

文章编号:1673-9469(2009)02-0059-03

变差系数法在伊/蒙混层矿物混层有序性判断中的应用

徐博会,丁述理

(河北工程大学 资源学院,河北 邯郸 056038)

摘要:基于数理统计理论,利用变差系数对伊/蒙混层矿物的混层结构有序性进行判断。通过对样品进行X射线衍射测试,获得各个样品中伊/蒙混层矿物的特征峰值,并将所得数据作为统计对象,采用变差系数法对所得数据进行统计计算。结果表明6个样品的变差系数均小于0.75,据此可判断所有样品中伊/蒙混层矿物的混层结构为规则混层结构。与采用间隔层数法相比,差异系数法可以较为快捷而准确的判断伊/蒙混层矿物的混层有序性。

关键词:伊/蒙混层;变差系数;有序性

中图分类号: P578

文献标识码: A

Coefficient of variation and its application in orderliness judgment of illite - montmorillonite mixed - layer mineral

XU Bo-hui, DING Shu-li

(College of Natural Resource, Hebei University of Engineering, Handan 056038, China)

Abstract: Order structure of illite - montmorillonite mixed - layer mineral was judged by coefficient of variation, based on mathematical statistics theory. Through the X - ray diffraction, characteristic peak height of illite - montmorillonite mixed - layer mineral was obtained. Being statistical object, these data were progressed in statistical calculation by coefficient of variation method. It was shown that coefficient of variation of 6 samples was below 0.75. Mixed - layer structure of illite - montmorillonite in all samples was regular mixed - layer. Difference coefficient method is rapid and accurate for the judgement of orderliness of illite - montmorillonite mixed - layer mineral, compared with interval coefficient method.

Key words: illite - montmorillonite mixed - layer; coefficient of variation; orderliness

在富钾的地质环境中,蒙脱石可以向伊利石发生进一步的转化。在蒙脱石向伊利石的转化过程中,可以形成由不同比例的蒙脱石膨胀性晶层与伊利石非膨胀性晶层构成的伊/蒙混层粘土矿物^[1-3]。根据单元晶层沿c轴堆积的规律性,可以分为有序混层粘土矿物和无序混层粘土矿物^[4,5]。伊/蒙混层矿物的有序性反映了蒙脱石发生伊利石化的程度,研究伊/蒙混层矿物的有序性,对于了解成岩程度和判别有机质成熟度都具有重要的地质意义^[6]。

目前多数学者和研究人员多采用间隔层数(R)来判断伊/蒙混层矿物的有序性,这种方法需要首先计算出伊/蒙混层矿物的混层比 I/S,然后通过一定

的方程计算得到其有序性^[7]。该方法的计算量较大,有时需借助计算机才能完成。作者采用变差系数法^[8]对河北某地伊利石矿中的伊/蒙混层矿物的有序性进行了研究,以期在判断伊/蒙混层矿物有序性方面寻找一种较为简便而准确的方法。

1 计算方法与原理

设样本序列为 $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$, n 为样本容量,其平均值的无偏估计为

$$\bar{X} = \sum x_i / n \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

样本的标准偏差为

收稿日期:2008-12-06

基金项目:河北省自然科学基金项目(D2007000695, D2009000833)

特约专稿

作者简介:徐博会(1981-),男,山东东营人,助教,从事非金属开发利用研究。

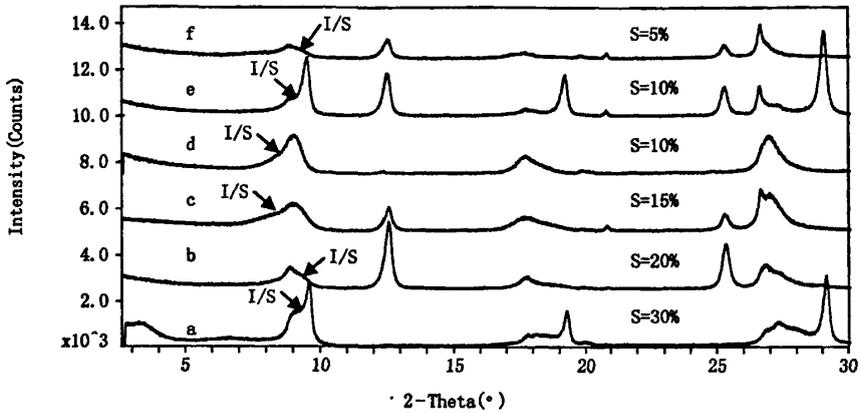


图1 6个样品的X射线衍射图谱

Fig.1 The XRD patterns of six samples

$$S = [\sum(x_i - \bar{x})^2 / (n - 1)]^{1/2} (i = 1, 2, \dots, n)$$

那么, 样本的变差系数为

$$Cv = S/\bar{X}$$

2 样品及测试方法

试验所需的6个样品采自河北某伊利石矿, 样品呈灰色、灰绿色。粉碎过200目分样筛, 105℃烘干24h, 然后将其用乙二醇饱和, 在相对湿度为50%的条件下, 利用日本理学D/max-RA衍射仪进行X射线衍射测试, 测试条件为: Cu-K α 辐射, 发散狭缝与散射狭缝均为1°, 接收狭缝为0.3mm; 扫描速度为4°(2 θ)/min, 采样步宽0.04°(2 θ), 工作电压40kV, 工作电流100mA, 扫描范围为2.5°-30°(2 θ)。

3 伊/蒙混层矿物有序性的判断

图1显示了6个伊利石样品的X射线衍射测试结果, 根据图谱可以得出6个样品中的主要矿物成分为伊利石, 但伊利石001衍射峰却表现出不对称性, 其d值在9.78-9.94 $\times 10^{-1}$ nm之间, 样品b与f的图谱中出现9.4 $\times 10^{-1}$ nm的“小鼓包”, 这说明6个样品中均存在伊/蒙混层矿物。

为确定样品中伊/蒙混层矿物的有序性, 从XRD图谱中选取伊/蒙混层矿物的标志峰(d_{001} , d_{002} , d_{003}), 并记录其峰值。采用变差系数法对所记录的数据进行统计处理, 具体步骤如下:

第一步, 采用Jade 5.0分析软件, 对6个样品

的XRD图谱进行了分析, 获得样品中伊/蒙混层矿物的特征峰, 并记录其峰值(表1)。

表1 各样品的XRD特征峰值

Tab.1 The d value of every character peaks

样品号	d_{001} ($\times 10^{-1}$ nm)	d_{002} ($\times 10^{-1}$ nm)	d_{003} ($\times 10^{-1}$ nm)
a	9.817 5	4.978 9	3.262 9
b	9.916 3	5.001 1	3.349 6
c	9.949 9	5.006 8	3.345 9
d	9.883 3	4.967 8	3.299 6
e	9.983 6	4.992 9	3.323 8
f	9.795 9	5.009 6	3.304 4

表2 变差系数(Cv)计算结果表

Tab.2 The calculation results of Cv

样品号	X	S	Cv
a	6.01	2.77	0.46
b	6.09	2.78	0.45
c	6.10	2.80	0.46
d	6.05	2.79	0.46
e	6.10	2.82	0.46
f	6.04	2.74	0.45

第二步, 采用变差系数法对试验所得数据进行统计处理, 其中 X_i 为各级衍射峰 d_{001} 的实测值, \bar{X} 为 X_i 的平均值, n 为观测值 X_i 的个数, l 为衍射级次($l = 1, 2, 3, \dots, n$). 计算结果见表2。

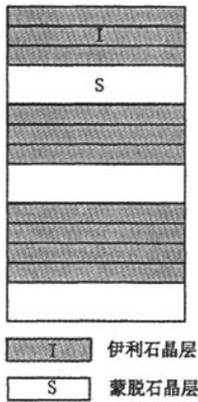


图2 混层结构模型

Fig.2 The structural model of

表 3 结构模型的基本数据

Tab.3 The basic date of structural model

结构类型	%S	可能出现 的组合	不可能出 现的组合
0	0-100	SS, SI, IS, II	
1	0-50	ISI, IS...SI(≥ 2)	II
	50-100	SIS, SI...IS(≥ 2)	SS
2	0-33.3	SIIS, SI...IS(≥ 3)	SS, SIS
3	0-25	SIIS, SI...IS(≥ 4)	SS, SIS, SIIS
.	.	.	.
.	.	.	.
n	0-100/(n+1)	SI...IS($\geq n+1$)	SI...IS($\leq n-1$)

数据处理后的结果见表 1。从表 1 中我们可以看到 6 个样品的变差系数分别为 0.46, 0.46, 0.46, 0.46, 0.46, 0.45。变差系数在不超过 0.75 的情况下,说明混层具有足够的交替规则性,属于规则混层结构。反之则为不规则混层。由此可以看出,该地区伊利石矿中的伊/蒙混层矿物的结构均属规则混层结构。为验证该方法的准确性,我们同时采用了求取间隔层数(R)的方法对该样品中伊/蒙混层矿物的有序性进行了判断。经计算机处理后,图 1 中也给出了 6 个样品中蒙脱石(S)层

在混层矿物结构的百分比。Takashi Watanable^[9]给出了不同 S% 条件下,伊/蒙混层矿物可能出现的结构类型和组合方式(表 3),根据此表格可求得 6 个样品的对应的 R 值,结果显示 6 个样品的 R 值均大于 3,混层结构属于 $R \geq 3$ 型有序,其混层结构模型如图 2 所示

4 结论

该伊利石矿中伊/蒙混层矿物的 Cv 值均小于 0.75,表明该伊/蒙混层矿物的混层结构为规则混层结构。与采用间隔层数法相比,差异系数法可以较为快捷而准确的判断伊/蒙混层矿物的混层有序性。

参考文献:

- [1] 任磊夫. 粘土矿物与粘土岩[M]. 北京:地质出版社, 1992.
- [2] REYNOLDS R C. Interstratified clay minerals. In: crystal structures of clay minerals and their X-ray identification [J]. Min. Soc., 1980, 4:249-303.
- [3] 丁述理,王明振,宋黑,等. 一种硬质高岭石剥片实验研究[J]. 河北工程大学学报(自然科学版),2008,25(2):58-61.
- [4] 郑柏平,徐博会,王明振. 邯郸膨润土的特征研究[J]. 河北工程大学学报(自然科学版), 2008,25(4):73-76.
- [5] 周张健. 蒙脱石伊利石化的控制因素、转化机制及其转化模型的研究综述[J]. 地质科技情报,1994,13(4),41-46.
- [6] 丁述理,徐博会,孙玉壮,等. 邯郸矿区伊利石粘土岩中稀土元素地化特征及其地质意义[J]. 煤炭学报, 2009, 34(5): 583-589.
- [7] 林西生. X 射线衍射分析技术及其地质应用[M]. 北京:石油工业出版社,1990.
- [8] 庄楚强,吴亚森. 应用数理统计基础[M]. 广州:华南理工大学出版社,2004.
- [9] TAKASHI WATANABLE. The structural model of illite/smectite interstratified mineral and the diagram for its identification [J]. Clay Science, 1988, (7):97-114.

(责任编辑 刘存英)