

光谱学与光谱分析

铝硅酸盐Raman活性分子振动解析

潘峰^{1, 3}, 喻学惠¹, 莫宣学¹, 尤静林², 王晨¹, 陈辉², 蒋国昌²

1. 中国地质大学, 北京 100083
2. 上海大学上海现代冶金与材料制备重点实验室, 上海 200072
3. 北京服装学院, 北京 100029

收稿日期 2005-9-28 修回日期 2005-12-18 网络版发布日期 2006-10-26

摘要 分别测定了蓝晶石、红柱石和硅线石三种铝硅酸盐天然矿物晶体以及 $K_2O-Al_2O_3-SiO_2$ 三元铝硅酸盐玻璃的Raman光谱。构建了一组硅铝四面体聚集体结构模型, 采用量子化学自洽场分子轨道从头计算的方法计算了其Raman振动频率。分析研究了上述Raman光谱振动特征, 确定了特征谱峰的归属, 解析了铝对铝硅酸盐Raman活性分子振动特征的影响。结果表明, 随四配位铝的增加, 导致 $800\sim 1\ 200\text{ cm}^{-1}$ 波数区间内谱峰频率降低, 该区间的谱峰是 $Si-O_{nb}$ 间非桥氧对称伸缩振动引起的, 其中不含 $Al-O$ 振动; $700\sim 800\text{ cm}^{-1}$ 区间内出现的谱峰归属于 $Al-O_{nb}$ 间非桥氧的对称伸缩振动。

关键词 [铝硅酸盐Raman光谱](#) [矿物晶体](#) [\$K_2O-Al_2O_3-SiO_2\$ 玻璃](#) [结构模型](#)

分类号 [O657.3](#)

DOI:

通讯作者:
潘峰

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
 - ▶ [PDF\(627KB\)](#)
 - ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
 - ▶ [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“铝硅酸盐Raman光谱”的 相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [潘峰](#)
- [喻学惠](#)
- [莫宣学](#)
- [尤静林](#)
- [王晨](#)
- [陈辉](#)
- [蒋国昌](#)