

1

## 超声对钼酸铵溶液结晶过程的影响机制

吴争平, 尹周澜, 陈启元, 张平民, 李洁(

中南大学化学化工学院, 湖南 长沙 410083

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 揭示了超声对3种不同结晶形态四钼酸铵结晶的晶型和热化学性质的影响规律. 对于生成b型四钼酸铵的反应体系, 无超声作用下需1~2 d制得产物, 而在超声作用下只需十几分钟即可完成, 并且发生晶型的改变, 生成了微粉型四钼酸铵. 用量子化学从头计算方法, 在RHF/3-21G和STO-3G水平上, 对超声作用下可能发生的离子形态转变中所涉及到的 $H_2Mo_7O_{24}^{4-}$ ,  $[(MoO_2)(MoO_3)_{x-1}]^{2+}$  ( $x=1, 2, 3$ )等进行计算, 得到各研究体系的总能量和集居数. pH值为2.3~2.5时超声作用下所产生的高能环境可能是使钼酸铵溶液中的 $H_2Mo_7O_{24}^{4-}$ 变成 $[(MoO_2)(MoO_3)_{x-1}]^{2+}$  ( $x=1, 2, 3$ ), 从而生成微粉型四钼酸铵的原因.

**关键词** [超声](#); [钼酸铵](#); [晶型](#); [量子化学从头计算](#)

分类号 [O642.3](#)

**DOI:**

对应的英文版文章: [2021-006](#)

通讯作者:

作者个人主页: 吴争平; 尹周澜; 陈启元; 张平民; 李洁(

### 扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF \(392KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\] \(0KB\)](#)

▶ [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“超声; 钼酸铵; 晶型; 量子化学从头计算”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [吴争平](#)

· [尹周澜](#)

· [陈启元](#)

· [张平民](#)

· [李洁](#)