

# 昌乐蓝宝石色带区域 3 309 cm<sup>-1</sup> 红外吸收峰 强度分布与微量元素关系

陈超洋, 邵天, 沈锡田\*

中国地质大学(武汉)珠宝学院, 湖北 武汉 430074

**摘要** 天然蓝宝石红外光谱中经常会出现与 OH 有关的 3 309 cm<sup>-1</sup> 吸收峰, 此峰对于鉴别蓝宝石热处理具有一定指示意义。目前对于 3 309 cm<sup>-1</sup> 峰在蓝宝石色带上的强度分布情况尚缺乏研究且其归属尚存在争议。山东昌乐产出的蓝宝石蓝色普遍偏深且色带发育, 其红外光谱中通常存在 3 309 cm<sup>-1</sup> 吸收峰。针对昌乐蓝宝石色带区域 3 309 cm<sup>-1</sup> 峰的强度分布以及此峰与微量元素的关系进行研究, 并进一步推测此峰的归属。谱学测试技术方面, 创新性使用红外光谱面扫描技术测试 3 309 cm<sup>-1</sup> 峰在色带区域的强度分布。谱学分析方面, 创新性结合蓝宝石的电荷补偿理论与色带区域的微量元素分布情况, 对 3 309 cm<sup>-1</sup> 峰的归属进行了分析推测。结果发现, 3 309 cm<sup>-1</sup> 峰在色带上的强度分布呈现出从面扫描区域的左下角到右上角不断增强的趋势, 沿着此峰增强的方向, 使用激光剥蚀电感耦合等离子体质谱仪(LA-ICP-MS)测试了 5 个点的微量元素含量。根据电荷补偿理论, 在蓝宝石晶体中, Ti<sup>4+</sup> 会优先跟 Mg<sup>2+</sup> 进行电荷补偿, 如果 Ti<sup>4+</sup> 含量高于 Mg<sup>2+</sup>, 那么跟 Mg<sup>2+</sup> 电荷补偿之后剩余的 Ti<sup>4+</sup> 会跟 Fe<sup>2+</sup> 进行电荷补偿, 形成 Fe<sup>2+</sup>-Ti<sup>4+</sup> 对产生蓝色调。色带中无色区域的 Ti 含量较低且全部的 Ti<sup>4+</sup> 与 Mg<sup>2+</sup> 进行电荷补偿, 所以无色区域中没有 Fe<sup>2+</sup>-Ti<sup>4+</sup> 对且结合红外光谱面扫描数据发现该区域内 3 309 cm<sup>-1</sup> 峰很弱。蓝色区域的 Fe<sup>2+</sup>-Ti<sup>4+</sup> 对含量决定了蓝色的深浅, 蓝色区域的 3 309 cm<sup>-1</sup> 峰强度明显高于无色区域, 但深蓝色区域此峰强度并非一定比蓝色区域强, 3 309 cm<sup>-1</sup> 峰强与 Fe<sup>2+</sup>-Ti<sup>4+</sup> 对的含量无必然联系。3 309 cm<sup>-1</sup> 峰强分布表现出随着 Ti 含量升高而增强的现象, 即 3 309 cm<sup>-1</sup> 峰强与 Ti 元素的含量呈正相关性。推测是含有 Ti 和 OH 的缺陷簇导致了 3 309 cm<sup>-1</sup> 吸收峰的产生。Fe<sup>2+</sup> 的作用是与 Ti<sup>4+</sup> 形成电荷补偿对产生蓝色, 与 3 309 cm<sup>-1</sup> 吸收峰的产生并没有必然联系。

**关键词** 昌乐蓝宝石; 红外光谱面扫描; 3 309 cm<sup>-1</sup> 吸收峰; 缺陷簇

**中图分类号:** P575.4 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2020)07-2138-05

## 引言

天然蓝宝石属于刚玉矿物, 因其漂亮的颜色, 较高的硬度以及某些特殊的光学效应而非常受珠宝市场的欢迎<sup>[1-3]</sup>。纯净的刚玉( $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) 仅由 Al 和 O 组成, 没有颜色, 属三方晶系<sup>[4]</sup>。刚玉的颜色是某些微量元素(比如 Fe, Mg, Ti, Cr, V) 取代晶格中的 Al 造成的<sup>[5]</sup>。蓝宝石的蓝色是 Fe<sup>2+</sup> 和 Ti<sup>4+</sup> 取代相邻位置的 Al 形成 Fe<sup>2+</sup>-Ti<sup>4+</sup> 离子对, Fe<sup>2+</sup> 和 Ti<sup>4+</sup> 之间电荷转移造成的<sup>[6]</sup>, 并且在理论上得到了验证<sup>[7]</sup>。除了杂质阳离子, 天然蓝宝石中还可能存在微量的 OH, OH 的振动会引起中红外区的吸收<sup>[1, 8]</sup>。20 世纪 80 年代末, 山东省昌乐

县发现了蓝宝石, 因其晶体形态好且产量高而一直备受关注<sup>[9]</sup>。昌乐蓝宝石的蓝色普遍偏深, 色带较发育, 价值相对较低。所以很多深蓝色的蓝宝石会通过热处理来减轻蓝色调<sup>[2]</sup>。蓝宝石红外光谱中 3 309 cm<sup>-1</sup> 处 OH 振动的吸收峰对于鉴别蓝宝石的热处理有一定的指示意义<sup>[2]</sup>, 晶格中含有 OH 的蓝宝石如果经过高温热处理且加热时间足够长, 其红外光谱中与 OH 有关的吸收峰会消失, 但如果是低温热处理或是加热时间比较短, 那么红外光谱中与 OH 有关的吸收峰可能仅仅是减弱而并不会消失。所以蓝宝石红外光谱中 3 309 cm<sup>-1</sup> 吸收峰对于鉴别蓝宝石是否经过热处理仅有一定的指示意义。蓝宝石蓝色调与此峰的强度有一定的相关性<sup>[10]</sup>。3 309 cm<sup>-1</sup> 峰在蓝宝石色带区域的强度分布特征尚缺

收稿日期: 2019-06-10, 修订日期: 2019-10-26

基金项目: 国家重点研发计划项目(2018YFF0215403)资助

作者简介: 陈超洋, 1995 年生, 中国地质大学(武汉)珠宝学院硕士研究生 e-mail: 377651868@qq.com

\* 通讯联系人 e-mail: ahshen@foxmail.com

乏研究,其归属也无定论。基于此,我们创新使用显微傅里叶变换红外光谱测试对蓝宝石的色带区域进行面扫描来表征  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰在色带区域的强度分布情况。考虑到蓝宝石的蓝色调与此峰的强度有一定的相关性<sup>[10]</sup>且蓝色是  $\text{Fe}^{2+}$ - $\text{Ti}^{4+}$  对产生的<sup>[6-7]</sup>,故采用 LA-ICP-MS 测试获得不同颜色区域的微量元素含量情况。创新性结合电荷补偿理论,综合研究蓝宝石色带区域  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  吸收峰的强度分布情况以及此峰与微量元素之间的关系,并进一步推测了此峰的归属。

## 1 实验部分

### 1.1 材料

实验样品是一颗山东省昌乐县出产的蓝宝石,其蓝色较深且具有明显的色带,为了方便测试,将其加工成两面平行等厚的薄片,并进行双面抛光处理(如图 1)。

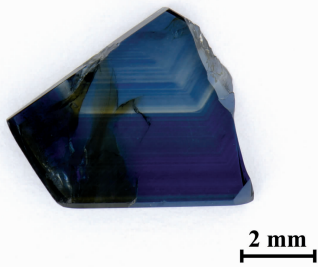


图 1 用于实验的昌乐蓝宝石切片

Fig. 1 Changle sapphire sample

### 1.2 仪器与测试方法

红外光谱测试在中国地质大学(武汉)珠宝学院完成,测试仪器为德国布鲁克公司产 Bruker HYPERION 3000+Vertex 80 显微傅里叶变换红外光谱仪。面扫描色带区域在图 2 中用白色矩形标出,使用透射法测试,测试在室温下进行。面扫描 200 个点,光斑直径  $50\ \mu\text{m}$ ,分辨率  $4\ \text{cm}^{-1}$ ,扫描 64 次。信号采集范围为  $4\ 000\sim 600\ \text{cm}^{-1}$ 。LA-ICP-MS 测试在武汉上谱分析科技有限责任公司完成,测试使用的 Geolas-Pro 激光剥蚀系统由 COMPexPro 102 ArF 193 nm 激光器和 MicroLas 光学系统组成,ICP-MS 型号为 Agilent 7900。激光束斑直径  $44\ \mu\text{m}$ ,激光频率 5 Hz,能量密度  $5.5\ \text{J}\cdot\text{cm}^{-2}$ 。使用的玻璃标准物质包括: BHVO-2G, BCR-2G, BIR-1G 和 NIST 610。使用“多外标-无内标”法,选取 Al27 为归一化元素,数据分析采用软件 ICPMSDataCal 完成<sup>[11]</sup>,LA-ICP-MS 测试点位置在图 2 中使用红色圆点标出并分别标上序号 1, 2, 3, 4 和 5。

## 2 结果与讨论

红外光谱面扫描是在所选色带区域内测试了 200 个点的红外光谱。为了表征  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰在蓝宝石色带区域的强度分布,记录每个测试点的红外光谱中该峰的强度并绘制出其在测试区域内的强度分布。使用不同颜色表示峰强的变化,

从蓝色到红色表示该峰强由弱到强(如图 3)。

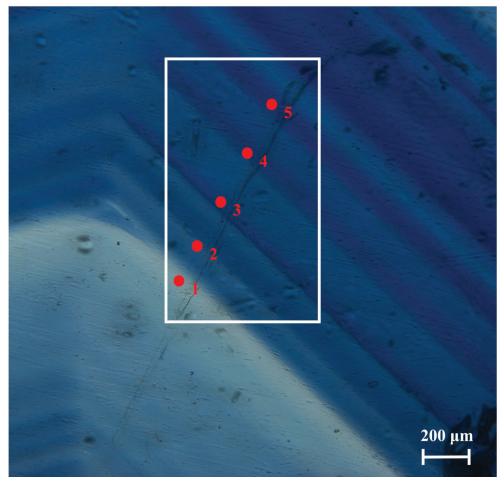


图 2 显微红外光谱面扫描测试位置(白色矩形圈出)与 LA-ICP-MS 测试点位置(红点标出)

Fig. 2 The position of area scanning by microscopic FTIR spectrometer (marked by white rectangle) and test point of LA-ICP-MS (marked by red point)

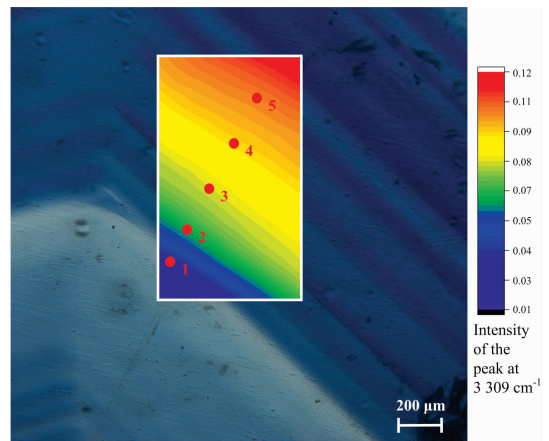


图 3 红外光谱面扫描区域  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  吸收峰的强度分布 红色点为 LA-ICP-MS 测试点,用不同的颜色来表示  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  吸收峰在不同位置的强度,图例中从蓝色到红色表示  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  吸收峰的强度依次增加

Fig. 3 Intensity distribution of infrared absorption peak at  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  in the area scanning region

The red point is LA-ICP-MS test point. The intensities of  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  peak at different position is characterized by different colors. The intensity of  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  absorption peak increases from blue to red

如图 3,面扫描区域中  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰强从左下角到右上角呈现出不断增强的趋势。结合蓝宝石的颜色,在无色区域,该峰较弱。而在蓝色区域,无论蓝色深浅,该峰依旧保持从左下角到右上角增强的趋势。前人研究发现该峰强与蓝宝石的蓝色有一定的相关性<sup>[10]</sup>,而蓝宝石的蓝色由  $\text{Fe}^{2+}$ - $\text{Ti}^{4+}$  对产生<sup>[6-7]</sup>,且 Moon 等认为在含有 Fe 和 Ti 的蓝宝石中, $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰是含 Ti, Fe, 氧空位,铝空位以及 H 组成的缺陷簇引起的<sup>[1]</sup>。所以如果进一步分析  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰在色

带上的强度分布特征,需要先分析色带区域不同位置的  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对含量。蓝宝石中的杂质元素种类较多且缺陷也较为复杂<sup>[12-15]</sup>,为了便于讨论,一般采用简单的电荷补偿理论来解释<sup>[2]</sup>。根据电荷补偿理论,当  $\text{Ti}^{4+}$  这种比  $\text{Al}^{3+}$  价态高的四价阳离子取代晶格中的  $\text{Al}^{3+}$  时,就会有  $\text{Mg}^{2+}$  和  $\text{Fe}^{2+}$  这种比  $\text{Al}^{3+}$  价态低的二价阳离子取代晶格中的  $\text{Al}^{3+}$  来平衡电价,使晶体对外保持电中性<sup>[2]</sup>。当  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{2+}$  和  $\text{Ti}^{4+}$  同时在刚玉的晶格中取代  $\text{Al}^{3+}$  时,  $\text{Mg}^{2+}$  会优先和  $\text{Ti}^{4+}$  进行电荷补偿,剩余的  $\text{Ti}^{4+}$  才会和  $\text{Fe}^{2+}$  进行电荷补偿形成  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对,产生蓝色。如果刚玉中的 Mg 含量高于 Ti,那么  $\text{Ti}^{4+}$  就会全部和  $\text{Mg}^{2+}$  进行电荷补偿,即使晶格中有  $\text{Fe}^{2+}$ ,也不会形成  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对产生蓝色<sup>[2]</sup>。所以列出 Mg, Ti 和 Fe 的含量(表 1)。为方便讨论,这里近似认为所有的  $\text{Mg}^{2+}$  都会跟  $\text{Ti}^{4+}$  进行电荷补偿,而剩余未跟  $\text{Mg}^{2+}$  补偿的  $\text{Ti}^{4+}$  都会和  $\text{Fe}^{2+}$  进行电荷补偿形成  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对。

表 1 不同 LA-ICP-MS 测试点的 Mg, Ti, Fe 元素以及  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对含量情况(ppma)

Table 1 The contents of Mg, Ti, Fe and  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  pair at different LA-ICP-MS test points (ppma)

测试点	Mg	Ti	Fe	$\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$ pairs
1	21.0	18.6	2 820	0
2	39.6	56.8	3 360	17.2
3	28.7	55.1	3 400	26.4
4	42.8	68.2	3 495	25.4
5	43.1	71.6	3 440	28.5

从图 2 中可以看出,测试点 1 没有蓝色调。按照刚玉的电荷补偿机制,测试点 1 中 Mg 的含量要高于 Ti,几乎所有的  $\text{Ti}^{4+}$  都会和  $\text{Mg}^{2+}$  进行电荷补偿,这一位置几乎不会含有  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对,所以测试点 1 没有蓝色调。测试点 2 中估计的  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对的含量约有 17.2 ppma,故该处呈蓝色,测试点 3, 4 和 5 处的  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对含量相差不大,分别为 26.4, 25.4 和 28.5 ppma,故测试点 3, 4 和 5 处的蓝色非常相近。由于测试点 3, 4 和 5 处的  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对含量高于测试点 2,所以测试点 3, 4 和 5 处的蓝色也要比测试点 2 处的蓝色深。根据图 3 中  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰的强度分布情况,总体来看,从 LA-ICP-MS 测试点 1 到点 5(即从左下角到右上角),  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰强呈现不断增强的趋势,说明此方向上含 OH 的缺陷簇数量在不断增加。分析如下:第一,测试点 1 处  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰强较弱,但根据电荷补偿理论,此处没有  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对,假设产生该峰的缺陷簇中必须含有  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对,理论上无色区域不含  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对,则无色区域不会出现该峰。所以产生  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰的缺陷簇中不一定必须含有  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对。第二,测试点 3, 4 和 5 所含的  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对含量非常接近,但测试点 3, 4 和 5 处  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰强却依次递增,且测试点 3 的  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰强与测试点 5 相差明显。如果该峰的出现必须要有 Fe 和 Ti 同时参与到含 OH 的缺陷簇中,则这三处测试点附近的  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰强应较为接近而不会出现这种现象。根据这两点,推测产生  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  吸收峰的缺陷簇并不一定必须含有  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对,也就是说,真正导致

该峰出现的缺陷簇中并不含 Fe。

从这 5 个测试点的微量元素情况来看, Ti 含量跟  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰强呈现出正相关性。测试点 1 的 Ti 含量最低,为 18.6 ppma,其所在区域  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰强较弱,而测试点 2 与测试点 3 的 Ti 含量相当,分别为 56.8 和 55.1 ppma,其所在区域  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰强相差不大。测试点 4 的 Ti 含量为 68.2 ppma,明显高于测试点 2 和测试点 3,其所在区域  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰强要高于测试点 2 和测试点 3 所在的区域。测试点 5 的 Ti 含量为 71.6 ppma,高于测试点 4,其所在区域的  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰强要高于测试点 4 所在的区域。根据这一趋势,推测  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰是含有 Ti 和 OH 的缺陷簇造成的。测试的蓝宝石色带区域红外光谱中  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰从左下角到右上角呈现出的由弱到强的变化趋势,是由于晶格中的杂质元素 Ti 从左下角到右上角含量依次增加,能够产生  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  吸收峰的含 Ti 和 OH 的缺陷簇依次增加造成的。

蓝宝石中的色带深浅变化是由  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对的数量决定的。很多情况下,测试发现的蓝宝石中蓝色较深的位置其  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰较强,而蓝色较浅的位置该峰较弱这一现象,产生原因是因为在蓝宝石中,  $\text{Ti}^{4+}$  如果本身含量足够高并且高于杂质离子  $\text{Mg}^{2+}$ ,那么优先跟  $\text{Mg}^{2+}$  进行电荷补偿之后,剩余的  $\text{Ti}^{4+}$  会跟  $\text{Fe}^{2+}$  补偿形成  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$ ,这时蓝色较深。 $\text{Ti}^{4+}$  含量如果不够高且稍微高于杂质离子  $\text{Mg}^{2+}$ ,那么跟  $\text{Mg}^{2+}$  进行电荷补偿后,剩余非常少的  $\text{Ti}^{4+}$  跟  $\text{Fe}^{2+}$  进行电荷补偿,形成非常少的  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对,这时蓝色较浅。所以蓝宝石中蓝色较深的 Ti 含量本身高,导致形成较多的含 Ti 和 OH 缺陷簇,导致红外光谱中  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰较强。反之,蓝宝石中蓝色较浅的 Ti 含量本身低,导致形成较少的含 Ti 和 OH 的缺陷簇,导致红外光谱中  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰较弱。蓝宝石红外光谱中  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰的强度与 Ti 含量表现出正相关性,而不是与蓝宝石的蓝色有着直接的正相关性。

### 3 结论

(1)根据红外光谱面扫描色带区域的蓝色深浅分布以及  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰在该色带区域的强度分布情况,发现该峰强并非一定随着蓝宝石蓝色调的加深而增强,  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰强与蓝色的深浅没有必然关系。

(2)结合测试区域的微量元素情况与刚玉的电荷补偿理论,发现昌乐蓝宝石中  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰的强度与  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  对的含量没有必然关系,该峰的强度分布情况表现出随杂质元素 Ti 含量的升高,  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰变强的情况,即  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰的强度与 Ti 的含量呈正相关性。

(3)推测  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰的产生是由含有 Ti 和 OH 的缺陷簇导致的,而  $\text{Fe}^{2+}$  的作用是与  $\text{Ti}^{4+}$  形成电荷补偿对产生蓝色,与该峰的产生并没有必然联系。

(4)本研究创新性地使用红外光谱面扫描来分析  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰在蓝宝石色带区域的分布情况,同时创新性结合刚玉的电荷补偿理论与微量元素数据来分析  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  峰的归属,为研究矿物红外光谱中与 OH 有关的吸收峰归属提供了一种新的研究思路。

## References

- [ 1 ] Moon A R, Phillips M R. *Journal of the American Ceramic Society*, 1994, 77(2): 356.
- [ 2 ] Emmett J L, Scarratt K, McClure S F, et al. *Gems & Gemology*, 2003, 39(2): 84.
- [ 3 ] Gubelin E, Schmetzer K. *Gem & Gemology*, 1982, 18(4): 197.
- [ 4 ] Lewis J, Schwarzenbach D, Flack H D. *Acta Crystallographica*, 1982, 38(5): 733.
- [ 5 ] Emmett J L, Stone-Sundberg J, Guan Y, et al. *Gems & Gemology*, 2017, 53(1).
- [ 6 ] Townsend M G. *Solid State Communications*, 1968, 6(2): 81.
- [ 7 ] Na-Phattalung S, Limpijumnong S, Jiraroj T, et al. *Acta Materialia*, 2018, 143: 248.
- [ 8 ] Beran A, Rossman G R. *European Journal of Mineralogy*, 2006, 18(4): 441.
- [ 9 ] Guo J, Wang F, Yakoumelos G. *Gems & Gemology*, 1992, 28(4): 255.
- [ 10 ] LI Xiao-xiao, YANG Zhi-jun, HUANG Shan-shan, et al(李晓潇, 杨志军, 黄珊珊, 等). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2018, 38(2): 407.
- [ 11 ] Liu Y, Hu Z, Gao S, et al. *Chemical Geology*, 2008, 257(1-2): 34.
- [ 12 ] Jacobs P W M, Kotomin E A. *Philosophical Magazine A*, 1993, 68(4): 695.
- [ 13 ] Kitaoka Y, Nakamura K, Akiyama T, et al. *Physical Review B*, 2013, 87(20): 205113.
- [ 14 ] Choi M, Janotti A, Van de Walle C G. *Journal of Applied Physics*, 2013, 113(4): 044501.
- [ 15 ] Hine N D M, Haynes P D, Mostofi A A, et al. *The Journal of Chemical Physics*, 2010, 133(11): 114111.

# Study on the Relation between the Intensity Distribution of Infrared Absorption Peak at $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$ and Trace Elements in Color Zones of Changle Sapphire

CHEN Chao-yang, SHAO Tian, Andy Hsitiesh Shen\*

Gemmological Institute, China University of Geoscience (Wuhan), Wuhan 430074, China

**Abstract** The infrared absorption peak at  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  caused by the vibration of OH often appears in natural sapphire. This peak is significant for the identification of heat treatment sapphire. The color of sapphire produced in Changle County, Shandong Province is often dark blue, and the color zones are usually well developed. The absorption peak at  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  is often found in FTIR spectrum of Changle Sapphire. At present, the intensity distribution of this peak in color zones of sapphire is still not studied, and the assignment of this peak is still controversial. In this paper, the intensity distribution of peak at  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  in Changle sapphire color zones and the relationship between this peak and trace elements are studied, and the assignment of this peak is further speculated. In spectroscopic technology, FTIR area scanning was innovatively used to analyze the intensity distribution of peak at  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  in the color zones. In the spectroscopic analysis, the assignment of the peak at  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  was creatively predicted based on the charge compensation theory in sapphire and the distribution of trace elements in the color zones. We found that the intensity distribution of this peak showed a trend of increasing from the lower left corner to the upper right corner in the scanning area. Along the direction of this peak increasing, we measured the trace elements contents at five points by Laser Ablation Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometer. Based on the charge compensation theory,  $\text{Ti}^{4+}$  prefers to compensate with  $\text{Mg}^{2+}$  in sapphire. If the content of  $\text{Ti}^{4+}$  is higher than  $\text{Mg}^{2+}$ , almost all  $\text{Mg}^{2+}$  will compensate with  $\text{Ti}^{4+}$  and remaining  $\text{Ti}^{4+}$  will compensate with  $\text{Fe}^{2+}$  to form  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  pairs which produce the blue color. The content of Ti in the colorless region is low, and all  $\text{Ti}^{4+}$  will compensate with  $\text{Mg}^{2+}$ . So there is almost no  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  pair in colorless region and the peak at  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  is very weak. The contents of  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  pairs in the blue region determine the depth of blue. The intensity of  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  peaks in the blue region is obviously higher than that in colorless region, but the intensity of this peak in the dark blue region is not necessarily stronger than that in the blue region. The intensity of this peak has no certain relationship with the contents of  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ti}^{4+}$  pairs in sapphire. The intensity distribution of this peak shows a positive correlation with the contents of Ti. The more the Ti contents are, the stronger the is peak. We found this peak was positively correlated with the content of Ti, and we further speculated that the defect cluster containing Ti and OH produced the peak at  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$ . The  $\text{Fe}^{2+}$  is not necessary to produce a peak at  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$  but to compensate with the  $\text{Ti}^{4+}$  to produce the blue color.

**Keywords** Changle sapphire; FTIR spectrum area scanning; Absorption peak at  $3\ 309\ \text{cm}^{-1}$ ; Defect cluster

\* Corresponding author

(Received Jun. 10, 2019; accepted Oct. 26, 2019)

## 第 21 届全国分子光谱学学术会议暨 2020 年光谱年会 (第二轮通知)

由中国光学学会和中国化学会主办的“第 21 届全国分子光谱学学术会议”暨由中国光学会光谱专业委员会主办的“2020 年光谱年会”将于 2020 年 10 月 30—11 月 2 日在成都召开,会议由四川大学分析测试中心承办。本次大会将秉承前 20 届分子光谱学学术会议之宗旨,以期形成自由研讨的学术氛围,让光谱相关或相近的思想撞击出火花,期待颠覆性创新创造力泉涌。

### 一、会议简要日程安排

2020 年 10 月 30 日

全天注册报到

16:00—18:00 组织委员会和学术委员会会议;《光谱学与光谱分析》编委会会议

2020 年 10 月 31 日

08:30—12:00 开幕式、大会报告

14:00—18:00 大会报告

2020 年 11 月 1 日

08:30—12:00 分组邀请报告和口头报告

14:00—18:00 分组邀请报告和口头报告

2020 年 11 月 2 日

08:00—12:00 大会报告及闭幕式

### 二、学术报告

本次会议将采用邀请报告和申请口头报告相结合的形式,同时也将开设青年论坛和墙报展示。组委会对青年学者、博士和硕士研究生等设立优秀论文奖(包括优秀口头报告和墙报),届时将组织专家进行评选。

#### 2.1 邀请报告

已经确认参加会议并作大会报告的院士及国内外著名学者:

李 灿 院士 中国科学院大连化学物理研究所

陈洪渊 院士 南京大学

田中群 院士 厦门大学

孙世刚 院士 厦门大学

谭蔚泓 院士 湖南大学

张 锦 院士 北京大学

邀请报告信息将陆续更新,请大家关注会议主页浏览相关信息:

<http://www.sinospectroscopy.org.cn/meeting/index.php?mid=24>

#### 2.2 口头报告

会议将开放一定数量的口头报告,大家可以自由申请,申请方式为在会议注册系统中提交口头报告题目(在口头报告栏目),并在会议截稿日期前通过会议稿件提交系统按要求提交论文摘要,申请截止日期为 2020 年 6 月 30 日。

#### 2.3 青年论坛

对于青年学者,博士和硕士研究生可以申请青年论坛报告,申请办法和截止日期与口头报告相同,组委会将组织专家进行优秀报告评选,并颁发优秀论文证书和奖金。

#### 2.4 墙报展示

墙报展示作为本次会议的一种主要形式。墙报要求制作规范,内容体现研究工作的创新点。在准备墙报时注意以下几个方面:

1. 墙报尺寸:高 110 公分×宽 80 公分;

2. 墙报内容不包括中英文摘要和参考文献;

3. 墙报内容以图文为主,层次分明,主要体现研究工作的创新性,主要结果和结论;

4. 墙报右上侧写上论文编号;

(下转 2147 页)

quantify these spectral differences and the concentration of aqueous ethanol. The absolute Raman difference spectra are obtained through subtracting the normalized spectra of pure ethanol from the normalized spectra of solution. The intensity of the absolute Raman difference spectra related to the concentration of ethanol. Using the relationship, we measured the ethanol concentration of a series of bottled Chinese liquors. The measured values agree well with those marked on the bottle, which confirms the reliability of the absolute Raman difference spectra. Based on this method, we also measured the spectra of a series of bulk liquors in Xi'an. The results show that the ethanol concentration of bulk liquor is generally a few degrees lower than its identification value, which highlights the need for supervision of bulk liquors. Our results show significantly that the absolute Raman difference spectrum is a good method to detect the ethanol concentration of liquors rapidly.

**Keywords** Raman spectra; Difference spectra; Alcohol degree; Chinese liquor

\* Corresponding author

(Received Jul. 4, 2019; accepted Nov. 20, 2019)

(上接 2142 页)

拟作墙报展示的代表,在会议注册系统中提交墙报题目和编号。组委会将组织专家对青年学者、博硕士研究生墙报进行评审,并对优秀墙报颁发优秀论文证书和奖金。

### 三、会议稿件

会议截稿日期为 2020 年 6 月 30 日,请大家按照会议第一轮通知的要求继续投稿。

<http://www.sinospectroscopy.org.cn/readnews.php?nid=94098>

### 四、会议注册

#### 4.1 会议注册费

2020 年 9 月 20 日以前缴纳注册费:正式代表:1600 元/人;学生代表:1000 元/人;2020 年 9 月 20 日后及现场缴纳注册费:正式代表:1800 元/人;学生代表:1200 元/人,现场缴费将邮寄发票。由于酒店房间是预留,2020 年 9 月 20 日后及现场缴纳注册费的代表将不能保证房间;陪同家属 1000 元/人(没有发票)。

会议注册费收缴方式:

银行汇款,如网银、手机银行、支付宝、微信转账、银行柜台等。

收款单位:四川大学(请注明:2020 光谱+姓名);

帐号:5100 1870 4690 5988 8666;

开户行:建行成都川大支行;

汇款成功后请务必将姓名、参会编号、单位发票抬头、单位税号、汇款金额通过邮箱(atcpubs@scu.edu.cn)告知会务组,以便核实会议注册费发票信息。(如果需要开具增值税发票,请注明并提供单位名称、纳税人识别号、地址、电话、开户行及账号)

发票联系人:张亮 联系邮箱:zhang.liang@scu.edu.cn 联系方式:15902844473

#### 4.2 会议注册系统

请登陆光谱网会议主页:<http://www.sinospectroscopy.org.cn/meeting/index.php?mid=24>

注册并提交您的参会信息,包括个人信息、报告题目、墙报题目、住房预定等信息。

#### 4.3 会议住宿

会议酒店:

##### 1. 世外桃源酒店

地址:四川省成都市武侯区科华北路 69 号

酒店房间价格:标间 620 元/间天;大床房 560 元/间天

##### 2. 科华苑宾馆

地址:四川省成都市武侯区科华北路 141 号

酒店房间价格:标间 360 元/间天;大床房 470 元/间天

由于会议期间住宿相对紧张,涉及到房间预定、会议安排等因素,务请各位专家、同学在截止日期前注册,只有在收到注册费后,才会进行会议相关安排,务请体谅与协助。

(下转 2158 页)