

此外，近年来，我们及胜利油田分别进行的人工模拟热演化系列样品的实验，发现其中五环三萜烷分布特征都与盆地中各种深度的系列样品不一致，特别是原生藿烷的 $\beta \alpha / \alpha \beta$ 异构体比值呈现出相反的变化趋势，这说明因斯敏格提出的藿烷演化途径 $(\beta \beta \nearrow \alpha \beta \searrow \uparrow \alpha)$ 有问题呢？还是暗示快速加热条件下反应历程有所变化？类似这样一些理论问题应该组织一定力量进行研究，以利生物标志化合物有效地服务于生油评价。

4. 关于生油量计算方法问题 生油量计算是含油气盆地评价重要结果之一，计算的正确与否直接影响到设计勘探规模和勘探部署的合理性。因此选择合理的计算方法至关重要。据了解，目前还有一些地方采用沥青A法，作者认为这是不恰当的。对于一个特定的含油气盆地来说，生油岩的总体积决定于生油岩的平均厚度和分布面积，只要确定生油门槛，生油岩总体积实际上就是一个常数。所谓沥青转化系数，只是变化于15—20%的经验数，影响也不大，在计算结果上最多相差1/4。最关键的参数是沥青A的含量，它实际上是单位重量生油岩中残余沥青A的量，是生油岩排烃之后的残留部份。生油岩排烃有两种情况：①如果成熟生油岩中脂碳率高，总生油能力就高，排出的烃类就多，残留部分就相对较少；相反，如果生油岩生油能力小，没有排烃，它生成的沥青就会全部保留下来。②生油岩的排烃能力与其成熟度有关，一般刚进入生油门槛时排烃能力小，生油高峰时排烃量增大，这时的残余沥青A当然比前者少得多。可见在成熟生油层中残余沥青A的量与排烃量之间不但无线性增长关系，相反，在大多数情况下是互相消长的。以沥青A含量为基础计算出的量只不过打了折扣的残存沥青A总量而不是真正的生油量，从勘探的目的来看，我们所要找寻的是从生油岩中排出、并有条件聚集保存下来的那一部分液态烃，而不是残存在生油岩中根本无法开采利用的残留沥青。所以用这种方法所计算的资源量是不合理的，是没有实际意义的。作者认为，只有以排出量为基础进行的资源评价才是有意义的。

矿物物理学和矿物材料

陈 丰

(一)

六十年代以来，矿物学研究发生了重大的变化。矿物学与物理、化学、材料科学相结合，形成了新的边缘学科——矿物物理学。矿物物理学不仅改变了古老的矿物学面貌，也影响到岩石学、矿床学、地球化学和地球物理等学科。

目前，矿物物理学主要研究内容有：矿物的化学键理论；矿物实验方法，特别是矿物谱学；矿物的物性和化性；矿物能量状态；实际矿物晶体和高压矿物物理学。

矿物物理学的主要理论是量子理论。它是廿世纪自然科学中最富有成就的理论，是人类

通向微观世界的钥匙。它渗透到其他学科领域，已经形成了固体物理学、量子化学和量子生物学，发现了半导体、激光，使工业结构和社会经济发生了根本性的变化。矿物物理学就是在这样的背景下出现的，它是量子理论在地学中的生长点。在矿物物理学中主要应用量子理论讨论矿物的键性问题，统称化学键理论，包括晶体场理论（以及配位场理论）、分子轨道理论和能带理论。这些理论都是应用近似方法和数学处理来研究矿物的微观状态，以解决矿物形成和变化中的本质问题。今天，矿物学者已开始从电子相互作用（以及电子与核的相互作用）来认识矿物，研究矿物结构的形成、类质同象、有序-无序等问题的实质，探讨矿物物性、化性的根本起因，追溯矿物成因，并开始预测不同条件下矿物结构和性能。

矿物物理学的实验方法是非常多样化的。当代矿物学者应用了物理、化学和材料科学中所使用的各种仪器。矿物的结构、组分和性能研究都使用了大量先进的仪器。四圆X光衍射仪广泛应用，开始采用同步加速器辐射作为X光光源。矿物组分测定除了化学分析之外，物理分析仪器发挥了重要的作用，电子探针、离子探针、质子探针、电镜、质谱，以及中子活化已成为矿物研究中最有力的手段。电镜除了研究形态、组成和结构外，目前已广泛用于矿物缺陷的研究。

矿物谱学是当前矿物学研究中十分活跃的领域。谱学测定的许多结果，可以和化学键理论相互印证，从而阐明矿物中某些离子的电子结构（或核能级结构），进而研究矿物的特征。矿物谱学是研究矿物在电磁波辐照下（有外场或无外场）所出现的吸收或发射现象。它涉及从 γ 射线、X光、紫外、可见、红外、微波到无线电波的整个电磁波范围。谱学的方法很多，大致分为矿物光谱学、矿物波谱学和矿物能谱学。矿物光谱学研究处于紫外—可见—红外区的谱，有吸光谱、发光光谱、发射光谱、红外光谱和喇曼光谱等。矿物波谱学是五十年代以后发展起来的，其频段在无线电波和微波区，包括顺磁共振、核磁共振等。波谱学有其固定含义，它和“谱学”的外文名称也不相同。因此，把矿物谱学称为“矿物波谱学”是不合适的。矿物能谱学主要研究矿物与X光和远紫外光的相互作用，以能谱仪作为主要探测器，包括X光吸收谱、X光发射谱、光电子能谱和俄歇能谱等。矿物谱学分类的方式很多，例如常用的磁共振谱，是指穆斯鲍尔谱、顺磁共振和核磁共振等。下面我们将简略地加以阐述。

γ 射线与矿物中的原子核相互作用，产生无共振吸收，即为穆斯鲍尔谱。X光通过矿物后，将离子的内层电子击出，吸收某个能量的X光，这称为X光吸收谱。X光发射谱类似于X光荧光发射光谱，但要求其谱线的分辨能力更高。光电子能谱可通过测定击出的电子（即光电子）的动能，计算其所处能级的能量（结合能）。其结果和X光发射谱、俄歇电子谱一样，均可用分子轨道理论计算来解释。光电子能谱是一种表面分析手段，分析深度仅50—100Å。俄歇电子能谱是在内层电子被击出后，外层电子向内层的低能级空穴跃迁时，把多余的能量交给同能级的另一电子，使这个电子飞出晶体之外，后一电子称为俄歇电子。从俄歇电子动能可以得出矿物的能级。俄歇能谱也是一种化学分析手段，特别适用于原子序数小于11的轻原子的测定。

吸收光谱主要研究矿物中离子（或原子）的壳层（价带）的电子的跃迁过程，它联系着这些离子的电子能级。反射光谱也是研究外层的价电子跃迁的手段。它用来研究不透明矿物，而吸收光谱则以研究透明矿物为主。反射光谱是从矿物反射率测定发展起来的，它反映了能带中不同能级的电子跃迁，需要用能带理论来解释。发射光谱是矿物紫外发光的进一步发展。

发光是激发态电子跃迁回基态时以光子形式所释放多余的能量。发光除了作为矿物研究手段之外，已开始用于砂卡岩矿床和石油的找矿工作。红外光谱和喇曼光谱是矿物中分子团振动或转动的手段。其中喇曼光谱由于使用了激光，可以测定很小范围（微米级）的矿物或包裹体。所以有人称之为喇曼微探针。

顺磁共振研究矿物中具不配对电子的离子的基态，在外磁场下的分裂特征。核磁共振研究的是具有核自旋的元素，在外加磁场中形成的基态亚能级间的跃迁。过去核磁共振主要用于矿物中水的存在状态的研究，近年来用于研究硅酸盐矿物中Li、Na、Al等元素的晶格特征。

矿物谱学有下列用途：（1）研究矿物中离子的价态、配位、局域对称、晶格动力学特征。（2）红外光谱和喇曼光谱已成为常用的矿物鉴别手段。而光电能谱和俄歇能谱等是主要的组分分析工具。（3）矿物谱学研究大大推动了成因矿物学，深入地探索标型特征的本质原因。如利用顺磁共振和吸收光谱等来区别含金与不含金的石英脉；钨、钼矿床中萤石的吸收光谱的差别；不同花岗岩中Si-Al有序度的变化；脉金和砂金中表面含银量的不同等等。

矿物物理性质的研究联系着找寻新型材料、矿物资源的选矿加工以及地球深部地质作用和地球物理探测结果的解释。矿物的光学性质和矿物谱学研究密切相关，由于激光技术的发展，它提供了许多激光发射材料、光电材料、倍频和变频材料。矿物的热学性质涉及晶格动力学理论和热力学理论。矿物的热导、热膨胀等性能研究都和材料研究休戚相关，例如，具有最高热导率的固体是Ⅱ型金刚石，它已用于半导体、激光、雷达与卫星。矿物声学性能涉及地震波探测解释，近年测试方法进展很快，使用了布里渊散射、激波方法等。矿物力学性能，特别是矿物的塑性变形的理论和实验技术都有较大的发展，建立了常见矿物（如石英、主要硅酸盐矿物和某些硫化物）的塑性变形的各种参数。这对于地幔流变、固态变质、某些矿床形成、糜棱岩化、碎裂岩化、古断层活动特征的复原等都具有重要意义。矿物电学性质随着物探和深部地质研究的发展，也有相当大的进展。相对而言，矿物磁学性质研究进展较小，影响面也比较窄。矿物表面性质研究近年有很大的发展，主要是吸附、催化等方面的研究。在这个领域，矿物谱学技术也发挥了相当大的作用。

矿物能量状态研究一直是矿物学的重要课题。它包含矿物的晶格能、相变、出溶、有序与晶体生长等方面的能量状态及其变化；这些方面影响矿物结构的形成，也控制着矿物某些性能。近年，在各领域中都有所进展。其中影响最大的是结合相平衡的热力学工作，提供了不同条件下的矿物相图（或拓扑相图），研究元素和同位素在矿物间、矿物和熔体间的分配，建立了地质温度计、地质压力计和地质速率计的理论 and 实验基础。同时，开始研究宏观体系和微观体系的相互关系。已报导利用矿物红外光谱、喇曼光谱和非弹性中子散射所测定的微观数据，推断热力学参数，计算高温高压下的相图。另外，利用 Fe^{2+} 的晶体场稳定能考虑矿物的晶格能的改正，并用于研究矿物的共生顺序。

实际矿物晶体研究的目标是偏离矿物的理想结构的种种特征。例如，缺陷、有序、调制等。它们提供了矿物的生长、冷却、变化等多方面的信息。实际矿物晶体往往存在有各种缺陷（空位、杂质、位错、层错等）。这些缺陷对矿物影响很大。例如，在不同的温度下，矿物中空位数目不同，高温空位增加；而空位又决定了矿物中的元素的扩散和迁移。在磁黄铁矿中有柱状排列的空位，造成其组成偏离化学计量的配比。矿物在受力时，产生大量的位

错。位错线的分布取决于矿物晶格特征以及温度条件，由此可以推断当时的受力状况。

实际矿物晶体中经常存在着离子有序问题。这与矿物的类质同象研究有联系。离子有序可用X光衍射和各种矿物谱学技术来测定，由于常与矿物成因条件有关，所以很受注意。

七十年代以来，电镜工作揭示了许多实际矿物中存在的结构有序现象，往往也和矿物中的缺陷密切相关。这在硅酸盐中研究得较多，并已找到几个到几十个单胞尺寸中的某些规律。电镜研究表明，硅氧四面体构造单元可以象积木一样堆垛起来，形成新的复杂组合，而堆垛的构造单元之间，常常存在各种缺陷。硅镁石族矿物间的无序堆垛是岛状硅酸盐中的例子。链状硅酸盐也形成极其复杂的堆垛，不仅出现单链、双链、叁链，还有多链，直到333链。层状硅酸盐的有序现象，过去称为多型或超结构，最近发现大量层状和链状结构单元，以I束的方式相联系，大量共存事实。这种情况，就好象矿物与岩石的关系：岩石是矿物的集合体；而今发现，在接近矿物单胞尺寸的范围里，矿物的构造单元也与岩石中一样堆垛起来，看来，这是矿物认识历史上的又一次、更加深化的循环。

实际矿物中这种构造单元的无序现象，以目前已知的情况判断，均属于矿物间的反应作用，它受矿物中的扩散作用所制约。

推动高压矿物物理学研究的主要动力是人类对地球深部知识的渴望以及地下核爆炸的研究。产生高压的手段可分静高压和动高压两种。前者目前可达1.7Mb，已接近地核和地幔的边界。还利用X光衍射、吸收光谱、红外光谱、喇曼光谱、穆斯鲍尔谱、布里渊散射等研究高压下矿物的相变和性能。

高压相变的矿物学研究主要集中于橄榄石、辉石、石榴石和尖晶石等族地幔的主要组分矿物。最近也研究了相当核压力下铁的行为。近年的研究表明，地球物理探测出的地球深部深约400公里处的不连续大致与橄榄石—尖晶石转变相当，而670公里处的不连续，尚未有相应的矿物相变。从目前情况看来，这个不连续现象是相变引起，还是来源于组分变化，尚难判定。

(二)

在矿物物理学、特别是矿物谱学的影响下，矿物材料工作取得相当大的进展。它在军工和民用的特殊无机新材料的研制上成果累累，解决了许多尖端材料，显示出极为广阔的前景。例如，卫星温控涂层的研制、航天飞机返回大气层时的防热片和激光工业的各种新型材料等。同时，矿物材料为建筑、化工、轻工、机械等领域提供了新材料、新工艺和新产品，扩大了矿物的利用范围，开拓了新的矿物资源，打开了以矿物物理、化学特性为基础的矿产综合利用的新途径。

目前，矿物材料的利用可以大致分为单晶和粉末两种。前者常以其特殊的功能为主，包括压电、焦电、铁电、光电、电光、磁光、声光、声电等。这样的材料在达到实用目的之后，往往转向人工合成，以保证产品的质量稳定和持续供应。近年来，这一领域中激光材料发展较快，已经发现了萤石、白钨矿、彩钼铅矿、氟钙铈钇矿（加加林矿）和氟磷灰石等固体发射材料；淡红银矿、浓红银矿和辰砂等激光调制材料；方解石激光偏转材料；萤石和方钠石等光色存贮材料。这些新型材料的开发，促进了激光工业的发展。粉末形态的矿物材料

比单晶矿物应用更为广泛，它涉及多方面矿物性能的利用。例如，耐高温、隔热、隔音、热导、热膨胀、热辐射、高强、耐磨、耐酸碱、密封、吸附、离子交换等等。这些材料近年来发展极快，如建筑工业中高强、轻质、隔热、隔音、装饰材料；化工部门有机制品的补强、防火、抗老化、催化、离子交换、吸附、净化；轻工业中各种配料、助剂；钢铁工业中的球团用料、高铝耐火材料、铸造用材等。这些材料不仅有矿物，也包括一部分岩石；可以单独使用，也可以制成复合材料；可以是各种形状，也可以是涂层；特别是涂层，近年进展很快，例如耐高温涂层、隔热涂层、防火涂层等。

总之，矿物材料研制既解决了许多急缺的材料，保证新技术的发展，又由于用材简单，价格低廉而降低了产品和工程造价，节约了能源。可以确信，随着我国四个现代化进程的加快，特别是城乡改革的开展，我国矿物材料必将出现飞速的发展，从而向矿物物理学和矿物谱学研究提出了在质与量两个方面更高的要求。

江苏六合坡缕石的穆斯鲍尔谱研究

仇吉军 严仲良 刘维国 王治明

(成都地质学院)

坡缕石是一种含水的镁铝硅酸盐。理论分子是 $Mg_5 [Si_8O_{20}] \cdot (OH)_2 \cdot (OH_2)_4 \cdot 4H_2O$ 。由于它们的单晶X-射线和电子衍射资料太少，其精细结构一直是令人感兴趣的课题。

本实验样品产自江苏六合小盘山，呈粘土状，与蒙脱石等共生，属于沉积成因。其含铁量是国内坡缕石中较高的，适合进行穆斯鲍尔谱研究。样品经过弱酸长时间处理，除去共生的蒙脱石和碳酸盐杂质。经X-射线分析没有发现蒙脱石相。用阴离子电价平衡法计算得到的晶体化学式是： $(K_{0.10}Ca_{0.15}Mg_{1.13}Al_{1.09}Fe^{3+}_{0.74})_{3.95} [(Si_{7.67}Ti_{0.17}Al_{0.16})_8O_{20}] \cdot (OH)_2 (OH_2)_4 \cdot 4H_2O$ 。

1. 实验得到的穆斯鲍尔谱为一对较对称的顺磁双峰宽度较大。700℃以下的谱拟合出两对四极双峰，其线宽和 X^2 值都是合理的。

坡缕石属层一链过渡型结构。类似角闪石的硅氧四面体双链；沿一方向延伸；而垂直这个方向又类似于2:1型的层状硅酸盐。所以坡缕石在层链之间的归属还是有争议的问题。有些学者把它们类角闪石链的延伸方向定为 α ，我们也采用这种定向法。在坡缕石中类闪石链的阳离子八面体层有五个可能的阳离子位置。这些位置共分三种，都是六次配位的。链内部的是与层状硅酸盐类似的一个 M_1 和两个 M_2 位。前者八面体畸变略大，还有两个位于链边缘的E位。E位的阳离子与四个氧和两个配位水(OH_2)结合，这个八面体畸变最小。八面体层的阳离子主要是 Mg^{2+} 、 Al^{3+} 和 Fe^{3+} 。类闪石链之间的较大空洞由配位水和沸石水充填，可能还有少量阳离子进入。