・基础研究・

# 矿物药白石英优质矿产资源筛选及 XRD Fourier 指纹图谱研究<sup>△</sup>

徐晨呈<sup>1</sup>,赵倩<sup>2,3</sup>,刘圣金<sup>1\*</sup>,吴思澄<sup>1</sup>,王迎<sup>1</sup>,袁鹏<sup>1</sup>,詹庚申<sup>3,4</sup>,马瑜璐<sup>1</sup>,戴仕林<sup>1</sup>,严辉<sup>1</sup>, 严宝飞<sup>5</sup>,朱星宇<sup>6</sup>,陈亚运<sup>7</sup>,奥·乌力吉<sup>8</sup>

 南京中医药大学 药学院/江苏省中药资源产业化过程协同创新中心/中药资源产业化与方剂创新药物国家地方 联合工程研究中心/国家中医药管理局中药资源循环利用重点研究室,江苏 南京 210023;

2. 江苏省有色金属华东地质勘查局, 江苏 南京 210007;

3.江苏省地质学会,江苏 南京 210018;
4.江苏省地质调查研究院,江苏 南京 210018;
5.江苏卫生健康职业学院,江苏 南京 211800;
6.江苏护理职业学院,江苏 淮安 223001;
7.泰州职业技术学院,江苏 泰州 225323;
8.内蒙古民族大学,内蒙古 通辽 028000

[摘要]目的:分析不同产地白石英样品中矿物成分及含量,评价不同产地白石英样品的质量,筛选白石英优质矿产资源,并建立白石英X射线衍射(XRD)Fourier特征指纹图谱。方法:通过偏光显微及XRD分析不同样品矿物成分及其含量,以结晶度和石英含量作为评价指标。采用粉末XRD对白石英样品进行分析,建立中药白石英XRDFourier特征指纹图谱,并进行模糊聚类分析、主成分分析和相似性评价。结果:偏光显微分析结果显示,不同产地白石英样品在结晶度上有明显不同。物相分析结果显示白石英样品主要成分为石英和正长石,且大多数样品含有钠长石。不同产地白石英中石英质量分数为91.2%~99.4%,其中浙江省安吉县章村镇和安徽省绩溪县扬溪镇白石英中石英质量分数最高,均为99.4%,浙江安吉县杭垓镇产白石英中石英质量分数为91.2%。建立了以12个共有峰为特征指纹信息的白石英XRDFourier指纹图谱分析方法,其XRDFourier指纹图谱的相似度为0.993~1.000。 结论:在所采集的样品中,白石英动材品质总体较好,石英质量分数均在90.0%以上,其中浙江省安吉县章村镇和安徽省绩溪县扬溪镇所产白石英品质最好,其次为福建永安小陶镇和江苏新沂阿湖镇产白石英。偏光显微特征观察和XRDFourier指纹图谱分析法可用于白石英的鉴定与分析。

[关键词] 矿物药; 白石英; 矿产资源; 偏光显微镜; X射线衍射; 指纹图谱; 质量评价 [中图分类号] R282 [文献标识码] A [文章编号] 1673-4890(2022)06-1033-09 doi:10.13313/j.issn.1673-4890.20210824006

#### Screening of Quality Mineral Resources and X-Ray Diffraction Fourier Fingerprint of Mineral Chinese Medicine Quartz Album

XU Chen-yu<sup>1</sup>, ZHAO Qian<sup>2,3</sup>, LIU Sheng-jin<sup>1\*</sup>, WU Si-cheng<sup>1</sup>, WANG Ying<sup>1</sup>, YUAN Peng<sup>1</sup>, ZHAN Geng-shen<sup>3,4</sup>, MA Yu-lu<sup>1</sup>, DAI Shi-lin<sup>1</sup>, YAN Hui<sup>1</sup>, YAN Bao-fei<sup>5</sup>, ZHU Xing-yu<sup>6</sup>, CHEN Ya-yun<sup>7</sup>, AO Wu-li-ji<sup>8</sup>

1. School of Pharmacy, Nanjing University of Chinese Medicine, Jiangsu Collaborative Innovation Center of Chinese

Medicinal Resources Industrialization, National and Local Collaborative Engineering Center of Chinese Medicinal

Resources Industrialization and Formulae Innovative Medicine, Key Laboratory of Chinese Medicinal Resources Recycling Utilization, National Administration of Traditional Chinese Medicine, Nanjing 210023, China;

△ [基金项目] 全国第四次中药资源普查矿物药资源普查项目 (GZY-KJS-2018-004, ZY-KJS-2019-01); 教育部科技委 2021 年战略研究项目

[通信作者] 刘圣金,副教授,研究方向:中药品质评价及质量标准研究、矿物药研究; Tel: 025-85811511, E-mail: lsj@njucm.edu.cn

2. East China Geological Exploration Bureau of Nonferrous Metals, Jiangsu Province, Nanjing 210007, China;

3. Geological Society of Jiangsu Province, Nanjing 210018, China;

4. Geological Survey of Jiangsu Province, Nanjing 210018, China;

5. Jiangsu Health Vocational College, Nanjing 211800, China;

7. Taizhou Polytechnic College, Taizhou 225323, China;

8. Inner Mongolia Minzu University, Tongliao 028000, China

[Abstract] Objective: To evaluate the quality of quartz album from different origins, select the quality mineral resources based on the mineral constituents in quartz album samples and content of the constituents, and establish the X-ray diffraction (XRD) Fourier fingerprint of the Chinese medicine. Methods: The mineral constituents in different samples and the content of the constituents were analyzed by polarizing microscopy and XRD, and samples were assessed with the indexes crystallinity and quartz content. To be specific, X-ray powder diffraction was employed for analysis of quartz album to establish the XRD Fourier fingerprint, followed by fuzzy clustering analysis, principal component analysis, and similarity evaluation. Results: According to the results of polarizing microscopy, the crystallinity of quartz album samples was obviously different among the origins. Phase analysis suggested that the main mineral constituents in the samples were quartz and orthoclase, and the majority of the samples contained albite. The quartz content in the samples fell in the range of 91.2%-99.4%, with the highest content detected in samples from Zhangcun Town, Anji County, Zhejiang Province and Yangxi Town, Jixi County, Anhui Province (both 99.4%), and lowest content in sample from Hanggai Town, Anji County, Zhejiang Province (91.2%). The XRD Fourier fingerprints of the samples characterized by 12 common peaks were established, with the similarities of 0.993-1.000. Conclusion: The quality of quartz album samples collected in this study was generally high, as manifested by the quartz content of above 90.0%. Among them, the samples produced in Zhangcun Town, Anji County, Zhejiang Province and Yangxi Town, Jixi County, Anhui Province were the best, followed by those from Xiaotao Town, Yongan County, Fujian Province and Ahu town, Xinyi City, Jiangsu Province. Polarizing microscopy and XRD Fourier fingerprint analysis are applicable to the identification and quality analysis of quartz album.

[Keywords] mineral Chinese medicine; quartz album; mineral resources; polarizing microscope; X-ray diffraction; fingerprint; quality evaluation

白石英为氧化物类石英族矿物石英,主要含二 氧化硅(SiO<sub>2</sub>),始载于《神农本草经》,主产于江 苏、广东、湖北、福建、陕西等地。其味甘、辛, 性微温,具有温肺肾、安心神、利小便的功效,临 床上主要用于虚寒咳喘、阳痿、消渴、心神不安、 惊悸善忘、小便不利、水肿等证<sup>11</sup>。

偏光显微镜主要是利用偏振光的特性和晶体的 双折射效应鉴别某一物质具有单折射(各向同性) 和双折射(各向异性),用于观察和分析矿石薄片的 光学性质<sup>[2]</sup>。矿物类中药大部分为结晶矿物,透明矿 物利用投射偏光显微镜,不透明矿物利用反射偏光 显微镜<sup>[3]</sup>。X射线衍射(X-ray diffraction,XRD)分 析是一种研究物质微观结构的有效手段,物质被X 射线照射产生不同程度的衍射线性,物质组成、晶 型、分子内成键方式、构型、构像等将决定其产生 的特有衍射图谱<sup>[4]</sup>。目前,XRD已广泛应用于矿物 药的质量控制和品质评价研究<sup>[5-11]</sup>。 本课题组在进行"全国第四次中药普查矿物药 资源普查项目"华东地区矿物药资源调查过程中发 现,华东地区石英资源较为丰富,分布地域较广。 目前对白石英的相关研究较少,因此本课题组采集 了不同产地的白石英样品共13批,采用偏光显微及 XRD对其进行分析,以结晶度和石英含量作为评价 指标,筛选白石英优质矿产资源,并建立白石英 XRD Fourier特征指纹图谱,为白石英矿物药资源的 进一步开发利用提供参考。

#### 1 材料

#### 1.1 仪器

AXIO SCOPE AI POL型偏光显微镜(德国蔡司 公司); D8 ADVANCE型X射线衍射仪(德国布鲁 克公司); RM250型多刀旋转切片机(广州卓的宝 玉石机械有限公司); DPM-250型单盘磨片机(永 安兴业山水探矿机械有限公司); Ly-1型高精度自动

<sup>6.</sup> Jiangsu College of Nursing, Huai'an 223001, China;

磨片机(南京山特仪器有限公司)。

#### 1.2 样品

通过矿区实地采集和安徽亳州药材市场获得13 份不同产地白石英样品,经南京中医药大学中药鉴 定学教研室刘圣金副教授鉴定为中药白石英,由南 京大学地球科学与工程学院胡文瑄教授鉴定为主要 由石英组成的脉石英或变质岩石英岩,留样保存于南 京中医药大学中药鉴定学教研室。样品信息见表1。

编号	批号	产地	来源
Y1	2020111801	江苏东海房山镇	自采
Y2	2021032901	安徽金寨麻埠镇	自采
Y3	2021041502	安徽凤阳大庙镇	自采
Y4	2021031201	福建永安小陶镇	自采
Y5	2021032902	安徽金寨麻埠镇	自采
Y6	2020121901	江苏新沂阿湖镇	自采
Y7	2021041501	江西万载高村镇	自采
Y8	2021032301	浙江安吉杭垓镇	自采
Y9	2021032302	浙江安吉章村镇	自采
Y10	2021033101	安徽绩溪扬溪镇	自采
Y11	2021042901	河南南阳	安徽亳州药材市场
Y12	2021042902	湖北仙桃	安徽亳州药材市场
Y13	2021042903	河南南阳	安徽亳州药材市场

表1 白石英样品信息

## 2 方法

#### 2.1 偏光显微镜分析

2.1.1 白石英粉末的制备及偏光显微特征分析 取 白石英,破碎后置于玛瑙研钵中研细,过100目筛, 制得白石英样品,备用。取少许粉末,置载玻片上, 滴加蒸馏水或水合氯醛试液1~2滴,盖上盖玻片, 置偏光显微镜下观察。

2.1.2 白石英磨片制备及偏光显微特征分析 1)选样,分别选取10批不同产地石英岩样品具有代表性的材料部位。2)切割,使用切片机分别将不同产地白石英样品切成约20 mm×20 mm×10 mm的切片。 3)磨片,取平整一面作底面,用研磨机将样品进行粗磨、细磨、抛光,直至制备成光片。4)粘胶,用树胶将样品粘在载玻片上。5)磨薄,用研磨机将粘在载玻片上的样品磨至0.10 mm (探针片)。6)抛光,采用海军呢和抛光液将磨片抛光。将磨片置偏光显微镜下观察。3 份采自安徽亳州药材市场的白 石英饮片样品呈破碎颗粒状,未制作磨片。

2.2 X射线衍射分析

**2.2.1** 样品制备 将白石英破碎后,置玛瑙研钵中 研细,过200目筛,备用。

**2.2.2** 测定条件 Cu靶Kα辐射,光管电压和光管 电流分别为40 kV和40 mA。发散狭缝(DS)为 0.6 mm;防散射狭缝(SS)为5.5 mm;接收狭缝 (RS)为0.1 mm;扫描速度为5(°)·min<sup>-1</sup>,连续 扫描,扫描范围2θ为3°~85°,步长为0.01°。

2.2.3 物相分析和相对含量计算 用 Jade 6.0 软件 对白石英药材 XRD 图谱进行物相分析,将所得衍射 数据与国际粉末衍射数据中心粉末衍射标准联合委 员会(JCPDS)标准卡片匹配,获得物相分析结果。 并根据各矿物衍射峰强度,计算各矿物组分的相对 含量<sup>[12]</sup>。

2.2.4 XRD Fourier特征指纹图谱的建立及相似度 评价 取供试品适量,按2.2.2项下条件进行 XRD 分析,寻峰条件为Width 1.00、Height 2.0、Minimum Height 1.5。d为晶格间距(nm)。获得不同 2θ 衍射 角及其对应的相对强度,应用 Origin 2017软件处理 得 XRD 图谱,将13个白石英样品图谱叠加平均,建 立白石英样品的 XRD Fourier指纹图谱,并对其进行 相似度评价。

2.2.5 指纹图谱聚类分析和主成分分析 (PCA) 选择白石英 XRD Fourier 指纹图谱中 12个共有峰,采用 SPSS 24软件中的系统聚类对 13个白石英样品进行聚类分析;采用 SIMCA-P 14.1软件,根据 13批样品共有峰相对强度 (*I*/*I*<sub>0</sub>)数据,对 13个白石英样品进行 PCA。

#### 3 结果与分析

#### 3.1 偏光显微镜分析

3.1.1 白石英粉末偏光显微特征 在单偏光下各样 品呈不规则颗粒状,无色透明,有的微带黄色,具 玻璃样光泽,表面不平坦,可见网状纹理,断面呈 层状分布。在正交偏光下,各样品呈不规则颗粒状, 具有偏光性,多呈黄色或蓝紫色。不同产地白石英 粉末偏光显微特征差异不明显。代表性的显微特征 图,见图1。

**3.1.2** 白石英磨片偏光显微结构特征 不同产地的 白石英样品由于成因不同具有不同的显微特征,见



注: A. Y9; B. Y13; 左侧为单偏光,右侧为正交偏光; 标尺为100 µm; 图2 同。 图1 白石英样品粉末的单偏光、正交偏光显微特征

表2。其中Y1、Y4、Y6、Y9、Y10样品在单偏光下 呈无色透明,正交偏光下可见结晶度好,晶体较大, 较为完整,品质较好;Y2、Y3、Y8在单偏光下多 呈粒状结构,其中Y8表面不光滑,正交偏光下颗粒 镶嵌分布,结晶度较差,可见较多杂质,品质较差。 各样品偏光显微特征图见图2。

#### 3.2 XRD 物相分析

白石英样品 Y1 主要物相是石英(SiO<sub>2</sub>)、方解 石(CaCO<sub>3</sub>)、伊利石[KAl<sub>2</sub>Si<sub>3</sub>AlO<sub>10</sub>(OH)<sub>2</sub>]、正长石 (KSi<sub>3</sub>AlO<sub>8</sub>); Y2 主要物相是石英、方解石、伊利 石、正长石、钠长石[Na(AlSi<sub>3</sub>O<sub>8</sub>)]; Y3、Y5、Y12 主要物相是石英、伊利石、正长石、钠长石; Y4、 Y6、Y9~Y11、Y13 主要物相是石英、正长石、钠长 石;Y7主要物相是石英、方解石、正长石、钠长 石;Y8主要物相是石英、伊利石、正长石、钠长 石、高岭石[Al<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>5</sub>(OH)<sub>4</sub>]。物相分析结果显示,白 石英样品主要成分为石英和正长石,且大多数样品 含有钠长石。样品中石英质量分数依次为Y9=Y10> Y4>Y6>Y11>Y1>Y13>Y7>Y5>Y12>Y3>Y2>Y8。其 中Y9、Y10中石英质量分数最高,均为99.4%;Y8 中石英质量分数最低,为91.2%。此结果与偏光显 微特征分析显示的Y9、Y10样品结晶度好、品质较 高,Y8样品结晶度相对较差、杂质较多、品质相对 较低的结果较为一致。白石英XRD矿物成分含量分 析结果见表3,部分具代表性的样品物相分析图见 图3~8。

表2 白石英样品磨片偏光显微特征

编号	单偏光显微特征	正交偏光显微特征
Y1	呈无色透明状且表面光滑平整,可见裂隙,可见 少量黑褐色杂质	结晶度好,晶体较大,较为完整,可见裂隙,晶体呈干涉色(黄),旋转物台,颜 色发生4次变化
Y2	呈无色透明状,粒状结构,见少量黑褐色杂质	结晶度较差,呈粒状结构,颗粒镶嵌分布,分布较为均匀,颗粒间杂质较少,颗 粒呈不同干涉色,旋转物台,颜色发生4次变化
Y3	呈无色透明状,粒状结构,见少量黑褐色杂质	结晶度较差,呈粒状结构,颗粒镶嵌分布,分布较为均匀,颗粒间杂质较少,颗 粒呈不同干涉色,旋转物台,颜色发生4次变化
Y4	呈无色透明状,表面不光滑,裂隙较多	结晶度好,晶体较大,较为完整,可见裂隙,晶体呈干涉色(蓝),旋转物台,颜 色发生4次变化
Y5	呈无色透明状,表面不光滑,裂隙较多,可见黑 色杂质	结晶度较差,呈粒状结构,颗粒破碎明显,大小不一,分布不均,可见黑色杂质, 晶体呈干涉色,旋转物台,颜色发生4次变化
Y6	呈无色透明状且表面光滑平整,可见裂隙,可见 少量黑褐色杂质	结晶度好,晶体较大,较为完整,可见裂隙,晶体呈干涉色(黄),旋转物台,颜 色发生4次变化
Y7	呈无色透明状,表面不光滑,可见裂隙,可见黑 色杂质	结晶度较好,晶体较大,可见裂隙,零星颗粒分布其中,晶体呈干涉色,旋转物 台,颜色发生4次变化
Y8	呈无色透明状,表面不光滑,可见裂隙,裂隙较 多,且裂隙中含有较多的黑褐色矿物杂质	结晶度较差,呈粒状结构,颗粒破碎明显,大小不一,分布不均,裂隙明显,有 较多杂质,颗粒呈不同干涉色,旋转物台,颜色发生4次变化
Y9	呈无色透明状且表面光滑平整,可见裂隙,可见 少量黑褐色杂质	结晶度好,晶体较大,较为完整,可见裂隙,晶体呈干涉色(紫),旋转物台,颜 色发生4次变化
Y10	呈无色透明状,表面不光滑,可见裂隙,可见少 量黑褐色杂质	结晶度好,晶体较大,较为完整,中间包含有小颗粒,可见裂隙,晶体呈干涉色(蓝),旋转物台,颜色发生4次变化



注: A~J. Y1~Y10。

图2 白石英样品磨片的单偏光、正交偏光显微特征

3.3 白石英XRD Fourier特征指纹图谱的建立

各样品 XRD 叠加图见图 9。将白石英样品图谱的几何拓扑图形叠加平均后,建立白石英样品的 XRD Fourier特征指纹图谱,见图 10。

3.4 白石英的XRD Fourier指纹图谱分析

**3.4.1** XRD图谱峰的标定及寻峰 对白石英样品的指纹图谱进行标定和寻峰处理。分析比较后,选取强度较大的共有特征峰12个,得到各峰的200及其对应的*I/I*<sub>0</sub>,各共有峰数据见表4。

**3.4.2** 相似度评价 采用叠加平均计算得到白石英 XRD特征指纹图谱,根据各特征峰2θ、*I*/I<sub>0</sub>,以各自 的均值为参照,分别计算各样品的相关系数和相似 度(夹角余弦值)。白石英相似度计算结果见表5。

相似度计算结果表明,白石英XRD指纹图谱的 均数相关系数、均数夹角余弦值、中位数相关系数及 中位数夹角余弦值均大于0.9900,建立的XRD指纹 图谱具有科学性。

3.4.3 指纹图谱聚类分析和 PCA 选择白石英 XRD Fourier 指纹图谱中 12个共有峰,根据表5中的

80

80

80



数据,用 SPSS 24 软件中的系统聚类对 13 个白石英 样品进行聚类分析;用SIMCA-P14.1对白石英样品 进行PCA,结果见图11~12。

· 1038 ·

Y9、Y13归为一类,样品Y6、Y10、Y11归为一类; 当距离为2时样品Y2、Y3、Y6、Y9~Y11、Y13归 为一类,样品Y4、Y5归为一类;当距离为5时,样 品 Y2~Y6、Y9~Y11、Y13 归为一类; 当距离为 14 时样品 Y2~Y7、Y9~Y11、Y13 归为一类;当距离为







24 时样品 Y2~Y11、Y13 归为一类,Y1、Y12 归为 一类;当距离为25时,所有样品归为一类。

应用 PCA 可将 13 批白石英样品分为 5 类, Y2~Y6、Y9、Y11、Y13 归为一类, Y1、Y7、Y8、



注: 1.  $(20.87\pm0.05)$ °; 2.  $(26.65\pm0.05)$ °; 3.  $(36.55\pm0.06)$ °; 4.  $(39.47\pm0.05)$ °; 5.  $(40.29\pm0.04)$ °; 6.  $(42.46\pm0.05)$ °; 7.  $(45.80\pm0.05)$ °; 8.  $(50.14\pm0.04)$ °; 9.  $(54.87\pm0.05)$ °; 10.  $(59.96\pm0.05)$ °; 11.  $(69.74\pm0.04)$ °; 12.  $(68.14\pm0.04)$ °。

#### 图 10 白石英 XRD Fourier 特征指纹图谱

Y12各归为一类,通过峰数据分析可知,主要是主成分1方差贡献率差异导致,主成分2方差贡献率略 有影响,与聚类分析的结果基本一致。

聚类分析和PCA结果显示,13个白石英样品大 致可以分为5类,其中Y2~Y6、Y9、Y11、Y13样 品归为一类,而Y1、Y7、Y8、Y12样品各归为一 类。其原因可能是矿物组成差异造成的,13个样品 中仅有Y1样品中无钠长石。Y7、Y8和Y12样品中 正长石质量分数均超过2%;Y8样品在13个样品中 石英质量分数最小,且仅有其含有高岭石;Y7含有 方解石而无伊利石;Y12无方解石,有伊利石。因 此这4个样品各归为一类,其余样品在矿物组成及 含量上较为接近,因此归为一类。

表4 白石英XRD图谱各共有峰的2θ及I/I。

共有峰 20/°	20/9	1/10000													
	20/	<i>a</i> /nm	Y1	Y2	Y3	Y4	Y5	Y6	Y7	Y8	Y9	Y10	Y11	Y12	Y13
1	20.87	0.426	29.4	21.8	20.2	23.1	22.3	21.3	17.9	27.2	20.2	22.5	21.8	24.8	20.6
2	26.65	0.335	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0
3	36.55	0.246	11.1	7.3	5.7	8.4	6.9	7.8	6.4	6.7	6.7	6.9	6.8	6.9	6.9
4	39.47	0.228	11.8	5.8	5.5	5.7	6.0	5.4	5.1	5.2	5.2	6.1	6.4	5.9	5.7
5	40.29	0.224	4.9	3.0	3.0	3.6	3.5	3.5	2.5	3.0	3.5	3.4	2.9	3.6	3.1
6	42.46	0.213	9.3	4.1	4.8	5.7	5.1	4.7	3.5	5.3	4.5	4.6	4.4	5.8	4.5
7	45.80	0.198	4.0	3.5	3.0	3.5	2.9	3.2	2.4	3.2	3.3	3.6	3.0	3.4	2.9
8	50.14	0.182	14.1	9.5	10.0	11.6	13.4	11.8	8.9	9.2	10.6	10.9	11.5	17.4	11.2
9	54.87	0.167	3.7	3.2	3.7	3.4	3.0	3.8	2.9	2.5	3.3	3.0	3.1	3.7	3.3
10	59.96	0.154	8.5	6.5	8.3	8.2	7.9	7.6	5.3	6.9	7.8	7.4	6.9	7.6	7.1
11	67.73	0.138	5.9	4.0	4.3	4.9	4.7	4.2	3.1	3.7	5.2	4.2	3.9	5.1	4.8
12	68.14	0.138	9.9	4.5	5.4	5.5	4.9	5.4	3.7	5.8	4.5	5.5	4.7	6.5	5.4

衣3 口口央AKU 拍纹图信怕似度										
编号	均值相关系数	均值夹角余弦	中位数相关 系数	中位数夹角 余弦						
Y1	0.996 8	0.996 1	0.994 2	0.993 2						
Y2	0.999 7	0.999 8	0.999 6	0.999 7						
Y3	0.999 4	0.999 7	0.999 5	0.999 7						
Y4	0.999 9	0.999 8	0.999 9	0.999 7						
Y5	0.999 7	0.999 7	0.999 8	0.999 7						
Y6	0.999 8	0.999 9	0.999 9	0.999 9						
Y7	0.999 1	0.999 3	0.998 1	0.998 5						
Y8	0.998 2	0.997 9	0.998 6	0.998 4						
Y9	0.999 5	0.999 7	0.999 6	0.999 8						
Y10	0.999 9	0.999 9	0.999 9	1.000 0						
Y11	0.999 9	0.999 9	0.999 9	0.999 9						
Y12	0.998 1	0.997 8	0.998 2	0.997 8						
Y13	0.999 8	0.999 9	0.999 8	0.999 9						

VDD 长侍团进扫创由







### 4 讨论

· 1040 ·

优质的石英矿石在单偏光下基本呈无色透明, 表面光滑,裂隙较少,在正交偏光下结晶度好,晶 体颗粒直径较大,杂质较少<sup>[13]</sup>。在本研究中通过偏 光显微镜观察,结果表明白石英样品Y1、Y4、 Y6、Y9、Y10结晶度好,晶体颗粒大,裂隙与杂 质较少,品质较好。白石英中的主要成分为石英, XRD分析结果显示,Y9、Y10中石英质量分数最高 (99.4%),其次为样品Y4、Y6、Y11、Y1、Y13 (均超过97%),样品Y8含量最少(91.2%),与偏 光显微镜观察结果基本一致。白石英样品Y9和 Y10结晶度好且石英含量最高,质量最好,其中Y9 产自浙江安吉章村镇、Y10产自安徽绩溪扬溪镇, 两处矿物成因类型均为热液成因(纯度较高,品质 较好)<sup>[14]</sup>。

本研究采用粉末 XRD 技术对矿物药白石英进行 分析,建立了以12个共有峰为特征指纹信息的白石 英 XRD Fourier 指纹图谱分析方法,其 XRD Fourier 指纹图谱的相似度为0.993~1.000。XRD Fourier 指纹图谱分析法可作为白石英的鉴定与分析手段之一, 部分样品图的峰数、峰位和峰强有一定差异,说明 不同产地白石英样品的矿物组成及其含量有一定 差异。

对白石英XRD指纹图谱中12个共有峰的相对峰 强度数据进行聚类分析和PCA。其结果表明,同一 省份的样品并未归为一类,因此推测影响白石英中 矿物组成及其含量的因素并非为单一的地域因素。 在聚类分析中当距离为2时,Y2、Y3、Y6、Y9~Y11、 Y13聚为一类。查阅文献发现其中Y2、Y3样品为变 质成因,Y6、Y9~Y11、Y13均为热液成因<sup>[14-15]</sup>,且 该5个样中石英质量分数均超过97%,提示矿物成 因对白石英的物质组成及其品质有较大影响,后续 可进行相关的研究进一步探讨影响白石英品质的因 素,为白石英矿物药资源的品质形成及开发利用提 供参考。

#### 参考文献

- 南京中医药大学.中药大辞典[M].2版.上海:上海科
   学技术出版社,2006:974-975.
- [2] 许乔.基于拉曼光谱及偏光成像技术的阿尔兹海默症相 关物质的分析研究[D].上海:华东师范大学,2018.
- [3] 刘圣金,王瑞,吴德康,等.现代技术在矿物药研究中的 应用[J]. 中国现代中药,2015,17(9):869-877,904.
- [4] 田志宏,张秀华,田志广.X射线衍射技术在材料分析中 的应用[J].工程与试验,2009,49(3):40-42.
- [5] 吴怡青,刘静,刘新,等. 矿物类中药滑石粉的 XRD Fourier 图谱研究[J]. 中药材,2019,42(12):2856-2860.

- [6] 杨丹,刘圣金,燕珂,等.朱砂药材及饮片X射线衍射 Fourier指纹图谱研究[J].中药材,2018,41(12):2767-2773.
- [7] 刘圣金,乔婷婷,马瑜璐,等.矿物药白矾、枯矾及其伪品
   的SEM,XRD鉴别分析[J].中国实验方剂学杂志,2019,
   25(5):8-13.
- [8] 陈龙,何博,曾晓璇,等. 矿物药阳起石 XRD Fourier 指纹 图谱研究[J]. 世界科学技术—中医药现代化,2015,17
   (7):1562-1566.
- [9] 黄必胜,明晶,陈科力.X射线衍射指纹图谱在矿物药中的研究进展[J].中南民族大学学报(自然科学版), 2015,34(4):45-49.
- [10] 杨欢,刘圣金,吴德康,等. 矿物药禹余粮X射线衍射

Fourier 指纹图谱研究 [J]. 药物分析杂志, 2014, 34 (12):2171-2180.

- [11] 刘圣金,吴超颖,马瑜璐,等.不同矿物成因禹余粮质量 评价及优质矿产资源筛选[J].中国实验方剂学杂志, 2019,25(5):14-20.
- [12] 陈浩,周连福.XRD定量相分析方法及其在湖泊沉积研 究中的应用[J].盐湖研究,2013,21(4):60-66.
- [13] 从金瑶. 几种伟晶岩石英的矿石学特征及杂质去除工艺研究[D]. 绵阳:西南科技大学,2019.
- [14] 高树学,颜玲亚,陈正国,等. 我国脉石英成矿区带初步
   划分[J]. 中国非金属矿工业导刊,2020(5):5-9.
- [15] 张明,褚强.凤阳石英资源特征及开发现状[J].中国非 金属矿工业导刊,2009(5):24-27.

(收稿日期: 2021-08-24 编辑: 田苗)