峰高与峰面积统计量表示岩心黏土矿物相对含量的差异

张照鹏[1], 褚忠信[1,2], 李应坤[1]

(1. 中国海洋大学 海洋地球科学学院 山东 青岛 266100; 2. 海底科学与探测技术教育部重点实验室 山东 青岛 266100)

摘要: 目前黏土矿物分析主要依据 XRD 衍射峰的峰高或峰面积统计量, 为了分析两种统计量计算黏土矿物相对含量的差异。对取自黄海的 YSZD02 岩心短柱开展了黏土矿物 XRD 测试, 分别利用峰高和峰面积表示 4 种主要黏土矿物蒙皂石、伊利石、高岭石、绿泥石的相对百分含量, 探究两种统计量表示黏土矿物相对含量随深度变化的差异, 结果发现两算法都能显示黏土矿物的相对组成特征, 对 YSZD02 岩心而言, 其黏土矿物主要为伊利石, 其次为高岭石, 再次为绿泥石, 最次为蒙皂石。两种算法得到的 4 种矿物的相关系数由高到低依次为: 高岭石 0.94, 绿泥石 0.93, 蒙皂石 0.82, 伊利石 0.73, 呈正相关。峰面积法求 4 种矿物的相对含量随深度变化的离散程度比峰高法大。用峰高、峰面积法表示黏土矿物相对含量随深度的变化, 两种方法相对差异由小到大依次为伊利石, 高岭石, 绿泥石和蒙皂石。以上结果表明两种算法既有共性又有明显的差异。随着分析技术的不断更新, 相较于峰高法较难解决的误差问题, 未来峰面积法会得到更广泛的应用。因此研发更精确的计算机分析软件、统一研究方法将是未来发展的必然趋势。本文的研究加深了对峰高与峰面积统计量的理解, 为其他分析方法的比较与选择提供了参考。

关键词: 黏土矿物; 相对含量; X 射线衍射; 峰高法; 峰面积法

中图分类号: P599 **文献标识码**: A **文章编号**: 1000-3096(2016)12-0107-07

doi: 10.11759/hykx20160508001

黏土矿物为含水的硅酸盐矿物, 颗粒一般小于 2 μm。其类型主要有蒙皂石、伊利石、高岭石、绿泥石等。黏土矿物是海洋沉积物中的重要组成部分, 在浅海区约占沉积物总量的 1/4~1/3[1]。黏土矿物含量及其组合, 对环境变化、物质来源及搬运强度、环流强度演化等具有重要意义[2], 是沉积学中常用的测试方法。如黏土矿物可以揭示古气候环境演变信息、吸附污染物、净化环境等[3]。周晓静等[4]对东海陆架表层沉积物黏土矿物组成和分布特征和来源的研究、李安春等[5]对南海北部陆坡 50 ka 以来黏土矿物来源与输运机制的分析以及刘健等[6]对南黄海西部陆架区表层沉积特征与物源分析的研究和冯秀丽等[1]对渤海湾西部表层沉积物黏土矿物特征的研究均揭示了黏土矿物在追踪物源、物质输运过程、沉积环境和气候特征等问题中的作用。

X 射线衍射(XRD)是黏土矿物鉴定和分析的重要工具, 一方面, 特定物相具有特定衍射线条[7], 利用衍射峰值计算晶面间距判断矿物类型, 进行定性分析; 另一方面, 峰高和峰面积可以表示矿物衍射峰强度, 进行定量分析。X 射线衍射原理是: X 射线波长短(2.5~0.5 Å), 穿透力强[8], 当穿过矿物晶格时会发生衍射现象, 由于不同矿物具有不同晶体结构特征, 故会呈现出不同的衍射图谱。衍射图谱表现为多个连续高低不一的峰。

峰高法和峰面积法是分别用矿物衍射峰的峰高和峰面积来表示混合物中该矿物相对含量的定量方法。峰高即峰顶至基线的垂线距离; 峰面积即峰形曲线与基线围成区域的面积[9], 又称为积分值。矿物在沉积物中的含量跟其衍射峰强度成正比关系, 即矿物含量越高, 衍射峰强度越强。故峰高和峰面积都可用于表示矿物在沉积物中的相对含量。在沉积学中有广泛的应用。沉积物颗粒特征是物源、地形地貌、沿岸流、季风强度等综合作用的结果[10-11], 所以作为

收稿日期: 2016-05-08; 修回日期: 2016-09-03

基金项目: 国家自然科学基金项目(41376052, 41030856)

[Foundation: National Natural Science Foundation of China, No.41376052, No.41030856]

作者简介: 张照鹏(1990-), 男, 山东淄博人, 硕士研究生, 主要从事海洋沉积学研究, E-mail: zhaopeng_ouc@sina.com; 褚忠信(1976-), 通信作者: 男, 山东临沂人, 博士, 教授, 主要从事河流-河口-边缘海沉积学研究, E-mail: zhongxinchu@ouc.edu.cn

细粒组分的黏土矿物，用于分析上述因素时选择合适的含量计算方法就很重要。已往的黏土矿物相对含量分析，有的基于峰高值[12]；有的基于峰面积值[4]。而对于这两种统计量的差异还缺乏足够的了解。故此，我们拟对取自黄海的同一岩心，开展黏土矿物的 XRD 测试，分别基于峰高和峰面积，获取黏土矿物的相对含量，以期揭示两种方法在反映黏土矿物相对含量上的差异。

1 材料和方法

取自黄海的岩心 YSZD02,长度为 42 cm，站位水深为 73 m，地理坐标为 35°17′7140″N， 123°12′4302″E。对 YSZD02 岩心每 0.5 cm 间隔取样，共取得 84 个样品。实验室对样品的处理包括样品分离和制备。样品处理过程主要是非黏土矿物及有机部分的祛除，包括去碳酸盐，去有机质和去游离氧化铁等过程。并对黏土悬浊液进行搅拌，按照斯托克斯公式提取黏土粒级组分(＜2 μm)，将上述取液离心，去上清液，制作乙二醇饱和定向片(EG 片)，定向片制作方法是将自然定向片放入干燥器上部，底部放入少量乙二醇溶液，盖严，放入已升温至 40~60℃的恒温箱中 16~ 24 h[13]，最后上机测试。

测试工作在中国海洋大学完成，使用仪器为德国产 D8 Advance 型 X 射线衍射仪，仪器工作电压为 40 kV，电流为 40 mA，扫描范围 θ 为 3°~33°，步长为 0.02°/s，使用软件 MDI Jade5.0 进行分析，将得到的衍射图谱扣除背景、平滑[4]。峰面积为峰形与基线围成的区域面积，峰高为基线到峰顶的垂线高度(图 1)。

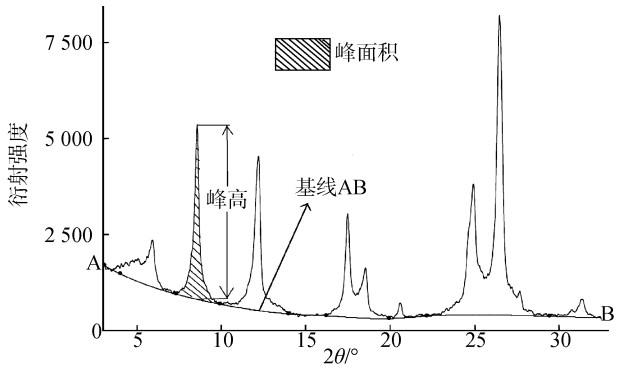


图 1 峰高与峰面积示意图

Fig. 1 Schematic diagram of peak height and peak area

在计算 4 种黏土矿物蒙皂石(S)、伊利石(I)、高岭石(K)、绿泥石(C)相对百分含量时，文中两种算法采用相同的权重系数，标准如下：蒙皂石的质量峰强度为 17 Å 的衍射峰强度；伊利石的质量峰强度为 10 Å 的衍射峰强度的 4 倍；高岭石和绿泥石的衍射峰强度(为高岭石的 d001 和绿泥石的 d002 的叠合峰)为 7Å 的衍射峰强度的 2 倍；高岭石和绿泥石的进一步测定需要根据绿泥石(3.53Å)和高岭石(3.58Å)衍射峰强度比来计算。具体计算式如下[13-14]：

$$I_{17Å}/4+I_{10Å}/1+I_{7Å}/2=100 \quad (1)$$

$$C(\mathrm{S})=[(I_{17Å}/4)/(I_{17Å}/4+I_{10Å}/1+I_{7Å}/2)]\times 100\% \quad (2)$$

$$C(\mathrm{I})=[(I_{10Å}/1)/(I_{17Å}/4+I_{10Å}/1+I_{7Å}/2)]\times 100\% \quad (3)$$

$$C(\mathrm{K+C})=[(I_{7Å}/2)/(I_{17Å}/4+I_{10Å}/1+I_{7Å}/2)]\times 100\% \quad (4)$$

$$C(\mathrm{K})=[I_{3.58Å}/(I_{3.58Å}+I_{3.53Å})]C(\mathrm{K+C})\times 100\% \quad (5)$$

$$C(\mathrm{C})=[I_{3.53Å}/(I_{3.58Å}+I_{3.53Å})]C(\mathrm{K+C})\times 100\% \quad (6)$$

式中：$I_{17Å}$, $I_{10Å}$, $I_{7Å}$, $I_{3.58Å}$, $I_{3.53Å}$ 分别为乙二醇处理后的蒙皂石 17 Å，伊利石的 10 Å，高岭石+绿泥石的 7Å 衍射峰强度(峰高或峰面积)，高岭石 3.58Å，绿泥石 3.53Å；C(S)为蒙皂石含量，C(I)为伊利石含量，C(K+C)为高岭石+绿泥石含量，C(K)为高岭石含量，C(C)为绿泥石含量。本公式简单方便，相当于半定量。

为比较两种算法结果的差异，这里还特定义了两者相对差异=[(峰面积–峰高)/峰高]×100%，其中的峰面积和峰高为同一深度同一样品的计算结果。计算结果中，由于黏土矿物含量计算为半定量，故所有百分含量均只保留整数，其他数值如相关系数、标准偏差、相对差异值等保留小数点后一位以保证分析精度。

两种方法的相关分析借助于 SPSS 软件完成。

2 结果

两种算法结果的相关性分析(图 2)显示，4 种矿物的相关系数 r 由高到低依次为：高岭石 0.94，绿泥石 0.93，蒙皂石 0.82，伊利石 0.73，说明 4 种矿物两种算法的结果均呈显著正相关，特别是高岭石和绿泥石。由图 3 和图 4 可知，4 种黏土矿物的两种算法结果的曲线具有相似的变化特征，表明两种算法都能反映矿物相对含量随深度的变化特征。

利用峰面积法和峰高法分别得到的黏土矿物相对百分含量的主要统计结果见表 1。从中看出，两种算法的的结果皆显示，在该岩心的黏土矿物中，伊利石相对含量最高，其次为高岭石，再次为绿泥石，含量最低的为蒙皂石，这说明两算法皆能反映样品中黏土矿物相对含量变化的根本特征，这是两算法的共性。对该岩心黏土矿物相对含量的组成及其随深度变化的特征与地质意义，不是本文的目标，这里重点阐述两种算法结果的差异。

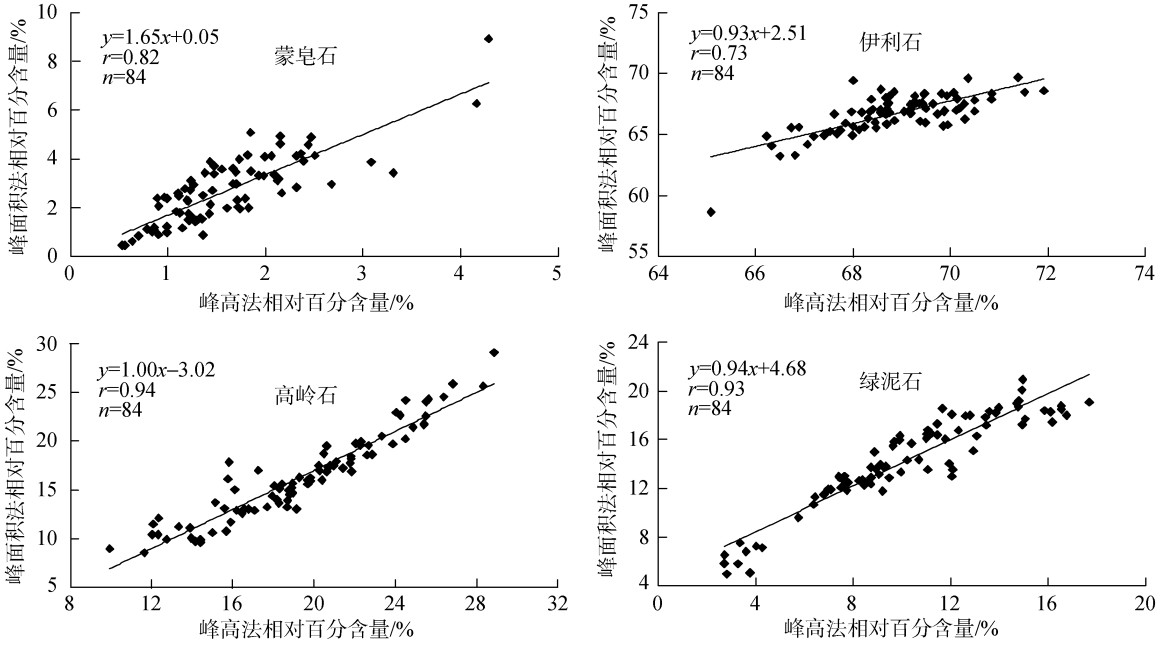


图 2　利用峰高与峰面积法分别得到的 4 种黏土矿物相对百分含量的相关性分析

Fig. 2　Correlation analysis of relative contents of four main clay minerals based on peak-height and peak-area methods, respectively

从垂向上的 84 个样品的黏土矿物的相对含量并结合平均值来看，峰面积法大于峰高法的黏土矿物为蒙皂石和绿泥石，峰面积法小于峰高法的黏土矿物为高岭石和伊利石(表 1，图 3)。图 4 用箱式图显示两种算法得到的各黏土矿物相对百分含量的最大值、最小值、中位数、平均值与异常值，由图可知蒙皂石和伊利石在两种算法中都存在异常值，也说明两种算法存在一致性。峰面积法的异常值(蒙皂石和伊利石分别为 9%和 59%)脱离正常值的程度明显大于峰高法(蒙皂石和伊利石分别为 4%和 65%)，且 4 种矿物峰高法结果分布区间依次为：蒙皂石[1，4]，伊利石[65，72]，高岭石[10，29]，绿泥石[3，18]；峰面积法结果分布区间依次为：蒙皂石[1，9]，伊利石[59，70]，高岭石[9，29]，绿泥石[5，21](表 1)。由此看出，4 种矿物峰面积法数值的分布区间均大于峰高法数值的分布区间，即峰面积法数据的极差(最大值与最小值之差)较大，而峰高法数据的极差较小。数据异常值特征和数据分布区间或极差的比较，说明用峰面积法计算的黏土矿物相对含量随岩心深度的差异更明显，数据更为分散；而用峰高法计算的黏土矿物相对含量随岩心深度的差异较小，数据相对集中。整体而言，相对于峰面积法，黏土矿物峰高法结果的中位数线更接近于箱体的中间位置，说明峰高法得到的随深度变化的黏土矿物相对含量数值更接近于正态分布。

表 1　基于峰高法与峰面积法求得的岩心 YSZD02 黏土矿物相对百分含量统计结果

Tab. 1　Statistical results of relative contents of clay minerals of YSZD02 core based on peak-height and peak-area

矿物类型	黏土矿物相对百分含量(%)								标准偏差	
	峰高法				峰面积法				峰高法	峰面积法
	最大	最小	极差	平均	最大	最小	极差	平均		
S	4	1	3	2	9	1	8	3	0.7	1.4
I	72	65	7	69	70	59	11	67	1.3	1.6
K	29	10	19	19	29	9	20	16	4.2	4.5
C	18	3	15	10	21	5	16	14	3.7	3.8

除了上述的数据分布区间或极差，用标准偏差统计量进一步比较两种算法结果的离散程度，对比发现，4 种黏土矿物的峰面积法结果的标准偏差均大于峰高法结果的标准偏差(表 1)，这同时说明利用峰面

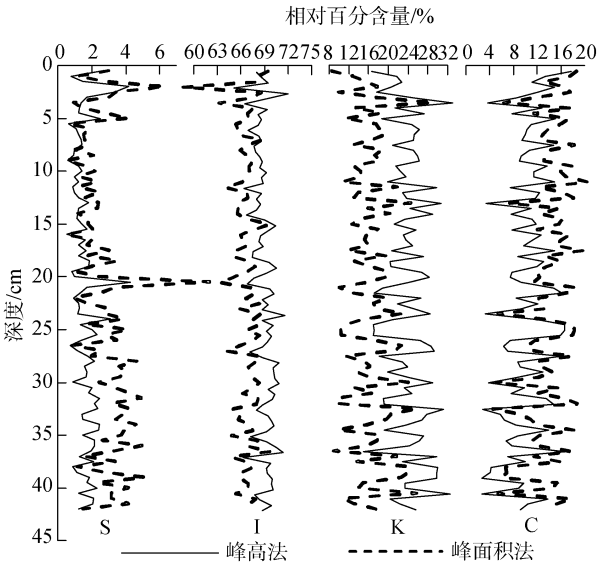


图 3　利用峰高与峰面积法分别计算 4 种主要黏土矿物相对百分含量随深度的变化曲线

Fig. 3　Curve of relative contents of four main clay minerals with depth, based on peak-height and peak-area methods, respectively

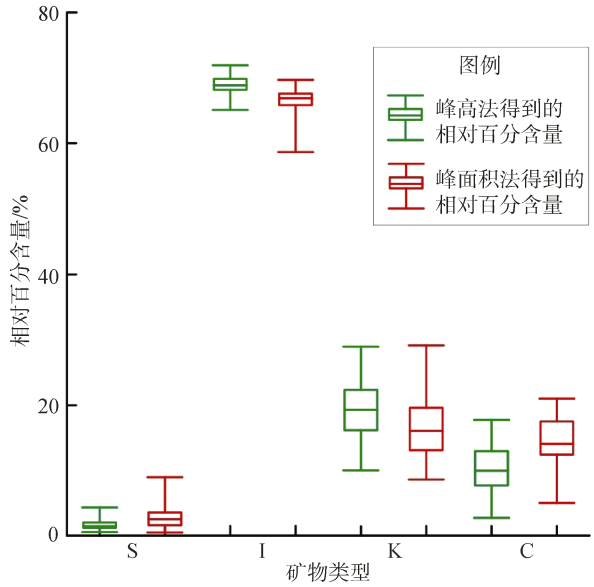


图 4　峰高法与峰面积法得到的岩心黏土矿物相对百分含量箱式图

Fig. 4　Box plot of relative contents of four main clay minerals based on peak-height and peak-area methods, respectively

积法表示 4 种矿物相对含量随深度变化的离散程度比峰高法大，换句话说，利用峰面积数值表示的黏土矿物相对含量随深度变化更明显。

两种算法结果的自定义相对差异显示，4 种矿物相对差异值的标准偏差由小到大依次为：1.6(I)，8.7(K)，25.6(C)，52.6(S)；相对差异值分布区间分别为：[–9.9，2.1](I)，[–33.1，12.9](K)，[7.6，142.4](C)，[–34.9，175.9](S)。伊利石矿物与其他 3 种矿物相比，其相对差异曲线随深度的波动最小(图 5)，说明两种算法反映伊利石相对含量随深度变化的差异最小。两算法得到的高岭石相对含量随深度变化的曲线波动较伊利石偏大，但较蒙皂石和绿泥石的变化曲线波动偏小(图 5)，蒙皂石和绿泥石的变化曲线波动大，尤其是蒙皂石，这说明用峰高法和峰面积法得到的蒙皂石和绿泥石相对含量随深度变化的结果差异较大。

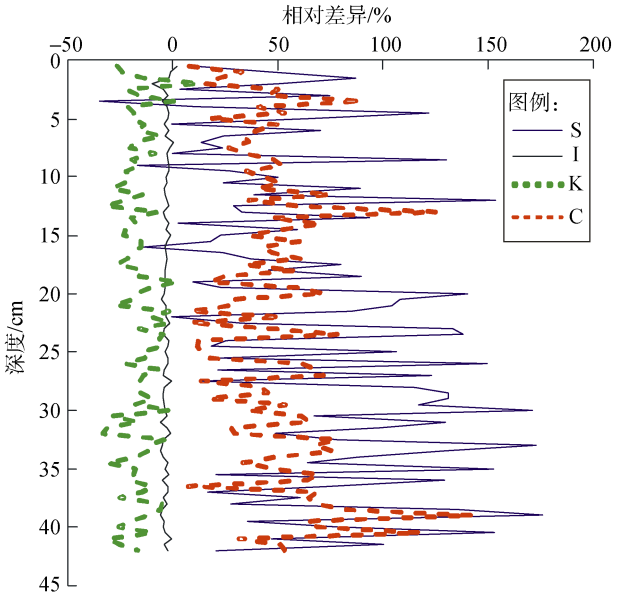


图 5　利用峰高法和峰面积法计算的黏土矿物相对百分含量的相对差异

Fig. 5　Relative differences in relative contents of clay minerals based on peak-height and peak-area methods, respectively

3　讨论

在比较峰高法和峰面积法在计算岩心黏土矿物相对百分含量中的差异时，影响误差的因素主要有以下几点：黏土成分分离、定向片制取和择优取向效应、其他矿物衍射峰的干扰[15]、矿物结晶程度、混合物粒度[16]、仪器精密程度、峰值计算方法、矿物权重的选择、基线选择等。目前分析精度处于半定量水平，人为误差不可避免，但应将人为因素的影响降到最低。虽然有误差，但基本可以满足基本研究需要。

X 射线衍射图谱中选择基线时，谱线首尾平滑相接，基线与峰两端曲线相切。为保证两种算法对比

结果的可靠性，基线选取标准须一致。峰面积即为峰线与基线围成的区域，本文涉及的几种黏土矿物峰形近于对称。

矿物权重系数值的选择，不同学者观点不同，较常用的是比斯卡纳的方法[13]。为确保比较结果的可靠性，本文利用峰高、峰面积法计算时采用了相同的矿物权重系数。

使用乙二醇制作饱和定向片，有机分子可以进入黏土矿物层间，使层面形成不同程度的膨胀，并取代层间水分子，如乙二醇可以使蒙皂石层间间距加大到 17.0~17.3Å[17]。

在获取矿物相对含量过程中，峰高法和峰面积法各有特点，峰高法求解更为简洁，不过难以解决矿物结晶学差异、峰形宽窄、基线选择等问题，如蒙皂石通常结晶程度不好，峰型较宽，且形态不规则(受混层矿物影响)，用峰高法计算便会引起较大误差；峰面积法是用峰形围成的面积来表示，理论上更为精确，传统的 XRD 分析方法会遇到峰形叠加的情况，如高岭石的 d001 和绿泥石的 d002 的叠合峰，叠合峰分离方法不一，难免有误差，这时使用峰面积法计算两种矿物相对含量时精度不及峰高法，峰形多样导致算法多样，同时在界定峰面积区域左右界限时也会有误差，所以选择合适的峰面积算法就显得格外重要。随着 XRD 软件技术的不断更新，新应用软件如 TOPAS 的诞生有效提高了峰面积法的分析精度。总体而言，尽管峰高法和峰面积法具有相近的衍射峰分析结果，但随着计算机技术的发展，峰面积法将有更好的应用前景。

本文用两种算法得到的岩心黏土矿物相对含量的实例说明，两种算法的结果虽有差异，但都可求取矿物的相对含量，两种算法的结果也存在显著正相关，将来可以考虑在两种算法之间建立关系式，寻求更理想的测算方法。

4 结论

基于 X 射线衍射图谱，我们分别采用峰面积法与峰高法提取了黄海 YSZD02 岩心短柱随深度变化的 4 种黏土矿物相对含量，再利用多种统计方法对两算法的结果进行了对比，以期获取两算法结果的异同，主要结论如下。

1) 利用峰面积法与峰高法，得到岩心黏土矿物相对含量平均值分别为，伊利石 67%与 69%，高岭石 19%与 16%，绿泥石 14%与 10%，蒙皂石 3%与 2%，说明两算法结果都能显示黏土矿物的相对组成特征，对 YSZD02 岩心而言，其黏土矿物主要为伊利石，其次为高岭石，再次为绿泥石，最次为蒙皂石。

2) 相关性分析显示，两算法获取的随深度变化的 4 种黏土矿物相对含量基本呈显著正相关，相关系数分别为高岭石 0.94，绿泥石 0.93，蒙皂石 0.82，伊利石 0.73，说明两算法都可用于获取岩心中随深度变化的黏土矿物相对含量，这是两算法的共性。

3) 黏土矿物相对含量箱型图的异常值和分布区间以及标准偏差显示，整体而言，利用峰面积法求 4 种矿物的相对含量随深度变化的离散程度比峰高法大，说明峰面积结果更能突出岩心矿物相对含量在不同深度的差异。

4) 两种算法结果的自定义相对差异值的标准偏差由小到大依次为：伊利石 1.6，高岭石 8.7，绿泥石 25.6，蒙皂石 52.6，说明两算法求取岩心黏土矿物随深度变化的相对含量对于不同矿物有不同差异。

5) 整体而言，虽然峰高法和峰面积法均能反映衍射强度，但随着分析技术的不断更新，未来峰面积法会得到更广泛的应用。此外，为了减少人为误差，研发更精确的计算机分析软件、统一研究方法将是未来发展的必然趋势。本文的研究加深了对峰高与峰面积统计量的理解，为其他分析方法的比较与选择提供了参考。

参考文献:

[1] 冯秀丽，魏飞，刘杰，等. 渤海湾西部表层沉积物粒度及黏土矿物特征分析[J]. 海洋科学，2015，39(8): 70-77.
Feng Xiuli, Wei Fei, Liu Jie, et al. The sediment grain size characteristics and analysis of sources in the western Bohai Bay[J]. Marine Sciences, 2015, 39(8): 70-77.

[2] 孙庆峰，陈发虎，Colin C，等. 粘土矿物在气候环境变化研究中的应用进展[J]. 矿物学报，2011，31(1): 146-152.
Sun Qingfeng, Chen Fahu, Colin C, et al. Application progress of clay minerals in the researches of climate and environment[J]. Acta Mineralogica Sinica, 2011, 31(1): 146-152.

[3] 汤艳杰，贾建业，谢先德. 粘土矿物的环境意义[J]. 地学前缘，2002，9(2): 337-344.
Tang Yanjie, Jia Jianye, Xie Xiande. Environment significance of clay minerals[J]. Earth Science Frontiers, 2002, 9(2): 337-344.

[4] 周晓静，李安春，万世明，等. 东海陆架表层沉积物粘土矿物组成分布特征及来源[J]. 海洋与湖沼，2010，

41(5): 667-675.
Zhou Xiaojing, Li Anchun, Wan Shiming, et al. Clay minerals in surfacial sediments of the East China Sea Shelf: distribution and provenance[J]. Oceanologia Et Limnologia Sinica, 2010, 41(5): 667-675.

[5] 黄杰, 李安春, 万世明. 南海北部陆坡 50 ka 以来黏土矿物来源与输运机制分析[J]. 海洋科学, 2013, 37(1): 17-22.
Huang Jie, Li Anchun, Wan Shiming. Clay minerals in core sediments of the northern South China Sea slope since 50 ka and their indication to sources and transport[J]. Marine Sciences, 2013, 37(1): 17-22.

[6] 徐刚, 刘健, 温春, 等. 南黄海西部陆架区表层沉积特征与物源分析[J]. 海洋地质与第四纪地质, 2010, 30(4): 49-56.
Xu Gang, Liu Jian, Wen Chun, et al. Sedimentary characteristics and provenance of surficial sediments in the west South Yellow Sea[J]. Marine Geology & Quaternary Geology, 2010, 30(4): 49-56.

[7] 杨新萍. X 射线衍射技术的发展和应用[J]. 山西师范大学学报(自然科学版), 2007, 21(1): 72-76.
Yang Xinping. The development and application of X-ray diffraction[J]. Journal of Shanxi Normal University(Natural Science Edition), 2007, 21(1): 72-76.

[8] 蒲海波. 用 X 射线衍射分析鉴定粘土矿物的方法[J]. 勘探科学技术, 2011, 5: 12-14.
Pu Haibo. Method of identifying clay mineral by X-ray diffraction analysis[J]. Site Investigation Science and Technology, 2011, 5: 12-14.

[9] 胡艳峰. 总烃峰面积积分法与峰高法的线性比较[J]. 分析试验室, 2008, 27: 399-400.
Hu Yanfeng. The linear comparison of peak-area and peak-height methods of total hydrocarbon [J]. Chinese Journal of Analysis Laboratory, 2008, 27: 399-400.

[10] 王晓磊, 冯秀丽, 刘潇, 等. 冬、夏季渤黄海表层沉积物粒度特征差异及其成因分析[J]. 海洋科学, 2015, 39(8): 63-69.
Wang Xiaolei, Feng Xiuli, Liu Xiao, et al. Particle size differences of surface sediments in the Bohai Sea and the Yellow Sea between winter and summer and the genetic analysis[J]. Marine Sciences, 2015, 39(8): 63-69.

[11] 卢健, 李安春. 南黄海表层沉积物粒度特征季节变化及其影响因素[J]. 海洋科学, 2015, 39(3): 48-58.
Lu Jian, Li Anchun. Seasonal variations and influencing factors of the grain size characteristics of surface sediments in the South Yellow Sea[J]. Marine Sciences, 2015, 39(3): 48-58.

[12] 廖立兵. 粘土矿物 X 射线定量分析计算方法探讨[J]. 现代地质, 1995, 9(4): 423-425.
Liao Libing. Study of calculation methods for X-ray quantitative analysis of clay minerals[J]. Geoscience, 1995, 9(4): 423-425.

[13] Biscaye P E. Mineralogy and sedimentation of recent deep-sea clay in the Atlantic Ocean and adjacent seas and oceans[J]. Geological Society of America Bulletin, 1965, 76: 803-832.

[14] 廖立兵, 李国武. X 射线衍射方法和应用[M]. 北京: 地质出版社, 2008: 154-156.
Liao Libing, Li Guowu. X-ray Diffraction Method and Application[M]. Beijing: Geological Publishing House, 2008: 154-156.

[15] 郝立波, 陆继龙. 土壤粘土矿物含量计算方法研究[J]. 土壤通报, 2006, 37(3): 456-459.
Hao Libo, Lu Jilong. A method for the calculation of clay minerals content of soil[J]. Chinese Journal of Soil Science, 2006, 37(3): 456-459.

[16] 房俊卓, 张霞, 徐崇福. 实验条件对 X 射线衍射物相定量分析结果的影响[J]. 岩矿测试, 2008, 27(1): 60-62.
Fang Junzhuo, Zhang Xia, Xu Chongfu. Effect of experimental conditions on X-ray diffractometric quantitative phase analysis[J]. Rock and Mineral Analysis, 2008, 27(1): 60-62.

[17] 周晓静, 池野, 李安春, 等. 两种方法计算黏土矿物相对含量结果的比较[J]. 海洋地质与第四纪地质, 2009, 29(6): 149-156.
Zhou Xiaojing, Chi Ye, Li Anchun, et al. Comparison between two methods used for calculating relative clay mineral contents[J]. Marine Geology & Quaternary Geology, 2009, 29(6): 149-156.

Difference between peak-height and peak-area methods in extracting relative contents of core clay minerals

ZHANG Zhao-peng[1], CHU Zhong-xin[1,2], LI Ying-kun[1]
(1. College of Marine Geoscience, Ocean University of China, Qingdao 266100, China; 2. Key Laboratory of Submarine Geosciences and Prospecting Techniques of Ministry of Education, Qingdao 266100, China)

Received: May 8, 2016
Key words: clay minerals; relative contents; x-ray diffraction; peak-height method; peak-area method

Abstract: Relative contents of clay minerals are currently extracted based mainly on the peak-height or peak-area of XRD (X-ray Diffraction) peaks. To analyze the differences between the use of these two measurements, XRD is conducted on YSZDO2 core obtained from the Yellow Sea. Relative contents of four main kinds of clay minerals (smectite, illite, kaolinite, and chlorite) are extracted using the peak-height and peak-area methods, respectively, and differences between the data obtained from each is explored to determine the relative composition of clay minerals with depth. Results show both methods are able to extract and indicate the relative composition of clay minerals. Clay minerals of the YSZDO2 core mainly include illite, kaolinite, chlorite, and smectite (from highest to lowest content). The correlation coefficient of these four clay minerals using both methods shows a positive correlation; in descending order: kaolinite (0.94), chlorite (0.93), smectite (0.82), and illite (0.73). However, the variance in clay mineral data from the core with depth extracted by the peak-area method is greater than that of the peak-height method. The defined relative difference between the two methods indicates that the depth of the relative content of clay minerals can be ranked from lowest to highest as illite, kaolinite, chlorite, and smectite. The above results show that although both methods have common characteristics visible differences are evident. It is considered that with the application of new technology, the peak-area method will be more extensively used compared to the peak-height method, which has error problems that are difficult to solve. In addition, future developments in more precise computer analysis software and greater unity of research methods are inevitable in the future. This paper enables and increased understanding of the peak-height and peak-area methods and acts as a reference for the comparison and selection of other methods.

(本文编辑：刘珊珊)