

颗粒物表面 Al₁₃ 的拉曼表征方法研究

李宁, 刘会娟*, 曲久辉

(中国科学院生态环境研究中心 北京 100085)

Al₁₃被认为是铝盐最有效的絮凝形态, 其在水处理中的转化及作用过程成为铝盐絮凝的关键。絮凝从本质上是一种絮凝剂与颗粒物, 以及颗粒物之间的微界面作用过程。仅从溶液化学入手, 优化溶液中的铝形态已不能真正实现铝盐絮凝系统的完善, 而是应涉及颗粒物界面的深入探讨。研究表明直接投加铝盐在一定条件下絮凝效果优于预制聚合氯化铝(PACl), 研究者认为这可能归因于颗粒物表面原位生成的Al₁₃絮凝效果更优于预制Al₁₃[1]。因目前微界面表征方法尚不多见, 该作用过程的进一步研究受到限制。拉曼手段作为一种可以实现单分子检测的表面技术被广泛关注[2]。其中表面增强拉曼

技术(SERS)通过结合贵金属基质, 因具有检测灵敏, 操作简单, 样品无损等特点, 而常被应用于界面分子检测。

本文前期制备高纯的Al₁₃固体, 初步采用显微共聚焦激光拉曼光谱确定Al₁₃的特征峰。通过合成金核/二氧化硅壳(Au/SiO₂)颗粒物, 模拟自然颗粒物, 采用表面增强拉曼光谱检测Au/SiO₂颗粒物表面的Al₁₃。最终结合Gaussian09计算, 从理论上对Al₁₃的特征峰进行验证, 并采用最小二乘法(LSFC)将Al₁₃的每个特征峰与其分子结构振动一一对应。以期为絮凝过程中Al₁₃在颗粒物表面研究提供有效的方法手段。

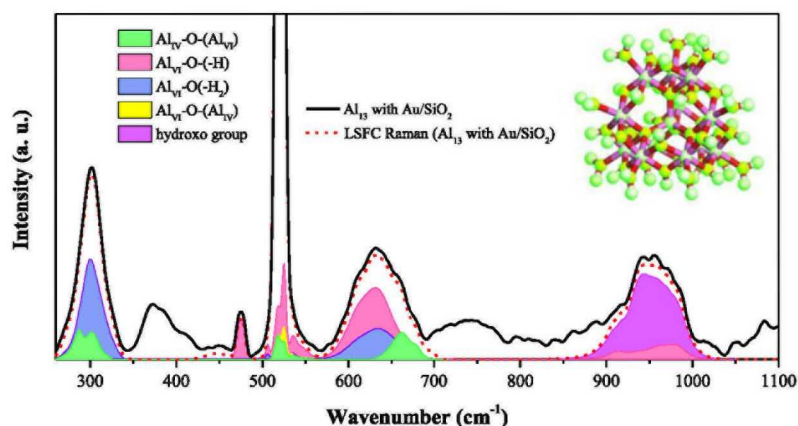


图1 Au/SiO₂颗粒物表面 Al₁₃ 的 SERS 图谱及相应 LSFC 拉曼图谱及特征峰的振动模式组成

研究结果表明, 通过显微共聚焦激光拉曼光谱, 确定300、635以及987 cm⁻¹的拉曼峰为Al₁₃的主要特征峰。且表面增强拉曼光谱实现对吸附于Au/SiO₂颗粒物表面Al₁₃的检测, 表现为300、635及987 cm⁻¹处特征峰的检出, 且信噪比高。在表面增强拉曼图谱中, 475 cm⁻¹处有新的拉曼峰检出。通过理论计算及分析, 确认300 cm⁻¹的拉曼峰主要由Al₁₃分子中的Al_{IV}-O(-Al_{VI})及Al_{VI}-O(-H₂)的振动引起; 635 cm⁻¹的拉曼峰主要由Al_{VI}-O(-H)、Al_{VI}-O(-H₂)及Al_{IV}-O(-Al_{VI})的振

动引起; 987 cm⁻¹处的拉曼峰由Al₁₃中的特征性羟桥产生。另, 475及520 cm⁻¹处也产生Al₁₃响应的信号, 主要由Al_{VI}-O(-H)振动产生, 但因强度较弱常难以被识别出。这些振动共同组成具有指纹特征的Al₁₃拉曼图谱。

基金项目: 国家自然科学基金(No.21177144)

*Email: hjliu@rcees.ac.cn;

参考文献

【1】 Zhao H., Liu H. J., Hu C. Z., et al., Environmental Science and Technology, 2009, 40(1):325-331.

【2】 Kusic D., Kampe B., Rosch P., et al., Water Research, 2014, 48:179-189.