

其他区域属于两相或三相。

由于这一体系的单相区存在着明显的畸变,晶体的完整性很低(包括多晶试样),因而生长完整的单晶体存在困难,作为电光和非线性光学材料应用的可能性难以探讨。但这一体系晶体结构的堆积系数低,同时,不同的组分存在着不同量的 H^+ , Li^+ , Mg^{+2} 和空位,特别是

以 $Li_2H(IO_3)_3$ 为基的固溶体;这对于研究导电类型,导电机制,导电率的大小与空位的作用都将会是有意义的。

参 考 文 献

- [1] 梁敬魁,俞育德,物理学报 29 (1980), 1293.
- [2] 梁敬魁,张玉苓,刘宏斌,物理学报, 29 (1980), 1023.

骤冷的 $LiKSO_4$ 多晶的核磁共振实验

郭全中 曹琪娟

(中国科学院物理研究所)

1981年6月17日收到

一、前 言

作者已报道过 $LiKSO_4$ 单晶在 190K 附近,其 7Li 核磁共振 (NMR) 谱出现了明显的变化^[1],如图 1 所示。当时提出有两种可能,一是发生了相变,二是 7Li 核可能存在着两个不等价晶位。本文所述的骤冷实验可证实 NMR 谱的变化是由相变引起的。最近也陆续见到用热膨胀系数^[2] 和喇曼光谱^[3] 确定 $LiKSO_4$ 晶体在该温度附近有相变的报道。

二、实验和讨论

我们可以设想,如果低温下 7Li 的 NMR 谱确实反映了 $LiKSO_4$ 晶体中 7Li 核具有不等价性,而高温下由于只能得到其平均结果而呈现为一条谱线,则 NMR 谱线的形状应同样品的冷却速度无关,而仅仅由样品所处的温度来确定。如果 $LiKSO_4$ 晶体确实在低温下发生了相变,那么,这个相变就可能同样品冷却过程相关。为此,我们可通过改变冷却速度来确定 $LiKSO_4$ 晶体在低温下的性质。

实验是在 SXP4-100 型脉冲傅里叶变换核磁共振谱仪上进行的。实验参数参阅文献[1]。

由于单晶承受不了快速冷却,改用 $LiKSO_4$

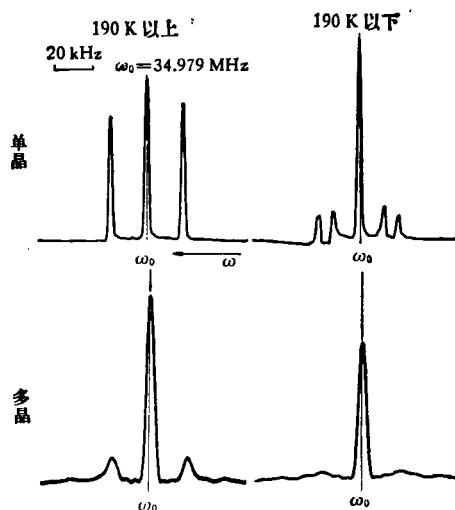


图1 $LiKSO_4$ 晶体 NMR 谱

多晶粉末做骤冷实验。冷却速度约为 200K/min, 温度降至 141K 时测得的 NMR 谱示于图 2(a) 中。样品在 141K 温度下持续了 40 多分钟, 前后共采样四次, NMR 谱形无差异。同时,用约 2K/min 的速度缓慢冷却至 150K, 得到的 NMR 谱如图 2(c) 所示。图 2(b) 是室温下的 NMR 谱。由图可见,图 2(a) 基本上保持了图 2(b) 的谱形特征, 只是边峰高度降低、变宽。而图 2(c) 与图 2(b) 明显不一样,其边峰大大增宽以致失去了室温 NMR 谱的基本特征。

$LiKSO_4$ 单晶及多晶,在缓慢冷却时测得的 7Li NMR 谱示于图 1 中。单晶的谱形可分为

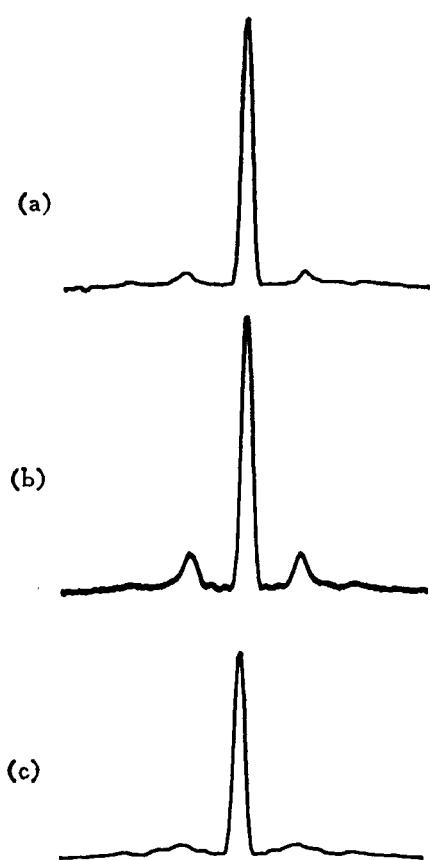


图2 LiKSO₄ 多晶的 NMR 谱
(a) 急冷至 141K; (b) 室温; (c) 缓冷至 150K

两类, 190K 以上为一类, 其边峰呈现为单峰, 表观上 ⁷Li 核为同一类晶位; 190K 以下为另一

类, 边峰分裂成双峰, 高度下降, 表现为 ⁷Li 核处于两种不等价晶位上。不难看出, 多晶和单晶的 NMR 谱的谱形随温度的变化是一致的, 所不同的是多晶谱的边峰较单晶谱为宽, 强度也弱, 这是因为四极分裂与晶体取向密切相关, 其平均结果使其强度变弱, 宽度增加。在 190K 以下, 多晶谱的边峰增宽到几乎看不见。因为, 单晶谱在 190K 以下边峰已分裂成相距较远的双峰, 多晶的平均结果必然使谱线大大增宽以致几乎看不见。

由图 2 可看出, 骤冷实验所得的 NMR 谱, 的确保留了室温谱的边峰特征, 虽然它的高度下降了, 但它却意味着急速冷冻使部分晶体保持了室温下的结构特征, 这一事实说明 LiKSO₄ 晶体在室温下 ⁷Li 核只有一种晶位。而缓冷过程中, LiKSO₄ 晶体在 190K 附近发生了位移型相变, ⁷Li 核出现了两种不等价晶位。

文献[3]认为 LiKSO₄ 晶体在低温下, 其对称性由 C₆ 变为 C_{3v}。多晶 NMR 谱无法给出对称性的信息, 我们正设法用单晶作进一步的研究。

参 考 文 献

- [1] 郭全中、曹琪娟, 物理, 10-8 (1981), 475.
- [2] D. P. Sharma, *Pramana (India)*, 13 (1979), 223.
- [3] M. L. Bansal, et al., *Solid State Communications*, 36 (1980), 1047.

(上接 221 页)

活 动 名 称	预 计		活 动 名 称	预 计	
	时间(月)	地点		时间(月)	地点
国内外质谱仪器展览及技术交流	9	上海	高能物理实验讲习班	10	北京
第三次格拉斯曼广义相对论国际会议**	9	上海	粒子加速器学会第一届第二次理事会	10	南京
固体光学性质学术交流会	9	上海	直线加速器技术及应用交流会	10	南京
头发的 X 射线色散分析及活化			束流测试和控制技术交流会	10	南京
分析交流会	9	无锡	发光学会理事会全体会议	10	长春
扇形加速器讲习班	三季度	北京	中、日、美质谱学术交流	10	北京
组织关于小型加速器的咨询	三季度		第五次全国核物理会议	10	成都
穆斯堡尔谱学在磁学上的应用讨论会	三季度	北京	第三届全国非晶态物理学术讨论会	10	合肥
核物理实验数据自动获取与处理会议	三季度	合肥	物理学会教学委员会第二次全体会议	10	桂林
物理杂志编委会全体会议	三季度	待定	1982 年全国液晶学会理事会、液晶专题讨论会	10	待定
发光显示讨论会	10	无锡			

(下转 249 页)