

文章编号 :1000-0550(2001)02-0309-06

偏岭石结构研究^①

陈济舟¹ 刘长龄² 刘钦甫³ 王俊桥¹ 张鹏飞³ 陈新邦²

(天津理工学院材料物理所 天津 300191) (天津地质研究院 天津 300061)

(中国矿业大学北京校区 地质系 北京 100083)

摘要 用广角度 X 射线散射 (WAXS) 和由它得到的径向分布函数 (RDF) 研究了偏岭石的结构。偏岭石是一种以非晶组份为主的部分有序的中间序性物质。构成偏岭石的结构单元是四面体 MO_4 [$M = Si, Al$] 和八面体 AlO_6 [$O = O, OH$]。偏岭石结构中近邻四面体与四面体共顶连接构成 M—O 层, 八面体与八面体共棱或共面连接构成 Al—O 层; 而四面体与八面体通过不规则的共顶连接构成近程层状结构。它的近程结构将不随序性或结晶性变化。它的微结构及其随热处理温度的变化主要决定于结构基元之间的关系和序性。偏岭石是结构不同于变高岭石的一种粘土。

关键词 偏岭石 结构 径向分布函数

第一作者简介 陈济舟 男 1939 年 11 月出生 研究员 材料物理与化学

中图分类号 P578 **文献标识码** A

偏岭石产于我国山西北部及近邻的内蒙南部的晚石炭世含煤地层中, 属于温湿气候的沼泽相标准的胶体化学沉积—成岩矿物。它的物质来源为酸性火山灰从高空降落于沼泽中, 在富含有机酸的沼泽水中溶蚀 ($pH = 4.8 \sim 5.0$), 成为胶体 $Al_2O_3/SiO_2 = 1/2$ 的沉积物或水 英石, 在成岩作用下转变而成偏岭石^[1, 2]。

偏岭石 ($Al_2O_3 \cdot 2SiO_2 \cdot H_2O$) 于 1963 年由刘长龄等人发现^[1]。该矿物的地质产状, 成因和理化性质已进行了广泛而深入的研究^[2~4]。然而, 由于条件所限, 偏岭石的结构并未完全弄清楚。虽然曾经对偏岭石的结构进行了常温和高温 X 射线衍射分析, 并获得了一定的结果。但是这种研究结晶矿物结构非常有效的方法对于准晶质或半晶质类矿物难以奏效。广角度 X 射线和中子衍射以及由它们得到的径向分布函数 (RDF) 已用来研究非晶态岩石的结构^[5, 6]。由于偏岭石是一种以非晶组份为主 (接近非晶) 的部分有序的中间序性物质, 因此, 本文采用这个方法对偏岭石结构进行研究。

1 原理和方法

对于各向同性非晶固体, 其结构通常用原子或电子数径向分布函数 $RDF_{ij}(r) = 4\pi r^2 \rho_{ij}(r)$ 作统计描述。 $\rho_{ij}(r)$ 表示在一个多组份的非晶物质中距离 i 类原子 r 处的 j 原子数密度。因此, $RDF_{ij}(r)$ 表示距 i 类原子 r 处的 j 原子数。对于含有 n 个组份的非晶物质, 其结构原则上需要 $n(n+1)/2$ 个 $RDF_{ij}(r)$ 来描述。而从 X 射线衍射测量得到的全径向分布函数 $RDF(r)$ 是偏

径向分布函数 $RDF_{ij}(r)$ 的权重和。为了获得较细微的结构信息, 需要从全径向分布函数分离出偏径向分布函数。迄今, 只有对于 $n = 2$ 的简单的非晶物质可以严格地实现这种分离。因此, 对于通常 $n \geq 2$ 的非晶态岩石和矿物, 用 RDF 来揭示其结构细节是非常困难的。本文采用一种近似方法, 即多峰重叠分离法, 从全径向分布函数分离出理论和实验上合理的近邻和隔邻原子间距峰, 通过分析 RDF 分离峰和相干散射强度峰的峰参数, 讨论了偏岭石的微结构。本文采用的有效电子密度径向分布函数^[7], 通过下列各式可从测量的广角度 X 射线散射强度 $I_{exp}(k)$ 求得:

$$RDF(r) = 4\pi r^2 \sum N_i K_i \rho_e + 2r/\pi \int_0^\infty F(k) \text{Si}(kr) dk \quad (1)$$

$$F(k) = k [Y(k) - \sum N_i f_i^2(k)] / f_e^2(k) \quad (2)$$

$Y(k) = \alpha [I_{exp}(k) - I_b(k)] [A(k) \cdot P(k) MP(k)] - I_{inc}(k)$ (3) 式中, $k = 4\pi \sin \theta / \lambda$, θ 为散射角, λ 为所用的 X 射线波长; ρ_e 为样品的平均有效电子密度; $f_i(k) = \sum N_i f_i(k) / \sum N_i Z_i$, N_i 为组成单元中 i 类原子的个数, Z_i 为原子系数; $K_i = f_i(k) / f_e(k)$ 为 i 类原子的有效电子数; $F(k)$ 为结构因子; $Y(k)$ 为从实验测量的 X 射线散射强度 $I_{exp}(k)$, 扣除空气散射强度 $I_b(k)$ 和 Compton 散射强度 $I_{inc}(k)$, 进行了吸收因数 $A(k)$, 偏振因数 $P(k)$ 和多重散射因数 $MP(k)$ 校正后的样品相干散射强度 (电子单位); α 为将任意单位强度转换成电子单位强度的归一化因子。本文采用作者自编程序, 从实验测量的 X 射线散射强度 $I_{exp}(k)$ 计算样品的相干散射强度 $Y(k)$ 和全径向分布函数 $RDF(r)$, 然后按如下所述方法从 $Y(k)$ 和 $RDF(r)$ 获得与样品结构有关的数

① 国家自然科学基金 (批准号: 49802010) 和天津市“材料物理与化学”重点学科资助

据和信息。非晶物质的相干散射强度($Y(k)$)上出现的散射峰是非晶物质中常见的平均原子间距的反映。各散射峰的位置(k)对应的原子间距(r)可以用近似式 $r = 2.5\pi/k$ 求得。根据晶体化学知识,可以确认这些原子间距所对应的原子对。在本文中,这些原子间距不但解释微结构的重要依据,而且以它们作为 RDF 分峰的初始参数,克服了分峰法中的多解问题,使分峰结果更具有客观性。

假定样品中的偏径向分布函数 RDF(r)可用(4)式所示的高斯—柯西函数表征:

$$RDF(r) = f_i h_i \exp\{-\ln[(r - r_i)/w_i]^2\} + (1 - f_i) h_i [1 + 4(r - r_i)^2/w_i^2]^{-2} \quad (4)$$

式中 f_i, h_i, r_i 和 w_i 分别为分离峰的峰形因子,峰高,峰位和峰宽。这些峰参数可通过求下面的目标函数的极小值计算得到。

$$S = \sum [RDF(r) - RDF(r)]^2 \quad (5)$$

式中 M 为分峰范围实验测定的 $RDF(r)$ 数据个数。分峰的好坏用拟合度 $\sigma = \{S/\sum [RDF(r)]^2\}^{1/2}$ 来表示。一般要求 $\sigma < 0.01$ 。根据分峰所得峰参数原则上就可以获得原子间距、配位数和有序性等结构信息。

2 实验

2.1 试样

PO_4 为晋北石炭二叠纪煤系中偏岭石(在玛瑙钵中研细);偏岭石在 $600\text{ }^\circ\text{C}$ 、 $700\text{ }^\circ\text{C}$ 和 $800\text{ }^\circ\text{C}$ 玛弗炉中加热保温 1 小时,分别得到 $600\text{ }^\circ\text{C}$ 、 $700\text{ }^\circ\text{C}$ 和 $800\text{ }^\circ\text{C}$ 温度热处理偏岭石样品。

2.2 X 射线散射测量

采用大功率 X 射线衍射仪(D-MAX/RC, 12 kw)进行样品和空白的 WAXS 测量(测量范围 $2\theta = 5 \sim 140^\circ$, 阶梯扫描步阶 $0.2 \sim 0.3^\circ$)。用弯曲石墨晶体单色器获得单色 $CuK\alpha$ (50 kv , 200 mA)。为了减少计数统计误差,计数值/步阶 $> 10^4$ 。为了使低 2θ 测量范围扫描时 X 射线不照射在样品架上,狭缝系统的宽度随 2θ 测量范围变化。不同测量条件得到的(WAXS)强度规范化为统一测量条件的强度 $I_{exp}(k)$ 。用和样品相同的测量条件收集空白(无样)散射强度。

3 结果和讨论

(1) 图 1 为偏岭石(PO_4)的相干散射强度($Y_i(k)$)。从图 1 可见,偏岭石的相干散射强度图是由非常宽散的非晶散射峰(第一主峰位于 $\sim 15.9\text{ nm}^{-1}$)和峰位在 $k = 36.5, 18.2, 17.5$, 和 14.4 nm^{-1} 等处的稍

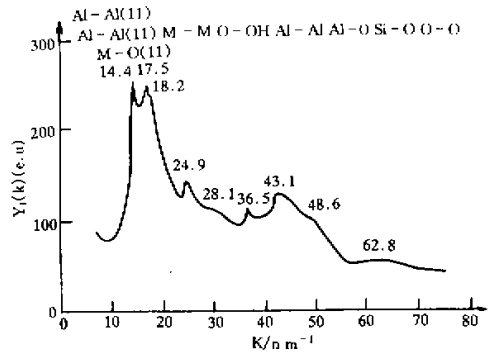


图 1 偏岭石的 X 射线相干散射强度图

Fig.1 X-ray interference scattering of pianlinitite

略尖锐的小峰组成。因为有序性与峰宽成反比,所以这些小而稍尖的峰表明:偏岭石结构中存在某种程度的有序性组份。按结晶度近似计算有序组份的含量大略为 5%。按峰宽度近似计算其有序尺寸为几个 nm;而非晶组份的短程有序尺寸 $\leq 1\text{ nm}$,因此,偏岭石是一种以非晶组份为主(接近非晶)的部分有序的中间序性物质。

(2) 偏岭石(PO_4)的相干散射强度($Y_i(k)$)上的各峰的物理意义可从它的峰位(k)计算的原子间距($r = 2.5\pi/k$)得到说明(表 1)。

$k = 48.6\text{ nm}^{-1}$ 处的峰对应的原子间距为 0.162 nm ,与四面体 $[SiO_4]$ 的 Si—O 间距一致。 43.1 nm^{-1} 处的峰对应的原子间距为 0.182 nm ,这个间距值介于四面体 $[AlO_4]$ 的 Al—O 间距(0.175 nm)和八面体 $[AlO_6]$ 的 Al—O 间距(0.191 nm)之间。这些事实表明:偏岭石的结构中存在四面体 $[MO_4]$ ($M = Si, Al$) 和八面体 $[AlO_6]$ 结构单元。峰位在 28.1 nm^{-1} 处的峰对应的原子间距为 0.28 nm 。它除了来自 O—O 间距($0.265 \sim 0.275\text{ nm}$)贡献,还包含了 OH—O 间距(0.285 nm)。和后述的近邻共棱八面体中心的 Al 离子间距(0.28 nm)的贡献。 $k = 24.9\text{ nm}^{-1}$ 处的峰对应的原子间距为 0.32 nm ,这个间距与共顶连接的四面体中心的 M 离子间距(0.32 nm)相同,但偏离规则共顶连接四面体—八面体中心的 Al 离子间距(0.34 nm)较大。这可能暗示同种多面体之间的连接较异种多面体之间的连接规则。因此,偏岭石可能具有短程层状结构。较有序四面体 $[MO_4]$ ($M = Si, Al$) 层和八面体 $[AlO_6]$ 层通过四面体—八面体的共顶连接交替排列形成层状结构。在 $k = 36.5\text{ nm}^{-1}$ 处的峰对应的原子间距为 0.215 nm ,这一间距接近共面八面体的

表 1 偏岭石的相干散射峰位 (k) 及其对应的原子间距 (r) 和原子对

Table 1 The peak positions (k) Of the coherent X-ray scattering of pianlinitite and corresponding

散射峰位 (k)	14.4	17.5	18.2	24.9	28.1	36.5	43.1	48.6	64.0
原子间距 (r)	0.545	0.448	0.431	0.318	0.280	0.215	0.182	0.162	0.25?
相应的主要原子对	Al—Al	Al—Al	M—O	M—M	O—OH	Al—Al	Al—O	Si—O	O—O?

特征原子间距,即近邻共面八面体中心的 Al 离子间距 (0.217 nm)。

以上我们主要从 $Y(k)$ 得到的近邻原子间距讨论了偏岭石多面体内部原子间以及近邻多面体之间的关系。下面将用隔邻原子间距进一步讨论多面体之间的关系和序性。

在 $k = 17.5 \text{ nm}^{-1}$ 处的峰对应的原子间距为 0.448 nm, 这可解释为共面八面体隔邻 Al 离子间距 (0.44 nm)。 $k = 18.2 \text{ nm}^{-1}$ 处的峰对应的原子间距为 0.431 nm, 此峰主要为近邻 $[\text{MO}_4]$ 间的隔邻的氧—氧间距 (O—O(II)) 和硅 (Al)—氧间距 (M—O(II)) 间距的贡献。这个峰和 24.9 nm^{-1} 处的峰一致表明: 虽然 $[\text{MO}_4]$ 之间没有规则排列形成的长程有序结晶, 但是存在某种程度的有序性。由此可看出: 虽然 $[\text{MO}_4]$ 之间的键角 M—O—M 是随机变化的, 但是它们的重心是近乎规则排列的。对应原子间距为 0.545 nm 的峰位在 $k = 14.4 \text{ nm}^{-1}$ 的峰, 主要为共棱八面体的隔邻 Al 离子间距 (0.54 nm) 和 $[\text{MO}_4]$ 间的隔邻 M—M 间距。上述事实进一步说明了偏岭石结构中近邻四面体与四面体, 四面体与八面体是共顶连接的, 八面体与八面体是共棱或共面连接的。

图 2 给出了偏岭石的 RDF (r) 及其分峰结果。表 2 给出了分峰所得峰参数。不难看出: RDF (r) 分峰所得原子间距与从 $Y(k)$ 得到的原子间距基本上是对等的, 而且拟合误差小于 0.71%, 因而分峰结果是满意的。

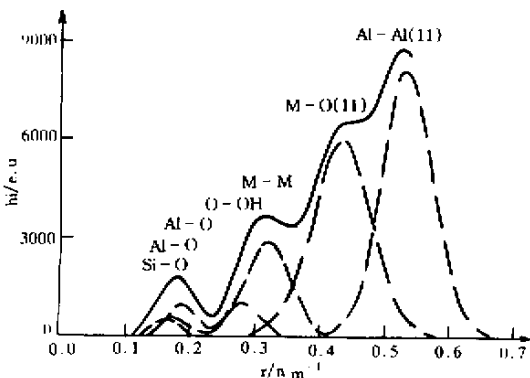


图 2 偏岭石的 RDF (r) 及其分峰结果

Fig.2 The RDF (r) and peak separation of pianlinitite

从表 2 可见, 所有分离峰的峰形因子都接近 1, 表明原子间的电子密度分布遵从高斯分布。因而可以用峰宽来表示原子间距的均方根偏差, 从而表征非晶结构的无序性。表 2 中的峰宽可分为两大类: 一类是宽度比较小的 (0.05 ~ 0.06 nm), 如原子间距 0.161, 0.176, 0.191 和 0.285 nm 等; 一类是宽度比较大的 (0.08 ~ 0.11 nm), 如原子间距 0.32, 0.43 和 0.54 nm 等。不难看出: 宽度比较小的峰都是对应结构基元 $[\text{MO}_4]$ 和 $[\text{AlO}_6]$ 内原子间距, 而宽度比较大的峰都是对应结构基元之间的原子间距。这说明结构基元 $[\text{MO}_4]$ 和 $[\text{AlO}_6]$ 内的原子分布要比结构基元之间的原子分布规整。表 2 中的近邻原子间距非常接近按结晶化学计算的原子间距。因此, 可认为偏岭石的近程结构将不随结晶性变化。其结构序性主要决定于结构基元之间的原子分布。由于各隔邻 (或近邻) 原子间距峰的峰宽大体上是相近的, 因此, 可用峰高来反映这些原子间距序性的差异。

(3) 我们可从偏岭石微结构随温度变化来进一步了解它的结构。图 3 给出了在不同温度热处理的偏岭石的相干散射强度图。表 3 给出了在不同温度热处理样品的 RDF 分峰结果。

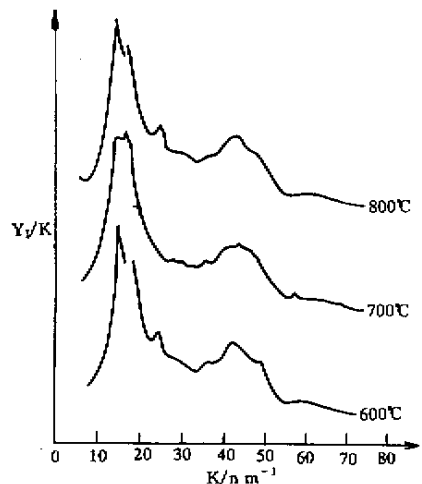


图 3 600 °C、700 °C 和 800 °C 热处理偏岭石的 X 射线相干散射强度图

Fig.3 X-ray interference scatterings of pianlinitite heat treated at 600 °C, 700 °C and 800 °C

不难看出,不同温度热处理样品的散射图和分峰结果大体相似,但细节上存在差异。大体相似性说明热处理没有改变偏岭石的总体结构,细节上存在差异可解释其结构发生了如下变化:

(1) 从表3可见,近邻原子间距值和它的峰形因子基本上不受热处理的影响。然而,四面体 $[MO_4]$ 的M—O间距峰的高度随温度升高而增大;反之,八面体 $[AlO_6]$ 的Al—O间距峰的高度随温度升高而减小。这可能意味着热处理使八面体结构基元发生变形,而使

四面体结构基元变得规则。

(2) 从图3可见,属于结构基元之间的原子间距峰($14.4 \sim 18.2 \text{ nm}^{-1}$)随温度有不同的变化。对应八面体结构基元连结的 $k = 17.6 \text{ nm}^{-1}$ 处的峰基本不随温度变化,而对应四面体结构基元连结的 $k = 14.4, 18.2$ 和 24.9 nm^{-1} 处的峰随温度变化明显。这说明热处理过程中八面体的连结是稳定的,而四面体的连结及其序性是变化的。

(3) 不同温度热处理样品的散射图显示,700℃

表2 偏岭石的RDF分峰参数

Table 2 The peak parameters deived from the peak seprating of RDF for pianlinite

峰位 $r_i(\text{nm} \times 10)$	1.62	1.76	1.91	2.10	2.85	3.22	4.32	5.36
峰宽 $w_i(\text{nm} \times 10)$	0.50	0.59	0.55	0.33	0.58	0.83	1.08	0.95
峰高 $h_i(\text{e.u.})$	482	507	976	76	1 043	2 884	5 879	8 017
峰形因子 f_i	1.00	1.00	1.00	0.88	1.00	1.00	0.95	0.97

表3 偏岭石部分原子间距分峰参数随热处理温度的变化

Table 3 The change of partial atom distances with heat treatment temperatures for pianlinite

样 品	偏岭石(PO_4)				600℃热处理				700℃热处理				800℃热处理			
	r_i	f_i	h_i	w_i	r_i	f_i	h_i	w_i	r_i	f_i	h_i	w_i	r_i	f_i	h_i	w_i
Si—O	0.162	1.00	482	0.051	0.162	1.00	514	0.049	0.161	1.00	621	0.049	0.162	1.00	647	0.050
原 Al—O(AlO_4)	0.175	1.00	507	0.060	0.174	1.00	527	0.058	0.175	1.00	669	0.063	0.176	1.00	656	0.063
Al—O(AlO_6)	0.192	1.00	975	0.055	0.190	1.00	979	0.051	0.191	1.00	872	0.047	0.191	1.00	861	0.049
子 M—M	0.322	1.00	2 875	0.083	0.325	0.77	2936	0.083	0.324	0.74	3 079	0.089	0.324	0.97	3 128	0.087
M—O(II)	0.434	0.94	5 678	0.102	0.434	0.84	6 208	0.110	0.431	1.00	6 218	0.096	0.433	1.00	6 194	0.100
对 Al—Al(II)	0.536	0.97	8 015	0.095	0.538	1.00	8 468	0.096	0.536	0.99	8 992	0.099	0.537	1.00	8 901	0.100

热处理样品的非晶主峰($\sim 15.9 \text{ nm}^{-1}$)突出,而对应四面体结构基元连结的峰(如 $k = 14.4$ 和 24.9 nm^{-1})变得小而宽。因此,它的非晶度最大。另一方面,在700℃热处理样品的相干散射强度图上,在较宽的散射角范围出现了不少尖的弱峰,这说明700℃热处理样品是由无序性较高的非晶组份和结晶组份组成的半晶物质。而600℃和800℃热处理的相干散射强度图上非晶主峰附近($\sim 15.9 \text{ nm}^{-1}$)的尖峰明显;而在其他较宽的散射角范围很难观察到尖峰,因此把它们看成介于结晶与非晶之间的中间序性物质较为恰当。

(4) 有些文献认为,偏岭石就是变高岭石,即高岭石经煤自燃而形成的产物。图4给出了高岭石在600℃、700℃和800℃热处理一小时所得变高岭石的X射线相干散射强度图。比较图3,图1与图4,显而易见,变高岭石的散射图与偏岭石及其不同温度热处理样品的散射图是不同的。下面我们详细讨论偏岭石与变高岭石结构的差别:

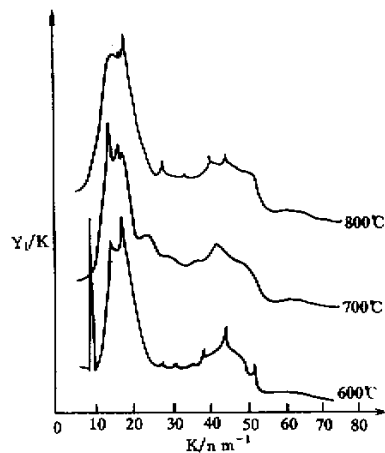


图4 600℃、700℃和800℃变高岭石的X射线相干散射强度图

Fig.4 X-ray interference scatterings of metakaolinite heat treated at 600℃, 700℃ and 800℃ (1) 比较图3和图4可见:变高岭石的X射线相干

散射强度图是由分布在较宽角度范围的尖锐的结晶衍射峰和宽散的非晶散射峰组成的。这表明变高岭石是由非晶相和结晶相组成的半晶物质。X 射线衍射分析表明:600 °C 变高岭石的结晶相主要是 Al—Si—O—OH—H₂O(Aluminium Silicate Hydroxide Hydrate ,JCPDS 291 490) ,其次是 SiO₂(Quartz ,JCPDS 50 490) ;而 700 °C 和 800 °C 变高岭石的结晶相基本上是 SiO₂。这些结晶相的有序尺寸(晶粒大小)为几十个 nm。如前所述 ,偏岭石是由非晶相和中间序态组成的半晶物质 ,而其有序组份的有序尺寸为几个 nm。用前述分峰方法分离结晶衍射峰和非晶散射峰 ,结晶度用 $X_c = I_c / [I_c + I_a]$ 计算(I_c 和 I_a 分别为分离结晶度不同衍射峰和非晶散射峰的面积)。计算得变高岭石的结晶度(X_c)大约为 7% ~ 10%。如果我们近似地把偏岭石中的有序性看作是结晶性 ,则偏岭石的结晶度(X_c)少于 5%。由此可见 ,偏岭石与变高岭石不但相组成不同 ,而且结晶度也不同。

(2) 从图 3 A 显而易见 ,偏岭石的 X 射线相干散射强度图基本不随温度变化 ,而变高岭石的 X 射线相干散射强度图随温度变化。因此它们的结构温度稳定性是不同的 ,偏岭石的结构稳定性高于变高岭石的。所有样品的 X 射线相干散射图上 ,在大约 $k = 28 \sim 30 \text{ nm}^{-1}$ 范围 有一宽散小峰 ,如前所述 ,此峰主要对应平均近邻的 O—O 间距(0.265 nm)或者近邻共棱八面体中心的 Al 离子间距(0.28 nm)。偏岭石的这个峰位为 28.1 nm^{-1} ,它对应的原子间距为 0.285 nm ,接近近邻共棱八面体中心的 Al 离子间距。而变高岭石的这个峰位为 29.6 nm^{-1} ,它对应的原子间距为 0.265 nm ,接近近邻的 O—O 间距。由此看来 ,偏岭石中存在共棱八面体 ,而变高岭石中无共棱八面体 ,近邻八面体主要以共面形式存在。无疑 ,共面八面体的增多导致其中心的 Al 离子间距缩短 ,同号离子的排斥增大 ,降低结构稳定性。这大概是变高岭石的结构稳定性低于偏

岭石之故。

(3) 比较图 3 和图 4 可见 ,偏岭石及其所有加热产物的 X 射线衍射图上在 k 大约 2.59 nm^{-1} 处有一宽散小峰 ,而所有变高岭石的 X 射线衍射图上看来无此小峰。因为这个宽散小峰主要对应于共顶近邻四面体 $[\text{MO}_4]$ ($M = \text{Si}, \text{Al}$) 中心阳离子间距($M—M$: 0.32 nm) ,因此我们认为偏岭石结构中近邻四面体 $[\text{MO}_4]$ 之间的连结比较规整 ,而变高岭石中 ,虽然存在结晶 SiO₂ ,但非晶相结构中近邻四面体 $[\text{MO}_4]$ 之间的连结比较无序。

(4) 表 3 ,表 4 为对偏岭石与变高岭石的 RDF 进行分峰所得近程原子间距参数。不难看出 ,偏岭石与变高岭石的近程结构是十分接近的。然而 ,除了从散射图看出它们的差别以外 ,我们还可以从 RDF 的分峰参数进一步分辨它们结构的差异。例如 对于偏岭石 ,四面体 $[\text{MO}_4]$ 的 M—O 间距随温度升高而增大 ,八面体 $[\text{AlO}_6]$ 的 Al—O 间距随温度升高而减少 ;而对于变高岭石 则无此现象。这可能意味着 ,虽然热处理未使偏岭石晶化 ,但使它的内部结构发生了调动。而对于变高岭石来说 ,热处理主要导致其结晶性变化 ,这是它们之间的又一不同。

综上所述 ,虽然偏岭石与变高岭石具有相似的近程结构 ,但它们的微结构是不同的。

5 结论

综上所述 ,偏岭石是一种以非晶组份为主的部分有序的中间序性物质。构成偏岭石的结构单元是四面体 $[\text{MO}_4]$ ($M = \text{Si}, \text{Al}$) 和八面体 $[\text{AlO}_6]$ ($O = \text{O}, \text{OH}$)。偏岭石结构中近邻四面体与四面体共顶连接构成 M—O 层 ,八面体与八面体共棱或共面连接构成 Al—O 层 ,而四面体与八面体通过不规则的共顶连接构成近程层状结构。它的近程结构将不随序性或结晶性变

表 4 变高岭石部分原子间距分峰参数随温度的变化

Table 4 The change of partial atom distances with heat treatment temperatures for metakaolinite

样 品	600 °C 变高岭石				700 °C 变高岭石				800 °C 变高岭石				
	r_i	f_i	h_i	w_i	r_i	f_i	h_i	w_i	r_i	f_i	h_i	w_i	
原	Si—O	0.162	1.00	855	0.053	0.162	1.00	498	0.052	0.162	1.00	524	0.055
子	Al—([AlO ₄])	0.175	1.00	677	0.057	0.176	1.00	686	0.063	0.175	1.00	734	0.063
	Al—([AlO ₆])	0.196	1.00	922	0.046	0.191	1.00	906	0.053	0.191	1.00	906	0.052
对	M—M	0.320	1.00	3 132	0.090	0.323	1.00	3 174	0.086	0.320	1.00	3 028	0.089
	M—O O—(II)	0.412	0.99	3 837	0.086	0.415	0.83	3 512	0.089	0.413	0.92	3 587	0.088
	Al—Al (II)	0.540	0.97	8 765	0.095	0.538	1.00	8 686	0.096	0.536	0.99	8 673	0.097

化。它的微结构及其随热处理温度的变化主要决定于 结构基元之间的关系和序性。偏岭石是结构不同于变

高岭石的粘土矿物。

致谢:本工作获国家自然科学基金(项目批准号:49802010)和天津市“材料物理与化学”重点学科资助。

参 考 文 献

- 1 刘长龄等. 偏岭石—粘土矿物新种[J]. 科学通报, 1963 (10): 59
- 2 刘长龄. 沉积岩新种—偏岭石粘土岩研究[J]. 科学通报, 1979 (13): 611
- 3 刘长龄. 晋北煤层夹矸粘土岩, 偏岭石及紫矸的物质来源与成因[J]. 沉积学报, 1990 (1): 65
- 4 刘长龄. 偏岭石矿物新资料[J]. 科学通报, 1979 (12): 553
- 5 陈济舟, 王俊桥, 毕于润. 非晶质岩石结构的 RDF 研究[J]. 科学通报, 1999 (7): 1875
- 6 Wright A C, Desa J A E, Weeks R A J. Noncrys[J]. Solid, 1984 (1/3): 35
- 7 Warren B E. X-Ray Diffractor[M]. Addison-Wesley, Reading, Mass, 1969

The Study on Pianlinite Structure

CHEN Ji-zhou¹ LIU Chang-ling² LIU Qin-fu³
WANG Jun-qiao¹ ZHANG Beng-fei³ CHEN Xin-bang²

¹(Institute of material physics, Tianjin Institute of Technology, Tianjin 300191)

²(Tianjin Institute of Geology, Tianjin 300061)

³(Geological Department, China University of Mining and Technology, Beijing 100083)

Abstract

Using the wide angle x-ray scattering (WAXS) and radial distribution function (RDF), the structure of pianlinite occurring in China has been discussed. It is shown that pianlinite is mainly composed of amorphous phase with less amount of order phase. The structural units constructing pianlinite are tetrahedron [MO₄] (M = Si, Al) and octahedron [AlO₆] (O = O, OH). The connecting of neighbour tetrahedron with common vertex angle forms M—O layer (M = Al, Si) and the connection of neighbour octahedron with common edge or plane forms Al—O layer. The structure of pianlinite is formed from the such kind layers. Its structure change with temperatures is mainly caused by that of the correlation or order between structural units and its structure in neighbour range is nearly unchanged. Pianlinite is a clay rock with the structure different from that of the metakaolinites.

Key words pianlinite radial distribution function wide angle x-ray scattering