

# 傅立叶红外光谱及拉曼光谱技术 在宝玉石鉴定方面的应用

李 胜

(布鲁克光谱仪器公司, 北京 100081)

20 世纪 20 年代来发展起来的波谱分析技术已被广泛地应用于矿物学研究,其中红外光谱为物质分子振动的分子光谱,反映分子振动的能级变化及分子内部的结构信息,由无机化合物组成的矿物质具备各自不同特征的红外光谱;而拉曼光谱为分子振动的散射光谱,物质振动的频率及强度由物质内部分子的结构和组成决定,拉曼光谱反映出不同物质的组成和分子内部的结构信息。近几十年来,红外、拉曼光谱技术已经成为矿物学研究的重要手段之一,同时以德国布鲁克光谱仪器公司为首的光谱仪器制造厂家不断推出红外反射光谱、红外显微镜、拉曼显微镜、探针等新的测试技术,对矿物学和矿床地球化学的研究起到了重要的推动作用。近年来随着宝玉石行业的蓬勃发展,红外、拉曼光谱作为非破坏、快速鉴定的方法得到了广泛的应用,同时矿物学研究分析的许多方法及仪器也在宝玉石鉴定中被广泛认可和使用。下面就德国布鲁克光谱仪器公司的红外、拉曼光谱仪器在宝玉石鉴定方面的应用方法做一简要介绍。

## 1 傅立叶中红外光谱

中红外光谱主要指  $4\,000\sim 400\text{cm}^{-1}$  波段的红外光谱。不同的分子振动在此波段均有吸收,几乎没有两种物质的红外光谱图是相同的,所以红外光谱也被称为“指纹谱”。中红外光谱测试是宝石鉴定中最主要的手段。

### 1.1 透射光谱法

红外光穿透宝玉石可以方便地得到其中物质的结构信息。以翡翠为例,通过  $3\,200\sim 2\,750\text{cm}^{-1}$  波段可以十分容易地鉴定翡翠内是否存在有机树脂填充物,并可以鉴别是否有染色剂出现,从而快速鉴别翡翠是 A 货、B 货还是 C 货。这种方法简便、有效,常用于红宝石、兰宝石及钻石等宝玉石的鉴别。

### 1.2 反射光谱法

对于较厚的翡翠或使用黄金及白金镶嵌的成品,红外光难以穿透,无法采集到透射光谱,此时需使用漫反射光谱附件。测试宝玉石表面的红外反射光谱是解决上述问题的一个

成熟的方法,该方法不但可以鉴定宝玉石的填充、改性,还能得到完整的宝玉石的结构信息,常用于鉴定宝石的真伪。布鲁克光谱仪器公司及北京瑞利公司还提供适合宝玉石测试、对焦的漫反射附件。

### 1.3 显微光谱法

红外显微镜可以将红外光由  $7\sim 13\text{mm}$  的光束聚焦到  $10\sim 20\mu\text{m}$ ,通过研究钻石中的包裹体来判断是否为天然钻石。而切割打磨过的钻石、红宝石、蓝宝石,由于切割面会将红外光散射,使透射红外光无法聚焦到检测器上,解决此问题只需将红外光显微聚焦到一个切割面上即可测得其红外光谱。

## 2 傅立叶近红外光谱

近红外光谱主要指  $12\,500\sim 4\,000\text{ cm}^{-1}$  波段的红外光谱。此波段是中红外光谱的倍频和组合频区,其特点是穿透能力强,穿透深度可达到  $1\text{mm}$  以上,而中红外光的穿透能力只能到  $40\mu\text{m}$  左右。当翡翠 B 货表面打蜡较厚时,中红外光难以穿透蜡层,无法得到石蜡层以下填充树脂的相关信息,从而产生误判;而近红外光可深入宝玉石  $1\text{mm}$  以上,树脂、石蜡的光谱信息均不会漏掉,确保了鉴定的准确性。因此,近年来越来越多的鉴定部门采用中、近红外双波段的傅立叶红外光谱仪,不仅对翡翠 A、B、C 货进行鉴定而且可通过观察红宝石在  $7\,000\text{ cm}^{-1}$  左右近红外谱区中水的构态来鉴定红宝石的真伪。

布鲁克光谱仪器公司还推出了光导纤维连接的近红外手持式探针,为鉴别无规则或大块宝玉石提供了便利的条件。

## 3 傅立叶拉曼光谱

拉曼光谱得到的是物质组成和分子的结构信息,在矿物学中用于分析矿物结构及包裹体。由于拉曼光谱为散射光谱,对样品形态、表面没有要求,因此很适合宝玉石分析。

布鲁克光谱仪器公司生产的  $1064\text{ nm}$  激光激发的傅立叶拉曼光谱仪,荧光干扰小,除分析钻石、红宝石、蓝宝石以外,还可用于鉴定翡翠、和田玉及其他玉种的相关填充物、染色剂等。

## 4 鉴别谱图库

国际上通用的谱图库,如 SADTLER 谱库中只有矿物、无机物标准谱图,没有专业的宝玉石谱图库,以致测试宝玉石得到的光谱图很难找到标准谱图参考,只能寻找有关文献比较,使鉴定的准确度降低,增加了宝玉石鉴定工作的难度。近年来,我国一些宝玉石矿物专家为建立宝玉石谱库做了许多开拓性的工作,为宝玉石的鉴定提供了大量的红外标准谱图,大大简化了宝玉石鉴定工作的难度,如国土资源部矿产资源研究所的郭立鹤研究员已经建立了宝玉石红外谱库,通过使用计算机检索,提高了鉴定的准确度。同时谱图库中还

给出各种宝玉石的矿物、物理化学等相关信息,极大方便了使用者。

## 5 总结

随着红外、近红外、拉曼光谱在宝玉石鉴定应用中的不断深入,国际仪器厂家最新的仪器技术也将不断被引入,鉴定方法已经从判定真伪、修饰发展到区分天然、人造,甚至帮助评价宝玉石等级。宝玉石行业的专家、用户及仪器厂商将相互合作进一步拓宽研究范围、提高仪器鉴定效率及准确度,从而全面推动宝玉石业的发展。

www.yskw.ac.cn