erasmuslaan. Wegens de afsluiting van het kruispunt Heijendaalseweg - Kapittelweg, vervallen gedurende de afsluiting de haltes op de Heyendaalseweg en de Kapittelweg. Tijdens de spits rijdt er elke vier minuten een bus (lijn 10) van het station naar campus Heyendaal. Ook rijden er verschillende stadsbussen en streekbussen uit onder meer Wijchen, Grave, Cuijk, Venlo en Arnhem naar de universiteit.

# Japan-Netherlands Joint Symposium on Crystal Growth: Theory and In-Situ Measurements

**Sponsored by JSPS and NWO**

**13-16 March 2006**

**Conference Hotel Guldenberg, Helvoirt, The Netherlands**

Following two successful meetings in 1999 (in The Netherlands) and 2002 (in Japan), a symposium called Jane-2006 will be held with Japanese and Dutch researchers in the field of crystal growth.

Like the previous meetings, Jane-2006 will have an informal character and a limited number of participants, because this format stimulates discussions and the exchange of ideas. The programme will consist of approximately 20 invited talks and a poster session. The meeting will be held in the Conference Hotel Guldenberg, Helvoirt, which is close to the city of 's-Hertogenbosch. This is a former cloister lying in a quiet, wooded area, and this peaceful accommodation will contribute to a relaxed and informal atmosphere. More details concerning the accommodation can be found at: [www.guldenberg.nl](http://www.guldenberg.nl).

Crystal growth is a broad field, ranging from industrial crystallisation to in situ observations of growing steps, and covering materials from proteins to silicon. For this reason, each invited speaker is expected to briefly introduce his/her topic in a general way and to emphasise current problems, limitations of the methods used and new directions. In this way we expect to stimulate the exchange of ideas and new collaborations. An invited talk will last 45 minutes, of which (at least) 10 minutes is scheduled for discussion (also *during* the talk).

The tutorial character of the invited talks makes the meeting particularly interesting for other researchers (including students) interested in the field of crystal growth. We therefore encourage you to distribute this invitation to other potential participants. We invite you to apply for this meeting and to submit an abstract for the poster session by using the web-site of the Dutch Association of Crystal Growth: [www.dacg.nl](http://www.dacg.nl). In order to preserve the informal character of the meeting and to allow genuine discussion among the participants, the total number of participants will be restricted to approximately 45. The organising committee will therefore make a selection out of the applications.

Thanks to subsidies by JSPS and NWO the fee for the meeting is limited to € 400 for normal participants and € 200 for PhD-students. These fees cover the accommodation, all meals, an afternoon trip and the conference dinner.

The meeting will start on Monday, 13 March 2006, at 10.45, allowing local participants to travel on Monday morning. The meeting will end in the afternoon on Thursday, 16 March.

In case of questions, please don't hesitate to contact us at [e.salem@science.ru.nl](mailto:e.salem@science.ru.nl).

We are looking forward to meeting you in March at Jane-2006.

The organisers:

[Yoshinori Furukawa](#) (Hokkaido University, Sapporo, Japan),

[Elias Vlieg](#) (Radboud University Nijmegen, The Netherlands)

[Willem van Enckevort](#) (Radboud University Nijmegen, The Netherlands)

[Jan van Kessel](#) (Radboud University Nijmegen, The Netherlands)

[Elizabeth Salem](#) (Radboud University Nijmegen, The Netherlands)

## **Important deadlines/dates:**

24 Februari 2006	Pre-registration and submission of abstracts ( <a href="http://www.dacg.nl">www.dacg.nl</a> )
3 March 2006	Notification (by email) of acceptance of application
10 March 2006	Payment of registration fee
13-16 March 2006	Jane-2006

## List of confirmed invited speakers:

A. van Blaaderen (University of Utrecht)	Mimicking Ionic Crystals with Colloids
M. Deij (Radboud University Nijmegen)	
Y. Furukawa (Hokkaido Univ., Sapporo)	Oscillatory growth of ice crystal controlled by impurity effect of AFGP and AFP
R. van Gastel (University of Twente)	
P. Hageman (Radboud University Nijmegen)	GaN heteroepitaxy: using non-lattice matched substrates for fine-tuning of the material properties
T. Hibiya (Syuto Univ., Tokyo)	Physicochemical Phenomena of Molten Silicon during Crystal Growth
J. ter Horst (Technical University Delft)	
H. Imai (Keio Univ.)	Helical and hierarchical growth of inorganic crystals in cooperation with organic molecules
M. Ishikawa (Tokyo Inst. of Techn.)	Precise Fabrication of Nanomaterials: An Approach from Crystal Growth
H. Kramer (Technical University Delft)	
M. Maruyama (Tohoku Univ., Sendai)	
M. Matsuoka (Tokyo Univ. of Agri. & Eng.)	Crystallization phenomena in ternary systems: spontaneous nucleation and formation of combined crystals
Y. Matsuura (Osaka University)	Macro bond and morphology in protein crystals.
H. Nada (AIST)	Computer simulation study on growth kinetics at ice-water interfaces: Development of a new H <sub>2</sub> O potential model and molecular dynamics simulation
M. Rost (University of Leiden)	Seeing thin films evolve with real-time, in-situ STM: film growth and grain growth
K. Tsukamoto (Tohoku Univ., Sendai)	Defect generation during protein crystal growth
M. Uwaha (Nagoya Univ.)	Theory of Drift-Induced Instabilities on Si(001) Vicinal Surfaces
E. Vlieg (Radboud University Nijmegen)	The role of additives
T. Vlugt (University of Utrecht)	
E. Yokoyama (Gakushuin Univ., Tokyo)	Self-oscillatory growth of a crystal controlled by interface kinetics and transport process

---

## BACG/DACG-meeting 2006

The conference will be held at the Edinburgh (Riccarton) Campus of Heriot-Watt University, set in beautiful parkland six miles west of Edinburgh city centre.

As in previous years the Conference will include the **BACG Annual General Meeting**, presentation of the **BACG Annual lecture** and the **BACG Young Scientist Award**, plenary talks from invited speakers and both invited and contributed papers presented in a number of dedicated sessions as detailed overleaf.

### Conference Programme & Call for Papers

The 2006 Conference, which will be a joint meeting with the Dutch Association for Crystal Growth (DACG / NVKG) will commence with registration on Sunday 10<sup>th</sup> September and finish on the afternoon of Tuesday 12<sup>th</sup> September.

The deadline for receipt of abstracts is Friday 14 July 2006. See the [BACG website](#) for details on how to submit an abstract and register for this meeting.

**Important deadlines**

Submission of abstracts	15 <sup>th</sup> March 2006
Notice of acceptance	15 <sup>th</sup> April 2006
Submission written contributions	15 <sup>th</sup> June 2006
Deadline for early registration	15 <sup>th</sup> August 2006

**Scientific Committee**

- G. Coquerel (University Rouen, France)
- J.H. ter Horst (Delft University of Technology, the Netherlands)
- P.J. Jansens (Delft University of Technology, the Netherlands)
- K.J. Kim (Hanbat National University, South Korea)
- J. Ulrich (ML University Halle, Germany)

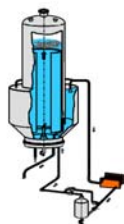
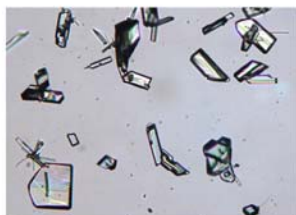
**Organization**

- Ir. Shanfeng Jiang
- Dr. Ir. Joop ter Horst
- Prof. Dr. Ir. Peter Jansens

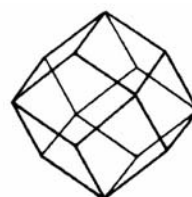
**Correspondence**

Organizing Committee BIWIC 2006  
Delft University of Technology  
Department Process & Energy  
Leeghwaterstraat 44  
2628 CA Delft  
The Netherlands

Phone: +31-15-2786678  
Fax: +31-15-2786975  
Email: [Biwic2006@3mE.tudelft.nl](mailto:Biwic2006@3mE.tudelft.nl)  
[www.biwic.3mE.tudelft.nl](http://www.biwic.3mE.tudelft.nl)



13<sup>th</sup> International Workshop  
on  
**Industrial  
Crystallization**



**BIWIC 2006**

**13 -15 September 2006**

**Delft**

**The Netherlands**



**First Announcement and Call for Paper**



## Introduction

The BIWIC is the International Workshop on Industrial Crystallization. This year's workshop will be held 13 -15 September in Delft, the Netherlands. It will be organized by the Separation Technology group of the Department for Process and Energy Technology, Delft University of Technology.

The BIWIC is an informal 2 day workshop with 50-80 participants. In a pleasant atmosphere, the current state of the art in Industrial Crystallization is discussed during scientific sessions and even more so during the social events.

The conference starts at Wednesday evening 13 September with an informal get-together in the centre of Delft. The scientific program takes place on Thursday 14 and Friday 15 September in the Aula of the Delft University of Technology. On Thursday, before the conference dinner, the now already traditional annual soccer game will be played.

## Workshop scope

Industrial crystallizations performed in volumes up to 100 cubic meter are no exception. Generally the crystalline product of such a process has a size between 1-1000 $\mu\text{m}$ . In turn crystal growth usually take place by the addition of molecules at kinks of steps on the crystal surfaces. Crystallization research is therefore increasingly focused on identifying and studying the relevant length scales determining product quality aspects like crystal size distribution and polymorphic fraction.

The trend towards more complex molecules and systems as well as nanoparticulate products highlights the necessity of studying the molecular scale processes. The extended use of precipitation processes accounts for the increased interest in mixing effects. The increased understanding of crystallization processes leads to innovative crystallizer design. These topics will result in a scientifically challenging and industrially relevant BIWIC in Delft, 13 to 15 September 2006.

## Workshop topics

Participants from both industry and academia who wish to contribute with a lecture or a poster are invited to hand in an abstracts (about 200 words in length) preferably on one of the following topics:

- Crystallization as a product technology.
- Polymorph crystallization prediction and control.
- Crystallization in complex and multicomponent systems.
- Design and operation of precipitation processes.
- The crystallizer of the future.

Abstracts can be submitted by email to [BIWIC2006@3mE.tudelft.nl](mailto:BIWIC2006@3mE.tudelft.nl). Upon acceptance a conference paper of 8 pages can be submitted. All accepted papers will be included in the conference proceedings and given as poster presentations. A Selection of the papers will furthermore be invited for oral presentation in plenary sessions.

## Registration Fee

The conference fee will be set to around 175 Euros. The fee will include lunches, conference dinner and proceedings.

## Venue

Delft is a small city situated between The Hague and Rotterdam. Delft is one of the most charming cities in the Netherlands. It is crammed with 17th and 18th Century houses, streets that overlook canals, magnificent public buildings, outdoor markets, and a surprising number of museums for such a small town. The workshop will be held in the Aula Congress Center at the Delft University of Technology.

---

## Sitzung VDI-Kristallisation

Onderstaand de aankondiging voor de kristallisatiebijeenkomst van de VDI, die gehouden wordt van 23-24 maart 2006 te Basel. Voor meer informatie, zie de [VDI website](#).

Ansprechpartner: Dr.-Ing. U. Delfs  
Abteilung: TW-C  
Telefon: +49 (0) 211 62 14-521  
Telefax: +49 (0) 211 62 14-162  
E-Mail: [gvc@vdi.de](mailto:gvc@vdi.de)  
Düsseldorf, 25. Oktober 2005

### **Call for Papers für die Sitzung des VDI-GVC-Fachausschusses „Kristallisation“ vom 23. bis 24. März 2006, Fa. Novartis, Basel**

Sehr geehrte Mitglieder und Gäste des GVC-Fachausschusses,

die nächste Sitzung des VDI-GVC-Fachausschusses „Kristallisation“ wird auf Einladung von Herrn Wieckhusen **von Donnerstag, 23. März bis Freitag, 24. März 2006, bei der Firma Novartis Pharma in Basel** stattfinden.

Es ist folgender Ablauf vorgesehen (Änderung im Zeitplan vorbehalten, Besichtigungen in Planung):

#### **Mittwoch, 22. März 2006**

Ab 19:30 Abendliches Beisammensein (Gelegenheit zum Abendessen)

#### **Donnerstag, 23. März 2006**

08:30 – 18:00 Uhr Vorträge/Poster „Kristallisation“

18:00 Uhr Geschäftssitzung „Kristallisation“

(Nur berufene Mitglieder)

ab 19:30 Uhr Abendliches Beisammensein

#### **Freitag, 24. März 2006**

08:30 – 13:30 Uhr Vorträge/Poster „Kristallisation“

An die Mitglieder und Gäste des GVC-Fachausschusses „Kristallisation“

Verein Deutscher Ingenieure e.V. · Graf-Recke-Straße 84 · 40239 Düsseldorf · Postfach 10 11 39 · 40002 Düsseldorf  
Deutsche Bank AG Düsseldorf (BLZ 300 700 10), Kto.-Nr. 5 492 020 · Postbank Essen (BLZ 360 100 43), Kto.-Nr. 685 044 30  
Telefon +49 (0) 211 62 14-0 · Telefax +49 (0) 211 62 14-5 75 · [vdi@vdi.de](mailto:vdi@vdi.de) · [www.vdi.de](http://www.vdi.de) · USt.-ID: DE 119 353 789  
VDI · Postfach 10 11 39 · 40002 Düsseldorf

---

## Recente proefschriften

Neda Radenovic

### “The Role of Impurities on The Morphology of NaCl Crystals: An Atomic Scale View”

Promotores: Prof. Dr. E. Vlieg en Dr. W.J.P.

van Enckevort

Radboud University Nijmegen

Verdedigd op: 24-01-2006

It is well known that crystal growth and morphology are largely influenced by the presence of impurities in the growth solution. However, little is known about the actual process of impurity interaction with the growing crystal surface. In this thesis we study this influence in detail using the NaCl crystal as a model system. Attention is mainly focused on the morphology and atomic scale structure of the {111} faces, which from a theoretical point of view should not be stable.

The second chapter compares the morphology of {111} NaCl faces grown from water-formamide solution with that obtained from pure water solution. The surface patterns were examined *ex-situ* and *in-situ* using bright field and differential interference contrast optical microscopy and *ex-situ* atomic force microscopy. It was shown that formamide and urea stabilize the {111} NaCl faces, whereas larger homologous molecules do not. Atomic resolution imaging of NaCl {111} showed no surface reconstruction. For the {111} NaCl crystals growing from water-formamide solutions, it was observed that growth proceeds by monomolecular steps of height  $d_{\{111\}}$ . This implies that the surface is terminated by either a  $\text{Na}^+$  or a  $\text{Cl}^-$  ion layer. The {111} surfaces grown from pure water solutions showed shallow growth hillocks with rounded tops as well as growth pits which develop after a longer period of growth. The formation of the pits is explained by the presence of a masking particle at the pit bottom, which locally retards the fast {111} growth.

In the third chapter we examine the morphology of a whole group of alkali halide crystals, which are obtained only from pure formamide solutions. We found that the appearance of the octahedral form is related to the unit cell size of the NaCl structure crystals. In addition to this, the (im-)possibility to obtain {111} surfaces on NaCl crystals grown from

pure water solutions at high supersaturations is also investigated. Here we show that independently of supersaturation, {100} is the only stable form.

The atomic scale structure of {111} NaCl is further investigated using surface X-ray diffraction. Chapter four describes the *in-situ* SXR measurements of {111} NaCl surfaces in contact with ultra-thin water and formamide liquid layers. We ascertained that the surface is not reconstructed and is  $\text{Na}^+$  terminated for both conditions. Our results reveal small differences in surface structure between the two cases, which apparently lead to dramatic differences in crystal morphology. It was further concluded from the SXR analysis that a quarter to half a monolayer of laterally disordered  $\text{Cl}^-$  ions are on top of a fully ordered  $\text{Na}^+$  crystal surface with occupancy 0.75 to 1.0. In this the surface charge is compensated and the whole crystal is electrically neutral.

A small concentration of  $\text{CdCl}_2$  in the supersaturated aqueous solution results in appearance of {111}NaCl surfaces as well. This is described in chapter five, which presents AFM, optical microscopic and SXR observations of these surfaces.  $\text{Cd}^{2+}$  is very different from formamide and is already active at far lower concentrations than formamide. This implies that the mechanism for the stabilization of the {111} NaCl crystal faces is different in both cases. *In-situ* SXR measurement shows that at an atomic scale the {111} NaCl surface is similar to its bulk phase truncated along the {111} plane. Further analysis based on the SXR results and electrical double layer theory leads to the conclusion that the octahedral surface is  $\text{Cl}^-$  terminated, with  $\frac{1}{4}$  monolayer of  $\text{Cd}^{2+}$  at random  $\text{Na}^+$  sites on top.

In the last chapter we discuss the development of pyramids on the {100} NaCl crystal surface during etching in formamide. Our *in-situ* and *ex-situ* observations of pyramid growth, shape and density show that these features are formed due to the presence of semipermeable, masking dust particles at the dissolving surface.

---

## **AANKONDIGING CONGRESSEN EN SYMPOSIA**

### **JANE-2006,**

**13-16 March 2006, Helvoirt, The Netherlands**

Zie de aankondiging in dit nummer en de [NVKG website](#).

### **NVKG Kristalgroeisymposium,**

**12 mei 2006, Radboud Universiteit Nijmegen**

Zie de aankondiging in dit nummer en de [NVKG website](#).

### **BACG/DACG Conference 2006,**

**10-12 September 2006, Edinburgh, United Kingdom**

For more info: <http://www.bacg.org.uk/>

### **BIWIC-2006,**

**13-15 September 2006, TU Delft**

Zie de aankondiging in dit nummer en de [BIWIC website](#).

### **NVKG Najaarssymposium en Algemene Ledenvergadering,**

**17 November 2006, FrieslandFoods, Deventer, organisator: F.F.A. Hollander**

**Nadere informatie volgt....**

### **International Conference on Crystal Growth ICCG 15,**

**12-17 Augustus 2007, Salt Lake City, Utah, USA**

Co-chairs R. Feigelson and G. Stringfellow

### **International Summer School on Crystal Growth ISSCG 13,**

**5-10 Augustus 2007, Park City, Utah USA,**

Co-chairs J. DeYoreo and C. Wang

---