文章编号: 0254 - 5357(2015)06 - 0652 - 07 DOI: 10.15898/j.cnki.11 - 2131/td.2015.06.008

基于拉曼光谱 - 红外光谱 - X 射线衍射技术研究斜硅石的相对含量与石英质玉石结晶度的关系

周丹怡[1,2], 陈 华[1*], 陆太进[1], 柯 捷[3], 何明跃[2]
(1. 国土资源部珠宝玉石首饰管理中心北京珠宝研究所, 北京 100013;
2. 中国地质大学(北京)珠宝学院, 北京 100083; 3. 国家珠宝玉石质量监督检验中心, 北京 100013)

摘要: 石英质玉石的成分除 α - 石英外,还或多或少含有一种低温低压的 SiO_2 矿物"斜硅石",关于斜硅石的相对含量与石英质玉石结晶程度的关系还未见有研究。本文选取中国云南龙陵、安徽霍山、广西贺州和内蒙古阿拉善盟地区所产出的不同类型的石英质玉石为研究对象,采用拉曼光谱、红外光谱、X 射线衍射分析技术,确定了斜硅石的相对含量与石英质玉石结晶程度之间的关系。结果表明,石英质玉石中斜硅石的相对含量越高,石英质玉石的结晶程度越低;其中拉曼光谱中能够描述斜硅石相对含量变化的 502 cm^{-1}/465 cm^{-1} 两峰强度比值(X)与石英质玉石的结晶度指数(Y)基本上呈负相关关系:$Y = -0.36X + 6.93$($r = -0.94$)。此结论为利用无损检测手段大致判断石英质玉石的结晶程度提供了新的思路,同时也为定性评价石英质玉石的品级提供了科学依据和理论约束。

关键词: 石英质玉石结晶度; 斜硅石相对含量; 拉曼光谱法; 红外光谱法; X 射线衍射法
中图分类号: P619.281; P575.4; P575.5 **文献标识码:** A

在宝石学中,主要由低温石英(α - 石英)微晶组成且具有一定工艺价值的矿物集合体通常被称为石英质玉石。该类玉石分布十分广泛,并凭借其多彩的颜色、温润细腻的质地而深受人们青睐,具有较高的市场潜力,从而推动了石英质玉石的相关研究。石英质玉石的成分往往对其外观特征、品质级别、应用性能等方面有着显著影响,因此该领域也是石英质玉石研究中的热点。随着研究的不断深入,人们发现石英质玉石中还可存在一种低温低压 SiO_2 矿物——斜硅石[1]。1976 年斜硅石首次发现于西班牙大加纳利岛(Gran Canaria)Mogan 组底层流纹质凝灰岩的裂隙和孔洞中[2],其晶体结构可以看作通过左形 α - 石英与右形 α - 石英的($10\bar{1}1$)面网交替堆叠,形成一个由 SiO_4 四面体共角连接而成的三维结构,在单个晶胞范围内这种结构类似于作周期性重复的巴西双晶[3]。2007 年国际矿物学会新矿物和矿物命名委员会正式批准,将斜硅石作为一种具有与石英相似的 AB2 结构的新矿物种(CNMMN No. 99 - 035)列入矿物名录。斜硅石和 α - 石英可共存于常温常压环境中,但两者具有不同的晶体结构:斜硅石的晶胞参数 $a = 0.8758$ nm, $b = 0.4876$ nm, $c = 1.0715$ nm, $\beta = 90.08°$,其空间群为 I2/a,属单斜晶系(由于 $\beta = 90.08°$,外观常呈假斜方对称),其对称性低于 α - 石英(α - 石英的晶胞参数 $a = 0.4913$ nm, $b = 0.4913$ nm, $c = 0.5404$ nm,空间群为 $P3_121$,属三方晶系)[2-3]。

斜硅石常以纳米尺度微晶的形式存在于各种产状、各种颜色以及不同结晶程度的石英质玉石中[1,3-5],仅凭肉眼观察一般无法将其鉴别出来。迄今为止,斜硅石的研究主要涉及晶体结构[2-3,6-7]、形态特征[1,4-5]、物理化学性质[1,3]、检测方法[8-15]、分布特征[1,7,16]和形成机理[17-22]等方面,但关于斜硅石的相对含量对石英质玉石结晶程度的影响还未见报道,开展这些方面的研究将为大致判断石英质玉石的结晶程度提供新思路,也可为石英质玉石的品质评价、综合利用等建立科学依据和理论约束。

收稿日期: 2015 - 06 - 26; **修回日期:** 2015 - 09 - 22; **接受日期:** 2015 - 11 - 10
基金项目: 国土资源部公益性行业科研专项项目(201011005 - 2B)
作者简介: 周丹怡,硕士,宝石学专业。E-mail: lilyzdy@163.com。
通讯作者: 陈华,研究员,主要从事珠宝玉石研究。E-mail: chenhua63@163.com。

本文选取中国云南龙陵、安徽大别山地区、广西贺州、内蒙古阿拉善盟地区 4 个代表性产地所产出的不同颜色、不同结构类型的石英质玉石为研究对象,分别利用拉曼光谱、红外光谱、X 射线粉晶衍射三种宝玉石研究中较为常用的测试方法,探讨了石英质玉石中斜硅石和 α - 石英的相对含量与石英质玉石结晶程度之间的关系,并结合斜硅石与 α - 石英的晶体结构特征给予了理论上的解释。

1　实验部分

1.1　实验样品

本次研究的 19 件样品是从 100 件来自不同产地(云南龙陵、安徽大别山地区、广西贺州和内蒙古阿拉善盟地区)的石英质玉石中挑选出来的典型样品,通过偏光显微镜对样品磨制的岩石薄片进行分析,研究样品的显微结构可分为粒状结构和纤维状结构两大类。

1.2　样品分析方法及其测量条件

(1)拉曼光谱分析:采用 Renishaw - inVia 型激光共聚焦显微拉曼光谱仪(英国雷尼绍公司)。仪器测量条件为:激发光源波长 532 nm,分辨率 1 cm^{-1},激光功率 10 mW,测量范围 100 ~ 1200 cm^{-1},扫描次数为 3 次,对测试图谱进行峰形拟合所使用的软件为 Wire 4.1。

(2)红外漫反射光谱分析:采用 NICOLET iS5 傅里叶变换红外光谱仪(美国尼高力公司)的 PIKE TECHNOLOGIES UplR™红外漫反射附件对 19 件样品进行测试,所有测试图谱均进行 K - K 变换予以校正。仪器主要测量参数为:扫描范围 400 ~ 2000 cm^{-1},扫描次数为 32 次,分辨率 4 cm^{-1}。

(3)X 射线衍射分析:采用 Bruker D8 Advance 型 6.5kW 转靶 X 射线衍射仪(美国 Bruker 公司)进行测试。根据研究内容的不同,测量参数设置略有差异:在物相鉴定时测量角度范围为 10° ~ 80°,扫描速度 4°/min,步长 0.02°;而在结晶度测量时角度范围为 67° ~ 69°,扫描速度 0.25°/min。为尽可能地减少晶体粒度和择优取向对测量结果的影响,将样品均磨制成粒度为 74 μm(200 目)以下的粉末。

2　结果与讨论

2.1　斜硅石及其相对含量表征

2.1.1　拉曼光谱分析

前人研究表明,斜硅石具有 19 个独立的拉曼光谱谱峰,其中多数与 α - 石英重合,最特征的也是最强的斜硅石拉曼特征峰位于 502 cm^{-1}附近,该峰主要与硅氧四面体组成的四方环中 Si—O—Si 的对称伸缩 - 弯曲振动有关,因此常用于确定是否有斜硅石存在[9,12,23]。由于石英质玉石中常含有黄色、红色等主要由铁的氧化物(氢氧化物)组成的致色物质,这些杂质矿物会对斜硅石的拉曼光谱产生影响,如赤铁矿在 496 cm^{-1}附近具有特征峰。因此,本次研究选取无色或接近无色的样品进行拉曼光谱测试,结果显示不同样品所包含的 502 cm^{-1}谱峰的强度差异较大,说明不同样品中斜硅石的相对含量存在差异。样品中的斜硅石含量越高,其拉曼光谱中斜硅石 502 cm^{-1}特征峰就越为明显。

斜硅石含量的多少可以根据研究样品的拉曼光谱和 X 射线粉晶衍射图谱的分析和计算获得。Götze 等(1998)[9]配制了不同含量比例的斜硅石/α - 石英样品,对其进行拉曼光谱测试,发现斜硅石在样品中的相对含量越高,拉曼光谱中 502 cm^{-1}/465 cm^{-1}谱峰面积的比值和峰强度的比值也越高。本文利用高斯函数及洛伦兹函数对 502 cm^{-1}和 465 cm^{-1}进行峰形拟合,分别求出两峰的积分面积比(A_{502}/A_{465},%)和强度比(I_{502}/I_{465},%),见表 1。有必要说明的是,由于部分样品的 502 cm^{-1}特征峰较小,无法进行较好的峰形拟合,从而计算得出的积分面积比的误差也相对较大,因此表 1 中仅列出了这些样品的两峰强度比 I_{502}/I_{465}。

将表 1 中可进行峰形拟合的样品的 I_{502}/I_{465}和 A_{502}/A_{465}进行对比可知,两种计算方法得出的结果均相对偏差在 3% 以内,并且其变化趋势基本相同。因此,考虑到研究样品中的斜硅石含量较低,对斜硅石的 502 cm^{-1}特征峰较小的部分样品进行峰形拟合时存在一定困难且误差较大,本文将以拉曼光谱的 502 cm^{-1}/465 cm^{-1}峰强度比 I_{502}/I_{465}来表示斜硅石含量相对大小的变化。

2.1.2　红外漫反射光谱分析

斜硅石在石英质玉石中的相对含量变化同样可对红外漫反射光谱产生影响。Hardgrove(2013)[12]对含有不同比例斜硅石的石英质玉石样品进行红外漫反射光谱分析,发现 1095 cm^{-1}与 1157 cm^{-1}两处谱线强度比(记作 I_{1095}/I_{1157})会随着斜硅石含量的改变而发生明显的变化。本文对 19 件研究样品进行红外漫反射光谱测试并计算其红外漫反射光谱强度比值 I_{1095}/I_{1157}(表 1),再将样品测试数据投点绘制成"红外漫反射光谱 I_{1095}/I_{1157}与拉曼光谱 I_{502}/I_{465}散点分布图"(图 1)。由图 1 可知,当拉曼光谱中的 502 cm^{-1}与 465 cm^{-1}峰强度比 I_{502}/I_{465} > 12% 时,红外漫反射光谱中的 I_{1095}/I_{1157}比值与其呈较明显的正

相关关系;而当 502 cm^{-1} 与 465 cm^{-1} 两峰的强度比 I_{502}/I_{465} <5% 时,两者的相关性较弱。

表 1　不同产地石英质玉石样品的拉曼光谱和红外漫反射光谱信息

Table 1　Data of Raman spectra and infrared diffuse reflectance spectra of quartzite jade samples from different geographic origins

样品产地	样品编号	结构类型	拉曼光谱峰强度比 I_{502}/I_{465}(%)	拉曼光谱峰面积比 A_{502}/A_{465}(%)	红外光谱强度比 I_{1095}/I_{1157}
内蒙古阿拉善盟地区	ALS-1	纤维状	15.29	15.87	1.746
	ALS-2	纤维状	17.27	18.54	1.789
	ALS-CH-1	纤维状	16.25	16.47	1.749
	ALS-MNS-1	纤维状	19.54	19.63	1.874
	ALS-MNS-2	纤维状	14.68	15.24	1.772
	ALS-MNS-3	纤维状	16.00	16.13	1.743
	ALS-BLMN-1	纤维状	16.54	17.21	1.759
	ALS-BLMN-2	纤维状	20.37	22.00	1.724
	ALS-KD1-1	纤维状	16.19	16.35	1.837
	ALS-KD1-2	粒状	15.30	15.94	1.783
	ALS-MNT-1	粒状	12.75	12.50	1.714
	ALS-MNT-2	粒状	0	0	1.508
安徽霍山	HSY-60	粒状	2.92	-	1.722
	TB1235	粒状	0	0	1.628
广西贺州	HZ-C-030	粒状	2.54	-	1.512
市场购买(产地不详)	AGATE-20	纤维状	16.30	17.62	1.793
	AGATE-21	纤维状	17.13	17.93	1.830
	AGAM10018	纤维状	4.62	-	1.602
	AGAM10019	纤维状	0	0	1.605

注:I_{502}/I_{465} 和 A_{502}/A_{465} 的数据均为每件样品 20 个测试点的平均值。个别样品由于 502 cm^{-1} 特征峰过小,无法准确计算出峰面积,在表中以“-”表示。

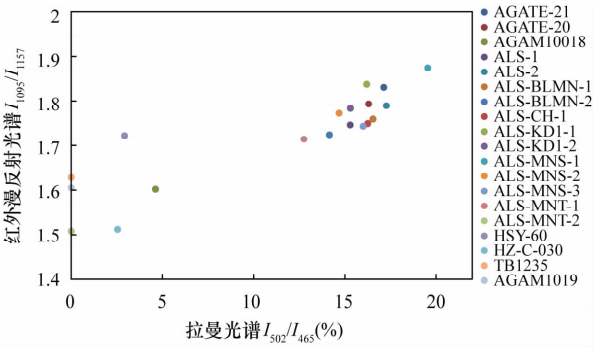


图 1　红外漫反射光谱中 I_{1095}/I_{1157} 与拉曼光谱中 I_{502}/I_{465} 之间的关系

Fig. 1　The relationship between I_{1095}/I_{1157} of infrared diffuse reflection spectrum and I_{502}/I_{465} of Raman spectrum

2.1.3　X 射线衍射分析

斜硅石的主要特征 d 值为 4.43、4.35、3.11、2.88[7]。根据布拉格公式 $\lambda = 2d\sin\theta$,上述各 d 值对应的 2θ 分别为 19.92°、20.27°、28.72°、30.97°。

根据拉曼光谱和红外漫反射光谱的测试结果,选取 7 件斜硅石相对含量不同的典型样品切除围岩并研磨成 74 μm 以下的粉末,进行 X 射线粉晶衍射测试(图 2)。由图 2 可知,样品中斜硅石的衍射峰强度普遍较弱,说明样品中斜硅石的含量普遍较低。一些研究[9,12]通过对比两种计算结果发现,拉曼光谱测试所获得的斜硅石含量更接近于真实值,并认为这种差异可能是因为 X 射线衍射对于纳米尺度的斜硅石无法产生连续的布拉格散射,而拉曼光谱的微小光斑对纳米尺度的斜硅石的短程有序结构反应灵敏所致。由于样品的 X 射线衍射分析获得的斜硅石的衍射峰普遍较弱,因此本文主要采用拉曼光谱的计算结果来表征样品中斜硅石相对含量的变化。

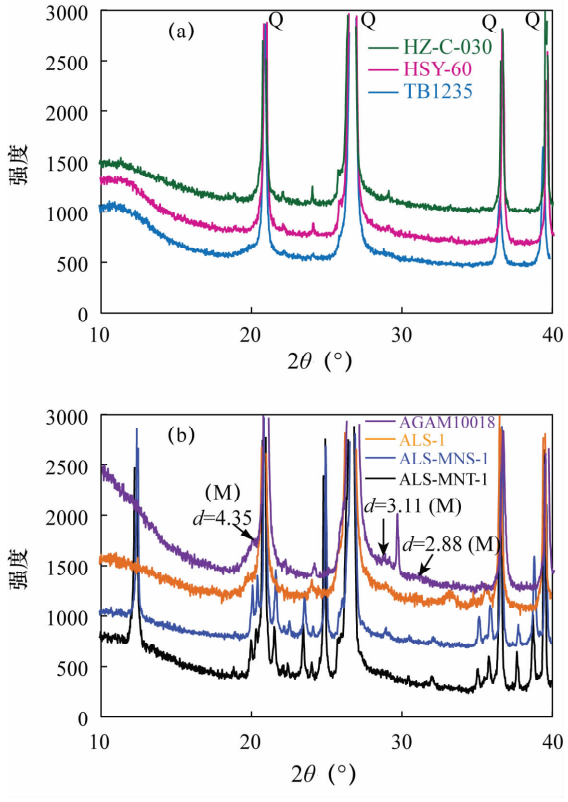


图 2　不同斜硅石含量样品的 X 射线粉晶衍射图谱:(a)斜硅石衍射峰未出现或不明显;(b)斜硅石衍射峰较为明显

Fig. 2　XRD patterns of typical samples with different moganite contents: (a) XRD patterns with less obvious or without diffraction peaks of moganite; (b) XRD patterns with relatively obvious diffraction peaks of moganite

Q—α-石英衍射峰; M—斜硅石衍射峰。

2.2　斜硅石相对含量与石英质玉石结晶度的关系

X 射线衍射技术同样可以用来测量矿物的结晶度。结晶度可以描述为结晶的完全程度或完整程度,其中结晶的完全程度是指物质中非晶体与晶体的相对比例,而结晶的完整程度是指物质中内部质点排列的规则程度以及结构缺陷的多少[24]。本次研究样品的 X 射线粉晶衍射图谱中无非晶体散射峰存在,所以本文所指的结晶度主要是石英质玉石结晶完整程度的体现。已有研究[25-26]表明,X 射线粉晶衍射图谱中 67° ~ 69°范围内的五指衍射峰可用于计算石英质玉石的结晶度指数(CI),计算公式为:CI = 10 · F · a/b。式中的 a、b 值可由位于 67.74°附近、对应 $d(2\bar{1}32)$ = 0.13844 nm 衍射峰测量得出(图 3);F 为比例因子,不同衍射仪的 F 值一般不同,需要用标准样品进行标定(一般为纯净无杂质的人工水晶,其 CI 值为 10)。本文所选用的标准样品是由一个无色透明、内部基本无任何包裹体的水晶研磨而成的粉末。根据上述公式计算,得出本次结晶度计算公式中比例因子 F = 1.179。7 件典型样品的结晶度指数见图 4 中各点的纵坐标。

结合拉曼光谱和 X 射线粉晶衍射的计算结果,分别对 7 件 X 射线衍射测试样品的 502 cm^{-1}/465 cm^{-1}谱峰强度比 I_{502}/I_{465} 和石英质玉石结晶度指数进行投点,绘制了"I_{502}/I_{465} - 石英结晶度指数"散点分布图(图 4)。结果显示,无论是粒状结构还是纤维状结构的石英质玉石,其中斜硅石的相对含量与样品结晶度的关系有着共同的规律,即 502 cm^{-1}/465 cm^{-1}峰强度比值(I_{502}/I_{465})越大,斜硅石的相对含量越高,样品的结晶度越低。通过 Excel 软件对数据进行线性回归分析,石英质玉石的结晶度指数(Y)与 502 cm^{-1}/465 cm^{-1}峰强度比值(X)之间的变化规律大致符合负相关关系:Y = -0.36X + 6.93,相关系数 r = -0.94。

2.3　斜硅石相对含量对石英质玉石结晶度影响的理论解释

石英质玉石中斜硅石的相对含量与石英质玉石结晶度之间的负相关关系,可以从晶体结构的角度进行解释。斜硅石的晶体结构可以看作是由左形 α - 石英与右形 α - 石英的$(10\bar{1}1)$面晶格面网平行斜硅石晶体(101)面交替堆叠而成,而自然界中无双晶存在的石英大多全部是由左形 α - 石英或右形 α - 石英组成。由此推测,尺度大多为纳米级的斜硅石微晶在 α - 石英中的出现可以视作一种结构缺陷,在一定程度上破坏了 α - 石英中质点规则排列

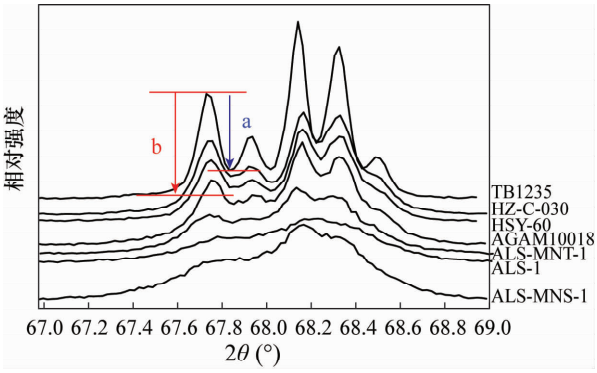


图 3　7 件测试样品 XRD 图谱的 68°五指衍射峰

Fig. 3　The 68° quintuplet peaks in the XRD patterns of seven investigated samples

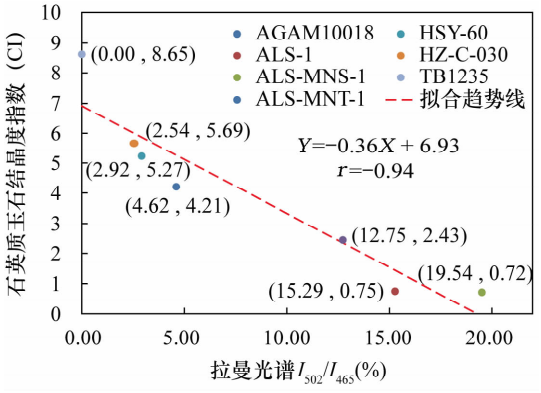


图 4　拉曼光谱中峰强度比值 I_{502}/I_{465}(%)与石英质玉石结晶度(CI)的关系

Fig. 4　The relationship between the peak intensity ratio I_{502}/I_{465} (%) of Raman spectrum and the crystallinity index of quartzite jade

所形成的长程有序结构,使以 α - 石英为主要成分的石英质玉石的结晶完整程度降低,从而使体现这种完整程度的结晶度指数下降。因此,图 4 中能够表征斜硅石相对含量的 I_{502}/I_{465} 比值越高,其石英质玉石的结晶度指数越低。

石英质玉石结晶度指数的变化也可以通过 X 射线衍射图谱直观地表现出来。由于斜硅石相对含量的不同,石英质玉石中 α - 石英晶体结构的畸变程度也有所差异,这种结构畸变将导致在 X 射线衍射过程中,本应产生的衍射转化为不同程度的弥散散射。因此,图 3 中斜硅石相对含量较高的样品,其衍射峰一般窄且尖锐(如样品 TB1235),反之则宽且弥散(如样品 ALS - MNS - 1)。

不同石英质玉石中斜硅石相对含量的差异可能与其形成环境密切相关。目前,关于 α - 石英中斜

硅石的形成仍存在较多争议,但多数认为斜硅石是在 α - 石英结晶的过程中形成的,而 α - 石英既可从流体中直接结晶,也可通过"opal - A→opal - CT/opal - C → 隐晶质石英"这一序列相变形成[2,5,20,27-28]。在 α - 石英结晶过程中,受温度、介质的 pH 值、SiO_2 含量、杂质的种类和含量的变化等多种因素影响[1,16,19-20],α - 石英的结晶过程可能会发生改变,左形 α - 石英与右形 α - 石英沿($10\bar{1}1$)面方向的晶格面网沿一定方向交替堆叠排列,从而促成了斜硅石的结晶和生长。

3　结论

在利用无损测试方法分析石英质玉石中斜硅石的相对含量方面,现有研究大多依靠拉曼光谱和红外光谱,而对石英结晶度的定量分析则主要借助 X 射线衍射技术。本文利用拉曼光谱、红外光谱和 X 射线衍射这三种宝玉石检测领域较为常用的测试方法,对我国 4 个代表性产地产出的不同颜色、不同结构类型的石英质玉石中斜硅石的相对含量差异进行了探讨,并在对比分析斜硅石相对含量与石英质玉石结晶度的过程中发现了两者之间的负相关关系,认为拉曼光谱中能够描述斜硅石相对含量变化的 502 cm^{-1}/465 cm^{-1} 两峰强度比值(X)与石英质玉石的结晶度指数(Y)的负相关关系大致符合线性方程 $Y = -0.36X + 6.93$($r = -0.94$)。这一结论建立了斜硅石相对含量与石英质玉石结晶度两个不同研究方向的关联性,为判断石英质玉石的结晶程度提供了一种无损的检测方法,也为定性评价石英质玉石的品级、探讨不同产地石英质玉石的形成环境提供了新的借鉴依据。

值得指出的是,由于研究样品数量有限,还需更多的石英质玉石样品的测试数据,以期完善斜硅石的相对含量与石英质玉石结晶度之间的定量关系。

致谢: 感谢中国地质科学院矿产资源研究所蔡剑辉研究员对本文提出的修改建议。

4　参考文献

[1] Heaney P J, Post J E. The Widespread Distribution of a Novel Silica Polymorph in Microcrystalline Quartz Varieties[J]. Science, 1992, 255: 441 - 443.

[2] Heaney P J. Structure and Chemistry of the Low-pressure Silica Polymorphs[M]//Heaney P J, Prewitt C T, Gibbs G V. Silica. Washington D C: Mineralogical Society of America, 1994: 1 - 40.

[3] Miehe G, Graetsch H. Crystal Structure of Moganite: A New Structure Type for Silica[J]. European Journal of Mineralogy, 1992, 4: 693 - 706.

[4] Wahl C, Miehe G, Fuess H. TEM Characterisation and Interpretation of Fabric and Structural Degree of Order in Microcrystalline SiO_2 Phases [J]. Contributions to Mineralogy and Petrology, 2002, 143: 360 - 365.

[5] 刘鑫鑫. 南京六合方山沉积砾石层中玛瑙雨花石矿物学研究[D]. 南京: 南京大学, 2013.
Liu X X. The Mineralogical Study of Agates in the Sedimentary Gravel Layers from Fangshan, Liuhe County, Nanjing[D]. Nanjing: Nanjing University, 2013.

[6] Graetsch H. Structural Characteristics of Opaline and Microcrystalline Silica Minerals [M]//Heaney P J, Prewitt C T, Gibbs G V. Silica. Washington D C: Mineralogical Society of America, 1994: 209 - 232.

[7] Graetsch H, Flörke O W, Miehe G. Structural Defects in Microcrystalline Silica [J]. Physics and Chemistry of Minerals, 1987, 14: 249 - 257.

[8] Graetsch H, Topalovic I, Gies H. NMR Spectra of Moganite and Chalcedony [J]. European Journal of Mineralogy, 1994, 4: 459 - 464.

[9] Götze J, Nasdala L, Kleeberg R, et al. Occurrence and Distribution of 'Moganite' in Agate/Chalcedony: A Combined Micro-Raman, Rietveld, and Cathodoluminescence Study [J]. Contributions to Mineralogy and Petrology, 1998, 133: 96 - 105.

[10] Zhang M, Moxon T. In Situ Infrared Spectroscopic Studies of OH, H_2O and CO_2 in Moganite[J]. European Journal of Mineralogy, 2012, 24: 123 - 131.

[11] Schmidt P. Moganite Detection in Silica Rocks Using Raman and Infrared Spectroscopy[J]. European Journal of Mineralogy, 2013, 25: 797 - 805.

[12] Hardgrove C. Thermal Infrared and Raman Microspectroscopy of Moganite-bearing Rocks [J]. American Mineralogist, 2013, 8: 78 - 84.

[13] Sitarz M, Wyszomirski P, Handke B, et al. Moganite in Selected Polish Chert Samples: The Evidence from MIR, Raman and X-ray Studies [J]. Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2014, 122: 55 - 58.

[14] Zhang M, Moxon T. Infrared Absorption Spectroscopy of SiO_2-Moganite[J]. American Mineralogist, 2014, 99: 671 - 680.

[15] Capel F C, Leon R L, Jorge V S, et al. Combined Raman Spectroscopic and Rietveld Analyses as a Useful and Nondestructive Approach to Studying Flint Raw Materials at Prehistoric Archaeological Sites [J]. Archaeology &

Anthropology Science,2015,7(2):235 - 243.

[16] Wenk H R,Shaffer S J,Tendelo G V. Planar Defects in Low Temperature Quartz[J]. Physica Status Solidi A: Applied Research,1988,107:799 - 805.

[17] Heaney P J. Moganite as an Indicator for Vanished Evaporites: A Testament Reborn? [J]. Journal of Sedimentary Petrology A,1995,65:633 - 638.

[18] Moxon T, Ríos S. Moganite and Water Content as a Function of Age in Agate: An XRD and Thermogravimetric Study [J]. European Journal of Mineralogy,2004,16:269 - 278.

[19] Moxon T, Carpenter M A. Crystallite Growth Kinetics in Nanocrystalline Quartz (Agate and Chalcedony) [J]. Mineralogical Magazine,2009,73(4):551 - 568.

[20] Hatipoglu M. Moganite and Quartz Inclusions in the Nano-structured Anatolian Fire Opals from Turkey[J]. Journal of African Earth Sciences,2009,54:1 - 21.

[21] Heaney P J,Mckeown D A,Jeferey P E. Anomalous Behavior at the I2/a to Imab Phase Transition in SiO_2-Moganite: An Analysis Using Hard-mode Raman Spectroscopy[J]. American Mineralogist,2007,92:631 - 639.

[22] Bustillo M A. Moganite in the Chalcedony Varieties of Continental Cherts (Miocene, Madrid Basin, Spain) [J]. Spectroscopy Letters,2012,45:109 - 113.

[23] Kingma K J,Hemley R J. Raman Spectroscopic Study of Microcrystalline Silica [J]. American Mineralogist, 1994,79:269 - 273.

[24] 黄继武,李周编著. 多晶材料 X 射线衍射——实验原理、方法与应用[M]. 北京:冶金工业出版社,2012:118 - 131.
Huang J W, Li Z. X-ray Diffraction of Polycrystalline Material—Experimental Principles, Methods and Application[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2012:118 - 131.

[25] Murata K J, Norman M B. An Index of Crystallinity for Quartz[J]. American Journal of Science, 1976, 276: 1120 - 1130.

[26] 何明跃,王濮. 石英的结晶度指数及其标型意义[J]. 矿物岩石,1994,14(3):22 - 28.
He M Y, Wang P. The Crystallinity of Quartz and Its Typomorphic Significance [J]. Minerals and Rocks, 1994,14(3):22 - 28.

[27] Williams L A,Parks G A,Crerar D A. Silica Diagenesis, Ⅰ. Solubility Controls [J]. Journal of Sedimentary Petrology,1985,55:301 - 311.

[28] 谢天琪. 辽宁阜新"战国红"玛瑙致色机理及结构成因研究[D]. 北京:中国地质大学(北京),2014.
Xie T Q. Study on the Color and Genesis of Zhanguohong Agate from Fuxin,Liaoning Province[D]. Beijing: China University of Geosciences (Beijing),2014.

Study on the Relationship between the Relative Content of Moganite and the Crystallinity of Quartzite Jade by Raman Scattering Spectroscopy, Infrared Absorption Spectroscopy and X-ray Diffraction Techniques

ZHOU Dan-yi[1,2], *CHEN Hua*[1*], *LU Tai-jin*[1], *KE Jie*[3], *HE Ming-yue*[1]

(1. Beijing Research Institute, National Gems & Jewelry Technology Administrative Center, Ministry of Land and Resources, Beijing 100013, China;
2. School of Gemology, China University of Geosciences (Beijing), Beijing 100083, China;
3. National Gemstone Testing Center, Beijing 100013, China)

Abstract: Quartzite jade is composed of α-quartz and another silica phase, moganite, which forms under low pressure and low temperature conditions. At present, there are few studies on the relationship between the relative content of moganite and the crystallinity of quartzite jade. In this study, some quartzite jade samples from four locations in China (Longling, Yunnan province; Huoshan, Anhui province; Hezhou, Guangxi Zhuang Autonomous Region, and Alxa League, Inner Mongolia Autonomous Region), were analyzed by Raman Scattering Spectroscopy, Infrared Absorption Spectroscopy and X-ray Powder Diffraction techniques. The results showed a negative correlation between the relative content of moganite and the crystallinity of quartzite jade. The higher the relative content of moganite, the lower is the crystallinity index of quartzite jade. The relationship of the intensity ratio of 502 cm^{-1}/465 cm^{-1} in the Raman scattering spectrum and the crystallinity index of quartzite jade, could be expressed by the equation of $Y = -0.36X + 6.93$ (the correlation coefficient is -0.94). This research could not only offer some new ideas about qualitatively estimating the crystallinity of quartzite jade by non-destructive testing methods, but also provide some scientific evidence and theoretical restrictions for qualitatively evaluating quartzite jade.

Key words: crystallinity of quartzite jade; relative content of moganite; Raman Spectroscopy; Infrared Spectroscopy; X-ray Diffraction

《色谱》2016 年征订启事

国内刊号：CN 21－1185/O6　　邮发代号：8－43　　国际刊名 CODEN 编码：SEPUER
国际标准刊号：ISSN 1000－8713　　国外代号：DK21010　　广告经营许可证号：8－43

《色谱》是中国唯一的色谱专业期刊，主要报道色谱学科的基础性研究成果，色谱及其交叉学科的重要应用科研成果及最新研究进展。适于科研院所及分析测试领域等从事色谱基础和应用技术研究的科研人员、色谱及其相关学科的硕士及博士研究生、色谱器件及仪器的开发人员阅读。

《色谱》已被美国《医学索引》(Medline)、美国《化学文摘》(CA)、荷兰 Elsevier Scopus、美国《剑桥科学文摘》(CSA)、俄罗斯《文摘杂志》(AJ)、波兰《哥白尼索引》(IC)、《日本科学技术文献数据库》(JICST)和英国皇家化学学会系列数据库中的《分析化学文摘》(AA)、《工业化学灾害》(CHI)、《质谱学通报(增补)》(MSB－S)等收录。连续多年入选 CA 千刊表。

《色谱》在国内也具有较高的影响力。曾连续入选百种中国杰出学术期刊，是中国科学院优秀期刊、中国科协优秀期刊、中国科技核心期刊、中国精品科技期刊、中文核心期刊、中国科协精品科技期刊工程项目及中国中科院科学出版基金择优支持期刊。《色谱》近几年在中国科学技术信息研究所的影响因子等评价指标一直名列化学学科期刊前茅。2015 年公布的影响因子为 1.954，连续第六年名列全国化学类核心期刊第一名。

《色谱》每月 8 日出版。单价 20 元，全年 240 元。请在全国各地邮局订阅，邮发代号 8－43；也可直接与《色谱》编辑部联系订购，联系人：魏桂林。。网址：www.chrom－China.com。

《色谱》编辑部地址：大连市中山路 457 号；电话：(0411)84379021；E－mail：sepu@dicp.ac.cn。