

---

# 稀土磷酸盐玻璃的局域结构研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/36351.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

稀土磷酸盐玻璃的局域结构研究取得进展。

近期，中国科学院上海光学精密机械研究所在稀土磷酸盐玻璃局域结构方面取得进展。研究团队在原子尺度上解析了 $\text{Sc}^{3+}$ 离子的特征配位结构，阐明了其局域聚集机制，为理解稀土掺杂功能玻璃的构效关系及性能优化提供了更深刻的理论依据。

稀土掺杂玻璃材料的光学与热力学稳定性，依赖稀土离子的局部配位环境和空间分布。以往研究采用光谱分析、拉曼、中子散射等手段来探讨稀土离子在玻璃网络中的配位状态，但这些手段难

进行有效探测，限制了对稀土离子与玻璃网络连接机制及其结构演化规律的理解。这些局限使得稀土离子的局部有序性和网络修饰机制缺乏系统研究。

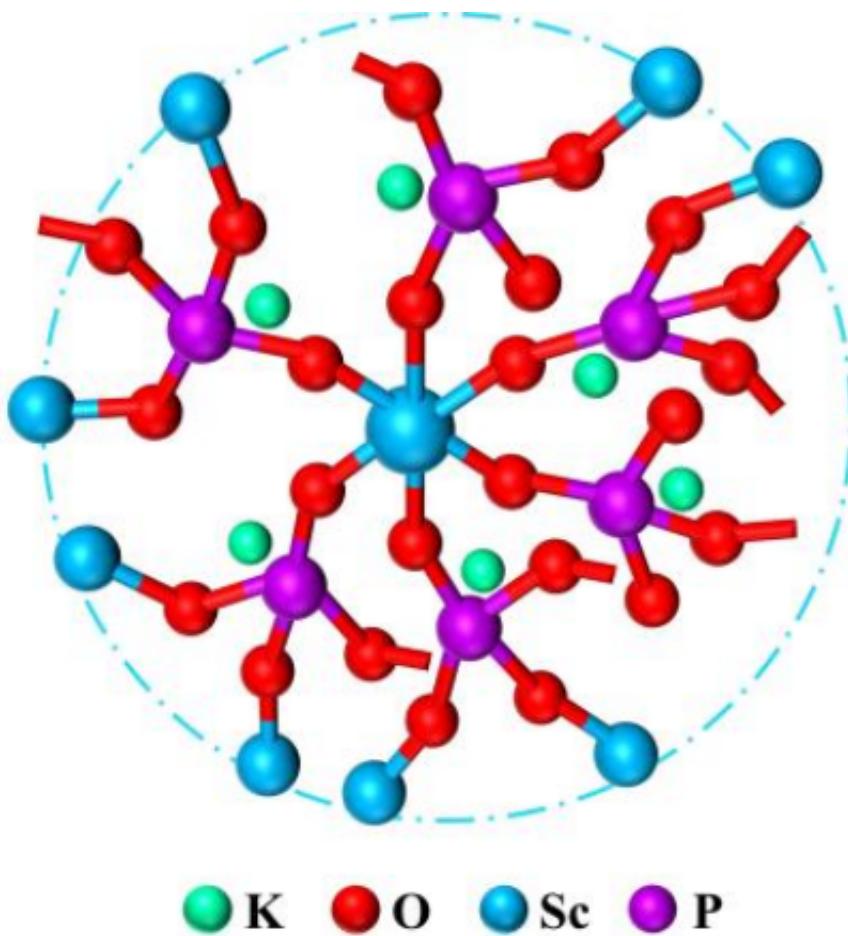
研究选取无顺磁性且具优异固态核磁共振响应特征的 $\text{Sc}^{3+}$ 为模型离子，以模拟小半径重稀土离子在磷酸盐玻璃中的结构行为。研究进一步通过多维固态核磁共振技术，解析 $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{-xKPO}_3$ 玻璃中 $^{31}\text{P}$ 、 $^{45}\text{Sc}$ 与 $^{39}\text{K}$ 的局域结构，揭示了 $\text{Sc}^{3+}$ 的配位特性与聚集规律。结果表明， $\text{Sc}^{3+}$ 在玻璃网络中完全呈现六配位态，并以共顶形式连接六个磷氧四面体 $[\text{PO}_4]$ 。研究确认了 $\text{P}_{3\text{Sc}}^1$ 结构单元，并对鉴定出的9种 $\text{P}_{m\text{Sc}}^n$ 单元进行定量分析。基于电荷、键数与空间分布概率的计算发现， $\text{Sc}^{3+}$ 在5.5 Å范围内存在聚集倾向。同时，研究据此构建其原子尺度的聚集模型。这一原子尺度模型揭示了稀土离子聚集的微观机理，为理解和调控磷酸盐玻璃的光学与热学性能奠定了基础，并有望指导材

---

料设计以规避相分离风险。

相关研究成果发表在Journal of Non-Crystalline Solids上。研究工作得到中国科学院战略性先导科技专项的支持。

[论文链接](#)



1Sc<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-7.5KPO<sub>3</sub>玻璃中P<sub>mSc</sub><sup>n</sup>单元在Sc<sup>3+</sup>离子周围的空间分布示意图

研究团队单位：上海光学精密机械研究所

---

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发