

ICS 39.060
Y 88

CAQI

团 体 标 准

T/CAQI 73—2019

珠宝玉石鉴定 红外光谱法

Gem testing—Infrared spectroscopy method

2019-07-03 发布

2019-10-01 实施

中国质量检验协会 发 布

目 次

前言	V
1 范围	1
2 规范性引用文件	1
3 术语和定义	1
4 方法原理	2
5 仪器设备	2
6 方法选择	2
7 操作步骤	3
8 主要影响因素	3
9 结果表示	4
附录 A (资料性附录) 珠宝玉石鉴定常见红外光谱图及扼要说明	5
A.1 关于附录 A 中谱图的限制性说明	5
A.2 红外谱图	5
A.2.1 大气背景单光束图	5
A.2.2 金刚石	6
A.2.3 刚玉	12
A.2.4 金绿宝石	14
A.2.5 绿柱石	16
A.2.6 碧玺	20
A.2.7 尖晶石	22
A.2.8 锆石	24
A.2.9 托帕石	25
A.2.10 橄榄石	26
A.2.11 石榴石	27
A.2.12 石英	28
A.2.13 长石	34
A.2.14 方柱石	36
A.2.15 柱晶石	37
A.2.16 黝帘石	37
A.2.17 绿帘石	38
A.2.18 萤青石	39
A.2.19 楔石	39
A.2.20 磷灰石	40
A.2.21 透辉石	41
A.2.22 顽火辉石	42
A.2.23 锂辉石	43

A.2.24	红柱石	44
A.2.25	矽线石	45
A.2.26	蓝晶石	46
A.2.27	鱼眼石	47
A.2.28	符山石	48
A.2.29	硼铝镁石	49
A.2.30	塔菲石	50
A.2.31	蓝锥矿	51
A.2.32	重晶石	52
A.2.33	天青石	52
A.2.34	石膏	53
A.2.35	方解石结构型碳酸盐质宝玉石	54
A.2.36	文石结构型碳酸盐质宝玉石	55
A.2.37	锡石	56
A.2.38	磷铝锂石	57
A.2.39	透视石	57
A.2.40	蓝柱石	58
A.2.41	赛黄晶	59
A.2.42	硅铍石	60
A.2.43	硬玉	60
A.2.44	绿辉石	65
A.2.45	软玉	66
A.2.46	欧泊(玻璃态)	67
A.2.47	石英岩	69
A.2.48	玉髓	71
A.2.49	石英质玉(隐晶质-显晶质)	72
A.2.50	蛇纹石	73
A.2.51	查罗石	74
A.2.52	蔷薇辉石	75
A.2.53	阳起石	75
A.2.54	绿松石	76
A.2.55	青金石	77
A.2.56	孔雀石	78
A.2.57	葡萄石	78
A.2.58	萤石	79
A.2.59	水钙铝榴石	80
A.2.60	滑石	81
A.2.61	方钠石	81
A.2.62	赤铁矿	82
A.2.63	高岭石族	83
A.2.64	叶蜡石	84
A.2.65	水镁石	84
A.2.66	苏纪石	85

A.2.67 异极矿	85
A.2.68 云母、伊利石类	86
A.2.69 针钠钙石	86
A.2.70 绿泥石	87
A.2.71 斜红磷铁矿	88
A.2.72 硬水铝石	88
A.2.73 硅硼镁铝石	89
A.2.74 金红石	90
A.2.75 琥珀	90
A.2.76 牙骨类	92
A.2.77 角质蛋白类	93
A.2.78 合成立方氧化锆	95
A.2.79 合成碳硅石	96
A.2.80 人造钇铝榴石	97
A.2.81 人造钛酸锶	98
A.2.82 玻璃	98
参考文献	104

前　　言

本标准按照 GB/T 1.1—2009 给出的规则起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别这些专利的责任。

本标准由国家黄金钻石制品质量监督检验中心提出。

本标准由中国质量检验协会归口。

本标准起草单位：国家黄金钻石制品质量监督检验中心、国家金银珠宝饰品质量监督检验中心（四川）、广东省珠宝玉石及贵金属检测中心、同济大学宝石及工艺材料实验室、安徽省地质实验研究所（国土资源部合肥矿产资源监督检测中心）、上海宝石及材料工艺工程技术研究中心、深圳市飞博尔珠宝科技有限公司、南京宝光检测技术有限公司、北京尼高力天光科贸有限公司、布鲁克（北京）科技有限公司。

本标准主要起草人：李建军、程佑法、戴苏兰、陈能香、戴慧、周征宇、龙楚、徐思海、李澄、杨健、陈侃、高扬、马婷婷、张丛森、陈大鹏、王岳、山广祺、李婷。

珠宝玉石鉴定 红外光谱法

1 范围

本标准规定了使用红外光谱法鉴定珠宝玉石的术语和定义、方法原理、仪器设备和操作方法、主要影响因素及结果表示。

本标准适用于借助中红外至近红外范围光谱对有特征吸收的珠宝玉石进行鉴定。

2 规范性引用文件

下列文件对于本文件的应用是必不可少的。凡是注日期的引用文件,仅注日期的版本适用于本文件。凡是不注日期的引用文件,其最新版本(包括所有的修改单)适用于本文件。

- GB/T 6040 红外光谱分析方法通则
- GB/T 16552 珠宝玉石 名称
- GB/T 16553 珠宝玉石 鉴定

3 术语和定义

GB/T 6040、GB/T 16552、GB/T 16553 界定的以及下列术语和定义适用于本文件。为了便于使用,以下重复列出了 GB/T 6040 中的一些术语和定义。

3.1

溴化钾粉末压片透射法 transmission method using KBr powder

将少量样品粉末与适量溴化钾粉末混合均匀并压结成片,通过透射法采集红外吸收谱图的方法。

3.2

直接透射法 direct transmission method

让红外辐射光束穿过原位宝石样品获得透射谱图的方法。

3.3

反射法 specular reflection method

用样品表面光的反射(镜面反射)测定反射红外光谱的方法。

注:由于与反射率(对应折射率)相关,可能需要修正光谱,进行必要的变换。

3.4

衰减全反射(ATR)法 attenuated total reflection method

用于高吸收样品或样品表面的测定方法,红外光以大于临界角的角度入射到紧贴在样品表面的高折射指数晶体时,由于样品折光指数低于晶体,发生全反射,红外光只进入样品极浅的表层,只有某些频率被吸收,测量这一被衰减了的辐射即得到样品的衰减全反射光谱。

[GB/T 6040—2019,3.15]

3.5

透过率 transmittance

T

透过样品的红外辐射能与入射的红外辐射能之比。

[GB/T 6040—2019, 3.1]

3.6

反射率 reflectance

R

样品反射的红外辐射能量与总红外辐射能量之比。

3.7

吸光度 absorbance

A

透过率倒数的以 10 为底的对数。即：

$$A = \log \frac{1}{T}$$

[GB/T 6040—2019, 3.2]

3.8

基线 baseline

在红外吸收光谱上,按一定方式绘制的直线或曲线,用来表示吸收带不存在时的背景吸收曲线。

[GB/T 6040—2019, 3.5]

3.9

K-K 变换 Kramers-Kronig transformation

为消除通过反射技术采集到的谱图中光学色散的影响而进行的一种数学校正方法。

3.10

K-M 转换 Kubelka-Munk transformation

把漫反射法测定的光谱转换成透射吸收光谱的方法。

[GB/T 6040—2019, 3.12]

3.11

ATR 校正 ATR correction

使用 ATR 测定装置时,校正峰强度与波数相关性的功能。

[GB/T 6040—2019, 4.4.12]

4 方法原理

宝石在红外光的照射下,引起晶格(分子)、络阴离子团和配位基的振动能级发生跃迁,并引发相应的红外光能量衰减而产生的光谱为红外光谱。对红外光谱进行匹配、分析,可为珠宝玉石鉴定提供一定的证据(参见附录 A)。

5 仪器设备

红外光谱仪,波数测试范围 $4\ 000\text{ cm}^{-1}\sim400\text{ cm}^{-1}$,可配红外显微镜和/或透、反射附件。测试范围,依照不同的仪器,在高波数端可有一定的拓展,如有的中红外光谱仪可拓展至近红外区的 $7\ 500\text{ cm}^{-1}$ 。

6 方法选择

6.1 粉末法:适用于可刮取微量粉末的样品;

6.2 直接透射法:适用于具有至少一组平行面或具有切面平行的弧面的样品。如八面体{111}或立方

体{100}面发育的样品,或腰部足够厚的抛光样品;

6.3 表面反射法:适用于表面未覆有异相材料的宝石;

6.4 内部全反射法:适用于切磨比例满足内部全反射、或底面具有非红外活性衬底的样品。如标准圆钻型切工的抛光样品、带有金属衬底镶嵌的稍薄玉石等;

6.5 衰减全反射(ATR)法:只适用于存在能够与 ATR 附件高折射率晶体平面实现良好面接触的样品(包括粉末样品);

6.6 显微红外光谱法:适用于红外光路径狭小的样品,可采用显微直接透射法或显微内反射法或表面反射法。样品规格应符合仪器要求。

7 操作步骤

注:以傅里叶变换红外光谱仪为例。

7.1 开机,建议预热 30 min;

7.2 选择设置测试条件,包括分辨率、扫描计数、扫描波数范围等;

注:分辨率推荐 8 cm^{-1} 或优于 8 cm^{-1} 、扫描计数推荐不小于 8 Scans,必要时,可设置为上百甚至数千 Scans、扫描范围一般情况下推荐 $6\,000 \text{ cm}^{-1} \sim 400 \text{ cm}^{-1}$ 。若针对不同采样方式进行有针对性的设置,反射法推荐 $2\,000 \text{ cm}^{-1} \sim 400 \text{ cm}^{-1}$ 或 $4\,000 \text{ cm}^{-1} \sim 400 \text{ cm}^{-1}$;透射法推荐 $6\,000 \text{ cm}^{-1} \sim 2\,000 \text{ cm}^{-1}$ 或 $6\,000 \text{ cm}^{-1} \sim 400 \text{ cm}^{-1}$,特殊情况下设置为 $7\,500 \text{ cm}^{-1} \sim 400 \text{ cm}^{-1}$ 或仅针对某较小波数段范围进行扫描,如 $3\,600 \text{ cm}^{-1} \sim 3\,400 \text{ cm}^{-1}$ 等。

7.3 背景扫描(若对大气干扰扣除要求较高时,可采取先测样品后立刻扣除背景的扫描方式);

7.4 测试样品。为获得尽可能多的证据信息,宜采用不同操作方法从不同方向采集谱图;

7.5 参照附录 A 与已知宝石材料的红外光谱进行比较分析;

7.6 需要时,对原始谱图进行必要的处理,如:对反射谱图进行 K-M 转换以获得吸收光谱,对反射法光谱进行 K-K 变换有利于与溴化钾粉末压片透射法谱图进行比对,对衰减全反射(ATR)法获得的谱图进行 ATR 校正,当谱图基线不水平时进行适当的校正。

注:珠宝玉石以其较强的光泽属性及抛磨光洁的表面形貌,借助各种反射附件采集其反射谱图时,进入到仪器检测器的镜面反射信号占据绝对比例,因此宜采用反射法光谱处理技术对谱图进行变换校正,即 K-K 变换。

8 主要影响因素

8.1 粉末法测试时主要影响因素:样品量的多少、样品粉末粒度、压片样品透光性等。需注意晶体的类质同象替代可引起特征峰的漂移,特别是某些无机盐材料易与溴化钾介质发生离子交换。

8.2 无损测试时主要影响因素:晶体的方向性、样品对红外光的透明度;反射谱图受色散影响引起谱图畸变。其中不同结晶方向可呈现差异红外光谱的晶体宝石,多方向晶体共存样品(晶质集合体)谱图因拟合效应存在畸变;矿物颗粒的大小影响谱图某些谱带的拟合程度。

直接透射谱图对透射光能量的衰减受复杂因素影响,无论如何穿过样品的光程总会是影响绝对吸光度的重要因素,所有珠宝玉石都应考虑超大光程引发的谱图中湮没特征吸收峰的可能性。

无机宝石的大抛光平面理论上符合衰减全反射法的测试要求,但样品平面与 ATR 附件高折射率晶体面难以实现紧密贴合,因此测试效果不佳;具有可逆塑变性(弹性)的有机宝石,易借助一定压力与 ATR 附件高折射率晶体表面形成紧密贴合,可获得信噪比较好的谱图,但需注意过大的压力可能挤碎被测样品和/或 ATR 附件上的高折射率晶体。

8.3 无论何种采谱方式,与主体宝玉石成分不同的物质,如包裹体、浸入物、表面覆层等,均可能对谱图信号造成影响。

9 结果表示

9.1 呈现谱图：横坐标应包含坐标轴标尺与单位，纵坐标应包含谱图呈现模式——吸光度(A)、透射率(T)或反射率(R)；其中透过率和反射率的单位一般为“%”。参见附录A。

9.2 信息描述：应描述关键吸收峰的位置，如：具 $3\ 595\ \text{cm}^{-1}$ 红外吸收峰/带(本标准也简称为“吸收峰”或“吸收带”或“峰”或“带”)等。

9.3 必要的测试信息，包括但不限于：

- a) 测定日期；
- b) 测试者姓名；
- c) 样品名；
- d) 数据编号；
- e) 样品编号；
- f) 操作方法；
- g) 测试条件；
- h) 数据处理条件；
- i) 参比样品/谱图；
- j) 仪器名称及型号。

附录 A
(资料性附录)
珠宝玉石鉴定常见红外光谱图及扼要说明

A.1 关于附录 A 中谱图的限制性说明

- A.1.1 红外光谱谱图(本文件也简称为“谱图”)采集时设定的分辨率为 8 cm^{-1} 。
- A.1.2 采集谱图的结果与纵坐标标注相关,如: %透过率表示谱图采集时光路透过样品,无论采样方式是直接透射法还是内部反射法; %反射率表示光路经过样品时在样品表面(含极浅表层)发生反射,而获得的带有样品信息的谱图。
- A.1.3 受实际样品状态的影响,所有谱图的纵坐标数值不具有参考意义。
- A.1.4 如无特殊说明,本文件宝石名称仅指示其材料属性,无成因倾向。如:金刚石,代表碳原子组成的等轴晶系晶体材料,可能是天然形成的,也可能是人工制造的。“自然”“人为”以及 GB/T 16552 中规定的带有成因倾向的术语,如天然、人工、合成等,其语境界定了过程是否有人的干预。
- A.1.5 除特别指明的样品外,绝大多数谱图采自珠宝玉石领域常见规格样品,而未对样品进行破损。
- A.1.6 本标准提供的谱图是参考性的,不一定是决定性的。标准中涉及的宝石名称仅说明本标准起草方使用该类样品获得了标准件给出的谱图,但有些谱图并非指向某唯一类别的宝石。

A.2 红外谱图

A.2.1 大气背景单光束图

大气背景单光束图(见图 A.1)以 $7\ 500\text{ cm}^{-1}\sim6\ 800\text{ cm}^{-1}$ 、 $5\ 600\text{ cm}^{-1}\sim5\ 100\text{ cm}^{-1}$ 、 $4\ 000\text{ cm}^{-1}\sim3\ 300\text{ cm}^{-1}$ (常以 $3\ 700\text{ cm}^{-1}\sim3\ 600\text{ cm}^{-1}$ 为强谱带)、 $2\ 100\text{ cm}^{-1}\sim1\ 200\text{ cm}^{-1}$ (常以 $1\ 800\text{ cm}^{-1}\sim1\ 400\text{ cm}^{-1}$ 间为强谱带)范围内密集的与水蒸气有关的峰,以及 $2\ 349\text{ cm}^{-1}$ ($2\ 360\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 340\text{ cm}^{-1}$)和 667 cm^{-1} 与二氧化碳有关的峰为特征,因此宝石红外谱图一般无需对这些谱带进行解析。受尘埃(主要是无定形二氧化硅)污染影响,谱图常在 $1\ 050\text{ cm}^{-1}$ 、 800 cm^{-1} 处呈现宽带。受有机物(如机器防锈油、大气中未知有机挥发物、人员体脂等)污染的干扰,谱图常呈现与 $-\text{CH}_3$ 有关的 $2\ 960\text{ cm}^{-1}$ 峰以及与 $-\text{CH}_2-$ 有关的 $2\ 920\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 850\text{ cm}^{-1}$ 峰。尽管干扰难以避免,但测试前宜对样品进行清洁。

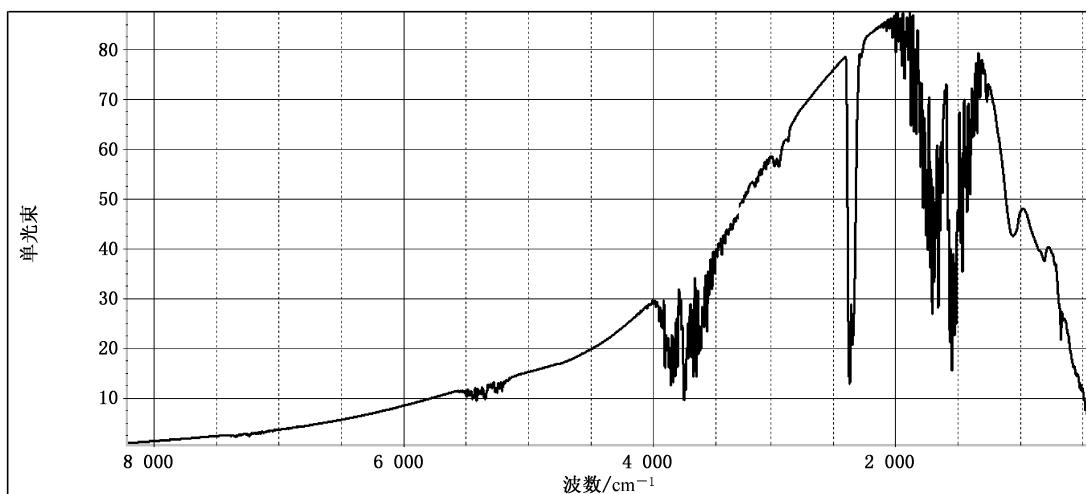
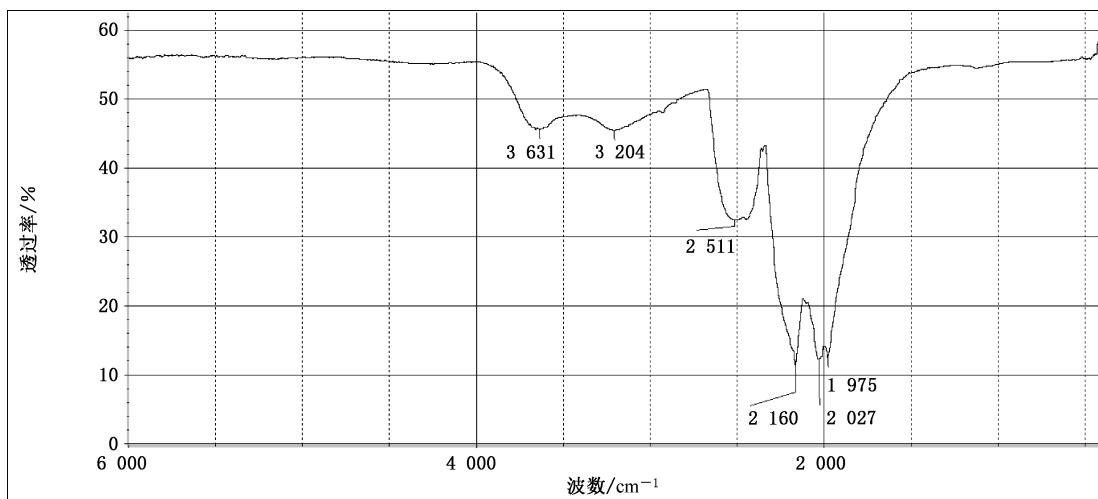


图 A.1 大气背景单光束红外光谱图

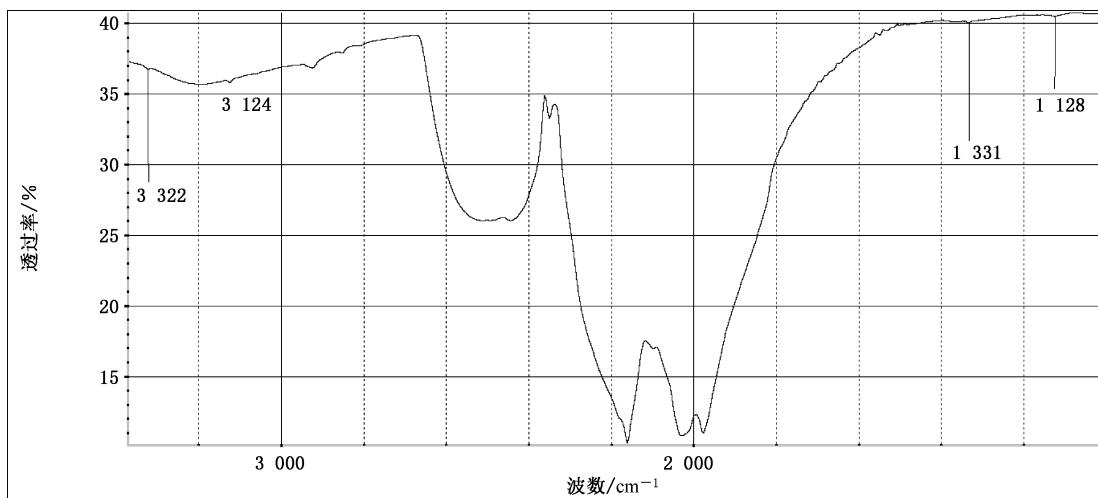
A.2.2 金刚石

A.2.2.1 金刚石晶体本征(Ⅱa型)谱图(见图A.2)表明晶体中不含氮,或氮原子的存在形式在红外光谱中无表征。



图A.2 金刚石本征红外谱图(Ⅱa型)

A.2.2.2 金刚石呈现的弱 $3\ 322\text{ cm}^{-1}$ 、 $3\ 124\text{ cm}^{-1}$ 峰,与含氢元素有关;呈现的弱 $1\ 331\text{ cm}^{-1}$ 、 $1\ 128\text{ cm}^{-1}$ 峰,与含氮元素有关。见图A.3。



图A.3 表现出与氢元素、氮元素有关的弱峰的金刚石红外谱图

A.2.2.3 金刚石中的氮元素以单原子替位氮形式存在(Ⅰb型)时,以 $1\ 344\text{ cm}^{-1}$ 和/或 $1\ 131\text{ cm}^{-1}$ 峰为特征,见图A.4。

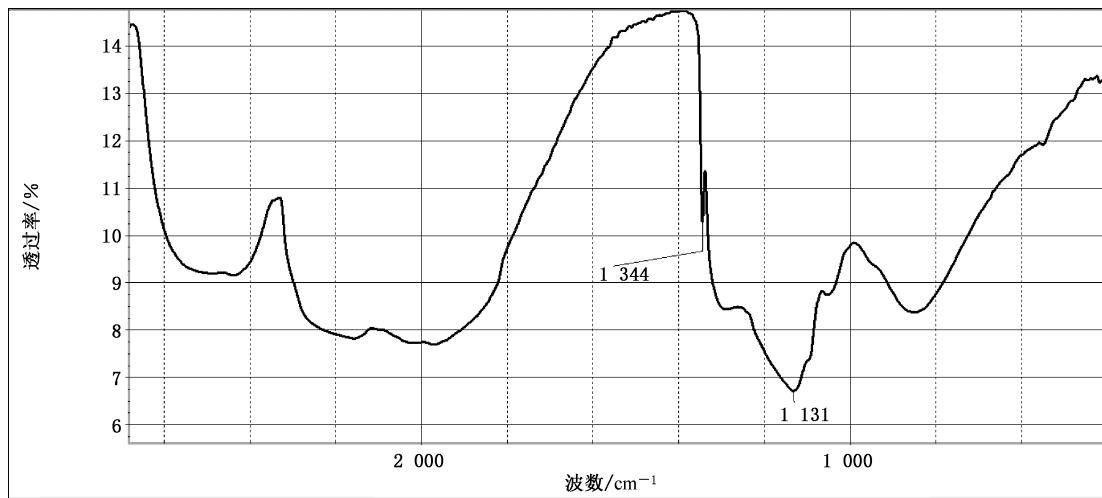


图 A.4 表现出 Ib 型特征的金刚石红外谱图

A.2.2.4 当金刚石中的氮元素以相邻双原子替位(A 心)形式存在(IaA型)时, 谱图以 $1\ 282\text{ cm}^{-1}$ 峰为特征, 见图 A.5。

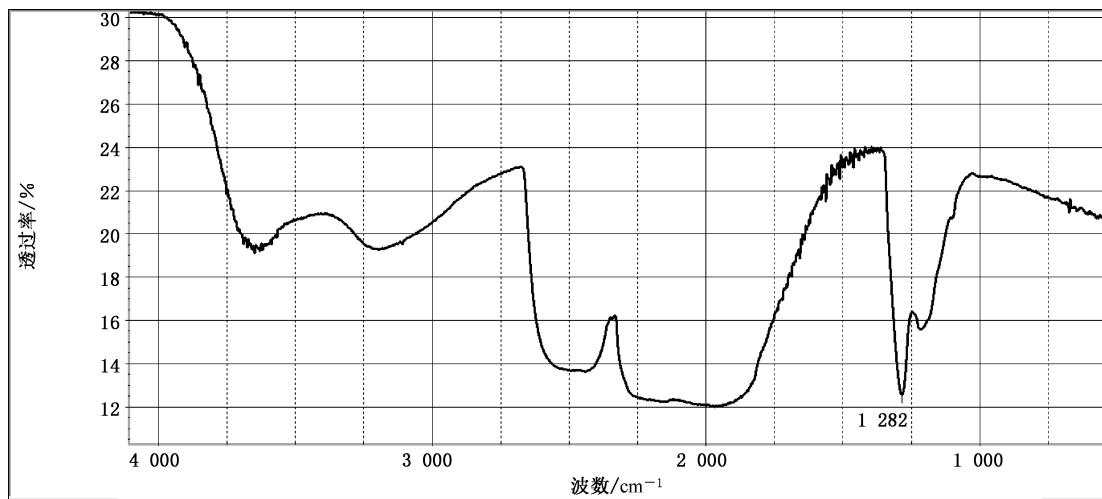
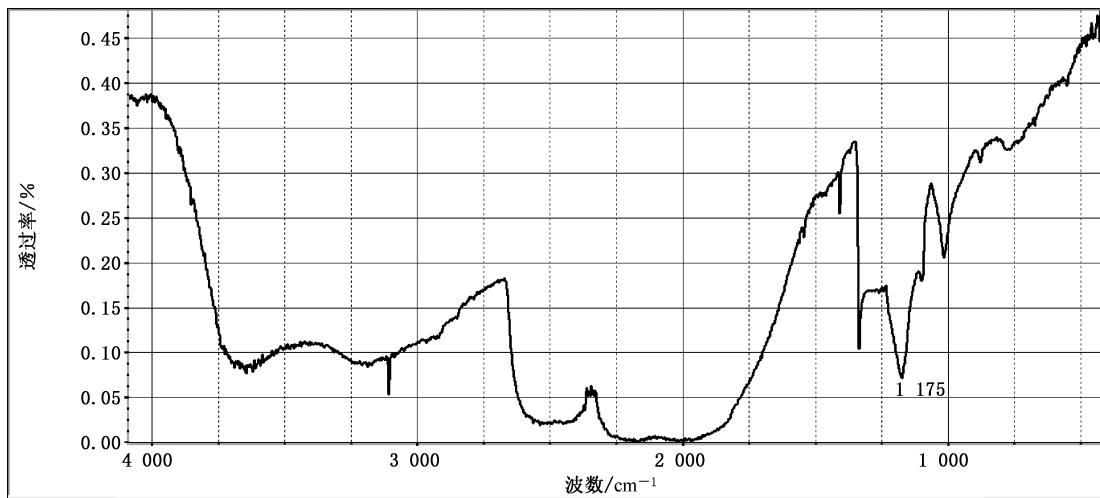
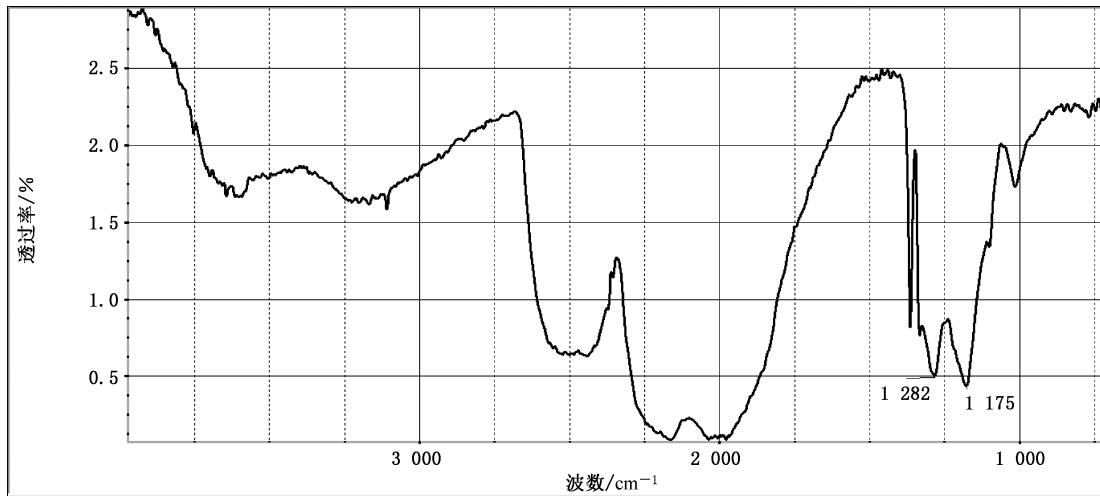


图 A.5 表现出双原子替位氮存在的金刚石红外谱图

A.2.2.5 当金刚石中的氮元素以多原子聚集形态(B类聚集态氮,B心)存在时, 谱图可呈现 $1\ 175\text{ cm}^{-1}$ 峰(IaB型), 见图 A.6。

图 A.6 表现出 IaB 特征(1175 cm^{-1} 峰)的金刚石红外谱图

A.2.2.6 当金刚石中的 A 心和 B 心产生的吸收近乎相当, 即 1282 cm^{-1} 、 1175 cm^{-1} 峰强较为接近, 钻石为 IaAB 型, 见图 A.7。

图 A.7 表现为 IaAB 特征(1282 、 1175 cm^{-1} 峰)的金刚石红外谱图

A.2.2.7 当金刚石中含有片晶氮时, 谱图可呈现 1370 cm^{-1} 峰, 见图 A.8。

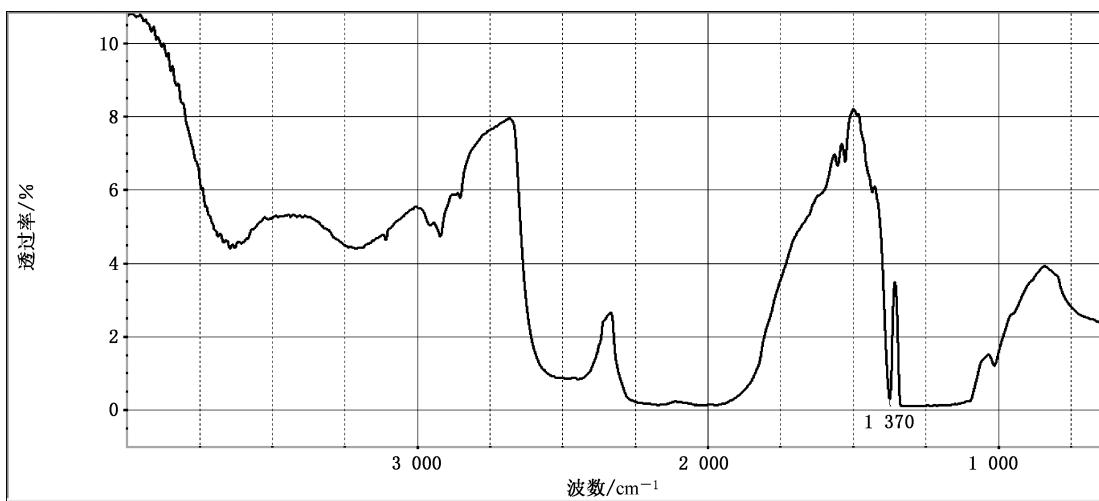


图 A.8 表现出片晶氮存在的金刚石红外谱图

A.2.2.8 当金刚石含有不带电荷的硼原子(B^0)时,常具有 $2\ 803\text{ cm}^{-1}$ 峰(Ⅱb型),见图A.9。该峰的强弱与 B^0 的浓度有正相关性,也与金刚石的蓝色饱和度有正相关性。图A.9谱图对应的样品几乎无色。

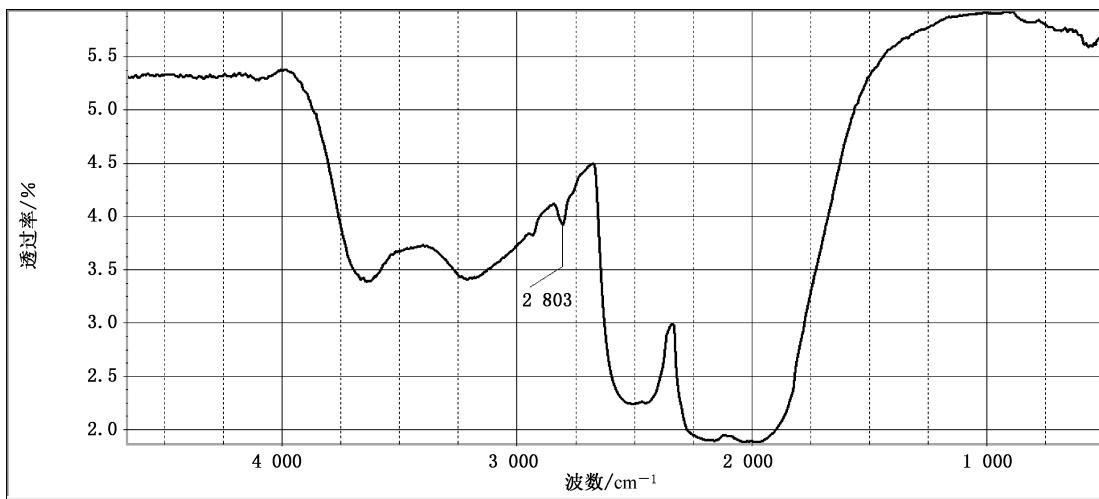


图 A.9 几乎无色的Ⅱb型金刚石红外谱图

A.2.2.9 当金刚石中硼元素浓度较高,因对红外光过强的吸收而湮埋掉 $2\ 803\text{ cm}^{-1}$ 谱带时,由 $1\ 290\text{ cm}^{-1}$ 处的谱带指示高浓度的硼元素,这种情况下,Ⅱb型金刚石往往呈现较高饱和度的蓝色,见图A.10。

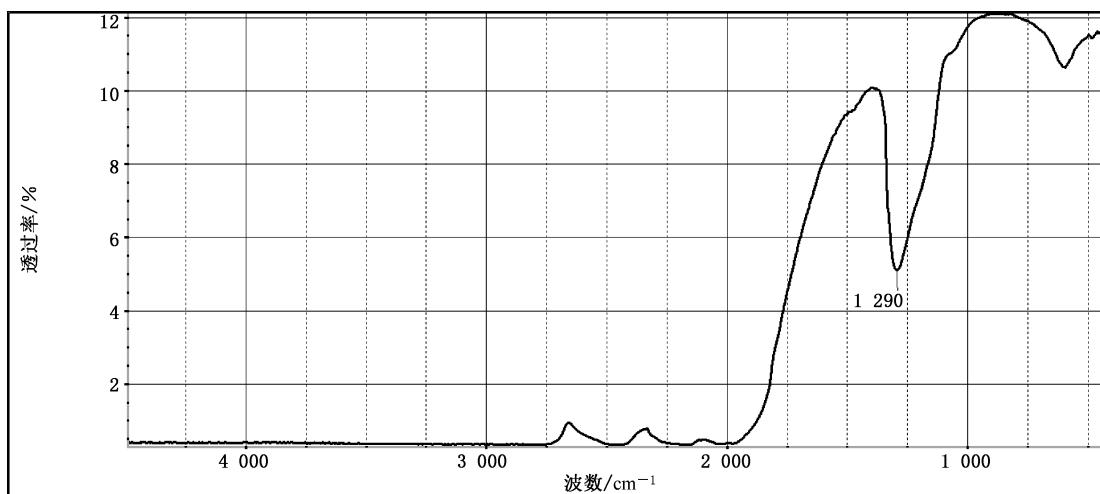


图 A.10 富硼的蓝色金刚石(Ⅱb型)红外谱图

A.2.2.10 当金刚石中含氢元素时,会表现出数量多变、强弱不等的一系列尖锐吸收峰(见图 A.3、图 A.11)。富氢时,以 $3\ 107\text{ cm}^{-1}$ 、 $1\ 405\text{ cm}^{-1}$ 峰为典型,包括在 $4\ 495\text{ cm}^{-1}$ 、 $4\ 167\text{ cm}^{-1}$ 处以及 $3\ 400\text{ cm}^{-1}\sim 2\ 750\text{ cm}^{-1}$ 范围内可呈现数个甚至多达十几处锐利尖峰。

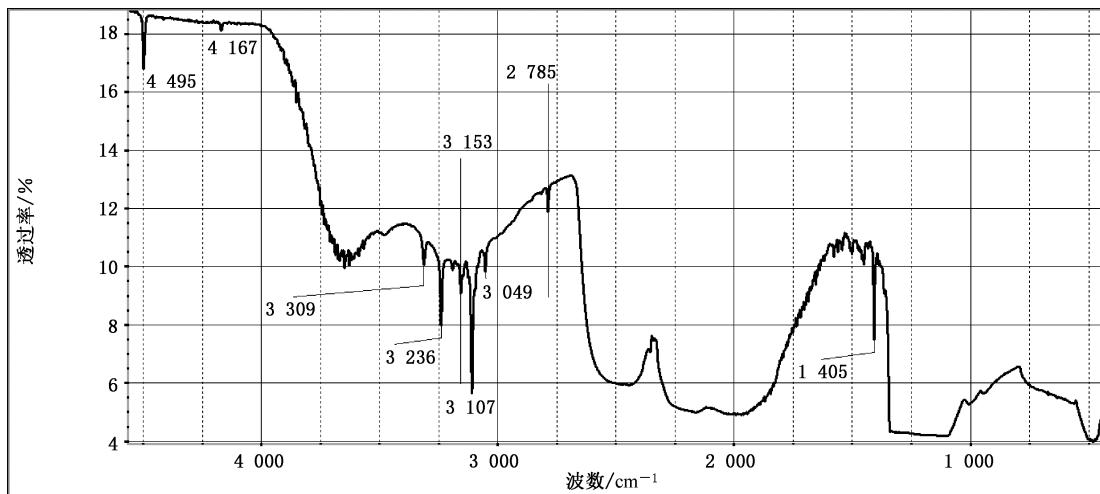


图 A.11 富氢的金刚石红外谱图

A.2.2.11 当金刚石红外谱图在 $1\ 450\text{ cm}^{-1}$ 处呈现的宏大谱带,偶尔伴有 880 cm^{-1} 附近的尖峰,往往与氧有关,或者归属于(-C=O-),见图 A.12。这在一些带有皮壳或自然扩散层的晶体部位较为常见。

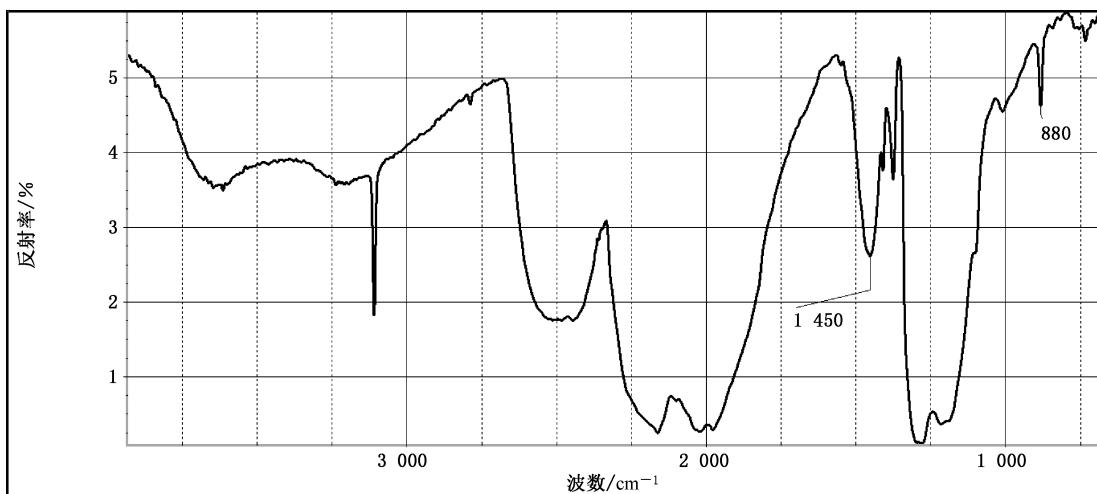


图 A.12 表现出与氧元素有关谱带的金刚石红外光谱图

A.2.2.12 当金刚石存在 N^+ 引发的晶格缺陷, 可引发 1330 cm^{-1} 峰; 而由众多填隙碳原子联合引发的杂质型片状晶格缺陷, 可引发 1360 cm^{-1} 峰(0.169 eV)。见图 A.13。

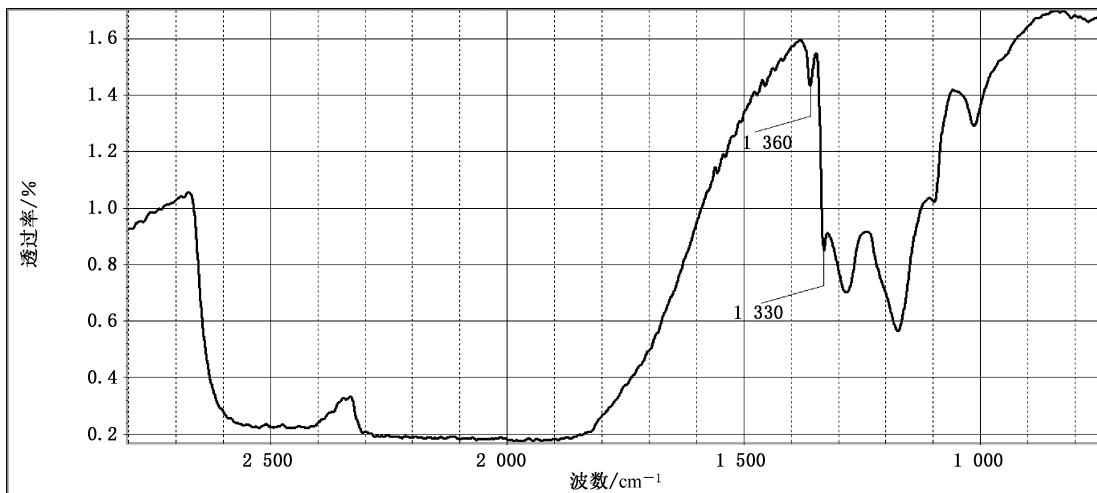


图 A.13 具有由众多填隙碳原子联合引发的杂质型片状晶格缺陷(导致 1360 cm^{-1} 峰)和 N^+ 引发的晶格缺陷(导致 1330 cm^{-1} 峰)的金刚石红外光谱

A.2.2.13 当金刚石谱图呈现出 1450 cm^{-1} (较为尖锐的峰)、 4941 cm^{-1} 、 5171 cm^{-1} 峰(见图 A.14), 即分别对应 H1a、H1b、H1c 心时, 表明金刚石晶体经历过来自射线或粒子的高能辐照过程后, 又经受过超过 $1000\text{ }^\circ\text{C}$ 的退火过程。H1a 心: 杂质型固有缺陷, 结构不确定, 红外吸收位于 1450 cm^{-1} (0.180 eV); 认为是与填隙氮有关; 可先天形成, 也可辐照后再退火诱发。H1b 心: 由不确定结构造成的杂质型固有缺陷, 吸收位于红外 2024 nm (0.612 eV , 4941 cm^{-1})处; 被认为与 A 心氮(双原子氮)有关; 可以先天形成也可以由辐照后退火热处理诱发。H1c 心: 由不确定结构造成的杂质型固有缺陷, 特征吸收位于红外 1934 nm (0.6408 eV , 5171 cm^{-1})处; 被认为是与 B 心氮(合体氮)有关; 可先天形成也可辐照后退火热处理诱发。

注: 近红外区域的峰位常常偏移超过仪器的分辨率限值。

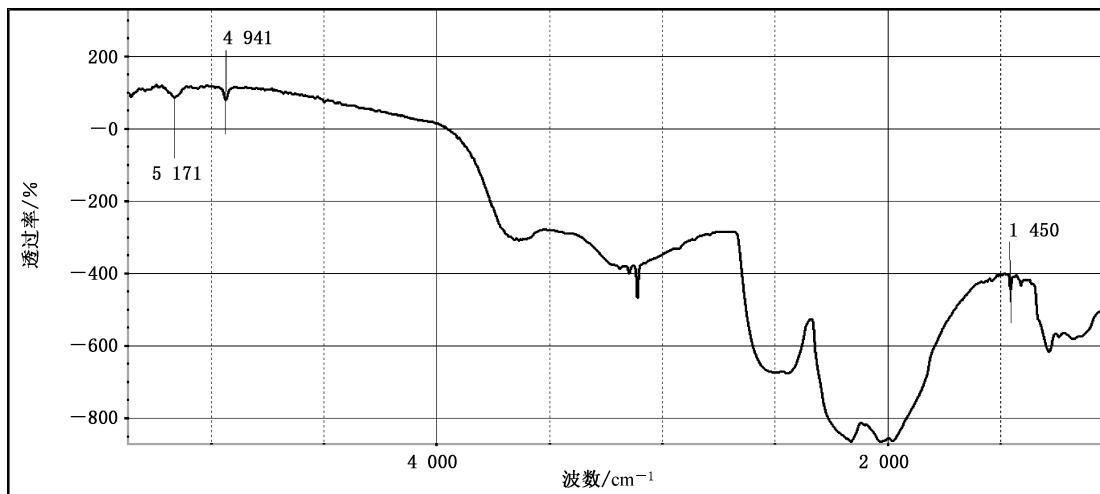


图 A.14 具有 H1a、H1b、H1c 心的金刚石红外谱图

A.2.3 刚玉

A.2.3.1 无论何种成因的红宝石、蓝宝石(同为刚玉种),其红外反射谱图差别不明显,见图 A.15。

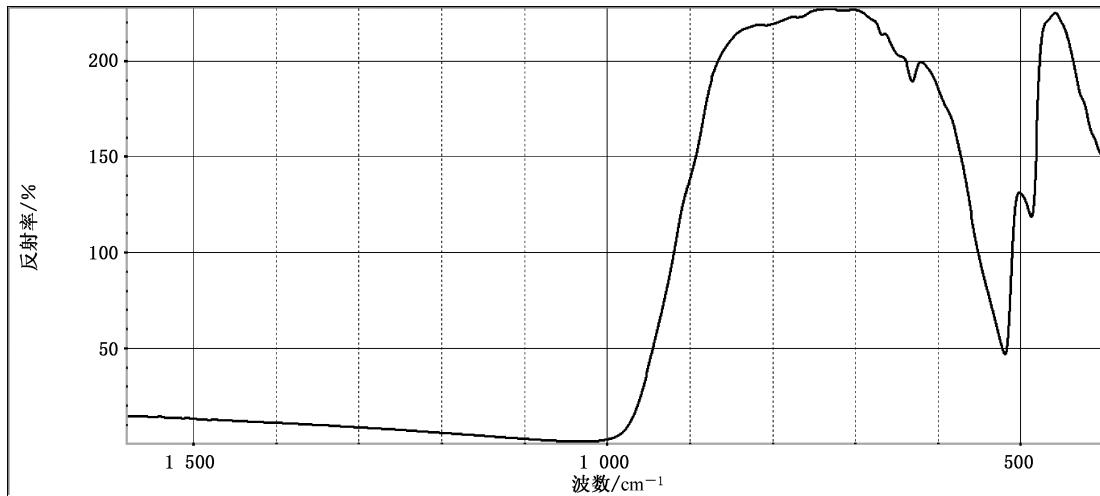


图 A.15 刚玉的红外反射谱

A.2.3.2 较为纯净的刚玉晶体的红外透射谱图,这意味着晶体中的杂质元素、包裹体及其他晶体缺陷的量低于红外光谱检测限,见图 A.16。

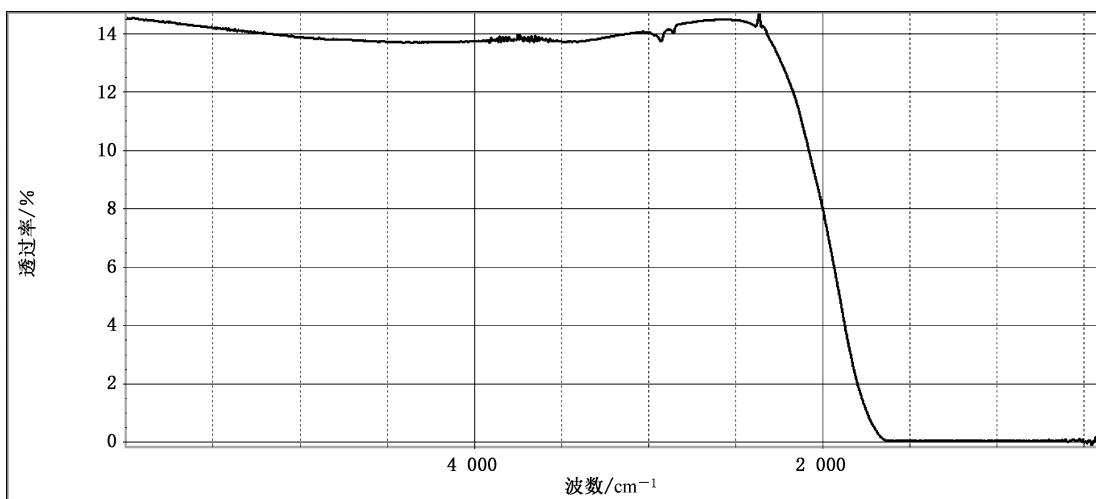
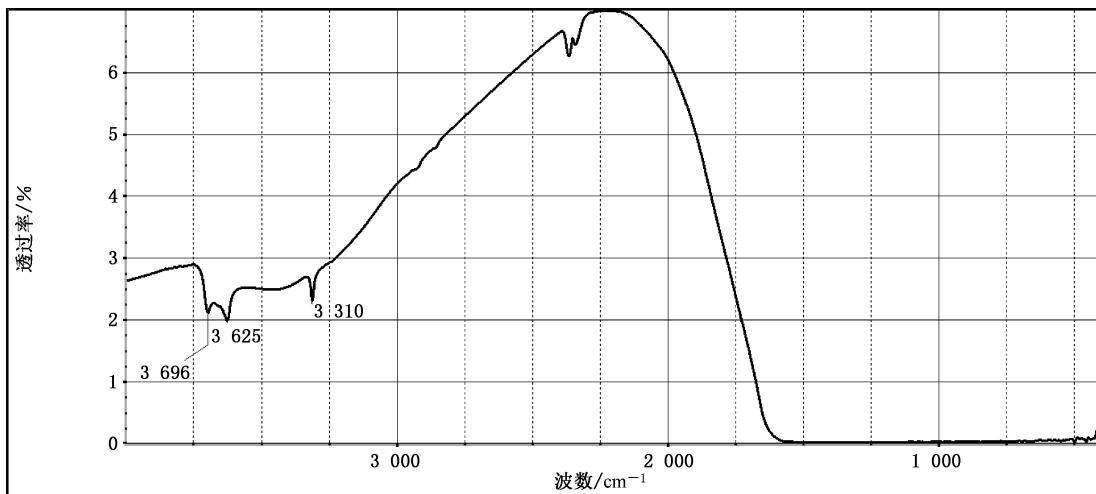


图 A.16 较为纯净的刚玉红外透射谱

A.2.3.3 当刚玉类宝石内部(晶格中或机械混入物中)含有与氢有关的价键结构时,红外谱图将呈现与 H/OH^- 有关的吸收,见图 A.17。

图 A.17 呈现与 H/OH^- 有关吸收的刚玉红外透射谱图

A.2.3.4 当刚玉经历过无氢参与/强氧化(自然/人为)热过程后,如助熔剂合成品、某些扩散处理品等,所呈现的谱图与较为纯净的刚玉透射谱相似,见图 A.18,同时参见图 A.16。

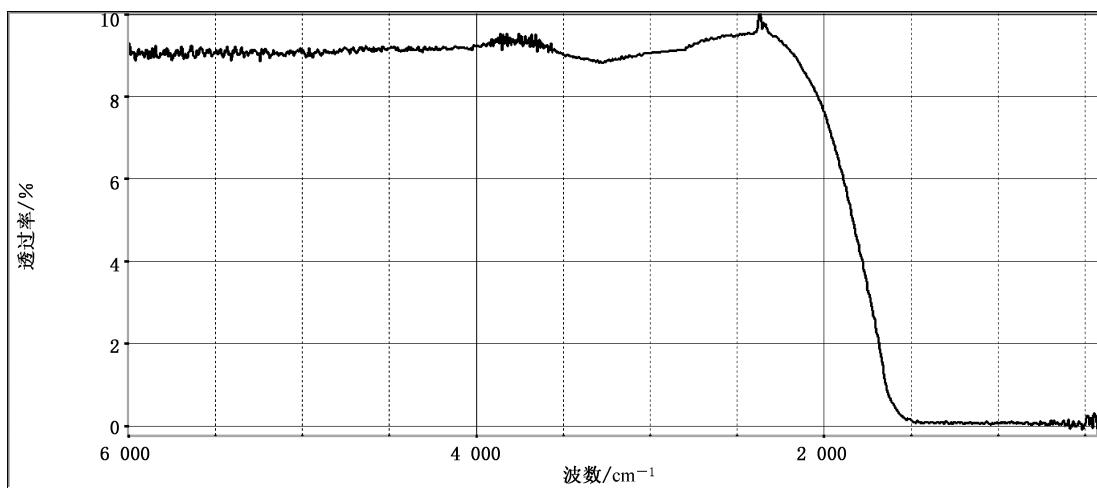


图 A.18 经历过无氢参与的热过程的刚玉红外透射谱图与纯净刚玉透射谱相似

A.2.3.5 当刚玉中富含(分子/羟基)水时,如水热法合成品、富次生含水矿物的天然品等,红外谱图常在 $3\ 000\text{ cm}^{-1}$ 左右呈现宏大谱带,也可伴有锐利羟基峰,见图 19。

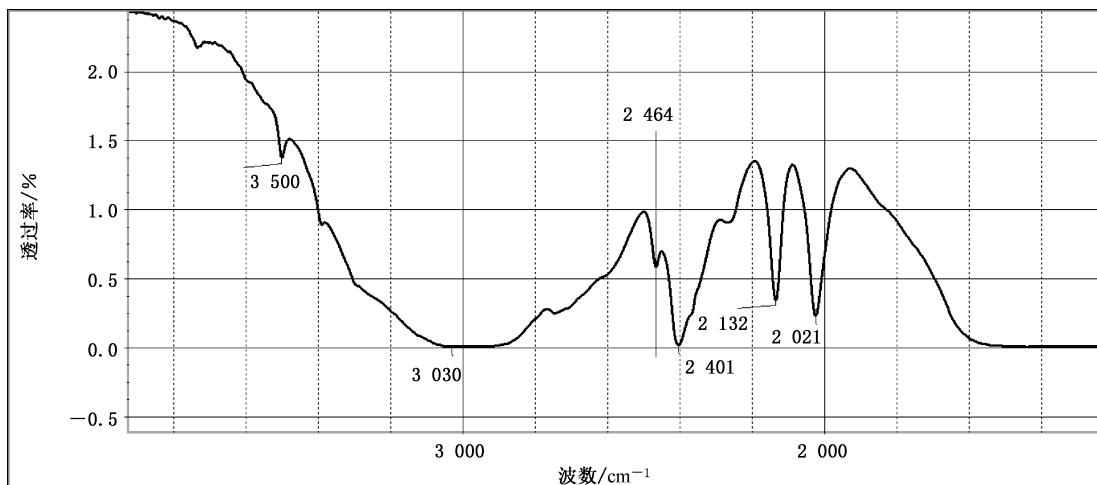


图 A.19 富水的刚玉红外透射谱图

A.2.4 金绿宝石

A.2.4.1 金绿宝石反射谱图因结晶学方向不同和/或类质同象替代而存在差异,见图 A.20。

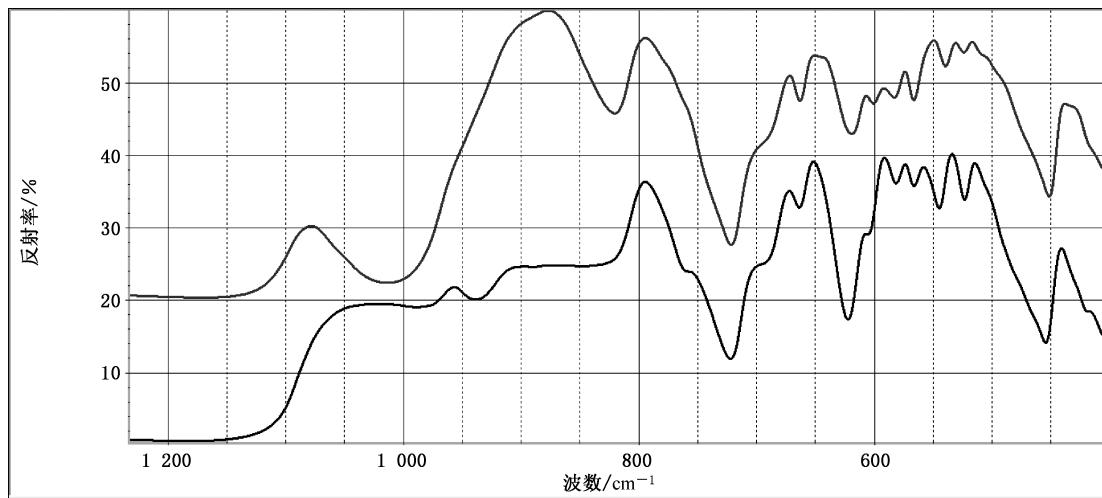


图 A.20 金绿宝石红外反射谱图

A.2.4.2 天然金绿宝石常呈现 $4\ 169\text{ cm}^{-1}$ 、 $3\ 230\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 845\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 405\text{ cm}^{-1}$ 吸收峰, 其中以 $2\ 405\text{ cm}^{-1}$ 峰较为典型, 见图 A.21, $2\ 845\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 405$ 峰 cm^{-1} 易受干扰, 测试前应清洗样品并让空气尽可能平稳。

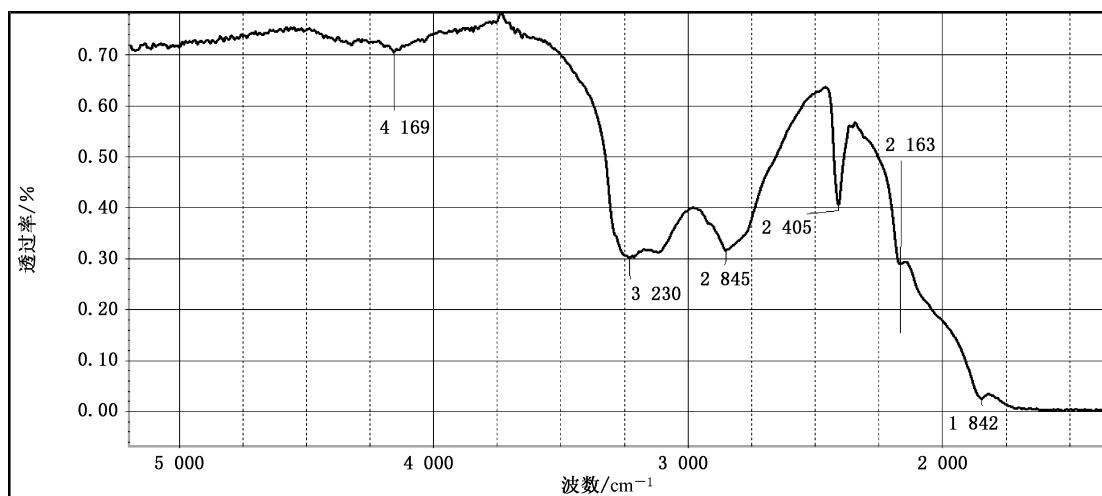


图 A.21 采集自天然金绿宝石的红外透射谱图

A.2.4.3 合成金绿宝石常不呈现 $2\ 405\text{ cm}^{-1}$ 等吸收峰, 见图 A.22。

注: 有些合成品也呈现 $3\ 230\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 845\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 405\text{ cm}^{-1}$ 等吸收峰。

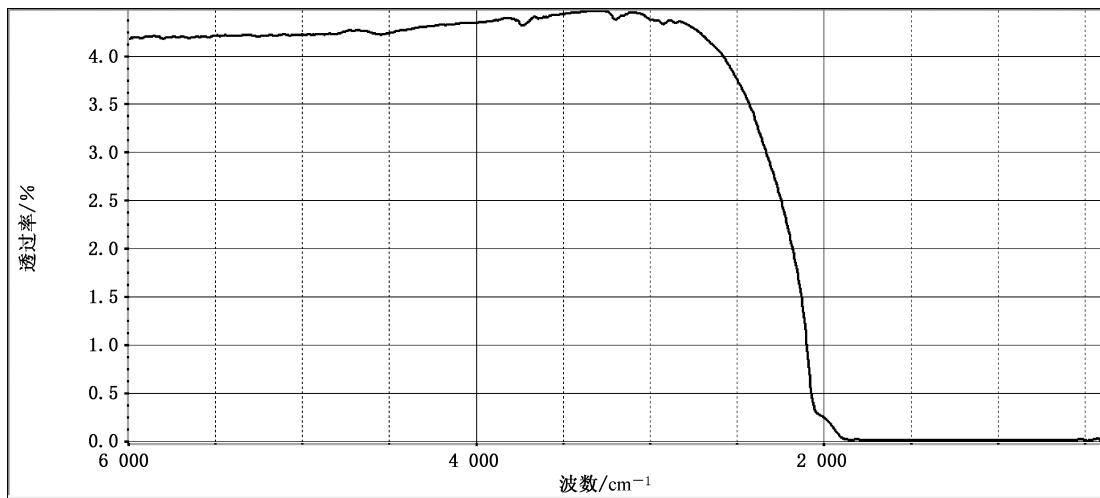


图 A.22 采集自合成金绿宝石的红外透射谱图

A.2.5 绿柱石

A.2.5.1 绿柱石的红外反射谱图因结晶学方向不同而导致某些峰位偏移及拟合,有时同一个晶体不同方向获得的谱图存在差异,见图 A.23。

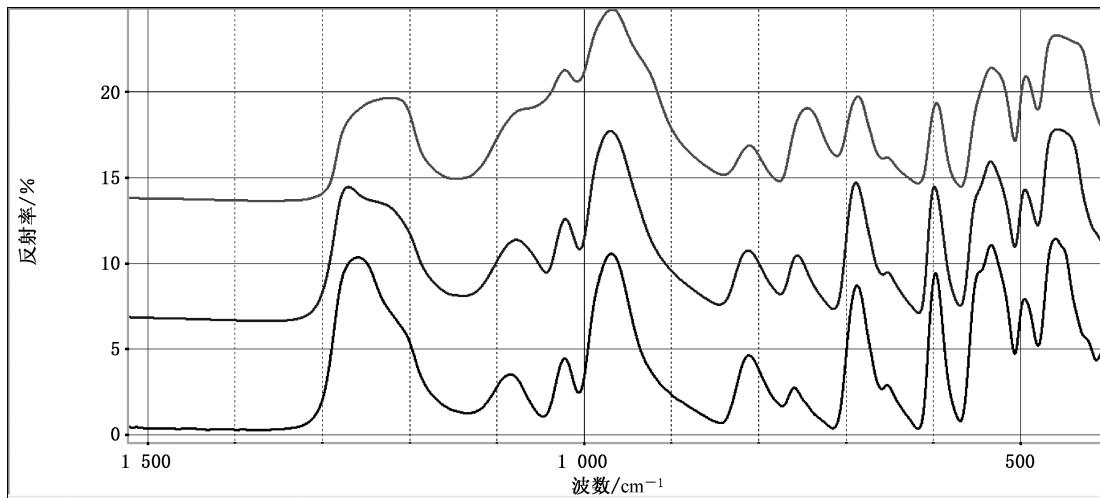


图 A.23 绿柱石的红外反射谱图(采自一个晶体的不同方向)

A.2.5.2 绿柱石中的类质同象替代现象也可以引发其红外反射谱图与理论化学组分的绿柱石谱图间存在差异,如摩根石(见图 A.24)、铯绿柱石(见图 A.25)。

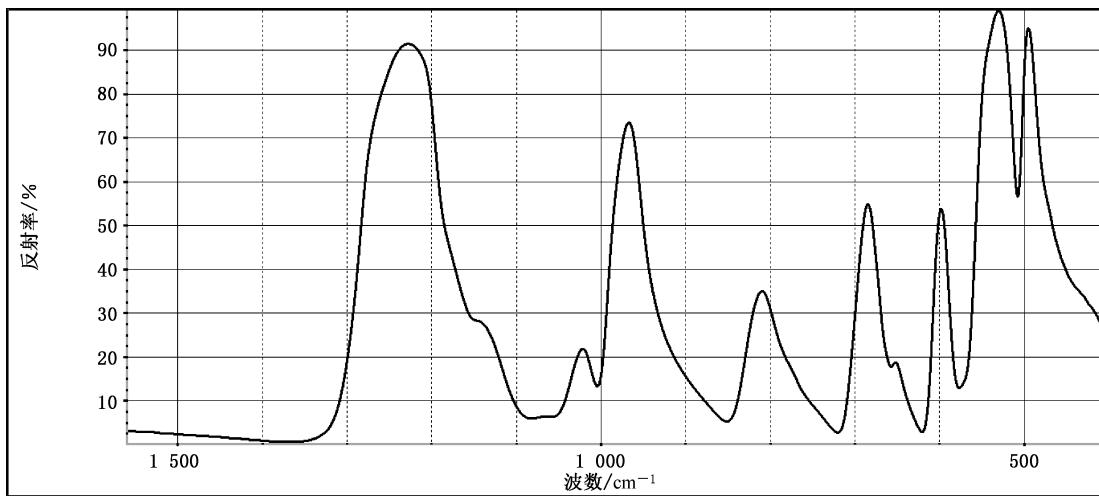


图 A.24 摩根石的红外反射谱图

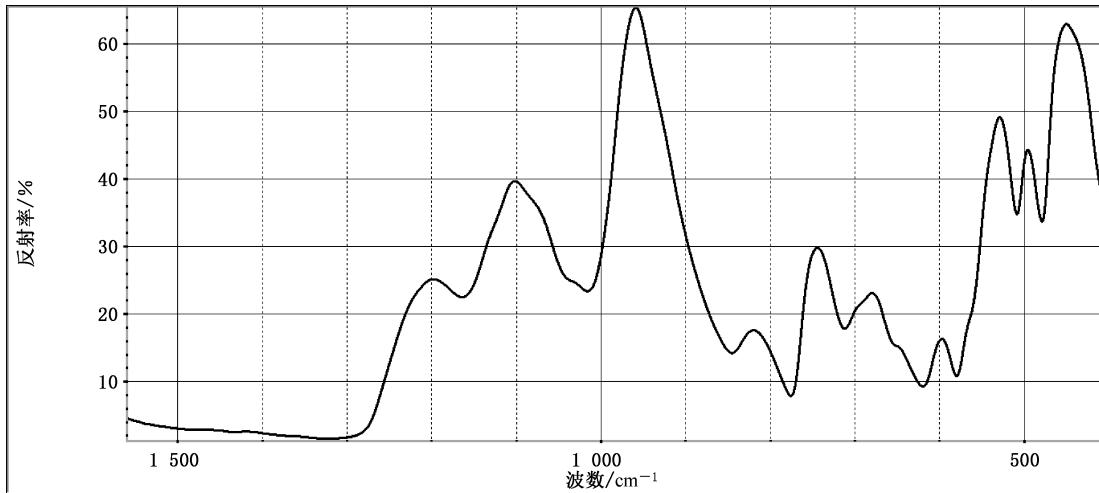


图 A.25 铬绿柱石的红外反射谱图

A.2.5.3 当绿柱石内不含有油、蜡、胶甚至人体油脂等有机材料时, $2960\text{ cm}^{-1}\sim2800\text{ cm}^{-1}$ 间一般无明显吸收, 见图 A.26。

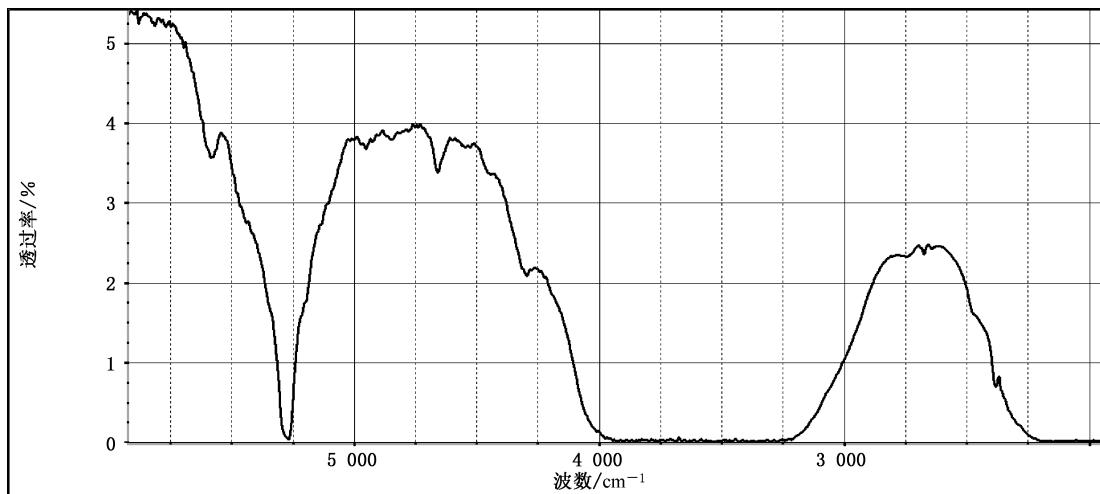
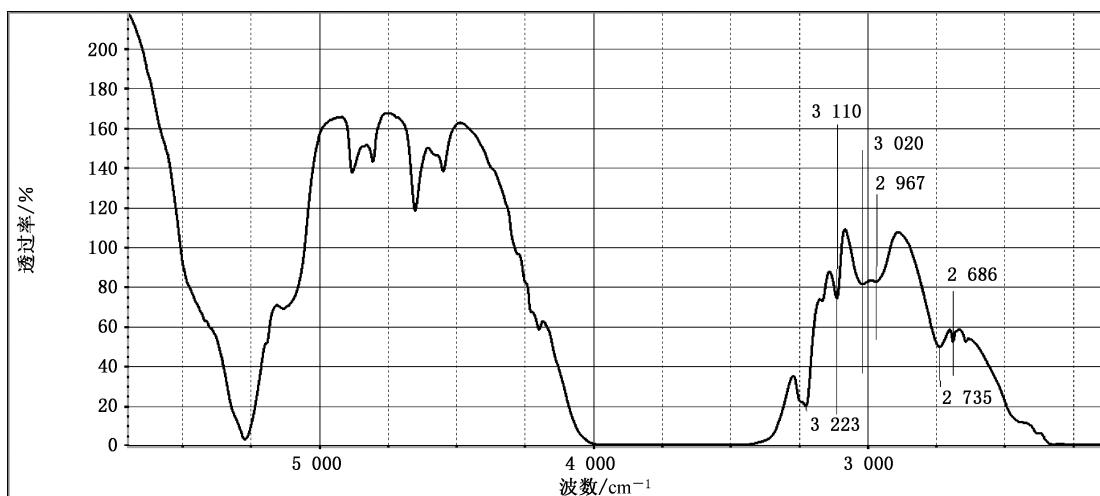


图 A.26 绿柱石红外透射谱图

A.2.5.4 但常见一些绿柱石在 $3\ 100\text{ cm}^{-1}\sim2\ 960\text{ cm}^{-1}$ 间呈现宝石自身具有的吸收峰, 见图 A.27, 需要与经充填的绿柱石相区分。

图 A.27 有的绿柱石自身透射谱图可具有 $3\ 100\text{ cm}^{-1}\sim2\ 960\text{ cm}^{-1}$ 间的吸收带

A.2.5.5 当测试绿柱石的光路中存在与 $-\text{CH}_3$ 以及 $-\text{CH}_2-$ 有关的物质, 如机器防锈油、大气中未知有机挥发物、人员体脂、无色油、有色油、各色的蜡等时, 谱图往往会在 $2\ 960\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 920\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 850\text{ cm}^{-1}$ 左右呈现吸收峰, 见图 A.28。

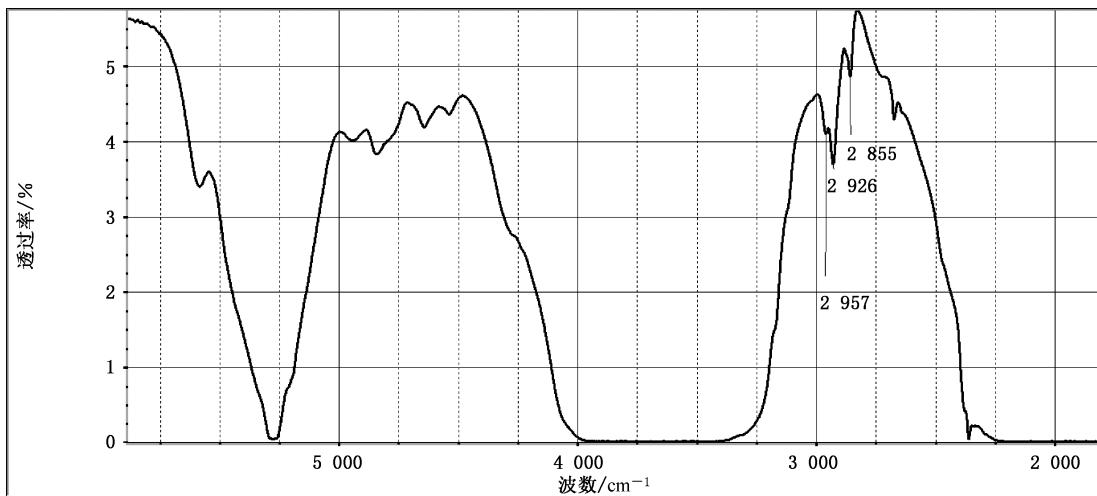


图 A.28 光路中存在含—CH₃ 以及—CH₂—结构物质的绿柱石的红外透射谱图

A.2.5.6 当绿柱石中含有与苯环结构相关的人工树脂时,其红外透射谱图常表现出与苯环有关的3 060 cm⁻¹~3 030 cm⁻¹间吸收带以及受苯环结构耦合的—CH₃ 以及—CH₂—有关的吸收峰,因耦合作用,—CH₂—有关的吸收峰往往发生蓝移至更高频率的2 930 cm⁻¹、2 870 cm⁻¹左右。见图 A.29。

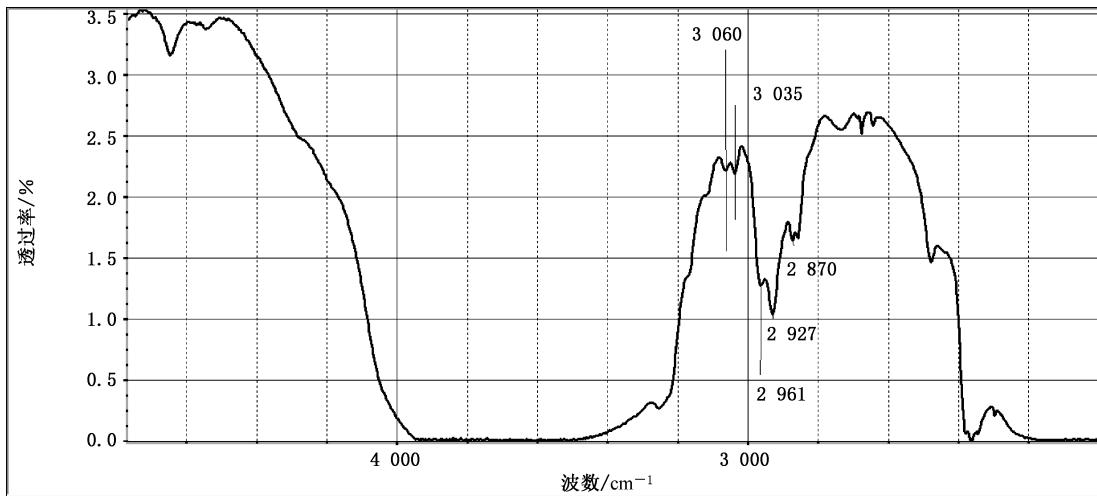


图 A.29 透射红外谱图呈现与苯环耦合的—CH₃ 和—CH₂—有关峰表明绿柱石经充填

A.2.5.7 当绿柱石形成过程中无水参与时,如助熔剂法合成绿柱石,其谱图在5 500 cm⁻¹~5 000 cm⁻¹范围(常以5 280 cm⁻¹左右为中心)不呈现与通道水有关的吸收,见图 A.30。

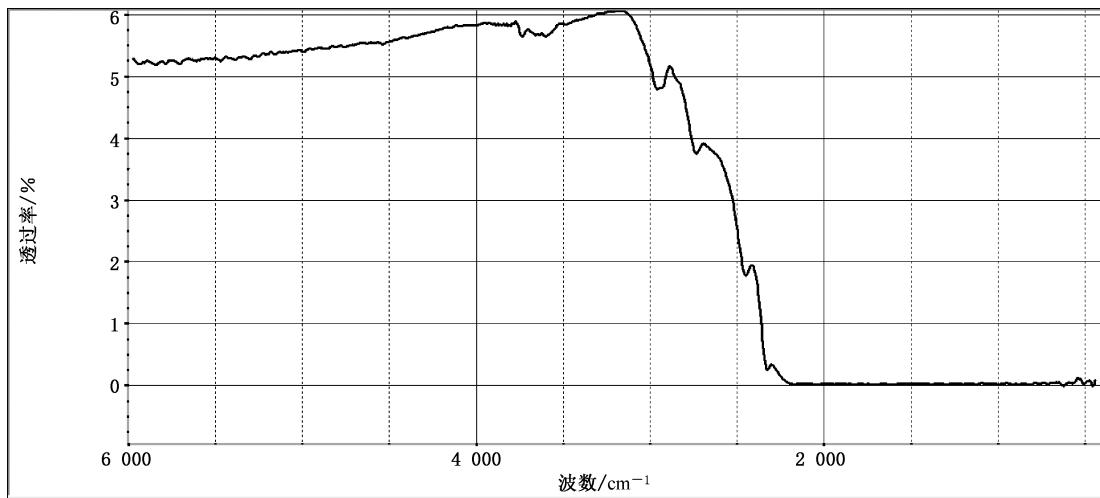


图 A.30 助熔剂法合成绿柱石红外透射谱图

A.2.5.8 当绿柱石经历过(自然/人为)辐照过程后,常会在 $7\ 216\ \text{cm}^{-1}$ 处呈现吸收峰,见图 A.31。

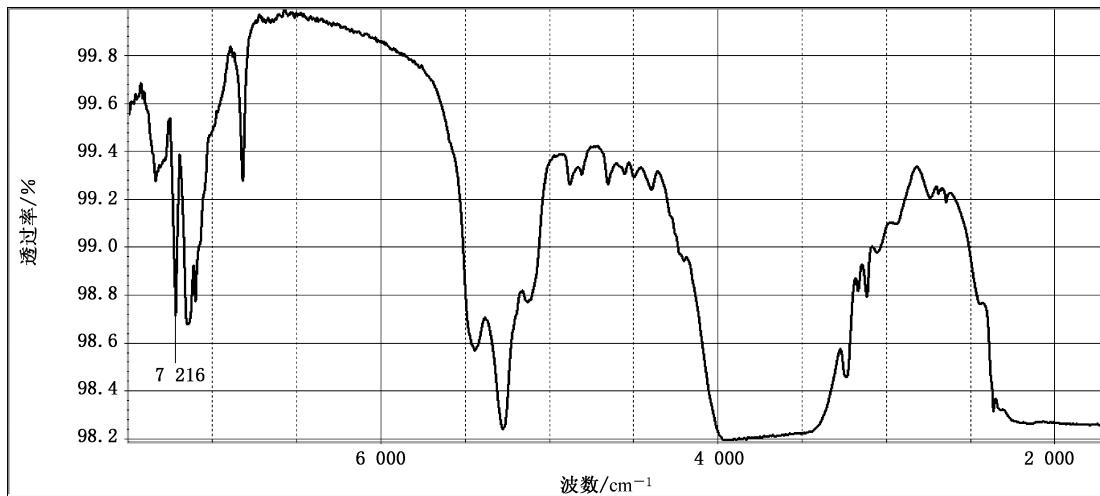


图 A.31 经历过(自然/人为)辐照的绿柱石红外透射谱图具 $7\ 216\ \text{cm}^{-1}$ 峰

A.2.6 碧玺

A.2.6.1 作为复杂的硼铝硅酸盐矿物,高频区至 $1\ 300\ \text{cm}^{-1}$ 左右的谱带归属于特征的硼氧键。类质同象替代和结晶学方向差异均能导致谱图有明显变化,见图 A.32。

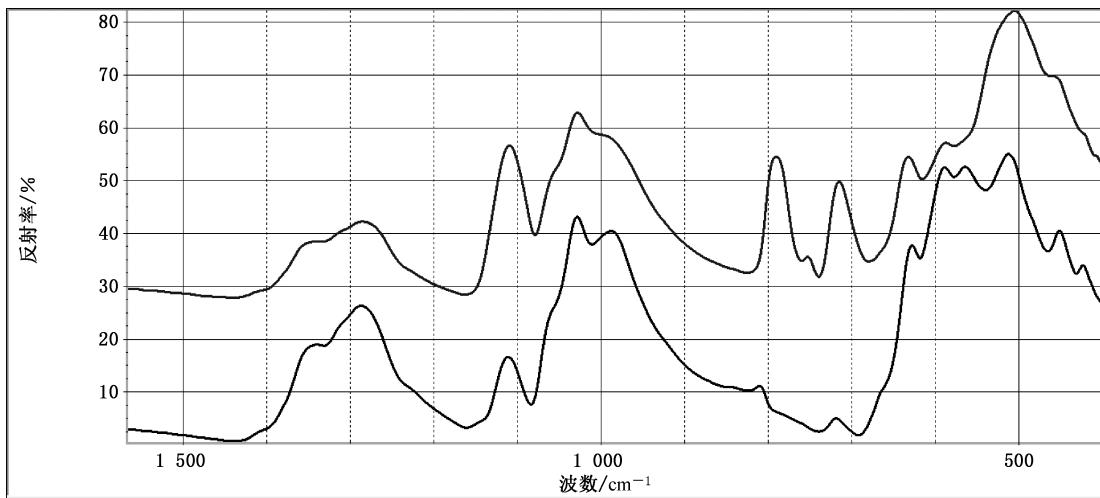


图 A.32 碧玺的红外反射谱图

A.2.6.2 碧玺的红外透射谱图,见图 A.33。

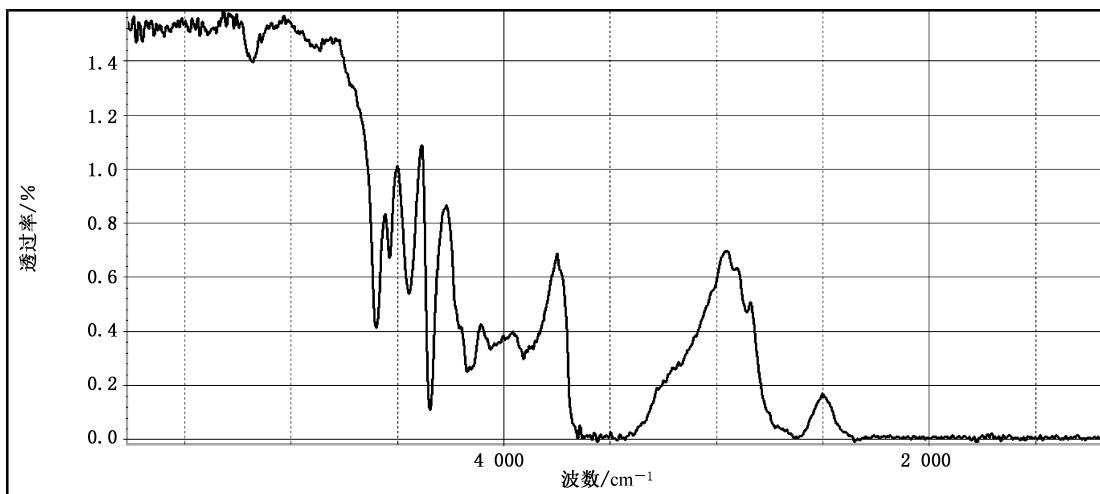
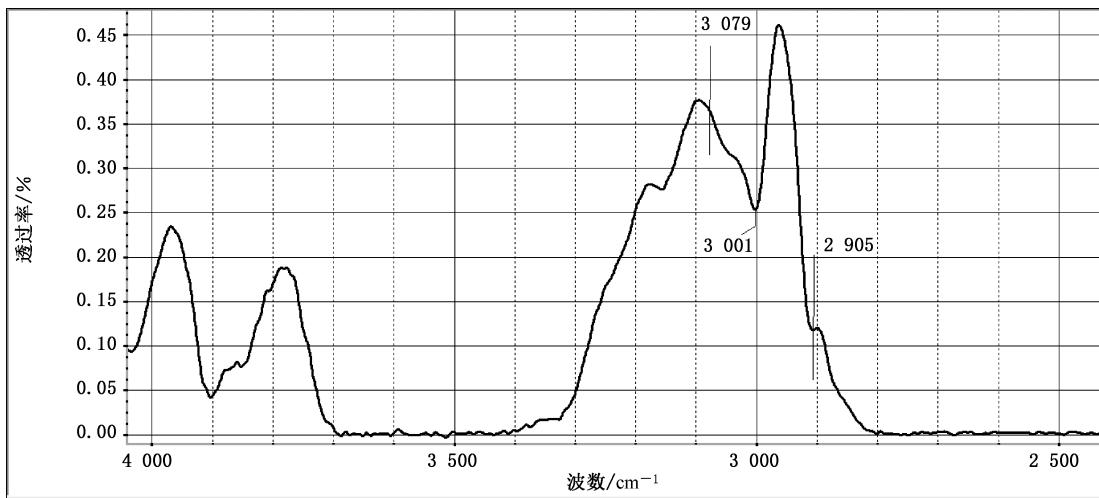


图 A.33 碧玺的红外透射谱图

A.2.6.3 有的碧玺自身红外透射谱图在 $3\ 080\text{ cm}^{-1}\sim 3\ 000\text{ cm}^{-1}$ 范围内有强吸收,见图 A.34。

图 A.34 有的碧玺红外透射谱图在 $3\ 080\ \text{cm}^{-1}\sim3\ 000\ \text{cm}^{-1}$ 范围内有强吸收

A.2.6.4 经人工树脂充填的碧玺有时会呈现 $3\ 060\ \text{cm}^{-1}\sim3\ 030\ \text{cm}^{-1}$ 间吸收带并伴有跟—CH₃ 以及—CH₂—有关的吸收峰,且相关峰往往向高频区偏移,如 $2\ 870\ \text{cm}^{-1}$ 峰,见图 A.35。

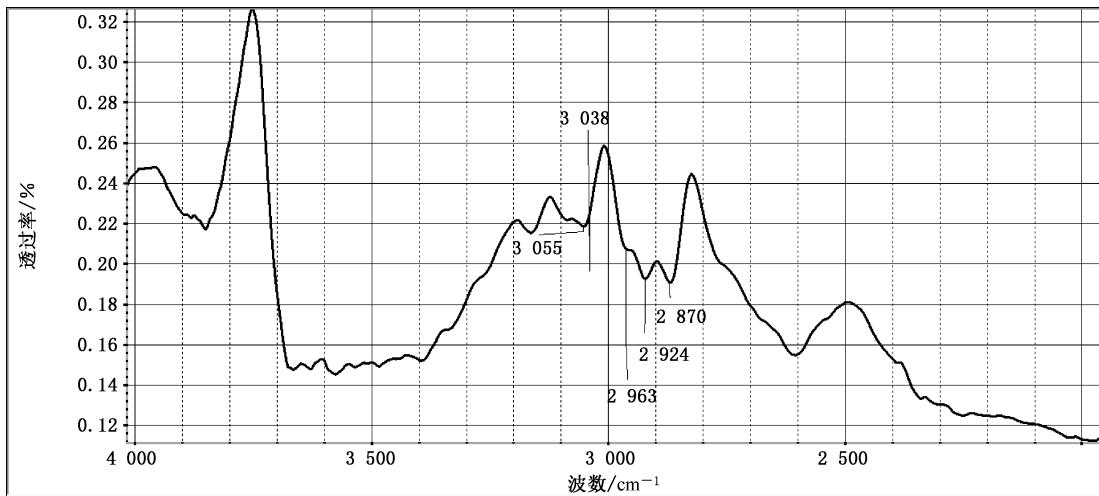


图 A.35 经人工树脂充填的碧玺红外透射谱图

A.2.7 尖晶石

A.2.7.1 尖晶石族材料(如尖晶石、助熔剂法合成尖晶石、铬铁矿、磁铁矿等)具有相似的红外反射谱图,见图 A.36。谱图的差异及峰位的偏移归因于主要金属元素的不同以及材料的透明度。

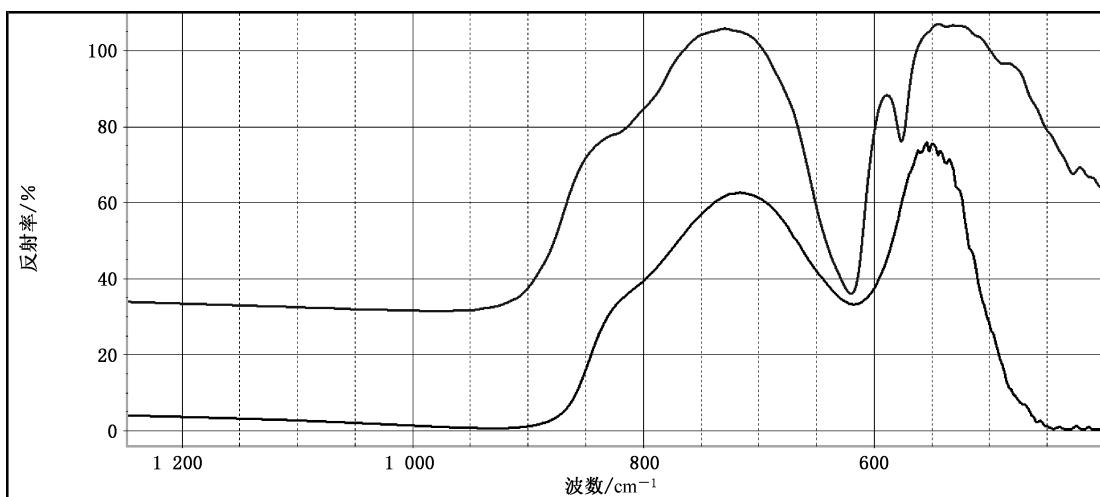


图 A.36 尖晶石族材料红外反射谱图

A.2.7.2 焰熔法合成尖晶石与尖晶石族矿物、助熔剂法合成品等的镁、铝含量比例不同,谱图具有辨析性,见图 A.37,并对比参见图 A.36。

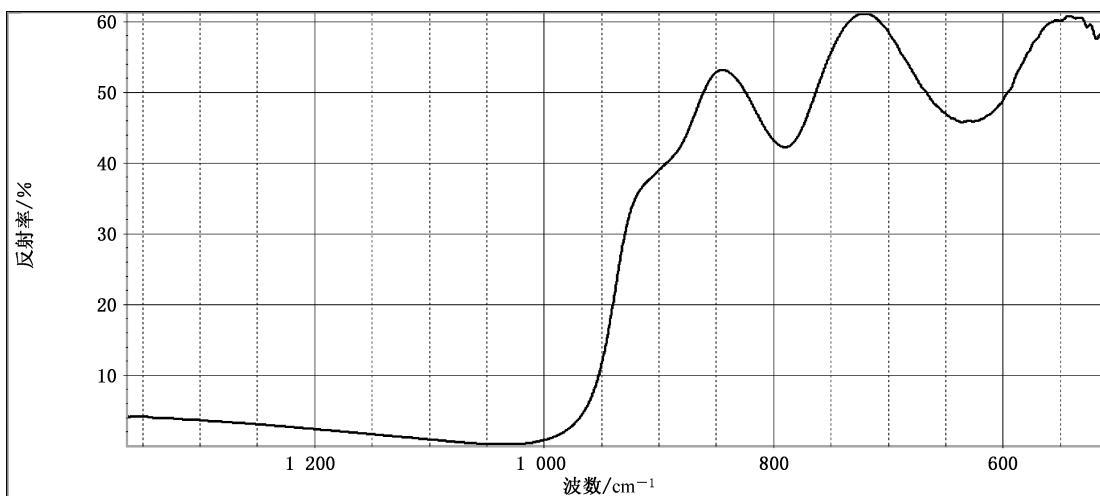


图 A.37 焰熔法合成尖晶石的红外反射谱图

A.2.7.3 尖晶石族材料红外透射谱图在 $3\ 000\text{ cm}^{-1}\sim1\ 500\text{ cm}^{-1}$ 范围内有透光区,见图 A.38。

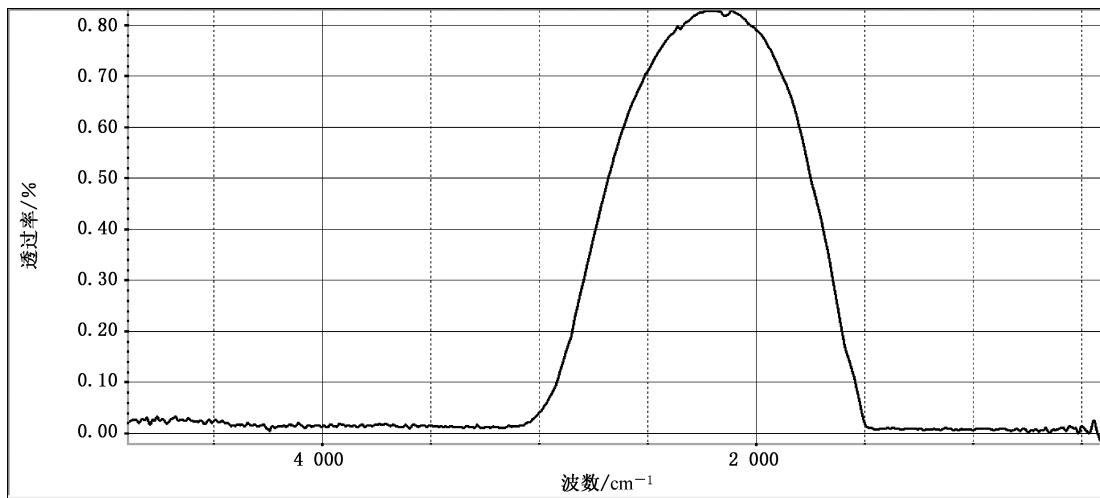


图 A.38 尖晶石的红外透射谱图

A.2.8 锆石

A.2.8.1 晶质锆石的谱图差异归因于结晶学方向不同及褪晶化程度不同,见图 A.39。

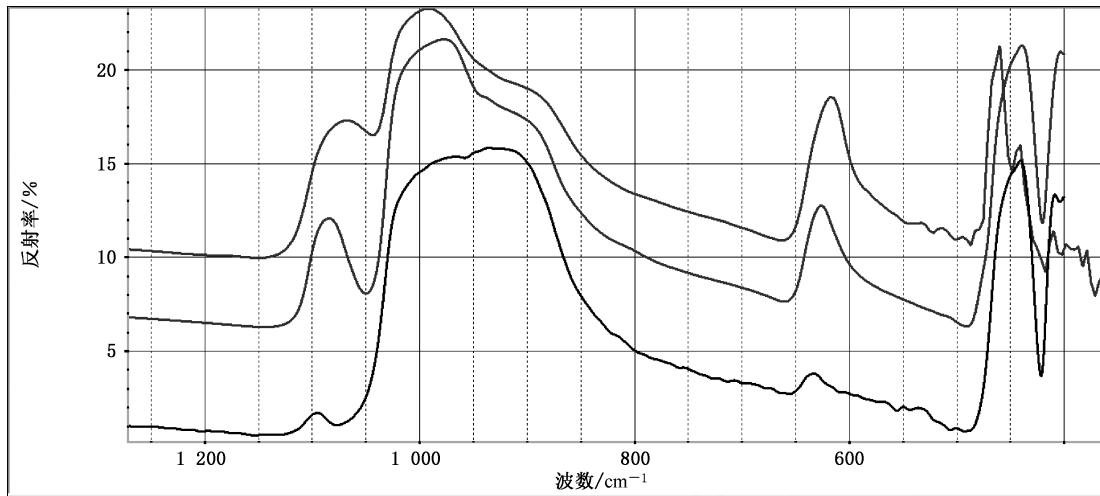


图 A.39 晶质锆石的红外反射谱图

A.2.8.2 低型锆石反射谱图在 $1 100\text{ cm}^{-1}\sim 900\text{ cm}^{-1}$ 间表现为宏大宽带而不分裂,即近乎于玻璃态谱图,见图 A.40。

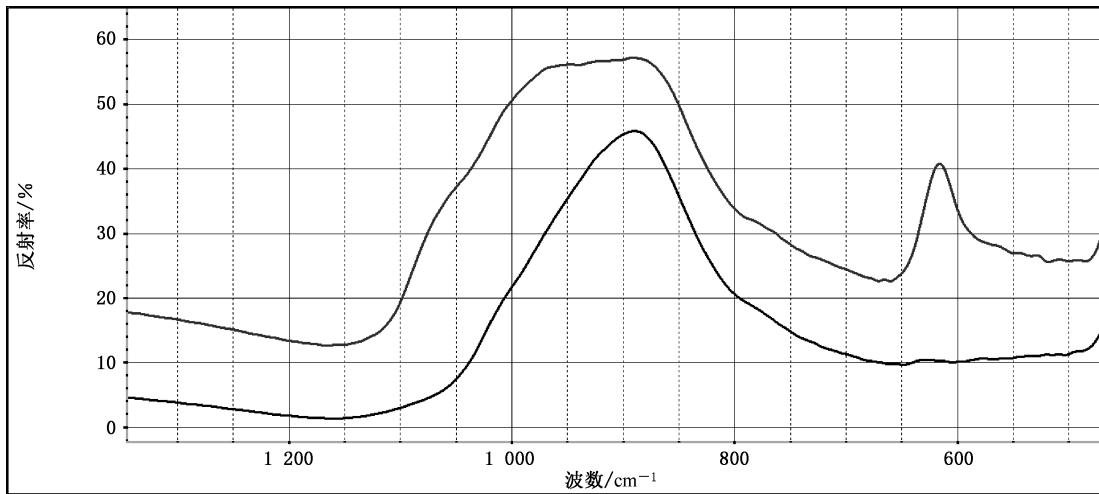


图 A.40 低型锆石的红外反射谱图

A.2.9 托帕石

A.2.9.1 托帕石红外反射谱图在 $980\text{ cm}^{-1}\sim880\text{ cm}^{-1}$ 间是否分裂以及 600 cm^{-1} 以下的差异归因于方向性与类质同像替代, 1164 cm^{-1} 峰稳定性好, 见图 A.41。

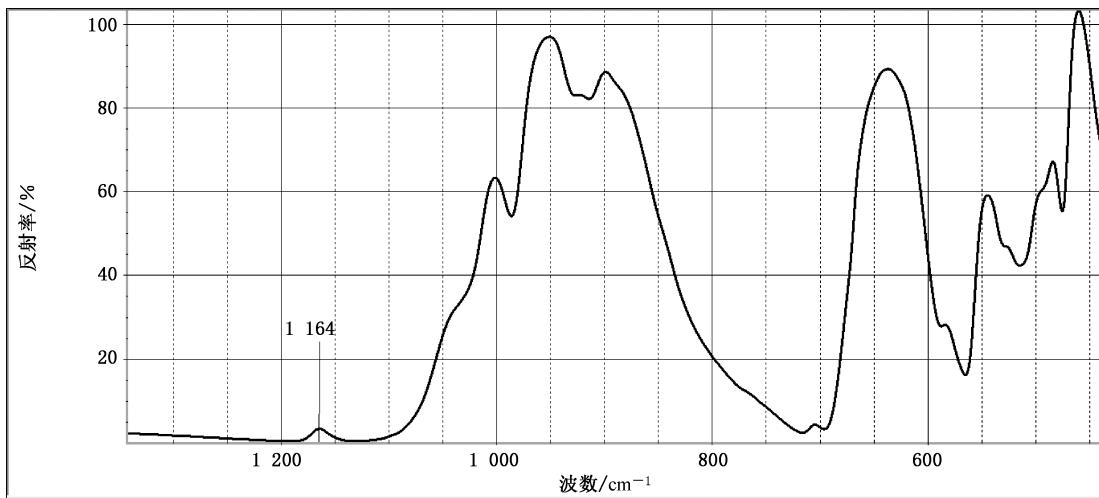


图 A.41 托帕石的红外反射谱图

A.2.9.2 托帕石透射谱图稳定性好, 即便托帕石表层经过人工处理, 透射谱图是指认宝石内核为托帕石的重要证据, 见图 42。

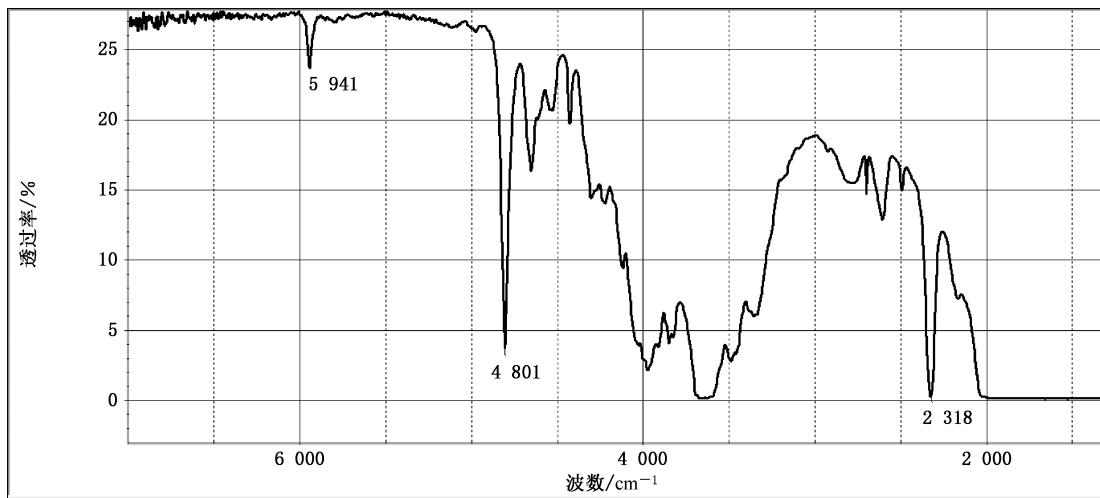


图 A.42 托帕石的红外透射谱图

A.2.10 橄榄石

A.2.10.1 橄榄石的红外反射谱图因结晶学方向不同而存在明显差异。而类质同象替代对谱图影响相对小,见图 A.43。

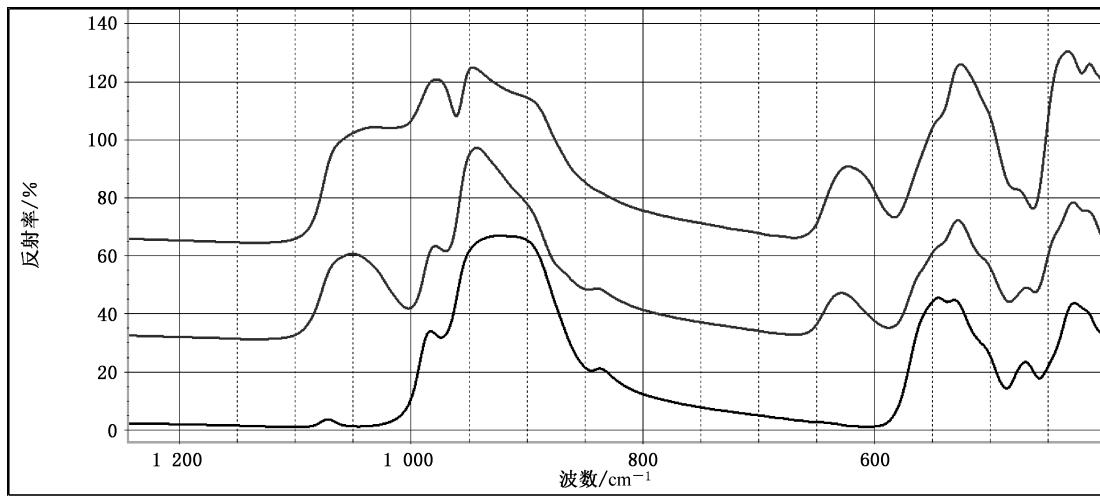


图 A.43 橄榄石的红外反射谱图

A.2.10.2 橄榄石作为典型的“无水”矿物谱图相对平滑,见图 A.44。

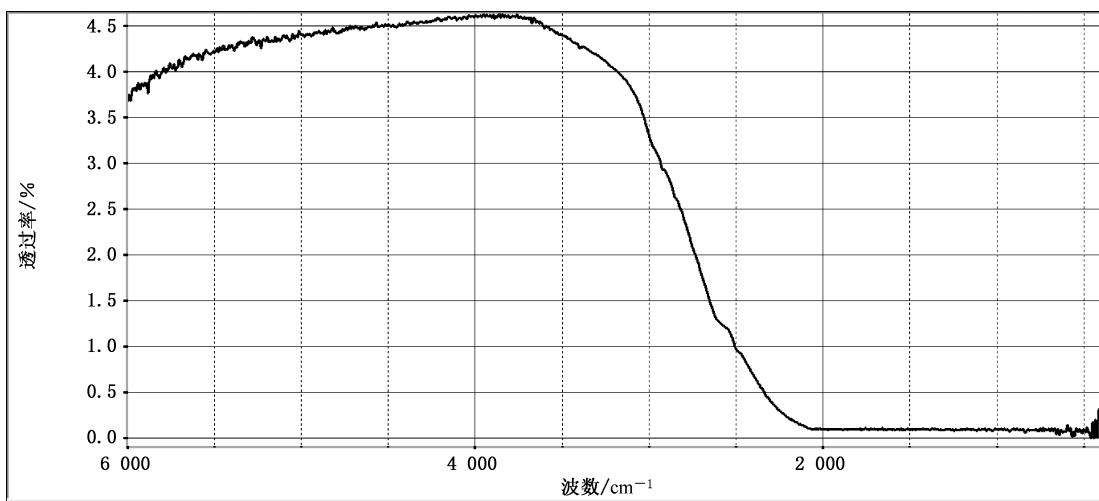


图 A.44 橄榄石的红外透射谱图

A.2.11 石榴石

A.2.11.1 石榴石红外反射谱图形状相对稳定,而峰位漂移取决于类质同像替代,见图 A.45。

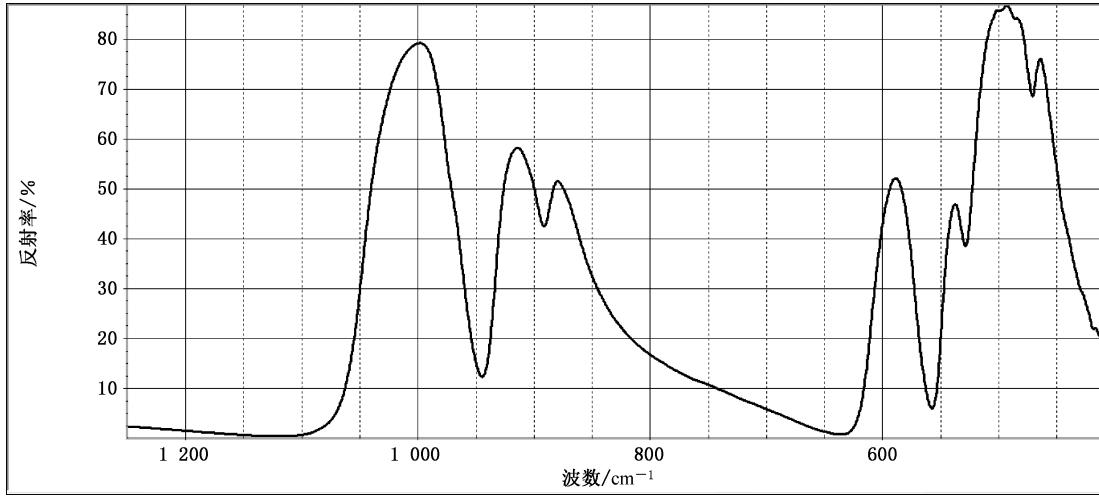


图 A.45 石榴石的红外反射谱图

A.2.11.2 铝质系列特别是铁铝石榴石的红外透射谱图较为典型,见图 A.46。

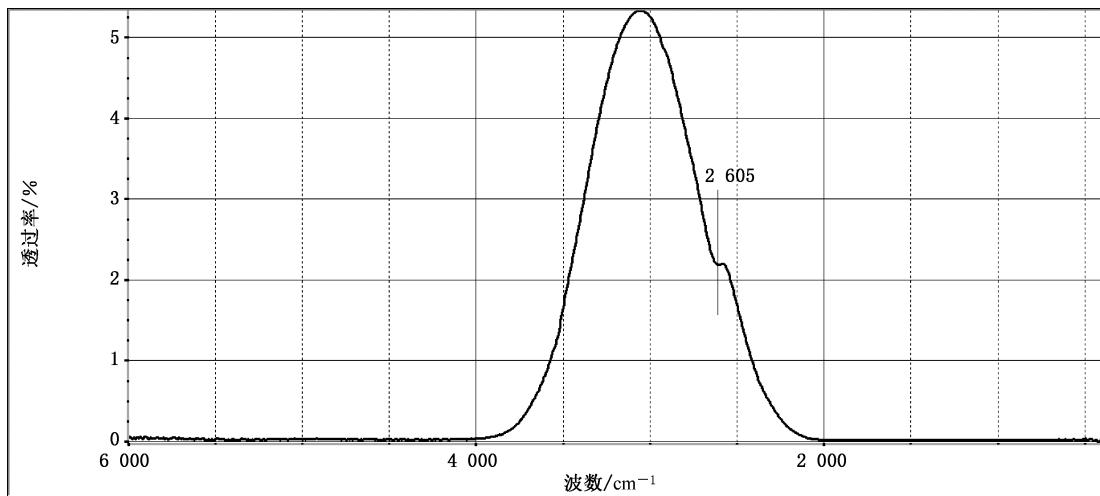


图 A.46 铁铝榴石的红外透射谱图

A.2.11.3 钙质石榴石透射谱图常不稳定,受变质作用影响钙质系列石榴石在 $3\ 700\text{ cm}^{-1}\sim3\ 500\text{ cm}^{-1}$ 范围内常表现出(与水和/或 OH^- 有关的)吸收,见图A.47。

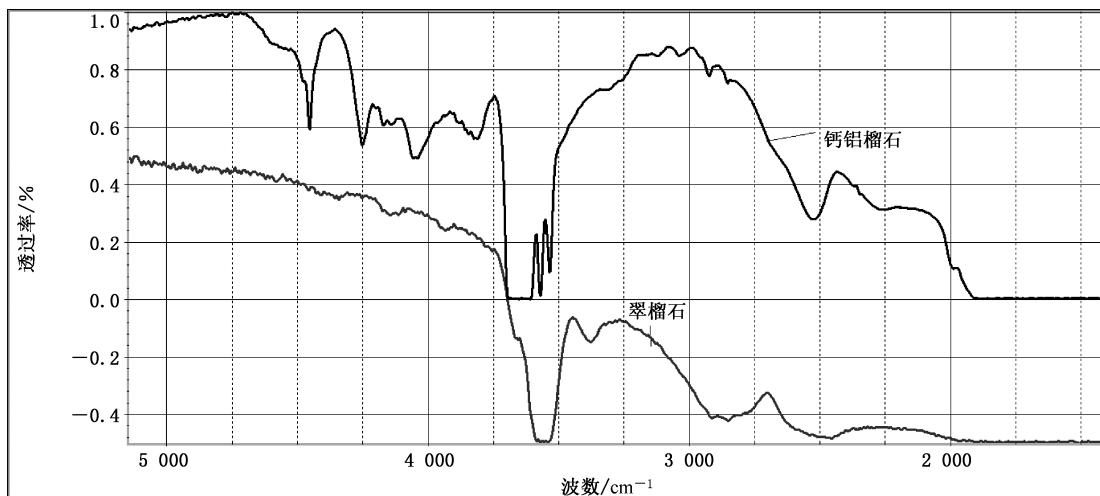


图 A.47 钙铝榴石和翠榴石(钙铁榴石)的红外透射谱图

A.2.12 石英

A.2.12.1 石英不同于大多数氧化物材料的红外反射谱图(主要反射谱带位于 $1\ 000\text{ cm}^{-1}$ 以下的靠近远红外区),其反射谱图宏观上与硅酸盐材料谱图类似,即 $1\ 200\text{ cm}^{-1}\sim900\text{ cm}^{-1}$ 范围内呈强反射谱带。此外 800 cm^{-1} 、 780 cm^{-1} 左右的反射峰的相对强度取决于入射红外与石英C轴的夹角。当夹角约

为 45° 时, 两峰强度接近, 见图 A.48。

注: 本标准中的“石英”专指“ α —石英(低温石英)”; 如 A.1.4 所述, 无定语的“石英”无(天然/或人工)成因指向。

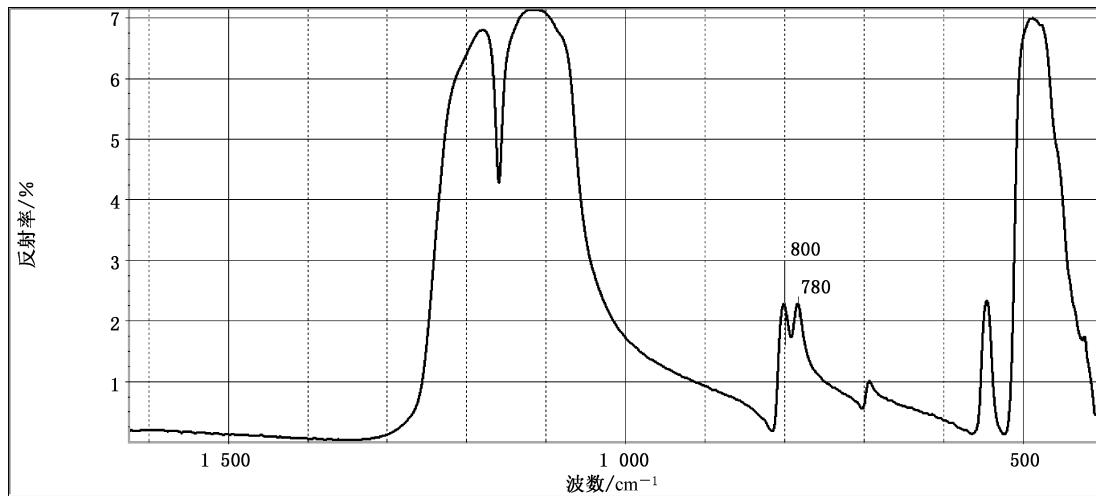


图 A.48 入射光与 C 轴夹角约 45° 时石英的红外反射光谱图

A.2.12.2 石英 C 轴与入射光大致平行时, 红外反射谱图在 $815\text{ cm}^{-1}\sim775\text{ cm}^{-1}$ 间呈现 800 cm^{-1} 单峰, 见图 A.49。

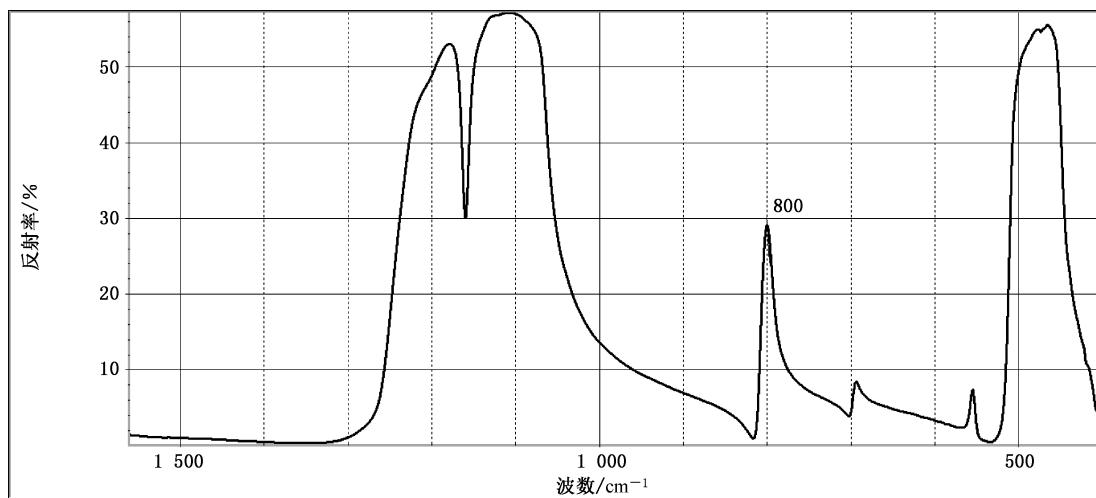


图 A.49 入射线与 C 轴大致平行时的石英红外反射谱图

A.2.12.3 受形成环境及晶体形成后所处环境的影响, 石英质宝玉石中常含有水或羟基, 这在红外透射光谱中常有所体现。天然无色水晶、天然烟晶红外透射谱图常(但非必然)呈现 $3\ 595\text{ cm}^{-1}$ 和/或 $3\ 484\text{ cm}^{-1}$ 吸收峰, 见图 A.50。

注：某些情况下应设置更优的分辨率，采用更严谨的采样方法以利于除去大气干扰。

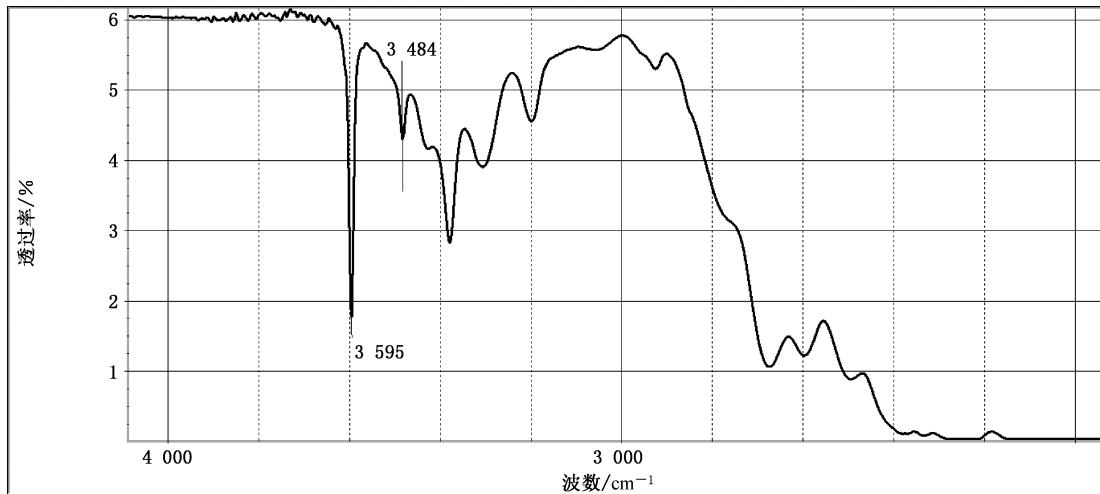


图 A.50 天然无色水晶或天然烟晶的红外透射谱图

A.2.12.4 合成无色水晶红外透射谱图常(但非必然)呈现 3585 cm^{-1} 吸收峰, 见图 A.51。

注：某些情况下应设置更优的分辨率，采用更严谨的采样方法以利于除去大气干扰。

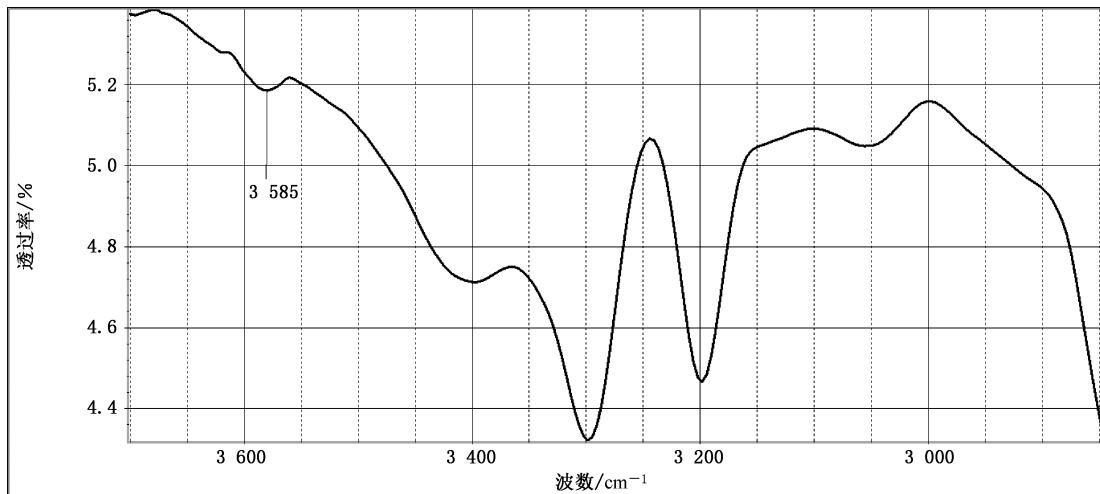


图 A.51 采自合成无色水晶的红外透射谱图

A.2.12.5 合成烟晶红外透射谱图常(但非必然)不呈现 3595 cm^{-1} 、 3585 cm^{-1} 、 3484 cm^{-1} 等吸收峰, 见图 A.52。

注：某些情况下应设置更优的分辨率，采用更严谨的采样方法以利于除去大气干扰。

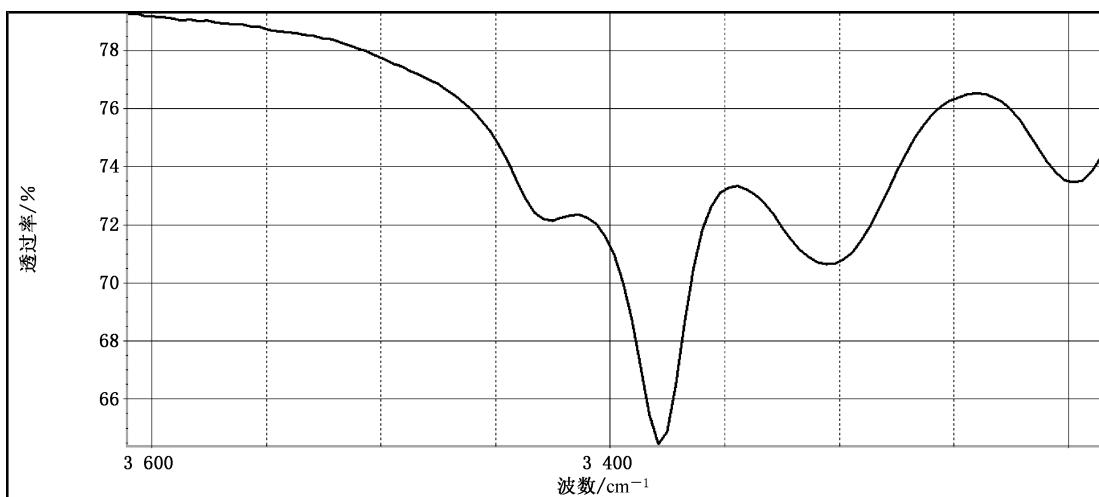


图 A.52 采自合成烟晶的红外透射谱图

A.2.12.6 天然紫晶红外透射谱图常(但非必然)呈强的 $3\ 585\text{ cm}^{-1}$ 吸收峰且无或弱的 $3\ 545\text{ cm}^{-1}$ 吸收峰, 见图 A.53。

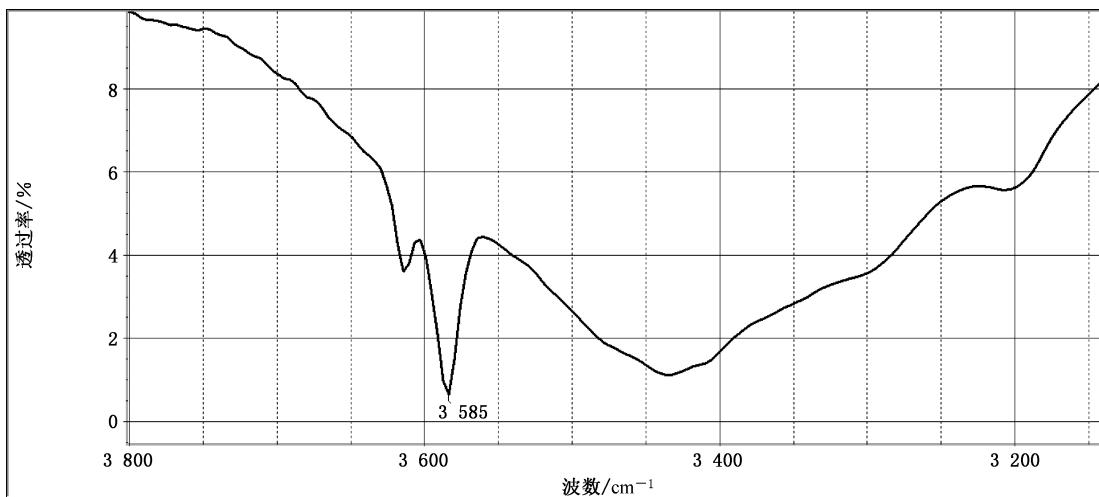


图 A.53 采自天然紫晶的红外透射谱图

A.2.12.7 合成紫晶红外透射谱图常(但非必然)呈 $3\ 585\text{ cm}^{-1}$ 吸收峰的同时也呈明显的 $3\ 545\text{ cm}^{-1}$ 吸收峰, 见图 A.54。

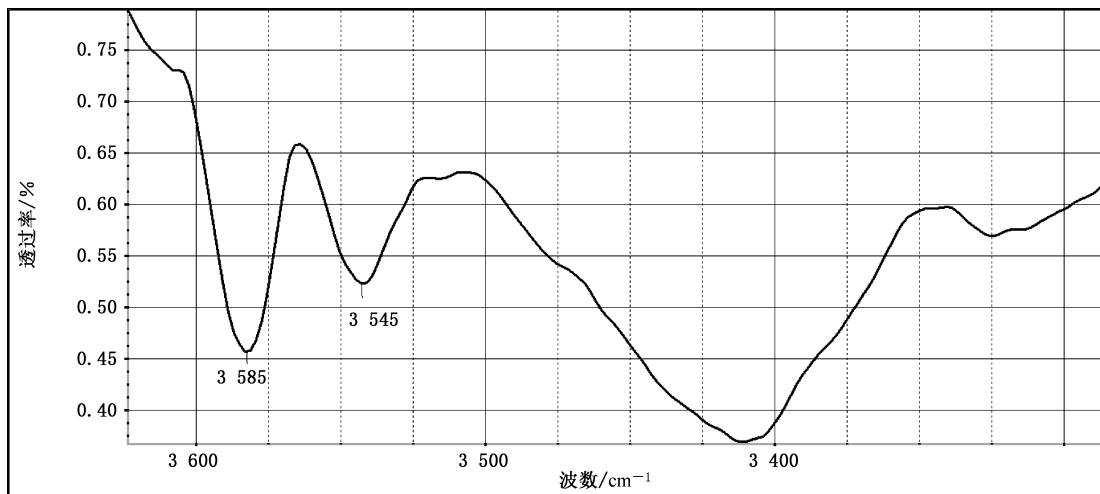


图 A.54 采自合成紫晶的红外透射谱图

A.2.12.8 当柠檬黄色水晶红外透射谱图呈现 $3\ 595\text{ cm}^{-1}$ 、 $3\ 484\text{ cm}^{-1}$ 吸收峰,甚至 $3\ 540\text{ cm}^{-1}$ 左右的吸收峰时,常为天然成因(无论颜色是何种成因),见图 A.55。

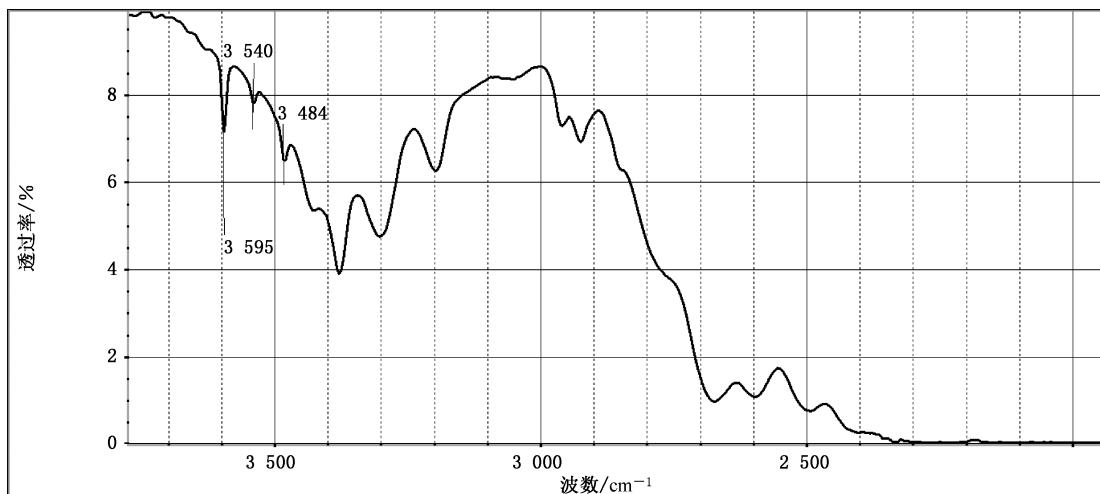


图 A.55 采自柠檬黄色的天然水晶的红外透射谱图

A.2.12.9 天然黄晶红外透射谱图常(但非必然)在 $3\ 500\text{ cm}^{-1}\sim2\ 000\text{ cm}^{-1}$ 范围内表现出较强的透光性,见图 A.56。

注:透光性的强弱与样品厚度密切相关。

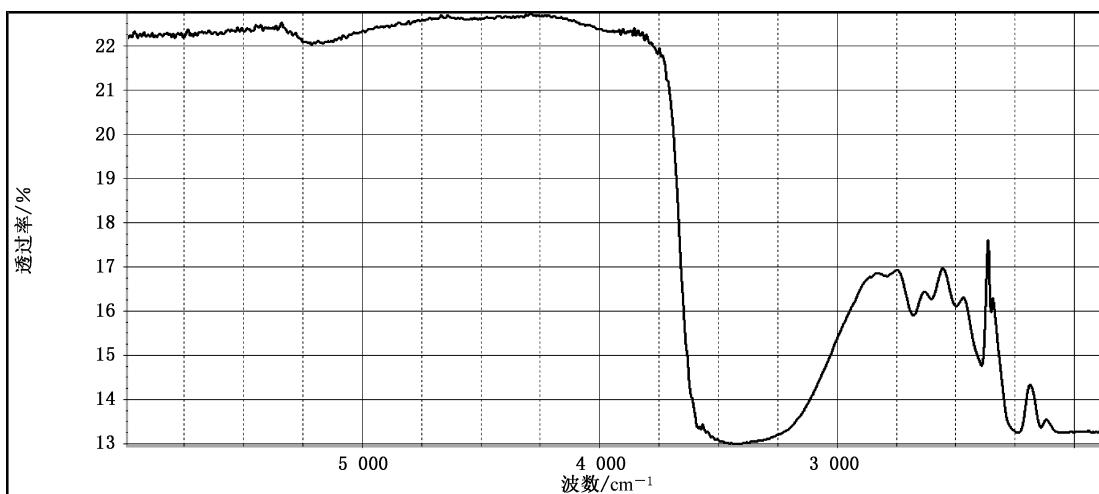


图 A.56 采自天然黄晶的红外透射谱图

A.2.12.10 合成黄晶红外透射谱图常(但非必然)在 $3\ 500\text{ cm}^{-1}\sim2\ 000\text{ cm}^{-1}$ 范围内表现出较弱的透光性甚至不透光,见图 A.57。

注:透光性的强弱与样品厚度密切相关。

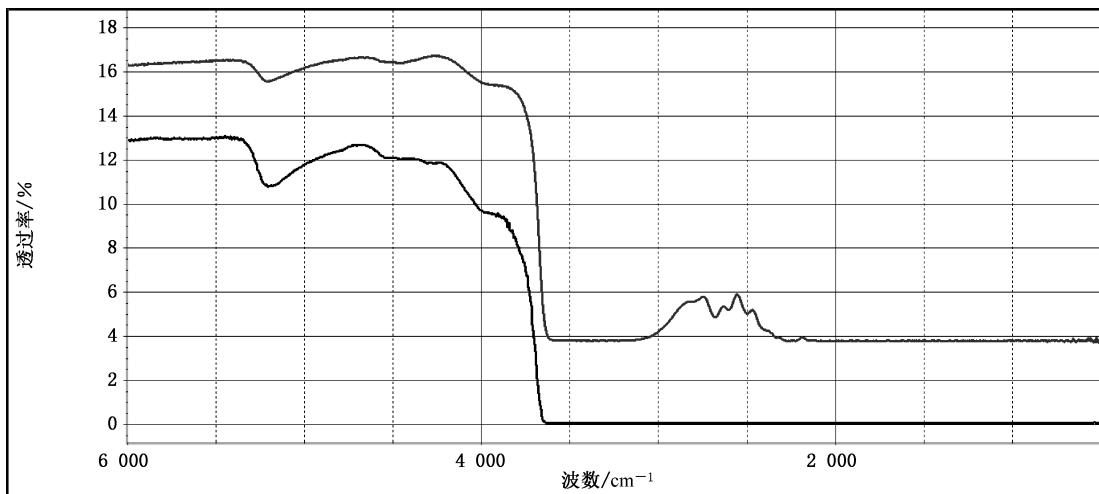


图 A.57 采自合成黄晶的红外透射谱图

A.2.12.11 非包裹体、非涂层致色的蓝水晶、绿水晶常为人工成因,其红外透射谱图与合成黄晶相似,常(但非必然)在 $3\ 500\text{ cm}^{-1}\sim2\ 000\text{ cm}^{-1}$ 范围内表现出较弱的透光性甚至不透光,见图 A.58,并参见图 A.57。

注:透光性的强弱与样品厚度密切相关。

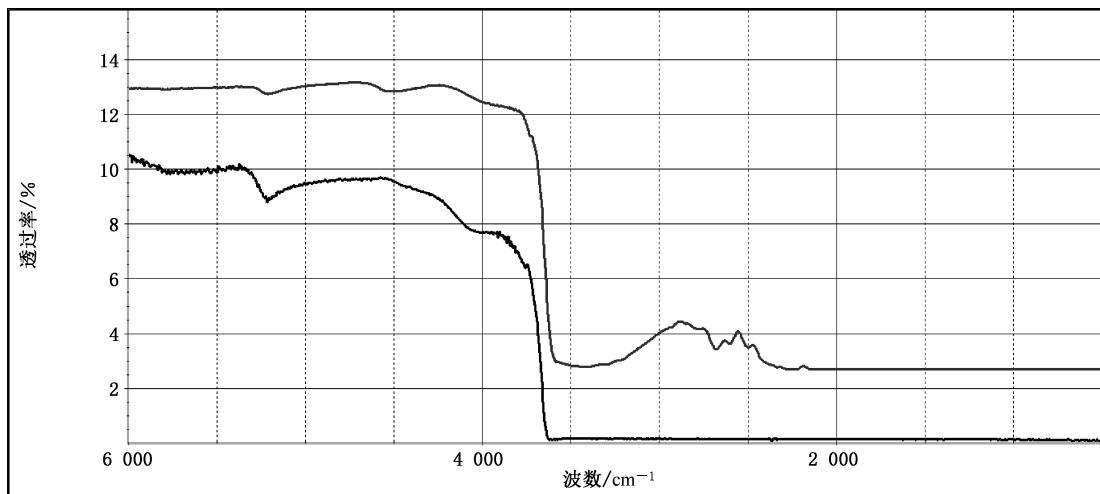


图 A.58 合成蓝水晶、合成绿水晶的红外透射谱图

A.2.13 长石

A.2.13.1 复杂的长石族矿物各个亚种的红外反射谱图并不一样,而每个亚种的红外反射谱图也不稳定,受方向性、类质同像替代甚至 Al-Si 有序度影响显著,见图 A.59。

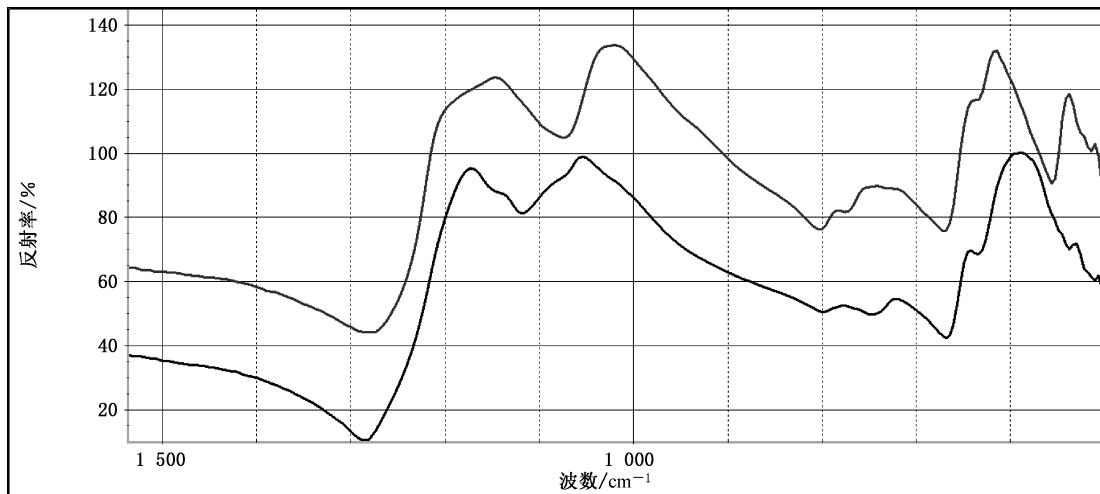


图 A.59 长石族矿物大致的红外反射谱图

A.2.13.2 斜长石的近端元组分钠长石的红外反射谱图以 $800\text{ cm}^{-1}\sim700\text{ cm}^{-1}$ 范围内呈现 4 个反射峰为特征,谱图差异归因于方向性,见图 A.60。

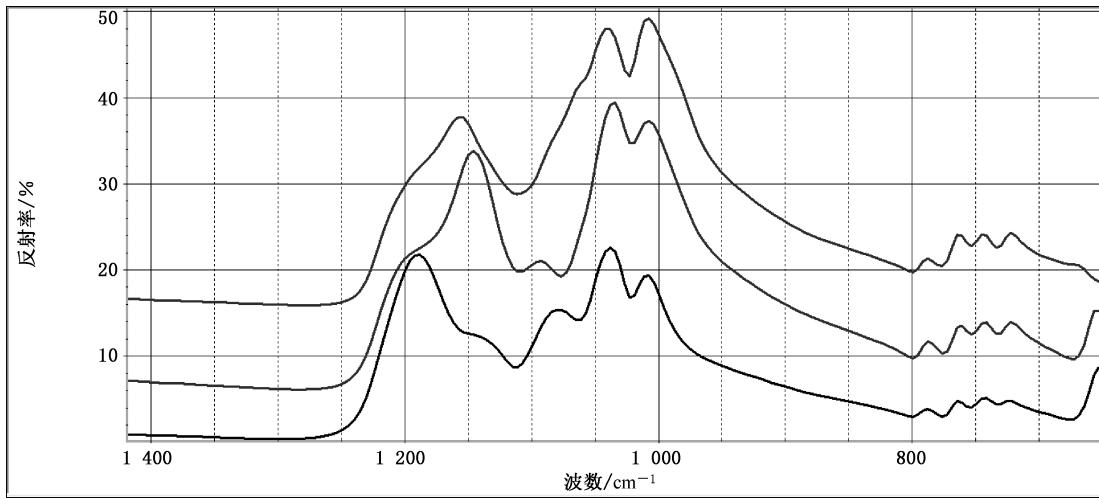


图 A.60 钠长石的红外反射谱图

A.2.13.3 基于方向性、类质同像替代、Si-Al有序度以及蚀变矿物、次生矿物的影响，长石透射谱图不稳定，有时与翡翠透射谱图相似，见图 A.61。

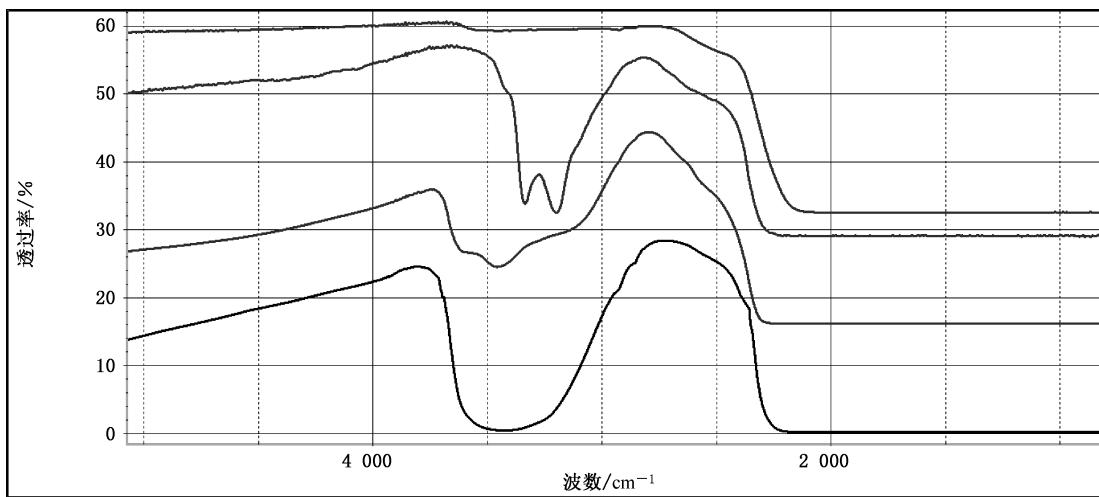


图 A.61 不同长石样品迥异的红外透射谱图

A.2.13.4 经人工树脂充填的长石有时会呈现 $3060\text{ cm}^{-1}\sim3030\text{ cm}^{-1}$ 间吸收带甚至 4062 cm^{-1} 峰并伴有跟 $-\text{CH}_3$ 以及 $-\text{CH}_2-$ 有关的吸收峰，且相关峰往往向高频区偏移，如 2870 cm^{-1} 峰，见图 A.62。

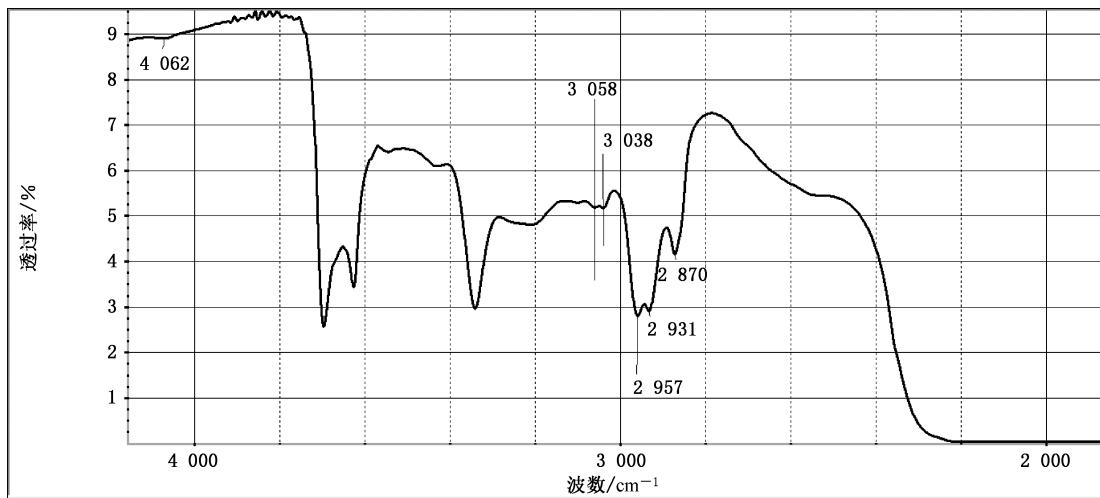


图 A.62 采自充填长石的红外透射谱图

A.2.14 方柱石

A.2.14.1 方柱石紫色和黄色品种红外反射谱图差异不显著,偶见以 1430 cm^{-1} 左右为中心的弱谱带归因于 CO_3^{2-} 基团的介入,见图 A.63。

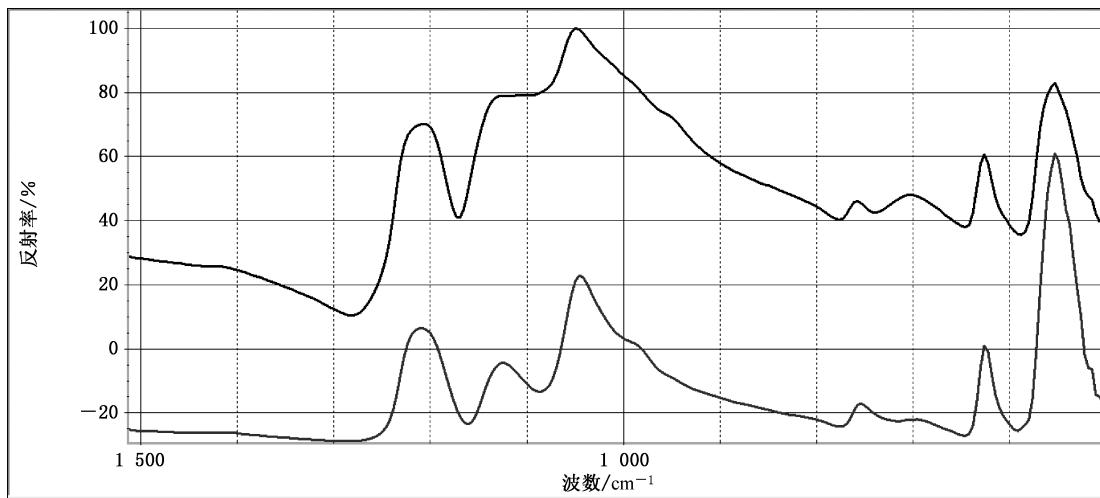


图 A.63 方柱石的红外反射谱图

A.2.14.2 紫色和黄色方柱石红外透射谱图差异不显著,应注意某些吸收峰带易与某些人工树脂谱带混淆,见图 A.64。

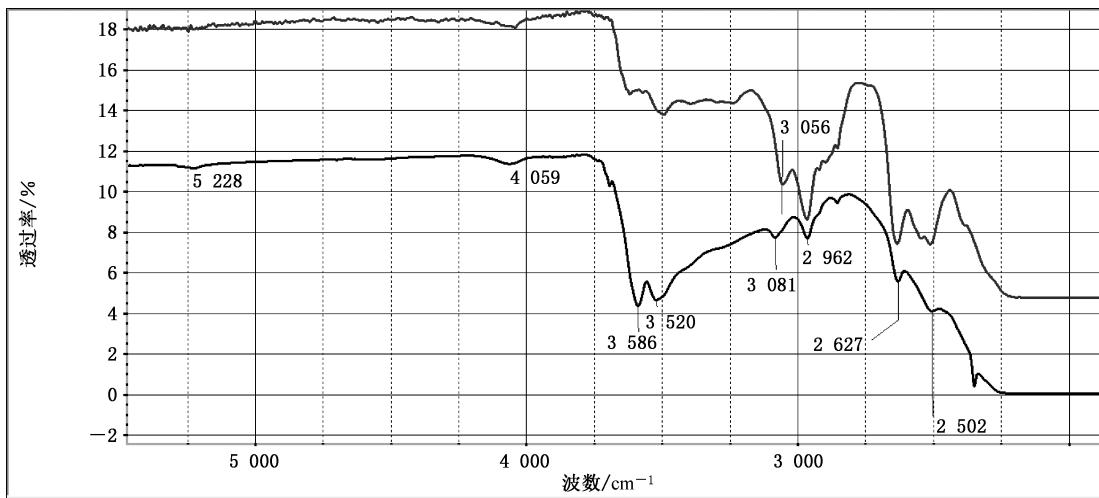


图 A.64 方柱石的红外透射谱图

A.2.15 柱晶石

A.2.15.1 柱晶石的红外反射谱图,见图 A.65。

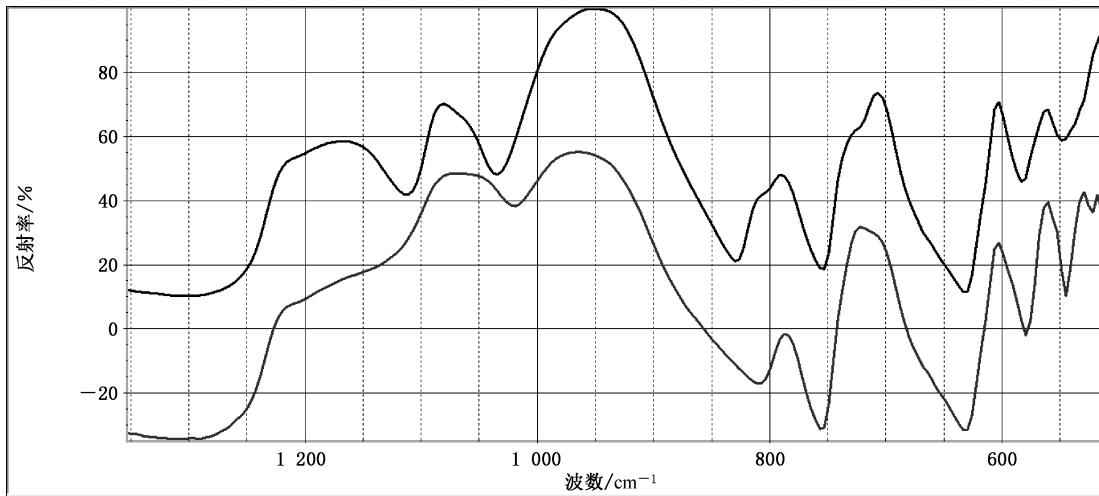


图 A.65 柱晶石的红外反射谱图

A.2.16 黜帘石

A.2.16.1 黜帘石(含坦桑石)的红外反射谱图差异归因于类质同像替代和方向性,3 150 cm^{-1} 左右呈现与 OH^- 有关的峰,见图 A.66。

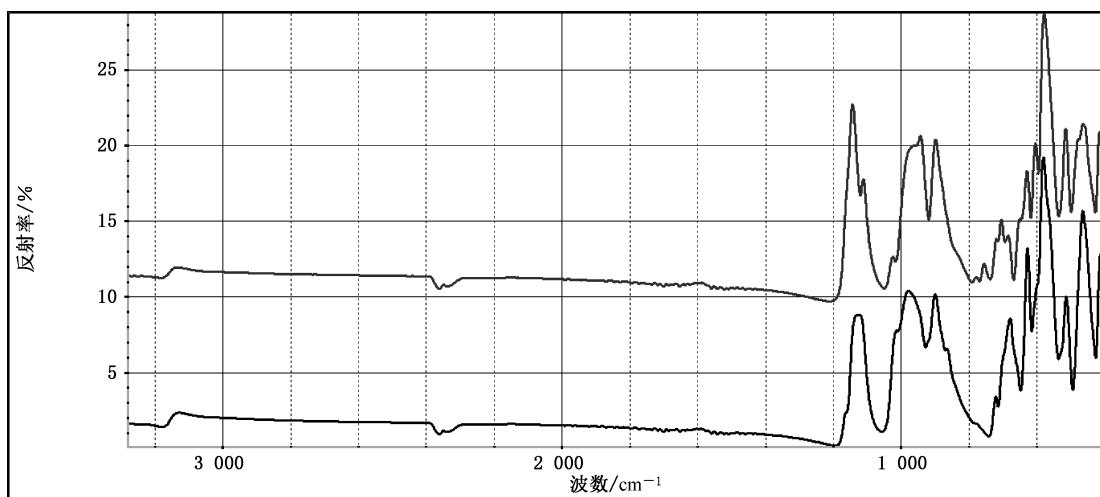


图 A.66 黜帘石的红外反射谱图

A.2.16.2 黜帘石(含坦桑石)的红外透射谱图,见图 A.67。

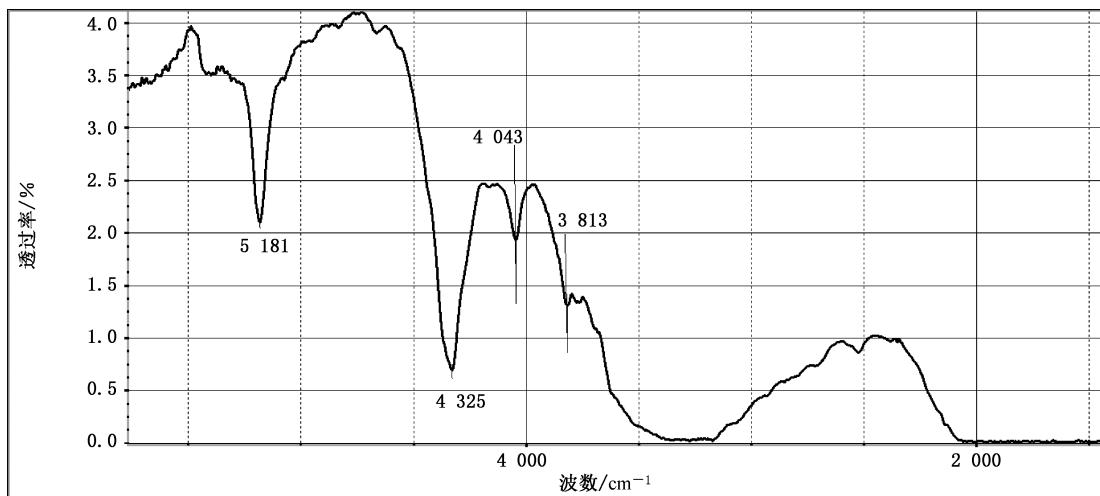


图 A.67 黜帘石的红外透射谱图

A.2.17 绿帘石

A.2.17.1 绿帘石的红外反射谱图,见图 A.68。

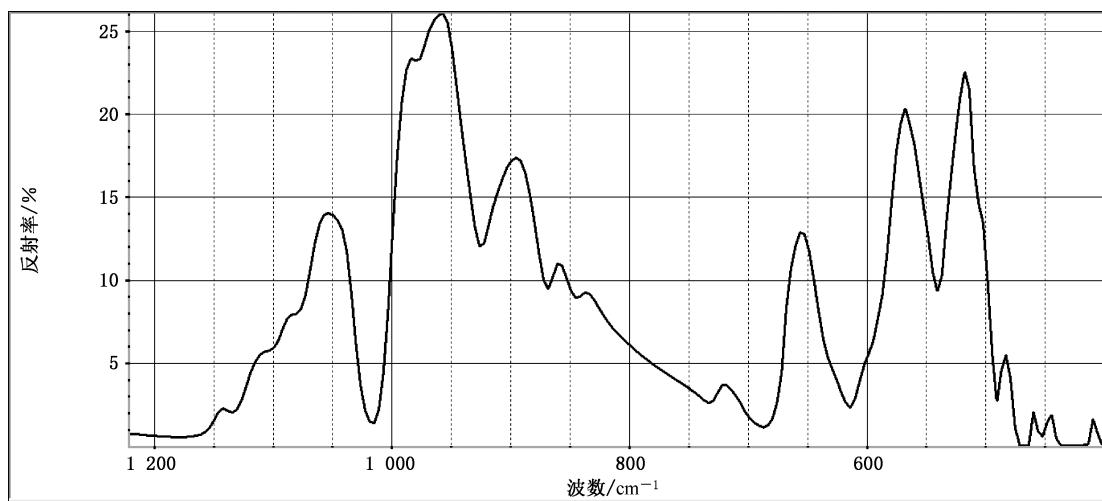


图 A.68 绿帘石的红外反射谱图

A.2.18 董青石

A.2.18.1 董青石的红外反射谱图, 见图 A.69。

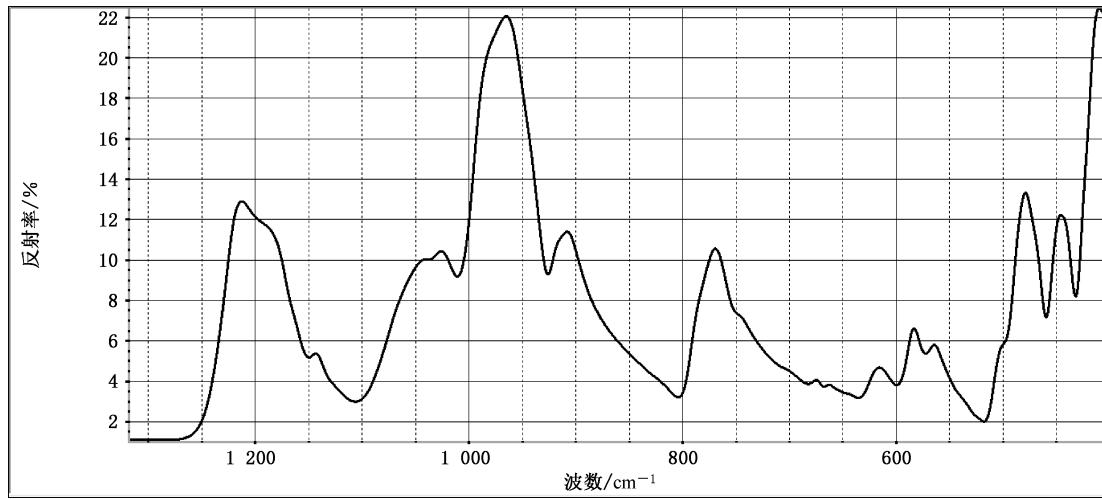


图 A.69 董青石的红外反射谱图

A.2.19 楷石

A.2.19.1 楷石的红外反射谱图, 见图 A.70。

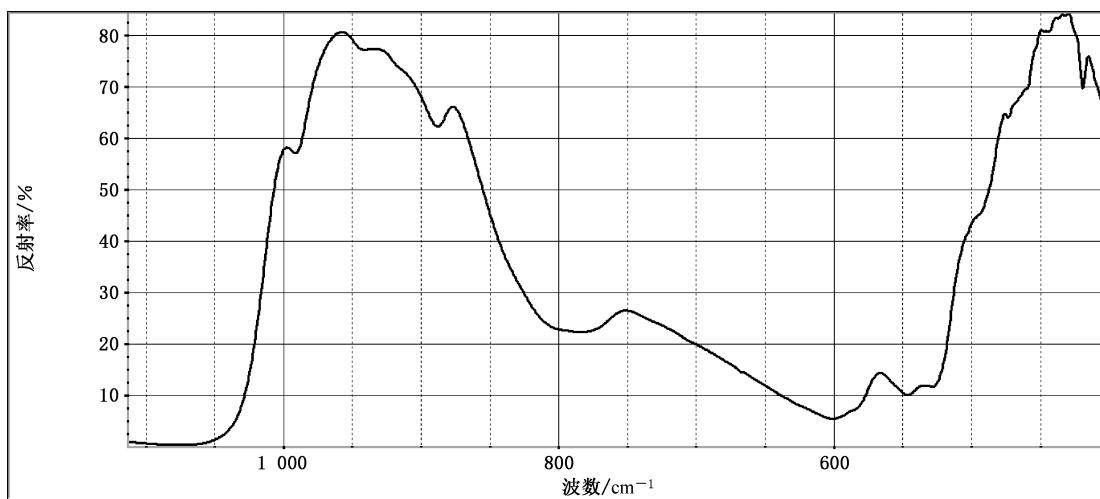


图 A.70 楷石的红外反射谱图

A.2.19.2 楷石的红外透射谱图,见图 A.71。

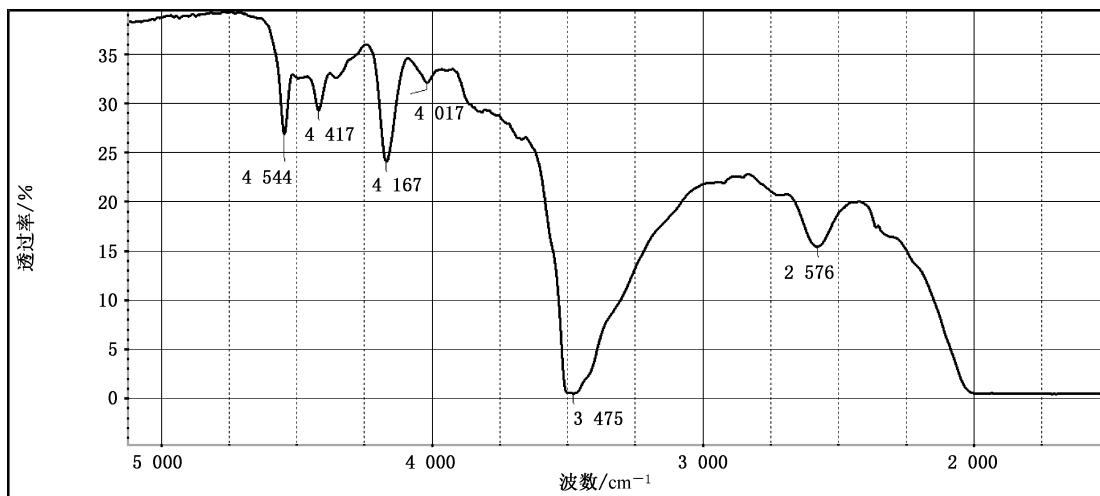


图 A.71 楷石的红外透射谱图

A.2.20 磷灰石

A.2.20.1 磷灰石的红外反射谱图,见图 A.72。

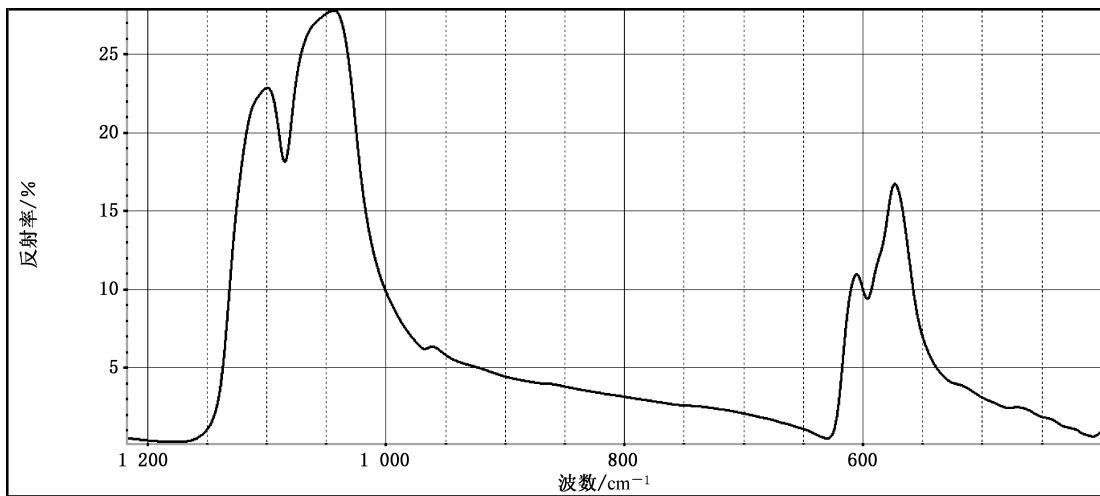


图 A.72 磷灰石的红外反射谱图

A.2.20.2 磷灰石的透射红外谱图呈现的差异主要归因于透明度对光通能量的衰减,见图 A.73。

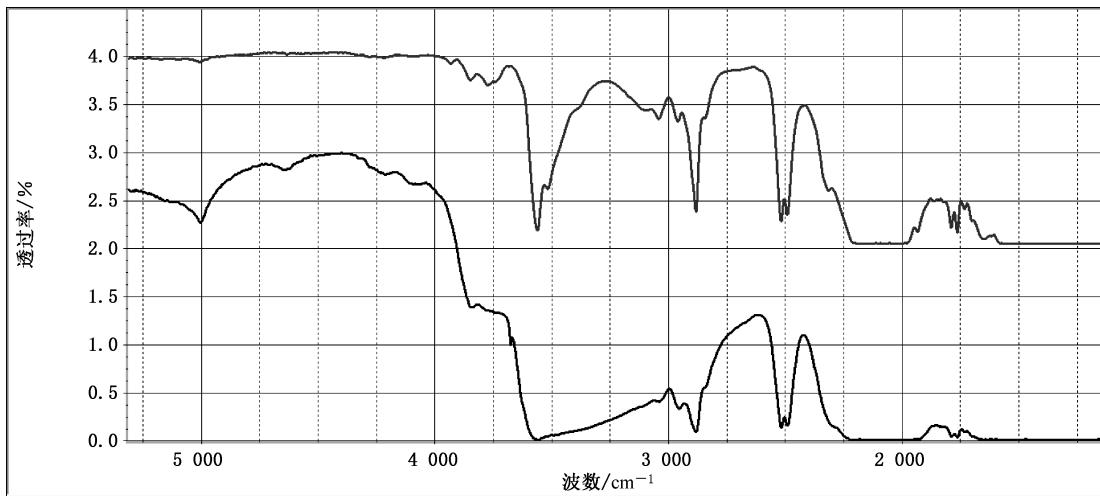


图 A.73 磷灰石红外透射谱图

A.2.21 透辉石

A.2.21.1 透辉石红外反射谱图因类质同象替代和结晶学方向不同而有差异,见图 A.74。

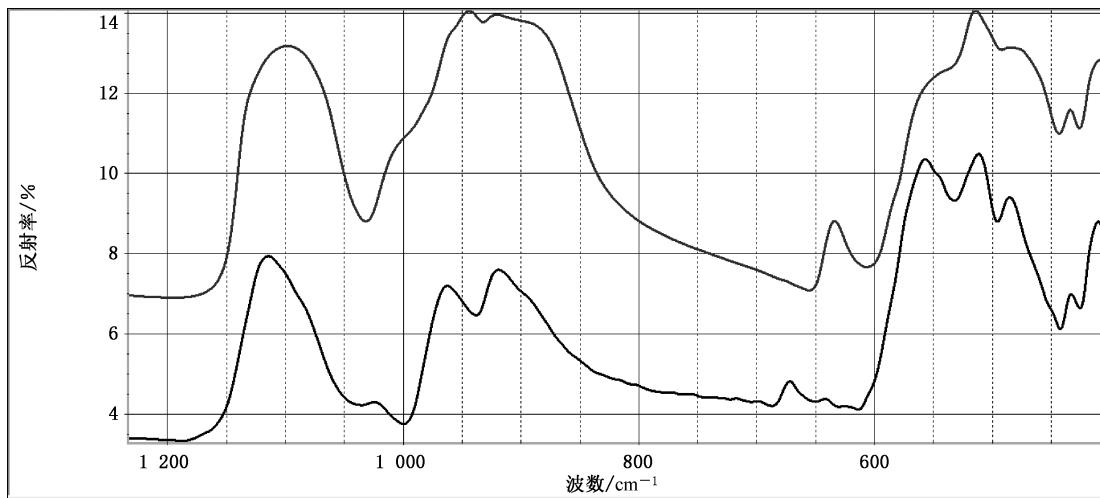


图 A.74 透辉石的红外反射谱图

A.2.21.2 透辉石的红外透射谱图常因含水矿物包裹体(有时是亚显微尺寸)的不同而存在差异,见图 A.75。

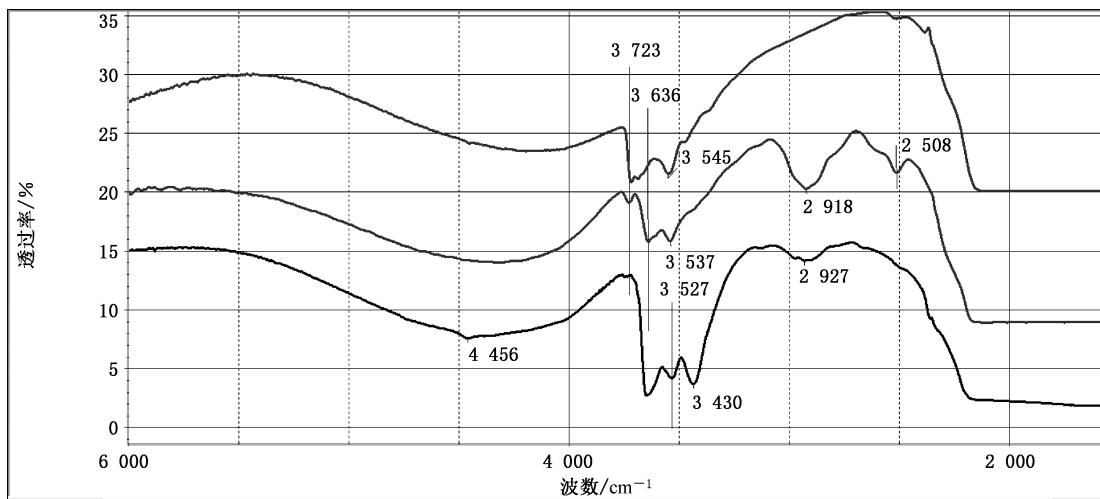


图 A.75 透辉石的红外透射谱图

A.2.22 顽火辉石

A.2.22.1 顽火辉石的红外反射谱图因类质同象替代而存在差异,见图 A.76。

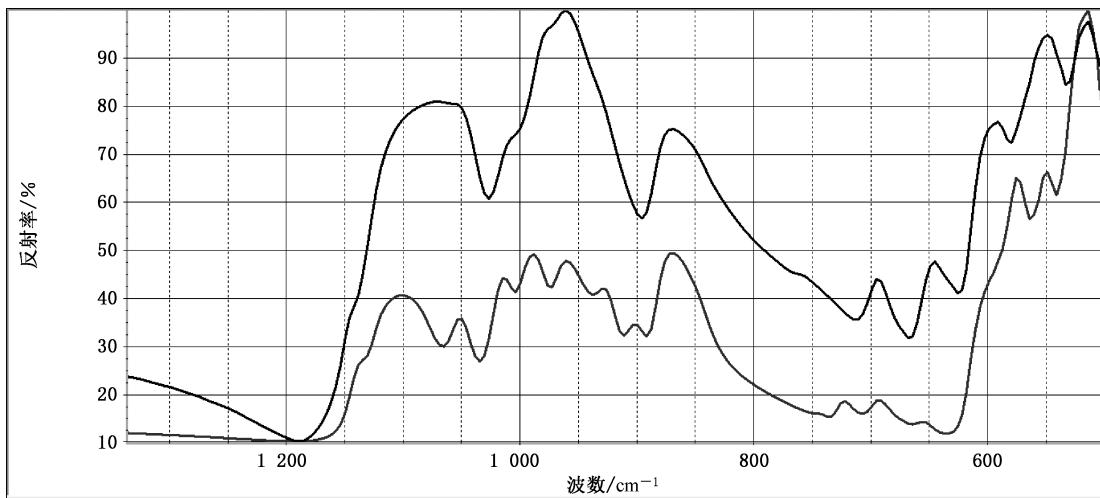


图 A.76 顽火辉石的红外反射谱图

A.2.22.2 顽火辉石的红外透射谱图,见图 A.77。

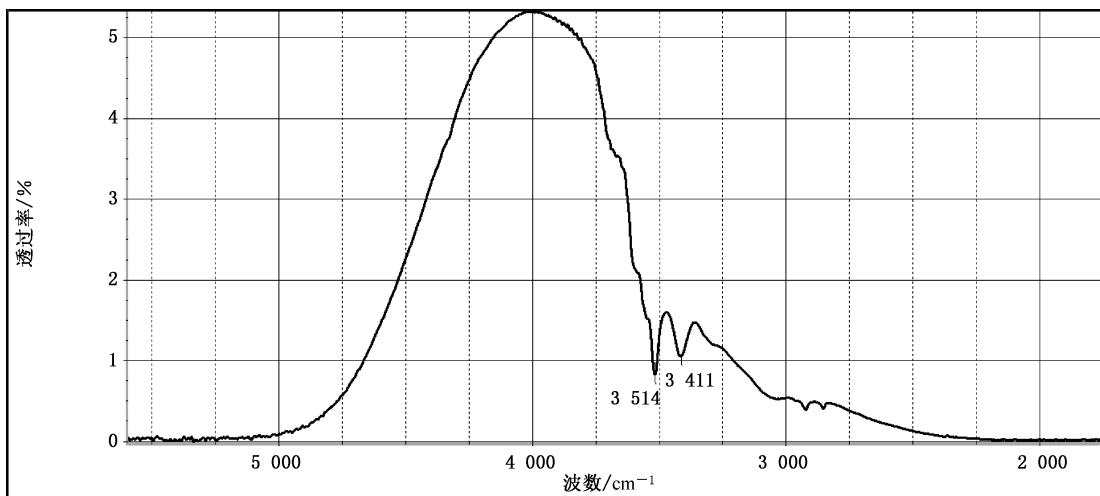


图 A.77 顽火辉石的红外透射谱图

A.2.23 锂辉石

A.2.23.1 锂辉石红外反射谱图差异归因于方向性,当特定方向谱图接近硬玉时,应关注锂辉石在 $760\text{ cm}^{-1}\sim730\text{ cm}^{-1}$ 范围内缺失反射峰,见图 A.78。

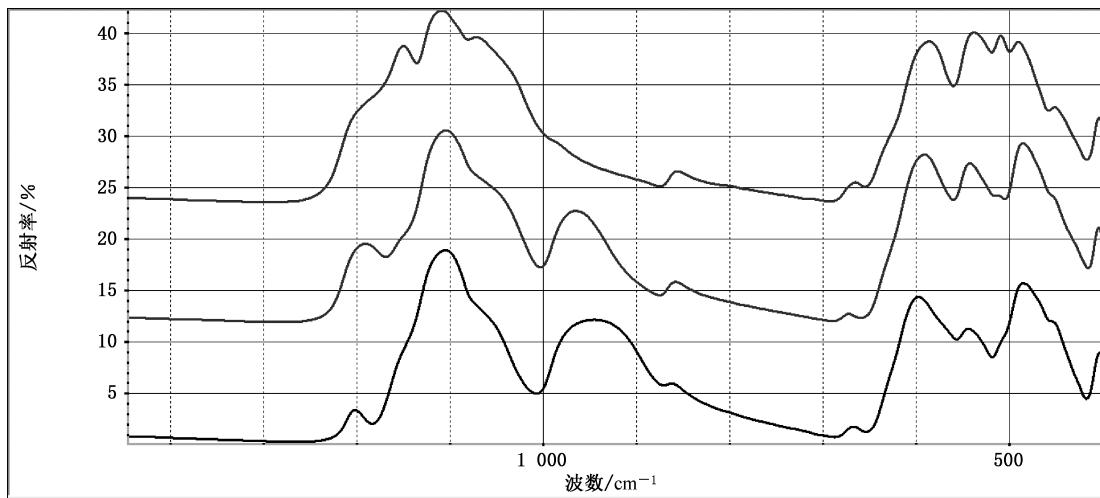


图 A.78 同一晶体不同方向的锂辉石的红外反射谱图

A.2.23.2 锂辉石的红外透射谱图因含水和/或羟基的矿物存在而有所差异,见图 A.79。

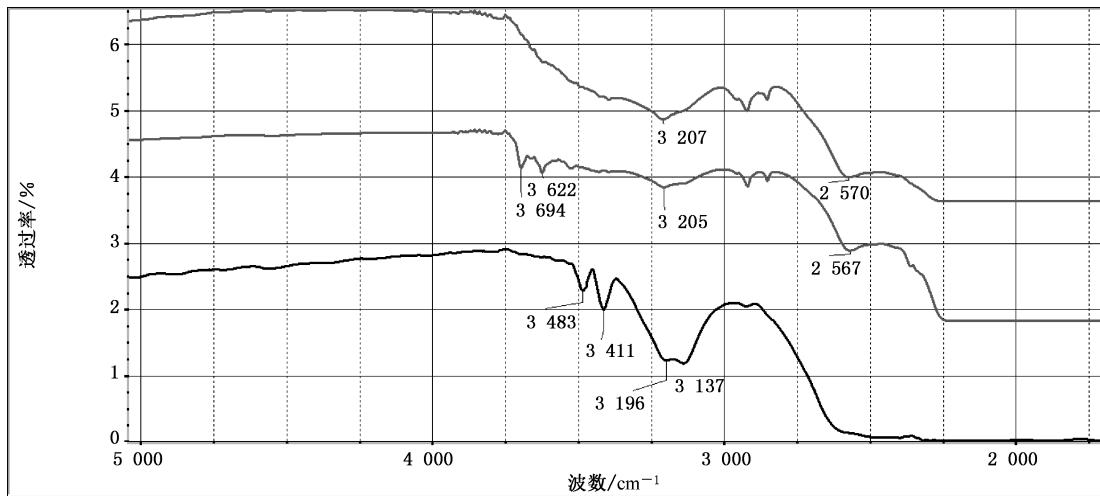


图 A.79 锂辉石的红外透射谱图

A.2.24 红柱石

A.2.24.1 红柱石红外反射谱图,见图 A.80。

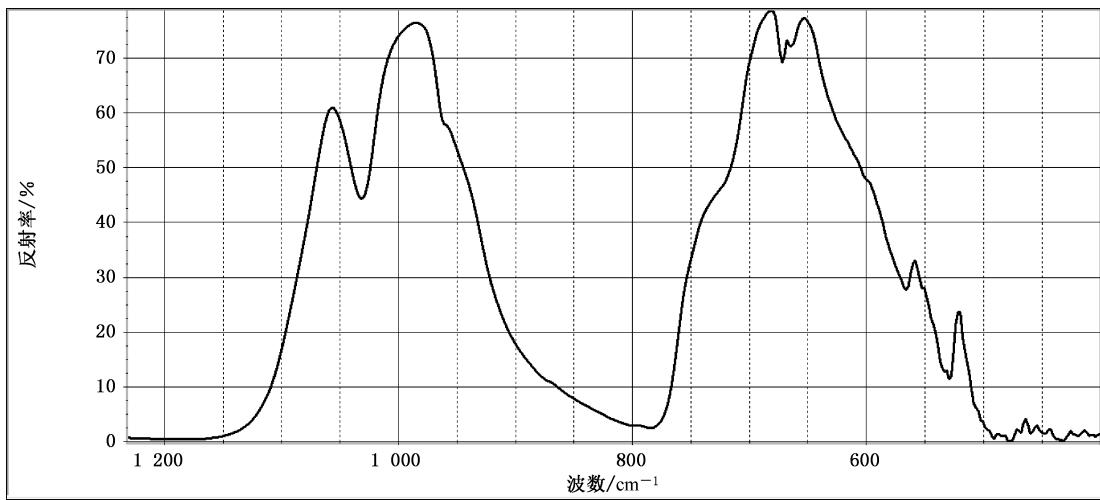


图 A.80 红柱石的红外反射谱图

A.2.24.2 红柱石的红外透射谱图, 见图 A.81。

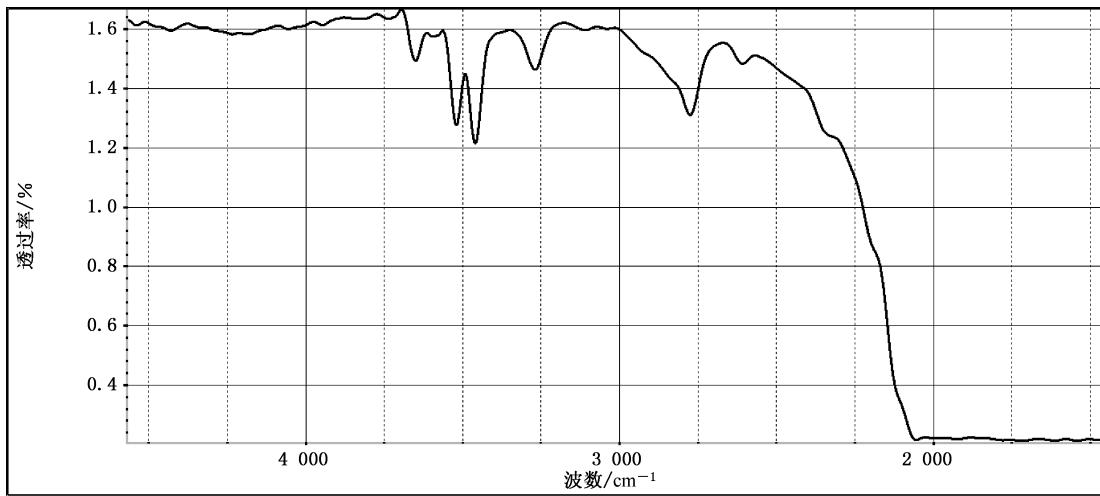


图 A.81 红柱石的红外透射谱图

A.2.25 砂线石

A.2.25.1 砂线石的红外反射谱图, 见图 A.82。

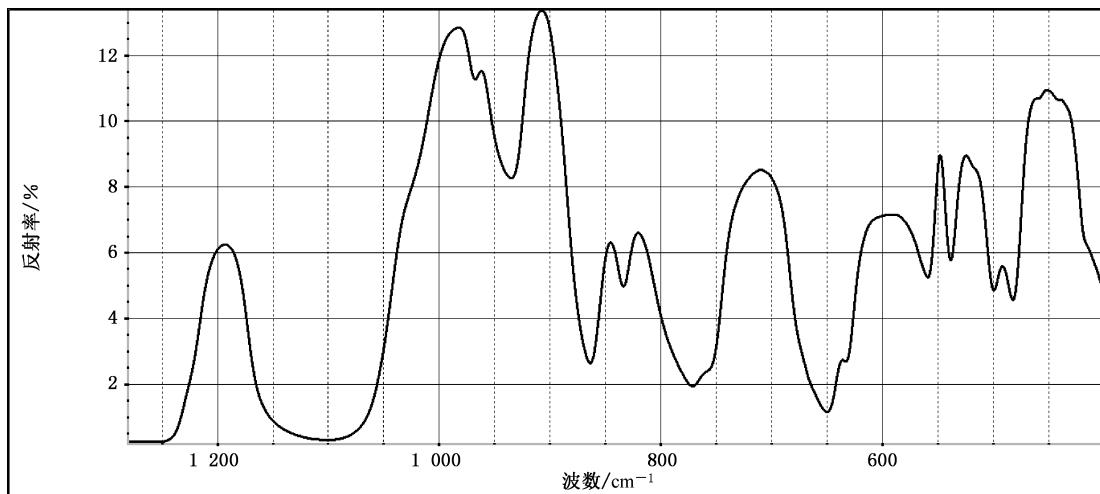


图 A.82 矽线石的红外反射谱图

A.2.25.2 矽线石猫眼的红外透射谱图,见图 A.83。

注:应考虑谱图可能带有包裹体矿物的信号。

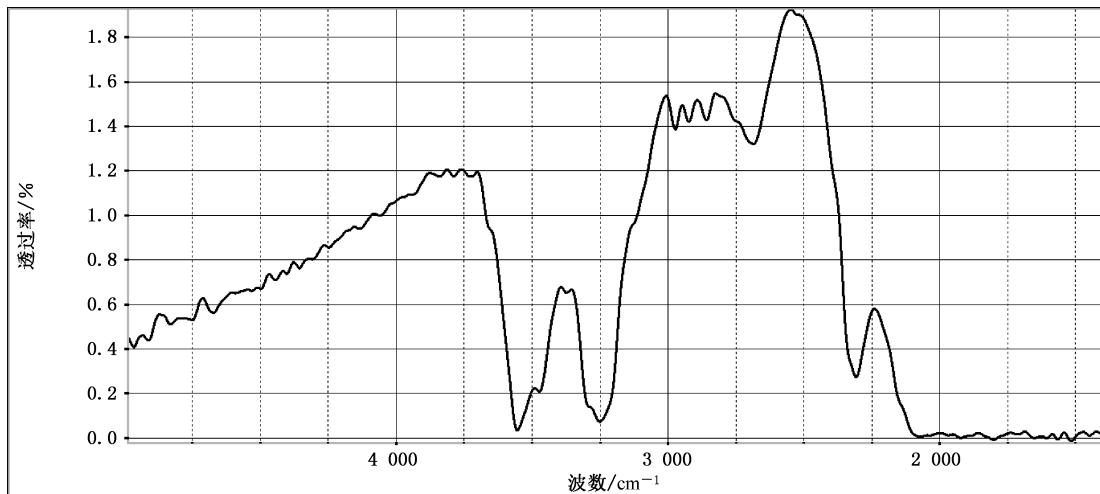


图 A.83 矽线石猫眼透射谱图

A.2.26 蓝晶石

A.2.26.1 蓝晶石的红外反射谱图,见图 A.84。

注:蓝晶石与红柱石、矽线石为同分异构关系,前两者谱图相似性高。

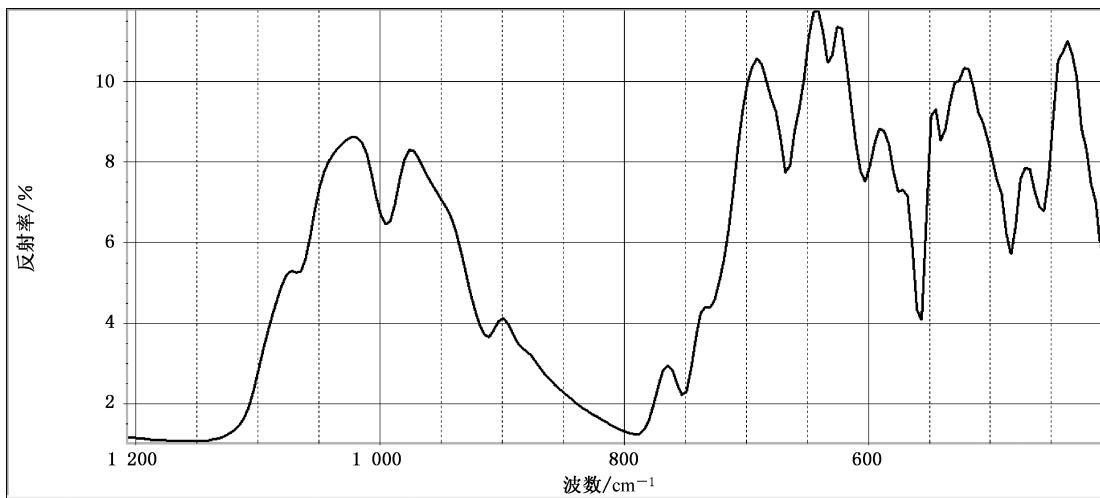


图 A.84 蓝晶石的红外反射谱图

A.2.26.2 蓝晶石解理完全,经人工树脂充填后红外透射谱图可见与充填物有关的特征峰,如 $4\ 525\text{ cm}^{-1}$ 、 $4\ 059\text{ cm}^{-1}$ 、 $3\ 057\text{ cm}^{-1}$ 、 $3\ 034\text{ cm}^{-1}$ 及 $3\ 000\text{ cm}^{-1}\sim2\ 850\text{ cm}^{-1}$ 间的谱带,见图 A.85。

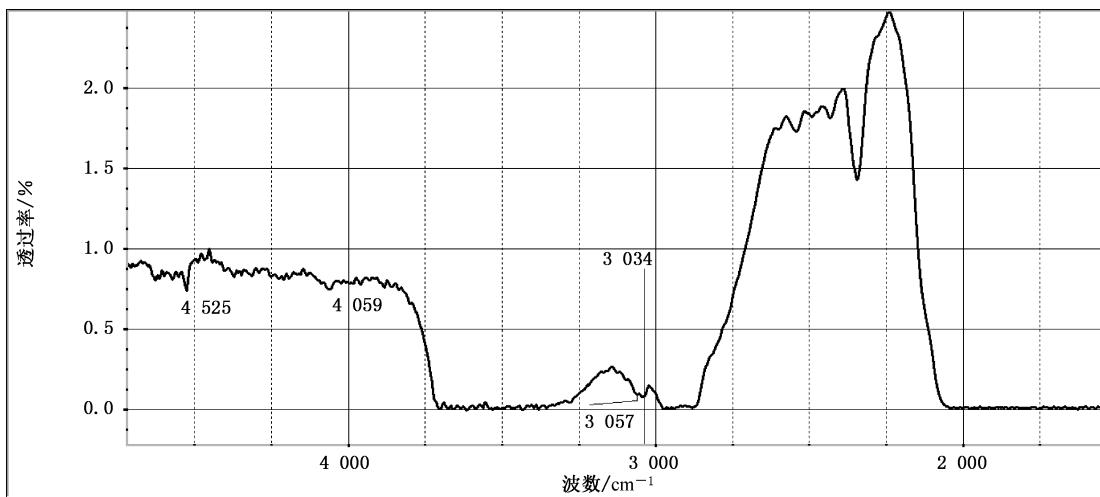


图 A.85 经充填的蓝晶石的红外透射谱图

A.2.27 鱼眼石

A.2.27.1 鱼眼石的红外反射谱图,见图 A.86。

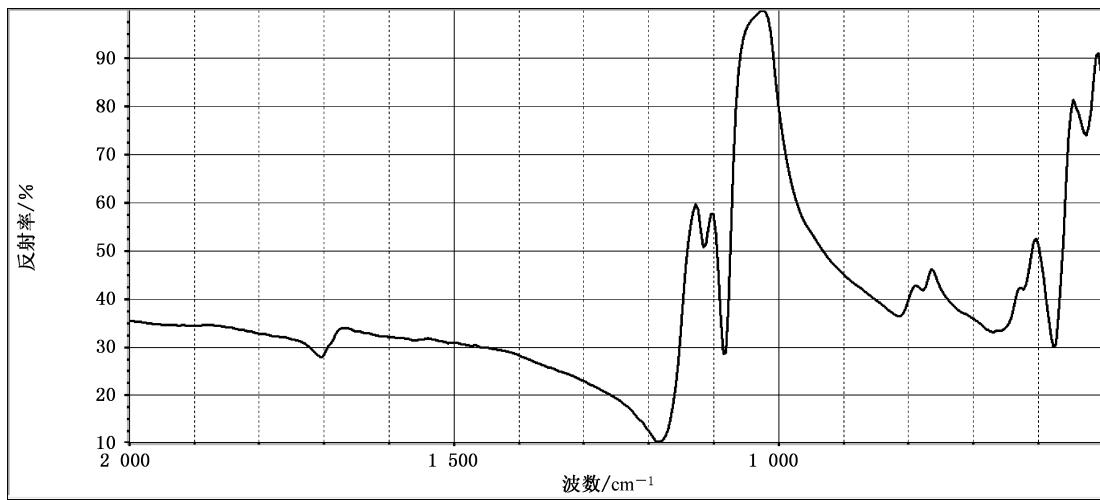


图 A.86 鱼眼石的红外反射谱图

A.2.27.2 鱼眼石的红外透射谱图,见图 A.87。

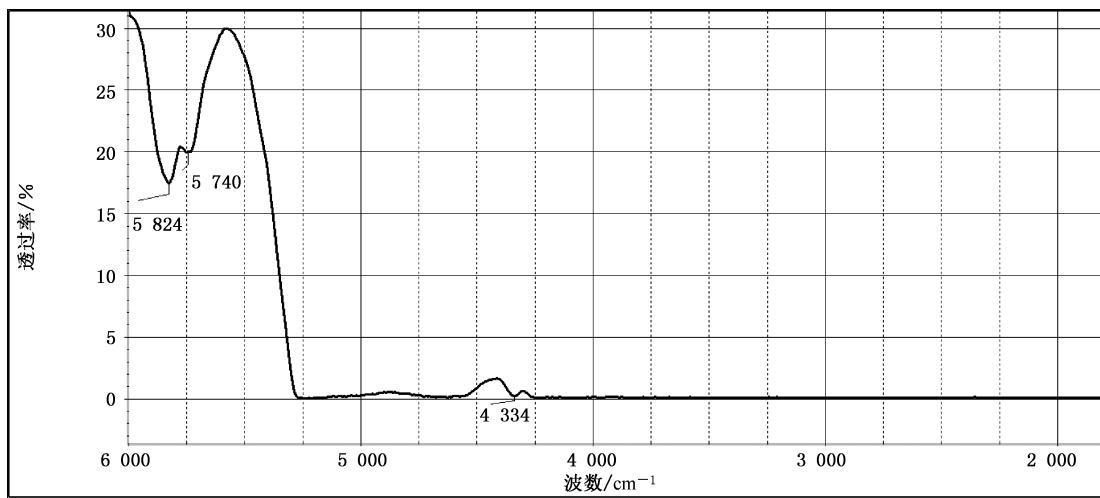


图 A.87 鱼眼石的红外透射谱图

A.2.28 符山石

A.2.28.1 符山石的红外反射谱图,见图 A.88。

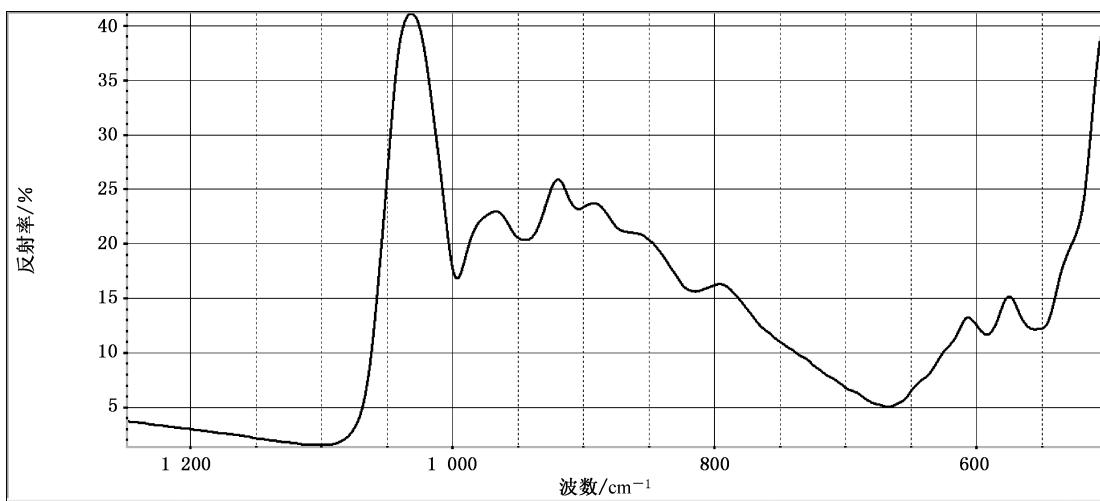


图 A.88 符山石的红外反射谱图

A.2.28.2 符山石的红外透射谱图,见图 A.89。

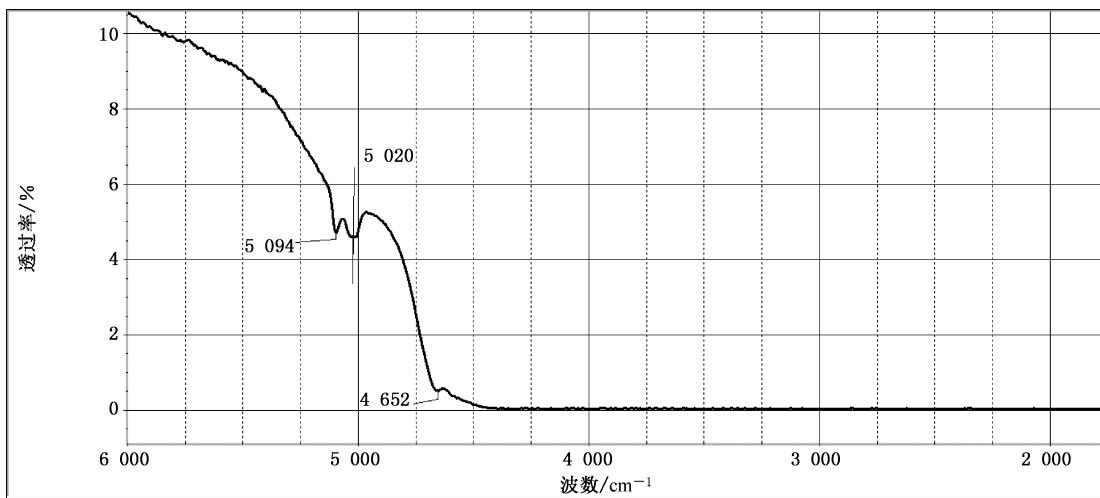


图 A.89 符山石的红外透射谱图

A.2.29 硼铝镁石

A.2.29.1 硼铝镁石的红外反射谱图,见图 A.90。

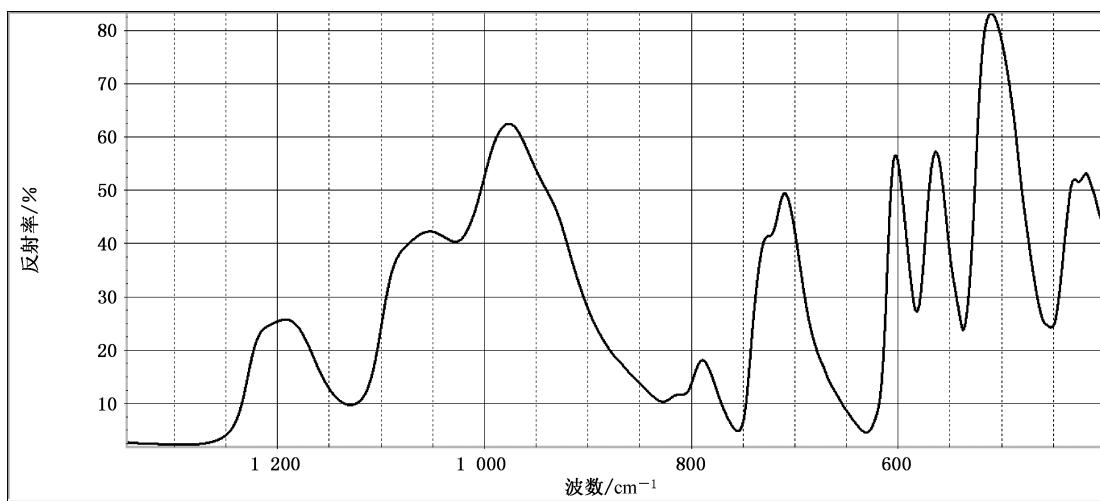


图 A.90 硼铝镁石的红外反射谱图

A.2.29.2 硼铝镁石的红外透射谱图,见图 A.91。

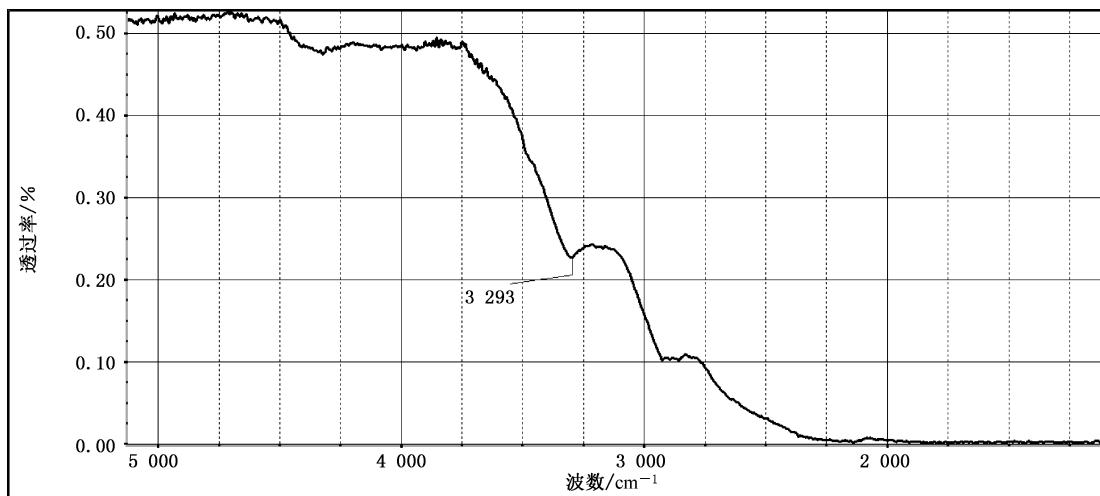


图 A.91 硼铝镁石的红外透射谱图

A.2.30 塔菲石

塔菲石的红外反射谱图,见图 A.92。

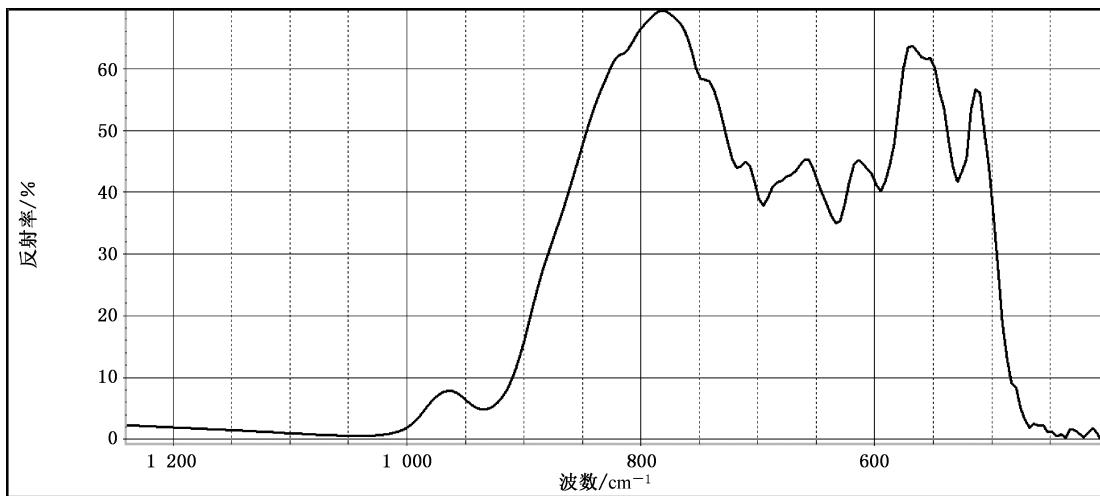


图 A.92 塔菲石的红外反射谱图

塔菲石的红外透射谱图,见图 A.93。

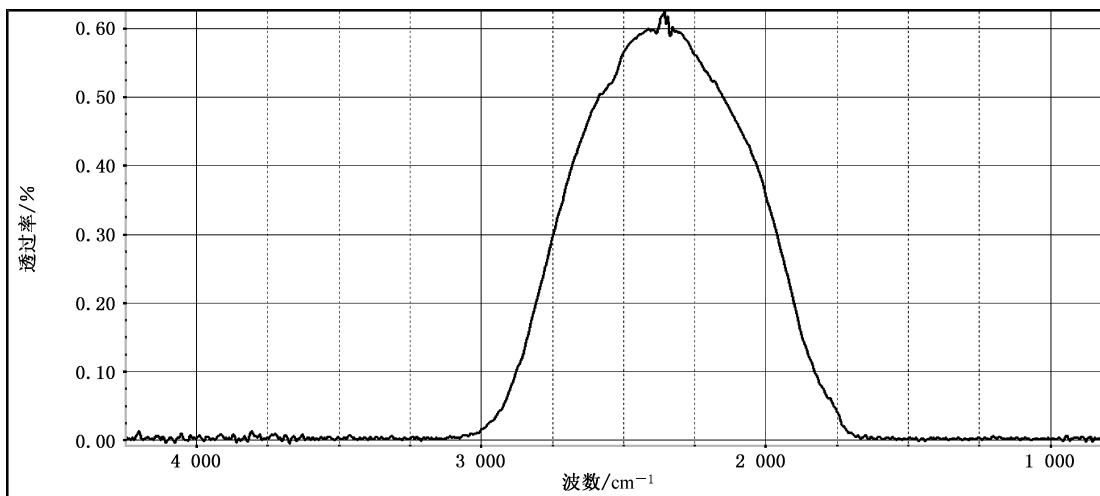


图 A.93 塔菲石的红外透射谱图

A.2.31 蓝锥矿

蓝锥矿的红外反射谱图,见图 A.94。

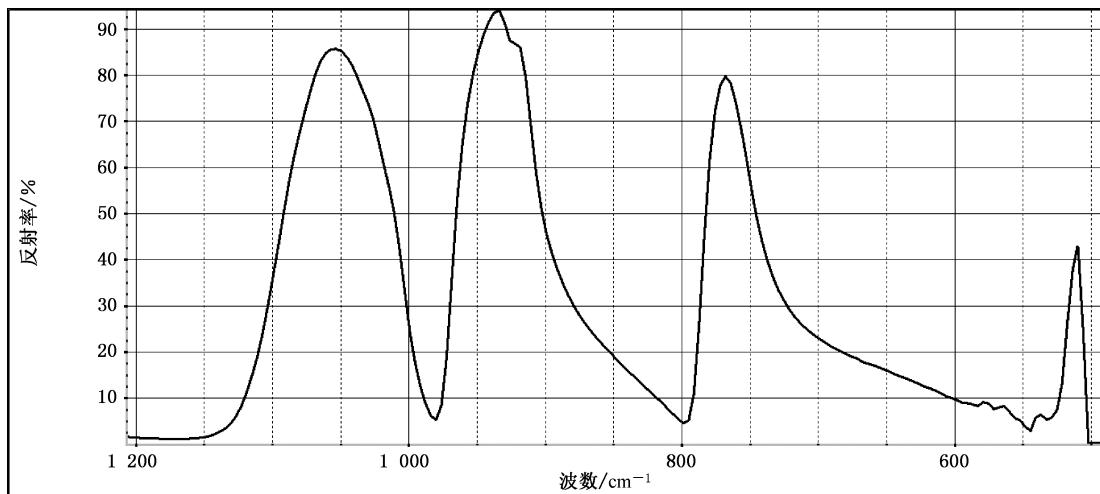


图 A.94 蓝锥矿的红外反射谱图

A.2.32 重晶石

重晶石的红外反射谱图,见图 A.95。

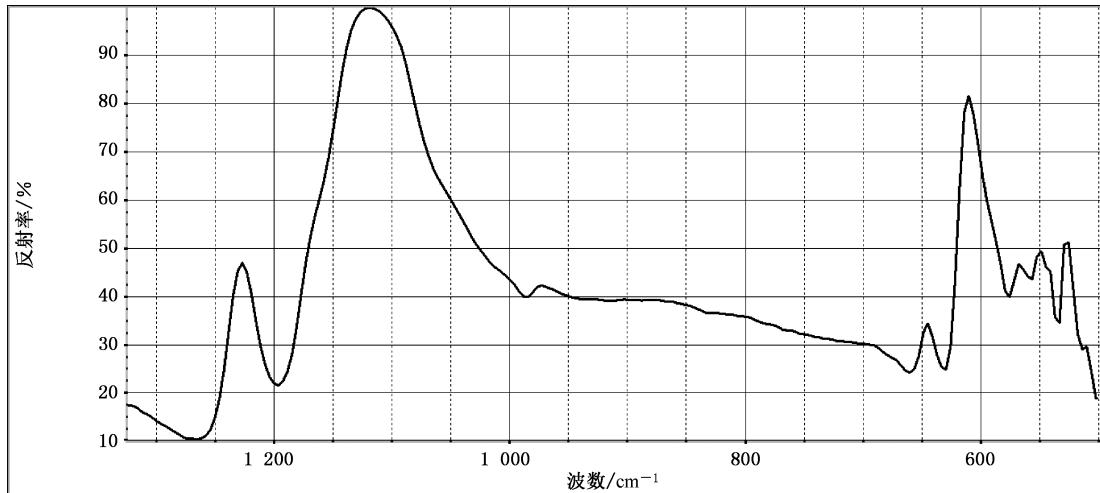


图 A.95 重晶石的红外反射谱图

A.2.33 天青石

天青石的红外反射谱图,见图 A.96。

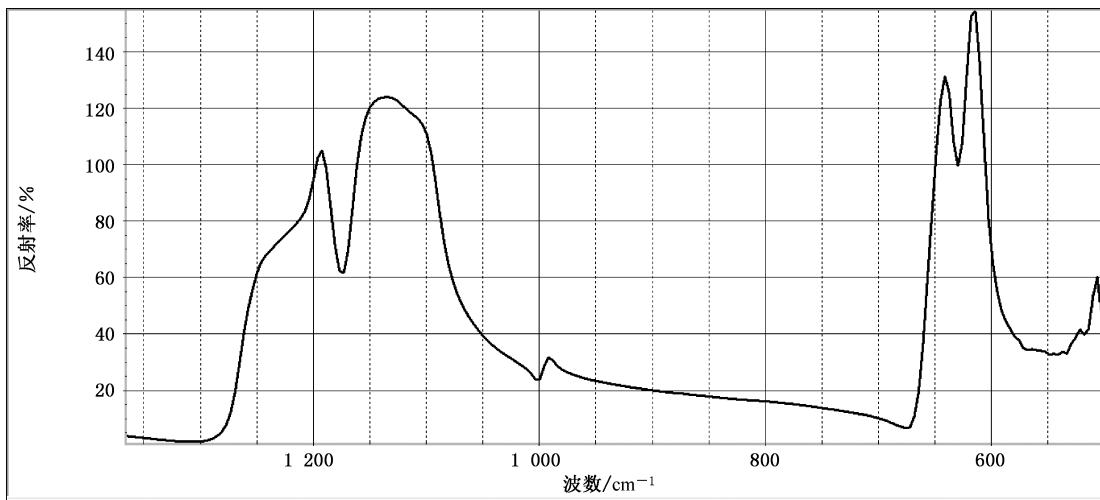


图 A.96 天青石的红外反射谱图

天青石的红外透射谱图,见图 A.97。

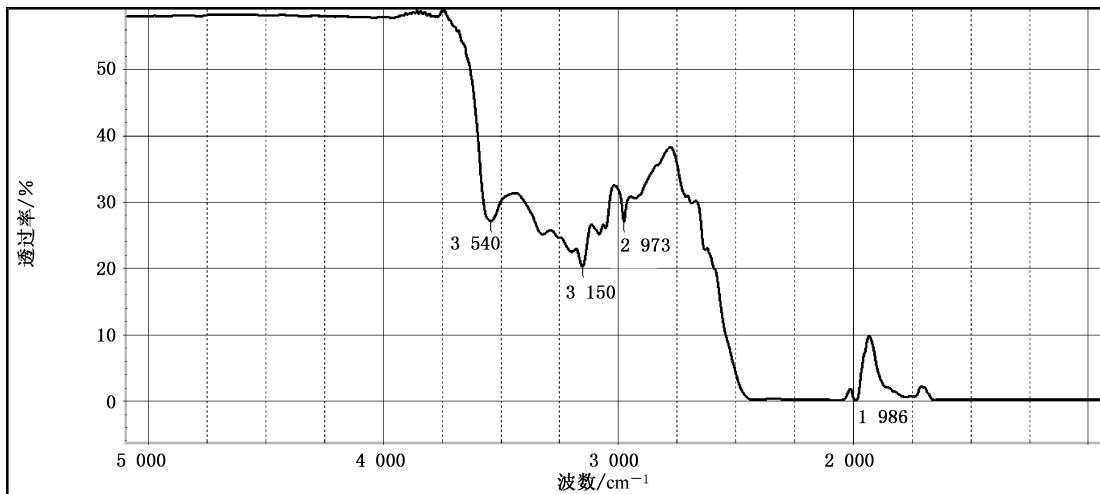


图 A.97 天青石的红外透射谱图

A.2.34 石膏

石膏和硬石膏的红外反射谱图以前者含水可见 1620 cm^{-1} 左右的峰,后者不含水且以 600 cm^{-1} 处分裂为特征,见图 A.98。

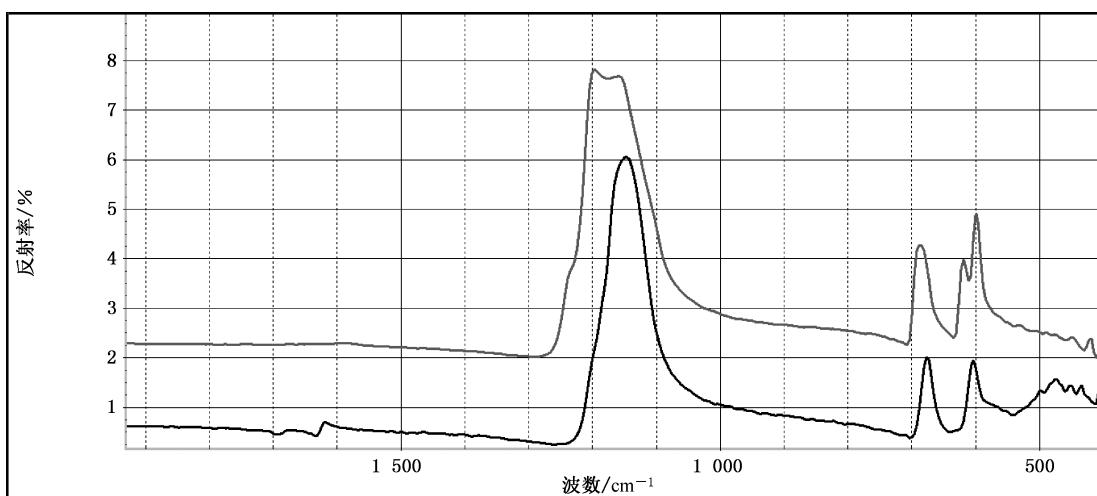


图 A.98 石膏(下谱线)和硬石膏(上谱线)的红外反射谱图

A.2.35 方解石结构型碳酸盐质宝玉石

以方解石、菱镁矿、菱锌矿、菱锰矿等常见宝玉石品种为代表的三方晶系的碳酸盐矿物宝玉石品种，红外反射谱图不具有明显的辨析度，自然界中 Mg、Ca、Fe、Mn、Zn、Co、Cd、Ba 等元素的在三方晶系碳酸盐矿物中类质同像替代常见，这导致 $900\text{ cm}^{-1}\sim 800\text{ cm}^{-1}$ 范围内的中等强锐峰和 $800\text{ cm}^{-1}\sim 700\text{ cm}^{-1}$ 范围内弱峰位置很不稳定。确定的是 $900\text{ cm}^{-1}\sim 800\text{ cm}^{-1}$ 范围内峰的相对强度由方向性决定；当测试对象为晶质集合体时，入射光与集合体针状、放射状、纤维状晶体延长方向间的角度不同，也会导致 $900\text{ cm}^{-1}\sim 800\text{ cm}^{-1}$ 范围内峰的相对强度不同。方解石结构型碳酸盐质宝玉石的红外反射谱图，见图 A.99。

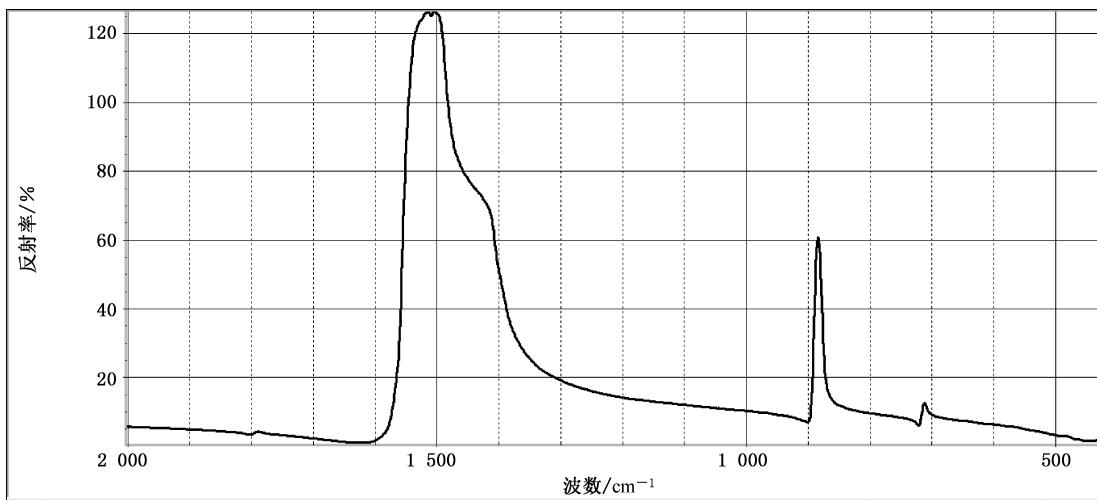


图 A.99 方解石结构型碳酸盐质宝玉石的红外反射谱图

借助不同厚度方解石(冰洲石)解理片(块)可阐明随着光程增大被测样品对红外光能量衰减造成特征峰拟合和被湮埋的现象。图 A.100 分别给出厚度为亚毫米、1.5 mm、5 mm、18 mm 的冰洲石片的红外透射谱图。

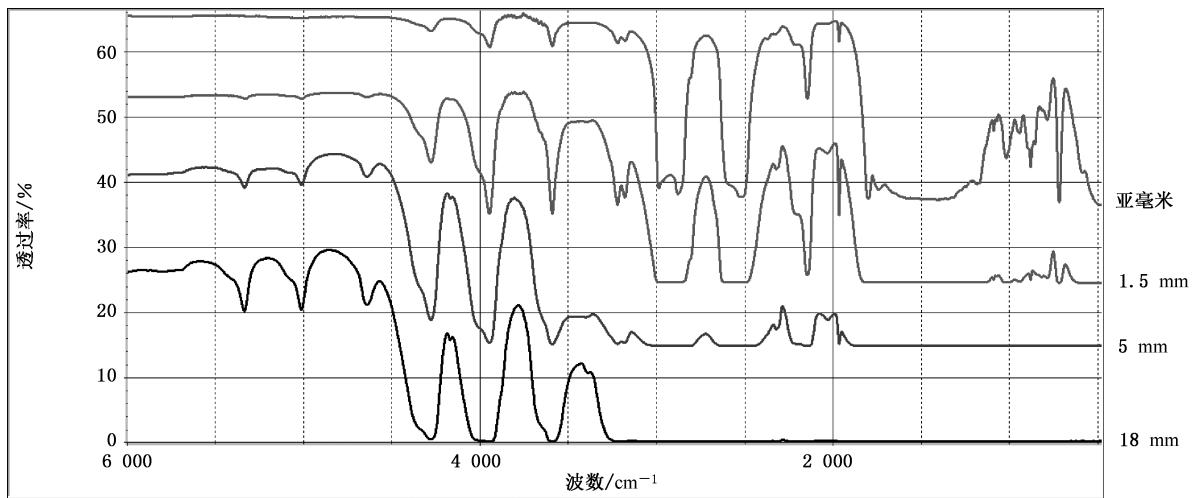


图 A.100 不同厚度方解石的红外透射谱图

A.2.36 文石结构型碳酸盐质宝玉石

以文石、菱锶矿为典型的斜方晶系碳酸盐矿物间的红外反射谱图辨析度不佳,相比方解石族矿物而言,文石型的这两种矿物红外反射谱图在 700 cm^{-1} 附近呈现双峰;与方解石族矿物谱图类似, $900\text{ cm}^{-1}\sim800\text{ cm}^{-1}$ 范围内峰的相对强度由方向性决定;当测试对象为晶质集合体时,入射光与集合体针状、放射状、纤维状晶体延长方向间的角度不同,也会导致 $900\text{ cm}^{-1}\sim800\text{ cm}^{-1}$ 范围内峰的相对强度不同。文石结构型碳酸盐质宝玉石的红外反射谱图,见图 A.101。

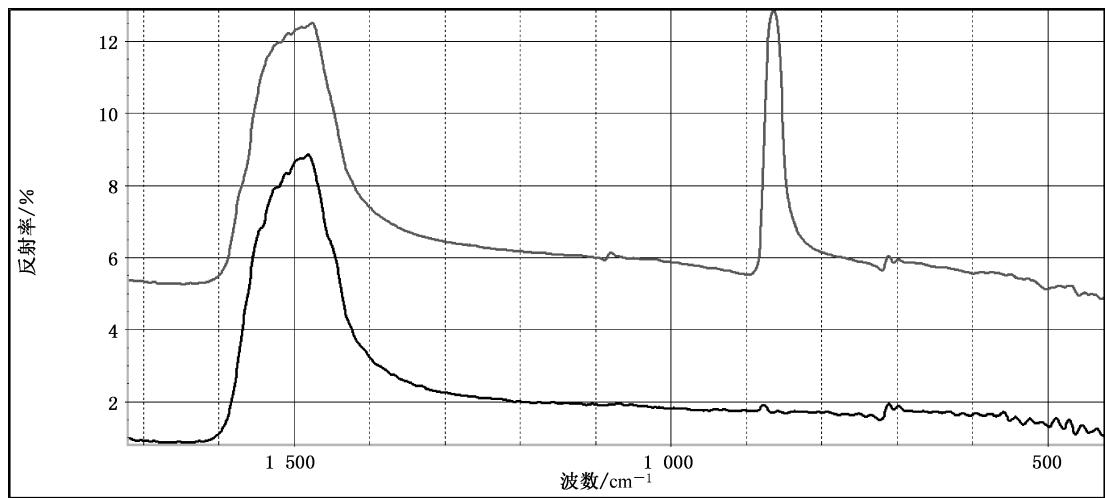


图 A.101 文石结构型碳酸盐质宝玉石的红外反射谱图

A.2.37 锡石

锡石的红外反射谱图,见图 A.102。

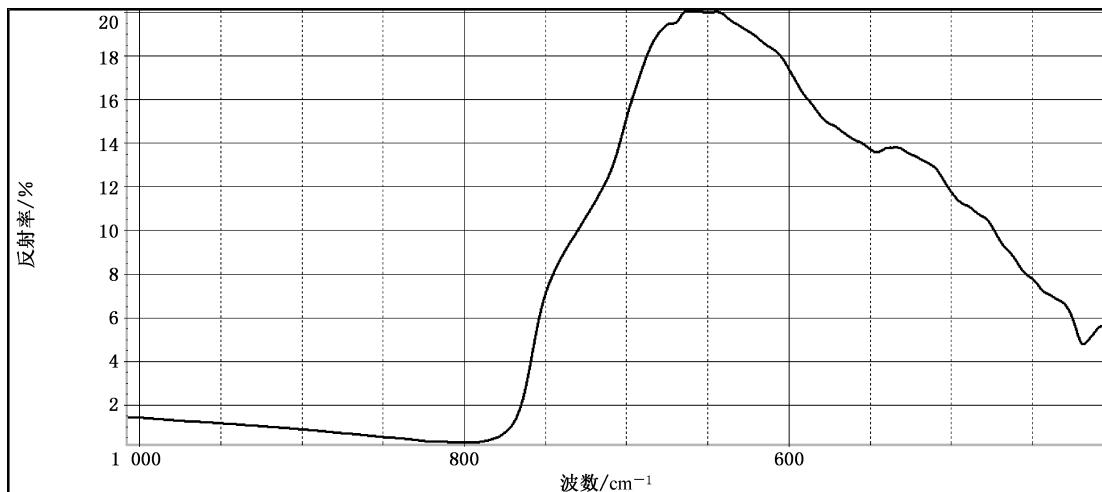


图 A.102 锡石的红外反射谱图

锡石的红外透射谱图,见图 A.103。

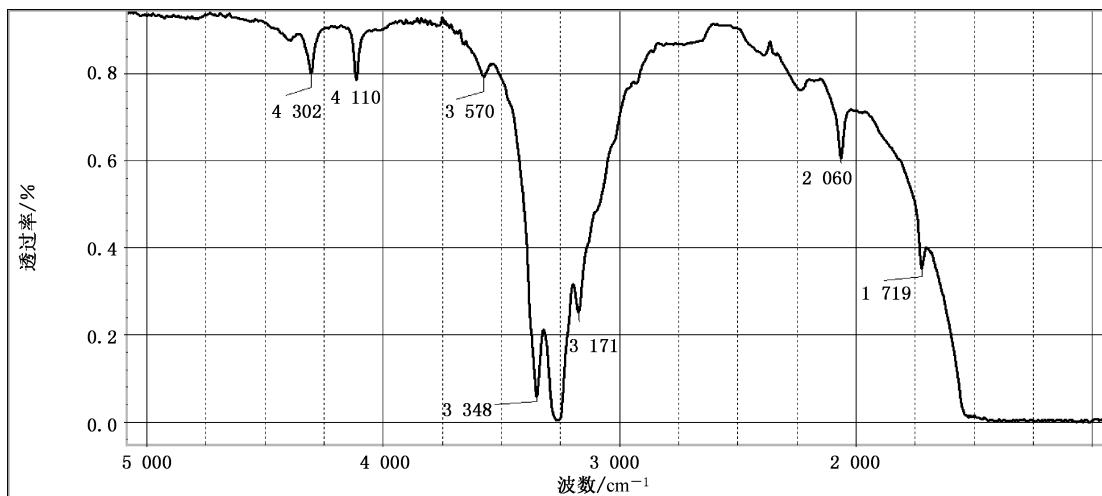


图 A.103 锡石的红外透射谱图

A.2.38 磷铝锂石

磷铝锂石的红外反射谱图,见图 A.104。

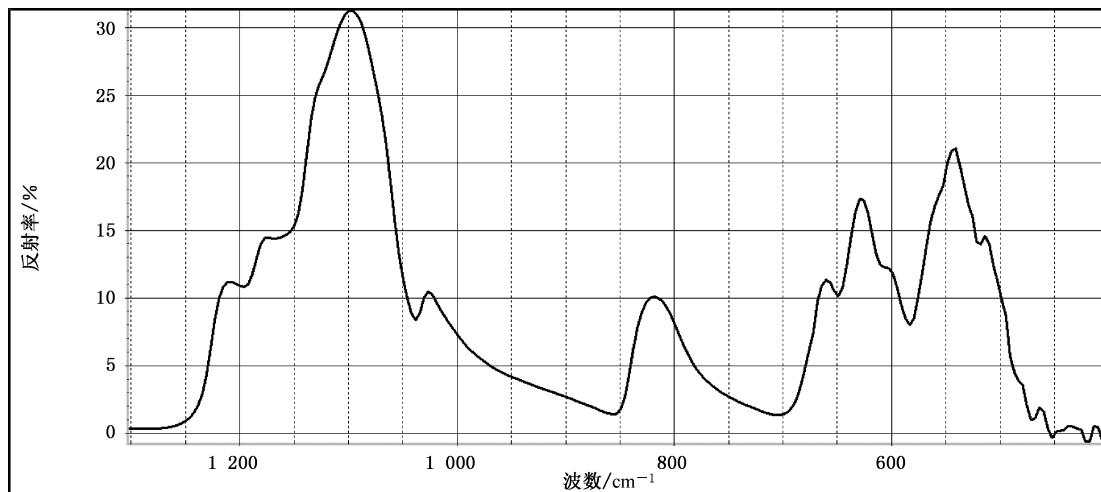


图 A.104 磷铝锂石的红外反射谱图

A.2.39 透视石

透视石红外反射谱图,见图 A.105。

注: 其中 $3\ 400\text{ cm}^{-1}\sim3\ 300\text{ cm}^{-1}$ 间的峰由结晶水造成。

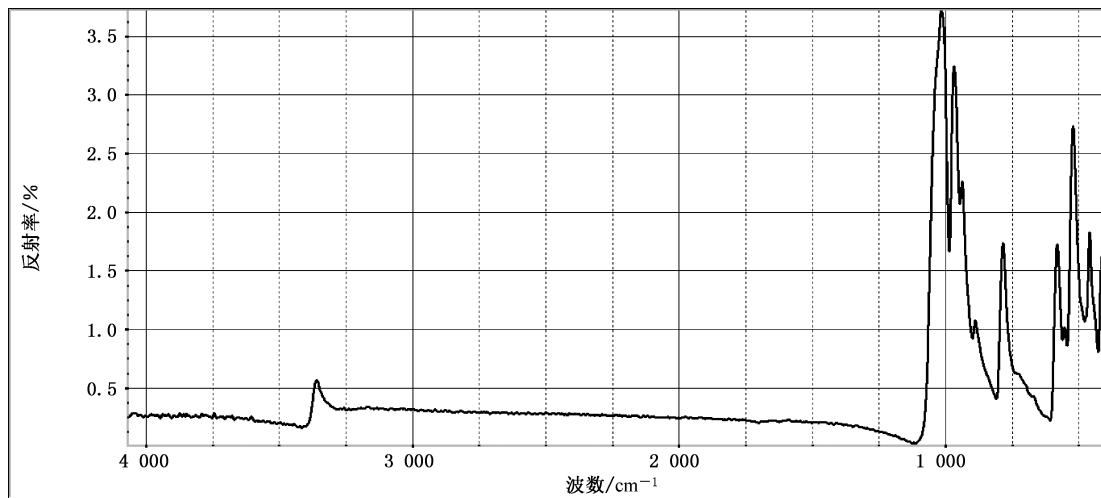


图 A.105 透视石的红外反射谱图

透视石红外反射谱图指纹区部分谱线,见图 A.106。

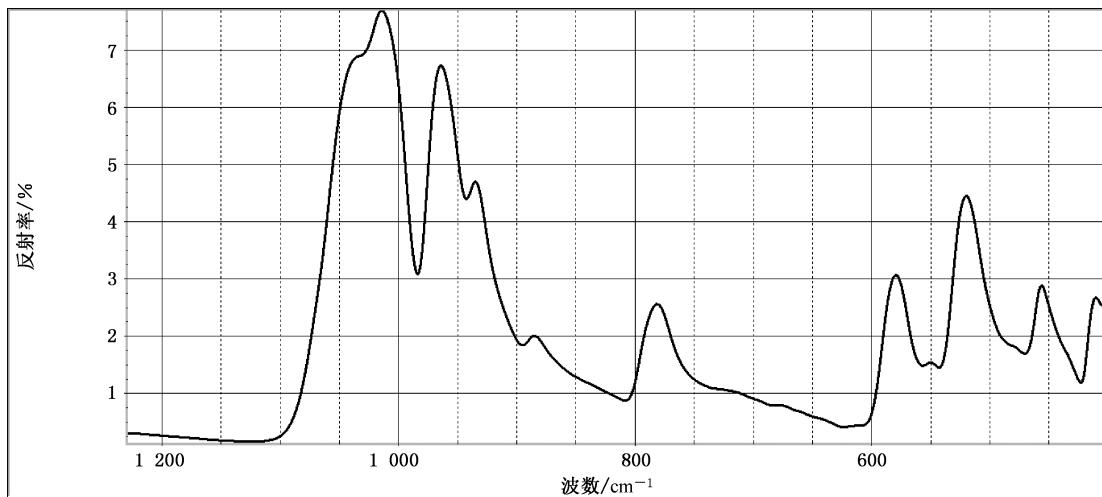


图 A.106 透视石的红外反射谱图指纹区部分

A.2.40 蓝柱石

蓝柱石红外反射谱图,见图 A.107。

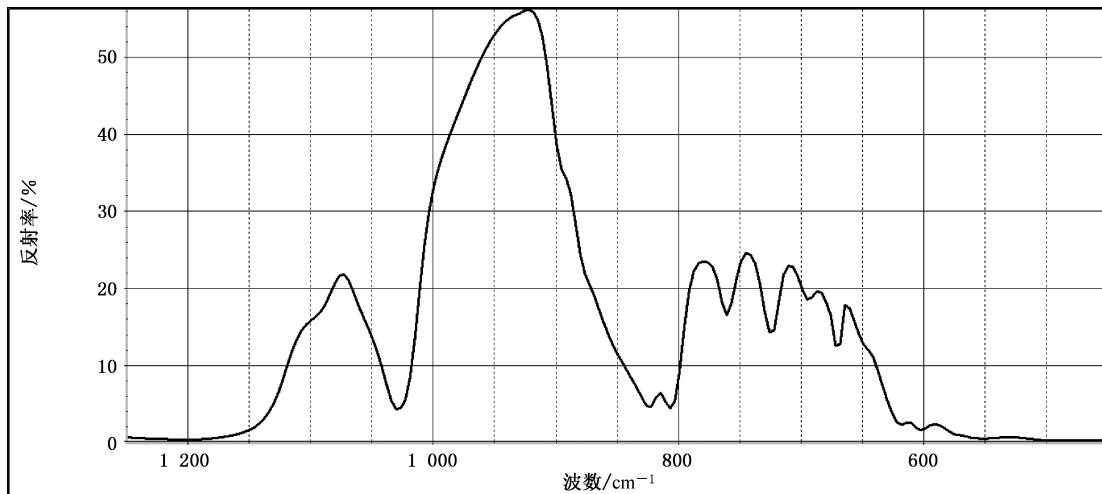


图 A.107 蓝柱石红外反射谱图

A.2.41 赛黄晶

赛黄晶的红外反射谱图,见图 A.108。

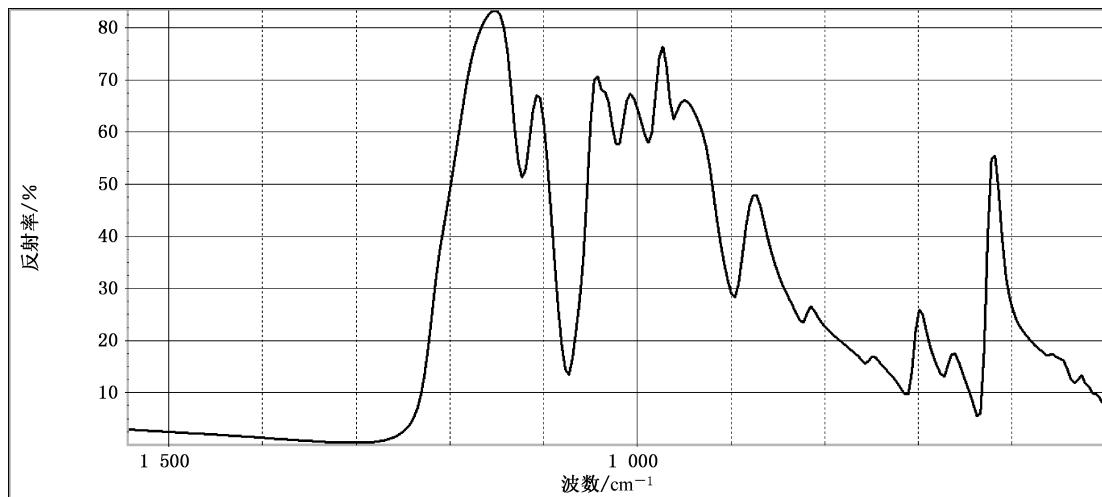


图 A.108 赛黄晶的红外反射谱图

赛黄晶的红外透射谱图,见图 A.109。因含水矿物包裹体(可为亚显微尺寸)的存在而引起相关的锐峰。

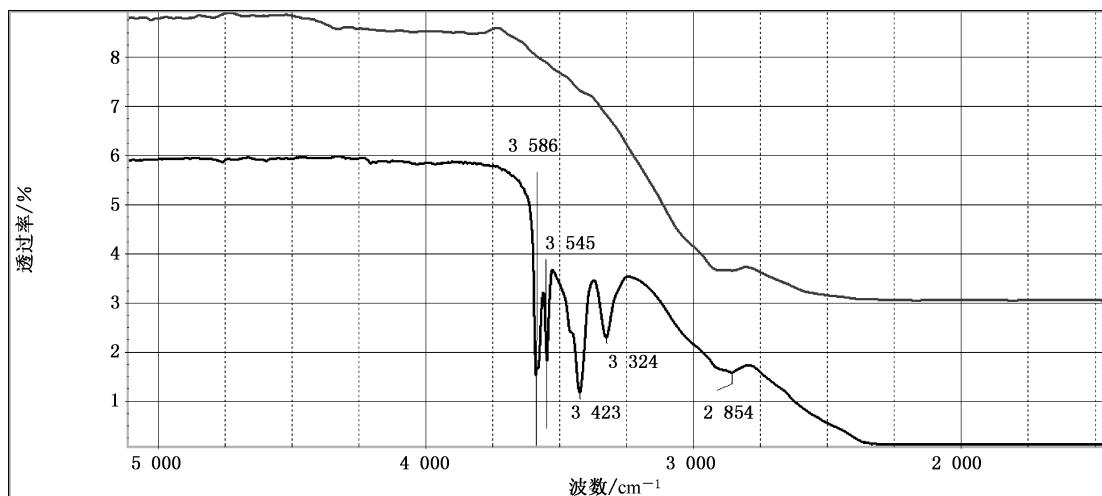


图 A.109 赛黄晶的红外透射谱图

A.2.42 硅铍石

硅铍石的红外反射谱图,见图 A.110。

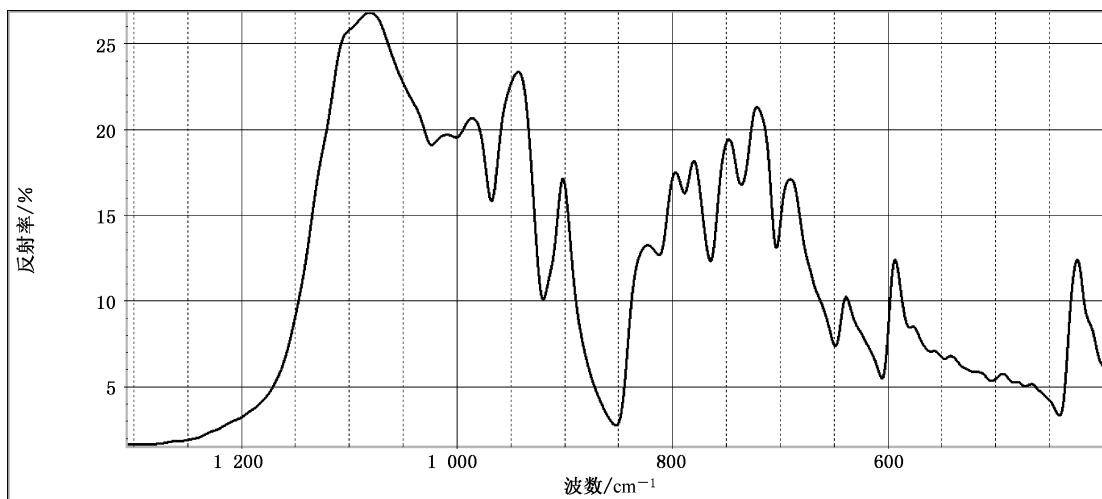


图 A.110 硅铍石的红外反射谱图

A.2.43 硬玉

硬玉的红外反射谱图,见图 A.111。

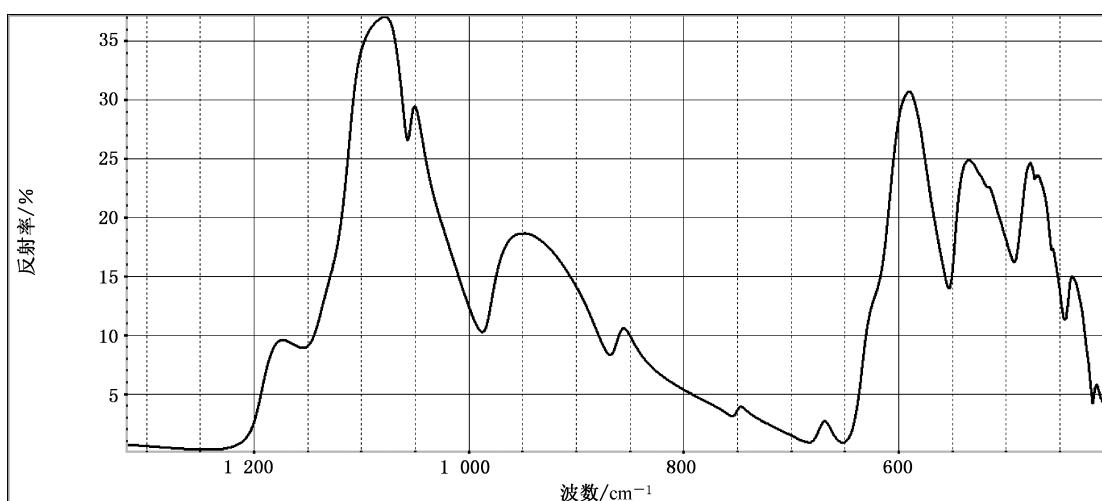


图 A.111 硬玉的红外反射谱图

翡翠的红外透射谱图,见图 A.112。

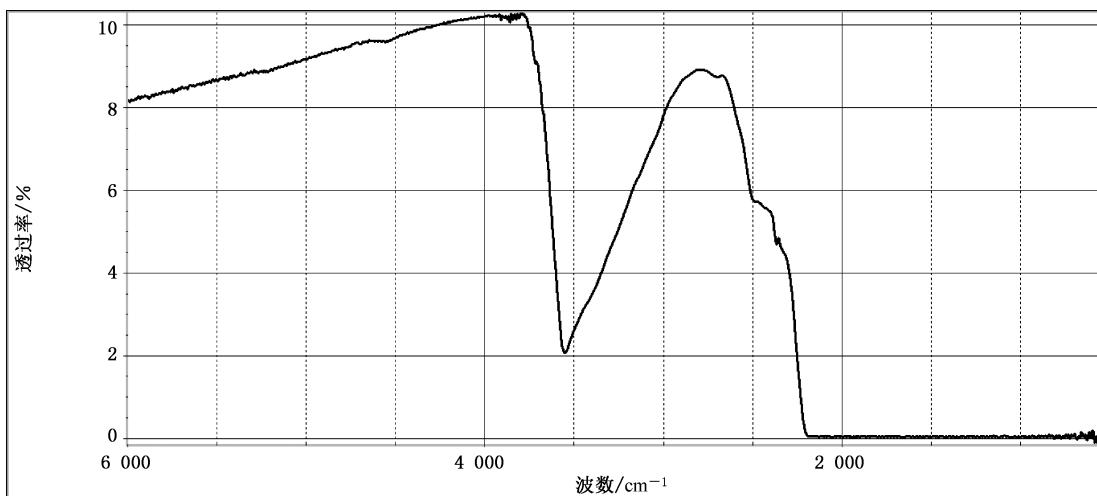


图 A.112 翡翠的红外透射谱图

当翡翠中带有含水(和/或 OH⁻)矿物时,其红外透射谱图可呈现相关的吸收峰,见图 A.113。

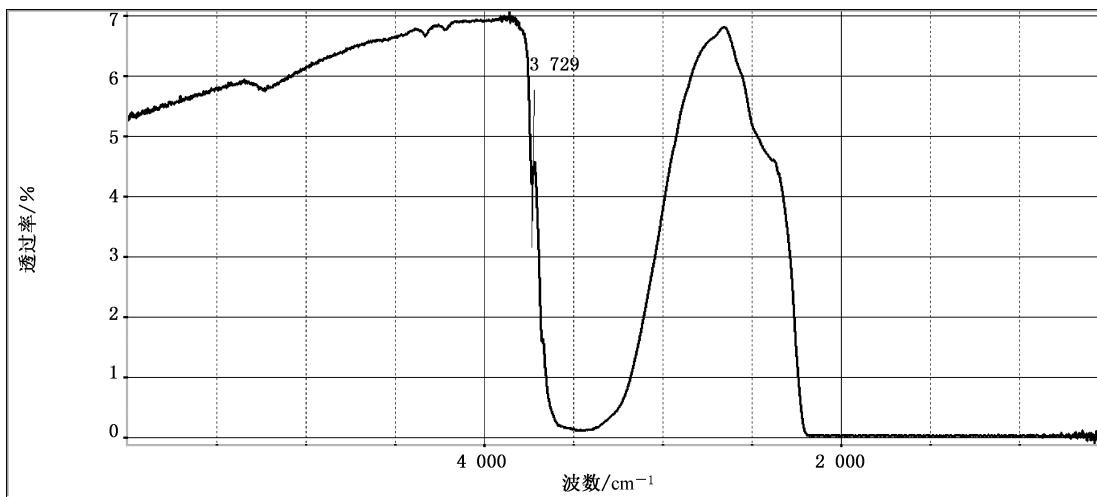


图 A.113 有的翡翠红外透射谱图中反映出某些含水矿物的迹象

当翡翠中含有角闪石族等矿物时,在 $4\ 500\text{ cm}^{-1}\sim4\ 100\text{ cm}^{-1}$ 范围内常有吸收,在 $3\ 800\text{ cm}^{-1}\sim3\ 600\text{ cm}^{-1}$ 范围内可呈现与水(和/或 OH⁻)有关的吸收,见图 A.114。

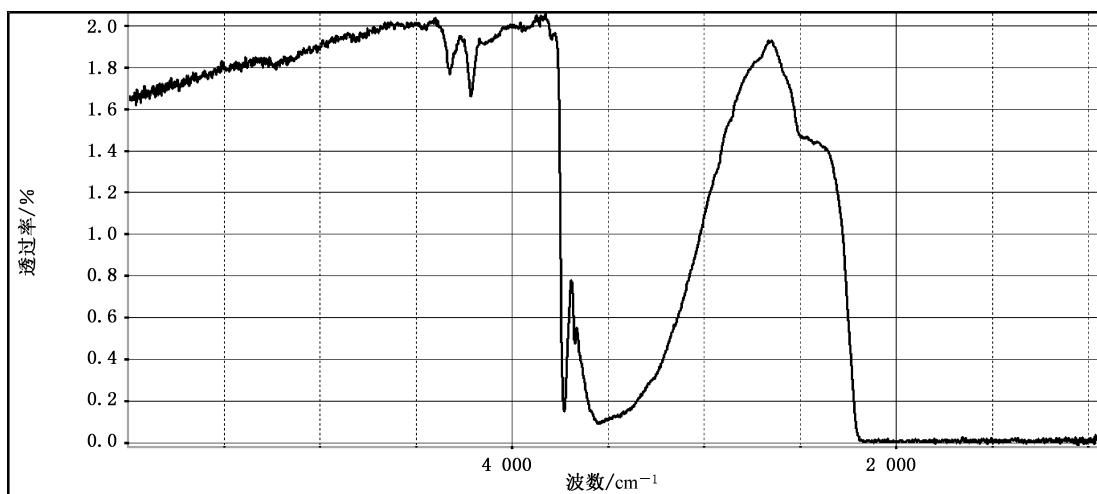
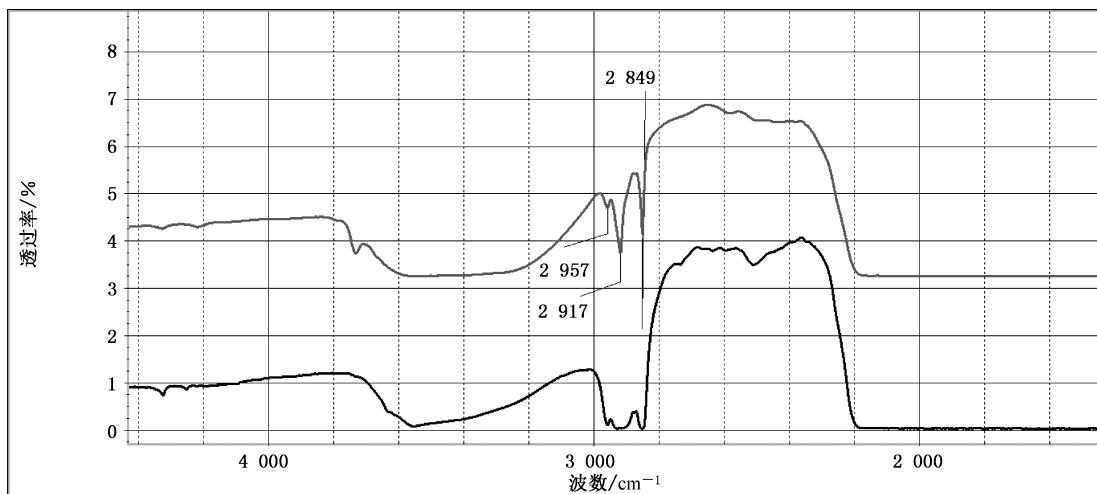


图 A.114 采自含角闪石矿物的翡翠的红外透射谱图

当测试翡翠的光路中存在与 $-\text{CH}_3$ 以及 $-\text{CH}_2-$ 有关的物质,如机器防锈油、大气中未知有机挥发物、人员体脂、无色油、有色油、各色的蜡等时,谱图往往会在 $2\ 960\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 920\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 850\text{ cm}^{-1}$ 左右呈现吸收峰,见图 A.115。

图 A.115 光路中存在含 $-\text{CH}_3$ 以及 $-\text{CH}_2-$ 结构物质的翡翠的红外透射谱图

当翡翠经漂白、充填后,其红外透射谱图具 $4\ 062\text{ cm}^{-1}$ 、 $3\ 055\text{ cm}^{-1}$ 、 $3\ 035\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 965\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 930\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 872\text{ cm}^{-1}$ 等跟苯环及 $-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ 与苯环结构耦合偏移(即人工树脂充填物)引发的一组吸收谱带,见图 A.116。

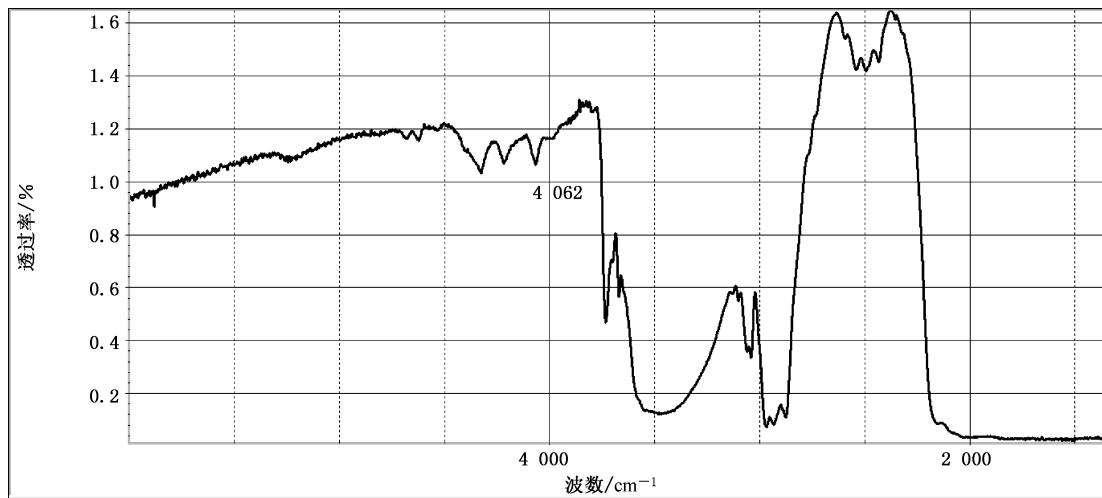


图 A.116 经漂白、充填的翡翠红外透射谱图具跟苯环及 $-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ 与苯环耦合引发的一组吸收谱带

跟苯环及 $-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ 与苯环结构耦合偏移(即人工树脂充填物)引发的一组吸收谱带在翡翠红外透射谱图中的常见典型表现,见图 A.117。

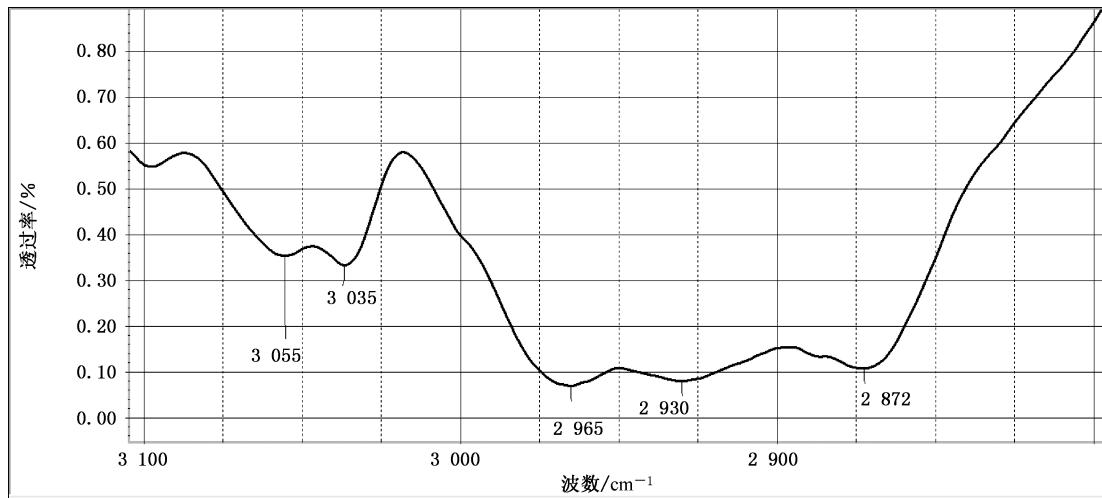


图 A.117 翡翠经漂白、充填处理后呈现的 $3\ 055, 3\ 035, 2\ 965, 2\ 930, 2872\ \text{cm}^{-1}$ 跟苯环及 $-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ 与其耦合偏移引发的一组吸收谱带

当充填翡翠中的人工树脂比例较大,红外透射谱图中本应常呈现的 $3\ 055\ \text{cm}^{-1}, 3\ 035\ \text{cm}^{-1}, 2\ 965\ \text{cm}^{-1}, 2\ 930\ \text{cm}^{-1}, 2\ 872\ \text{cm}^{-1}$ 等吸收谱带因全(或强)吸收被淹没而难以识别,大致位于 $4\ 060\ \text{cm}^{-1}, 4\ 620\ \text{cm}^{-1}, 4\ 680\ \text{cm}^{-1}$ 和 $5\ 980\ \text{cm}^{-1}$ 处的吸收峰提供了经漂白、充填的证据,见图 A.118。

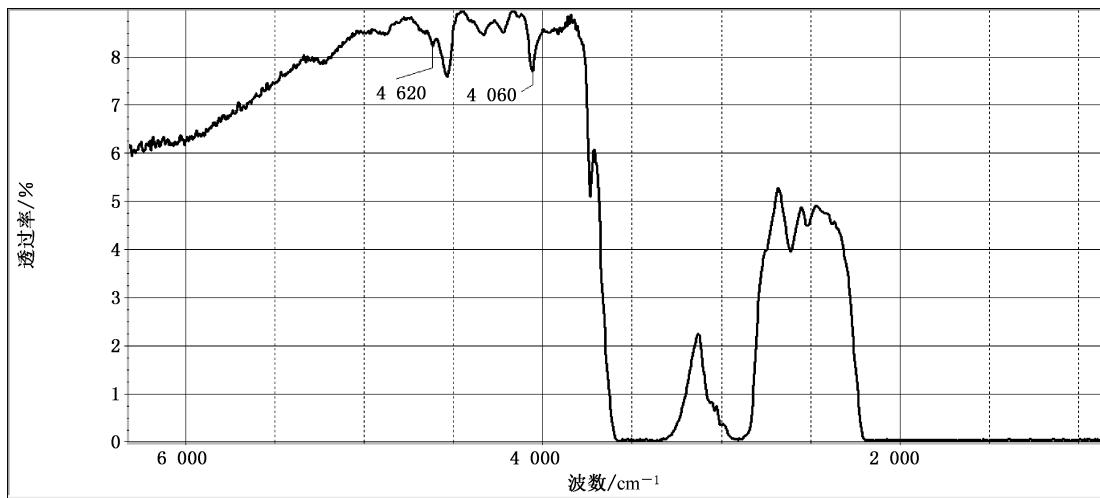
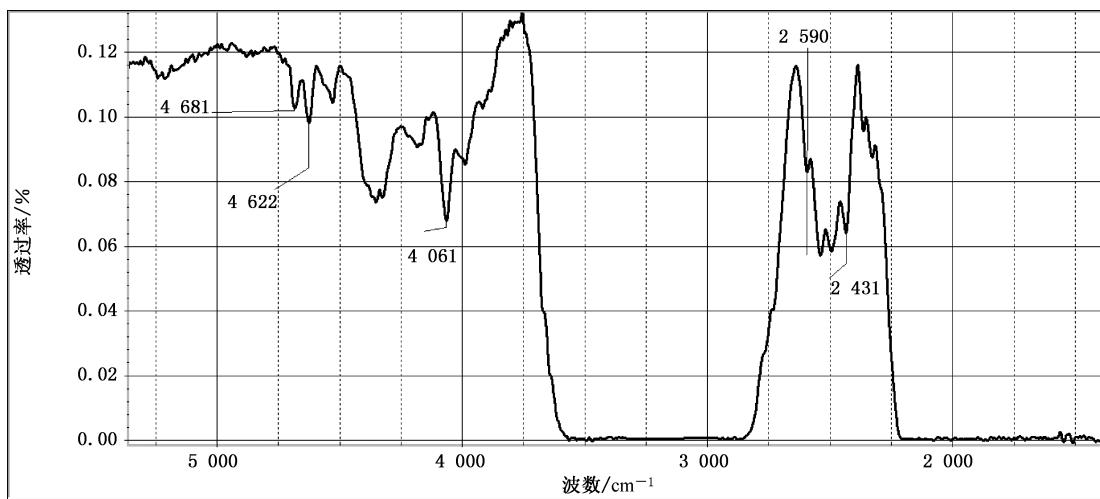


图 A.118 采自经大量人工树脂充填的翡翠的红外透射谱图

当样品吸收较强导致 $3\ 600\text{ cm}^{-1}\sim2\ 800\text{ cm}^{-1}$ 范围内趋于全吸收时,红外透射谱图 $3\ 055\text{ cm}^{-1}$ 、 $3\ 035\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 965\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 930\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\ 872\text{ cm}^{-1}$ 等吸收谱带均被淹没,大致位于 $4\ 060\text{ cm}^{-1}$ 、 $4\ 620\text{ cm}^{-1}$ 、 $4\ 680\text{ cm}^{-1}$ 和 $5\ 980\text{ cm}^{-1}$ 处的吸收峰以及 $2\ 600\text{ cm}^{-1}\sim2\ 400\text{ cm}^{-1}$ 范围内的强吸收峰提供了翡翠经漂白、充填处理的证据,见图 A.119。

图 A.119 因 $3\ 600\text{ cm}^{-1}\sim2\ 800\text{ cm}^{-1}$ 范围内强吸收湮埋掉部分特征峰的漂白、充填翡翠的红外透射谱图

A.2.44 绿辉石

绿辉石的红外反射谱图,见图 A.120。

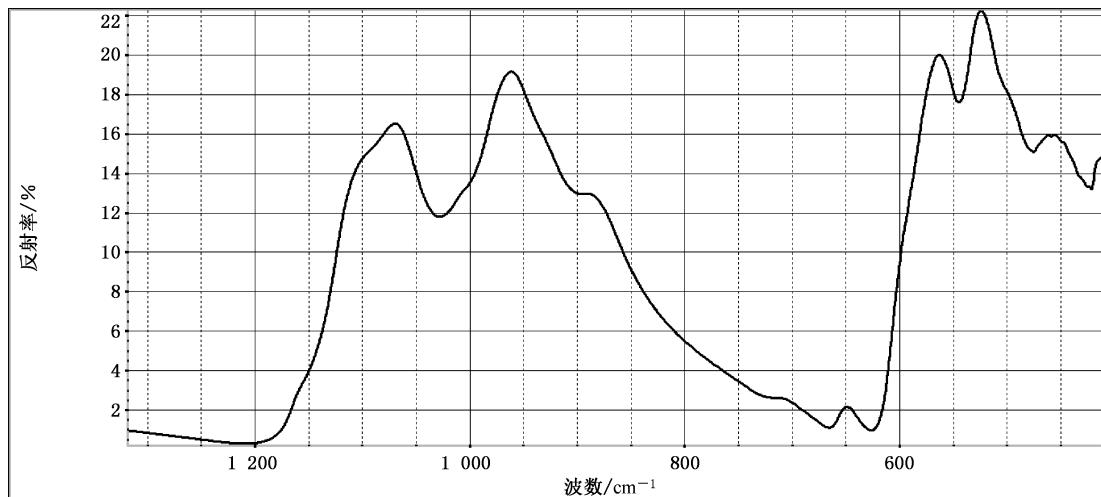


图 A.120 绿辉石的红外反射谱图

绿辉石矿物集合体的红外透射谱图,见图 A.121,相比以硬玉为主要矿物的翡翠的红外透射谱图(见图 A.112~图 A.114),绿辉石谱图 $3\ 500\text{ cm}^{-1}\sim2\ 000\text{ cm}^{-1}$ 范围内透过率最强峰值频率较低。

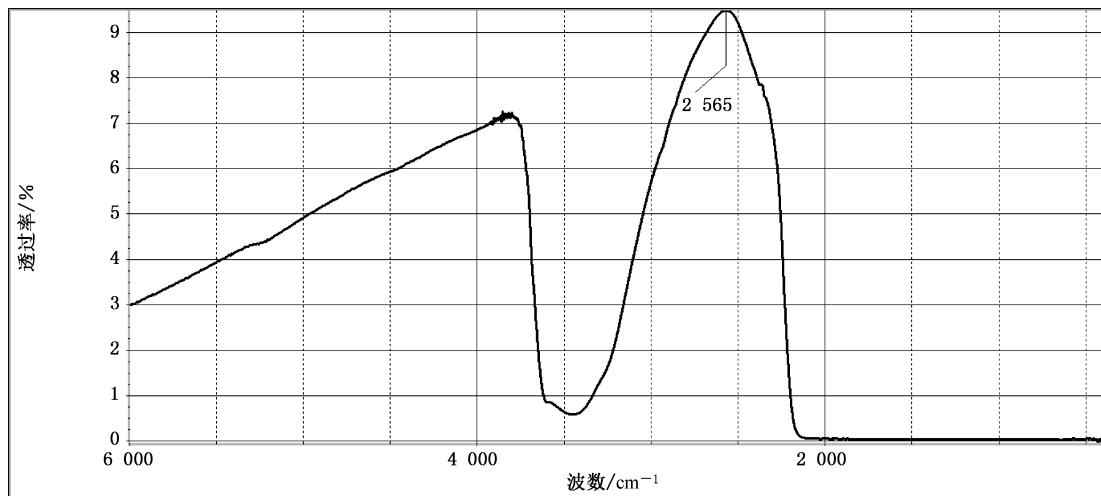


图 A.121 绿辉石红外透射谱图

A.2.45 软玉

软玉的红外反射谱图,见图 A.122。

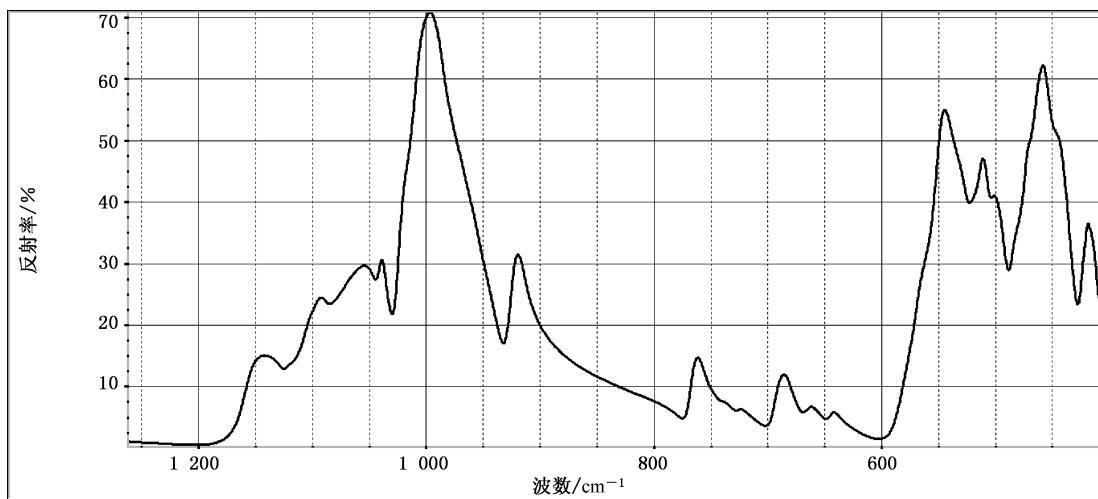


图 A.122 软玉的红外反射谱图

软玉的红外透射谱图,见图 A.123。

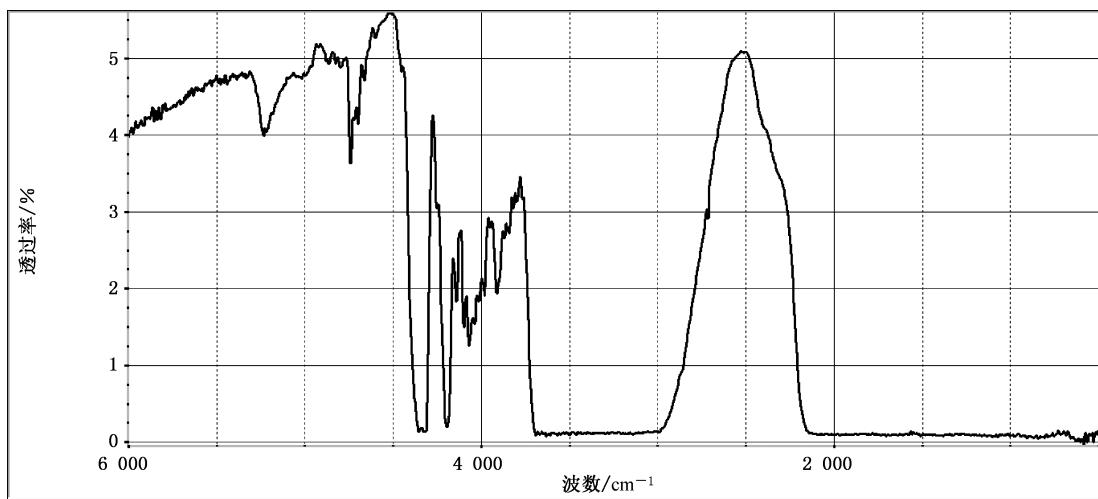


图 A.123 软玉的红外透射谱图

A.2.46 欧泊(玻璃态)

欧泊成分为含水的二氧化硅,其反射红外谱图表现为以 Si-O 键为典型的特征,即 $1\ 200\text{ cm}^{-1}\sim900\text{ cm}^{-1}$ 范围内呈强反射谱带。作为非晶态宝石,跟石英(见 A.2.12)不同,欧泊在 $1\ 200\text{ cm}^{-1}\sim900\text{ cm}^{-1}$ 范围内和 800 cm^{-1} 左右的谱带均无分裂。但由于内部结构的二氧化硅小球出现了规律性排列,即呈现似晶态, $1\ 200\text{ cm}^{-1}\sim900\text{ cm}^{-1}$ 范围内谱带常呈肩状,即 $1\ 200\text{ cm}^{-1}\sim900\text{ cm}^{-1}$ 范围内谱带呈现由一个谱带向分裂为两个谱带过渡的形状,见图 A.124。

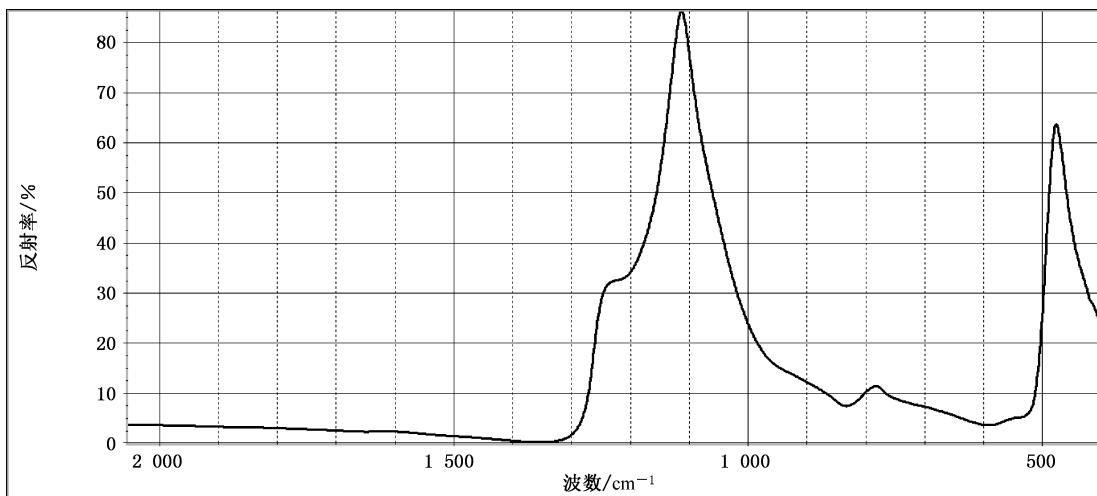


图 A.124 欧泊的红外反射谱图

欧泊的化学成分常被表述为 $\text{SiO}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$,计入分子式中的水在 $1\ 650\text{ cm}^{-1}\sim1\ 600\text{ cm}^{-1}$ 范围有对应谱带,见图 A.125。

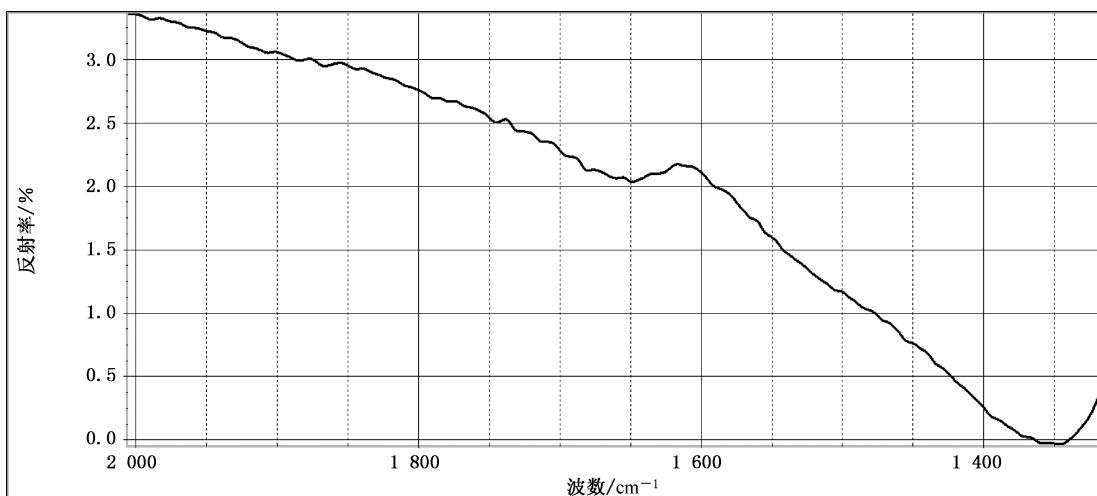


图 A.125 欧泊红外反射谱图呈现在 $1\ 650\text{ cm}^{-1}\sim1\ 600\text{ cm}^{-1}$ 范围内与 H_2O 有关的谱带

欧泊中的分子水在近红外区域呈现倍频和/或合频谱带,而在中红外区常常全吸收,见图 A.126。

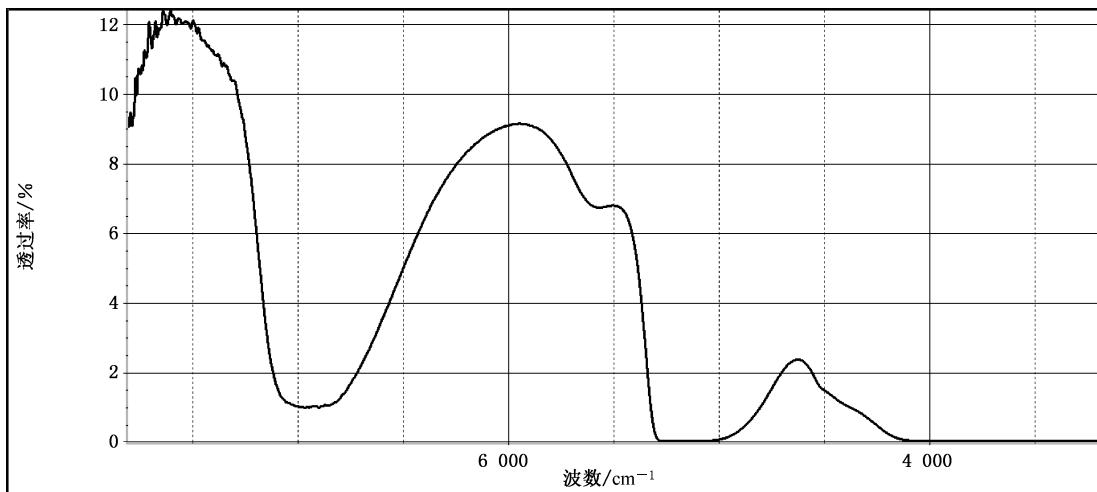


图 A.126 欧泊的近红外透射谱图

某些方法合成的欧泊因分子水含量较低,材料在中红外至长波近红外区有较高透过率,且与水有关的吸收相比图 A.126 显弱,见图 A.127。

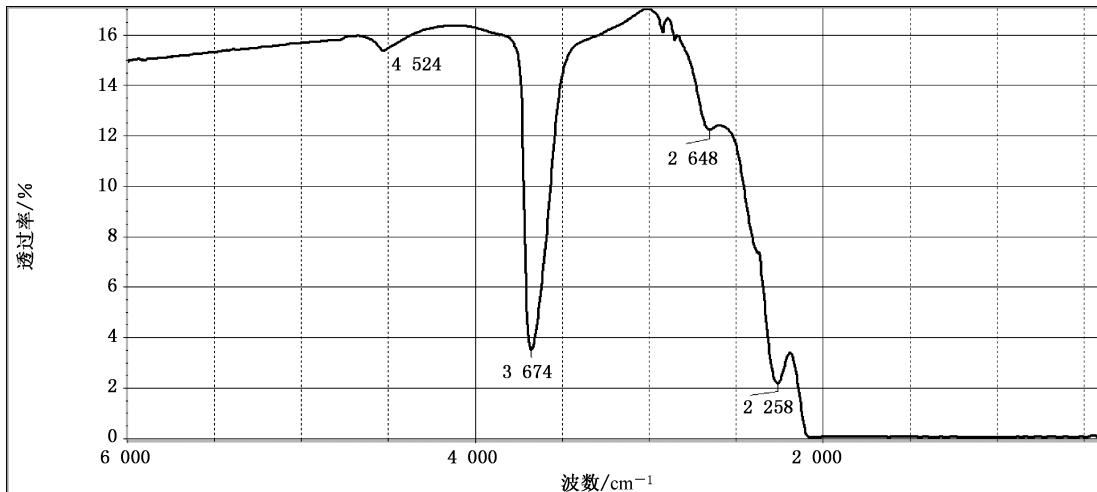


图 A.127 采自某方法合成的欧泊红外透射谱图

不同方法合成的欧泊分子水含量不同,有些方法合成品水含量与天然欧泊相似,对应的红外透射谱图也类似,见图 A.128,并参见图 A.126。

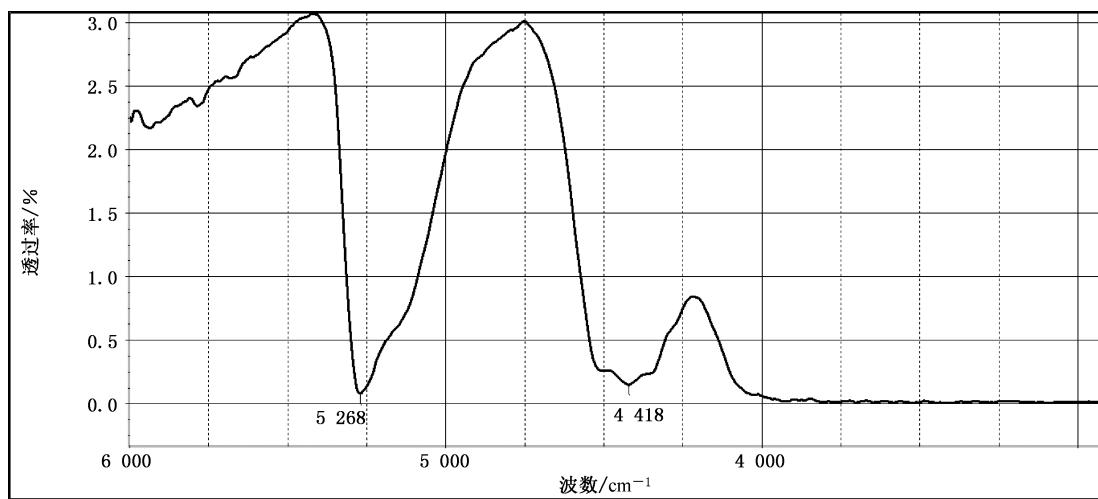


图 A.128 采自某方法合成欧泊的红外透射谱图与天然欧泊谱图相似

A.2.47 石英岩

石英岩因颗粒间隙水(及附存矿物羟基水)、晶体包含水(及羟基水)对红外光的吸收以及石英颗粒晶面对红外光的反射、折射、散射等作用导致进入仪器检测器的红外光能量衰减,常(并非必然)导致红外透射谱图在 $3\ 700\text{ cm}^{-1}\sim3\ 000\text{ cm}^{-1}$ 范围内吸收谱拟合为宽的圆化带,见图 A.129,而不同于巨晶石英在该区域可识别到多个吸收峰,再参见图 A.50。

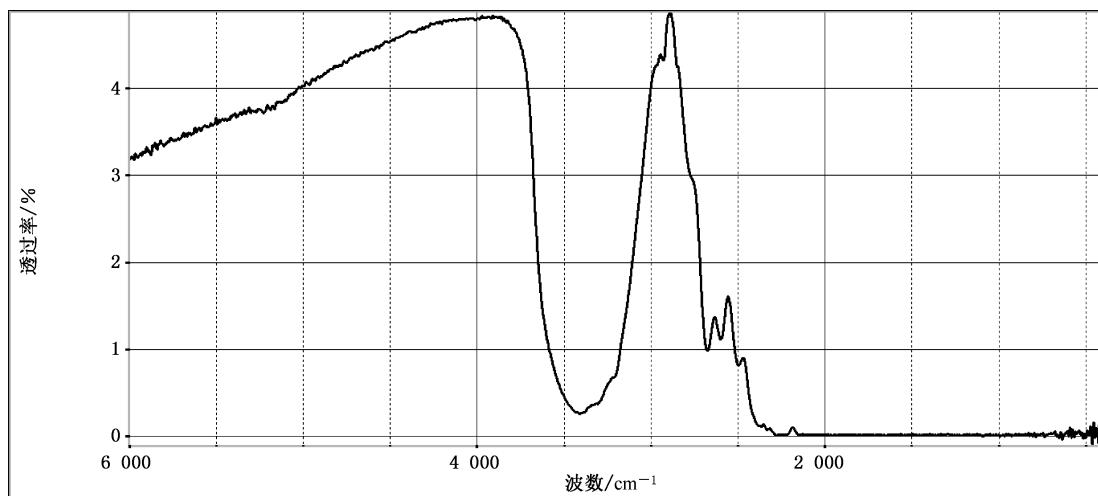


图 A.129 石英岩的红外透射谱图

当石英岩颗粒间隙对红外光衰减作用较弱(即对红外光透明度高),石英岩颗粒间隙浸有含水(和/或 OH^-)次生矿物时, $3\ 700\ \text{cm}^{-1}\sim3\ 600\ \text{cm}^{-1}$ 范围内可以呈现相关的吸收峰;此外石英岩颗粒间隙易(因加工工序或其他原因)污染或注入有机物,使得红外透射谱图常呈现与 $-\text{CH}_2-$ 及 $-\text{CH}_3$ 有关的吸收,见图 A.130。

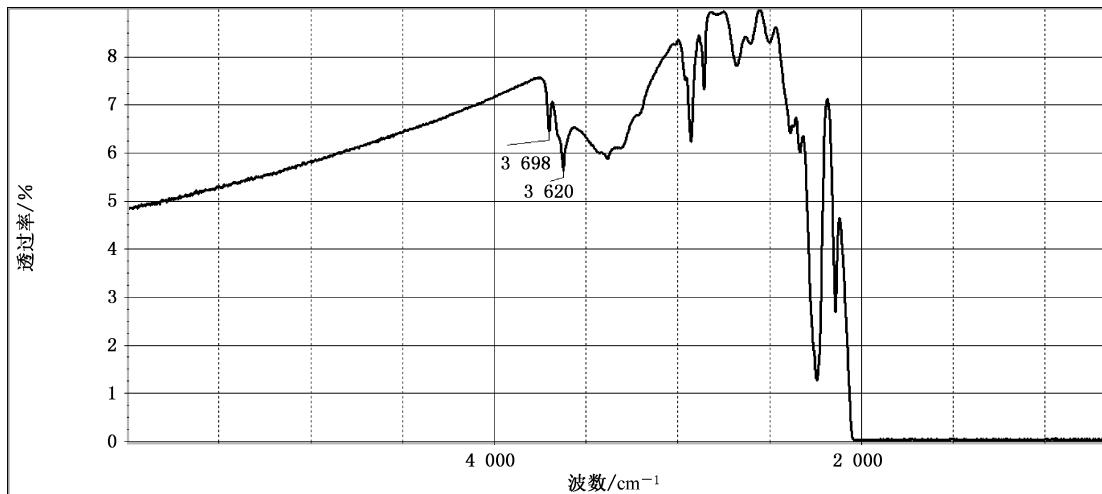


图 A.130 红外透光度较好的石英岩的红外透射谱图

经(漂白)充填的石英岩与漂白、充填处理翡翠类似表现出与苯环及 $-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ 与苯环结构耦合偏移引发的一组吸收谱带,见图 A.131。

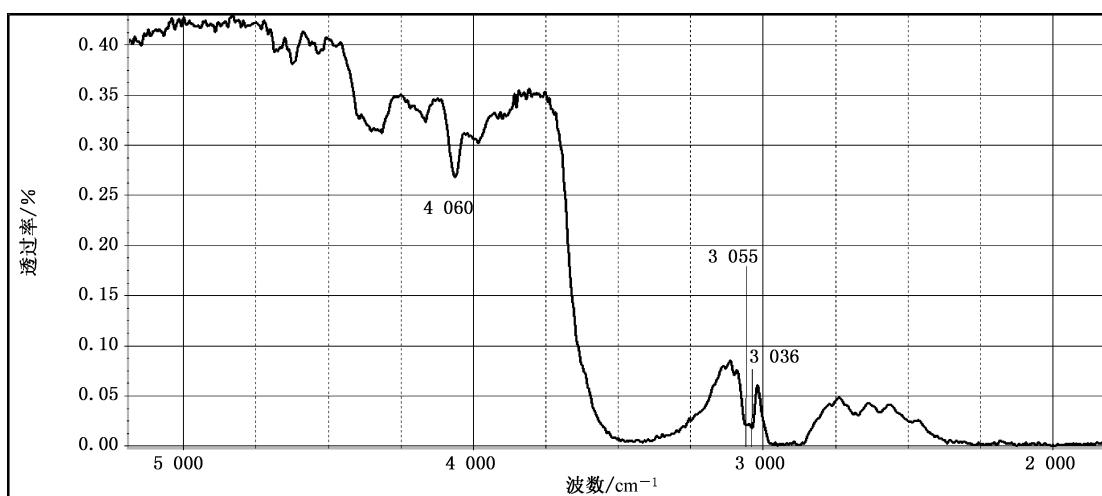


图 A.131 经(漂白)充填的石英岩的红外透射谱图

A.2.48 玉髓

呈隐晶质的石英因单位体积内的矿物颗粒、颗粒间隙较石英岩更多，晶体颗粒间隙水及微晶界面对红外光衰减更加强烈，因此宝石级玉髓在中红外区常(非必然)强吸收，甚至全吸收，而在近红外区呈现与欧泊类似的水的合频和/或倍频谱带，见图 A.132。

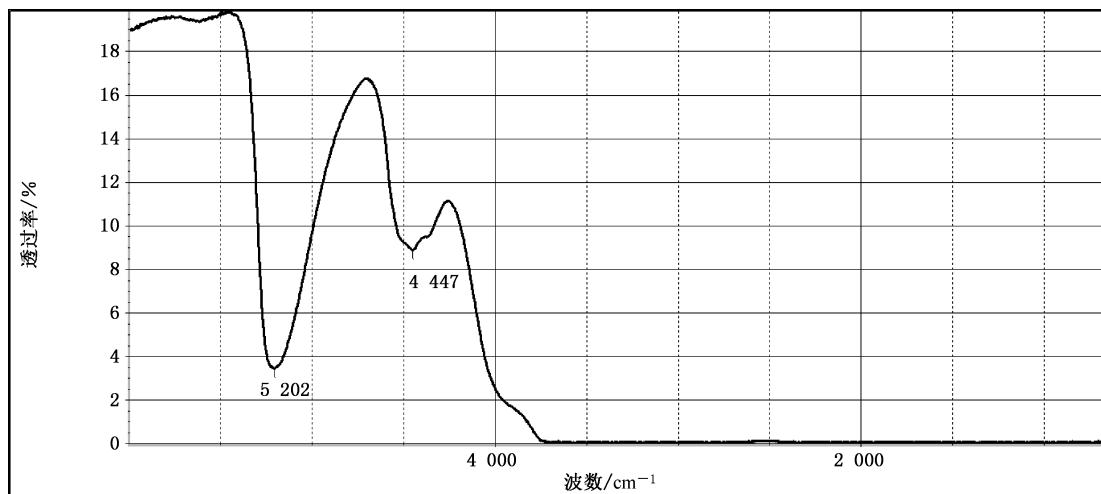


图 A.132 玉髓的红外透射谱图

当玉髓较薄时，微晶界面对红外光的衰减较弱，红外透射谱图在中红外区有明显的透过谱带，同时与水有关的吸收减弱，在较高透过率的谱带区会有所呈现，见图 A.133。

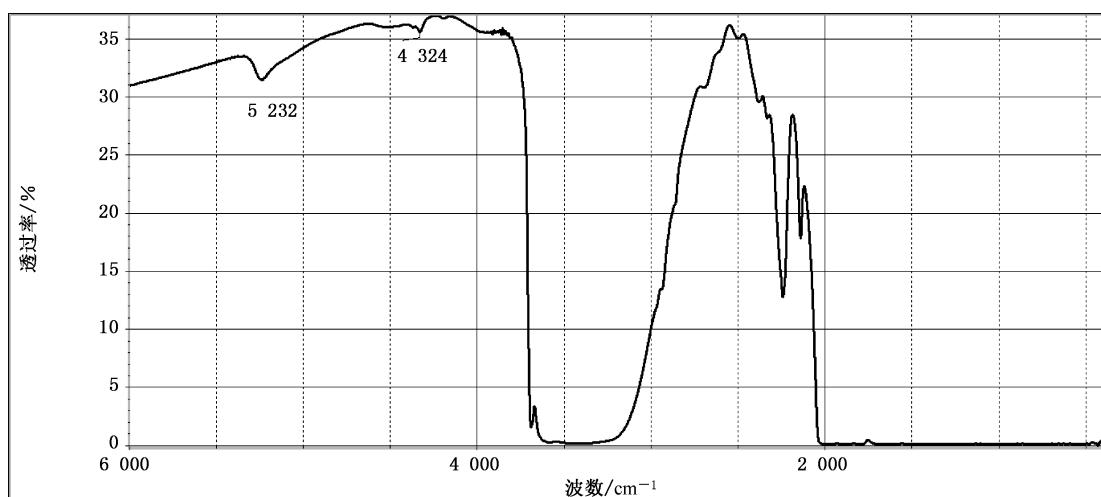


图 A.133 薄(厚度低于 3 mm)的玉髓的红外透射谱图

A.2.49 石英质玉(隐晶质-显晶质)

当石英颗粒尺寸介于数十个微米至亚毫米时,即石英呈隐晶质-显晶质集合体形态时,单位厚度矿物颗粒间隙的数量、赋存水的浓度均介于隐晶质石英与显晶质石英集合体之间,其红外透射谱图,即与上述因素相关的谱带表现为隐晶质石英与显晶质石英集合体谱图的过渡形式。如某些“黄龙玉”“南红”等。见图 A.134、图 A.135。

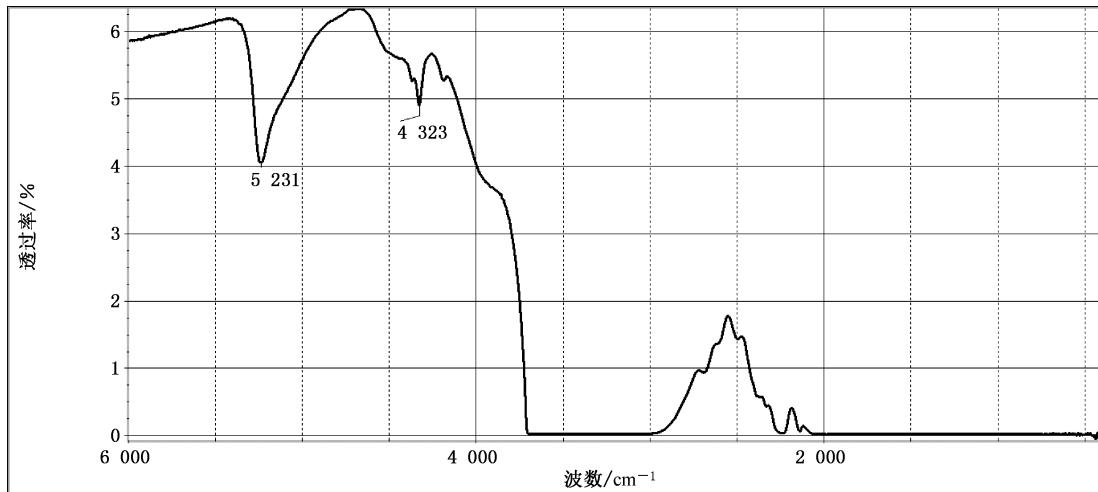


图 A.134 介于隐晶质和显晶质之间的石英质玉石的红外透射谱图

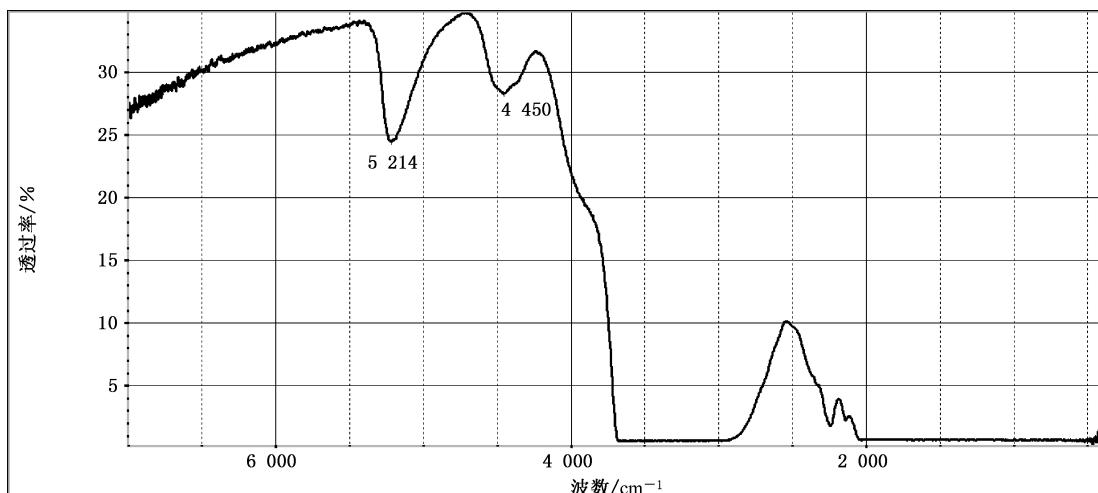


图 A.135 介于隐晶质和显晶质之间的石英质玉石的红外透射谱图

A.2.50 蛇纹石

半透明蛇纹石玉的红外反射谱图,见图 A.136。

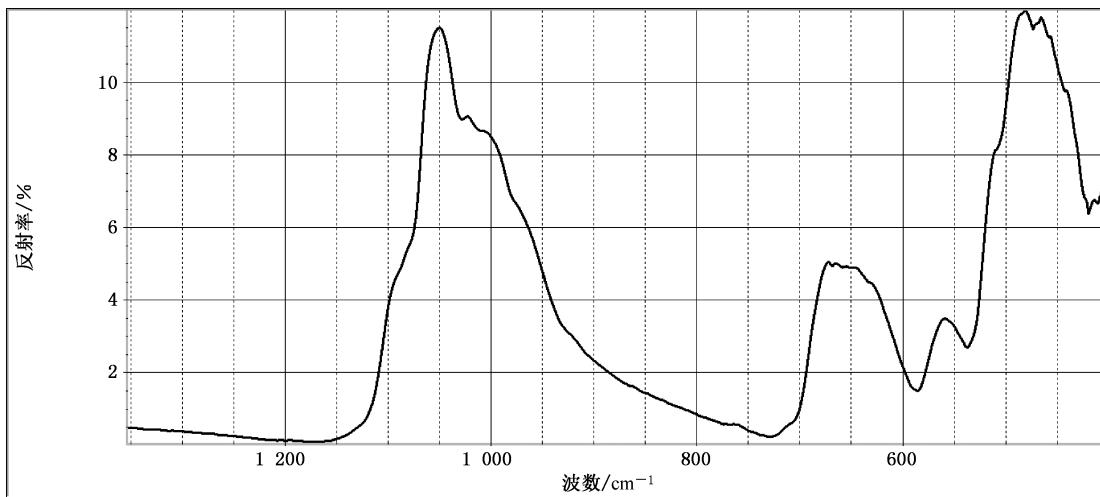


图 A.136 采自半透明蛇纹石的红外反射谱图

除了因亚种矿物的不同而导致蛇纹石谱图存在差异外,玉石的透明度对谱图形状也有较大影响,亚半透明-不透明蛇纹石玉红外反射谱图见图 A.137。但因为金属伴生矿物导致蛇纹石玉透明度降低为亚透明或不透明时,红外反射谱图参见图 A.136。

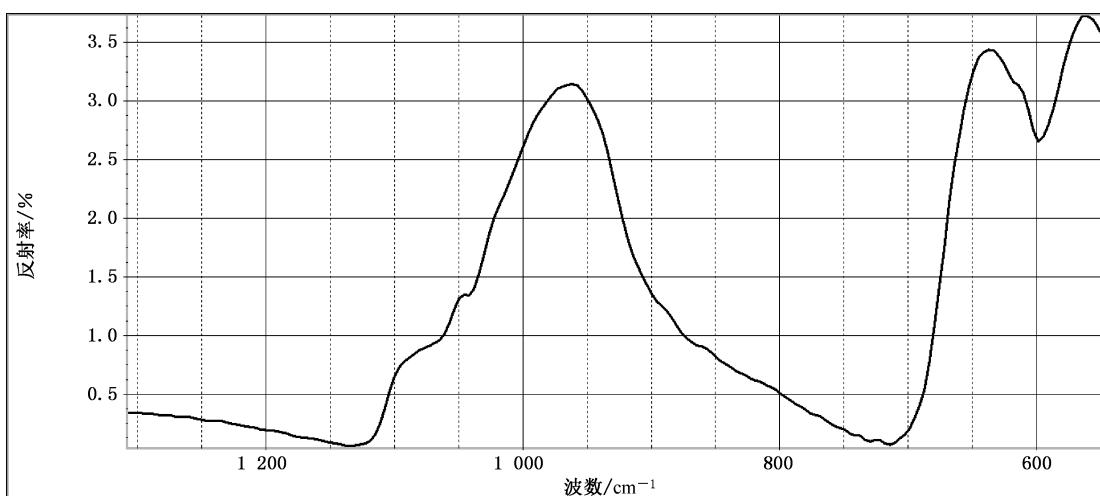


图 A.137 采自亚半透明蛇纹石玉的红外反射谱图

蛇纹石的红外透射谱图,见图 A.138。

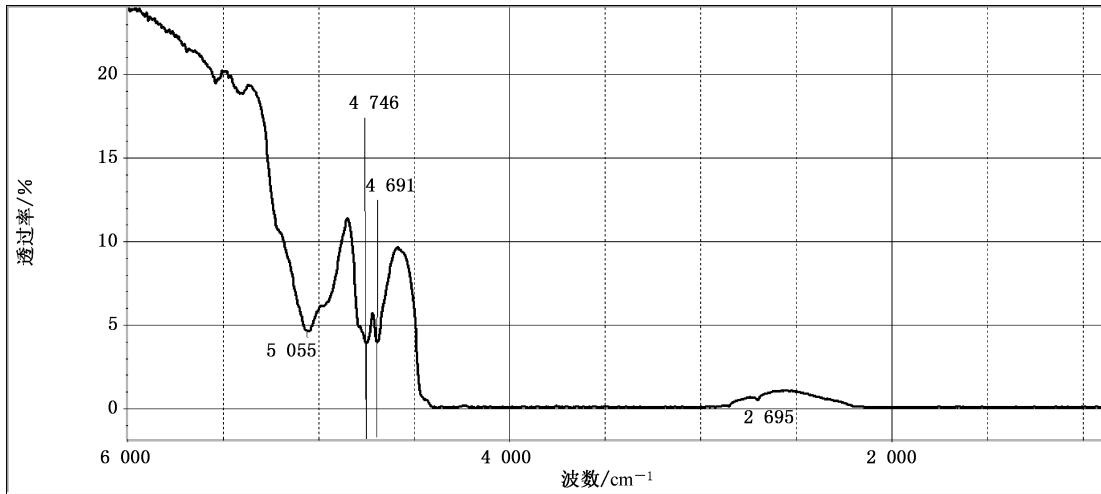


图 A.138 蛇纹石的红外透射谱图

A.2.51 查罗石

查罗石常伴有其他矿物,因此红外反射谱图常不稳定,但仍有一定参考意义,见图 A.139。

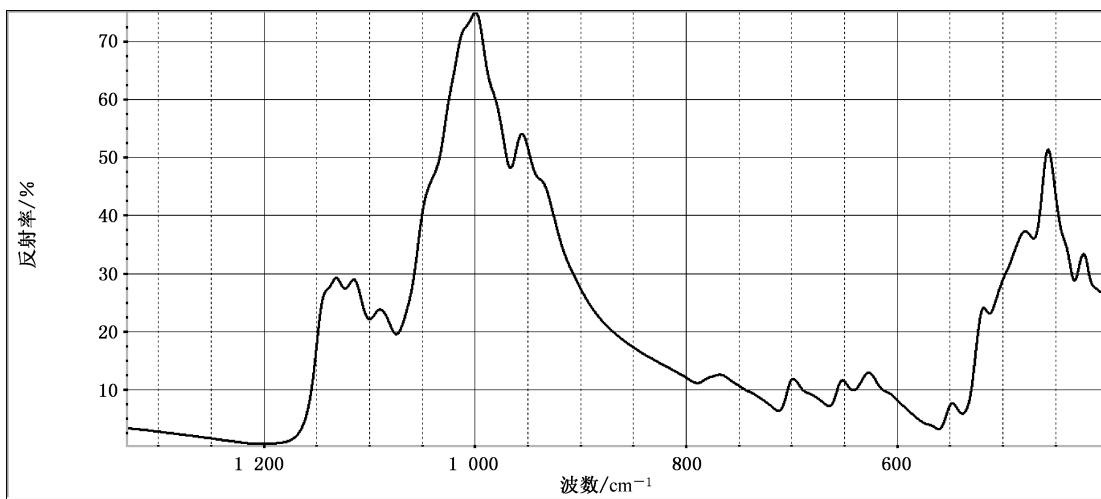


图 A.139 查罗石的红外反射谱图

A.2.52 蔷薇辉石

蔷薇辉石的红外反射谱图,见图 A.140。

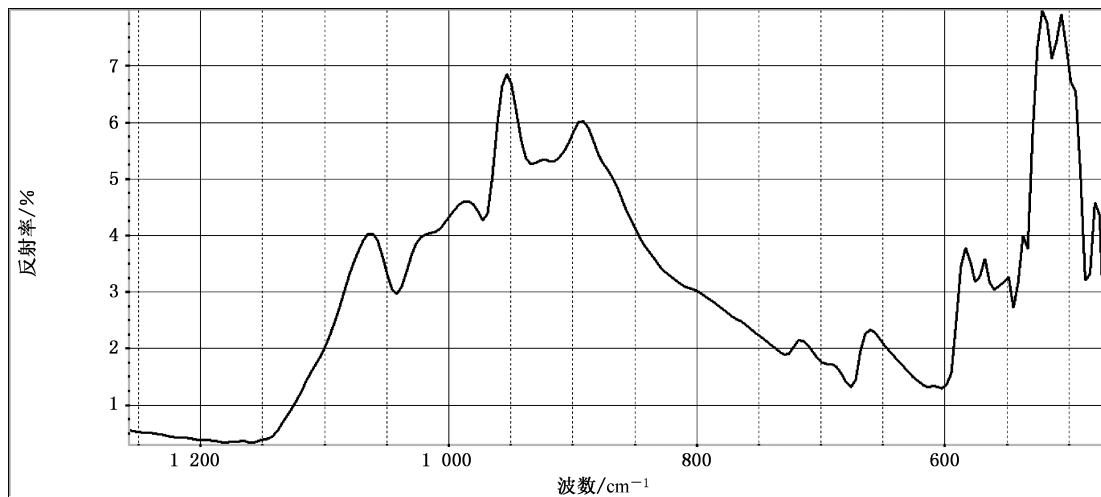


图 A.140 蔷薇辉石的红外谱图

A.2.53 阳起石

阳起石的红外谱图,见图 A.141。

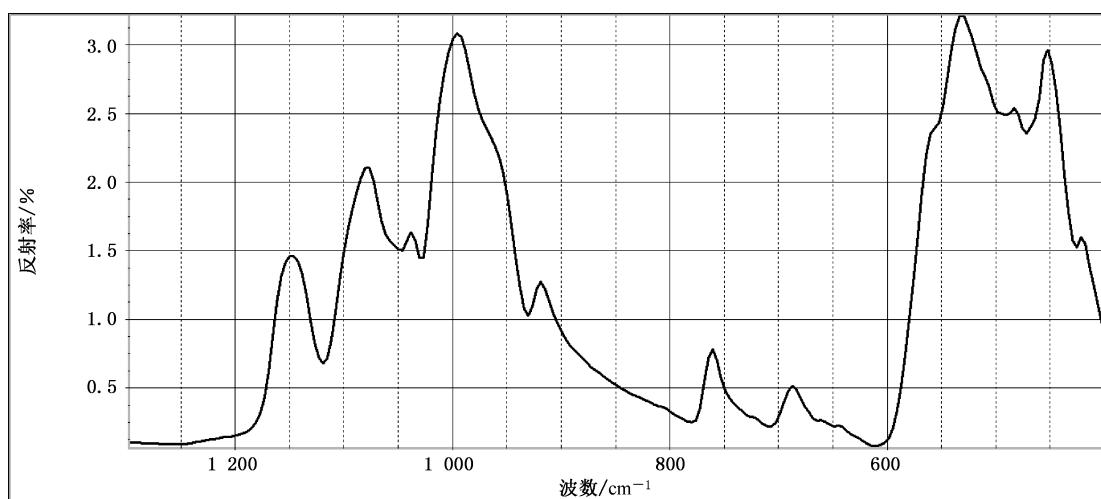


图 A.141 阳起石的红外反射谱图

A.2.54 绿松石

绿松石的红外反射谱图在 $3\ 600\text{ cm}^{-1}\sim3\ 000\text{ cm}^{-1}$ 范围内及 $1\ 700\text{ cm}^{-1}\sim1\ 600\text{ cm}^{-1}$ 范围内可见与 OH^- 及 H_2O 有关的谱带, 见图 A.142。

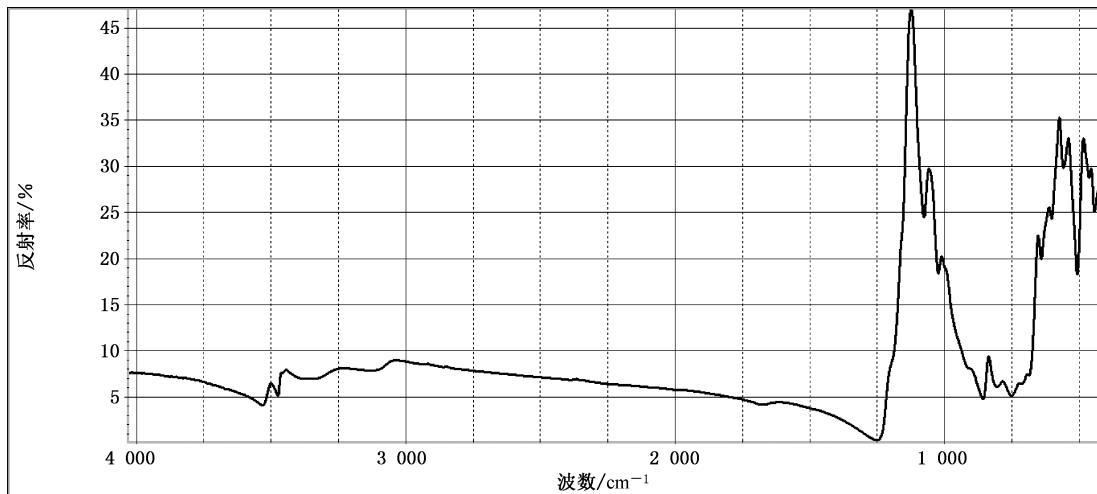


图 A.142 绿松石的红外反射谱图

对绿松石红外反射谱图进行 K-K 变换, 谱图呈现的 $3\ 600\text{ cm}^{-1}\sim3\ 400\text{ cm}^{-1}$ 范围内的锐峰、 $850\text{ cm}^{-1}\sim750\text{ cm}^{-1}$ 范围内的谱带与结构水 OH 有关, 而 $3\ 300\text{ cm}^{-1}\sim3\ 000\text{ cm}^{-1}$ 范围内及 $1\ 700\text{ cm}^{-1}\sim1\ 600\text{ cm}^{-1}$ 范围内谱带, 与 H_2O (吸附水及结晶水)有关, 图 A.143。

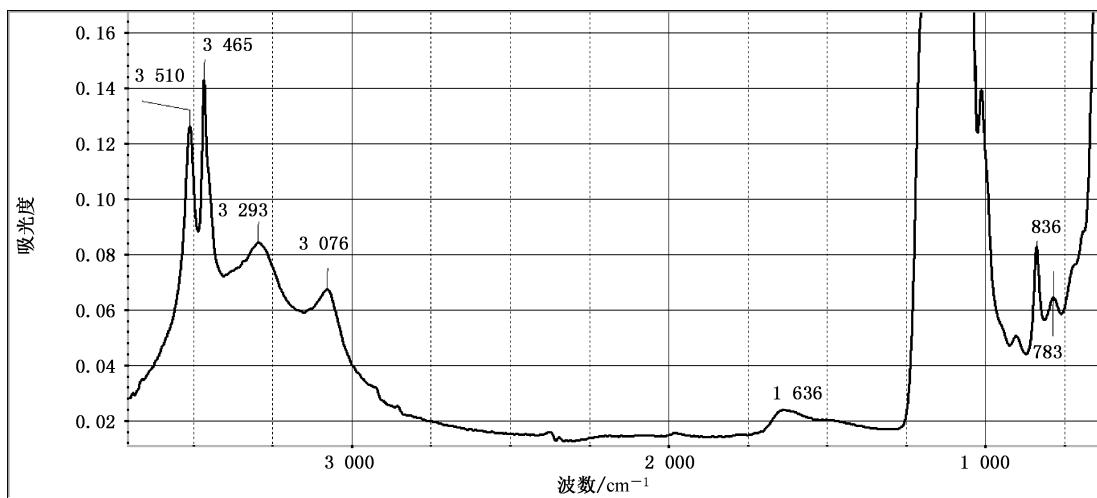


图 A.143 绿松石红外反射谱图中与水有关的谱带(经 K-K 变换)

经树脂充填的绿松石红外反射谱图,呈现 $1\ 750\text{ cm}^{-1}\sim1\ 700\text{ cm}^{-1}$ 范围内和/或 $1\ 550\text{ cm}^{-1}\sim1\ 450\text{ cm}^{-1}$ 范围内的谱带,见图 A.144。若经 K-K 变换,有利于对相关谱带的辨析。

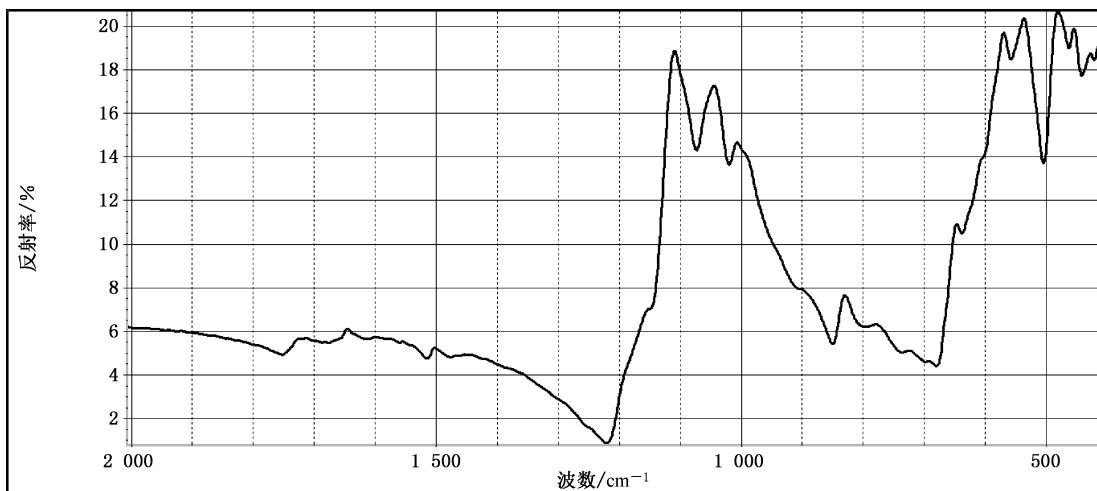
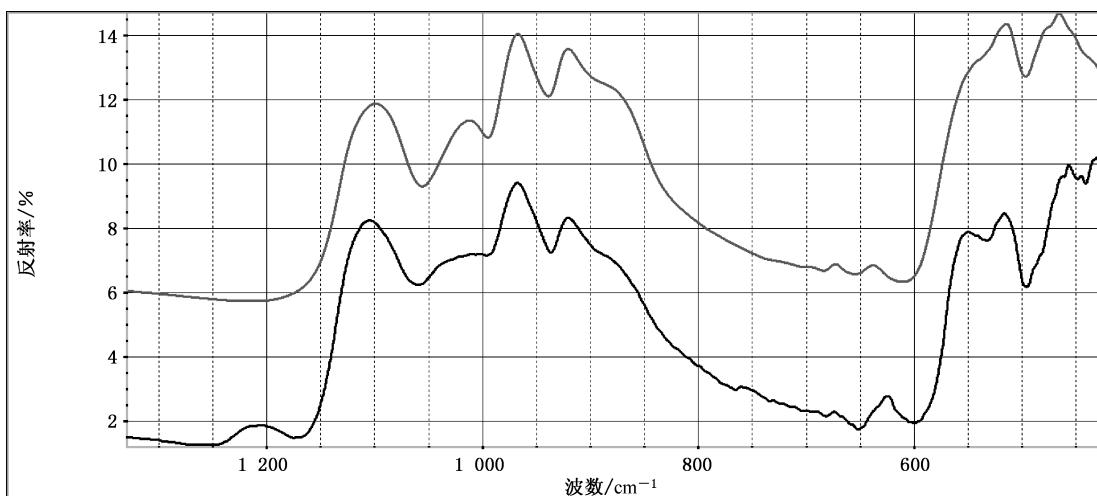


图 A.144 采自经树脂充填的绿松石的红外反射谱图

A.2.55 青金石

因青金石微晶方向的随机性,其红外反射谱图在 $1\ 100\text{ cm}^{-1}\sim900\text{ cm}^{-1}$ 范围与 Si-O 键相关的谱带较为稳定,当附加阴离子中存在 $(\text{SO}_4)^{2-}$ 时,谱图会呈现 $1\ 200\text{ cm}^{-1}$ 左右的谱带。见图 A.145。



注:上谱线未识别到与 $(\text{SO}_4)^{2-}$ 有关的谱带;下谱线呈现 $1\ 200\text{ cm}^{-1}$ 左右的谱带与 $(\text{SO}_4)^{2-}$ 有关

图 A.145 青金石的红外反射谱图

A.2.56 孔雀石

孔雀石红外反射谱图在 $850\text{ cm}^{-1}\sim 800\text{ cm}^{-1}$ 范围内谱带的相对强弱与方向性有关(入射光与集合体针状、放射状、纤维状晶体延长方向间的角度不同),见图 A.146。

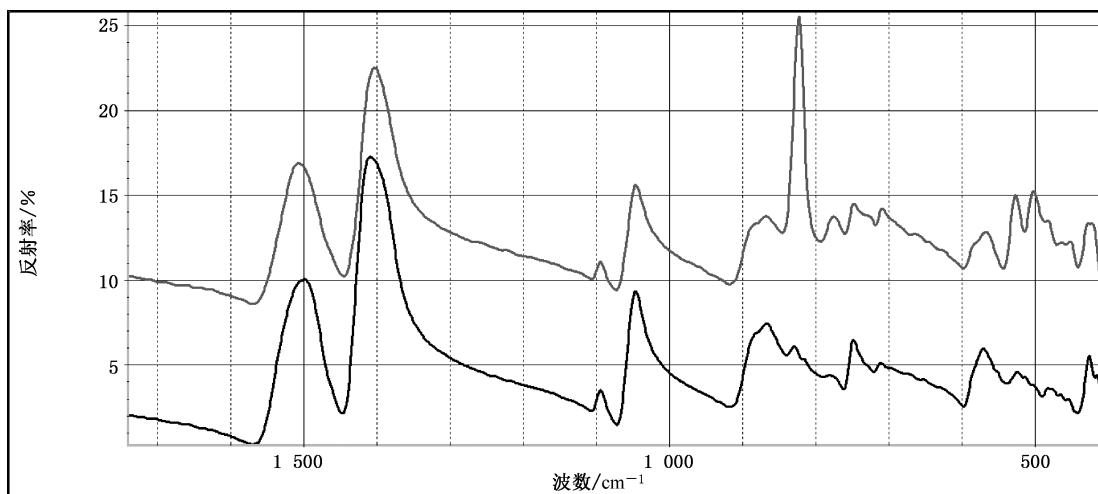


图 A.146 孔雀石的红外反射谱图

A.2.57 葡萄石

葡萄石的红外反射谱图,见图 A.147。葡萄石集合体放射状晶体延长方向与红外入射光的角度不同,使谱图产生差异。

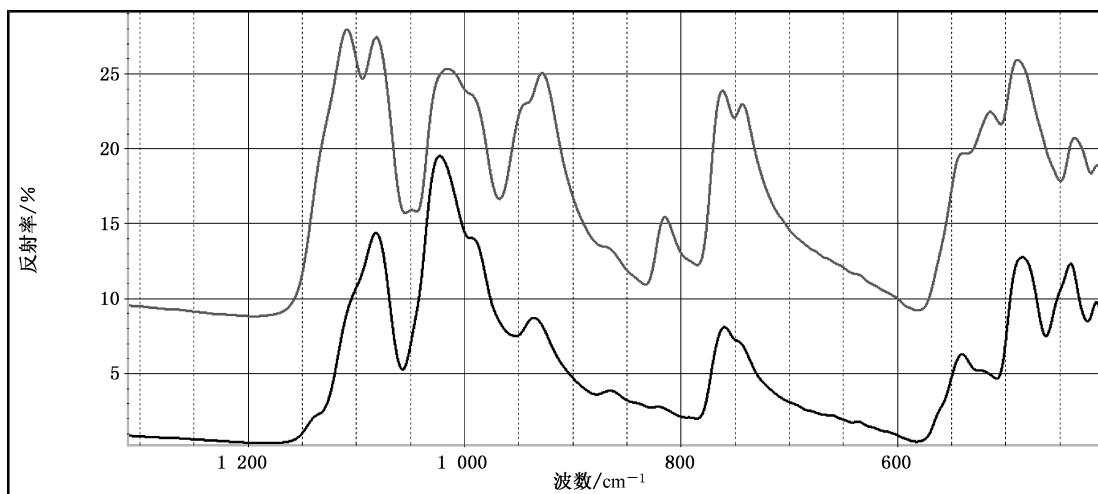


图 A.147 采自放射状集合体葡萄石同一个样品的不同方向的红外反射谱图

当葡萄石呈细粒状集合体,且晶体颗粒结晶学方向随机分布时,借助较大入射光斑采集到的红外反射谱图,相比较大颗粒呈放射状集合体具有一定结晶学方向的样品谱图,多个谱带发生拟合,见图 A.148。

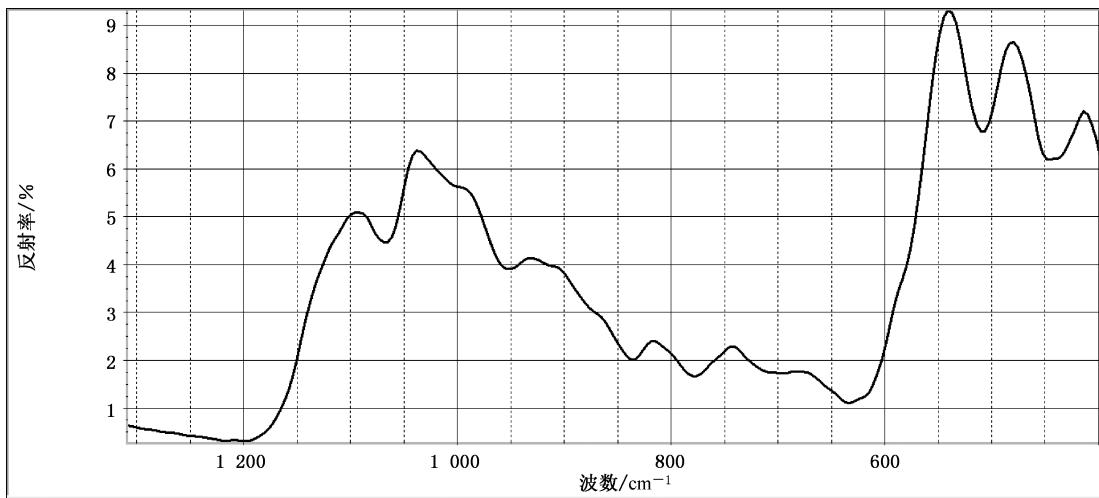


图 A.148 致密块状葡萄石的红外反射谱图

A.2.58 萤石

氟化钙因与中红外光谱仪探测器窗片溴化钾极性相当,因此在中红外区有良好的透光性,自较长波的近红外区远至 500 cm⁻¹ 均无特征吸收,因此采用反射法采集氟化钙材料往往难以获得明显的反射或吸收峰。但是萤石矿物中常含有多氟络合阴离子,如(BF₄)⁻、(SiF₆)⁻、(AlF₆)⁻ 等,会在接近远红外的区域产生强吸收,有时,强吸收可延伸至 1 100 cm⁻¹ 左右,见图 A.149。

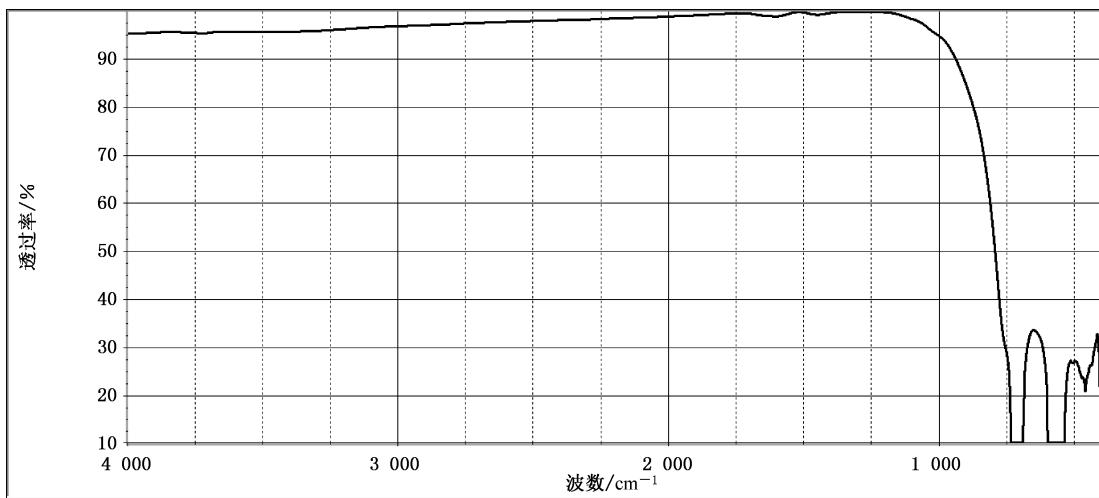


图 A.149 含多氟络离子的萤石片的红外透射谱图

厚大的萤石矿物中或多或少会含有一定的分子水或以包裹体形式存在羟基水, 所以其红外透射谱图中除了与多氟络离子有关的强吸收带外, 其他吸收特征基本与水(和/或羟基)有关, 见图 A.150。

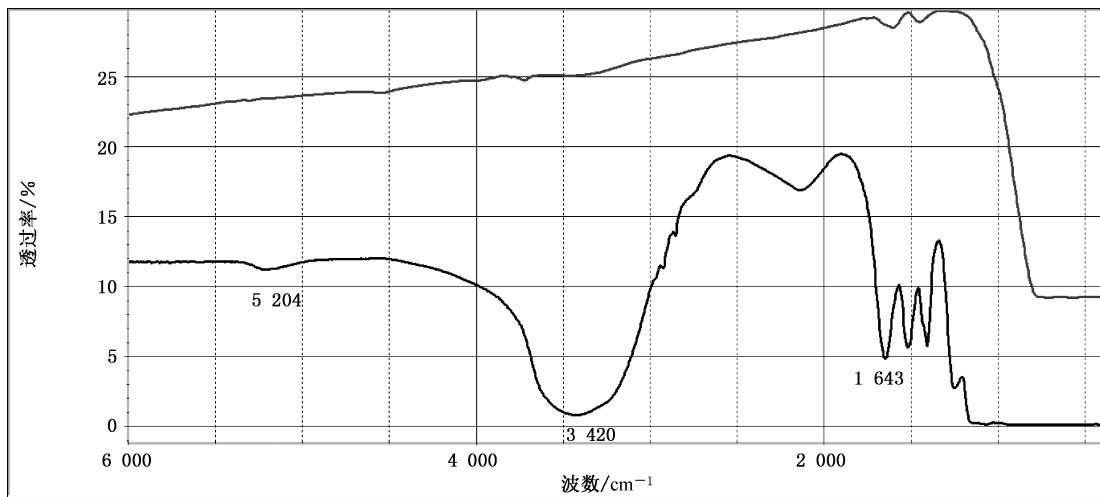


图 A.150 萤石矿物的红外透射谱图在 $6\ 000\ \text{cm}^{-1}\sim1\ 100\ \text{cm}^{-1}$ 范围内的吸收常由水(和/或羟基)引发

A.2.59 水钙铝榴石

水钙铝榴石的红外反射谱图, 见图 A.151, 其指纹区反射谱图与不含水石榴石品种相似(参见图 A.45), 但 $3\ 500\ \text{cm}^{-1}\sim3\ 300\ \text{cm}^{-1}$ 范围内与羟基相关的峰表明其为含水亚种。

注: 水钙铝榴石常与符山石共生。

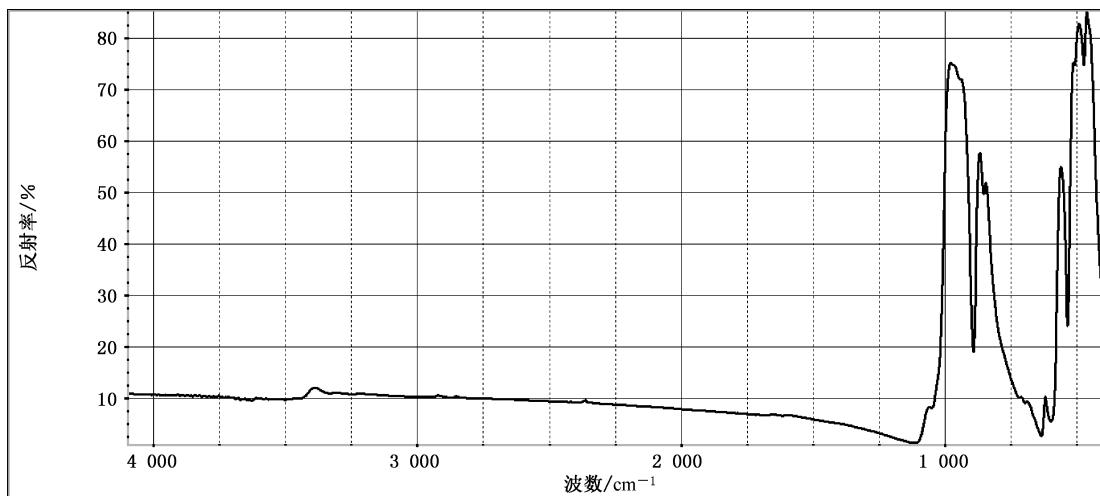


图 A.151 水钙铝榴石的红外反射谱图

A.2.60 滑石

滑石的红外反射谱图,见图 A.152。 $1\ 200\text{ cm}^{-1}\sim900\text{ cm}^{-1}$ 范围内谱带的分裂程度受结晶度及样品孔隙度的影响而不同,但 $700\text{ cm}^{-1}\sim650\text{ cm}^{-1}$ 范围内的尖锐反射峰较为典型。

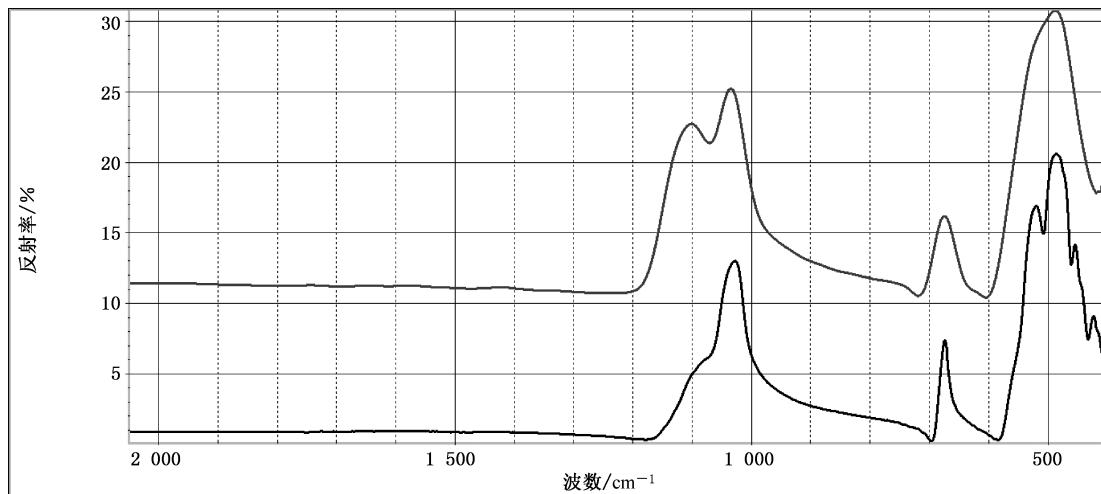


图 A.152 滑石的红外反射谱图

A.2.61 方钠石

方钠石的红外反射谱图,见图 A.153。

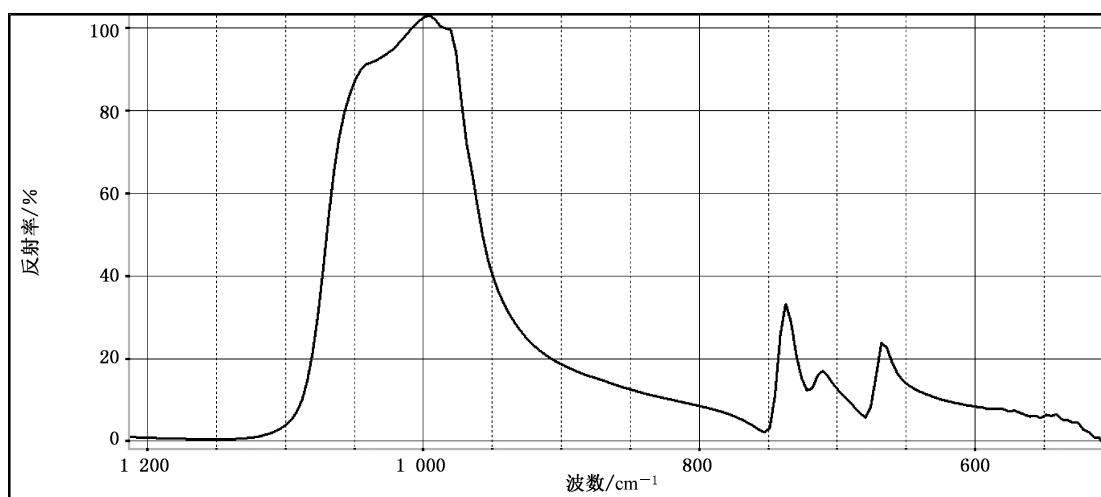


图 A.153 方钠石的红外反射谱图

相比方钠石端元矿物，该矿物种的亚种黝方石-蓝方石对红外光谱的影响主要决定于 $(SO_4)^{2-}$ 对 Cl^- 的类质同象替代，谱图表现主要为 $1\ 250\ cm^{-1} \sim 1\ 100\ cm^{-1}$ 范围内出现 $(SO_4)^{2-}$ 引发的反射谱带，见图 A.154。

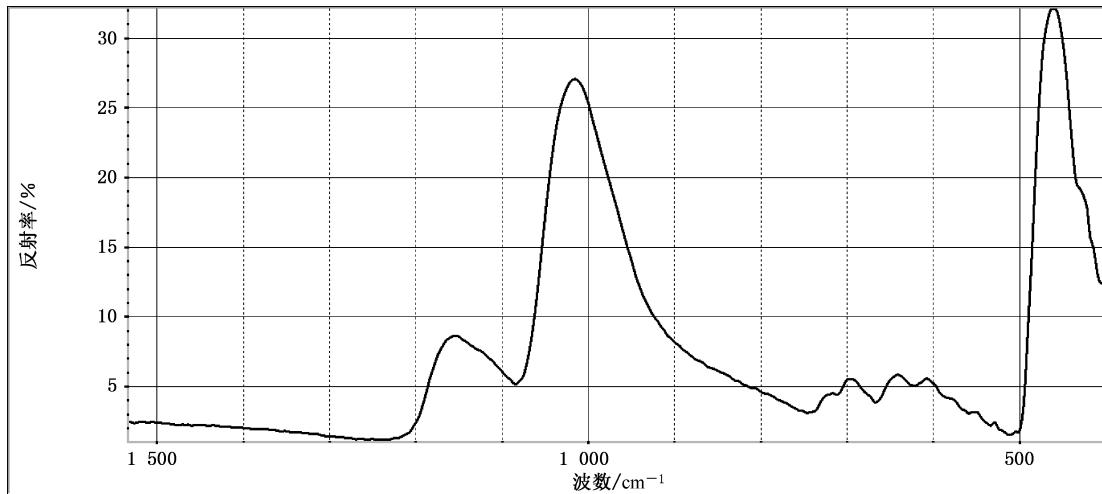


图 A.154 方钠石的亚种黝方石-蓝方石的红外反射谱图

A.2.62 赤铁矿

赤铁矿的红外反射谱图，见图 A.155。

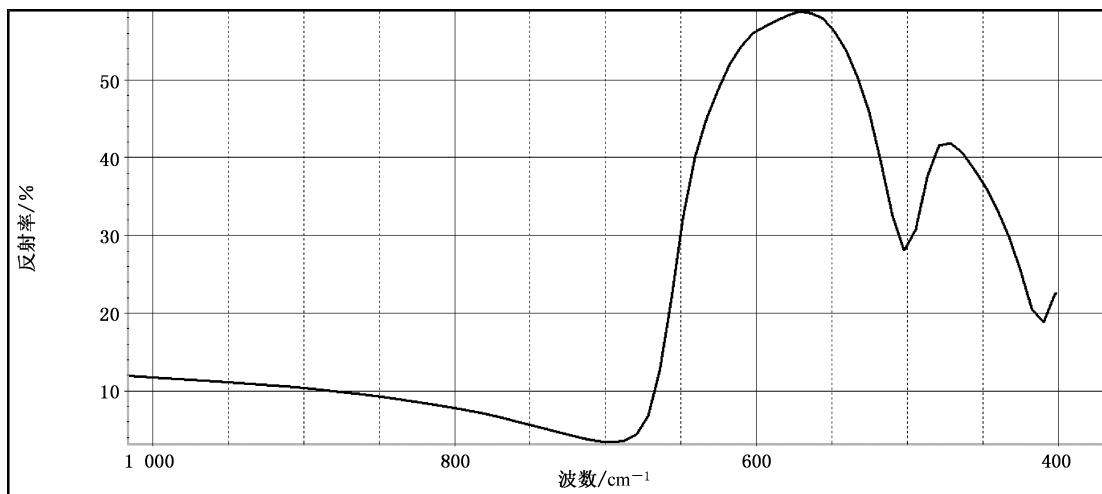
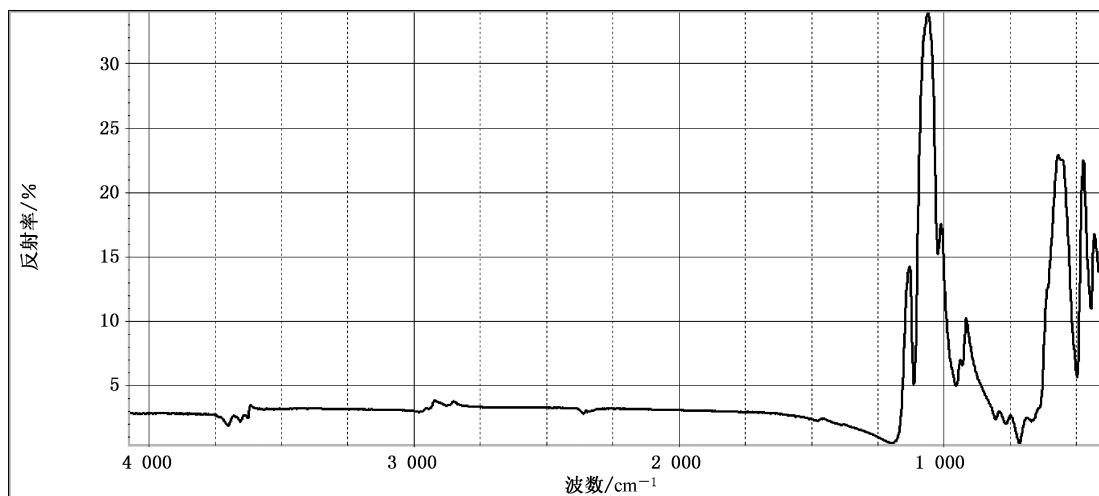


图 A.155 赤铁矿的红外反射谱图

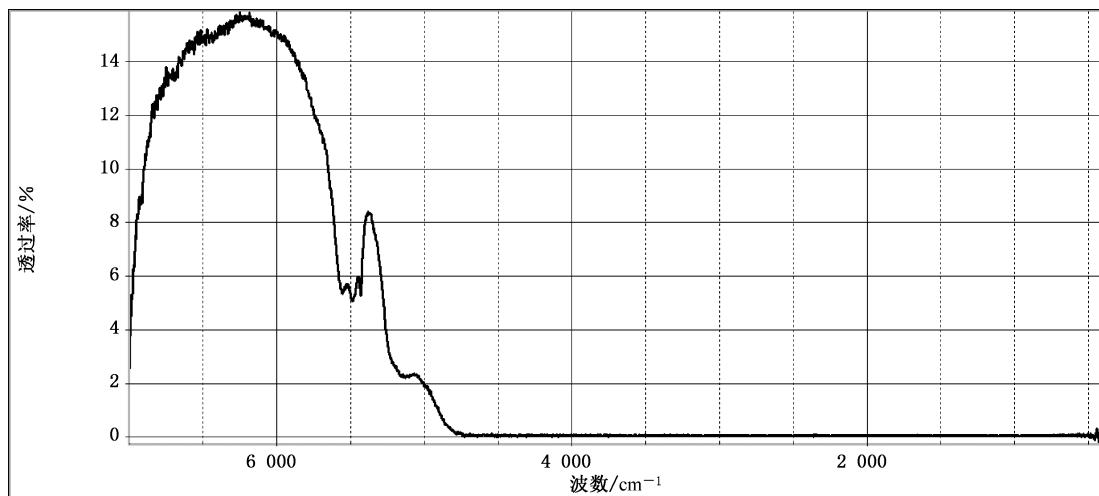
A.2.63 高岭石族

高岭石族矿物包括高岭石及其多型变体地开石、珍珠陶石以及多水高岭石——埃洛石；这几个矿物种的红外谱图难以区分。受多层变体堆叠、结晶度、Al-Si有序结构的影响， $3\ 750\text{ cm}^{-1}\sim3\ 600\text{ cm}^{-1}$ 范围内（与OH⁻有关）的3个~4个峰相对强度和发育情况呈多样化，其中地开石常呈现三个峰间分裂较深的锐峰，且随频率的变化强度具有递变性，见图A.156。但无论如何，这些现象对借助反射法获得的红外谱图，几乎不影响对印章石、黏土矿物质玉的指认。



图A.156 地开石和/或珍珠陶石的红外反射谱图

乳白色亚透明隐晶质高岭石族矿物集合体玉石片的红外透射谱图，见图A.157。



图A.157 高岭石族矿物玉石片的红外透射谱图

A.2.64 叶蜡石

叶蜡石的红外反射谱图,见图 A.158。

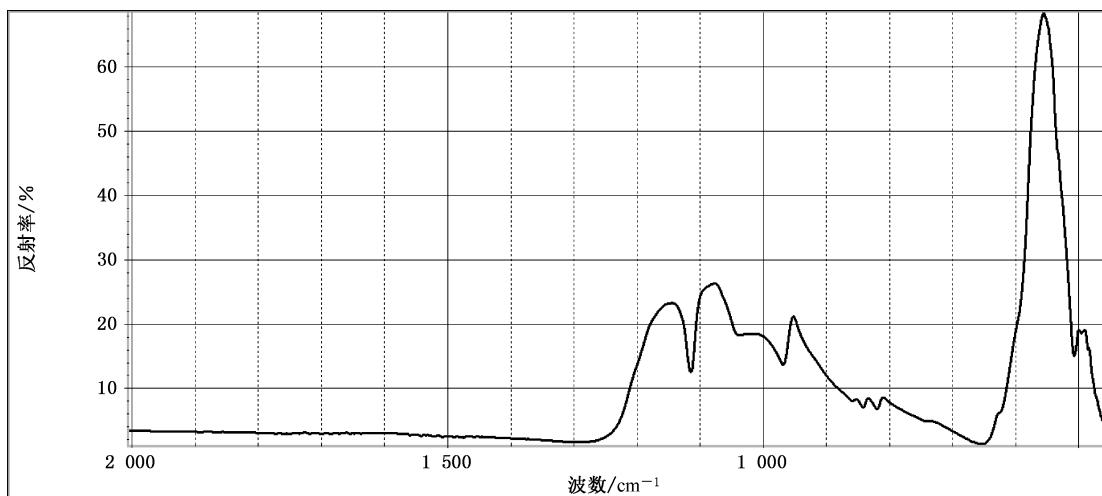


图 A.158 叶蜡石的红外透射谱图

A.2.65 水镁石

水镁石的红外反射谱图,见图 A.159。

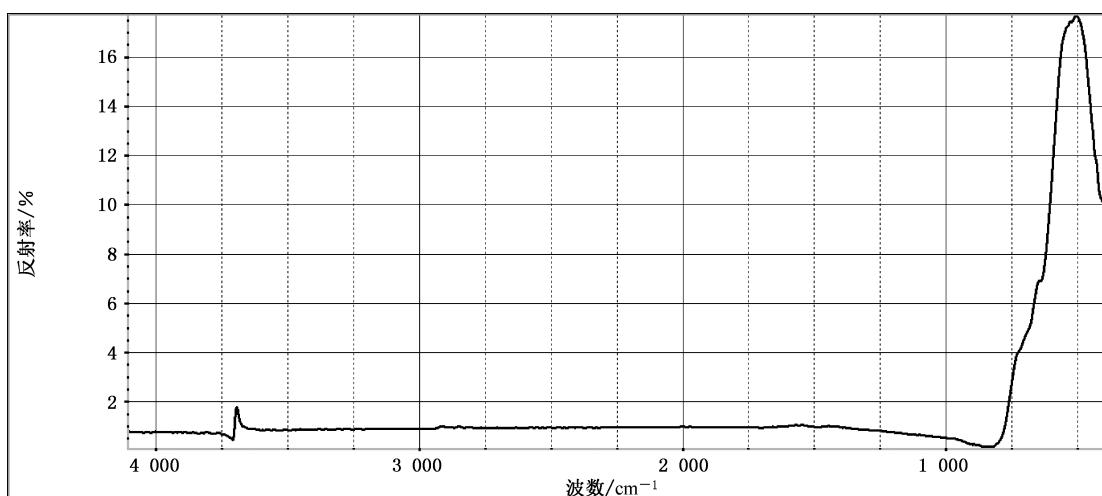


图 A.159 水镁石的红外反射谱图

A.2.66 苏纪石

苏纪石的红外反射谱图,见图 A.160。

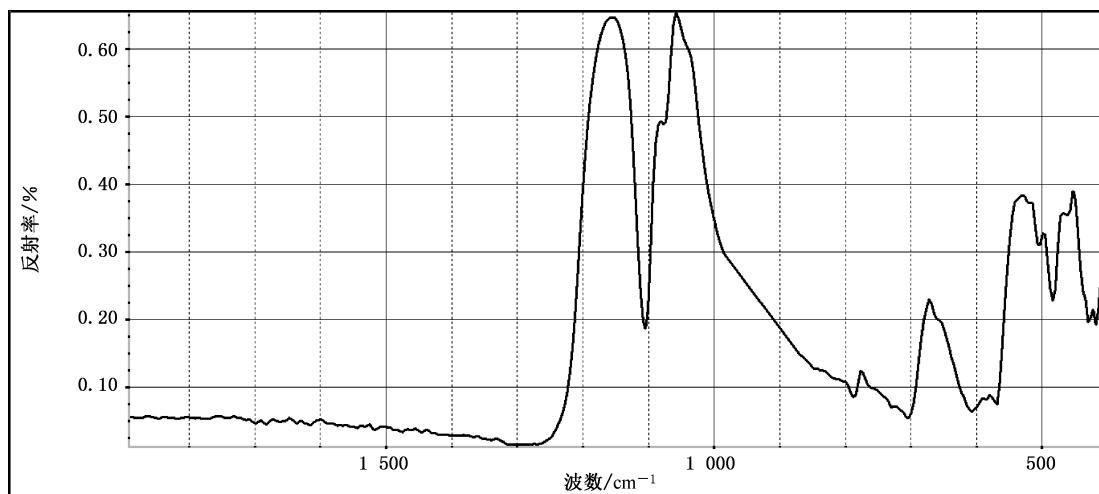


图 A.160 苏纪石的红外反射谱图

A.2.67 异极矿

异极矿的红外反射谱图,见图 A.161。

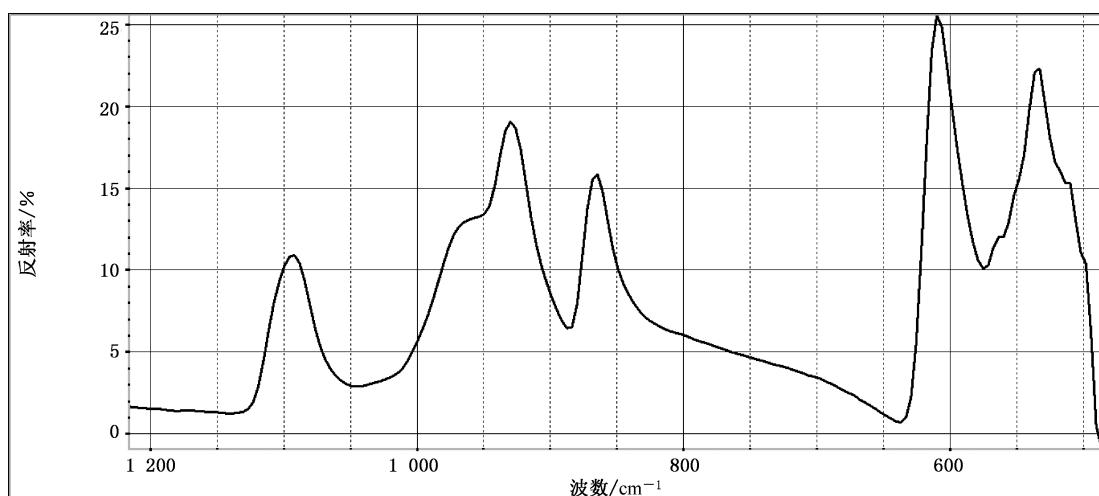
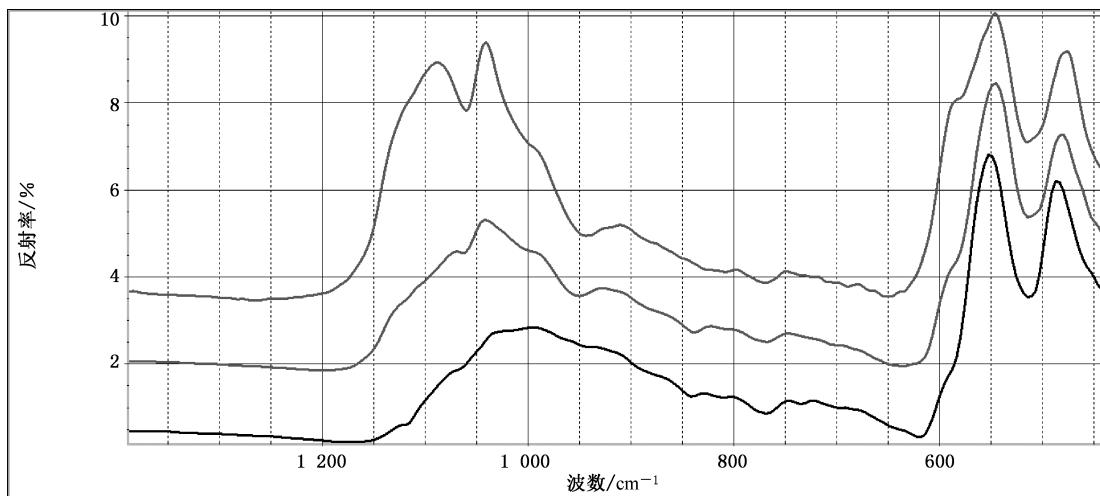


图 A.161 异极矿的红外反射谱图

A.2.68 云母、伊利石类

云母、伊利石的红外反射谱图在 $1\ 200\text{ cm}^{-1}\sim800\text{ cm}^{-1}$ 范围内谱峰分裂程度与集合体中鳞片状晶体组合的定向性程度有关,见图 A.162。但两类矿物在反射红外光谱下不易区分,甚至当葡萄石晶体呈无定向隐晶质集合体时, $1\ 200\text{ cm}^{-1}\sim800\text{ cm}^{-1}$ 范围内谱峰发生拟合(见图 A.148),红外反射谱图与显微鳞片状云母、伊利石谱图相似。



注:上:片状云母;中:绢云母;下:伊利石。

图 A.162 云母和伊利石的红外反射谱图

A.2.69 针钠钙石

针钠钙石的红外反射谱图见图 A.163。谱图差异主要归因于入射光与集合体针状、放射状、纤维状晶体延长方向间的角度不同。

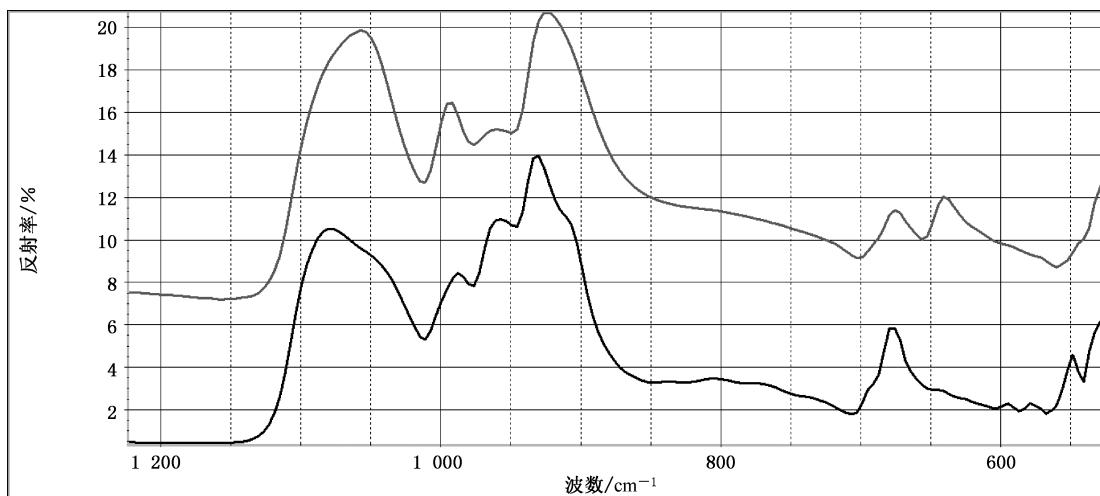


图 A.163 针钠钙石的红外反射谱图

A.2.70 绿泥石

绿泥石的红外反射谱图见图 A.164。谱图差异归因于构成集合体的矿物颗粒尺寸的差异。

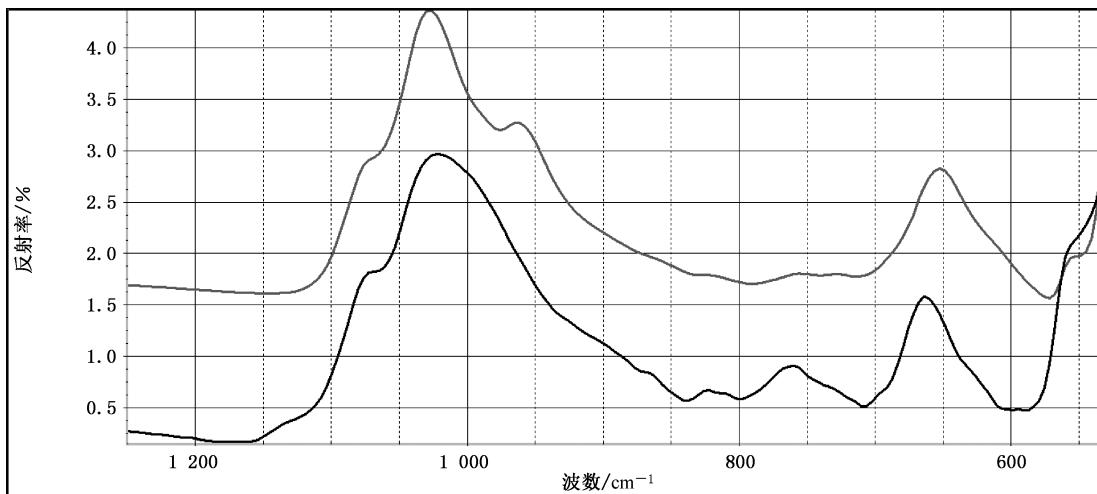
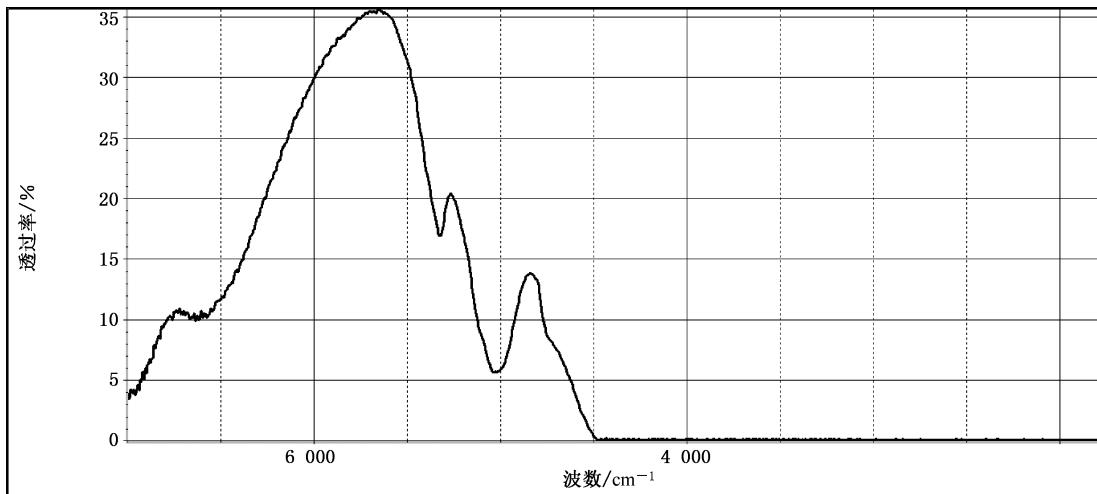


图 A.164 绿泥石的红外反射谱图

绿泥石的红外透射谱图,见图 A.165。



注：谱图采集于斜绿泥石(商贸名称：绿龙晶)样品。

图 A.165 绿泥石的红外透射谱图

A.2.71 斜红磷铁矿

斜红磷铁矿的红外反射谱图见图 A.166。由于原材料的加工性决定该玉石充填普遍, 谱图呈现的 $1\ 510\ \text{cm}^{-1}$ 峰与有机充填有关。

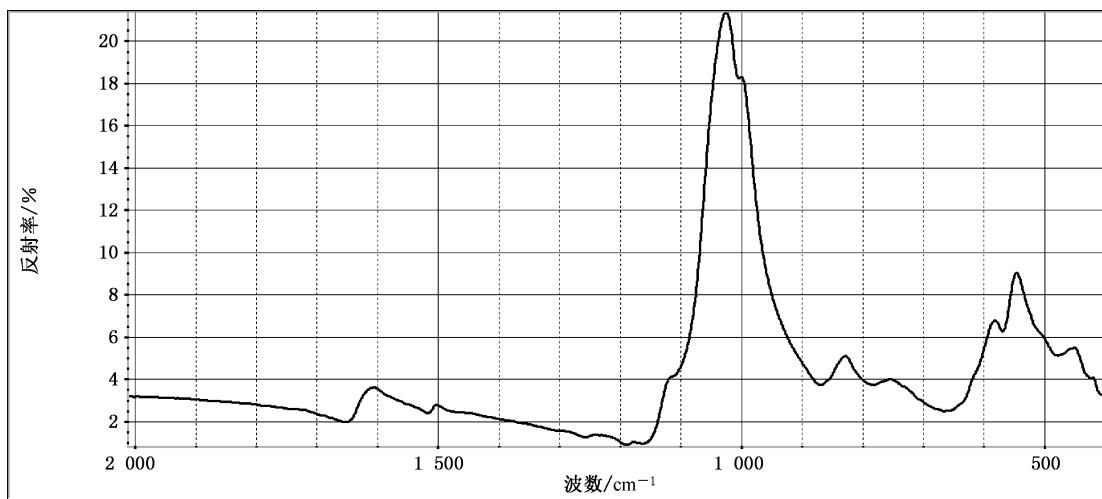
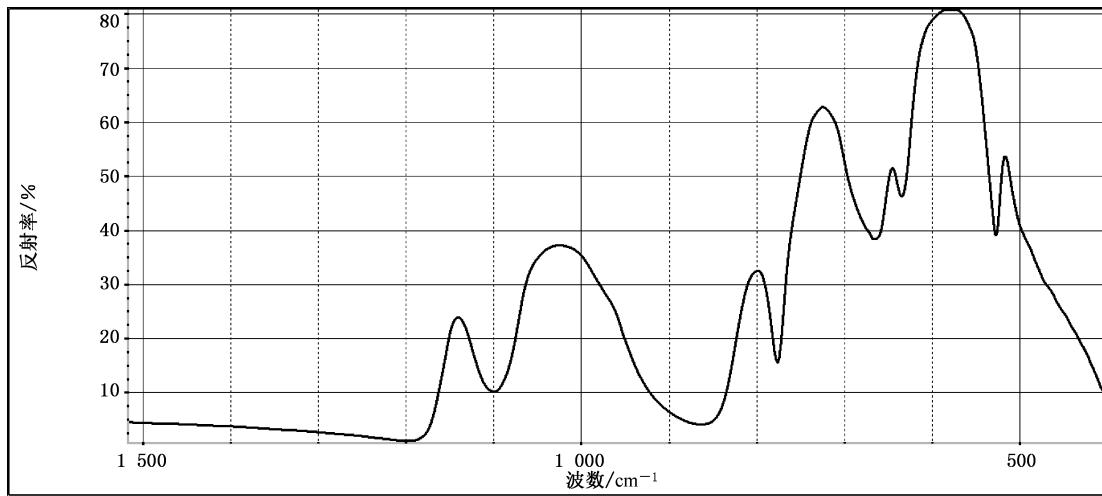


图 A.166 经充填的斜红磷铁矿的红外反射谱图

A.2.72 硬水铝石

巨晶硬水铝石的红外反射谱图, 见图 A.167。



注: 结晶学方向不同会引发谱图差异

图 A.167 巨晶硬水铝石(Diaspore; Zultanite)的红外反射谱图

A.2.73 硅硼镁铝石

硅硼镁铝石的红外反射谱图,见图 A.168。

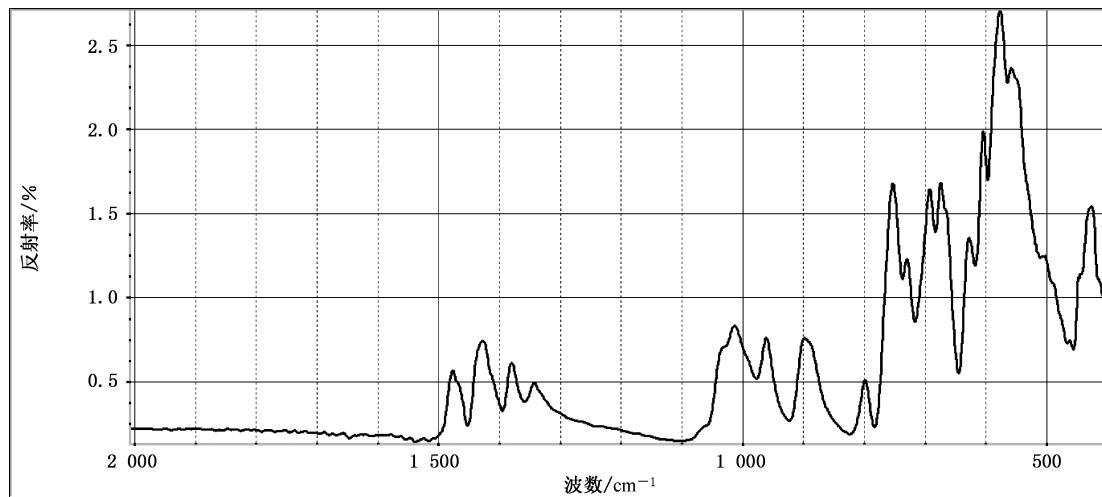


图 A.168 硅硼镁铝石(Grandidierite)的红外反射谱图

硅硼镁铝石的红外透射谱图,见图 A.169。

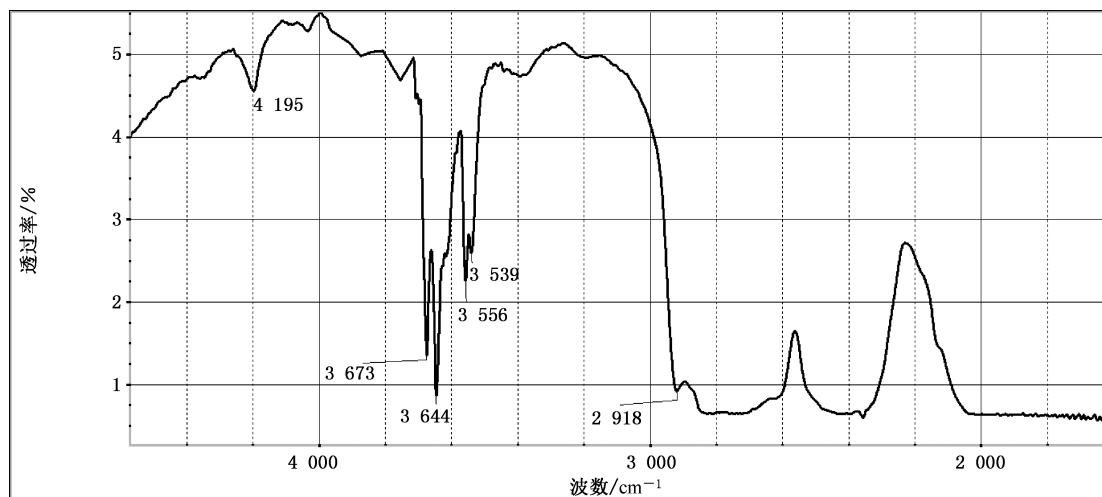


图 A.169 硅硼镁铝石(Grandidierite)的红外透射谱图

A.2.74 金红石

金红石的红外反射谱图,见图 A.170。

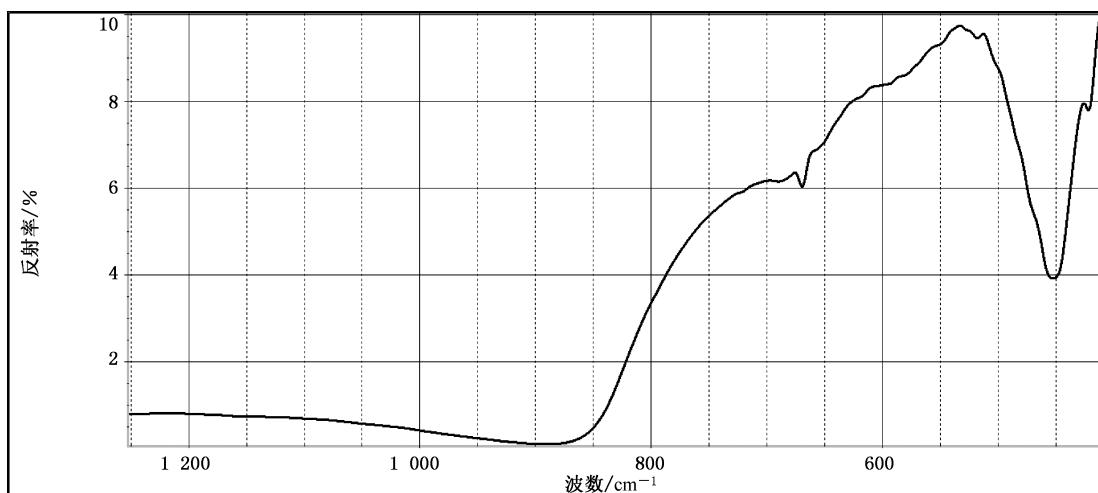


图 A.170 金红石的红外透射谱图

A.2.75 琥珀

使用溴化钾粉末压片透射法采集的波罗的海琥珀红外吸收谱图见图 A.171。谱图中 $1\ 260\ \text{cm}^{-1}$ 左右肩峰典型,被称为“波罗的海肩”。

若采用反射法采集谱图,与本文件比对前宜先进行 K-K 变换;若借助 ATR 测定装置采集谱图,与本文件比对前,宜先进行 ATR 校正;特殊情况下进行大量粉末样品漫反射测得的谱图与本文件比对前,宜先进行 K-M 转换。

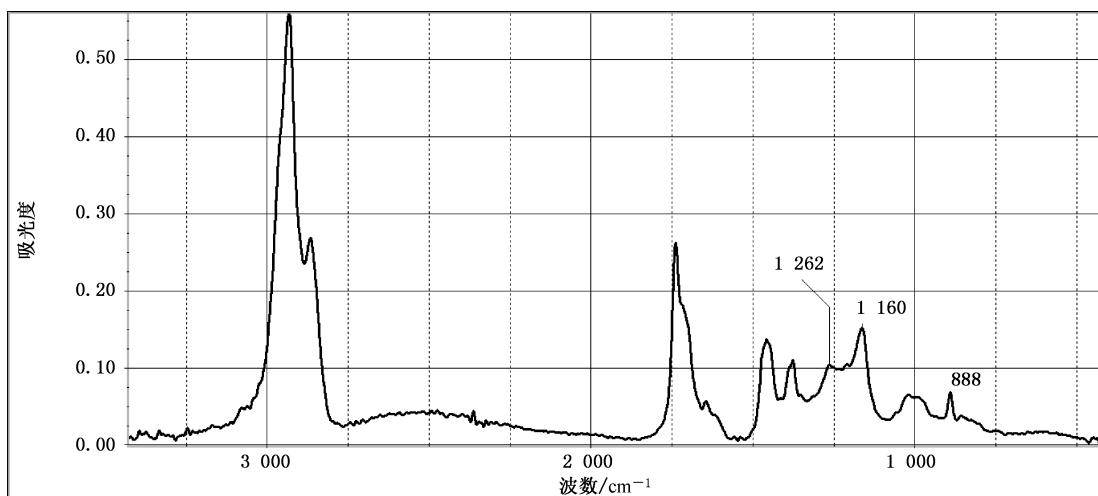


图 A.171 “波罗的海”琥珀的红外吸收光谱图

使用溴化钾粉末压片透射法采集的多米尼加产琥珀的红外吸收谱图见图 A.172。若采用反射法采集谱图,与本文件比对前宜先进行 K-K 变换;若借助 ATR 测定装置采集谱图,与本文件比对前,宜先进行 ATR 校正;特殊情况下进行大量粉末样品漫反射测得的谱图与本文件比对前,宜先进行 K-M 转换。

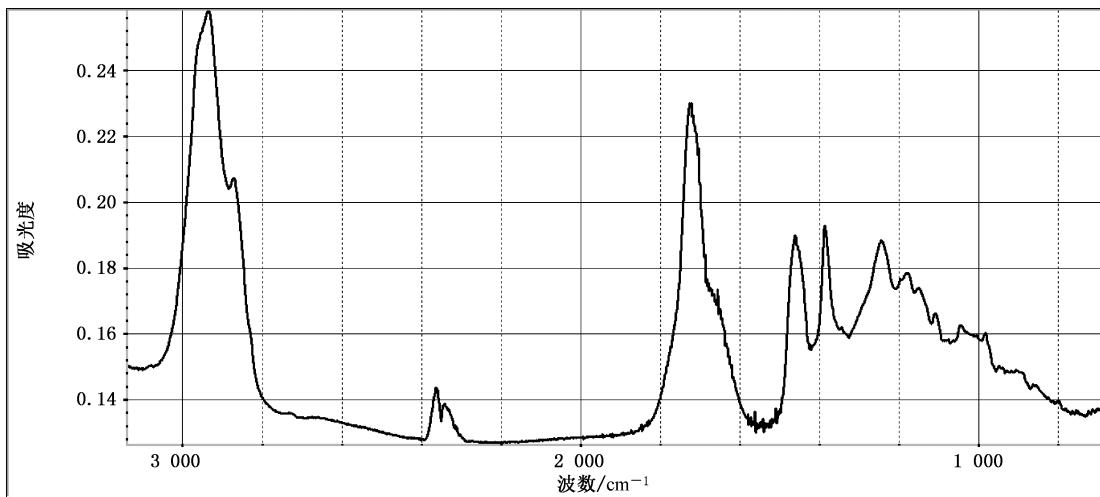


图 A.172 多米尼加产琥珀的红外吸收谱图

使用溴化钾粉末压片透射法采集的墨西哥产琥珀红外吸收谱图见图 A.173。若采用反射法采集谱图,与本文件比对前宜先进行 K-K 变换;若借助 ATR 测定装置采集谱图,与本文件比对前,宜先进行 ATR 校正;特殊情况下进行大量粉末样品漫反射测得的谱图与本文件比对前,宜先进行 K-M 转换。

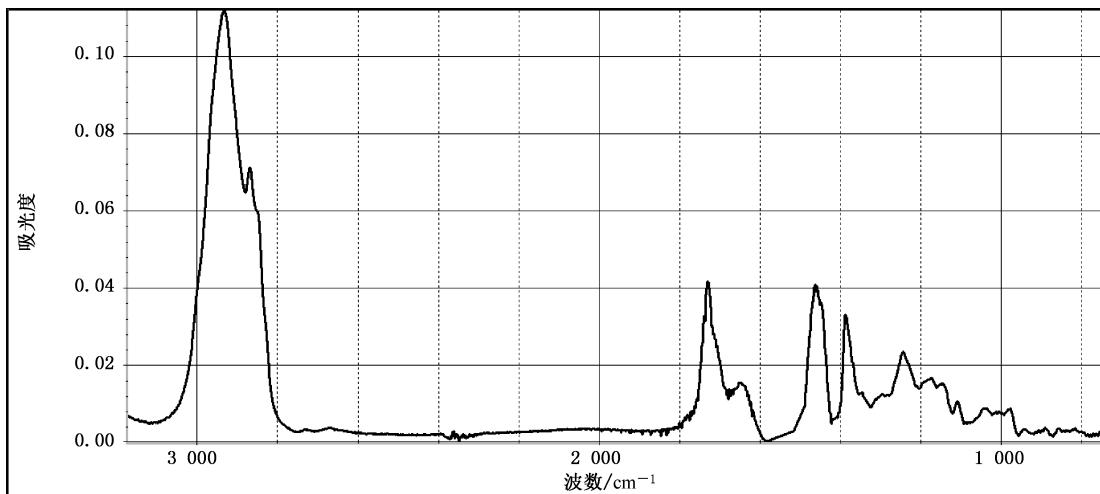


图 A.173 墨西哥产琥珀的红外吸收谱图

使用溴化钾粉末压片透射法采集的缅甸产琥珀红外吸收谱图见图 A.174。若采用反射法采集谱图,与本文件比对前宜先进行 K-K 变换;若借助 ATR 测定装置采集谱图,与本文件比对前,宜先进行 ATR 校正;特殊情况下进行大量粉末样品漫反射测得的谱图与本文件比对前,宜先进行 K-M 转换。

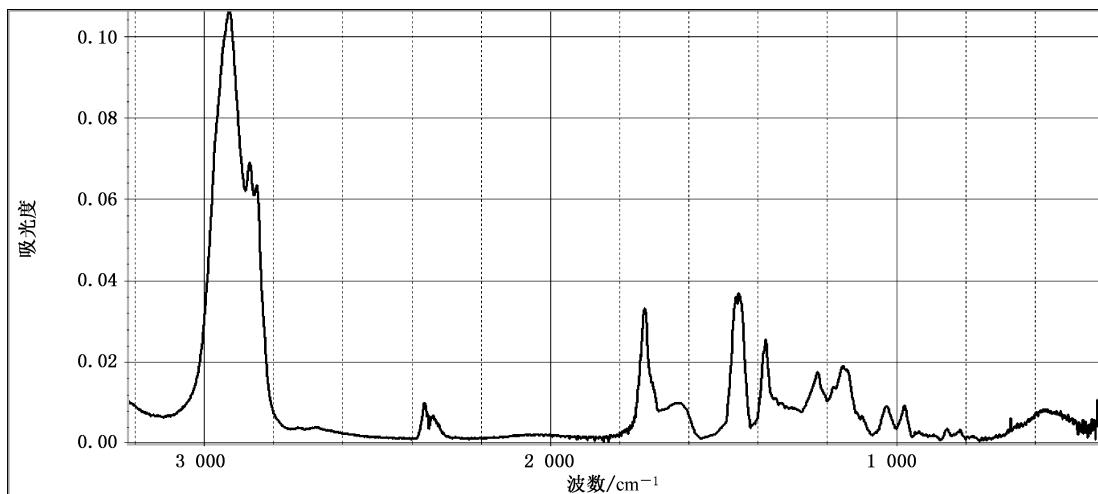


图 A.174 缅甸产琥珀的红外吸收谱图

A.2.76 牙骨类

牙骨类材质的主要组成为羟基磷酸钙和有机质,其红外反射谱图见图 A.175。其中 $1\ 800\text{ cm}^{-1}\sim 1\ 200\text{ cm}^{-1}$ 范围内谱带与有机质有关,一般来说,年代越久远,有机质变质或风化程度越大,该区域谱带相对强度较低,但应考虑现存物种的古代遗体中与灭绝物种被封存在特殊环境内的遗体中有机质相似的可能性。

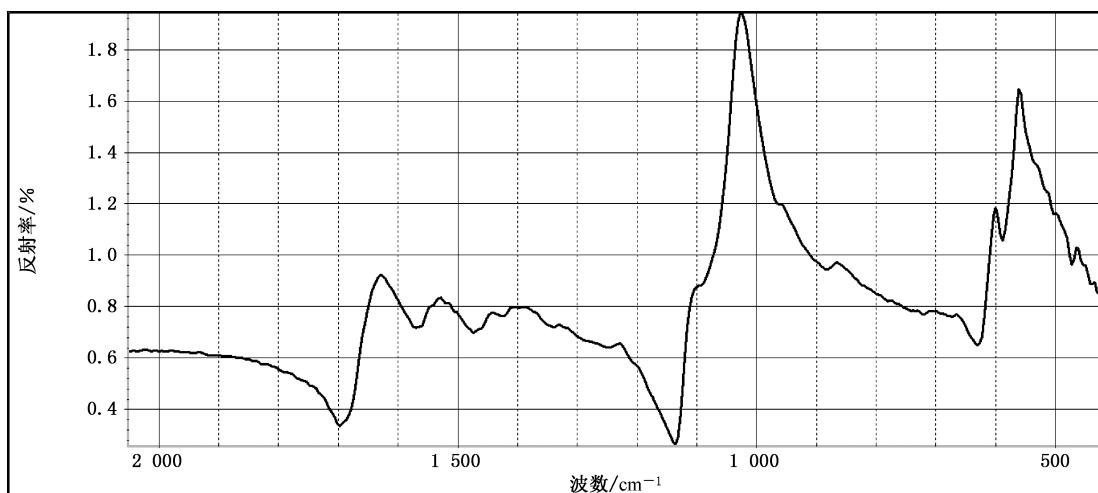
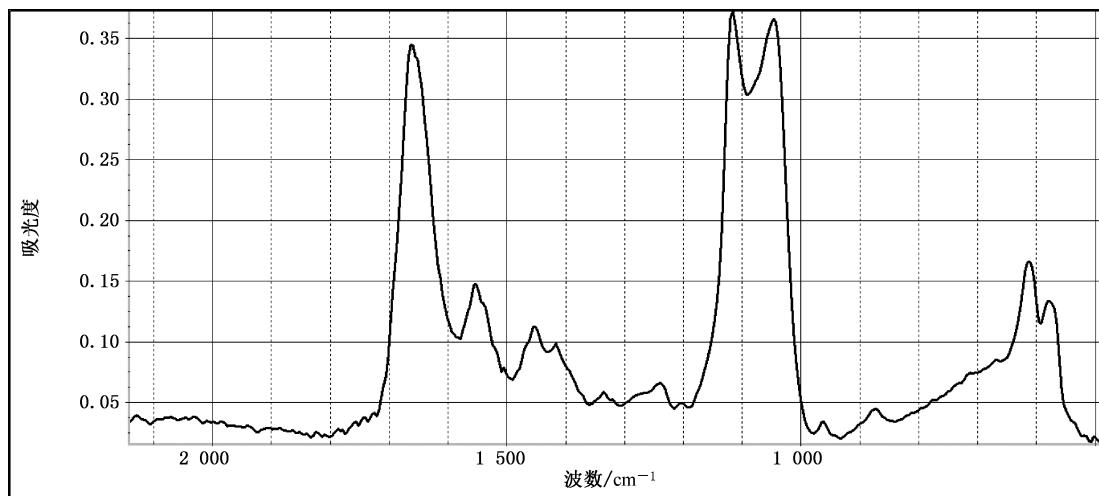


图 A.175 牙骨类材质的红外反射谱图

为识别牙骨类材质红外吸收谱图中有关峰的准确位置,对图 A.175 谱图进行 K-K 转换,获得图 A.176。



注: 借助反射法采集谱图,经 K-K 变换。

图 A.176 牙骨类材质的红外吸收谱图

A.2.77 角质蛋白类

角质蛋白类材质的红外反射谱图,见图 A.177。

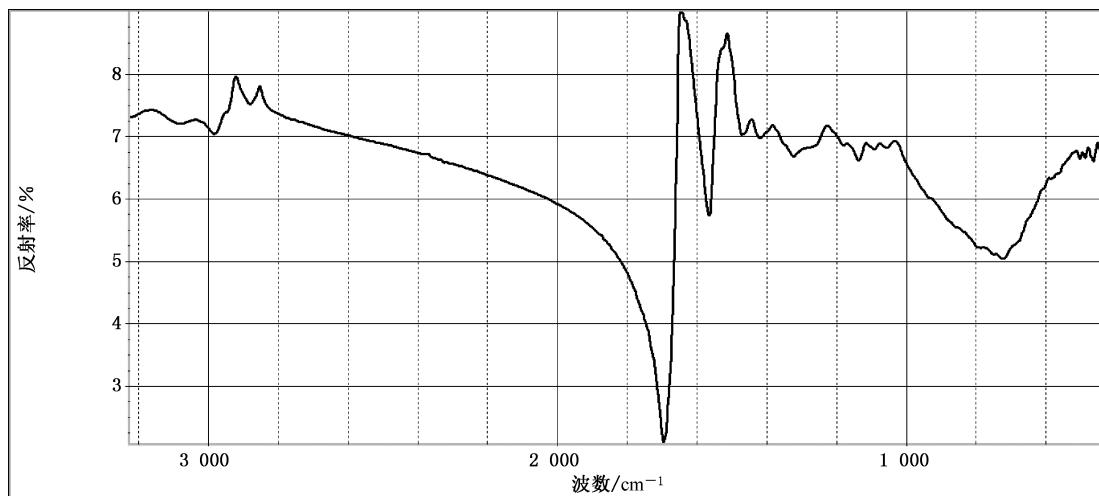
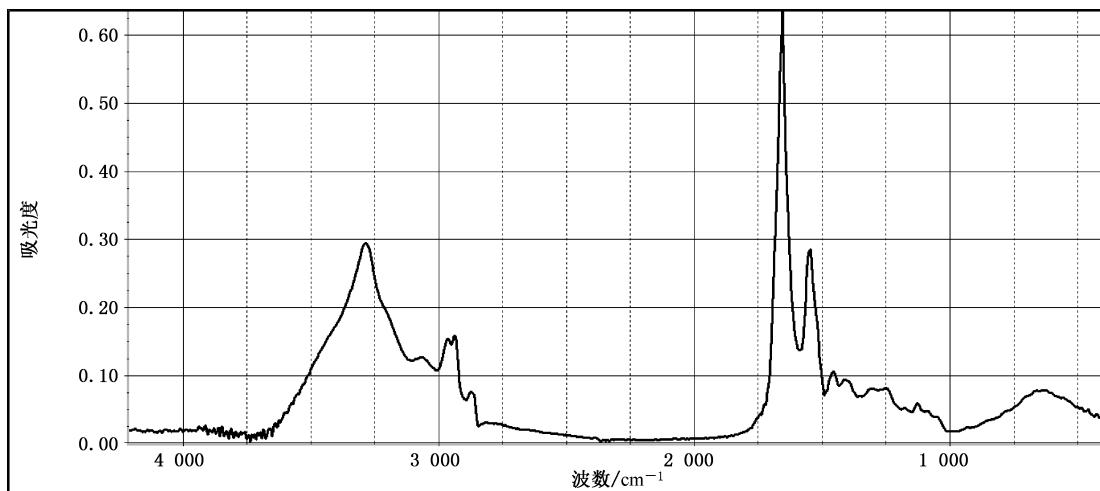


图 A.177 角质蛋白类材质的红外反射谱图

为识别角质蛋白类材质红外吸收谱图中有关峰的准确位置,对图 A.177 谱图进行 K-K 转换,所得结果见图 A.178。



注: 借助反射法采集谱图,经 K-K 变换。

图 A.178 角质蛋白类材质的红外吸收谱图

角质蛋白类材质的红外透射谱图,见图 A.179。

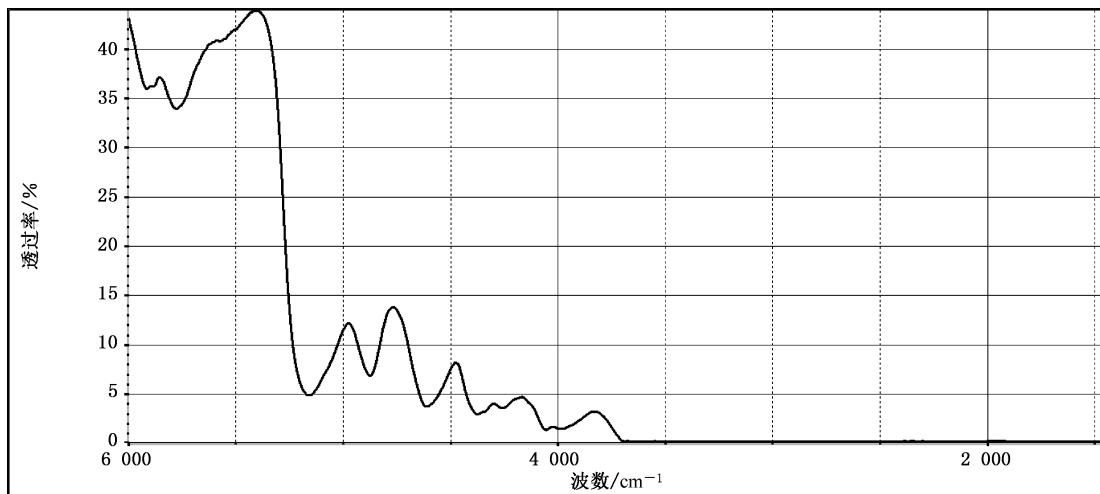


图 A.179 角质蛋白类材质红外透射谱图

A.2.78 合成立方氧化锆

合成立方氧化锆的红外反射谱图,见图 A.180。

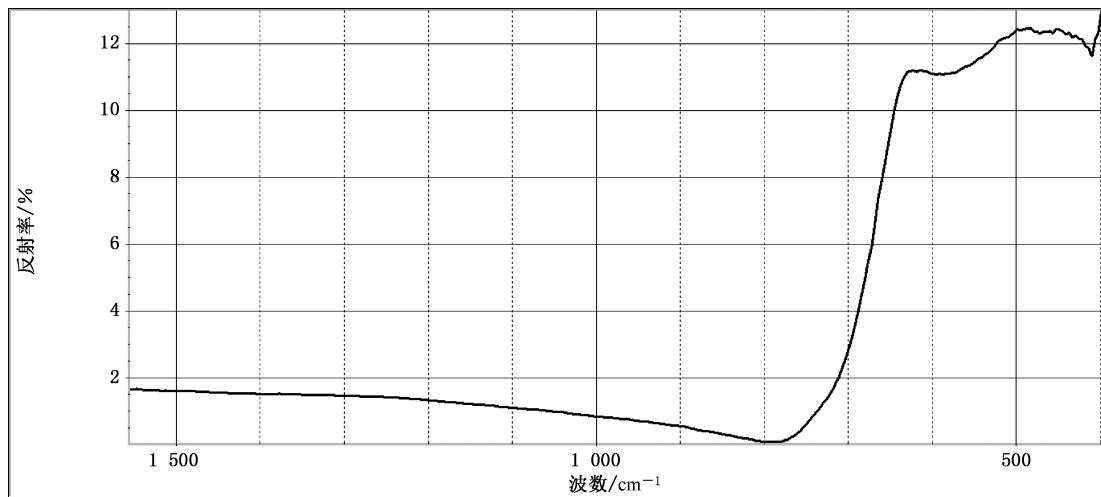


图 A.180 合成立方氧化锆的红外反射谱图

合成立方氧化锆的红外透射谱图,见图 A.181。

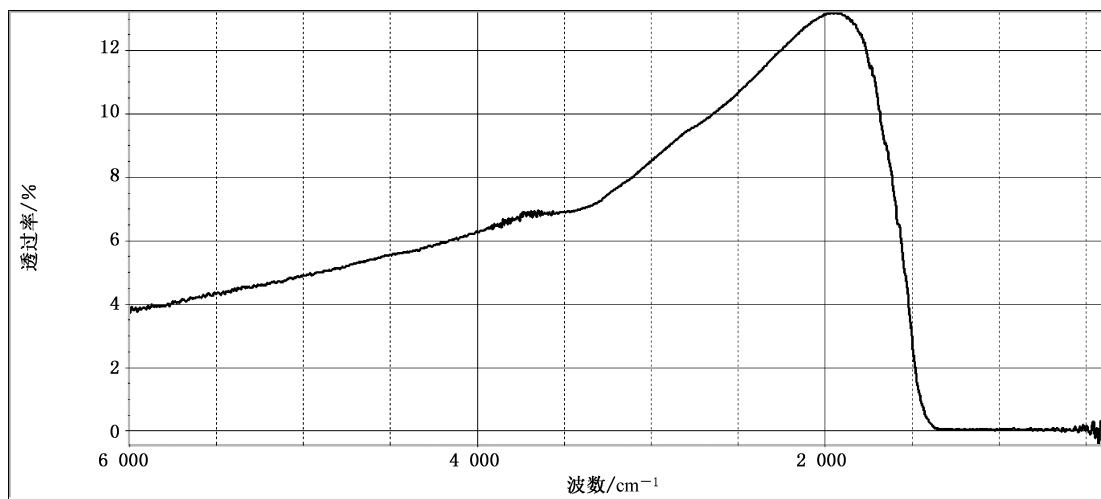


图 A.181 合成立方氧化锆的红外透射谱图

A.2.79 合成碳硅石

合成碳硅石的红外反射谱图,见图 A.182。

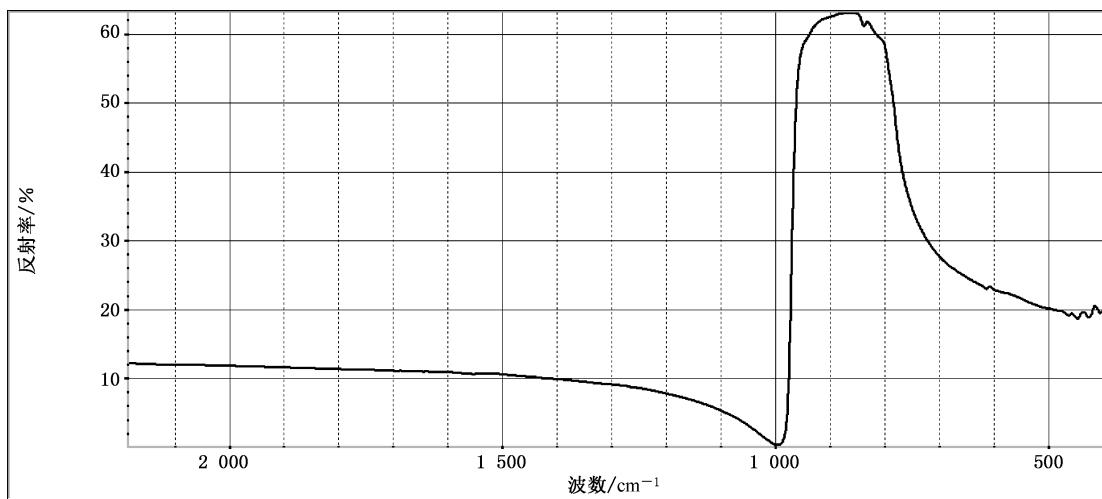


图 A.182 合成碳硅石的红外反射谱图

合成碳硅石的红外透射谱图,见图 A.183。

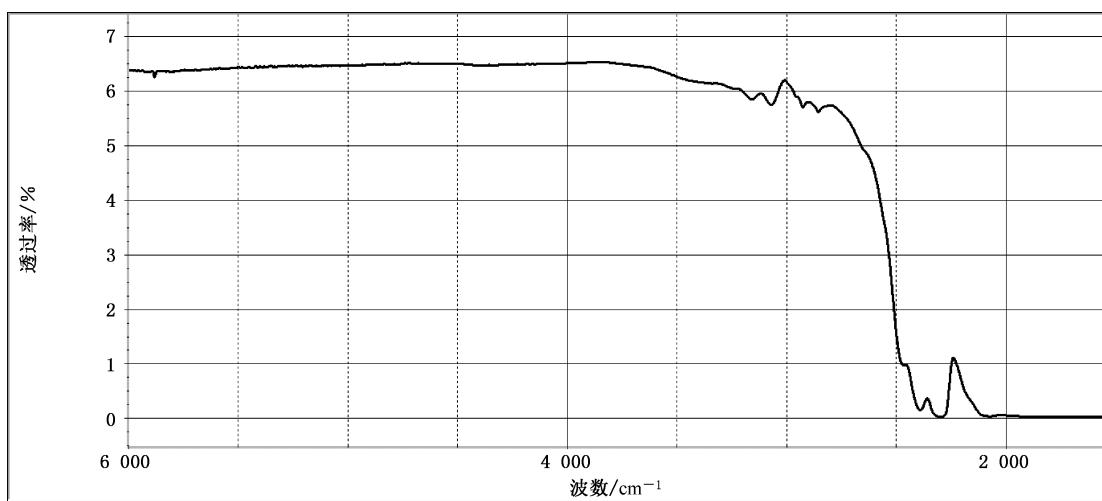


图 A.183 合成碳硅石的红外透射谱图

A.2.80 人造钇铝榴石

人造钇铝榴石的红外反射谱图,见图 A.184。

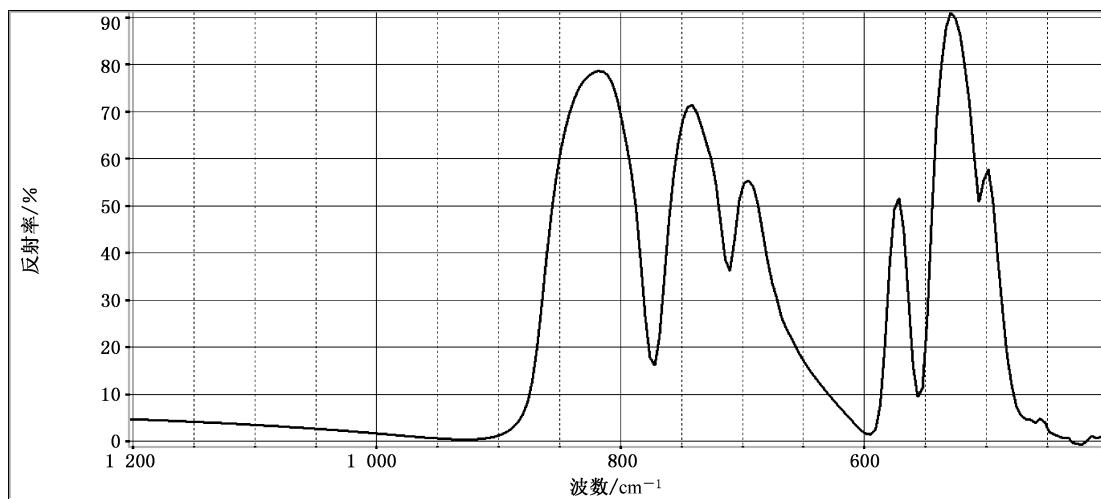


图 A.184 人造钇铝榴石的红外反射谱图

人造钇铝榴石的红外透射谱图见图 A.185。因包裹体等晶体缺陷的存在会引发谱图差异。

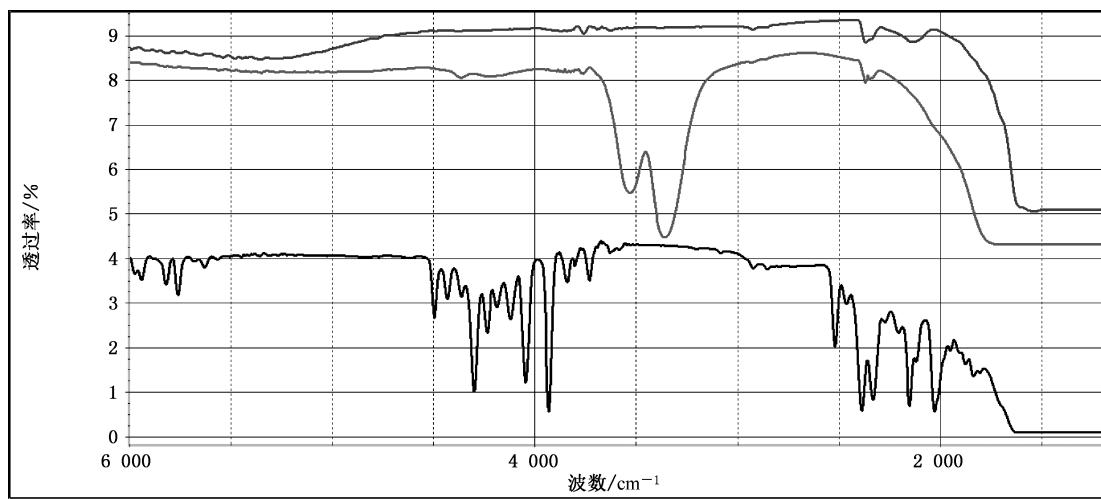


图 A.185 人造钇铝榴石的红外透射谱图

A.2.81 人造钛酸锶

人造钛酸锶的红外反射谱图,见图 A.186。

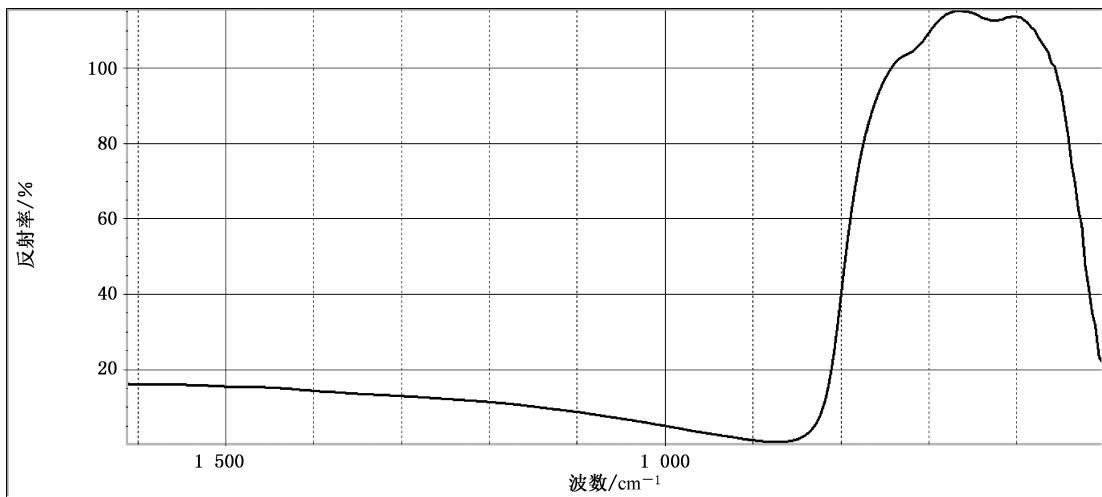


图 A.186 人造钛酸锶的红外反射谱图

A.2.82 玻璃

含 Si-O 键的玻璃态物质的红外反射谱图,见图 A.187。

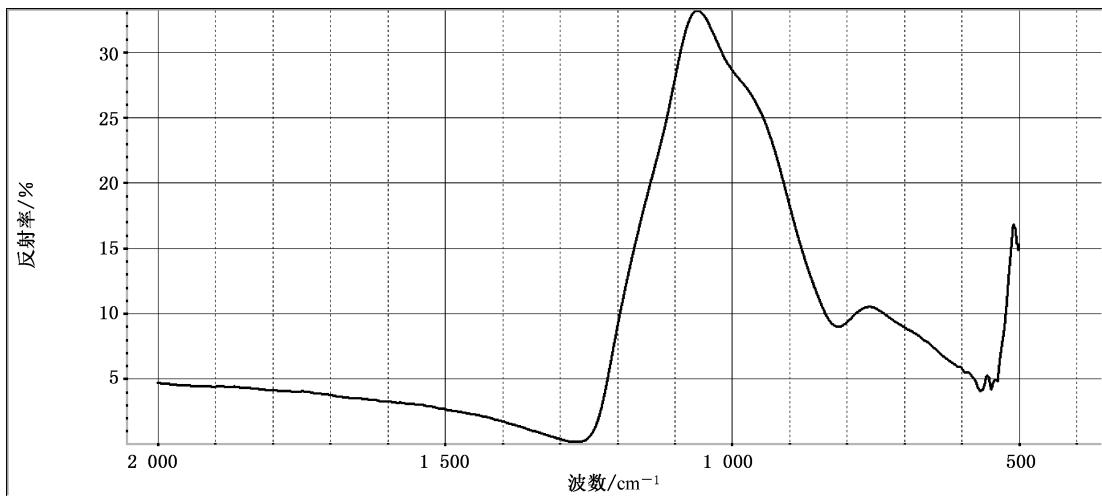


图 A.187 含 Si-O 键玻璃态物质的红外反射谱图

含 Si-O 键玻璃态物质发生脱玻化(析晶)后红外反射谱图在 $1200\text{ cm}^{-1}\sim800\text{ cm}^{-1}$ 范围内的宏大谱带发生分裂,见图 A.188。

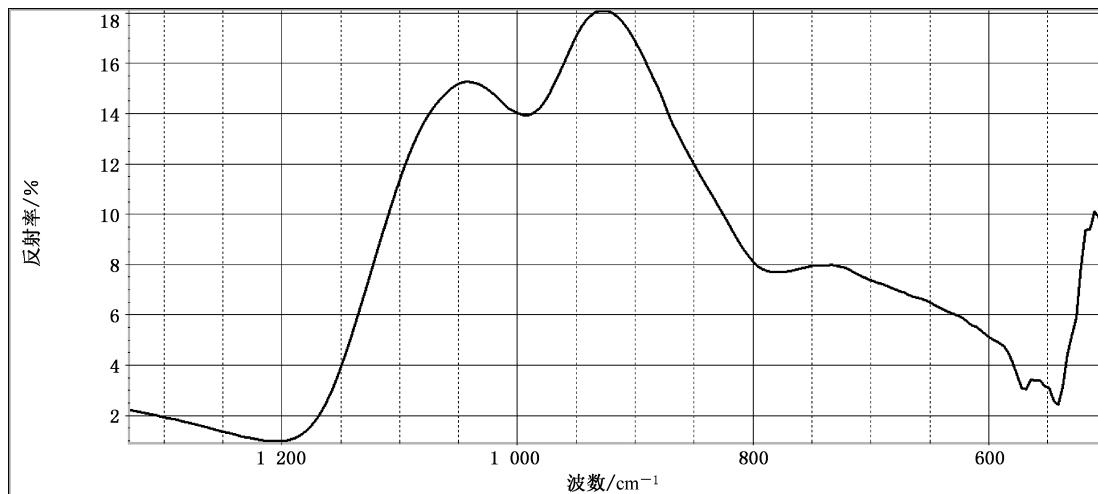


图 A.188 含 Si-O 键(脱玻化)玻璃态物质的红外反射谱图

组份不同的玻璃态物质其宏大谱带可扩展至更高频率区域,如硼硅酸盐玻璃的红外反射谱图可在 1200 cm^{-1} 左右呈现反射谱带,见图 A.189。脱玻化(析晶)可导致谱带分裂。

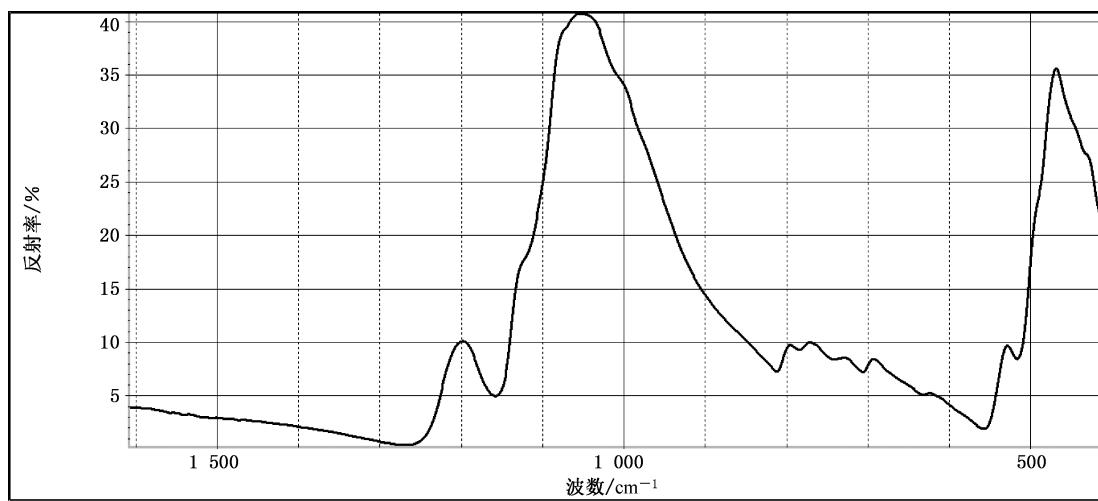


图 A.189 硼硅酸盐玻璃的红外反射谱图

处于亚稳态的硅酸盐有内能降低析出晶体的趋向,其红外反射谱图 1100 cm^{-1} 左右与 Si-O 键相关的单一宏大谱带会呈现分裂的趋势,演变出肩状带,见图 A.190,这与似晶态的欧洲红外反射谱图类似,再参见图 A.124。

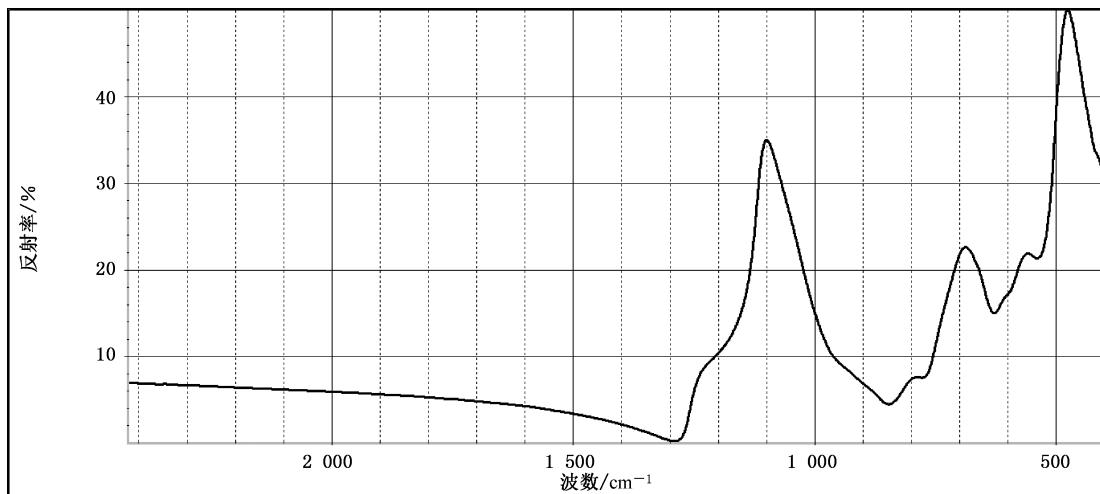


图 A.190 表现出向析晶演变的玻璃的红外反射谱图

一些常见的人工玻璃在 $3\ 700\text{ cm}^{-1}\sim2\ 200\text{ cm}^{-1}$ 范围内表现为宽大谱带,而在中近红外区透明度高。见图 A.191。

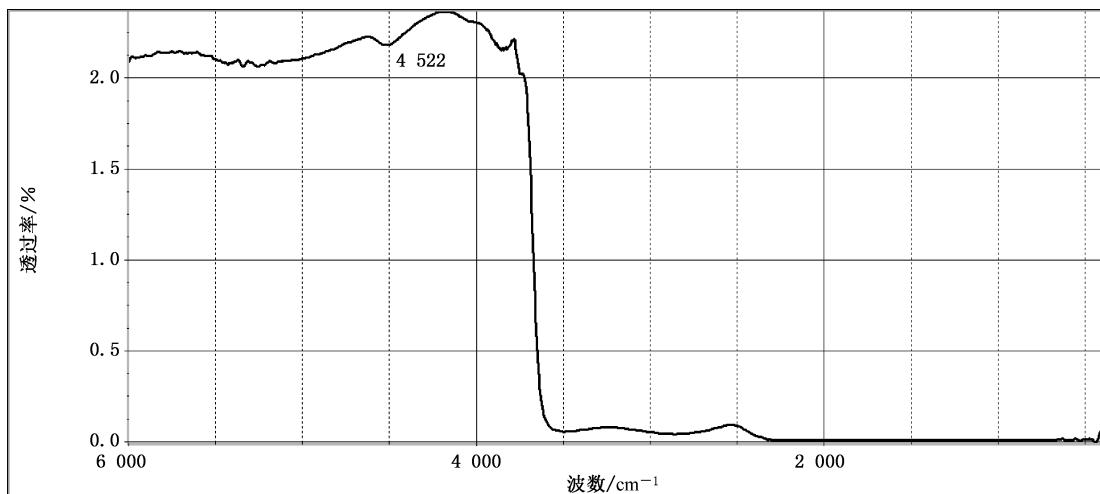


图 A.191 采自某类人工玻璃的红外透射谱图

呈亚稳态的玻璃的红外透射谱图常常不稳定,谱图多变,见图 A.192、图 A.193、图 A.194。

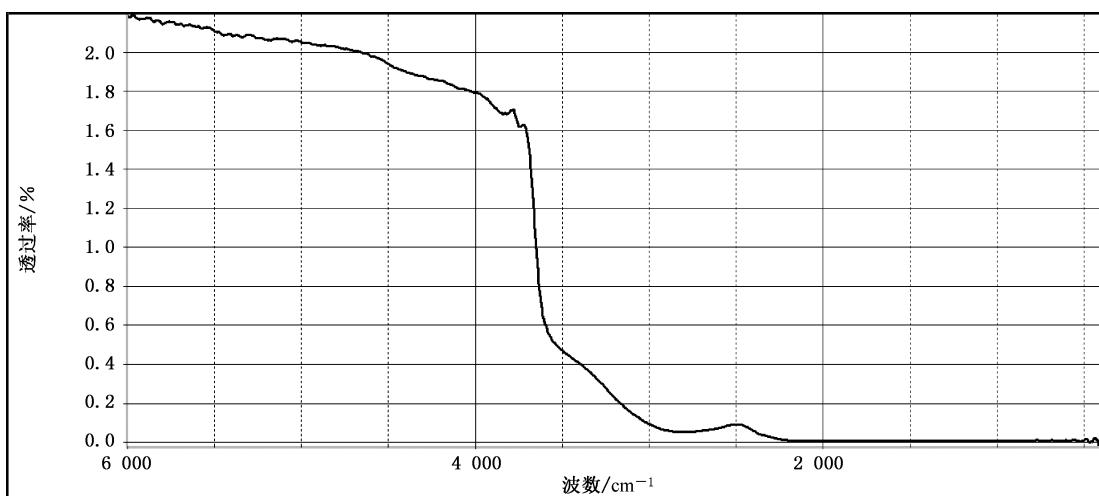


图 A.192 采自人工玻璃的红外透射谱图

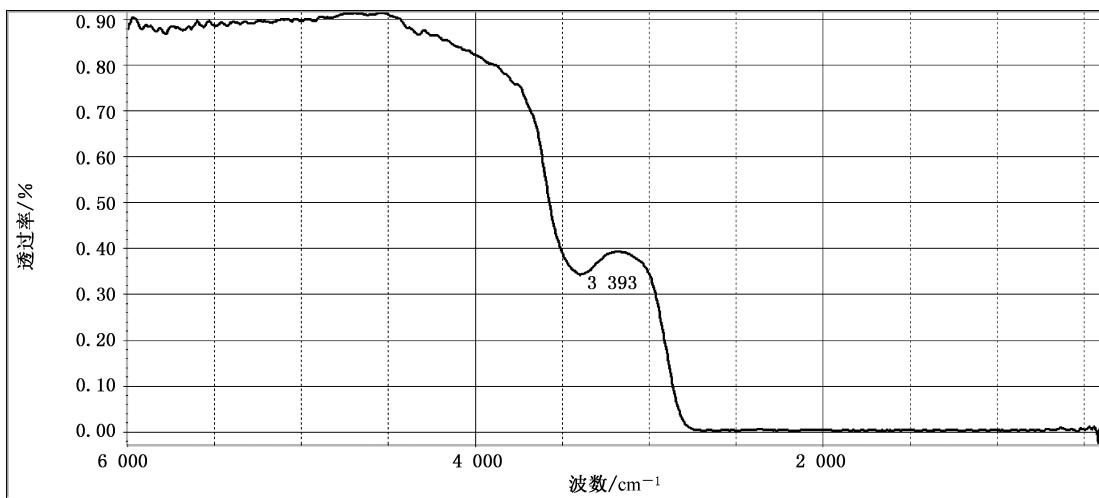


图 A.193 采自人工玻璃的红外透射谱图

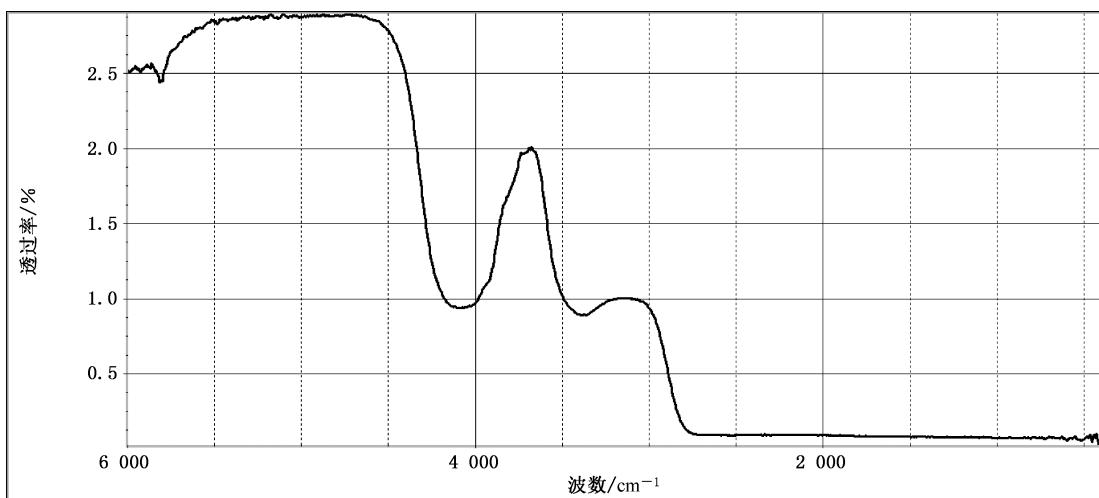


图 A.194 采自人工玻璃的红外透射谱图

还有一些常见的深色人工玻璃,其红外透射谱图在 $3\ 650\text{ cm}^{-1}$ 以下全吸收,而在中近红外区透明度高。见图 A.195。

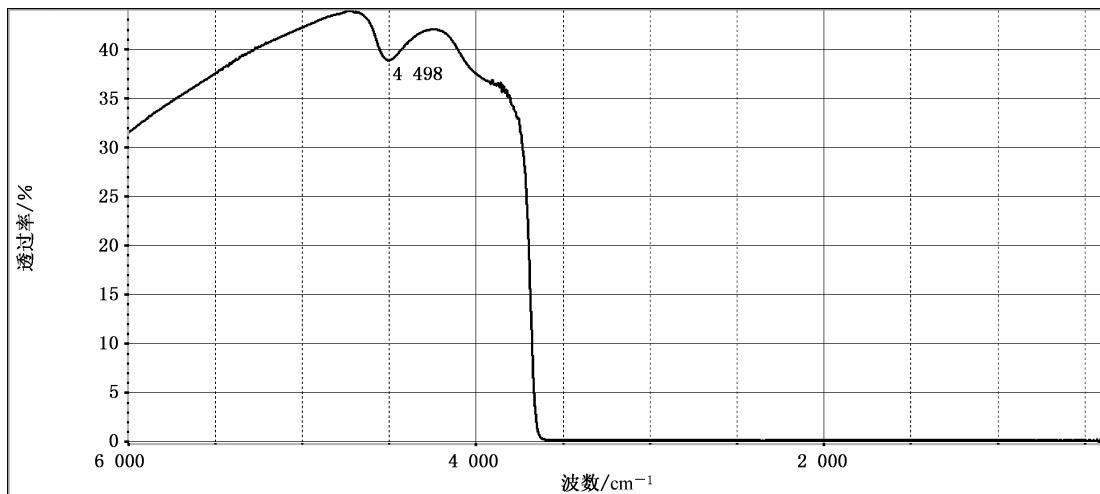


图 A.195 采自人工玻璃的红外透射谱图

有的人工玻璃红外透射谱图在 $3\ 700\text{ cm}^{-1}\sim2\ 200\text{ cm}^{-1}$ 范围内表现为单一的宽透过谱带,其最强透射峰值频率往往高于 $3\ 000\text{ cm}^{-1}$ 。见图 A.196。

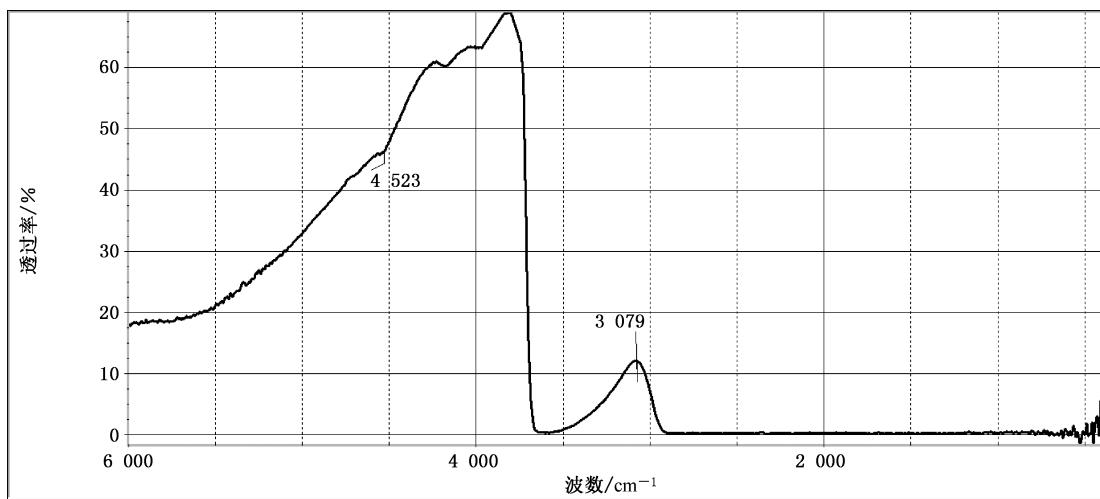


图 A.196 采自人工玻璃的红外透射谱图

透明度较高的天然玻璃(如“莫尔道玻璃”)的红外透射谱图常呈现 $3\ 620\text{ cm}^{-1}\sim3\ 610\text{ cm}^{-1}$ 附近与H₂O有关的吸收带, $3\ 700\text{ cm}^{-1}\sim2\ 200\text{ cm}^{-1}$ 范围内最强透射谱带峰值往往低于 $2\ 900\text{ cm}^{-1}$ 。见图 A.197。

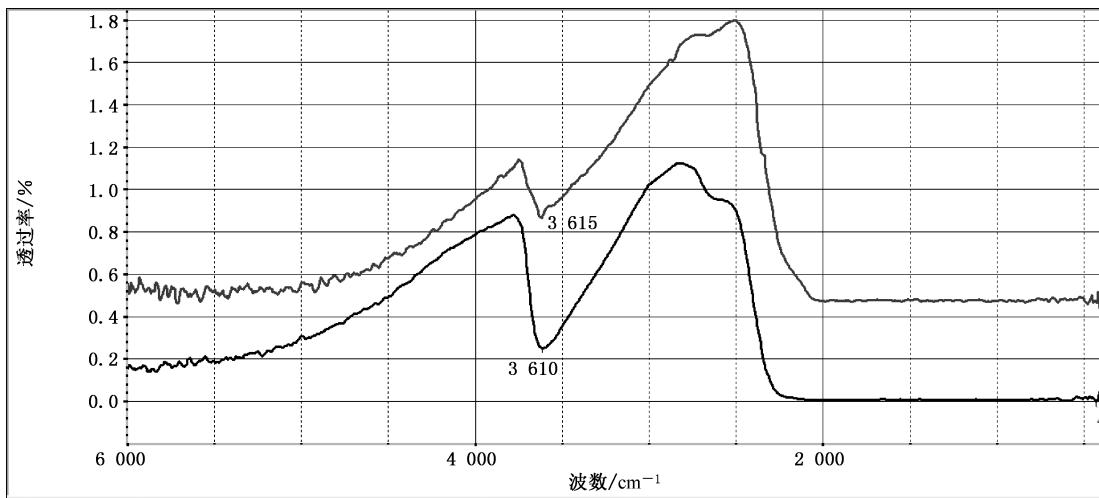


图 A.197 对中红外透明度较高的天然玻璃的红外透射谱图

透明度低的天然玻璃(如火山玻璃、玄武玻璃、黑曜岩等)或样品较厚时,其红外透射谱图的 3620 cm^{-1} 谱带全吸收,范围扩大至 $3700\text{ cm}^{-1}\sim2900\text{ cm}^{-1}$ 范围,而 $2900\text{ cm}^{-1}\sim2200\text{ cm}^{-1}$ 范围相对透过率仍较高,但受与水相关谱带侧切作用,低频区最强透射峰值往往低于 2800 cm^{-1} 。见图 A.198。

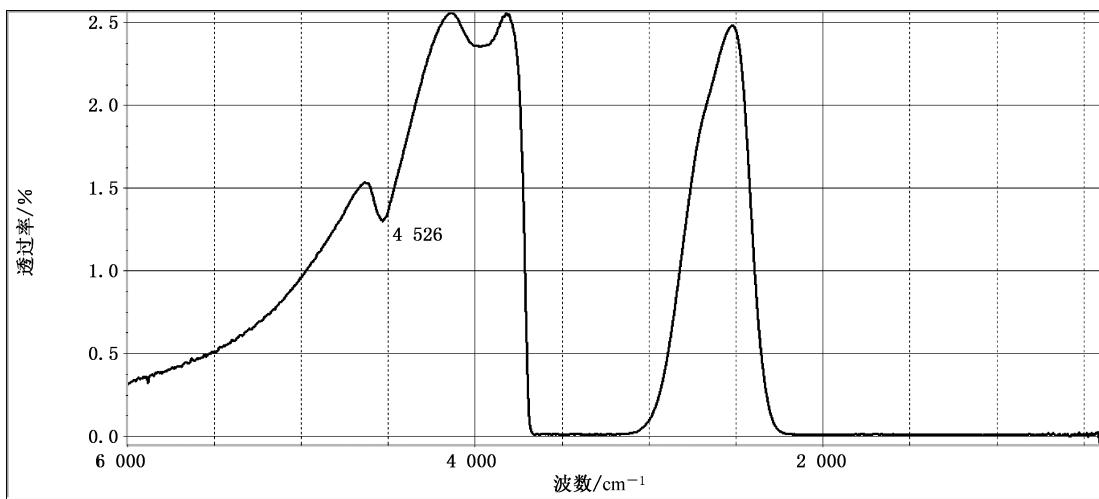


图 A.198 透明度低的天然玻璃的红外透射谱图

参 考 文 献

- [1] 彭文世、刘高魁,矿物红外光谱图集,1982.北京:科学出版社
 - [2] 李建军、刘晓伟、程佑法,红外光谱在宝石学领域的应用实例,2015.济南:山东人民出版社
-