



## 高浓度铝酸钠溶液结构

黄 静, 尹周澜, 刘 伟, 韦亭如, 丁治英

(中南大学 化学化工学院, 长沙 410083)

**摘要:** 研究不同苛性比(1.47~4.44)、不同氧化钠浓度(50~382 g/L)的铝酸钠溶液紫外吸收光谱, 对比发现高浓度铝酸钠溶液在320~340 nm处出现一个新的吸收峰, 结合该处吸收峰随时间的变化特征, 反演出320~340 nm处吸收峰对应的离子结构; 利用量子化学计算铝酸钠溶液中可能存在的含铝离子或分子的紫外吸收峰以验证反演的离子结构。结果表明: 随着氧化钠浓度和苛性比的增大以及时间的延长, 铝酸钠溶液中聚合离子的数量以及聚合的复杂程度均呈上升趋势; 320~340 nm处出现的新吸收峰为在高浓度溶液中出现的以 $\text{Al}-(\text{OH})_2-\text{Al}$ —桥连的聚合离子, 其中铝离子的配位数为4或者5。

**关键词:** 铝酸钠溶液; 紫外吸收光谱; 量子化学计算

**中图分类号:** O645.16+3

**文献标志码:** A

准确掌握铝酸钠溶液的结构与分解机理, 对于氧化铝工业生产及相关科学的研究具有重要意义。多年来国内外研究工作者运用多种分析检测手段, 研究了铝酸钠溶液的结构和分解机理, 但由于其离子种类和结构的复杂多变性, 难以得到完全一致的结论。目前取得的较为肯定的研究结果是:  $\text{Al}(\text{OH})_4^-$  为溶液中存在的主要铝酸根离子<sup>[1]</sup>, 然而溶液中分解析出的氢氧化铝(Gibbsite 或者 Bayerite)均为  $\text{Al}-(\text{OH})_6$  八面体结构。要想明确从四面体到八面体结构转变的机理, 关键是要从微观层次明晰铝酸钠溶液中的离子结构。

现今关于铝酸钠溶液相关的研究主要关注其晶种分解的强化<sup>[2~3]</sup>以及利用电导率法<sup>[4~6]</sup>研究铝酸钠溶液的分解规律, 从离子结构层次研究铝酸钠溶液的分解的文献报道较少, 其中主要是采用拉曼光谱、核磁共振、X射线和超声波谱法等现代研究方法, 直接近似判断离子结构。GERSON 等<sup>[7]</sup>利用溶液 X 射线衍射的方法, 系统地研究了铝酸钠溶液的结构与溶液浓度的关系, 结果发现高浓度溶液中( $6.0 \text{ mol/L NaOH}$ )主要以接触离子对的形式存在, 稀溶液中( $4.0 \text{ mol/L NaOH}$ )则是以水合离子的形式存在。SIPOS 等<sup>[8~9]</sup>利用核磁共振光谱和拉曼光谱分析方法, 分别研究了高苛性比铝酸钠溶液和高浓度铝酸钠溶液( $[\text{Al}(\text{III})]=0.8 \text{ mol/L}$ ,  $[\text{NaOH}] \geq 10 \text{ mol/L}$ )的离子结构, 提出溶液中并不存在

$\text{Al}(\text{OH})_6^{3-}$  和高于二聚体的更复杂的聚合离子。伏清等<sup>[10]</sup>将拉曼光谱与量子化学计算方法相联合, 研究得到高浓度铝酸钠溶液中( $\rho(\text{Al}_2\text{O}_3)=350 \text{ g/L}$ , 苛性比为1)含铝物种存在的主要形式是  $\text{Al}(\text{OH})_4^-$  和  $\text{Al}_2\text{O}(\text{OH})_6^{2-}$ 。尽管这些现代研究方法使得对铝酸钠溶液结构和分解机理的研究取得了重要进展, 但是关于高浓度铝酸钠溶液的结构性质仍没有明确结论。紫外光谱分析法是简单、有效的研究溶液结构的传统手段, 邱国芳等<sup>[11]</sup>详细研究高浓度铝酸钠溶液( $\rho(\text{Al}_2\text{O}_3)=612 \text{ g/L}$ ,  $\rho(\text{Na}_2\text{O})=558 \text{ g/L}$ )的紫外光谱特征, 证明高浓度溶液中存在有由  $\text{AlO}_4$  四面体组成的寡聚铝酸根离子。之后 CHEN 等<sup>[12]</sup>研究碱浓度对铝酸钠溶液紫外光谱的影响, 发现溶液紫外光谱的最大吸收峰随着碱浓度的增加而红移, 为高浓度铝酸钠溶液中聚合离子的存在提供了有力证据。MA 等<sup>[13]</sup>系统地研究了一系列铝酸钠溶液的紫外光谱, 指出高浓度、高苛性比铝酸钠溶液中( $\rho(\text{Na}_2\text{O})=353 \text{ g/L}$ , 苛性比为4)可能存在六配位的含铝离子。这些关于铝酸钠溶液的紫外光谱研究结果, 主要是对照拉曼光谱和红外光谱来预测紫外吸收峰所对应的离子结构, 较少有系统地利用紫外光谱分析法来分析铝酸钠溶液的结构, 并且关于铝酸钠溶液中聚合铝酸根离子和  $\text{Al}(\text{OH})_6^{3-}$  的存在也有不一样的结论, 因此, 本文作者在紫外光谱分析方法的基础

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51374251, 51134007)

收稿日期: 2016-03-11; 修订日期: 2016-09-09

通信作者: 丁治英, 副教授, 博士; 电话: 0731-88879616; E-mail: zy.ding@csu.edu.cn

上,同时配合量子化学计算方法,该法能够提供溶液结构和分子间相互作用等重要微观信息,国内外学者<sup>[14~18]</sup>利用该法研究铝酸钠溶液的分解机制以及离子结构之间的转化关系。结合实验结果与理论计算结果分析铝酸钠溶液陈化过程中紫外光谱的变化,对铝酸钠溶液分解前的初始结构特征进行反演,探寻高浓度铝酸钠溶液中可能存在的含铝离子或分子。

## 1 实验

### 1.1 铝酸钠溶液的制备

称取一定量的 NaOH 固体(分析纯)加入到自制不锈钢反应器中,加入一定量去离子水,加热至 NaOH 完全溶解,然后往热的氢氧化钠溶液中分批加入一定量 Al(OH)<sub>3</sub> 固体(分析纯),期间持续加热,加热过程适当补充水,以抵消由于反应和蒸发造成的水分损失,待 Al(OH)<sub>3</sub> 完全溶解后再加热 30 min,趁热快速过滤,得到澄清的铝酸钠溶液并储存在聚四氟乙烯瓶中,常温下密封保存。实验中向同一苛性比的浓溶液中缓慢加入去离子水,可以稀释得到相同苛性比的稀溶液;不同苛性比的溶液用分析纯氢氧化钠或氢氧化铝调节浓度和苛性比。

### 1.2 紫外光谱的测量

将配制的高浓度铝酸钠溶液稀释至所需浓度,放置于有盖的离心管中。用 UV-1801 型紫外分光光度计测其紫外吸收光谱,波长范围设置为 200~500 nm,用去离子水作为参比样品,采用光程为 1.00 cm 的石英玻璃比色皿,之后在常温放置过程中取样测量各个浓度的紫外吸收光谱。

### 1.3 量子化学计算

利用量子化学计算方法对高浓度铝酸钠溶液中可能存在的各类离子(分子)的总能量、几何构型、振动频率和紫外吸收光谱进行精确计算。计算中选用密度泛函 DFT 中的 B3LYP 方法,应用 6-311++G(d, p)基组,采用 PCM 溶剂化模型对离子进行结构优化和体系总能量计算,并以相同的基组和方法计算其振动频率和激发态紫外可见光谱。所有计算均采用 Gaussian09 软件,在中南大学高性能运算平台上运行。

## 2 实验结果

### 2.1 氧化钠浓度和苛性比对溶液结构的影响

不同苛性比(1.47~4.44)、不同氧化钠浓度(50~382 g/L)的铝酸钠溶液的紫外吸收光谱如图 1 所示。

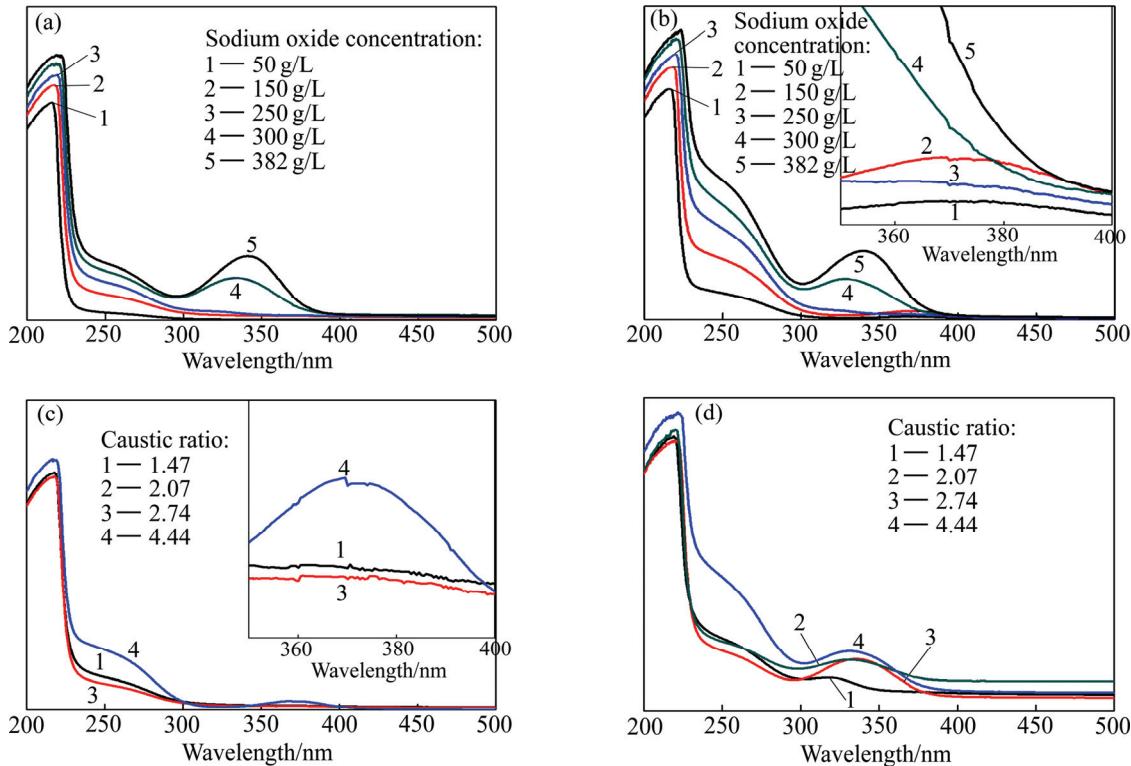


图 1 室温下铝酸钠溶液的紫外吸收光谱

Fig. 1 UV-vis spectra of sodium aluminate solution at room temperature: (a) Caustic ratio of 2.74; (b) Caustic ratio of 4.44; (c) Sodium oxide concentration of 150 g/L; (d) Sodium oxide concentration of 300 g/L

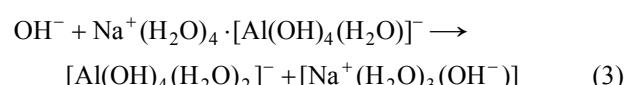
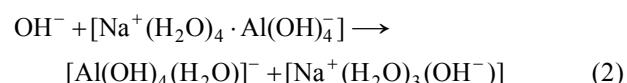
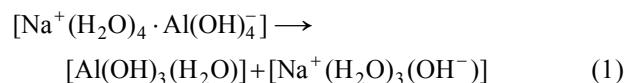
对比紫外光谱图可以明显发现,除了220 nm、260 nm处的紫外吸收峰外,高苛性比( $\alpha_k=4.44$ )溶液在370 nm处出现较弱吸收峰,且主要在中、低浓度的溶液中出现;高浓度溶液( $\geq 300 \text{ g/L}$ )在320~340 nm区间出现较强吸收峰,且随着苛性比的增加会发生一定的红移。前人根据实验和理论计算结果,指出220 nm和260 nm处的吸收峰分别是 $\text{Al}(\text{OH})_4^-$ 和 $[(\text{HO})_3\text{Al}-\text{O}-\text{Al}(\text{OH})_3]^{2-}$ 的吸收峰,通过量子化学计算也证实了 $\text{Al}(\text{OH})_4^-$ 和 $[(\text{HO})_3\text{Al}-\text{O}-\text{Al}(\text{OH})_3]^{2-}$ 的理论紫外吸收峰分别位于217 nm和273 nm,由此说明, $\text{Al}(\text{OH})_4^-$ 和 $[(\text{HO})_3\text{Al}-\text{O}-\text{Al}(\text{OH})_3]^{2-}$ 是铝酸钠溶液中存在的主要含铝离子。至于实验中出现的370 nm和320~340 nm处的吸收峰,尚未有文献报道所对应的离子结构。本文作者拟着重研究320~340 nm处吸收峰,370 nm处的吸收峰另撰文研究。为了准确判断320~340 nm处吸收峰对应的离子结构,利用其紫外光谱随时间的变化进行分析,并结合量子化学计算进行研究。

## 2.2 高浓度铝酸钠溶液的紫外吸收峰

图2所示为高浓度铝酸钠溶液紫外光谱随时间的变化,从图2(a)和(c)明显看出,苛性比为2.74,氧化钠浓度为300 g/L和382 g/L的溶液在330~340 nm处的吸收峰强度随时间的延长逐渐减小;图2(b)、(d)中

苛性比为4.44的高浓度铝酸钠溶液在330 nm处的吸收峰减小之后,在370 nm处出现新的吸收峰。苛性比为1.47的高浓度铝酸钠溶液的光谱研究结果同苛性比2.74一致。

上述紫外光谱结果可以推断,320~340 nm处吸收峰是与分解相关的离子(或生长基元)引起,高浓度铝酸钠溶液在自发分解过程中有中间产物的形成。随着苛性比的增加,高浓度铝酸钠溶液的结构发生了改变,自发分解机理不同。大量文献报道<sup>[14, 19~20]</sup>氢氧化钠浓度越高,越有利于铝酸钠溶液中离子对的存在,而离子对在 $\text{Al}(\text{OH})_4^-$ 转变成其他离子的反应式中起到了关键的作用:



因此,高浓度铝酸钠溶液中离子对的存在可以促进四配位的含铝离子转变成五配位、六配位的含铝离子(分子)。据文献报道<sup>[14, 21]</sup>,铝酸钠溶液中氢氧化铝

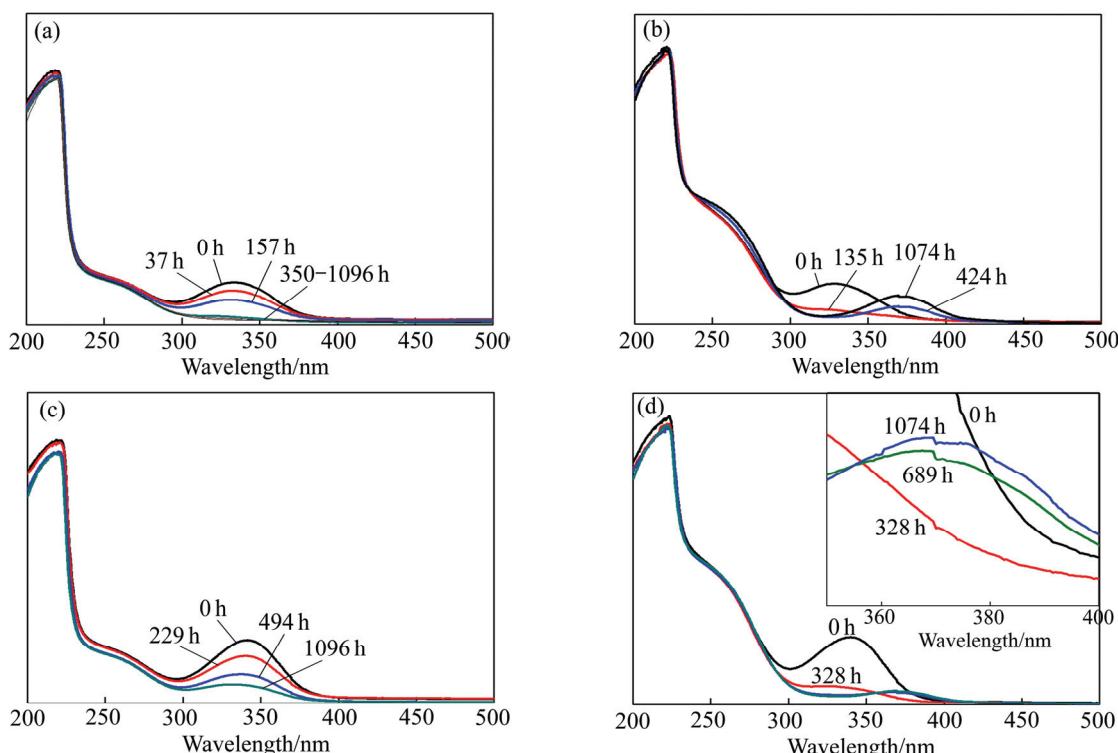


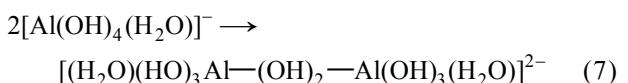
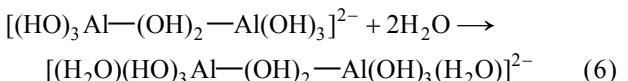
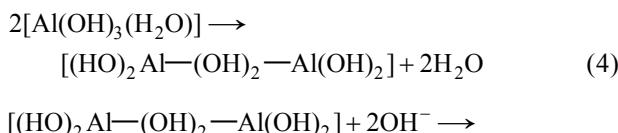
图2 高浓度铝酸钠溶液紫外光谱随时间的变化

**Fig. 2** UV-vis spectra of concentrated sodium aluminate solution with time: (a) Caustic ratio of 2.74, sodium oxide concentration 300 g/L; (b) Caustic ratio of 4.44, sodium oxide concentration 300 g/L; (c) Caustic ratio of 2.74, sodium oxide concentration of 382 g/L; (d) Caustic ratio of 4.44, sodium oxide concentration of 382 g/L

析出的生长基元最小单位是 $[\text{Al}(\text{OH})_4(\text{H}_2\text{O})_2]^-$ 或者 $[\text{Al}(\text{OH})_3(\text{H}_2\text{O})]$ ，而高浓度溶液中离子对的存在可以促进生长基元的形成，据此推测320~340 nm处吸收峰可能是由该生长基元最小单位及其聚合离子所产生。

### 2.3 量子化学计算结果

除了反应(1)~(3)，文献[14, 19~20]中对于铝酸钠溶液自发分解机制的推断还包括如下反应：



为了验证紫外吸收光谱的实验结果及我们的理论推断，利用 Gaussian 量子化学计算方法对 $\text{Al}(\text{OH})_4(\text{H}_2\text{O})_2^-$ 、 $\text{Al}(\text{OH})_3(\text{H}_2\text{O})$ 、二聚离子 $[(\text{H}_2\text{O})(\text{HO})_3\text{Al}-(\text{OH})_2-\text{Al}(\text{OH})_3(\text{H}_2\text{O})]^{2-}$ 、 $[(\text{HO})_2\text{Al}-(\text{OH})_2-\text{Al}(\text{OH})_2]$ 以及反应过程中可能生成的二聚离子的理论紫外光谱进行计算，结果如图3所示。

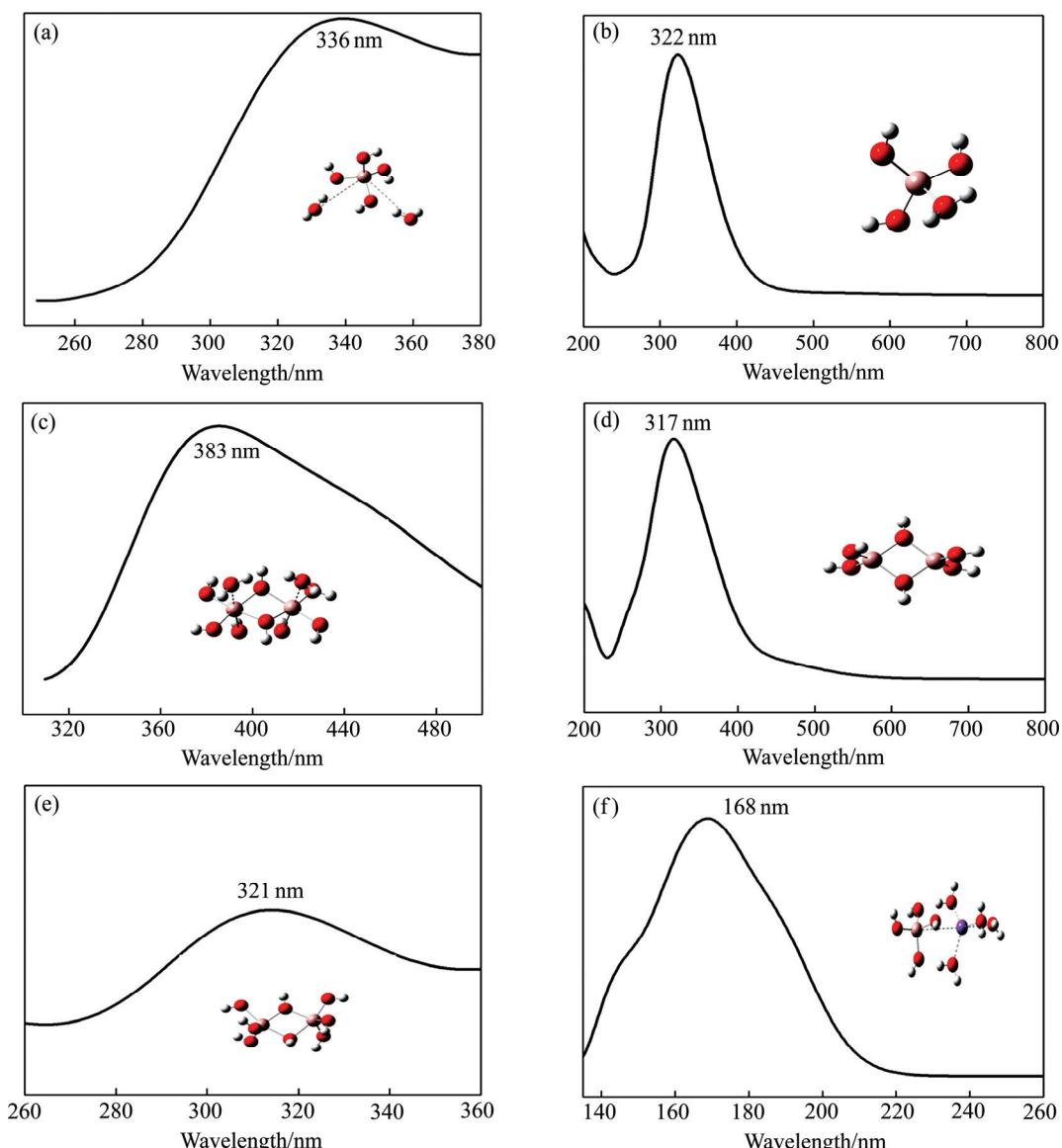


图3 含铝离子(分子)紫外光谱的量子化学计算结果

**Fig. 3** Calculated UV spectra for corresponding aluminum ions or molecules: (a)  $\text{Al}(\text{OH})_4(\text{H}_2\text{O})_2^-$ ; (b)  $\text{Al}(\text{OH})_3(\text{H}_2\text{O})$ ; (c)  $[(\text{H}_2\text{O})(\text{HO})_3\text{Al}-(\text{OH})_2-\text{Al}(\text{OH})_3(\text{H}_2\text{O})]^{2-}$ ; (d)  $[(\text{HO})_2\text{Al}-(\text{OH})_2-\text{Al}(\text{OH})_2]$ ; (e)  $[(\text{HO})_3\text{Al}-(\text{OH})_2-\text{Al}(\text{OH})_3]$ ; (f)  $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_4 \cdot \text{Al}(\text{OH})_4^-$

从图 3(f)可以看出, 高浓度铝酸钠溶液中存在的离子对  $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_4 \cdot \text{Al}(\text{OH})_4^-$  在紫外光谱区间并没有吸收峰, 图 3(a)、(b)、(d)、(e)中  $\text{Al}(\text{OH})_4(\text{H}_2\text{O})_2^-$ 、 $\text{Al}(\text{OH})_3(\text{H}_2\text{O})$ 、 $[(\text{HO})_2\text{Al}-(\text{OH})_2-\text{Al}(\text{OH})_2]$ 、 $[(\text{HO})_3\text{Al}-(\text{OH})_2-\text{Al}(\text{OH})_3]$  计算结果与 320~340 nm 处吸收峰的实验结果很接近。苛性比越高, 铝酸钠溶液中自由氢氧根浓度越大, 反应(2)的趋势越大, 即高苛性比、高浓度铝酸钠溶液中以  $\text{Al}(\text{OH})_4(\text{H}_2\text{O})_2^-$  为生长基元的机会越大, 其二聚离子的计算结果图 3(c)中 383 nm 处的吸收峰也直接验证了图 2(b)、(d)中光谱的变化特征。考虑到计算误差的影响, 推测高浓度铝酸钠溶液中 320~340 nm 处吸收峰是以—Al—(OH)<sub>2</sub>—Al—结构相连的聚合离子, 其中铝的配位数为 4 或 5。由于高浓度铝酸钠溶液分解过程中经历铝的配位数由 4 变成 6 的过程, 因此该处吸收峰主要是在分解前期出现。正如图 2(a)中 350~1096 h 的结果所示, 320~340 nm 处吸收峰强度已降至最小, 但紫外光谱图基线没有向上漂移, 溶液中没有大量固体析出。

### 3 结论

1) 随着铝酸钠溶液中氧化钠浓度和苛性比的升高以及时间的延长, 铝酸钠溶液中聚合离子的数量以及聚合的复杂程度都呈上升趋势。

2)  $\alpha_k=4.44$  时, 高浓度铝酸钠溶液紫外光谱随时间而发生变化, 在 330 nm 处的吸收峰减小, 在 370 nm 处出现新的吸收峰, 说明随着苛性比的增加, 高浓度铝酸钠溶液的结构发生了改变。

3) 320~340 nm 处出现的新吸收峰为在高浓度溶液中出现的以—Al—(OH)<sub>2</sub>—Al—桥连的聚合离子, 其中铝离子的配位数为 4 或者 5。

### REFERENCES

- [1] 李小斌, 赵东峰, 王丹琴, 阎丽. 铝酸钠溶液分解过程的理论及技术研究进展[J]. 中国有色金属学报, 2011, 21(10): 2577~2593.  
LI Xiao-bin, ZHAO Dong-feng, WANG Dan-qin, YAN Li. Research progress in theory and technology of gibbsite precipitation from sodium aluminate solution[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2011, 21(10): 2577~2593.
- [2] 徐荣广, 王志, 公旭中. 表面活性剂对铝酸钠溶液中一水软铝石晶种分解的影响[J]. 过程工程学报, 2012, 12(3): 388~394.  
XU Rong-guang, WANG Zhi, GONG Xu-zhong. The effect of surfactants on boehmite seed precipitation of sodium aluminate solution[J]. The Chinese Journal of Process Engineering, 2012, 12(3): 388~394.
- [3] 李小斌, 闫丽, 周秋生, 彭志宏, 刘桂华. 醇类添加剂 B35 对铝酸钠溶液晶种分解过程的影响[J]. 中国有色金属学报, 2011, 21(2): 459~464.  
LI Xiao-bin, YAN Li, ZHOU Qiu-sheng, PENG Zhi-hong, LIU Gui-hua. Effect of ethers additive B35 on seeded precipitation of sodium aluminate solution[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2011, 21(2): 459~464.
- [4] 李小斌, 王丹琴, 梁爽, 刘桂华, 彭志宏, 周秋生. 铝酸钠溶液的电导率与结构的关系[J]. 高等学校化学学报, 2010, 31(8): 1651~1655.  
LI Xiao-bin, WANG Dan-qin, LIANG Shuang, LIU Gui-hua, PENG Zhi-hong, ZHOU Qiu-sheng. Relationship between conductivity and structure of sodium aluminate solution[J]. Chemical Journal of Chinese Universities, 2010, 31(8): 1651~1655.
- [5] 李俊, 尹周澜, 丁治英, 张平民. 铝酸钠溶液均相分解过程的电导法研究[J]. 有色金属(冶炼部分), 2015(11): 17~20.  
LI Jun, YIN Zhou-lan, DING Zhi-ying, ZHANG Ping-min. Study on homogeneous decomposition of sodium aluminate solution by conductometry[J]. Nonferrous Metals (Extractive Metallurgy), 2015(11): 17~20.
- [6] LI Jun, YIN Zhou-lan, DING Zhi-ying, LIU Wei, WEI Ting-ru, CHEN Qi-yuan. Homogeneous nucleation of  $\text{Al}(\text{OH})_3$  crystals from supersaturated sodium aluminate solution investigated by in situ conductivity[J]. Hydrometallurgy, 2016, 163: 77~82.
- [7] GERSON A R, COUNTER J A, COOKSON D J. Influence of solution constituents, solution conditioning and seeding on the crystalline phase of aluminium hydroxide using in situ X-ray diffraction[J]. Journal of Crystal Growth, 1996, 160(3): 346~354.
- [8] SIPOS P, MAY P M, HEFTER G. Quantitative determination of an aluminate dimer in concentrated alkaline aluminate solutions by Raman spectroscopy[J]. Dalton Trans, 2006, 45(2): 368~375.
- [9] SIPOS P, HEFTER G, MAY P M.  $^{27}\text{Al}$  NMR and Raman spectroscopic studies of alkaline aluminate solutions with extremely high caustic content: Does the octahedral species  $\text{Al}(\text{OH})_6^{3-}$  exist in solution?[J]. Talanta, 2006, 70(4): 761~765.
- [10] 伏清, 尤静林, 王媛媛, 柳晓飞, 余立旺. 水溶液体系铝硅酸钠微结构的拉曼光谱和量子化学从头计算研究[J]. 光散射学报, 2014, 26(3): 265~271.  
FU Qing, YOU Jing-lin, WANG Yuan-yuan, LIU Xiao-fei, YU Li-wang. Raman spectra and quantum chemistry ab initio calculation study on microstructure of sodium aluminosilicate aqueous solutions[J]. The Journal of Light Scattering, 2014, 26(3): 265~271.
- [11] 邱国芳, 陈念贻, 阎立诚, 李郁. 高浓度铝酸钠溶液的光谱[J]. 中国有色金属学报, 1996, 6(1): 53~56.

- QIU Guo-fang, CHEN Nian-yi, YAN Li-cheng, LI Yu. The spectra of high concentration of sodium aluminate solution[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 1996, 6(1): 53–56.
- [12] CHEN Yun, FENG Qi-ming, LIU Kun, CHEN Yuan-dao, ZHANG Guo-fan. Study on the structure of Bayer liquor with spectroscopy and MD simulation[J]. Chemical Physics Letters, 2006, 422(4/6): 406–411.
- [13] MA Shu-hua, ZHENG Shi-li, XU Hong-bin, ZHANG Yi. Spectra of sodium aluminate solutions[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2007, 17(4): 853–857.
- [14] 李洁. 过饱和铝酸钠溶液结构及分解机理的研究[D]. 长沙: 中南大学, 2002: 69–117.
- LI Jie. Study on the structural characteristics and decomposition mechanism of supersaturated sodium aluminate solution[D]. Changsha: Central South University, 2002: 69–117.
- [15] 张牧群, 尹周澜, 陈启元, 李洁, 胡慧萍, 张平民. 铝酸钠溶液中离子溶剂化作用[J]. 中国有色金属学报, 2004, 14(2): 311–316.
- ZHANG Mu-qun, YIN Zhou-lan, CHEN Qi-yuan, LI Jie, HU Hui-ping, ZHANG Ping-min. Solvent effect of species in sodium aluminate solution[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2004, 14(2): 311–316.
- [16] 尹周澜, 丁治英, 李俊, 张牧群. 羟自由基对三聚铝酸根离子( $\text{Al}_3\text{-B}$ 基团)环合反应的影响[J]. 中国有色金属学报, 2015, 25(5): 1403–1408.
- YIN Zhou-lan, DING Zhi-ying, LI Jun, ZHANG Mu-qun. Effect of ·OH radical on cyclization reaction of trimmer aluminate ions ( $\text{Al}_3\text{-B}$  cluster)[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2015, 25(5): 1403–1408.
- [17] GALE J D, ROHL A L, WATLING H R, PARKINSON G M. Theoretical investigation of the nature of aluminum-containing species present in alkaline solution[J]. The Journal of Physical Chemistry, 1998, 102(50): 10372–10382.
- [18] LU Bang-mei, JIN Xiao-yan, TANG Jie. DFT studies of Al—O Raman vibrational frequencies for equated aluminium species[J]. Journal of Molecular Structure, 2010, 982(1/3): 9–15.
- [19] ROSSITER D S, FAWELL P D, ILIEVSKI D, PARKINSON G M. Investigation of the unseeded nucleation of gibbsite,  $\text{Al}(\text{OH})_3$ , from synthetic bayer liquors[J]. Journal of Crystal Growth, 1998, 191(3): 525–536.
- [20] GERSON A R. The role of fuzzy interfaces in the nucleation, growth and agglomeration of aluminum hydroxide in concentrated caustic solutions[J]. Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials, 2001, 43(2/3): 187–220.
- [21] GERSON A R, RALSTON J, SMART R S. An investigation of the mechanism of gibbsite nucleation using molecular modelling[J]. Colloids and Surfaces A (Physicochemical and Engineering Aspects), 1996, 110(1): 105–117.

## Structure of high concentration of sodium aluminate solution

HUANG Jing, YIN Zhou-lan, LIU Wei, WEI Ting-ru, DING Zhi-ying

(School of Chemistry and Chemical Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)

**Abstract:** By comparing the UV absorption spectra of sodium aluminate solutions with caustic ratio ranging from 1.47 to 4.44 and the sodium oxide concentration ranging from 50 to 382 g/L, it is found that a new absorption peak appears at 320–340 nm in the sodium aluminate solution with high concentration. According to the characteristic of the absorption peak with time, the corresponding ionic structure for the 320–340 nm absorption peak was speculated. The quantum chemical calculation of the UV absorption spectra for the corresponding aluminum ions or molecules was used to verify the speculations. The results show that the concentration of sodium oxide, caustic ratio and time can affect the characteristics of polymerization ions in sodium aluminate solution. The new absorption peak of 320–340 nm corresponds to the polymerization ions connecting with —Al—(OH)<sub>2</sub>—Al— bridge with coordination number of 4 or 5.

**Key words:** sodium aluminate solution; UV spectrum; quantum chemical calculation

**Foundation item:** Projects(51374251, 51134007) supported by the National Natural Science Foundation of China

**Received date:** 2016-03-11; **Accepted date:** 2016-09-09

**Corresponding author:** DING Zhi-ying; Tel: +86-731-88879616; E-mail: zy.ding@csu.edu.cn

(编辑 王超)