对非均质矿物实测主折光率的检验和改正

刘 智 星

(云南省地质研究所，昆明)

摘　　要

本文根据对非均质矿物光率体的深入研究，得出了非均质矿物实测主折光率的基本误差方程，并对该方程的解进行了全面的论述，进而提出了对非均质矿物实测主折光率加以检验和改正的方法.

非均质矿物的主折光率是很重要的晶体光学数据. 长期以来，人们为测定非均质矿物的主折光率进行了不懈的工作，发表了不计其数的测定结果. 但某些实测数据的误差表面上看起来似乎不大，而实际上却相当严重并且不容易察觉，甚至国际矿物学会新矿物和矿物名称审查委员会认可的非均质矿物的实测主折光率也有这种情况. 此外，由于实测主折光率的精度有限，不仅难以查明非均质矿物主折光率的微细差异和变化而且还会出现种种矛盾. 这些都是在对非均质矿物的光学研究工作中长期面临而又不容忽视的问题.

作者在深入研究非均质矿物光率体的基础上，提出了对非均质矿物实测主折光率进行检验和改正的方法，可鉴别它们的可靠性并提高其精度，有助于研究非均质矿物主折光率的微细差异和变化，也可解决二轴晶矿物的实测光轴角和根据其实测主折光率算得的光轴角不符所存在的矛盾.

一、二轴晶的光轴角和主折光率的关系

光轴角 $2V$ 和主折光率 N_g，N_m，N_p 是二轴晶的重要光学数据. 根据二轴晶的光率体，我们有

$$\mathrm{tg}^2\alpha = \frac{N_g^2(N_m^2 - N_p^2)}{N_p^2(N_g^2 - N_m^2)}. \tag{1}$$

其中，对于正二轴晶，α 代表半光轴角 V；对于负二轴晶，α 代表半光轴角的余角 $90°-V$.

文献 [1] 曾指出："α 角随 N_g，N_p 减小而增大，随 N_m 增大而增大. 因此，我们可以在 N_g，N_m，N_p 的一定允许范围内，根据 N_g 和 N_p 的最大值以及 N_m 的最小值由 (1) 式算得 α 的最小值；根据 N_g 和 N_p 的最小值以及 N_m 的最大值由 (1) 式算得 α 的最大值，从而确定和

本文 1985 年 3 月 18 日收到，1985 年 10 月 2o 日收到修改稿.

N_g，N_m，N_p 的一定允许范围相适应的光轴角的允许范围."

由于测定中的误差，二轴晶的实测光轴角往往与根据其实测主折光率而算得的光轴角不符. 这种不符实际上是一种关于测定误差的重要信息，值得加以重视.

作者[1]曾由实测主折光率的允许范围计算光轴角的允许范围，再根据实测光轴角是否在算得的光轴角的允许范围之内而鉴别实测主折光率的可靠性. 本文将进一步提出根据实测的半光轴角 V(对正二轴晶)或其余角 $90°-V$(对负二轴晶)对实测主折光率 N_g，N_m，N_p 的可靠性进行检验并加以改正的方法. 必须指出，实测半光轴角应力求准确可靠，否则应根据其允许范围上、下限，或者用本文对一轴晶所述的方法对二轴晶的实测主折光率进行检验和改正.

由 (1) 式可见，α 是 N_g，N_m，N_p 的三元函数. 当 α 一定时，N_g，N_m，N_p 有多解性. 而且，一般来说，实测 N_g，N_m，N_p 的误差可能彼此并不相等. 为便于数学推导，我们先假定三者的误差相等，称为基本误差. 求出此一基本误差之后，再得出一切其它可能误差的表达式，使问题得到完满的解决.

二、二轴晶实测主折光率的基本误差

1. 设二轴晶的实测半光轴角 (正二轴晶) 或其余角 (负二轴晶) 为 θ，实测主折光率为 N_g，N_m，N_p，而且其误差皆为 e (即基本误差). 考虑 α 与 N_g，N_m，N_p 的函数关系的增、减性，将主折光率分别取为 N_g+e，N_m-e，N_p+e. 以 N_g+e，N_m-e，N_p+e 分别代换 (1) 式中的 N_g，N_m，N_p 而算得的 α 角必然与 θ 相等. 因此，我们有

$$\mathrm{tg}^2\theta=\frac{(N_g+e)^2[(N_m-e)^2-(N_p+e)^2]}{(N_p+e)^2[(N_g+e)^2-(N_m-e)^2]}.$$

由此得 e 的实系数三次方程如下:

$$\begin{aligned}&2[(N_m+N_p)+(N_g+N_m)\mathrm{tg}^2\theta]e^3+[(N_m+N_p)(4N_g-N_m+N_p)\\&\quad+(N_g+N_m)(N_g-N_m+4N_p)\mathrm{tg}^2\theta]e^2+2(N_g-N_m+N_p)[N_g(N_m\\&\quad+N_p)+N_p(N_g+N_m)\mathrm{tg}^2\theta]e-[N_g^2(N_m^2-N_p^2)-N_p^2(N_g^2-N_m^2)\mathrm{tg}^2\theta]\\&=0,\end{aligned}\tag{2}$$

此方程可称为二轴晶实测主折光率的基本误差方程.

2. 为求方程 (2) 的解[2]，将其化为

$$E^3+pE+q=0,\tag{3}$$

其中，

$$E=e+\frac{(N_m+N_p)(4N_g-N_m+N_p)+(N_g+N_m)(N_g-N_m+4N_p)\mathrm{tg}^2\theta}{6[(N_m+N_p)+(N_g+N_m)\mathrm{tg}^2\theta]},$$

$$p=-\frac{[(N_m+N_p)(2N_g+N_m-N_p)+(N_g+N_m)(-N_g+N_m+2N_p)\mathrm{tg}^2\theta]^2}{12[(N_m+N_p)+(N_g+N_m)\mathrm{tg}^2\theta]^2},$$

$$\begin{aligned}q=-\{&[(N_m+N_p)(2N_g+N_m-N_p)+(N_g+N_m)(-N_g+N_m+2N_p)\mathrm{tg}^2\theta]^3\\&+54[(N_g+N_m)(N_m+N_p)(N_g-N_p)\,\mathrm{tg}\,\theta]^2(1+\mathrm{tg}^2\theta)\}/\\&\{108[(N_m+N_p)+(N_g+N_m)\mathrm{tg}^2\theta]^3\},\end{aligned}$$

由于 $\frac{q^2}{4}+\frac{p^3}{27}>0$，故方程 (3) 有唯一的实数根

$$E=\sqrt[3]{-\frac{q}{2}+\sqrt{\frac{q^2}{4}+\frac{p^3}{27}}}+\sqrt[3]{-\frac{q}{2}-\sqrt{\frac{q^2}{4}+\frac{p^3}{27}}},$$

因此，方程 (2) 也只有一个实数根

$$e=E-\frac{(N_m+N_p)(4N_g-N_m+N_p)+(N_g+N_m)(N_g-N_m+4N_p)\mathrm{tg}^2\theta}{6[(N_m+N_p)+(N_g+N_m)\mathrm{tg}^2\theta]}.$$

3. 在方程 (2) 中，三次项、二次项及一次项的系数皆大于零，常数项有以下三种情况:

1) $\theta=\alpha$，即实测半光轴角（或其余角）与根据实测 N_g，N_m，N_p 按 (1) 式计算的 α 角相等，则

$$\mathrm{tg}^2\theta=\mathrm{tg}^2\alpha=\frac{N_g^2(N_m^2-N_p^2)}{N_p^2(N_g^2-N_m^2)},$$

$$N_g^2(N_m^2-N_p^2)-N_p^2(N_g^2-N_m^2)\mathrm{tg}^2\theta=0,$$

即常数项等于零，故方程 (2) 有唯一的实数根 $e=0$.

2) $\theta<\alpha$，则

$$\mathrm{tg}^2\theta<\mathrm{tg}^2\alpha=\frac{N_g^2(N_m^2-N_p^2)}{N_p^2(N_g^2-N_m^2)},$$

$$N_g^2(N_m^2-N_p^2)-N_p^2(N_g^2-N_2^m)\mathrm{tg}^2\theta>0,$$

即常数项小于零. 方程 (2) 的系数符号改变一次，必有正实数根. 因此其唯一的实数根 $e>0$.

3) $\theta>\alpha$，则

$$\mathrm{tg}^2\theta>\mathrm{tg}^2\alpha=\frac{N_g^2(N_m^2-N_p^2)}{N_p^2(N_g^2-N_m^2)},$$

$$N_g^2(N_m^2-N_p^2)-N_p^2(N_g^2-N_m^2)\mathrm{tg}^2\theta<0,$$

即常数项大于零. 方程 (2) 的系数不变号，故无正实数根，其唯一的实数根 $e<0$.

4. 将求出的实数根 e 与实测主折光率的允许误差加以比较. 如果前者的绝对值大于后者的绝对值，则说明实测主折光率不可靠，应重新测定. 反之，则可将它们分别改正为 N_g+e，N_m-e，N_p+e.

三、二轴晶实测主折光率的其它可能误差

在求出基本误差 e 并对实测主折光率加以改正的基础上，可以得出实测主折光率在其允许范围内的其它可能误差的表达式.

对于 $F=\frac{(N_g+e)^2[(N_m-e)^2-(N_p+e)^2]}{(N_p+e)^2[(N_g+e)^2-(N_m-e)^2]}$，我们有

$$dF=F'_{(N_g+e)}d(N_g+e)+F'_{(N_m-e)}d(N_m-e)+F'_{(N_p+e)}d(N_p+e),$$

其中，

$$F'_{(N_g+e)}=-\frac{2(N_g+e)(N_m-e)^2[(N_m-e)^2-(N_p+e)^2]}{(N_p+e)^2[(N_g+e)^2-(N_m-e)^2]^2},$$

$$F'_{(N_m-e)}=\frac{2(N_m-e)(N_g+e)^2[(N_g+e)^2-(N_p+e)^2]}{(N_p+e)^2[(N_g+e)^2-(N_m-e)^2]^2},$$

$$F'_{(N_p+e)}=-\frac{2(N_g+e)^2(N_m-e)^2}{(N_p+e)^3[(N_g+e)^2-(N_m-e)^2]}.$$

令 $dF=0$，得

$$d(N_m-e)=\frac{(N_m-e)[(N_m-e)^2-(N_p+e)^2]}{(N_g+e)[(N_g+e)^2-(N_p+e)^2]}d(N_g+e)+\frac{(N_m-e)[(N_g+e)^2-(N_m-e)^2]}{(N_p+e)[(N_g+e)^2-(N_p+e)^2]}d(N_p+e). \tag{4}$$

在实测 N_g，N_p 的允许范围内，取 $d(N_g+e)$ 和 $d(N_p+e)$，代入 (4) 式并使所得的 $d(N_m-e)$ 在实测 N_m 的允许范围之内. 据此即可在原改正值的基础上求得实测 N_g，N_m，N_p 的一切其它改正值，即

$$(N_g+e)+d(N_g+e)=N_g+(e+d(N_g+e)),$$
$$(N_m-e)+d(N_m-e)=N_m-(e-d(N_m-e)),$$
$$(N_p+e)+d(N_p+e)=N_p+(e+d(N_p+e)).$$

根据这些改正值，按 (1) 式算得的 α 角都必然等于实测半光轴角或其余角.

$e+d(N_g+e)$，$e-d(N_m-e)$，$e+d(N_p+e)$ 可代表实测 N_g，N_m，N_p 的一切误差. 由于 (4) 式中 $d(N_g+e)$ 和 $d(N_p+e)$ 的系数皆大于零，故当 $d(N_g+e)$ 和 $d(N_p+e)$ 都大于零时，$d(N_m-e)$ 也大于零；当 $d(N_g+e)$ 和 $d(N_p+e)$ 都小于零时，$d(N_m-e)$ 也小于零. 因而，$e+d(N_g+e)$，$e-d(N_m-e)$，$e+d(N_p+e)$ 不可能都小于或都大于 e. 当 $d(N_g+e)$，$d(N_p+e)$ 中一个大于零，另一个小于零时，也有相同的结论. 由此可见，如果有的实测主折光率的误差小于或大于基本误差，则必有其它的实测主折光率的误差大于或小于基本误差.

四、实　例

作者已编出用上述方法对二轴晶实测主折光率进行检验和改正的电子计算机程序. 依次输入实测 N_g，N_m，N_p，半光轴角及允许误差 5 个数据，就可以很方便地得到检验和改正的结果.

现将对一些二轴晶的实测主折光率的检验和改正的结果列入表 1 中. 从表 1 可以看出:

1. Ushkovite 的实测主折光率的基本误差 e 高达 -0.00830266974，大大超过了允许误差范围. 此外，根据实测主折光率及其误差范围算得半光轴角的允许范围是 34—40°，实测半光轴角不在此范围内. 由此可见其实测主折光率很不可靠，应重新测定. 其余矿物的实测主折光率的基本误差都在允许范围之内，除 Whiteite 的 e 值接近 0.002 之外，一般都在 0.001 以下，实测主折光率很难达到这样高的精度. 顺便指出，Terskite 的实测 $N_g=1.584$，$N_m=1.582$，仅相差 0.002，而其误差范围皆为 ± 0.002，以致二者有很大的重叠范围. 这样的数据显然是很成问题的.

2. 正二轴晶 Whiteite 的实测半光轴角有 5° 的变化，反映出其主折光率有约 0.0003 的变

表 1 二轴晶实测主折光率的检验和改正

矿物名称	实测						W	e	基本改正值			S $(10^{-7})°$	T	U	$T+U$
	N_g	N_m	N_p	误差	光性	半轴光角			N_g+e	N_m-e	N_p+e				
Ushkovite[3]	1.670	1.637	1.584	±0.002	−	25°	−12.2°	−0.008302670							
Terskite[3]	1.584	1.582	1.576	±0.002	−	26.5	−3.4	−0.000198773	1.583801227	1.582198773	1.575801227	6.1	0.7984789588	0.2015272058	1.000006165
Lun'okite[3]	1.616	1.608	1.603		+	35	3.5	0.000378906	1.616378906	1.607621094	1.603378906	−10.3	0.3236712653	0.6763502275	1.000021493
Lithosite[3]	1.527	1.513	1.510		+	23.5	1.5	0.000167457	1.527167457	1.512832543	1.510167457	3.6	0.1545652883	0.8454595276	1.000024816
Whiteite[4]	1.590	1.585	1.580		+	20	25.1	0.001919973	1.591919973	1.583080027	1.581919973	0.05	0.1150398437	0.8849662596	1.000006103
					+	25	20.1	0.001613881	1.591613881	1.583386119	1.581613881	1.4	0.1758506062	0.8241580766	1.000008683
正长石[5]	1.526	1.524	1.518		−	34.5	4.6	0.000290145	1.526290145	1.523709855	1.518290145	−5.1	0.6757451752	0.3242638796	1.000009055
					−	36	6.1	0.000389105	1.526389105	1.523610895	1.518389105	0.6	0.650941148	0.3490682437	1.000009392
钙沸石[5]	1.519	1.519	1.512		−	18	18	0.000336321	1.519336321	1.518663679	1.512336321	−4.9	0.9033076899	0.09669509017	1.00000278
鳞石英[5]	1.473	1.469	1.469		+	17.5	−17.5	−0.000180178	1.472819822	1.469180178	1.468819822	−1.9	0.08975526197	0.9102456471	1.000000909
模来石[5]	1.654	1.644	1.642		+	10	14.2	0.000820983	1.654820983	1.643179017	1.642820983	2.3	0.02952174772	0.9704805495	1.000002297
天青石[5]	1.631	1.624	1.622		+	25.5	2.7	0.000171593	1.631171593	1.623828407	1.622171593	4.5	0.182847981	0.8171589118	1.000006893

注：1. 前 5 种矿物是国际矿物学会新矿物与矿物名称审查委员会近几年来认可的新矿物.
2. W，S 分别代表按实测、改正后的主折光率计算的角度减实测半光轴角(正二轴晶)或其余角(负二轴晶).
3. e 代表实测主折光率的基本误差.
4. T，U 分别代表(4)式中 $d(N_g+e)$，$d(N_p+e)$ 的系数.

化，N_g 和 N_p 随实测半光轴角增大而减小，N_m 则随实测半光轴角的增大而增大．负二轴晶正长石的实测半光轴角有 1.5° 的变化，反映出其主折光率有约 0.0001 的变化，变化趋势与前者相反．由此可见，对实测主折光率相同的同一种二轴晶矿物，可以根据其实测光轴角的变化而研究其主折光率的微细变化．

3. 从其实测主折光率来看，二轴晶钙沸石和鳞石英都貌似一轴晶．经改正后，前者的 N_g 和 N_m 有约 0.0007 的差异；后者的 N_m 和 N_p 有约 0.0004 的差异，使这种矛盾现象得到了合理的解释．

4. 所有矿物的 $T+U$ 值都非常接近于 1．因此，在允许范围内，分别对其三个实测主折光率的基本改正值 N_g+e，N_m-e，N_p+e 作等量的增加或减小，都可以很方便地得到另一组可能的改正值．

综上所述，用这种方法可以在实测主折光率的基础上得到非常准确的主折光率值，有助于研究它们的微细变化和差异．由此可见，二轴晶光轴角的准确测定具有非同寻常的重要意义．

顺便指出，人们有时对一些二轴晶的光轴角和三个主折光率这四个数据只测出其中的三个，并在不考虑测定误差的情况下据以算出另一数据．显然，这样算出的数据不仅本身很不可靠，而且还可掩盖了另外三个实测数据的误差．因而，这种作法是不可取的．

五、引伸到一轴晶

对一轴晶矿物，如果除测定主折光率 N_0 和 N_e 之外，还顺便测出与光率体短半轴（正一轴晶的 N_0 轴，负一轴晶的 N_e 轴）成某一夹角的方向的折光率 N'_e，则二轴晶实测主折光率的基本误差方程 (2) 和 (4) 式也适用于一轴晶．

1. 对于正一轴晶：N_e，N'_e，N_0 分别相当于方程 (2) 和 (4) 式中的 N_g，N_m，N_p；

2. 对于负一轴晶：N_0，N'_e，N_e 分别相当于方程 (2) 和 (4) 式中的 N_g，N_m，N_p．

将一轴晶的实测最大折光率、中间折光率、最小折光率及后二者之间的夹角分别代换方程 (2) 中的 N_g，N_m，N_p 及 θ，即可求出基本误差 e，并据以对实测主折光率进行检验和改正，进而按 (4) 式得出它们的其它改正值．

因此，方程 (2) 也可以称为非均质矿物实测主折光率的基本误差方程．

值得指出，当二轴晶的光轴角难以准确测定时，也可以仿此而行．在 N_gN_p 主切面上测出 N_g，N_p 及与 N_p 成某一夹角的 N'_g，并据以对实测的 N_g 和 N_p 进行检验和改正．然后在 N_gN_m 切面上测定 N_m 及与 N_m 成某一夹角的 N'_m，并据以对实测的 N_g 和 N_m 进行检验和改正．对实测的 N_g 进行了两次检验和改正，应彼此核对．得出实测主折光率的基本改正值之后，可据以算出准确可靠的光轴角．

人们在对非均质矿物的光学研究工作中，都很重视主折光率（对二轴晶而言，还有光轴角）的测定．但往往只限于孤立地测出各个数据，而忽略了对它们之间的内在关系的分析研究．加以测定精度有限，而且有时还会存在难以觉察的严重误差．因而在人们提供的非均质矿物的主折光率中，往往具有不少的问题，不利于对它们进行较深入的研究．作者希望本文能够扭转这种局面，把对非均质矿物主折光率的研究工作引向一个新的水平．

参 考 文 献

[1] 刘智星，矿物学报，1984，3：206—212.
[2] C. C. 麦克杜菲，方程论，云南人民出版社，1980.
[3] Dunn, Pete. J. et al., *Amer. Mineral.*, 69(1984), 210—213.
[4] Fleischer, M. et al., *ibid.*, **64**(1979), 464—467.
[5] Kerr, Paul, F., *Optical Mineralogy* (4th edition), McGraw-Hill Inc., **1977**.