

# 一门新的边缘学科——结构光性矿物学

叶大年

(地质研究所)

矿物学是地质学的基础学科之一，也是地质学中为数理化关系最密切的学科之一。两个世纪以来，矿物学的发展史充分说明，科学技术的每一个进步对矿物学都是一个推动。例如，上个世纪初，几何光学和光学机械的发展，促进了结晶学的发展；1850年偏光显微镜被引入矿物学研究中来，使得光性矿物学和岩石学得到飞快的进步。对矿物学研究推动最大的大概要算1895年伦琴射线的发现和1912年晶体对X射线的衍射现象的发现了。60年代初电子探针的发明使矿物学研究又发展到“微矿物”的新阶段。高分辨率透射电子显微镜的发明使得人们可以直接看到矿物的晶格像和结构像，如此等等，技术的进步对科学的促进是不容置疑的。然而，矿物学的发展史说明，学术思想的更新、新概念的引入以及新的数学方法的运用也起着同样重要的作用。例如，笛卡尔坐标和极坐标的引入、极射赤平投影和心射极平投影方法的运用、空间解析几何学方法的引进等，使得作为矿物学一部份的结晶学成为一门严密的科学；元素迁移富集和离子半径等新概念的引入，导致矿物学发展为地球化学的一部分；热力学平衡和相律概念在矿物学中的应用，使成因矿物学从描述阶段发展到证实和定量的阶段。但是，这并不意味着矿物学的发展相对于数理化学科来说总是被动的。矿物学家柯尔任斯基关于开放体系和活性组份的概念就大大推动了热力学的发展，费多洛夫关于空间群的理论 and 四维空间的图示法对数学也是一个大贡献。

“结构光性矿物学”是矿物学的一个新的分支学科，这个领域是我们自己开拓的。它是研究矿物(特别是透明矿物)的光学性质与其内部结构之间关系的科学，它是光性矿物学与晶体物理学和晶体化学之间的边缘学科。

1921年著名的科学家尼格里就曾预言：“总有一天，人们可以从化学成份和晶体结构计算出晶体的光学性质来，这是一项重要的基础研究工作。希望物理学家、化学家和矿物学家来个竞赛，看谁先解决这个问题”。尼格里的预言提出已经有六十多年了，物理学家、化学家、矿物学家确实都曾作过一些努力，取得过一些引人注目的成绩。例如，1921年拉尔森引入Gladstone-Dale——折射度(亦称比折射能)的概念，从而使人们可以从化学成份和密度计算矿物的平均折射率 $(\alpha + \beta + \gamma)/3$ ；1924年，诺贝尔奖金获得者布拉格提出点偶极理论，并用以研究方解石和文石的折射率；法扬斯学派则发展了折射度的理论。但是，在后来一个很长的时间里，至少是在物理学上和矿物学上几乎无人问津。

我还在读大学时就常常想一个问题，光性矿物学为什么没有任何理论，实际上只是一堆枯燥无味的数据呢？晶体的结构资料是那么丰富，矿物光性与晶体结构之间的关系究竟表现在什么地方呢？是不是被研究透了？在池际尚教授和彭志忠教授的鼓励下，我开始思索这个问题。1962年我考入科学院地质所当研究生，在著名的光性矿物学家何作霖教授指导下，正

式研究结构光性矿物学问题。在此以后,我的研究工作一直受到老一辈科学家如侯德封、尹赞勋、张文佑、钱伟长、李朴、涂光炽、叶连俊、赵宗溥和吴利仁诸教授的支持、鼓励和指导。如果说今天结构光性矿物学能够有所发展,是和上述这些老前辈民主的治学作风与支持青年人的新思想分不开的。这一点我有极为深刻的体会。

结构光性矿物学的研究内容主要有以下几方面: 矿物平均折射率与其化学成份之间关系;矿物折射率与离子的电子壳层结构之间关系;矿物的平均折射率与晶体结构之间关系;矿物光学异向性与晶体结构之间关系;矿物颜色及多色性产生的原因等等。

## 一、矿物折射率与其化学成份的关系

矿物的折射率是最重要的鉴定特征,1921年,美国著名的矿物学家,首次把适用于溶液的 Gladstone-Dale 公式引入到矿物学中来。他把矿物看成是其组分(主要是氧化物)的固体溶液。根据折射度加和性原则,矿物的折射度应是各组份折射度的加权平均值。根据化学成份可知矿物的折射度,再按折射度和密度就能计算出矿物的平均折射率来。拉尔森的贡献不仅仅是提出“固体溶液”的新概念,而且还给出了组成矿物的几十种组份的折射度。尽管矿物(晶体)绝非是其组份的固体溶液,但拉尔森的公式确实是最方便和最精确的方法,比之在理论上严密的洛仑茨-洛仑兹公式的结果更令人满意。几十年来,矿物学家一直沿用它,虽有几位学者对个别组份的折射度值作适当修正,但并没有对它深入研究。

拉尔森是不是把矿物光性和结构之间的关系完全解决了呢?没有。

1. 拉尔森公式并没有揭示出折射率与具体的晶体结构有什么关系。
2. 拉尔森及以后的科学家并没有揭示出各种氧化物的格拉斯顿折射度值究竟取决于什么。因而只是一些经验常数而已。

我们对拉尔森的折射度进行了大量的研究,立足于门捷列夫周期律及离子的电子壳层结构,使折射度值的定量规律一清二楚。这样它们就不再是一些经验常数,而是与物质结构有明确关系的物理常数了。

### (一) 氩型离子化合物折射度定律

具有  $1s^2 2s^2 2p^6$  电子构型的离子我们称之为氩型离子,因为它与氩有相同的电子构型。全部由氩型离子组成的化合物叫做氩型离子化合物。氩型离子化合物有其特殊的性质。

氩型离子化合物按负电性(即离子键性)分为三类,即氟化物类、硫酸盐和高氯酸盐类,氧化物、硅酸盐和磷酸盐类。在每一类中, Gladstone-Dale 折射度是固定的常数,而与其成份无关。目前在自然界和实验室合成的几十种氩型离子化合物几乎无例外地符合这一规律。

上述第三类中,折射率  $n = 1 + 0.204d$ ,  $d$  是密度。于是可以推断,  $\text{Na}_2\text{O}$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{P}_2\text{O}_5$  都有相近的折射度  $0.204 \pm 0.004$ 。如所周知,这些成份是地壳的主要成份,因而大多数造岩矿物主要是由这些氩型化学组份构成。这就不难解释,为什么大多数造岩矿物、火山玻璃和炉渣皆服从  $n \approx 1 + 0.21d$  的规律了。 $n \approx 1 + 0.21d$  的规律在矿物鉴定时是十分有用的,因为它反映了造岩矿物折射率与密度的近似关系。

### (二) 离子折射度 (GDIR 值)

为了研究折射度与电子构型的关系,我们引入了格拉斯顿-代尔离子折射度的概念,简称

GDIR 值,由化合物折射度很容易算出 GDIR 值。不同离子的 GDIR 值与其电子构型存在着明确的定量关系。

1. 周期表中同一主族的离子 GDIR 值与原子序数  $N$  成严格线性关系,相关系数  $r \geq 0.98$ 。
2. 同一周期惰性气体型的离子, GDIR 值与原子序数呈有异常峰的直线关系,第四周期的异常峰在  $Ti^{+4}$  (价电子  $4s^2 3d^2$ ) 处,第五周期的异常峰在  $Nb^{+5}$  (价电子  $5s^2 4d^3$ ) 处,第六周期的峰在  $W^{+6}$  (价电子  $6s^2 5d^4$ ) 处。异常峰是有规律的移动,  $Ti-Nb-W$  在周期表上是对角线。
3. 同一周期 18 电子型离子的 GDIR 值与原子序数的关系曲线是“V”字形的。这些离子的负电性-原子序数曲线也是“V”字形的。
4. 第一过渡族的二价离子和三价离子的 GDIR 值与  $3d$  电子数的关系都是“双驼峰”形的。二价和三价过渡族离子的各种性质与其  $3d$  电子数的关系总是“双驼峰”形的,从晶体场的理论很容易解释这一现象。如果不引入 GDIR 的概念,这个现象是不能揭示出来的。
5. 三价的稀土离子的 GDIR 值与  $4f$  电子数是直线关系,而且是随  $4f$  电子数的增加而减少,这是由于屏蔽效应和镧系收缩的缘故。我们发现,三价稀土离子的 GDIR 值与离子半径的比值接近常数,从而可以从数学上证明,等结构的单稀土化合物应有相同的折射率,即稀土的配分不应对折射率有明显的影响。

## 二、矿物的折射率与晶体结构之间的关系

如果说光性矿物学已经把一种矿物种属系列(类质同像系列)中折射率与成份的关系表达出来的话,那么揭示一大类矿物折射率与晶体结构之间的关系则是结构光性矿物学的任务。但是从 1913 年第一个晶体结构被测定以来的半个世纪中,除了一些定性的描述以外,还没有精确规律被揭示出来。例如,人们知道氧离子最紧密堆积构造的矿物有较高的折射率,而架状硅酸盐有较低的折射率。

六十年代初期,我们就开始研究这个问题。基于这样一个假设,在结构上有某些共同点的一大类矿物,折射率应该是化学成份和各种结构参数的函数,这个多变量的函数符合泰勒级数展开的条件,那么我们一定可以找到一个多项的线性函数很好地表达折射率与结构之间的关系。正是用这样的方法得到两条定律。

### (一) 氧离子最紧密堆积构造折射定律

1964年,我们发现氧离子最紧密堆积构造的矿物,平均折射率  $(\alpha + \beta + \gamma)/3$  是氧离子堆积紧密程度、八面体和四面体孔隙的占位率、阴离子团的形式、重阳离子增量及附加阴离子的减量的线性函数。这函数式中的常数项为 1.710 (我们称之为法杨斯常数)。它的物理意义是,一个假想晶体的折射率,它的氧离子堆到最密(每个氧占  $13.9 \text{ \AA}^3$ ),而不含任何阳离子和附加阴离子。

这可以说是我们得到的结构光性矿物学的第一条定律。如果用这个线性函数式计算矿物的折射率与实验值相比,均方根误差  $\pm 0.003$ ,这个精度是非常高的。用这个公式可以把近六十种矿物的折射率和晶体结构联系起来。在以往的矿物学和物理学中从未有过能把似乎风马牛不相及的刚玉、辉石、橄榄石和滑石等等矿物的折射率统为一体。

### (二) 架状硅酸盐定律

1943年费尔巴因引入离子堆积指数的概念，指出架状硅酸盐的堆积指数小，所以折射率低。1974年，我们找到了架状硅酸盐折射率与结构之间的定量关系。所有的架状硅酸盐可以看成是柯石英（Coesite,  $\text{SiO}_2$ ）的“衍生物”，一则是结构松弛，二是异价的类质同像。架状硅酸盐的折射率是硅氧四面体的占有体积和类质同像增量的线性函数。这个函数式同样是很精确的，均方根误差是  $\pm 0.004$ 。能把五十余种不同的架状硅酸盐和成份相同的玻璃统为一体。架状硅酸盐定律这样的规律在矿物学和物理学以往的文献中是不曾见到过的。

1976年河北大学的冷恒近同志研究了硼酸盐的结构与折射度（洛伦茨-洛伦兹折射度）的关系，那是一篇很有价值的论文。

1976年苏联的普洛申娜提出了一种估算矿物折射率的方法，她是基于洛伦茨-洛伦兹理论和离子键性提出这个方法的。这一成果是结构光性矿物学方面的又一大进步。遗憾的是，精度较低，常常有  $\pm 0.02$  的误差，有时误差更大。

### 三、伍斯特法则

如所周知，晶体除立方对称者外，都有光学的异向性，即有三个主折射率（二轴晶）或两个主折射率（一轴晶），其中最大和最小折射率之差叫重折射率；非均质晶体的光符有正负之分。1931年，英国著名的晶体物理学家伍斯特发表了一篇重要的论文，提出了晶体重折射率及光符正负与晶体结构之间关系的六条法则。这六条法则是：

1. 所有层状结构的晶体，除含氢氧根者外，都是负光符。
2. 所有具平行光轴的链状结构的晶体都是正光符。
3. 所有强烈非等轴对称的离子团引起重折射，平行该晶体中最短键长的方向有较高的折射率。
4. 所有等轴对称的离子团只引起较低的重折射。
5. 对称离子团构成的三维格架构造的晶体有低的重折射。
6. 含有相当量铁、钛的物质有较高的重折射率，但这不是由于结构有显著的非对称性。

伍斯特法则被许多晶体物理学和矿物学的教科书所引用。研究晶体结构的学者常常注意到光学性质，并从光学性质获得结构模式的信息。他们常常是运用伍斯特法则。

我们通过了数以百计的矿物光性和结构资料的分析，发现有许多矿物不符合伍斯特法则，为此提出三条补充的法则。

1. 任何一个晶体结构必然是三维的，它可以分解为一维和两维的两个对立面。一维即链状性，两维是层状性（或环状），通过两者组合为三维结构。一维性突出时为正光符，重折射大，光轴角  $2V$  小。当两维性突出时为负光性，重折射大， $2V$  大小取决于“层”的均一性。光符正负，重折射大小， $2V$  大小都是可以转化的。

2. 在分析一维性和两维性时，不仅仅注意某一种配位多面体的组合形式，而且还必需注意几种配位多面体的复合形式。

3. 分析晶体构造的一维性和两维性时，切忌主观性，因而必须用“比较解剖学”的方法，即必须从许多晶体构造中找出共同点来。

例如：锆石  $\text{ZrSiO}_4$ ， $\text{Zr-O}$  多面体和  $\text{Si-O}$  四面体都是等轴对称的原子团，按伍斯特

法则是不能解释它有较高的重折射率和正光性。但是我们可以看到在锆石结构中,有平行  $c$  轴的  $Zr-O$  多面体和  $Si-O$  四面体相间地连接成的无穷链,这样就圆满地解释了它的光性。这种类型的链在硬石膏  $CaSO_4$ 、独居石  $CePO_4$ 、磷钇矿  $YPO_4$  等矿物中都存在;它们的光性有类似之点。这就是我们所说的“比较解剖学”的方法。

长石是一种极为重要的造岩矿物,而它的鉴定方法又很繁杂。如果用我们补充的法则就很容易掌握要领了。长石的结构可分解为平行  $(\bar{2}01)$  方向的层和垂直层方向(即  $a$  方向)的“双曲轴”形的链,两者相比前者略胜一筹,故最小的折射率  $\alpha$  接近  $a$  的方向。长石中硅—铝有序无序对光性的影响也可用补充法则得以完美的解释。因为硅铝无序化后,平行  $(\bar{2}01)$  层的均匀性增加了,所以光轴角  $2V(-)$  就会减小。这个现象在钾长石和钠长石均可以见到。

#### 四、矿物光学异向性

1924年布拉格提出点偶极的理论,在《英国皇家学会会志》上发表了著名的论文“方解石和文石折射率的计算”。从而在物理学上打开新的一页,人们可以计算某些矿物的三个主折射率了。布拉格的方法长期以来为人所推崇。几十年过去了,布拉格的方法就不见有什么大的进步。最近这两年,又有人重新研究点偶极理论,应用电子计算机技术来计算矿物的折射率。这些研究与其说是计算折射率,不如说是用折射率来计算偶极矩,反过来又用偶极矩再计算折射率,实际上只是借点偶理论用计算机反复修正而已。布拉格的理论计算十分繁杂,可见要解决矿物的光学异向性计算问题是十分困难的。

从1980年以来,我们发表了一系列论文,提出了一些新的概念,并在此基础上对某些光子异向性强的矿物的主折射率提出新的简便方法。这些新概念有折射度指示体、光性异向指数(即 OAI 值)和原子团极化率椭球等。

在物理学上曾用过六种光学性质指示体,其中矿物学家用得最广泛的是光率体。光率体是以  $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$  三种主折射率值为主半径的三轴椭球。我们引入了第七种光性指示体,它是以 Gladstone-Dale 折射度为基础的,以  $(\alpha - 1)$ 、 $(\beta - 1)$  和  $(\gamma - 1)$  为三个主半径的三轴椭球,叫折射度指示体。

晶体某个方向的光学异向性是用折射度指示体来表达的,某方向的光性异向指数等于该方向上折射度指示体的半径与垂直该半径的椭圆截面的平均半径的比值。

用光学异向指数代替重折射率,在研究晶体光学异向性与晶体结构之间关系时有无比的优越性。因为光性异向指数正好反映晶体在这个方向和垂直方向极化强度的比值。是有明确的物理意义的。

由光学异向指数,借助于克尔效应,我们又导出原子团极化椭球的概念来,并且推导出一大批有强烈异向性原子团的椭球半径来。有了这些数值,可以用极为简便的方法计算出矿物的主要光子性质来( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $2V$ )。精度胜过布拉格的方法。计算的方法是用拉尔森方法求出平均折射率  $(\alpha + \beta + \gamma)$ ,用极化椭球半径和晶体结构中的原子坐标求出光性异向指数,并按这指数分别求出  $\alpha$ ,  $\beta$  和  $\gamma$ ,最后再计算出光轴角来。整个过程几行就完成了,而不是布拉格法的几页。不少的外国同行对计算的精度和简易性感到惊讶。

由此可见新概念的建立是多么重要。

## 五、结构光性矿物学研究的实际意义

结构光性矿物学的研究成果或方法在生产实际中是会得到应用的。有时还会收到其他方法不易收到的效果。下面我们举几个例子。

例 1. 1967 年我们研究稀土钢的非金属夹杂物时,发现一种新的物相。我们根据氧离子最紧密堆积构造的折射定律,推测它的折射率、化学成份和密度,结果都一一被后来的直接测定所证实。

例 2. 1971 年我们运用氮型离子化合物的折射度定律,解决了铸石结晶程度的测定方法问题,提出用密度间接测量结晶程度的方法。后来测定结果被自动扫描图像分析仪的测定所证实。我们提出的方法一直被全国的各铸石工厂采用。

例 3. 1982 年某个大玻璃厂引进国外新工艺后,生产的平板玻璃上有疵点。在鉴定疵点的过程中发现各种数据之间有矛盾之处。后来用结构光性矿物学的研究方法解决了问题。疵点产生的原因是涉及中外两方的责任问题。

例 4. 1984 年,山东硅酸盐研究所发明了一种新型日用瓷,这种瓷质轻、半透明并有良好的抗热冲击性能,在国际上获金质奖。然而一些理论问题无法解释。我指导该所的一位同志作研究生论文。用结构光性矿物学中架状硅酸盐定律配合电子探针分析,完美地解决了这个问题,得到轻工业部有关专家的高度评价。

例 5. 根据离子折射度  $GDIR$  值的研究后,本人指出在陶瓷中,要提高釉的遮盖力,就必须研究钛釉,因为在地壳中丰度高的元素中唯有钛的折射度最高。舍此别无它途。并指出研究钛釉的注意点。在我们研究室两位年轻同志和唐山建筑陶瓷厂的合作下钛釉已获成功。

由以上实例可以看出,即使像结构光性矿物学这样窄领域的基础理论研究也能对生产实践有指导作用。基础理论对生产的指导作用有时候是全面的,更多的情况下是一点一滴的。我们在强调加强应用研究的同时,不应因一时的功利而放松基础理论的研究。

## 六、结构光性矿物学研究的理论意义

结构光性矿物学的研究不仅仅有实际意义而且有深远的理论意义,下面的一些实例就可以说明这一点。

### 例 1. 预测离子的配位数

1965 年,张汉卿同志在彭志忠教授指导下正在测定锂铍石的晶体结构。我用最紧密堆积构造折射定律的公式,只用了五分钟,就算出锂的配位数是四而不是六。当时彭先生认为是六。张汉卿同志测定的结果证明锂的配位数是四。这个例子充分证明,结构光性矿物的研究能得到有用的结构方面的信息,往往可以加快晶体结构分析的进程。

例 2. 1976 年,冷恒近同志利用他对硼酸盐折射度研究的成果,根据光性预测中国发现的新矿物水碳硼石的晶体结构中硼酸根是孤立的硼氧四面体,后来被 X 射线结构分析所证实。

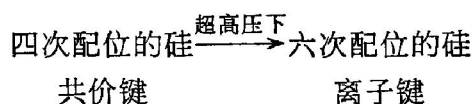
例 3. 1984 年,我在全国的一次 X 射线结晶学的会议上作结构光性物理学的报告时,在讲台上当着 120 位同行专家,预言碳铈钠石中碳酸根的交角是  $26^\circ$ 。当场有专家提出马上用电

子计算机核对我的预言。一周后,她通知我,碳酸根交角有两组值,一是  $27^\circ$ ,另一组是  $24.5^\circ$ ,平均是  $25.7^\circ$ ,竟符合得如此之好。我之所以敢用自己的声誉在大庭广众之中“打赌”,是因为我坚信自己的理论正确无疑。

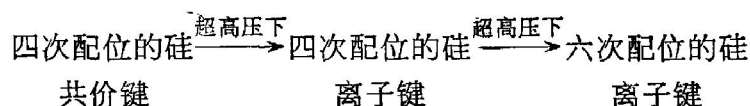
有位西方的科学哲学家认为评价一项科研成果,要从三个方面评价:评价这理论说明已有实际情况的能力,评价这理论解决新遇到问题的能力,最后是评价这理论预测未知、未来的能力。我认为这种评价的准则是不无道理的。评价结构光性矿物学的研究成果似乎也可以从这三方面入手。现在,我再就超高压矿物的光性和化学键问题提出自己的预测,以期待今后科学家们的证实。

在地球的深处,几百公里以下,矿物都处于超高压状态,矿物的晶体结构发生根本的变化,从而性质也发生了变化。这是一个极为重要而又迷人的地球物理问题。例如,顽火辉石  $\text{MgSiO}_3$  在超高压条件下,转变为钛铁矿型结构。我们可以根据晶胞参数,计算出每个氧的占有体积  $V_o = 14.58 \text{ \AA}^3$ 。在这个结构中硅是六次配位的,即这时的  $\text{MgSiO}_3$  已经不是硅酸盐而是氧化物了。根据氧最紧密堆积构造折射定律,可算出它的平均折射率为 1.757。用类似的结构光性矿物学的规律,可以预测其它超高压下物相的光学性质。

在超高压下  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  会转变为  $\beta\text{-Mg}_2\text{SiO}_4$  和  $\gamma\text{-Mg}_2\text{SiO}_4$ 。 $\alpha\text{-Mg}_2\text{SiO}_4$  是橄榄石,是硅酸盐,硅是在孤立的四面体中心。 $\beta\text{-Mg}_2\text{SiO}_4$  的结构分析资料证明硅仍在四面体配位,硅氧四面体是成双的,结构式是  $\text{Mg}_4\text{Si}_2\text{O}_7\text{O}_6$ 。 $\gamma\text{-Mg}_2\text{SiO}_4$  是尖晶石结构,晶体结构分析表明,硅依然是四次配位的。 $\beta$ -和  $\gamma\text{-Mg}_2\text{SiO}_4$  都是氧离子作最紧密堆积的结构。计算这两个物相的折射率时,如果按硅酸盐的方案计算,结果与实验值相差很大,但是按氧化物的方案计算,结果与实验值符合得很好。这就使我们不得不思考这样一个问题,究竟是规律出现了例外情况呢?还是超高压化学键性发生了变化呢?两者必居其一。第一种情况是不太容易理解的,为什么偏偏会出现例外呢?那么我们就接受第二种情况,好在结构分析的数据表明  $\text{Si-O}$  键长在超高压下反而增长了,由  $1.63 \text{ \AA}$  变成  $1.67 \text{ \AA}$ 。也许这个事实就说明,超高压下,四配位的硅化学键由共价键变为离子键。如果这是事实,那么以往地球物理学家的模式



就应改变为如下的模式



倘若这种假设成立,我们就可以看到硅在超高压条件下晶体化学行为与铝是多么相似,有四次配位的离子键的阶段,而后再向六次配位过渡。我也明知这种假设是多么大胆,正式发表出来是要有风险的,然而仍旧是坚信已得出结构光性矿物学的结论是正确无疑的。

## 七、展 望

为研究光学性质与矿物内部结构之间关系我花去了整整四分之一世纪,并撰著了《结构

光性矿物学原理》一书(约 35 万字)。结构光性矿物学作为一门新的边缘学科,它仍处于不太成熟的初级阶段,因为现在研究问题的方法仍是以枚举归纳法为主,而不是以演绎为主的,就说明了这一点。现在揭示出来的某些规律还没有完美的理论解释,而且对异向性不明显的矿物还没有有效的计算方法。因而结构光性矿物学的研究尤其是与量子化学的结合还有待于深入。

同所有的基础科学一样,结构光性矿物学与其它学科也会发生千丝万缕的联系,也会导致其它边缘科学的发展。

在研究矿物光性与结构之间关系时,势必要注意到矿物中离子堆积情况、玻璃中离子的堆积情况,发现其中的规律。由此及彼,这些规律的适应范围又大大拓宽。在结构光性矿物研究的时候,引起我们研究“颗粒堆积学”的问题。正如我国著名冶金学专家郭慕荪教授指出的那样,颗粒学是一门介于基础科学和工程科学之间的大科学,在地质学中也有重要意义。我们从结构光性矿物学的研究中可发现:

1. 地球的各个圈层,氧离子的堆积形式是不同的,并且氧离子的平均占有体积不是连续变化的函数,对每一圈层是一个近似的常数。这些不连续的常数与地震波的波速不连续性完全相对应。

2. 矿物中有各种形式的水、结构水、结晶水、沸石水和层间水等。拉尔森对各种水都给出同样的折射度,这就引起矿物学家们的争议。我们研究过这个问题,发现:除层间水、天然水和冰外(这些水是聚合的水分子),其它类型的水,其分子体积为  $23\text{\AA}$  左右 这个数值正是水分子“球体”(半径  $1.41\text{\AA}$ ) 的外切立方体的体积。水分子体积的求出在矿物学、岩石学和沉积学中都有很大的意义,在工程建设,如水泥硬化过程的研究中也是一个重要的参数。

3. 从水分子有个固定的堆积体积(我们称为拓扑体积)的事实出发,自然就会想到其他的离子或离子团有没有一个固定的拓扑体积呢?我们研究了硫酸盐、碳酸盐、硝酸盐、磷酸盐、铬酸盐等等盐类,得出结论,离子和离子团堆积成晶体时都有一个相对固定的拓扑体积。晶体的分子体积等于组成它的离子或离子团拓扑体积之和。也就是说,当知道一个盐类的分子式后,我们就可以知道它的密度,而不需要任何测量。

4. 从盐类分子的拓扑体积问题就可以拓展到硅酸盐玻璃,由玻璃又拓展到硅酸盐熔体,我们又发现在其中发现了一系列的规律。

5. 以上都是微观质点的堆积规律,我们自然就连想到宏观颗粒的堆积规律,从中又找到了研究课题,并已取得一些有意义的成果。从表面上看,结构光性矿物学与颗粒堆积学没有什么关系,实际上两者是姊妹科学。结构光性矿物学是研究微观粒子堆积体的光性(物理性质的一种),而颗粒堆积学是研究宏观颗粒堆积体的宏观性质。两者研究方法和理论基础都相近,即研究粒子(或颗粒)周围的环境,也就是配位数问题、孔隙度问题等等。

研究这种性质的基础理论问题并不需要太多的经费和仪器装备,也不需要多少人力。然而它们对国民经济建设和其他基础理论学科都会有所补益。因此,应对这种“纯理论”的研究给予一定的重视。这种研究不是脱离实际的,而是与更广泛的实际相联系着。我们大家都不否认,中国科学落后主要体现在实验科学上,尤其是高技术实验科学上。但是,安排为数很少的人力和物力从事“纯理论”研究是必要的和上算的。