

# DB37

## 山东省地方标准

DB37/ XXXXX—XXXX

### 钻石鉴定

Diamond-testing

(征求意见稿)

(本稿完成日期：2020-\*\*-\*\*)

2099-XX-XX 发布

XXXX-XX-XX

山东省市场监督管理局 发布

目 次

前言 ..... II

1 范围 ..... 1

2 规范性引用文件 ..... 1

3 术语和定义 ..... 1

4 钻石的基本性质 ..... 3

5 钻石的鉴定方法及要求 ..... 4

6 钻石的鉴定流程 ..... 6

7 钻石的分类 ..... 9

8 钻石标识 ..... 10

附录 A（资料性附录） 钻石常见晶格缺陷心及其谱学特征与成因解析 ..... 12

附录 B（资料性附录） 不透明钻石的鉴定流程 ..... 20

参考文献 ..... 20

## 前 言

本文件按照 GB/T 1.1—2020 给出的规则起草。

本文件由山东省黄金珠宝标准化技术委员会提出。

本文件由山东省黄金珠宝标准化技术委员会归口。

本文件起草单位：……。

本文件主要起草人：……。

本文件为首次制定。

# 钻石鉴定

## 1 范围

本文件规定了钻石鉴定的术语和定义、钻石的基本性质、钻石的鉴定方法及要求、钻石的鉴定流程、钻石的分类以及钻石标识。  
本文件适用于各种成因钻石的鉴定。

## 2 规范性引用文件

下列文件对于本文件的应用是必不可少的。凡是注日期的引用文件，仅所注日期的版本适用于本文件。凡是不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 6406 超硬磨料 粒度检验  
GB/T 16552 珠宝玉石 名称  
GB/T 16553 珠宝玉石 鉴定  
GB/T 16554 钻石分级  
GB/T 23536 超硬磨料 人造金刚石品种  
GB/T 34543 黄色钻石分级  
QB/T 4113 彩色钻石颜色分级  
.....

## 3 术语和定义

下列术语和定义适用于本文件。

### 3.1

**钻石 diamond** (标题：黑体，五号)  
以碳元素为主要组份的等轴(立方)晶系材料，包括单晶、双晶或多晶集合体。又被称为“金刚石”。

### 3.2

**天然钻石 natural diamond**  
在自然环境中形成主要由碳元素组成的等轴晶系材料，包括单晶、双晶或多晶集合体。又被称为“天然金刚石”。

### 3.3

**人工钻石 manmade diamond, synthetic diamond or lab grown diamond**  
完全或部分在人工构建的环境和装置下形成的主要由碳元素组成的等轴晶系材料，包括单晶、双晶或多晶集合体。又被称为“人工金刚石”、“培育钻石”、“合成钻石”、“实验室生长钻石(lab grown diamond)”。

注：本文件中“实验室”指用于生长钻石的环境和设施、设备等装置系统。与从事钻石测试、验证、鉴别、分类、分级的宝石学实验室概念不同。

## 3.4

## 改性钻石 modified diamond

晶体形成或经开采后，借助人工工艺(切磨抛光除外)改变其任何属性得到的钻石。包括涂色钻石、覆膜钻石、激光去杂钻石、充填钻石、高温高压处理钻石(1800–2500℃, 超过5 GPa)、高温低压处理钻石(1400–2200℃, 低于 $4 \times 10^{-5}$  GPa)、辐照处理钻石、退火钻石、多工序处理钻石等。改性钻石不改变绝大多数晶格质点排列形式，因此不改变钻石的成因属性。

## 3.5

## 原生钻石 diamond as originally or aboriginal diamond

未经改性的钻石，也包括仅经过切磨抛光的钻石；含天然成因和人工成因钻石。

## 3.6

## 组合钻石 assembly diamond(s)

通过人工手段，将小粒钻石进行拼接、结合(有时需借助粘接材料)或由部分钻石粘接其他材料形成的具整体外观的产品。

注：通过结晶学结构生长在一起的不同单晶个体组成的整体，不属于组合钻石。

## 3.7

## 钻石制品 production containing diamond.

组份中含有钻石的物质或物体。如钻石裸石、金刚石钻头、金刚石砂轮、钻石研磨液、钻石首饰等。

## 3.8

## 仿钻石 imitation of diamond

某方面属性与钻石相似的各种非钻石材料。

## 3.9

## 物相分析 material phase identification

对各种测量、测试方法给出的结果予以分析，确定存在某种具有特定物理、化学性质的材料的过程。

## 3.10

## 金刚石禁带宽度5.47eV Band gap of diamond: 5.47eV

不含氮、硼等元素的钻石电子导带的最高能级和价带的最低能级之间的能，又称为带隙、禁带。

注：根据能带理论，钻石禁带阈为5.47eV。光子能量(eV)与对应的光波波长(nm)转换关系，可根据光子质能方程获得：

$$E(\text{eV}) = mC^2(\text{J}) = h\nu$$

$$= \frac{6.62607015 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}}{1.602176634 \times 10^{-19} \text{J/eV}} \times \frac{2.99792458 \times 10^{17} \text{nm/s}}{\lambda(\text{nm})}$$

$$\approx \frac{1239.842}{\lambda \text{ (nm)}} (\text{eV})$$

即 5.47eV 的光子对应光波的波长约为 226.7nm，这是钻石的固有属性。对钻石颜色无影响，对长波紫外灯无响应，对短波紫外光源钻石发光观测仪无响应(或响应无法识别)。可借助紫外可见近红外光谱(UV-Vis-NIR)识别。

E是能量，m是质量，单位是千克(Kg)，C是真空中光速(m/s)，h为普朗克常数，v为某波长光量子的频率，即速度与波长的比值。2019年5月20日起正式生效的国际单位制单位(据BIPM)1千克被定义为“对应普朗克常数为 $6.62607015 \times 10^{-34} \text{J}\cdot\text{s}$ ( $6.62607015 \times 10^{-34} \text{kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$ )时的质量；光速取自米的定义：“光在真空中行进1/299 792 458秒的距离”；普朗克常数h单位J·s中的J换算成eV时，取1安培定义“1s内 $(1/1.602176634) \times 10^{-19}$ 个电荷移动所产生的电流强度”，即电子带负电，基本电荷e的量取固定数值 $1.602\ 176\ 634 \times 10^{-19}$ ，以库仑(C)为单位，即等于“安培·秒(A·s)”，这是电量的最小单元。

### 3.11

#### 钻石分级 diamond grading

从颜色(color)、净度(clarity)、切工(cut)及质量(carat)四个方面对钻石进行等级划分，简称4C分级。

[GB/T 16554-3.2]

## 4 钻石的基本性质

- 4.1 化学成分：碳。可含有N、B、H、Fe、Ni、Si、O等微量元素，自然产出的钻石可含有多种矿物包体甚至水。
- 4.2 结晶状态：晶质体；等轴晶系；常见八面体、立方体、菱形十二面体单形晶体或聚形晶体，偶见菱形十二面体、四角三八面体等单形晶面发育，化学气相沉淀法生长钻石（简称CVD钻石）常呈板状；晶面常有生长纹或蚀象，如螺旋生长纹、树枝状、阶梯状生长纹，三角或倒三角蚀相等；呈单晶、双晶、多晶或微晶集合体产出。
- 4.3 颜色：包括无色、白色~黑色在内的各种颜色。
- 4.4 光泽：金刚光泽。
- 4.5 解理：{111}解理中等，{110}不完全解理，阶梯状断口。
- 4.6 摩氏硬度：10。
- 4.7 密度：3.51515~3.51516克/厘米<sup>3</sup>(理想值)；实测值常低于理想值，介于3.50~3.52之间；多晶集合体及微晶集合体可低至3.14克/厘米<sup>3</sup>。
- 4.8 光性特征：均质体，可有异常消光。
- 4.9 多色性：无。
- 4.10 折射率：2.417(对应波长为589.3nm的钠光)。
- 4.11 双折射率：无。
- 4.12 紫外荧光：无至强，蓝色、黄色、橙色、粉色、绿色；可有磷光。其中在长波紫外灯下：HPHT生长钻石常呈惰性，CVD钻石可呈弱桔黄色、绿色、绿蓝色或惰性；在短波紫外灯下：HPHT生长钻石可呈无至中的淡蓝白色、淡黄色、橙黄色、绿黄色或惰性，荧光常不均匀，不同生长区特征不同，部分有磷光；CVD合成钻石可呈弱桔黄色、绿色、绿蓝色或惰性，有时呈现与生长有关的条纹；天然钻石可呈无至强荧光，荧光多为蓝色，也可称黄色、橙黄、粉等色，短波紫外荧光常较长波下弱。
- 4.13 放大检查特征：可具有生长过程留下的包裹体；色带、生长纹、双晶纹、负晶等结构性特征；可具因应力产生的纹理、破裂、凹陷等现象；可具因生长后环境作用产生的机械侵蚀、化学腐蚀残留的形

貌特征以及高能射线诱发的特征；抛光后的刻面钻石常具有锐利平直的棱线；经人工加工或改性的钻石在内部、表面可残留相关痕迹，如裂隙填充物、激光孔、激光切割加工痕、涂层等。

4.14 手持分光镜可见光吸收光谱：具较高浓度N3心的钻石可呈现Cape系列吸收线(参见附录A)。其他类型的钻石常不特征。

4.15 色散值：0.044(钻石对430.8nm紫光和686.7nm红光的折射率2.451和2.407的差值)

4.16 热导性：热导率高，可达2300 W/(m·K)

4.17 导电性：硼杂质浓度相对高的钻石可作为半导体材料，其他类型的钻石常为绝缘体。

4.18 其他：少数钻石具有变色效应，少数钻石具有热致变色效应(变色龙效应)，有的钻石具有肉眼可识别的光致发光性，有的钻石具有肉眼可识别的电致发光性。

## 5 鉴定方法及要求

### 5.1 简易鉴定法：

5.1.1 常规鉴定方法及热导性、热反应、化学反应、摩氏硬度等鉴定方法和上述方法的要求：参照 GB/T 16553。

注：常规鉴定方法对粉末磨料切削级钻石、集合体钻石以及透明度低的钻石鉴定受限。钻石成因的鉴定常常需要借助先进鉴定法。

5.1.2 质量的称量参照 GB/T 16554，钻石质量单位为克。当钻石质量超过 20.0000g 时，可使用分度值不大于 0.001g 的天平称量。非钻石单体构成的钻石制品质量称量遵从产品领域相关要求，如：贵金属钻石首饰称量天平分度值常不大于 0.001g，而金刚石研磨液称量天平分度值常不大于 1g。

5.1.3 贸易中可用克拉重量表示，例 0.2000g 的钻石表示为 1.00ct。

5.1.4 尺寸的测量可使用各种微尺、卡尺，直接对各径向进行测量，也可借助可溯源至几何量的三维扫描设备对钻石最大尺寸进行测量。珠宝首饰用抛光钻石测量应精确至 0.01mm；未经切磨的钻石尺寸测量精度应优于 0.5mm。

### 5.2 先进鉴定法

#### 5.2.1 紫外可见近红外吸收光谱

5.2.1.1 用途：用于采集 200nm~1000nm 范围的吸收光谱，从而识别钻石在该波段可能具有的吸收(及发光)特征。

5.2.1.2 所用仪器：紫外-可见-近红外光谱仪(分光光度计)，常需配置积分球装置或聚焦透射装置。

5.2.1.3 测试条件：常温或 $-196^{\circ}\text{C}$ (液氮， $\sim 77\text{K}$ )低温，扫描探测器(测试时间长、可有较高分辨率但扫描范围常限于 250~800nm)和色散探测器(高效但分辨率常 $\geq 1\text{nm}$ )均可，不规则样品应借助积分球。应考虑大样品吸收太强会引发探测器不能识别部分或全部光谱。

5.2.1.4 测试结果：可识别到金刚石禁带域 5.47eV 对应的吸收，以及 ND1、N3、N2、H3、H4、594nm、GR1、H2 中的一个或多个特征峰(参见附录 A)。

#### 5.2.2 中-近红外光谱

5.2.2.1 用途：用于采集  $400\text{--}11,000\text{cm}^{-1}$ (至少应满足  $400\text{--}6000\text{ cm}^{-1}$ )范围内的吸收光谱，从而识别钻石在该波数范围可能具有的吸收特征。

5.2.2.2 所用仪器：傅立叶变换红外光谱仪，常需配置反射附件或聚焦透射装置。

5.2.2.3 测试条件：常温，空气湿度低于 60%RH，分辨率 $\leq 8\text{ cm}^{-1}$ 。应选择适当的附件以确保经过

钻石的光可进入到仪器检测器。应考虑大样品吸收太强会引发探测器不能识别部分或全部光谱。

5.2.2.4 测试结果：或可识别 IIa 型、IIb 型特征谱图以及 A 心、B 心、C 心、各种与氢相关的缺陷、H1a、H1b、H1c 以及“琥珀心”等(参见附录 A)。

### 5.2.3 发光图像

5.2.3.1 用途：将钻石暴露于高能射线(粒子)氛围中，借助影像放大器观察钻石中不同区域发光颜色和强度情况，通过拍摄时间控制，可判断钻石是否具有磷光。

5.2.3.2 所用仪器：短波紫外光源钻石发光观测仪、阴极发光影像观测仪。

5.2.3.3 测试条件：常以短波紫外光或电子束作为激发源，样品仓须封闭；电子束作为激发源时样品仓须配真空系统。

5.2.3.4 测试结果：影像。

### 5.2.4 光致发光光谱(PL 谱)

5.2.4.1 用途：用于识别钻石经激光激发时释放的光波波长，从而分析钻石晶体缺陷的类型。

5.2.4.2 所用仪器：光致发光光谱仪，常需辅以低温载体容器。

5.2.4.3 测试条件： $\sim -196^{\circ}\text{C}$ (液氮， $\sim 77\text{K}$ )或 $\sim -268.785^{\circ}\text{C}$ (液氮， $\sim 4.2\text{K}$ )；分辨率应优于  $0.5\text{nm}$ 。简易型 PL 光谱谱仪对样品的致冷程度受限，波长分辨率应优于  $5\text{nm}$ 。

5.2.4.4 测试结果：激发光波长能量足够高时可部分识别 N3、 $490.7\text{nm}$ 、H4、H3、3H、 $\text{NV}^0$ 、 $\text{NV}^-$ 、GR1、H2 等缺陷以及与氢、与硅、与镍相关的缺陷(参见附录 A)；简易型 PL 光谱仪辨析力受限。

### 5.2.5 成分分析

5.2.5.1 用途：通过电子发光峰、原子发光峰或原子吸收峰甚至离子价态或原子质量的辨析，识别钻石内或含钻石材料的元素的种类。

5.2.5.2 所用仪器：X 射线荧光光谱仪(XRF)、电子探针(EPMA)/电子显微镜(EM, SEM/TEM)、激光诱导击穿光谱仪(LIBS)、激光烧蚀电感耦合等离子质谱仪(LA-ICP-MS)、原子吸收光谱仪(AAS)、二次离子质谱仪(SIMS/IPA)、高分辨离子探针(SHRIMP)等

5.2.5.3 测试条件：根据所选测试对象、测试目标元素的不同，设定所选方法的测试条件。

5.2.5.4 测试结果：呈现仪器检测能力范围内(仪器具有识别被测元素的能力，且该元素浓度高于仪器检测限)的元素定性。

### 5.2.6 X 射线衍射

5.2.6.1 用途：物相分析、测定晶胞参数以及混合物中各物相的比例；钻石晶体内应力测定，晶粒尺寸和点阵畸变的测定，单晶取向和多晶结构测定。

5.2.6.2 所用仪器：粉晶 X 射线衍射仪、单晶 X 射线衍射仪

5.2.6.3 测试条件：粉末样品尽量选择 300 目粒度(约 40 微米)或更小尺寸的样品，需 3g 左右的样品，或 5mg 以上；单晶样品可直接测试。

5.2.6.4 测试结果：衍射图谱、劳埃衍射斑花样。其中主要粉晶谱线有： $2.05(100)$ ， $1.26(80)$ ， $0.721(90)$ ， $0.358(90)$ 。

### 5.2.7 拉曼光谱

5.2.7.1 用途：用于识别  $400\sim 2000\text{cm}^{-1}$  范围(甚至可扩展至  $100\sim 4000\text{cm}^{-1}$  范围)内的拉曼位移，从而识别钻石及其相似物的特征拉曼位移峰。

5.2.7.2 所用仪器：拉曼光谱仪。

5.2.7.3 测试条件：常温，分辨率 $\leq 2\text{cm}^{-1}$ 。强荧光样品应选择低能量(大波长)激发源。

5.2.7.4 测试结果：钻石一阶拉曼峰位于  $1332\text{cm}^{-1}$  处，峰半高宽常低于  $5\text{cm}^{-1}$ 。结晶不佳的类金刚石材料，该峰半高宽常可高达  $10\text{cm}^{-1}$  以上；须注意内应力常造成拉曼峰偏移。谱图以波长呈现时拉曼位移指认公式：



$$\text{拉曼位移 (nm)} = \frac{1}{\frac{1}{\text{激发光波长(nm)}} - \frac{\text{本征拉曼位移(cm}^{-1}\text{)}}{10^7(\text{nm} \cdot \text{cm}^{-1})}}$$

5.2.8 其他钻石排查方法

5.2.8.1 用途：利用钻石某一些属性快速排查钻石仿制品或区分天然与合成钻石。

5.2.8.2 所用仪器：如紫外可见光部分波段透过性(吸收性)钻石确认仪、钻石磷光筛查仪、钻石顺磁响应仪。

5.2.8.3 测试条件：常因原理不同及设计适用性不同而有差异。如有的仪器仅限于 1~7mm 粒径的钻石及其仿制品。

5.2.8.4 测试结果：按某种现象、谱图等手段，将被测批量样品分为某些类型的钻石和剩余样品、或者某些成因的钻石和剩余样品。需注意，剩余样品可能是包含天然钻石、人工钻石、仿制品中的一种或多种类型。

5.3 测试项目

主要包括：

- a) 外观描述(颜色、透明度、形状、光泽、解理等)；
- b) 质量或总质量；
- c) 放大检查/偏光显微镜观测；
- d) 密度；
- e) 光性特征；
- f) 多色性；
- g) 折射率/反射率；
- h) 双折射率；
- i) 荧光观察；
- j) 摩氏硬度；
- k) 可见光分光镜观测；
- l) 红外光谱；
- m) 紫外可见近红外光谱；
- n) 发光影像观测；
- o) 发光光谱；
- p) 成分分析；
- q) X 射线衍射；
- r) 拉曼光谱；
- s) 其他性质测试。

5.4 方法选择原则

5.4.1 为获得符合预期的检验结论(如是否为钻石、钻石成因、有无改性等)，宜进行多项目测试。

5.4.2 本文件 5.3 中所列的各个测试项目并非必须测试，但无法获得足够的鉴定证据时，须增加(不限于本文件 5.3 中所列的)测试项目。

5.4.3 因样品条件不符，无法检测时，或所测项目足以满足鉴定的目的时，某些测试项目可不测。但其他测试项目所测结果的综合证据，应足以证明所得检验结论的可靠性。

6 鉴定流程

6.1 物相鉴定流程

6.1.1 微粒的鉴定流程:

6.1.1.1 显微镜观测:

6.1.1.1.1 工具: 常需要配有上下偏光片的 20 倍~1000 倍多档变倍光学显微镜。

6.1.1.1.2 结果: 在透射光下一般为无色, 或白、黄、橙、红、绿、蓝、褐、黑等色。多为均质体, 少数呈弱异常消光, 干涉色低, 极少数显假一轴晶。折射率  $N=2.4-2.48$ 。色散强。规则晶体呈八面体、立方体、菱形十二面体及其聚形。具一组中等解理, 一组不完全解理, 端口呈阶梯状或贝壳状。对鉴定为钻石或仿钻石的, 可借助 6.1.1.2 或 6.1.1.3 测试进一步验证。

6.1.1.2 X 射线衍射分析

6.1.1.2.1 设备: X 射线衍射仪(XRD)。

6.1.1.2.2 结果: 主要粉晶谱线: 2.05(100), 1.26(80), 0.721(90), 0.358(90)。晶胞参数 35.595nm。

6.1.1.3 拉曼光谱分析

6.1.1.3.1 设备: 拉曼光谱仪(Raman)。

6.1.1.3.2 结果: 尖锐的  $1332\text{ cm}^{-1}$  拉曼位移峰。

6.1.2 大颗粒钻石的鉴定流程:

大颗粒钻石的鉴定主要通过肉眼观察、放大观测(借助 10 倍手持放大镜或 6~70 倍连续变倍宝石显微镜)、摩氏硬度测试(必要时)、偏光镜观测(适用于透明样品)、密度测量(必要时), 根据样品表面形貌、解理发育、高硬度的特殊表现以及光性均质体等特征确定为钻石、组合钻石或仿钻石。对仿钻石可按 GB/T 16553 标准进一步验证。

6.2 珠宝首饰用钻石的成因鉴定流程

6.2.1 透明~微透明系列钻石的成因鉴定流程

6.2.1.1 透明~微透明系列钻石的成因鉴定宜参照表 1 步骤进行, 或测试方法包括但不限于表 1 方法在內的测试技术进行测试。

6.2.1.2 注意事项

a)确定为天然成因的钻石, 须进一步检测以判断经人工改性的可能。

b)近无色的钻石常见的人工改性方法有覆膜、激光钻孔、充填、高温高压处理等。

c)覆膜、激光钻孔、充填等改性特征主要借助放大检查识别, 覆膜、充填等有外来物质参与的改性方法, 可借助拉曼光谱或成分分析提供的证据加以验证。

d) 高温高压处理常针对 Ia 型或 IIa 型钻石, 也可针对氮元素或硼元素赋存状态及浓度接近红外光谱检测限的钻石, 即 C 心浓度较低的 Ib 型天然钻石或 B<sup>0</sup> 浓度较低的 IIb 型天然钻石。

e)常温 UV-Vis-NIR 谱图中 270nm 吸收带及 H2 缺陷吸收带(986nm)指示(非确定)钻石经高温高压法改性的可能性。

f)低温 PL 谱中由 NV<sup>0</sup>、NV<sup>-</sup>引发的分别位于 575、637nm 峰的相对关系, 指示(非确定)钻石经高温高压法改性的可能性。

g)应考虑钻石经多工序改性的可能性。

表 1. 透明~微透明钻石检测流程

测试 步骤	具有指示意义(绝大多数并非结论性)的细节					主要结果	得出的结论▲
	天然成因	人工成因	辐照	辐照 退火	高温 高压		
1、常 规方 法	/	/	关注 颜色 分布 特征	/	/	仿钻石、钻 石、组合钻 石, 涂色、覆 膜、激光钻 孔、充填等改	① 仿钻石按 GB/T 16553 标准进一步鉴 定; ② 组合钻石属于人工宝石 ③其他情形均需进一步检测

						性钻石	
2、常温 UV-Vis-NIR	C 心(270)、N3 心(415)、N2 心(478)、480 带、550 宽带	C 心(270)、Si-V 心(737)	ND1 缺陷(394)、3H 缺陷(503)、GR1 心(741)	H4 缺陷(496)、H3 缺陷(503)、594nm 宽带	C 心(270)、H3 缺陷(503)、H2(986)	226.7nm 吸收峰(可能被湮没)及相关缺陷吸收。	①呈现 737nm 吸收(Si-V 心)的钻石为人工成因；②其他情形均需进一步检测
3*、发光影像观测	/	/	/	/	/	典型的天然/或人工成因晶体发光影像；或发光影像不典型	②具人工增生层的钻石为人工成因； ②无人工增生层，无色近无色 Ia 型钻石未呈现指示辐照(及退火)或 HPHT 特征的钻石，结合常规方法结果定为天然钻石或经改性(步骤 1 所类别列的改性)的天然钻石。 ③其他情形均需进一步检测。
4、近红外-中红外(6000~400)光谱分析	C 心(1131)、A 心(1282)、B 心(1175)、氢杂质缺陷中的独立 3107 或以 3107 为典型的系列峰、硼杂质缺陷(2803/1290)、片状缺陷(1360)、空位群簇、琥珀心	C 心、氢杂质缺陷中的 3124 系或独立的 3107 峰、硼杂质缺陷、片状缺陷、空位群簇	/	H1c 心(5171)、H1b 心(4941)、H1a 心(1450)	C 心、氢杂质缺陷中的 3107 系	Ila、Ilb、Ib、IaA、IaB 及混合型	①具明确的、强于 3107 的 3124 吸收，为人工成因钻石。 ②具 IaB 型特征钻石未表现出与辐照(及退火)和/或 HPHT 有关的(IR 及 UV-Vis-NIR)吸收，为天然钻石，与步骤 1 是否存在改性的结果结合，综合定名； ③IaA 型、Ib 型、II 型钻石未表现出与辐照、高温高压有关的吸收，发光影像为典型天然特征，结合步骤 1 结果进行定名； ④具有天然成因特征的钻石(如红外谱特征为 Ib 型或 II 型钻石、或带有 Ia 型特征，且发光影像为典型天然成因的钻石)若具有辐照(及退火)和/或 HPHT 有关的(IR 及 UV-Vis-NIR)吸收，则为天然成因经改性，结合步骤 1 结论进行定名； ⑤剩余样品特征：II 型或 Ib 型或 IaA+Ib 型，均不具有典型的天然成因钻石发光影像特征，不具有 CVD 生长(包括表面增生)钻石发光影像特征，无论是否具有各种改性特征；这些样品均应进行进一步检测。
5 低温 PL(350~1000nm)或	N3 心、N2 心、480 带、550 宽带、NV 缺陷、I <sup>0</sup> 缺陷峰(666)、Si-V 心、Ni 杂质缺陷(883)	C 心、N3 心、N2 心、NV 缺陷、Si-V 心、I <sup>0</sup> 缺陷峰、Si-V 心、Ni 杂质缺陷	ND1 缺陷、3H 缺陷、GR1 心、I <sup>0</sup> 缺陷峰	H4 缺陷、H3 缺陷、594nm 宽带、I <sup>0</sup> 缺陷峰	H3 缺陷、NV 缺陷、H2	钻石拉曼位移峰及相关缺陷发光峰。	建议：绝大多数情况下 Ni 有关缺陷及 Si-V 心是钻石人工成因的证据，除非测及确切的天然成因证据，如含天然成因包裹体；NV 缺陷相关峰的相对强度及半高宽对钻石是否经历过 HPHT 过程有指示作用。对有效地识别优化处理来说是重要手段
5*低温高分辨 UV-Vis-NIR(250~800)测试	N3 心、N2 心、480 带、550 宽带、NV 缺陷、I <sup>0</sup> 缺陷峰、Si-V 心、Ni 杂质缺陷	C 心、N3 心、N2 心、NV 缺陷、Si-V 心、I <sup>0</sup> 缺陷峰、Si-V 心、Ni 杂质缺陷	ND1 缺陷、3H 缺陷、GR1 心、I <sup>0</sup> 缺陷峰	H4 缺陷、H3 缺陷、594nm 宽带、I <sup>0</sup> 缺陷峰	H3 缺陷、NV 缺陷、H2	相关缺陷吸收。	建议：绝大多数情况下 Ni 有关缺陷及 Si-V 心是钻石人工成因的证据，除非测及确切的天然成因证据，如含天然成因包裹体(如橄榄石、石榴石等)；
<p>▲每一步得出的结论是针对前面各个步骤特别是最近一个步骤中需要进一步测试的样品而做出的；鉴定结果有足够参数支持时，可减少不必要的测试步骤。</p> <p>*发光影像观测也可置于红外光谱分析之后进行，应注意原位吸收光谱对在天然和/或人工成因钻石基体上增生人工钻石识别力受限。</p> <p>*基于功能的相似性 PL 和低温 UV-Vis-NIR 可选其一。</p> <p>透明度较低的钻石，吸收光谱测试受限，可结合表 B.1 综合测试。</p>							

## 6.2.2 不透明系列钻石的成因鉴定流程

6.2.2.1 不透明钻石成因的鉴定，宜参照附录 B 步骤进行，或测试方法包括但不限于表 B.1 方法在内的测试技术进行测试。

### 6.2.2.2 注意事项

a)确定为天然成因的不透明系列钻石，须进一步检测以判断经人工改性的可能。

- b) 不透明或黑色钻石常见的人工改性方法有辐照(常附热处理)、高温高压处理等。
- c) 低温 PL 谱中由 NV<sup>0</sup>、NV<sup>-</sup>引发的分别位于 575、637nm 峰的相对关系，指示(非确定)钻石经高温高压法改性的可能性。
- d) 低温 PL 谱图中的 503nm、594nm、741nm 以及 FTIR(适用时)中与 H1c、H1b、H1a 有关的吸收峰(这些吸收特征不一定同时呈现)指示钻石经过辐照(可附加退火)改性的可能性。
- e) 应考虑钻石经多(或不确定)工序改性的可能性。

6.3 其他领域用钻石的分类鉴定流程

需要时，其他领域用钻石的分类鉴定参照本文件 6.2 的规定进行。

7 钻石的分类

7.1 钻石种类的划分

根据钻石鉴定目的的不同，依据7.2~7.5中某项或多项分别对钻石进行种类划分，并按照7.2~7.5对应项中语言予以描述。其中珠宝首饰领域用钻石的种类划分宜按本文件6.2条中流程进一步鉴定。

7.2 按成因分类

钻石可分为：天然钻石和人工钻石，其中天然钻石又可分为幔源钻石和不明成因钻石(卡波内斗，Carbonado)。

注：“不明成因”指在自然环境下其形成过程、机理及物质来源尚未明确。

7.3 按氮、硼相对浓度分类

根据紫外可见吸收光谱(UV-Vis-NIR)、红外光谱(FTIR)，按是否可识别钻石中的氮(N)元素、硼(B)元素杂质对钻石进行分类。钻石是否可识别到N杂质可分为I型和II型两大类，进一步细分见表2。

表2 钻石类型划分表

类型	分类依据	细分类型	杂质情况	再细分 <sup>①</sup>	FTIR特征(中红外) <sup>②</sup>	UV-Vis-NIR特征(>200nm)	其他
II 型	对能量低于禁带阈的中紫外线透明	IIa	氮、硼浓度均低于吸收光谱检测限	/	呈现钻石本征谱图，不呈现与氮元素、硼元素相关的吸收	呈现钻石禁带阈吸收，不呈现与氮元素、硼元素相关的吸收	/
		IIb	硼原子以孤立单原子的形式取代晶格中的碳	/	以2803cm <sup>-1</sup> 、2458cm <sup>-1</sup> 和/或1292 cm <sup>-1</sup> (以及2930、4090、5000、和5365 cm <sup>-1</sup> )处呈现的与硼有关的吸收为特征	除钻石禁带阈吸收外，自红光区至紫外吸收逐步降低，甚至紫外区有荧光带。	/
I 型	对能量低于禁	Ib	N原子以孤立单原子的形式	/	以1344 cm <sup>-1</sup> 和/或1130 cm <sup>-1</sup> 处呈现的与C心有关的吸	以270nm为中心的宽大吸收带可在紫外至蓝光区有普遍	FTIR谱还可具1100、1050 cm <sup>-1</sup> 吸收

	带阈的中紫外线不透明		取代晶格中的碳		收为特征	强吸收甚至全吸收	
		Ia	N杂质以聚集体形式存在于钻石晶格中	IaA	以1282 cm <sup>-1</sup> 处呈现的与A心有关的吸收为特征	435、452、465、478 nm系列峰 <sup>③</sup>	FTIR谱还可具1212、1100、480 cm <sup>-1</sup>
				IaAB	A心和/或B心有关的吸收峰同时可见 <sup>④</sup>	415nm吸收	
				IaB	以1175 cm <sup>-1</sup> 处(B <sub>1</sub> 心)和/或1375~1365 cm <sup>-1</sup> (B <sub>2</sub> 心)处呈现的与B心有关的吸收为特征	230~300nm强吸收	1430、1331(N <sup>+</sup> )、1180、 1100、1096、1010; 330 cm <sup>-1</sup>

注：①微区分析可识别到不均匀钻石常为混合型；

②A、B、C 心参见附录 A；

③没有纯 IaA 型钻石，因此该系列特征峰会嵌在与 N 有关的宽大吸收带中，或被全吸收湮埋；

④没有所有 N 元素全部以 N3 形式存在的钻石，因此 415nm 吸收呈现时总会有与 A 心和/或 B 心有关的吸收出现。

7.4 按可加工性分类

针对未经加工的钻石，常分为可切磨钻石(cuttable diamond)和工业钻石(industrial diamond)。其中可切磨钻石常指可以切磨加工成琢型钻石、用于首饰的钻石坯体。其它的坯体钻石常归为工业钻石。可切磨钻石还常将其分为若干组，其中大者按质重划分，小者按筛网大小划分。即分为超大钻(large stone)，>10.8克拉；大钻(large diamond)，10.8~2克拉；格令钻(grainers)，2~3/4克拉；小钻(small)，0.75~0.15克拉；混合小钻(mixed small)，每克拉8~40粒。

超硬磨料用工业钻石的粒度一般不大于GB/T 6406中16/18粒度标记尺寸，按GB/T 23536标准进行细分用途。

其他工业钻石粒度范围较大，部分工业钻石属于高品质可切磨钻石。

7.5 按粒度分类

微粒：粒度不大于GB/T 6406中16/18粒度标记尺寸(最少99.9%的钻石可通过1830μm尺寸的筛孔)。

大颗粒：尺寸不小于0.6mm的钻石。其中较小尺寸的大颗粒钻石，常指可切磨钻石。

7.6 钻石分级

7.8.1 基本原则：所有珠宝首饰用钻石的分级均应参照GB/T 16554、GB/T 34543、QB/T 4113给出的方法进行。

7.8.2 特例情形：因GB/T 16554、GB/T 34543、QB/T 4113标准规定的适用情形限制，需要对上述标准不适用钻石进行分级时，可参照GB/T 16554、GB/T 34543、QB/T 4113标准规定的方法进行分级，并应附注说明该项目级别参照的标准编号或详细标明标准名称及条款号。

8 钻石标识

- 8.1 单独的“钻石”二字代表等轴晶系碳晶体，无成因含义或未表达成因。常用于生产资料领域或其他领域。
- 8.2 根据特定领域的需求，产品名称应包括必要的成因、类型等信息，这类信息的描述语参考本文件第7章，信息披露以满足相关方必要的知情权为目的，出于专业领域的需要，产品名称可包括非中文字符。
- 8.3 基于本文件 8.2 款，某些领域(如生产资料领域)钻石产品名称可包含行业广泛认可的名称信息，如 CVD 钻石、MPCVD 钻石、IIb 钻石等。
- 8.4 基于本文件 8.2 款，以制作消费品(珠宝首饰)为目的的钻石，应按 GB/T 16552 标准的命名法标识，或在 GB/T 16552 标准规定的分类原则上，分别使用反映钻石成因的修饰语，如“天然钻石”、“培育钻石”、“人工钻石”等名称作为消费(产)品名称，对于较小颗粒的首饰用钻石(小于 0.04ct，或标准圆钻型切工直径不大于 2mm)或不透明钻石，可单独使用“钻石”二字，但应在相应质量文件中附注说明“未鉴定(或确定)钻石成因”，附注说明应与消费品名称具有相同的辨析度；宜尽量确定小颗粒钻石或不透明钻石的类别并予以明示。
- 8.5 以制作珠宝首饰为目的的、经人工改性的天然钻石，应在相应质量文件中表达该产品经过了人工改性，表达方式参照 GB/T16552 标准关于优化处理命名规则的规定，当天然钻石经历多种方法改性或不能确定具体改性方法时，可在相关质量文件中附注说明“该钻石经人工改性”，附注说明应与消费品名称具有相同的辨析度。
- 8.6 以制作珠宝首饰为目的且行业不能确定是否经过人工改性的天然钻石，应在相关质量文件中附注说明“可能经过 XX 改性”或“未能确定是否经过人工改性”，附注说明应与消费品名称具有相同的辨析度。
- 8.7 参照各分级标准分级得到的钻石级别，按照该标准规定的标识方法给出对应的级别，因为标准方法限制，确实不能进行分级的项目，可用语言描述，如颜色为紫红色。

## 附录 A

## (资料性附录)

## 钻石常见晶格缺陷心及其谱学特征与成因解析

## A. 1

## C心 C center

孤立的N原子取代钻石晶格中的碳原子所形成的晶格缺陷(Defect)，又叫C中心、孤氮、单原子替位氮。

红外吸收位于 $1130\text{ cm}^{-1}$ (0.140 eV, 8856.0nm)，可伴有 $1344\text{ cm}^{-1}$ (0.167eV, 7440.5nm)吸收；紫外可见光光谱可产生以270nm为中心的吸收宽带，该宽带吸收范围可延伸至450nm甚至500nm。

可赋存于原生钻石中，或对含有A心或B心(参见下文)的钻石进行高温高压处理引发。

可引发钻石呈鲜黄色，对长波紫外灯(~365nm)及短波紫外光源钻石发光观测仪下的钻石发光无影响。

可借助IR, UV, EPR等谱学方法识别与该缺陷有关的峰。

## A. 2

## A心 A center

两个相邻的N原子(N-N)取代钻石晶格中两个相邻的碳原子而不与其他的氮原子相邻所形成的晶格缺陷。又叫A中心、A类聚集体、A类聚集态氮。

具 $1282\text{ cm}^{-1}$ (0.159 eV, 7797.7nm)红外吸收带。

可赋存于原生钻石中，也可是较高浓度的C心经高温高压处理聚集而成。

可存在于无色近无色钻石中，导致钻石呈淡黄色。在长波紫外灯(~365nm)下具有淬灭钻石发光性的作用，在短波紫外光源钻石发光观测仪下也有淬灭发光性的作用。

可借助IR等谱学方法识别与该缺陷有关的峰。

## A. 3

## B心 B center

分别取代碳原子的4个N原子呈对称分布且围绕一个本应由一个碳原子占据但实际没有任何原子的空位(vacancy)构成的基本结构单元(4N+V)，可与其他的这种基本结构单元共用氮原子，从而形成由4~9个氮原子并围绕相应个数空位的氮聚集体形成的晶格缺陷，称为B<sub>1</sub>心；氮杂质以亚显微(借助电子显微镜可识别但在光学显微镜下不可见)、片状(约数个原子层厚度)偏析物包裹体形式存在造成的晶体缺陷，被称为B<sub>2</sub>心，又叫片晶氮；B<sub>1</sub>心和B<sub>2</sub>心统称为B心，又叫B中心、B类聚集体、B类聚集态氮。

B<sub>1</sub>心红外吸收位于 $1175\text{ cm}^{-1}$ (0.146 eV, 8492.1nm) 处的缺陷；B<sub>2</sub>心红外吸收位于 $1365\sim 1375\text{ cm}^{-1}$ (7326.0~7272.7nm)范围。

先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)形成。

对钻石颜色无贡献，对长波紫外灯(~365nm)及短波紫外光源钻石发光观测仪下的钻石发光无影响。

可借助IR等谱学方法识别与该类缺陷有关的峰。

## A. 4

**硼杂质缺陷 Boron related impurity defects**

硼在钻石晶格中常作为电荷受主元素，接受价带电子，即 $B^-$ 。富余的硼则以亚稳态电中性孤立替位原子形式存在，即 $B^0$ 。

$B^0$ 引起的缺陷首要吸收位于 $2803\text{cm}^{-1}$  (0.348 eV, 3563nm)及相关谱带，其中一个谱带一直延展到可见光区。第二主要吸收位于 $1290\text{ cm}^{-1}$  (0.160eV, 7752nm)。足够能量激发可引发钻石呈现以500nm和660nm为中心的磷光发光带。

可赋存于原生钻石中。

可导致钻石呈现淡蓝~灰蓝~深蓝。可导致长波紫外灯(~365nm)下的钻石具有绿蓝色荧光，短波紫外光源钻石发光观测仪下的钻石具有绿蓝色荧光。也可诱发红色磷光。

可借助IR光谱以及PL等发光光谱识别。

## A. 5

**ND1 One negatively charged vacancy ( $V^-$ ) defect**

被认为是由一个负价态电荷空位构成的结构缺陷。

紫外可见光谱表现在393.6 nm (3.150 eV)处有吸收(低温测试更易识别)。

由天然辐照或人工辐照作用引发[常伴有420~450nm间的吸收以及464.3(TR13心，与TR12心相关的近距离振动模式色心)、469.9(TR12心，一种固有辐照心)、594.2(见下文)、666.5(见下文)、735.8(见下文)、741.2 nm辐照诱发的吸收]。

对钻石颜色无贡献，对长波紫外灯(~365nm)及短波紫外光源钻石发光观测仪下的钻石发光无影响。

可借助UV-Vis-NIR(在液氮等低温下效果更佳)、PL等谱学方法识别与该缺陷有关的峰。

## A. 6

**N3心 N3 center**

分别取代了碳原子的3个氮原子围绕一个空位(3N+V)构成的杂质缺陷。

本质特征表现为紫外可见光谱中415.3 nm (2.985 eV)吸收及相关的一些谱带。在“开普(Cape)”系列钻石的谱图中常与N2心(477.2 nm)及几个其他相关谱带(465, 452, 435, and 423 nm)同时出现。

这些缺陷一般都是先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)形成的，氮浓度较高的人工生长晶体经后期改性可产生较低浓度的N3心。

可引发钻石带黄色调，可导致长波紫外灯(~365nm)及短波紫外光源钻石发光观测仪下的钻石具有蓝色荧光。

可借助UV-Vis-NIR、PL、EPR等谱学方法识别与该缺陷有关的峰。

有的人工钻石在低温高辨析PL谱下可识别到与N3心有关的发光峰。

## A. 7

**N2心 N2 center**

与N3心相关的氮杂质缺陷。

表现为紫外可见光谱中的477.2nm(478nm)吸收带，“开普”钻石系列吸收之一，呈现N2吸收的钻石总会有N3心吸收。

可赋存于原生钻石中。

对钻石呈黄色调有贡献。

可借助UV-Vis-NIR、PL等谱学方法识别与该缺陷有关的峰。



## A. 8

**480nm带 480nm band**

一个不确定结构(有时归因于氧原子替位)光学缺陷, 出现在I型钻石中。

在紫外可见光谱上表现出的相关吸收带以**480 nm**(2.580 eV)为中心。

先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)形成。

通常在Ia型钻石中产生黄色或橙色, 可导致长波紫外灯(~365nm)下的钻石具有黄色荧光, 短波紫外光源钻石发光观测仪中的钻石具有橙黄色荧光。

可借助UV-Vis-NIR等谱学方法识别该吸收。

## A. 9

**H4缺陷 H4 defect**

由被两个空位分离的4个替位N原子(即由4个替位氮原子围绕两个空位,  $4N+2V$ )构成的杂质缺陷。当空位在钻石晶格中迁移遇见一个B类N杂质聚集体( $B_1$ 心)时与之合体而形成。

本质特征表现为紫外可见光谱中的**496.2 nm** (2.498 eV) 吸收。常温发光光谱中的H4心表现为512nm峰。

先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)形成或由(人工或天然)辐照后退火引发。

在钻石中产生黄色调, 可导致长波紫外灯(~365nm)及短波紫外光源钻石发光观测仪下的钻石具有绿色荧光。

可借助UV-Vis-NIR、PL等谱学方法识别与该缺陷有关的峰。

## A. 10

**H3缺陷 H3 defect**

由空位分离两个N原子[即 $(N-V-N)^0$ ]构成的一种不带电荷的杂质缺陷。与H2心(见下文)密切相关。

本质特征表现在紫外可见光谱中位于**503.3 nm** (2.463 eV)及相关谱带处的吸收。

先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)形成或(人工或天然)辐照后退火或由高温高压处理引发。

引发钻石呈黄色、绿黄色调, 可导致长波紫外灯(~365nm)及短波紫外光源钻石发光观测仪下的钻石具有绿黄~黄绿色荧光。

可借助UV-Vis-NIR、PL等谱学方法识别与该缺陷有关的峰。

## A. 11

**3H缺陷 3H defect**

被认为是跟钻石晶格中的独立填隙(interstitial)碳原子有关的缺陷, 因辐照损伤而生, 常伴GR1出现。极少情况下, 3H吸收很强, 以至于可以改善由GR1吸收形成的绿色。

表现在紫外可见光谱中位于503.6 nm (2.462 eV)处的吸收。

与自然辐照或人工辐照有关。

可能有助于钻石形成绿色, 对紫外灯无响应, 对短波紫外光源钻石发光观测仪无响应。

可借助UV-Vis-NIR、PL等谱学方法识别与该缺陷有关的峰。

## A. 12

**550nm宽带 550 nm broad band**

一个尚未确定结构的光学中心, 被认为是由于晶格构造塑性变形引发。

特征是具有以**550 nm** (2.250 eV)为中心的宽吸收带。

先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)形成。

常引发钻石呈粉色，在天然钻石中它是产生粉色和红色的最常见缺陷。但它在褐色钻石中也经常存在。对紫外灯无响应，对短波紫外光源钻石发光观测仪无响应。

可借助UV-Vis-NIR光谱识别。

#### A. 13

##### **NV<sup>0</sup>缺陷 NV<sup>0</sup> defect**

由单个替位氮原子络合(挨着)一个空位构成的电态中性杂质缺陷，与637nm缺陷相结合呈现。

本质特征吸收位于**575 nm** (2.156 eV)及相关谱带。

可先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)形成，也可通过(人工或天然)辐照后退火热处理诱发。

可引发钻石呈灰粉色；在绝大多数处理呈粉色的钻石中引发粉色，但少数天然致粉钻石也是NV<sup>0</sup>心致色。可导致长波紫外灯(~365nm)下的钻石具有红色荧光，短波紫外光源钻石发光观测仪下的钻石具有橙红色荧光。

可借助PL、UV-Vis-NIR等谱学方法识别与该缺陷有关的峰。

#### A. 14

##### **594nm宽带 594nm broad band**

一个尚不确定结构的光学缺陷，被认为与氮相关的。

吸收带位于**594.4 nm** (2.086 eV)。

可先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)形成；也可由(人工或天然)辐照后退火热处理引发，当人工退火最大温度达到275℃的退火即可呈现，当退火最大温度高于1200℃时，该吸收消失。

常与经人工辐照立即退火使钻石产生绿色、黄色或粉色有关，但在许多天然致色的绿色或黄色钻石中也可以呈现弱吸收特征。可能有助于钻石形成其他颜色。对紫外灯无响应，对短波紫外光源钻石发光观测仪无响应。

可借助UV-Vis-NIR、PL光谱识别。

#### A. 15

##### **NV<sup>-</sup>缺陷 NV<sup>-</sup> defect**

由孤立的替位N原子络合(挨着)一个空位构成的带负电荷的杂质缺陷，与NV<sup>0</sup>缺陷相结合呈现。

本质特征吸收位于**637 nm** (1.945 eV)及相关谱带。

可先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)形成，也可由(人工或天然)辐照后退火热处理或经高温高压处理诱发。

可引发钻石呈现灰粉色~粉色。在绝大多数处理呈粉色钻石和少数天然致色钻石中产生粉色。可导致长波紫外灯(~365nm)下的钻石具有橙红色、红色荧光，短波紫外光源钻石发光观测仪下的钻石具有橙红色、红色荧光。

可借助PL、UV-Vis-NIR等谱学方法识别与该缺陷有关的峰。

#### A. 16

##### **I<sup>0</sup>缺陷 I<sup>0</sup> defect**

电中性的晶体自填隙缺陷。

表现为666.5nm处的吸收，以及与该吸收带相关的735.8nm吸收带。

与(天然或人工)辐照有关,经HPHT处理可消除,而420°~540°C退火也可消除。

对钻石呈现绿色调、绿蓝色有贡献。对紫外灯无响应,对短波紫外光源钻石发光观测仪无响应。

可借助UV-Vis-NIR(在液氮等低温下效果更佳)、PL等谱学方法识别与该缺陷峰。

#### A. 17

##### Si-V心 Si-V center

由替位硅连结(两个)空位构成的带负电荷的杂质型缺陷,常用 $(\text{Si-V})^-$ 或 $(\text{V-Si-V})^-$ 表达。

本质特征吸收位于737nm (1.673 eV)处,高分辨测试呈现736.6-736.9nm双峰。

在先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)或人工晶体生长过程中形成,与晶体生长过程及后期所处环境中的硅有关。

对钻石颜色几乎无影响。对紫外灯无响应,对短波紫外光源钻石发光观测仪无响应。

可借助UV-Vis-NIR、PL等谱学方法识别与该缺陷有关的峰,天然成因钻石在UV-Vis-NIR吸收谱呈现该谱带时须借助低温高分辨型光谱仪。

#### A. 18

##### GR1 (741nm)心 GR1 center

该缺陷在钻石晶格中是一种不带电荷的单独空位( $\text{V}^0$ )。尽管它处的位置超出了可见光的频率范围(~400–700 nm),但GR1引起的相关强吸收谱带位于红光区的末端从而可产生绿色或蓝色。与744.6 nm (1.665 eV)处及相关谱带呈双线吸收。

典型吸收位于741.0 nm (1.673 eV)处。

由自然辐照或人工辐照造成的,当钻石经历过最大温度超过800°C的退火后,该吸收消失。

可导致钻石呈绿色~蓝色。在绝大多数天然或人工辐照的Ia型或IIa型蓝色或绿色钻石中存在。对紫外灯无响应,对短波紫外光源钻石发光观测仪无响应。

可借助UV-Vis-NIR, PL等谱学方法识别与该缺陷有关的峰。

#### A. 19

##### Ni杂质缺陷 Nickel related impurity defect

与钻石{111}生长相关的以及多个尚不确定机理的与镍相关的杂质缺陷。

本质特征发射峰位于883.0/884.7nm(1.40eV)处。高分辨低温UV-Vis-NIR谱呈现在350 ~370 nm(357.0、360.2、363.5、367.0 nm)以及 460到480 nm(468.0、473.3、477.4、516.1 nm)之间的吸收以及以1.40eV心(接近884nm处,尚未研究透彻是否为零声子双线)的强吸收并关联大约685nm的吸收带,其中884、685nm吸收很可能由带正电荷的镍填隙原子( $\text{Ni}^+$ )引发。另外位于793nm的吸收尖峰已确定是镍相关的缺陷。

685nm吸收带强而宽,从585nm延续到大约735nm处,极大地阻碍红光和橙色光的透过。大约555nm开始向高能区(短波区)吸收增强(上述短波区的吸收),可见光范围两端吸收导致在大约555~585之间形成透射窗,引发钻石呈黄色、绿黄色。

常在使用金属镍作为触媒(催化剂熔剂)的HPHT生长钻石中出现,也可在天然变色龙钻石或天然绿黄色钻石中见到,偶在天然无色近无色钻石中检测到。

可引发钻石带绿黄色调,有时对钻石颜色无影响。可导致长波紫外灯(~365nm)下的钻石具有黄色、绿黄色荧光,短波紫外光源钻石发光观测仪下的钻石具有绿黄色荧光。

可借助高分辨UV-Vis-NIR、EPR、PL等谱学方法识别与该缺陷有关的峰,可借助成分分析法得到镍存在的有关信息。

## A. 20

## H2 (986nm)

由空位分离两个氮原子构成的一种带负电荷的[即(N-V-N)]杂质缺陷。它与H3心密切相关,常被认为是Ia型钻石经过HPHT处理的证据。偶尔情况下,H2(及相关的宽大吸收带)可能非常强,会导致H3和H2心合并致色产生浓烈的绿色体色。

本质特征吸收位于986.3 nm (1.256 eV, 10125 cm<sup>-1</sup>)及相关谱带。

可先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)形成或经(天然或人工)辐照后低温退火或经高温高压处理诱发。

可能有助于形成其他颜色。但对紫外灯无响应,对短波紫外光源钻石发光观测仪无响应。

可借助UV-Vis-NIR、PL等谱学方法识别与该缺陷有关的峰。

## A. 21

## H1c心 H1c center

由不确定结构造成的杂质缺陷,被认为是与B心氮(集体氮)有关。

本质特征吸收位于红外5171 cm<sup>-1</sup> (0.6408 eV, 1934 nm)处。

可先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)形成,也可(天然或人工)辐照后退火热处理(退火最大温度超过1000℃)诱发。

对钻石颜色无影响,对紫外灯无响应,对短波紫外光源钻石发光观测仪无响应。

可借助IR光谱识别。

## A. 22

## H1b心 H1b center

由不确定结构造成的杂质缺陷,被认为与A心氮(双原子氮)有关。

本质特征吸收位于红外4941 cm<sup>-1</sup> (0.612 eV, 2024 nm)处。

可先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)形成,也可(天然或人工)辐照后退火热处理(退火最大温度超过1000℃)诱发。

对钻石颜色无影响,对紫外灯无响应,对短波紫外光源钻石发光观测仪无响应。

可借助IR光谱识别。

## A. 23

## H1a心 H1a center

由不确定结构造成的杂质缺陷,被认为是与填隙氮有关。

本质特征吸收位于红外1450 cm<sup>-1</sup> (0.180 eV, 6888nm),表现为较为锐利的尖峰。

可先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)形成,也可(天然或人工)辐照后退火热处理诱发。

对钻石颜色无影响,对紫外灯无响应,对短波紫外光源钻石发光观测仪无响应。

可借助IR光谱识别。须与位于1450 cm<sup>-1</sup>处的吸收宽带区分,1450 cm<sup>-1</sup>吸收宽带往往由C=O结构引发,且常伴有900~850 cm<sup>-1</sup>范围内的弱吸收尖峰。

## A. 24

## 氢杂质缺陷 Hydrogen related impurity defects

与氢元素相关的多个或许已确定结构的缺陷。

特征吸收以 $3400\sim 2800\text{ cm}^{-1}$ 内多个吸收尖峰为典型，常见的组合有：① $3123$ 、 $3031$ 、 $2948$ 、 $2937$ 、 $2901$ 、 $2870$ 、 $2812\text{ cm}^{-1}$ ，被认为与LPHT有关，其中仅出现在CVD生长钻石中的 $3123\text{ cm}^{-1}$ 可能与NVH<sup>0</sup>结构( $0.387\text{ eV}$ ,  $3202\text{ nm}$ )有关，且经HPHT处理后会消失。而 $1600^\circ\text{C}$ 退火后尚保持的 $2902$ 和 $2871\text{ cm}^{-1}$ 峰经 $2300^\circ\text{C}$ 退火后会位移到  $2907$  and  $2873\text{ cm}^{-1}$ 。 $2901$ ,  $2870$ , and  $2812\text{ cm}^{-1}$ 的位移与退火过程的压力也有相关性，同样退火温度是 $1600^\circ\text{C}$ 时，经历 $7\text{ GPa}$ 的压力这三个峰在 $2902$ ,  $2871$ , and  $2819\text{ cm}^{-1}$ 处，而在常压条件下退火这三个峰出现的位置是 $2900$ ,  $2868$ , and  $2813\text{ cm}^{-1}$ 。②以 $3107\text{ cm}^{-1}$  ( $0.385\text{ eV}$ ,  $3220\text{ nm}$ ——即N<sub>3</sub>VH结构)为典型的一组尖峰，包括 $3309$ 、 $3236$ 、 $3188$ 、 $3169$ 、 $3153$ 、 $3143$ 、 $3121$ 、 $3107$ 、 $3092$ 、 $3080$ 、 $3049$ 、 $3009$ 、 $2978$ 、 $2855$ 、 $2812$ 、 $2785\text{ cm}^{-1}$ ，甚至还包括 $4495$ 、 $4167$ 和 $1405\text{ cm}^{-1}$ 尖峰，以最强的 $3107\text{ cm}^{-1}$ 吸收为典型，且常伴有 $1405\text{ cm}^{-1}$ 峰。

组合①常为化学气相沉淀法晶体生长过程形成或晶体生成后再处理呈现；组合②常为天然成因钻石含氢或天然钻石在富氢环境下改性后的谱图呈现；呈现组合①吸收的样品经特殊环境下高温处理后可消除组合①吸收特征而呈现 $3107\text{ cm}^{-1}$ 典型的吸收。

可在晶体(天然或人工)生长过程中形成，也可在晶体生长后产生。

可产生黄色或紫色，也可导致钻石呈灰色或褐色。对长波紫外灯无响应，对短波紫外光源钻石发光观测仪无响应。

可借助 IR 光谱识别。

#### A. 25

##### 片状缺陷 Platelet defect

为杂质缺陷，结构不确定，被认为是由许多填隙碳原子联合构成。

本质特征红外吸收位于 $1360\text{ cm}^{-1}$  ( $0.169\text{ eV}$ ,  $7336\text{ nm}$ ) 左右。

先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)形成或人工晶体生长过程形成。对钻石颜色无影响，对长波紫外灯无响应，对短波紫外光源钻石发光观测仪无响应。

可借助IR光谱识别。

#### A. 26

##### 空位群簇 Vacancy cluster

结构不确定的一种缺陷，被认为是大量空位造成的。

在紫外可见光谱上表现为向蓝端方向吸收逐渐增强。

先天条件(钻石被开采前经历的所有地质条件)形成。常导致钻石呈褐色调，对长波紫外灯无响应，对短波紫外光源钻石发光观测仪无响应。

可借助UV-Vis-NIR光谱识别。

#### A. 27

##### 琥珀心 amber centers (AC)

具有褐色琥珀类似颜色的钻石(IaA型或IaA+Ib型)，若具有层状塑性变形(褐色纹理)，在近红外区域(大约位于 $3900\sim 9000\text{ cm}^{-1}$ 范围内)表现出来的一系列吸收峰/带，最显著的谱学吸收位于近红外区大约 $0.52\text{ eV}$ 处(即 $4190\text{ cm}^{-1}$ ,  $2384\text{ nm}$ )。这种色心在不具褐色调的钻石中缺失。系列吸收峰见表A 1。

其中最为典型的吸收特征：琥珀心1(AC1)在 $77\text{ K}$ 时表现为 $4168\text{ cm}^{-1}$ 和 $4212\text{ cm}^{-1}$ 峰，室温时两峰拟合宽峰；相关的还有 $4676$ 和 $4857\text{ cm}^{-1}$ 峰。琥珀心2(AC2)在 $77\text{ K}$ 时表现为约 $4173\text{ cm}^{-1}$ 处有一弱尖峰，在 $4067$ 和 $4098\text{ cm}^{-1}$ 处另有两个尖锐的特征峰。琥珀心3(AC3)在 $77\text{ K}$ 时表现为在较低频率区具有一个尖锐的特征吸收，其峰尖位于 $4113\text{ cm}^{-1}$ 处，而高频肩峰位于 $4137\text{ cm}^{-1}$ 处。琥珀心4(AC4)出现的钻石基本为Ib型(具弱A心)， $4111$ 、 $4140$ 、 $4169$ 、 $4220$ 尽管与AC3中的峰位相近但相对强度不同(见表A 1)，另外在 $4067$

$\text{cm}^{-1}$ 处有一个显著的峰，许多宽峰与AC1峰处于相同位置，但在5920和6323  $\text{cm}^{-1}$ 则是AC1不具有的，而仅在AC3和AC4中可测到。更多特征吸收峰见表A 1。

表A 1. 谱图中与琥珀心有关的明显特征峰位( $\text{cm}^{-1}$ )表，测试温度77K

琥珀心 1	琥珀心 2	琥珀心 3	琥珀心 4	不确定度 (误差?)
Ia [A]»[B] <sup>a</sup>	Ia [A] » [B]	Ib(具弱A心)	Ib(具弱A心)	
	4067 [100] <sup>b</sup>		4066 [100]	±2
	4098 [42]			±2
		4113 [100]	4111 [60]	±2
		4137 [50]	4140 [35]	±2
4168 [100]	4173 [59]	4170 [49]	4169 [56]	±2
4212 [30]	4210 [50]	4224 [27]	4220 [36]	±10
4676 [3]			4676 [2]	±2
4732 [1]			4740 [1]	±5
4857 [2]		4857 [2]	4863 [4]	±5
5849 [4]	5865 [25]	5849 [4]	5854 [3]	±10
		5920 [4]	5920 [6]	±10
6045 [1]				±10
		6321 [1]	6323 [3]	±2
6514 [2]	6507 [13]	6497 [2]	6526 [4]	±15
7290 [6]		7261 [14]	7245 [13]	±20
7753 [9]			7754 [3]	±10
8056 [4]		8010 [19]	8036 [12]	±10
8561 [1]	8570 [4]	8558 [3]		±10

注：琥珀心从不出现在II型钻石中。a、A心谱学吸收远大于B心强度；b、1~100数值代表该类AC中该峰出现的概率百分数值。

附录 B

(资料性附录)  
不透明钻石的鉴定流程

不透明钻石鉴定流程见表B. 1

表 B.1 不透明钻石检测流程

测试步骤、方法	得出的结论
1、Ramam	金伯利岩或钾镁煌斑岩型黑钻石除石墨外，常含有其他幔源高压矿物，如橄榄石、石榴石、锆石、铬透辉石、柯石英等； 卡波内斗常含非常罕见的矿物，尤其是碳硅石(SiC)和陨氮钛石(TiN)，表面孔洞或断口破裂处会被次生的、低温矿物所充填，比如石英以及高度氧化类矿物磁铁矿、针铁矿、磷铝铈石以及磷铝钙石等。 合成黑钻石除石墨、金属或合金外几乎不含其他矿物包体。
2、发光影像观测	几乎所有的金伯利岩或钾镁煌斑岩型黑钻石都呈现典型的天然成因钻石复杂的发光纹理； 几乎所有的卡波内斗钻石都呈现绿或橙色到红色的微斑结构发光特征； 人工形成的聚晶钻石常具有紫红色荧光。
3、EDXRF	卡波内斗钻石常具系列金属 (Fe、Ni、Cr 和 Ti)、金属合金(Fe-Ni、Fe-Cr、Ni-Cr 以及 W-Fe-Cr-V)等特征；高温高压生长的钻石也可具有这类过渡金属及组合。
4、低温 PL(350~1000nm)或	几乎所有金伯利岩或钾镁煌斑岩型黑钻石都是 1a 型的； 几乎所有卡波内斗(Carbonado)钻石都是 1b 型(几乎不呈现 N3 心)的, 但会存在光谱明显可见的 N-V-N 缺陷，如 H3 和 H2 缺陷； 几乎所有的人工生长的黑色钻石都是 1b 型的；
注：1、尽管红外等吸收光谱对钻石的识别有一定的意义，但几乎无法提供具重要意义的鉴定依据。 2、难以确定天然黑钻石是否经过辐照(及退火)和/或高温高压处理。	

参考文献

[1] 标准GB/T 37835-2019/ISO21348:2007 太阳辐照度确定过程一般要求