

香花石包头矿黄河矿及蓟县矿的拉曼光谱特征^①

段玉然^② 李维华

中国地质科学院岩矿测试技术研究所 北京 100037

摘要 首次测定了中国矿物学家发现的矿物——香花石、包头矿、黄河矿及蓟县矿的拉曼光谱图。经对仪器准确性和精密度的测定表明,测定拉曼峰位的最大偏差为 $\pm 1 \text{ cm}^{-1}$ 。

关键词 傅立叶变换拉曼光谱 香花石 包头矿 黄河矿 蓟县矿

拉曼光谱是近代迅速发展起来的物理谱学分析技术,它反映物质的分子特征,拉曼位移、拉曼峰宽与分子的振转能级结构直接相关。因此不同物质,其拉曼特征不同,据此可以达到测定、鉴别不同物种的目的,也可作为探讨分子结构的一种重要手段。

近 20 年来拉曼光谱技术在地学领域得到了较为广泛的应用。特别是拉曼微探针技术达到了微量、微粒、微观的微束分析,对不易得到的微小标本,不需要分离,可直接在光片、薄片上取样测定成分及进行结构研究,更体现出这一技术在地学研究领域应用的潜在力和发展前景。

香花石、包头矿、黄河矿和蓟县矿是我国矿物学家发现的众多新矿物中 4 种不同种类的矿物。这 4 种矿物均经过电子探针成分分

析, X 射线衍射、扫描电镜等手段进行了晶体结构测试,为获取矿物的全面信息做了大量的研究工作。但有关利用拉曼光谱技术研究 4 种矿物以及它们的标准拉曼谱图至今尚未见报道。本项工作采用专家提供的标准矿物测定出它们的特征拉曼谱图,作为今后利用拉曼光谱技术研究矿物结构的一种手段、依据(香花石样品由矿物发现者黄蕴慧研究员提供,包头矿和黄河矿由稀有矿物专家白鸽研究员提供,蓟县矿由矿物发现者刘建昌高级工程师提供)。

1 矿物特性

香花石、包头矿、黄河矿及蓟县矿的主要特性列于表 1。

表 1 矿物主要特性

Table 1 Important characteristics of minerals

矿物名称 mineral	化学式 chemical formula	颜色 colour	晶系 crystal system	空间群 space group
香花石 ^[1] Hsianghualite	$\text{Ca}_3\text{Li}_2\text{Be}_3(\text{SiO}_4)_3\text{F}_2$	白色	等轴	$I 2_1 3$
包头矿 ^[2] Baotite	$\text{Ba}_4(\text{Ti, Nb, Fe})_8\text{O}_{16}(\text{Si}_4\text{O}_{12})\text{Cl}$	褐、黑	四方	$I 4_1/a$
黄河矿 ^[3] Huanghoite	$\text{BaCe}(\text{CO}_3)_2\text{F}$	蜡黄, 绿黄	六方	$C_3^4-R_3$
蓟县矿 ^[4] Jixianite	$\text{Pb}(\text{W, Fe}^{3+})_2(\text{O, OH})_7$	褐红	等轴	$\text{Fd}3m$

① 地矿部地勘高新技术研究开发计划项目资助(No. 9505603-2)。

② 段玉然 女, 研究员, 从事拉曼光谱分析技术研究。

2 实验部分

仪器: RFS-100 型傅立叶变换拉曼光谱仪(FT-Raman, 德国布鲁克公司制造)。整机配备大样品室及显微镜测量系统, 显微镜放大倍数为 400(40×10) 和 1 000(100×10) 倍; Nd: YAG 激光器, 激光波长 $1.064 \mu\text{m}$, 最大输出功率 1 500 mW; 分辨率 4 cm^{-1} , 光谱范围 $3\,500 \sim 30 \text{ cm}^{-1}$ 。

测定条件: 采用显微镜测量系统, 测定功率 300~380 mW, 扫描次数 200, 测量时间 5 min。将待测矿物置于载样板上, 移入载物台, 物镜聚焦于待测定部位后按上述条件进行测定。

3 结果

3.1 测定拉曼位移的准确度及重现性

为确认本实验条件下测出的矿物谱图, 其拉曼特征的真实性, 选用环己烷及甲苯检验了仪器测定样品拉曼位移的准确度。测得值与文献[5]中给出值的对照结果列于表 2。

为检验仪器的稳定性和测定拉曼位移的重现性, 采用 CO_2 气体标准, 在半年内断续测定 12 次, 测得 CO_2 拉曼位移 $1\,388 \text{ cm}^{-1}$ 的最大偏差为 $\pm 0.9 \text{ cm}^{-1}$ 。

由实验结果可知, RFS-100 FT-Raman 光谱仪实测拉曼位移的准确度高、精密度好, 对所选用标准矿物测出的拉曼谱图是准确无误的。

表 2 环己烷和甲苯拉曼位移测定结果

Table 2 Determination results of Raman shifts for the cyclohexane and the methylbenzene

化合物 compound	数据源 data source	拉曼位移/ cm^{-1} Raman shift									
环己烷 cyclohexane	测定值	802.4			1 028.9			1 267.1			1 444.4
	文献值	802			1 029			1 267			1 445
甲苯 methylbenzene	测定值	217.9	522.0	623.1	786.9	1 003.8	1 030.8	1 156.5	1 210.8	1 605.3	
	文献值	217	521	623	786	1 004	1 031	1 156	1 211	1 605	

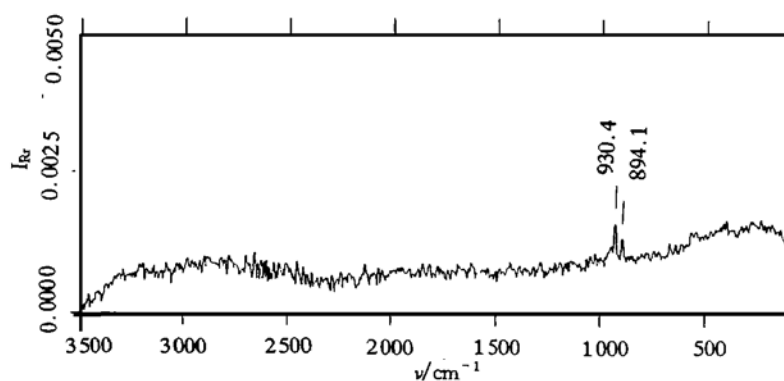


图 1 香花石拉曼光谱图

Fig. 1 Raman spectrum of the Hsianghualite

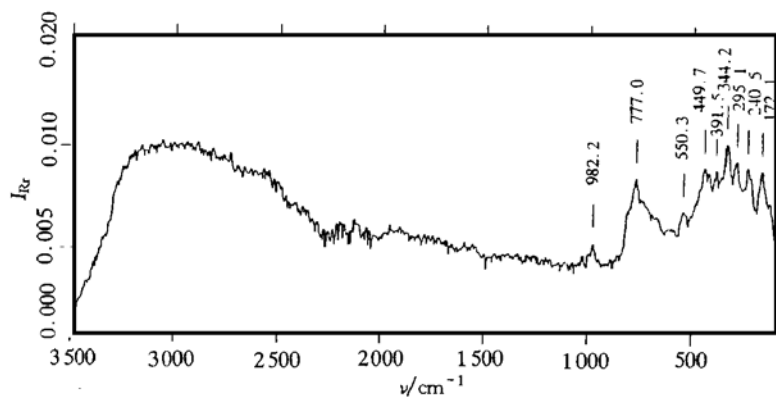


图2 包头矿拉曼光谱图

Fig. 2 Raman spectrum of the Baotite

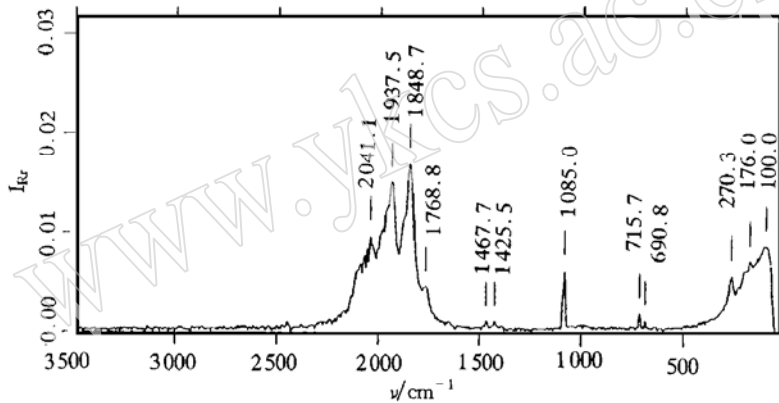


图3 黄河矿拉曼光谱图

Fig. 3 Raman spectrum of the Huanghoite

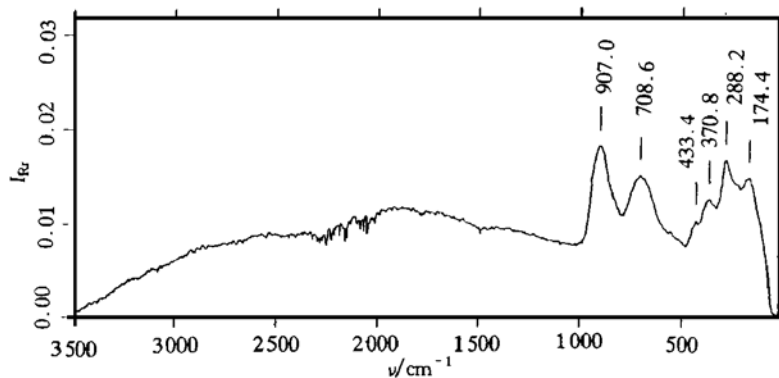


图4 蓟县矿拉曼光谱图

Fig. 4 Raman spectrum of the Jixianite

3.2 拉曼谱图

在实验设定条件下,测得香花石、包头矿、黄河矿、蓟县矿的拉曼谱图,其结果如图1~图4所示。

致谢:黄蕴慧研究员、白鸽研究员及刘建昌高级工程师为本项工作提供了矿物标样并对矿物的相关问题予以咨询,在此表示衷心地感谢。

4 参考文献

1 王濮,潘兆橹,翁玲宝,等编著.系统矿物学(中册).北京:

地质出版社,1984. 127.

2 Е. И. 谢苗诺夫,洪兴文. 包头矿——一种含稀有元素的新矿物. 地质科学. 1960(1): 1.

3 Е. И. 谢苗诺夫,张培善. 黄河矿——新发现的一种稀土矿物. 科学通报. 1961(6月号): 46.

4 刘建昌. 一种钨的新矿物——蓟县矿. 地质学报. 1979(1): 45.

5 Г. С. Ландсберг, П. А. Бажулин и М. М. Сушинский. Основные Параметры Спектров Комбинационного Рассеяния Углеродородов. Москва: Издательство Академии Наук СССР, 1956. 29.

(收稿日期: 1997-07-15 修回日期: 1997-12-12)

Study on Raman Spectrum Characteristics of Hsianghualite, Baotite, Huanghoite and Jixianite

Duan Yuran, Li Weihua

(Institute of Rock and Mineral Analysis, Chinese Academy of Geological Sciences, Beijing, 100037)

Raman spectra from Hsianghualite, Baotite, Huanghoite and Jixianite, the four new minerals found by Chinese mineralogists, have been studied in this paper. The results from accuracy and precision tests of the instrument show that the maximum error in Raman peak position measurement is $\pm 1 \text{ cm}^{-1}$.

Key words: Fourier transform Raman spectrum, Hsianghualite, Baotite, Huanghoite, Jixianite