

穆斯鲍尔谱简介

应育浦

(中国科学院地质研究所)

矿物的研究领域已从原子结构深入到电子结构,深入到矿物的精细作用和超精细相互作用。穆斯鲍尔谱是这方面的重要研究方法。它之所以得到广泛应用,是因为它是一种高灵敏的技术,能探测 10^{-8} eV的变化,它对穆斯鲍尔核所处的化学环境很敏感。

对地质学与矿物学来说, Fe^{57} 的穆斯鲍尔效应最为重要。现以它为例介绍穆斯鲍尔谱的应用。

1. 根据I.S.和Q.S.确定铁的氧化状态。 Fe^{2+} 的I.S.一般 >1.0 (毫米/秒) (相对金属铁),而 Fe^{3+} 的I.S.值 <1.0 ,一般为0.5毫米/秒左右。 Fe^{2+} 的Q.S.的都大于 Fe^{3+} 的Q.S.从吸收峰的面积比可以计算 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 比值(但不能测定Fe的绝对含量)。

2. 在晶体光学方面可以推定Fe的配位数、多面体畸变、等效点系与铁阳离子的占位。这些对结构未知的矿物研究很有价值。

3. “指纹”技术:根据不同的穆斯鲍尔谱可区分具四极双峰和具磁分裂的矿物,区分矿物的同质多型变体(如 $\alpha\text{Fe}_2\text{O}_3$ 与 $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$),区分六方和单斜磁黄铁矿以及某些硅酸盐矿物。

4. 多相物质的研究:包括陨石、月岩、月壤、矿石、海洋沉积物、煤岩与含油砂页岩等。如用电子计算机可将球粒陨石的陨硫铁、铁镍合金、橄榄石和辉石的穆斯鲍尔谱线分开,算出它们的比例。

5. 工艺过程中铁的价态、相变研究。例如对莱河矿进行氧化,还原处理后,测出不同阶段的产品穆斯鲍尔谱,对该矿的成因提出了一些看法。

6. 阳离子占位、有序-无序测定:四极双峰的个数与等效点系有联系,例如斜方辉石中Fe和Mg可占据两套等效点(M_1 和 M_2),因此,Fe的穆斯鲍尔谱,可望有两个四极双峰,从峰的面积比可以推算铁在 M_1 和 M_2 晶位上的分配,这就是阳离子占位,进而测定Fe的有序-无序。许多造岩矿物中都有铁的占位问题,穆斯鲍尔谱是研究这个问题最有效的方法通过穆斯鲍尔谱,证明 Fe^{2+} 在斜方辉石中 M_2 晶位呈有序分布。可以利用斜方辉石中 M_1 和 M_2 的 Fe^{2+} 、Mg占位,确定斜方辉石的平衡温度,例如河北迁西太古代麻粒岩中斜方辉石平衡温度为480—500℃。橄榄石穆斯鲍尔谱研究表明,在玄武岩的二辉橄榄岩包体的橄榄石中, Fe^{2+} 无序分布,说明受岩浆的高温作用;而深成岩的橄榄石中 Fe^{2+} 在 M_2 有序。低温高压的3T白云母中, Fe^{2+} 在 M_2 位呈有序分布,这是高压白云母的一个重要特征。

7. 混合价态的研究:相邻离子之间的电荷跃迁常常出现一些反常的吸收峰。目前主要研究的矿物有磁铁矿、蓝铁矿、黑柱石、钛榴石等。

此外，穆斯鲍尔效应还广泛应用于冶金学、催化化学、生物学中血红蛋白研究，非晶态材料、重力红移效应、 γ 激光、同频幅射、 γ 射线极化共振、相分析与离子注入等研究。

穆斯鲍尔谱的优点是：仪器设备不太贵，实验条件一般不苛刻，选择性强，能测定价态，对非晶体和结晶不好的物质均能研究，能研究有序-无序（比其他方法简便）。但必须说明，穆斯鲍尔谱方法不是万能的，应该与其他方法配合，方能取得最佳效果。

红外光谱在矿物学上的应用

郭 立 鹤

（中国地质科学院矿床地质研究所）

当前，红外光谱法主要用于矿物鉴定和辅助进行结构分析。作为定性分析手段，其优点是样品用量少（一般需几毫克，如采用计算机作累加扫描，则仅需几微克），也可以利用单晶体作分析测量。其次是分析速度快，一般十几分钟即可得到结果。同时不受样品状态的限制，不论气体、液体或固体，结晶或不结晶均可分析研究。

在单矿物鉴定时，仅需将有关矿物的红外谱图与已知标准谱图或合成物质谱图进行比较，即可确认。常用的可鉴定用的标准谱图及专著国外发表的有六种。最近我国也出版了两种谱图。对于某些矿物，用红外光谱不仅可以精确鉴定到矿物种，还能确定其成分范围。诸如石榴石、磷灰石、方解石、文石、沸石等族矿物。红外光谱还可以提供有关结构的信息。

红外光谱是研究矿物系列最好手段之一。它对于测定由于离子取代而引起的振动频率变化是相当精确的。其精度取决于两端离子组分相应吸收谱带的频率差 $\Delta\nu$ ； $\Delta\nu$ 愈大，精度愈高。如利用二八面体云母在 530cm^{-1} 附近谱带同 430cm^{-1} 附近谱带频率差来估计白云母—多硅白云母中的 Al-Si 取代量。七十年代已有人用 820cm^{-1} 附近谱带及 600cm^{-1} 附近谱带频率变化来鉴定 Mg-Fe-Mn 三元橄榄石系列矿物的端员组成。这已接近天然矿物的实际情况。

研究混合相的红外光谱是很有意思的。过去认为斜长是钙长石-钠长石的连续固溶体。现在已经知道，它实际上是钙长石和钠长石出溶片晶的混合物。测定斜长石的 $650\text{—}610\text{cm}^{-1}$ 范围谱带频率，可以快而准确地测定其中钠长石和钙长石的相对含量。这对于土壤、现代沉积物、粘土及氧化带的矿物研究是十分有用的。

多形现象是矿物学家非常关心的课题，例如生物壳层中方解石、文石成分的变化，反映了生物生活环境水温度的差异。

近十年来，为研究钾长石的结构状态作了大量红外有序度分析，在解决岩石形成机理、分异状态、后期地质作用的再改造及岩石含矿性等方面取得有成果。应当指出的是，X-射线衍射法对长程有序灵敏，而红外光谱则对短程有序是灵敏的。两种方法得到的结果不能简单地直接对比。

近二十年来，人们一直在注意探测阳离子在矿物中的分布状况。谱学方法比传统的结晶化学平衡规则计算得到的阳离子分布，更符合矿物的实际情况，因为矿物形成时往往不能达