

光谱学与光谱分析

钠磷酸盐精细结构的拉曼光谱解析

赵思杰, 尤静林*, 陈辉, 蒋国昌

上海大学材料科学与工程学院, 上海 200072

收稿日期 2008-3-6 修回日期 2008-6-9 网络版发布日期 2009-7-1

摘要 构建了钠磷酸盐精细结构团簇, 应用量子化学从头计算方法, 采用闭壳层Hartree-Fock(RHF)方法和6-31G(d, p)基组优化构型, 进行了拉曼光谱的模拟计算。引入SIT应力指数标识磷酸盐局部微观精细结构, 讨论和分析了磷酸盐在高频区的非桥氧对称伸缩振动的特征谱峰。结果表明SIT值与相应结构特征谱峰的拉曼位移呈良好相关性。采用高温拉曼光谱仪测定了 $\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}$ 固态及熔体的变温拉曼光谱, 观察到了 $\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}$ 在873~1 073 K间的相变。 $\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}$ 晶体的微结构单元为 Q^2_1 与 Q^1_2 , 其理论含量比例为2:1。随着温度升高, $\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}$ 的主要峰包中心向低频移动, 熔融后体系中出现了 $Q_0, Q^1_1, Q^2_1, Q^1_2, Q^{12}_2, Q^{22}_2$ 等多种精细结构单元, 导致其拉曼光谱的展宽与不对称性的出现。这些概念的建立和运用为磷酸盐熔体及玻璃的拉曼光谱的定量分析奠定了基础。

关键词 [磷氧四面体](#) [熔体](#) [量子化学从头计算](#) [四面体应力指数](#)

分类号 [O614.43](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2009\)07-1884-05](#)

通讯作者:

尤静林 jlyou@staff.shu.edu.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(1940KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“磷氧四面体”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [赵思杰](#)

· [尤静林](#)