

分析测试

钨酸钠分子三级中红外光谱研究

郭柯馨¹, 芦小刚¹, 杜林楠², 李宇涵², 罗梦雪², 高梅婷², 于宏伟², 徐元媛^{2*}

(1. 石家庄学院教师教育学院, 河北 石家庄 050035; 2. 石家庄学院化工学院, 河北 石家庄 050035)

摘要:采用中红外光谱(MIR)研究钨酸钠分子结构。钨酸钠分子红外吸收模式主要包括W—O键不对称伸缩振动模式和W—O键对称伸缩振动模式等。采用变温中红外光谱(TD-MIR)研究温度对钨酸钠分子结构的影响。在303~573 K的温度范围内,随着测定温度的升高,钨酸钠分子 ν_{as-w-o} 和 ν_{s-w-o} 对应的红外吸收频率和强度均发生明显的改变。以 ν_{as-w-o} 和 ν_{s-w-o} 为研究对象,采用二维中红外光谱(2D-MIR)研究钨酸钠分子的热变性。研究发现,在303~373、383~463、473~573 K 3个温度区间,钨酸钠分子主要官能团(ν_{as-w-o} 和 ν_{s-w-o})对热敏感程度及变化快慢顺序都存在较大差异,并进一步进行了热变性机理的研究。本研究拓展了中红外光谱技术(MIR、TD-MIR和2D-MIR)在重要的稀有金属盐(钨酸钠)分子结构及热变性领域的研究范围。

关键词:钨酸钠;中红外光谱;变温中红外光谱;二维中红外光谱;结构

中图分类号:O434.3

文献标志码:A

文章编号:0253-4320(2025)07-0271-07

DOI:10.16606/j.cnki.issn0253-4320.2025.07.043

Study on three-level mid infrared spectroscopy of sodium tungstate molecular

GUO Ke-xin¹, LU Xiao-gang¹, DU Lin-nan², LI Yu-han², LUO Meng-xue², GAO Mei-ting²,
YU Hong-wei², XU Yuan-yuan^{2*}

(1. School of Teacher Education, Shijiazhuang University, Shijiazhuang 050035, China;

2. School of Chemical Engineering, Shijiazhuang University, Shijiazhuang 050035, China)

Abstract: Molecular structure of sodium tungstate is characterized by means of mid infrared spectroscopy (MIR). The infrared absorption modes of sodium tungstate molecular include W—O bond asymmetry stretch vibration (ν_{as-w-o}), W—O bond symmetrical stretch vibration (ν_{s-w-o}), etc. The influences of temperature on sodium tungstate molecular structure is studied by means of temperature-dependent mid infrared spectroscopy (TD-MIR). It is found that with the increasing temperature in the range of 303–573 K, the corresponding infrared absorption frequency and intensity of sodium tungstate molecular (ν_{as-w-o} and ν_{s-w-o}) change obviously. Taking ν_{as-w-o} and ν_{s-w-o} as study objects, the thermal denaturation of sodium tungstate molecular are explored by using two-dimensional mid infrared spectroscopy (2D-MIR). It is indicated that in the 303–373 K, 383–463 K and 473–573 K temperature ranges, the main functional groups of sodium tungstate molecular (ν_{as-w-o} and ν_{s-w-o}) show significant differences in thermal sensitivity and the speed order of change. The thermal denaturation mechanism of sodium tungstate is further studied. In a sum, this study expands the research scope of mid infrared spectroscopy techniques (MIR, TD-MIR and 2D-MIR) in the molecular structure and thermal denaturation of important rare metal salts (sodium tungstate).

Key words: sodium tungstate; mid infrared spectroscopy; temperature-dependent mid infrared spectroscopy; two-dimensional mid infrared spectroscopy; structure

钨酸钠($\text{Na}_2\text{WO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, CAS号为10213-10-2)是一类重要的稀有金属盐,广泛应用于冶金^[1]、材料^[2]、农业^[3]及化工^[4]等领域。钨酸钠的广泛应用与其特殊的分子结构有关。中红外光谱(MIR)广泛应用于化合物分子结构研究^[5-6],但谱图分辨能力不高,提供的光谱信息有限。变温中红外光谱^[7-8](TD-MIR)及二维中红外光谱^[9-14](2D-MIR)则是一类较为新型的光谱技术,广泛应用于化合物的结构及热变性研究领域,并能提供丰富的光谱信

息,但钨酸钠分子相关研究未见报道。本文中采用三级中红外光谱技术(包括MIR、TD-MIR和2D-MIR),在303~573 K的温度范围内,分别开展了钨酸钠的结构及热变性研究,为钨酸钠的应用提供有价值的科学参考。

1 实验部分

1.1 材料

钨酸钠(含有2个结晶水),分析纯,天津市大

收稿日期:2024-11-12;修回日期:2025-05-09

基金项目:河北省高等学校科学技术研究项目(Z2020113);石家庄学院2023年博士启动基金项目(23BS043);石家庄学院一流本科课程(YLKC-202105);石家庄学院教学改革研究与实践项目(JGXM-202408Y);石家庄学院校级科研项目(24XJ005)

作者简介:郭柯馨(1982-),男,硕士,实验师,研究方向为实验室管理及实践教学研究,10564966@qq.com;徐元媛(1988-),女,博士,讲师,研究方向为红外光谱理论研究,通讯联系人,841566410@qq.com。

茂化学试剂厂。

1.2 仪器

Spectrum 100 型红外光谱仪(美国 PE 公司); Golden Gate 型 ATR-MIR 变温附件(测定频率范围 4 000~600 cm^{-1} , 英国 Specac 公司)。

1.3 实验方法

每次实验以空气为背景,对于钨酸钠进行 8 次扫描累加。测温范围 303~573 K(变温步长 10 K)。钨酸钠分子的 MIR 及 TD-MIR 原始数据获得采用

PE 公司 Spectrum v 6.3.5 操作软件。钨酸钠分子的 2D-MIR 原始数据获得采用清华大学 TD Version 4.2 软件。

2 结果与讨论

2.1 钨酸钠分子 MIR 研究

在 4 000~600 cm^{-1} 频率范围内,采用 MIR(一维 MIR 和二阶导数 MIR)开展了钨酸钠分子的结构研究,结果如图 1 所示。

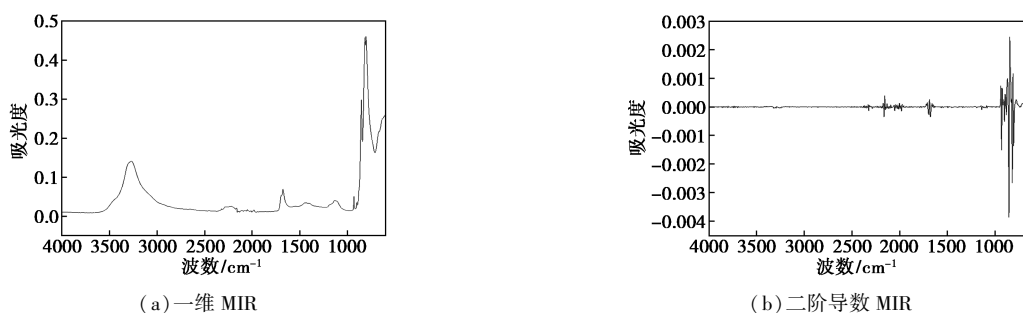


图 1 钨酸钠分子 MIR 谱图(303 K)

文献[15]报道,钨酸钠分子属于 XY_4 型分子,主要包括 XY 对称伸缩振动模式和 XY 不对称伸缩振动模式。如图 1(a) 所示,其中 931.31 cm^{-1} 频率处的吸收峰归属于钨酸钠分子 W—O 键对称伸缩振动模式(一维 MIR);而 853.36、816.70、805.00 cm^{-1} 频率处的吸收峰归属于钨酸钠分子 W—O 键不对称伸缩振动模式(一维 MIR);图 1(b)

为钨酸钠分子的二阶导数 MIR 光谱图,谱图分辨能力有了一定的提高,其中 931.40 cm^{-1} 频率处的吸收峰归属于钨酸钠分子 W—O 键对称伸缩振动模式(二阶导数 MIR);而 853.48、818.17、804.17 cm^{-1} 频率处的吸收峰归属于钨酸钠分子 W—O 键不对称伸缩振动模式(二阶导数 MIR),相关红外光谱数据见表 1。

表 1 钨酸钠分子 MIR 数据(303 K)

波数(吸光度)	
一维 MIR 数据	3965.64(0.01), 3941.50(0.01), 3917.35(0.01), 3898.50(0.01), 3886.05(0.01), 3855.72(0.01), 3844.06(0.01), 3826.24(0.00), 3807.89(0.00), 3791.81(0.00), 3776.83(0.00), 3752.90(0.00), 3743.78(0.00), 3728.16(0.00), 3719.52(0.00), 3701.37(0.00), 3686.31(0.00), 3665.83(0.00), 3645.95(0.00), 3625.47(0.01), 3270.61(0.14), 2657.82(0.01), 2518.87(0.01), 2507.63(0.01), 2498.41(0.01), 2456.30(0.01), 2443.40(0.01), 2429.19(0.01), 2410.85(0.01), 2390.07(0.01), 2370.83(0.01), 2344.61(0.01), 2324.16(0.01), 2284.72(0.02), 2268.82(0.02), 2249.89(0.02), 2242.32(0.02), 2230.27(0.02), 2218.16(0.02), 2179.30(0.02), 2163.39(0.02), 2150.69(0.01), 2113.27(0.01), 2076.05(0.01), 2050.93(0.01), 2039.41(0.01), 2021.15(0.01), 2009.71(0.01), 1993.54(0.01), 1980.45(0.01), 1943.59(0.01), 1920.38(0.01), 1913.50(0.01), 1907.20(0.01), 1894.75(0.01), 1882.70(0.01), 1859.79(0.01), 1841.90(0.01), 1834.48(0.01), 1827.47(0.01), 1820.23(0.01), 1790.37(0.01), 1765.87(0.01), 1759.27(0.01), 1742.98(0.01), 1677.04(0.06), 1559.97(0.02), 1540.09(0.02), 1443.72(0.03), 1340.04(0.02), 1241.86(0.02), 1137.73(0.04), 1122.83(0.04), 1004.09(0.01), 931.31(0.05), 900.10(0.03), 853.36(0.29), 816.70(0.45), 805.00(0.46), 670.19(0.21), 631.70(0.25), 627.65(0.25), 615.94(0.25), 607.01(0.25)
二阶导数 MIR 数据	2324.01(-0.00), 2286.66(-0.00), 2163.50(-0.00), 2150.50(-0.00), 2114.41(-0.00), 2051.00(-0.00), 2038.14(-0.00), 2009.85(-0.00), 1981.20(-0.00), 1844.50(0.00), 1697.07(-0.00), 1678.88(-0.00), 1138.81(-0.00), 931.40(-0.00), 914.86(0.00), 900.71(-0.00), 880.88(-0.00), 853.48(-0.00), 829.18(0.00), 818.17(-0.00), 804.17(-0.00), 739.08(-0.00), 673.03(-0.00), 631.91(-0.00), 619.05(-0.00)

注:波数的单位是 cm^{-1} , 吸光度的单位是 1。

2.2 钨酸钠分子 TD-MIR 研究

如图 2 所示, 在 303~573 K 的温度范围内, 考

查温度变化对钨酸钠分子结构的影响, 相关光谱数据见表 2。

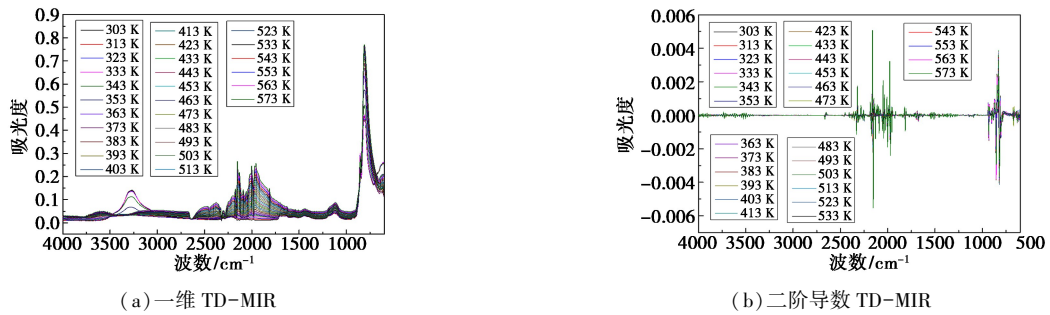


图 2 钨酸钠分子 TD-MIR 谱图(303~573 K)

表 2 钨酸钠分子 TD-MIR 光谱(303~573 K)

测试 温度/K	波数(吸光度)	
	一维 TD-MIR 数据	二阶导数 TD-MIR 数据
303	931.31(0.05), 853.36(0.29), 816.70(0.45), 805.00(0.46)	931.40(-0.00), 853.48(-0.00), 818.17(-0.00), 804.17(-0.00)
313	931.17(0.05), 853.21(0.29), 816.48(0.45), 804.99(0.46)	931.26(-0.00), 853.33(-0.00), 818.06(-0.00), 804.11(-0.00)
323	931.09(0.05), 853.09(0.29), 816.35(0.45), 804.99(0.46)	931.17(-0.00), 853.24(-0.00), 818.01(-0.00), 804.10(-0.00)
333	930.99(0.05), 852.93(0.29), 816.19(0.46), 805.09(0.46)	931.05(-0.00), 853.10(-0.00), 817.91(-0.00), 803.97(-0.00)
343	930.85(0.04), 852.21(0.27), 815.63(0.50), 805.04(0.50)	930.91(-0.00), 852.67(-0.00), 818.09(-0.00), 803.72(-0.00)
353	930.67(0.03), 850.01(0.23), 814.79(0.57), 806.87(0.57)	930.77(-0.00), 852.12(-0.00), 821.75(-0.00), 803.13(-0.00)
363	931.04(0.02), 813.76(0.63)	931.39(-0.00), 852.01(-0.00), 821.64(-0.00), 803.97(-0.00)
373	933.55(0.02), 812.11(0.66)	934.50(-0.00), 852.30(0.00), 821.39(-0.00), 803.12(-0.00)
383	933.69(0.02), 811.63(0.69)	934.70(-0.00), 821.28(-0.00)
393	934.06(0.02), 811.29(0.70)	934.95(-0.00), 820.99(-0.00)
403	933.89(0.02), 811.14(0.71)	935.26(-0.00), 820.87(-0.00)
413	933.50(0.02), 811.41(0.72)	934.77(-0.00); 820.85(-0.00)
423	933.60(0.02), 811.14(0.72)	934.78(-0.00), 820.73(-0.00)
433	933.24(0.02), 811.11(0.72)	934.84(-0.00), 820.65(-0.00)
443	933.36(0.03), 810.81(0.72)	934.50(-0.00), 820.55(-0.00)
453	932.45(0.03), 811.02(0.73)	934.50(-0.00), 820.46(-0.00)
463	931.67(0.03), 810.87(0.73)	934.50(-0.00), 820.28(-0.00);
473	932.38(0.03), 810.94(0.73)	820.07(-0.00)
483	810.97(0.73)	820.14(-0.00)
493	811.12(0.74)	820.07(-0.00)
503	810.89(0.74)	819.95(-0.00)
513	810.76(0.74)	819.83(-0.00)
523	810.68(0.75)	819.67(-0.00)
533	810.46(0.75)	819.61(-0.00)
543	808.35(0.75)	819.47(-0.00)
553	810.64(0.76)	819.38(-0.00)
563	808.21(0.76)	819.32(-0.00)
573	809.82(0.76)	819.17(-0.00)

注: 波数的单位是 cm^{-1} , 吸光度的单位是 1。

图 2(a) 为钨酸钠分子的一维 TD-MIR 谱图, 随着测定温度的升高, 钨酸钠分子主要官能团 ν_{s-w-0} 、 $\nu_{as-w-0-1}$ 和 $\nu_{as-w-0-3}$ 对应的吸收峰对于温度变化比较敏感, 其对应的红外吸收峰分别在 483、363、363 K 的温度下消失; 钨酸钠分子 $\nu_{as-w-0-2}$ 对应的吸收频率有明显的红移趋势, 对应的吸收强度则不断增加。

图 2(b) 为钨酸钠分子的二阶导数 TD-MIR 谱图, 随着测定温度的升高, 钨酸钠分子主要官能团 ν_{s-w-0} 、 $\nu_{as-w-0-1}$ 和 $\nu_{as-w-0-3}$ 对应的吸收峰对应温度变化同样比较敏感, 其对应的红外吸收峰分别在 473、383、383 K 的温度下消失; 钨酸钠分子 $\nu_{as-w-0-2}$ 对应的吸收频率先红移后蓝移, 又进一步红移。

产生上述变化趋势的原因, 可能是室温下, 钨酸钠分子中含有 2 个结晶水, 随着测定温度的升高, 钨酸钠分子中的结晶水不断风化, 而钨酸钠分子主要官能团对应的吸收频率及强度也相应地不断变化。结合表 1, 钨酸钠分子的一维 TD-MIR 和二阶导数 TD-MIR 存在着一定的差异性, 这主要是因为二阶导数 TD-MIR 是一维 TD-MIR 基于一定的数学模型和假设计算而来, 通常二阶导数 MIR 的谱图分辨能力要优于相应的一维 MIR。基于钨酸钠分子的二阶导数 TD-MIR 数据可知, 钨酸钠分子红外吸收频率及强度的变化范围主要集中在 303~373、383~463、473~573 K 3 个温度区间。

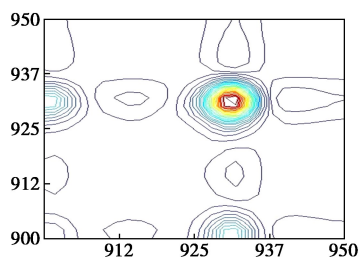
2.3 钨酸钠分子 2D-MIR 研究

在上述 3 个温度区间, 以钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 和 ν_{as-w-0} 为研究对象, 采用 2D-MIR 开展钨酸钠分子的热变性研究。

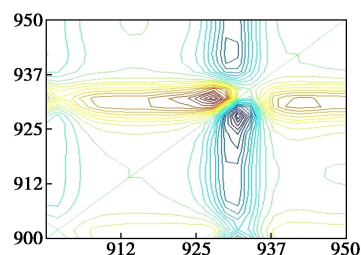
2.3.1 钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 2D-MIR 研究

(1) 第一温度区间钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 2D-MIR 研究

图 3(a) 为钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 同步 2D-MIR 谱图。在 $(931\text{ cm}^{-1}, 931\text{ cm}^{-1})$ 频率处发现 1 个相对强度较大的自动峰, 证明钨酸钠分子在该频率处的官能团对于温度变化比较敏感。图 3(b) 为钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 异步 2D-MIR 谱图。在 $(927\text{ cm}^{-1}, 932\text{ cm}^{-1})$



(a) 同步 2D-MIR 谱图



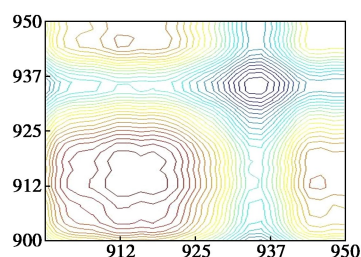
(b) 异步 2D-MIR 谱图

图 3 钨酸钠分子 2D-MIR 谱图(303~373 K)

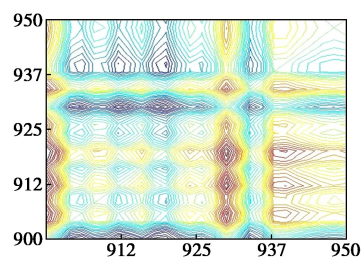
频率处发现了 1 个相对强度较大的交叉峰, 相关光谱数据见表 3。

(2) 第二温度区间钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 2D-MIR 研究

图 4(a) 为钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 同步 2D-MIR 谱图, 在 $(935\text{ cm}^{-1}, 935\text{ cm}^{-1})$ 频率处发现 1 个相对强度较大的自动峰。图 4(b) 为钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 异步 2D-MIR 谱图, 在 $(930\text{ cm}^{-1}, 935\text{ cm}^{-1})$ 频率处发现了 1 个相对强度较大的交叉峰, 相关光谱数据见表 3。



(a) 同步 2D-MIR 谱图



(b) 异步 2D-MIR 谱图

图 4 钨酸钠分子 2D-MIR 谱图(383~463 K)

(3) 第三温度区间钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 2D-MIR 研究

图 5(a) 为钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 同步 2D-MIR 谱图, 在 $934, 934\text{ cm}^{-1}$ 频率处发现 1 个相对强度较大的自动峰。图 5(b) 为钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 异步 2D-MIR 谱图, 没有发现明显的交叉峰, 相关光谱数据见表 3。

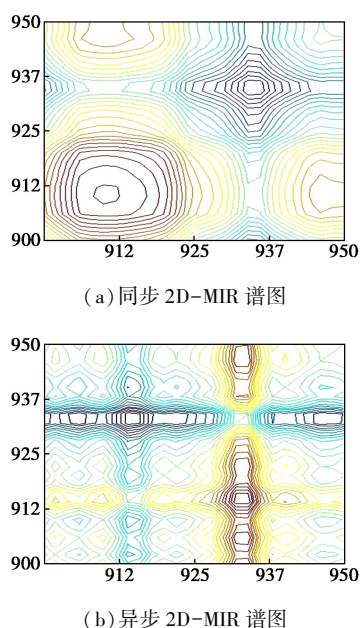


图 5 钨酸钠分子 2D-MIR 谱图(473~573 K)

表 3 钨酸钠分子的 2D-MIR 光谱数据及解释(950~900 cm⁻¹)

$\nu_1/$ cm ⁻¹	$\nu_2/$ cm ⁻¹	$\Phi(\nu_1, \nu_2)/$ (cm ⁻¹ , cm ⁻¹)	$\Psi(\nu_1, \nu_2)/$ (cm ⁻¹ , cm ⁻¹)	文字解释
927	932	+	+	927 cm ⁻¹ 处($\nu_{s-w-0-2}$) 吸收峰变化早于 932 cm ⁻¹ 处($\nu_{s-w-0-1}$)吸收峰;
930	935	+	+	930 cm ⁻¹ 处($\nu_{s-w-0-2}$) 吸收峰变化早于 935 cm ⁻¹ 处($\nu_{s-w-0-1}$)吸收峰。

根据表 3 数据和 NODA 原则^[10-14], 第一温度区间, 钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 对应的红外吸收频率包括 932 ($\nu_{s-w-0-1}$)、927 ($\nu_{s-w-0-2}$) cm⁻¹。随着测定温度的升高, 钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 对应的吸收峰变化快慢的顺序为 927 cm⁻¹ ($\nu_{s-w-0-2}$) > 932 cm⁻¹ ($\nu_{s-w-0-1}$); 第二温度区间, 钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 对应的红外吸收频率包括 935 ($\nu_{s-w-0-1}$)、930 ($\nu_{s-w-0-2}$) cm⁻¹, 与第一温度区间相比, 对应的吸收频率发生了明显的蓝移。随着测定温度的升高, 钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 对应的吸收峰变化快慢的顺序为 930 cm⁻¹ ($\nu_{s-w-0-2}$) > 935 cm⁻¹ ($\nu_{s-w-0-1}$)。第三温度区间, 并没有发现钨酸钠分子 ν_{s-w-0} 有价值的光谱信息。

2.3.2 钨酸钠分子 ν_{as-w-0} 2D-MIR 研究

(1) 第一温度区间钨酸钠分子 ν_{as-w-0} 2D-MIR 研究

图 6(a) 为钨酸钠分子 ν_{as-w-0} 同步 2D-MIR 谱

图, 在 (853 cm⁻¹, 853 cm⁻¹)、(818 cm⁻¹, 818 cm⁻¹) 和 (812 cm⁻¹, 812 cm⁻¹) 频率附近发现 3 个相对强度较大的自动峰, 在 (853 cm⁻¹, 812 cm⁻¹) 频率附近发现 1 个相对强度较大的交叉峰, 证明钨酸钠分子在该频率处对应的官能团之间存在着较强的分子内相互作用。图 6(b) 为钨酸钠分子 ν_{as-w-0} 异步 2D-MIR 谱图, 在 (805 cm⁻¹, 812 cm⁻¹)、(812 cm⁻¹, 818 cm⁻¹)、(812 cm⁻¹, 848 cm⁻¹) 和 (848 cm⁻¹, 855 cm⁻¹) 频率附近发现 4 个相对强度较大的交叉峰, 相关光谱数据见表 4。

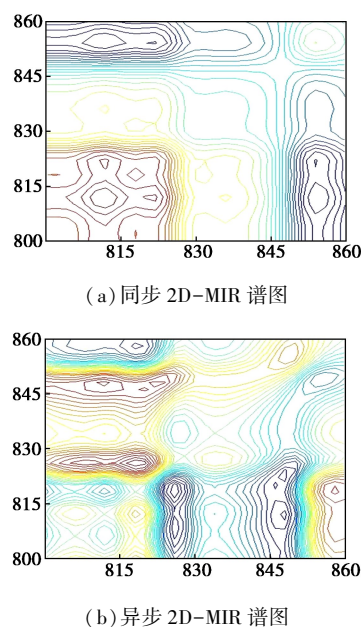
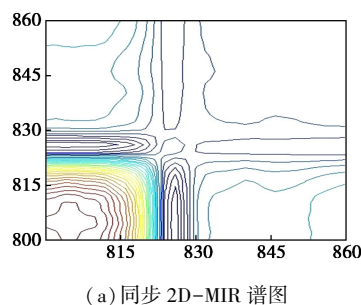


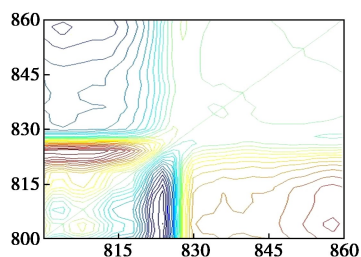
图 6 钨酸钠分子 2D-MIR 谱图(303~373 K)

(2) 第二温度区间钨酸钠分子 ν_{as-w-0} 2D-MIR 研究

图 7(a) 为钨酸钠分子 ν_{as-w-0} 同步 2D-MIR 谱图, 在 (825 cm⁻¹, 825 cm⁻¹) 和 (804 cm⁻¹, 804 cm⁻¹) 频率附近发现 2 个相对强度较大的自动峰, 而在 (825 cm⁻¹, 804 cm⁻¹) 频率附近发现 1 个相对强度较大的交叉峰。图 7(b) 钨酸钠分子 ν_{as-w-0} 异步 2D-MIR 谱图, 在 (803 cm⁻¹, 808 cm⁻¹) 和 (808 cm⁻¹, 824 cm⁻¹) 频率附近发现 2 个相对强度较大的交叉峰, 相关光谱数据见表 4。



(a) 同步 2D-MIR 谱图



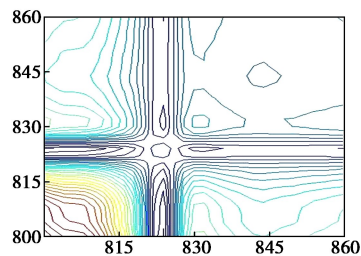
(b) 异步 2D-MIR 谱图

图 7 钨酸钠分子 2D-MIR 谱图 (383~463 K)

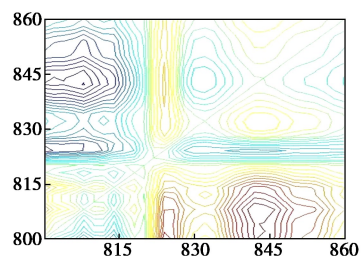
(3) 第三温度区间钨酸钠分子 ν_{as-W-0} 2D-MIR 研究

图 8(a) 为钨酸钠分子 ν_{as-W-0} 同步 2D-MIR 谱图, 在 $(822\text{ cm}^{-1}, 822\text{ cm}^{-1})$ 频率附近发现 1 个相对强度较大的自动峰。图 8(b) 为钨酸钠分子 ν_{as-W-0} 异步 2D-MIR 谱图, 在 $(808\text{ cm}^{-1}, 811\text{ cm}^{-1})$ 、 $(811\text{ cm}^{-1}, 814\text{ cm}^{-1})$ 和 $(814\text{ cm}^{-1}, 818\text{ cm}^{-1})$ 频率附近发现 3 个相对强度较大的交叉峰, 相关光谱数

据见表 4。



(a) 同步 2D-MIR 谱图



(b) 异步 2D-MIR 谱图

图 8 钨酸钠分子 2D-MIR 谱图 (473~573 K)

表 4 钨酸钠分子的 2D-MIR 光谱数据及解释 ($860\sim 800\text{ cm}^{-1}$)

$\nu_1/$ cm^{-1}	$\nu_2/$ cm^{-1}	$\Phi(\nu_1, \nu_2)/$ $(\text{cm}^{-1}, \text{cm}^{-1})$	$\Psi(\nu_1, \nu_2)/$ $(\text{cm}^{-1}, \text{cm}^{-1})$	文字解释
805	812	+	+	805 cm^{-1} 处 ($\nu_{as-W-0-5}$ -第一温度区间) 吸收峰变化早于 812 cm^{-1} 处 ($\nu_{as-W-0-4}$ -第一温度区间) 吸收峰
805	818	+	-	818 cm^{-1} 处 ($\nu_{as-W-0-3}$ -第一温度区间) 吸收峰变化早于 805 cm^{-1} 处 ($\nu_{as-W-0-5}$ -第一温度区间) 吸收峰
805	848	-	+	848 cm^{-1} 处 ($\nu_{as-W-0-2}$ -第一温度区间) 吸收峰变化早于 805 cm^{-1} 处 ($\nu_{as-W-0-5}$ -第一温度区间) 吸收峰
805	855	-	-	805 cm^{-1} 处 ($\nu_{as-W-0-5}$ -第一温度区间) 吸收峰变化早于 855 cm^{-1} 处 ($\nu_{as-W-0-1}$ -第一温度区间) 吸收峰
812	818	+	-	818 cm^{-1} 处 ($\nu_{as-W-0-3}$ -第一温度区间) 吸收峰变化早于 812 cm^{-1} 处 ($\nu_{as-W-0-4}$ -第一温度区间) 吸收峰
812	848	-	+	848 cm^{-1} 处 ($\nu_{as-W-0-2}$ -第一温度区间) 吸收峰变化早于 812 cm^{-1} 处 ($\nu_{as-W-0-4}$ -第一温度区间) 吸收峰
812	855	-	-	812 cm^{-1} 处 ($\nu_{as-W-0-4}$ -第一温度区间) 吸收峰变化早于 855 cm^{-1} 处 ($\nu_{as-W-0-1}$ -第一温度区间) 吸收峰
818	848	-	+	848 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-2}$ -第一温度区间) 吸收峰变化早于 818 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-3}$ -第一温度区间) 吸收峰
818	855	-	-	钨酸钠分子 818 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-3}$ -第一温度区间) 吸收峰变化早于钨酸钠分子 855 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-1}$ -第一温度区间) 吸收峰
848	855	+	+	钨酸钠分子 848 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-2}$ -第一温度区间) 吸收峰变化早于钨酸钠分子 855 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-1}$ -第一温度区间) 吸收峰
803	808	+	-	钨酸钠分子 808 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-2}$ -第二温度区间) 吸收峰变化早于钨酸钠分子 803 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-3}$ -第二温度区间) 吸收峰
803	824	-	+	钨酸钠分子 824 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-1}$ -第二温度区间) 吸收峰变化早于钨酸钠分子 803 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-3}$ -第二温度区间) 吸收峰
808	824	-	+	钨酸钠分子 824 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-1}$ -第二温度区间) 吸收峰变化早于钨酸钠分子 808 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-2}$ -第二温度区间) 吸收峰
808	811	+	-	钨酸钠分子 811 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-3}$ -第三温度区间) 吸收峰变化早于钨酸钠分子 808 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-4}$ -第三温度区间) 吸收峰
808	814	+	+	钨酸钠分子 808 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-4}$ -第三温度区间) 吸收峰变化早于钨酸钠分子 814 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-2}$ -第三温度区间) 吸收峰

续表

$\nu_1/$ cm^{-1}	$\nu_2/$ cm^{-1}	$\Phi(\nu_1, \nu_2)/$ $(\text{cm}^{-1}, \text{cm}^{-1})$	$\Psi(\nu_1, \nu_2)/$ $(\text{cm}^{-1}, \text{cm}^{-1})$	文字解释
808	818	+	-	钨酸钠分子 818 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-1}$ -第三温度区间) 吸收峰变化早于钨酸钠分子 808 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-4}$ -第三温度区间) 吸收峰
811	814	+	+	钨酸钠分子 811 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-3}$ -第三温度区间) 吸收峰变化早于钨酸钠分子 814 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-2}$ -第三温度区间) 吸收峰
811	818	+	-	钨酸钠分子 818 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-1}$ -第三温度区间) 吸收峰变化早于钨酸钠分子 811 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-3}$ -第三温度区间) 吸收峰
814	818	+	-	钨酸钠分子 818 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-1}$ -第三温度区间) 吸收峰变化早于钨酸钠分子 814 cm^{-1} 频率处 ($\nu_{as-W-0-2}$ -第三温度区间) 吸收峰

根据表 4 数据和 NODA 原则^[10-14], 第一温度区间, 钨酸钠分子 ν_{as-W-0} 对应的红外吸收频率包括 855 ($\nu_{as-W-0-1}$)、848 ($\nu_{as-W-0-2}$)、818 ($\nu_{as-W-0-3}$)、812 ($\nu_{as-W-0-4}$)、805 ($\nu_{as-W-0-5}$) cm^{-1} 。随着测定温度的升高, 钨酸钠分子 ν_{as-W-0} 对应的吸收峰变化快慢的顺序为 848 cm^{-1} ($\nu_{as-W-0-2}$) > 818 cm^{-1} ($\nu_{as-W-0-3}$) > 805 cm^{-1} ($\nu_{as-W-0-5}$) > 812 cm^{-1} ($\nu_{as-W-0-4}$) > 855 cm^{-1} ($\nu_{as-W-0-1}$) cm^{-1} 。第二温度区间, 钨酸钠分子 ν_{as-W-0} 对应的红外吸收频率包括 824 ($\nu_{as-W-0-1}$)、808 ($\nu_{as-W-0-2}$)、803 ($\nu_{as-W-0-3}$) cm^{-1} 。随着测定温度的升高, 钨酸钠分子 ν_{as-W-0} 对应的吸收峰变化快慢的顺序为 824 cm^{-1} ($\nu_{as-W-0-1}$) > 808 cm^{-1} ($\nu_{as-W-0-2}$) > 803 cm^{-1} ($\nu_{as-W-0-3}$)。第三温度区间, 钨酸钠分子 ν_{as-W-0} 对应的红外吸收频率包括 818 ($\nu_{as-W-0-1}$)、814 ($\nu_{as-W-0-2}$)、811 ($\nu_{as-W-0-3}$)、808 ($\nu_{as-W-0-4}$) cm^{-1} 。随着测定温度的升高, 钨酸钠分子 ν_{as-W-0} 对应的吸收峰变化快慢的顺序为 818 cm^{-1} ($\nu_{as-W-0-1}$) > 811 cm^{-1} ($\nu_{as-W-0-3}$) > 808 cm^{-1} ($\nu_{as-W-0-4}$) > 814 cm^{-1} ($\nu_{as-W-0-2}$)。

3 结论

钨酸钠分子的红外吸收模式包括 ν_{s-W-0} 和 ν_{as-W-0} ; 随着测定温度的升高, 钨酸钠分子 ν_{s-W-0} 和 ν_{as-W-0} 对应的吸收频率和强度都有明显改变; 热扰动因素下, 钨酸钠主要官能团 (ν_{s-W-0} 和 ν_{as-W-0}) 对热的敏感程度及吸收峰变化快慢有明显的差异。本文中为研究重要的稀有金属盐 (钨酸钠) 的结构及热变性建立一个方法学, 具有重要的理论研究价值。

参考文献

- [1] 李裕芳, 赖道玉. 用钨酸钠晶体制取钨酸、仲钨酸铵和三氧化钨 [J]. 中国钨业, 1991, 4(10): 4-9.
- [2] 陈孝文, 廖丹丹, 陈文贤, 等. 钨酸钠添加量对钛合金钴杆微弧氧化层耐磨性能的影响 [J]. 材料保护, 2019, 52(7): 90-94, 107.
- [3] 牛桂言, 邵惠芳, 孙双, 等. 钨酸钠对成熟期烤烟氮代谢、氧化胁迫和烟碱含量的影响 [J]. 中国土壤与肥料, 2018, 4(4): 93-98.
- [4] 张科良, 乔小安, 屈撑围, 等. 季膦盐和钨酸钠催化下双氧水溶液清洁氧化醇和烯烃的研究 [J]. 西安石油大学学报: 自然科学版, 2008, 4(1): 77-80, 114.
- [5] 周悦荣, 柴嘉欣, 吉一帆, 等. 聚四氟乙烯非晶相结构及热变性中红外光谱研究 [J]. 纺织科学与工程学报, 2024, 41(2): 53-58, 99.
- [6] 周子轩, 尹子璇, 吴雨靓, 等. 牙线结构及热变性研究 [J]. 纺织科学与工程学报, 2023, 40(1): 56-61.
- [7] 吴雨靓, 郑海桥, 周子轩, 等. 网球线结构及热变性研究 [J]. 纺织科学与工程学报, 2023, 40(2): 59-64.
- [8] 尉念伦, 赵莱含, 陈丽云, 等. 聚苯乙烯变温红外光谱研究 [J]. 纺织科学与工程学报, 2019, 36(1): 129-133.
- [9] 于宏伟, 王晓萱, 戎媛. 医用白凡士林三级 MIR 光谱研究 [J]. 保定学院学报, 2021, 34(4): 112-118, 125.
- [10] 柴嘉欣, 吉一帆, 李雨情, 等. 乙纶分子结构及热变性三级长波近红外-中红外光谱研究 [J]. 纺织科学与工程学报, 2024, 41(1): 58-67.
- [11] 于宏伟, 孟露, 秦佳慧, 等. 硫酸钡三级中红外光谱研究 [J]. 西安文理学院学报: 自然科学版, 2022, 25(2): 89-99.
- [12] 于宏伟, 王晓萱, 王雪琪, 等. 亚硫酸钠三级中红外光谱研究 [J]. 硫酸工业, 2020, (10): 13-18.
- [13] 徐元媛, 齐哲真, 张蕊, 等. 高锰酸钾三级中红外光谱测定 [J]. 宜春学院学报, 2020, 42(9): 26-31.
- [14] 于宏伟, 戎媛, 王晓萱, 等. 玻璃镜片三级中红外光谱研究 [J]. 玻璃搪瓷与眼镜, 2021, 49(1): 13-21.
- [15] 翁诗甫. 傅里叶变换红外光谱分析 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2010: 358-362. ■