

金属的理化性质和地壳丰度的相互关系初步研究

刘静¹, 穆云松¹, 王颖^{1,2}, 陈程^{1,3}, 朱元荣¹, 吴丰昌^{1*}

1. 中国环境科学研究院 环境基准与风险评估国家重点实验室, 北京 100012;
2. 北京师范大学水科学研究院, 北京 100876; 3. 河海大学 环境学院, 南京 210098

摘要: 本文旨在探讨金属元素的理化性质和其地壳丰度(CA)的分布规律。利用相关性分析和集对分析研究了金属的理化性质和其地壳丰度的关系。结果表明, 金属元素 21 种理化参数与地壳丰度之间均有不同程度的相关性。其中 10 种理化参数和地壳丰度显著相关 ($P \leq 0.05$), 包括共价指数 ($X_m^2 r$)、原子密度 (ρ)、原子序数 (AN)、原子量 (AW)、有效核电荷 (Z^*)、电负性 (X_m)、软指数 (σ_p)、电子亲和能 (EA)、极化力 (Z^{*2}/r) 和电势 (ΔE_0)。集对分析进一步表明: $X_m^2 r, \rho, Z^*$ 和 X_m 与 $\log$ (CA) 之间趋同性较好, 支持了相关分析的结论。研究结果暗示金属的理化性质与地壳丰度之间存在密切的内在关系, 这为地球演化成因、元素丰度演变规律提供了新证据, 对岩石、矿产资源开发和利用等具有重要意义。

关键词: 环境地球化学; 定量结构活性相关; 线性回归; 集对分析

中图分类号: X13 文章编号: 1007-2802(2015)02-0419-07 doi: 10.3969/j.issn.1007-2802.2015.02.026

Preliminary Study on the Relationship between Physicochemical Properties of Metals and Their Crustal Abundances

LIU Jing¹, MU Yun-song¹, WANG Ying^{1,2}, CHEN Cheng^{1,3}, ZHU Yuan-rong¹, WU Feng-chang^{1*}

1. State Key Laboratory of Environmental Criteria and Risk Assessment, Chinese Research Academy of Environmental Sciences, Beijing 100012, China; 2. College of Water Science, Beijing Normal University, Beijing 100876, China; 3. College of Environment, Hohai University, Nanjing 210098, China

Abstract: The study was aimed to analyze the relationship between physicochemical properties of metals and their crustal abundances. The results showed that 10 out of 21 physicochemical properties of metals were significantly related with the logarithm of their crustal abundances, ranking in the following order according to the size of the correlation coefficient (R^2): covalent-bonding index ($X_m^2 r$), atom density (ρ), atomic number (AN), atom weight (AW), efficient nuclear charges (Z^*), electronegativity (X_m), softness index (σ_p), electron affinities (EA), polarization force (Z^{*2}/r) and electrochemical potential (ΔE_0). The relationship was further proved by the set pair analysis. It was indicated that the physicochemical properties of metals were closely related with their crustal abundances. The study is helpful to know more about the Earth evolution and elements and to make best use of the rock and mineral resources.

Key words: environmental geochemistry; quantitative structure-activity relationships; liner regression; set pair analysis

化学元素是自然界中一切物质的构成基础, 化学元素的地壳丰度可为定量阐述地球物质的化学演化、行为, 甚至探索地球起源问题提供基础数据。元素的丰度与其分散和成相之间关系密切, 制约着元素在地球环境中的分配 (隋延辉和戚长谋, 2005)。元素在周期表中的位置及其原子的结构与

元素丰度存在着一定关系 (王素贤等, 1996)。恒星核合成理论解释了元素的形成过程, 为银河系中各种化学元素的丰度变化规律提供了依据 (张素华和徐一仁, 1987; 胡中为, 1991; 张华伟和赵刚, 2000)。根据岩石中元素的丰度比值推测出早期大陆地壳的形成 (Sylvester *et al.*, 1997), 发现人体内和地壳中

收稿日期: 2014-02-27 收到, 2014-05-04 改回

基金项目: 国家重点基础研究发展计划项目 (41261140337); 国家自然科学基金项目 (40973090)

第一作者简介: 刘静 (1987-), 女, 硕士研究生, 研究方向: 环境基准. E-mail: liujing2007879@126.com.

* 通讯作者简介: 吴丰昌 (1965-), 男, 研究员, 博导, 研究方向: 湖泊有机质环境地球化学. E-mail: wufengchang@vip.skleg.cn.

元素的丰度有相同的变化趋势 (Hamilton *et al.*, 1972)。戚长谋等 (2000) 创新性地将元素“质的属性”考虑到丰度的研究中来, 提出了“元素状态丰度”的概念, 有助于对元素地球化学行为的认识和对特定价态元素的资源利用。然而, 有关元素地壳丰度的影响因素, 比如其和理化性质关系的研究还很少见。原子序数 (AN)、原子量 (AW)、密度 (ρ)、熔点 (MP)、沸点 (BP)、原子半径 (AR)、氧化数 (ON)、离子电荷 (Z)、有效核电荷 (Z^*)、共价半径 (R)、离子半径 (r)、电负性 (X_m)、共价指数 ($X_m^2 r$)、离子指数 (Z^2/r)、极化力 (Z^{*2}/r)、标准电极电势 (E_0)、电化学势 (ΔE_0)、离子势 (Φ)、电离势 (IP)、硬度 (harness)、电离能 (IE)、软指数 (σ_p)、电子亲和势 (EA)、第一水解常数 ($|\log K_{OH}|$)、电子构型等均是描述金属理化性质的重要参数。

从 20 世纪初开始, 大量研究涉及金属的理化性质与其生化活性 (Biesinger and Christensen, 1972; Jacobson and Turner, 1980; Zhou *et al.*, 2011) 以及毒性 (Jacobson *et al.*, 1983; Kaiser, 1985; Turner *et al.*, 1987; Khangarot and Ray, 1989; McCloskey *et al.*, 1996; Tatara *et al.*, 1998; Wolterbeek and Verburg, 2001) 等的定性和定量关系。包括利用结构-活性相关模型 (Structure and Activity Relationships, SARs) 和定量结构-活性相关模型 (Quantitative Structure and Activity Relationships, QSARs) 进行物质理化性质和活性或毒性间的相关关系并揭示其内在机理的研究 (Tatara *et al.*, 1997; Ownby and Newman, 2003; Walker *et al.*, 2007; Mendes *et al.*, 2010; Zhou *et al.*, 2011; Meng *et al.*, 2013)。本文从地壳这样一个大的环境背景和元素形成之初至今的大时间尺度出发探讨了金属的理化性质与其背景含量即地壳丰度的关系, 揭示地壳丰度的决定因子并探讨其内在作用机理, 为更好地认识地球的产生和演化规律, 岩石和矿产资源的利用提供一定的科学依据。

1 研究方法

1.1 数据来源

选择 AN、AW、 ρ 、MP、BP、EC、TC、AR、 R 、 r 、 X_m 、 $X_m^2 r$ 、 Z^2/r 、 Z^{*2}/r 、 ΔE_0 、IP、 Φ 、IE、 σ_p 、EA 和 Z^* 21 种元素理化性质基本参数。其中, AN、AW、AR、 R 及 r 为元素大小的表征参数, ρ 、MP、BP、EC、TC 表征元素物理性质, 其余参数可表征元素的化学性质。

本文采用黎彤 (1976) 值作为地壳丰度基础数据。由于同周期元素具有相似的理化性质, 对于地

壳丰度特别接近的同周期元素只选择一种金属元素, 如镧系元素只选择 La。由于不同的金属元素理化参数具有不同的来源 (McCloskey *et al.*, 1996; Wolterbeek and Verburg, 2001; 张运陶和肖胜兰, 2004; 李梦龙等, 2008), 因此, 在理化参数收集整理过程中, 为了获得较好的一致性, 对数据的筛选和获取遵循以下原则: (1) 对于同一种理化参数采用同一个数据来源; (2) 通过公式计算可获得的理化参数, 比如极化力 (Z^{*2}/r), 依据其他基础数据计算而得; (3) 与氧化数密切相关的理化参数, 只保留金属元素最常见氧化价态下的理化参数值。

1.2 统计分析

1.2.1 相关性分析

运用 SPSS16.0 软件, 采取以下几个步骤对数据进行分析: (1) 将金属的地壳丰度和各理化参数的原数据进行线性回归分析; (2) 将地壳丰度的原数据对数处理后进行相关分析; (3) 挑选出具有显著相关关系的数组进行简单散点图分析, 观察地壳丰度随着理化参数值而变化的总趋势。

1.2.2 集对分析

利用集对分析方法进一步分析有显著相关关系的数组, 考察其变化总趋势的同异反关系程度即趋同性, 进一步对简单散点图分析的结果进行验证, 具体描述如下:

集对分析, 即对组成对子的两个集合的关系进行分析。例如集合 A 和集合 B 组成集对, 记为 H(A, B), 研究这样的集合 A 和 B 的关系就是分析集对 H(A, B) 的关系; 若 2 个集合具有某些相同特性, 称这两个集合具有同一性关系, 简称同关系; 若两个集合具有相反特性, 称有对立关系, 简称反关系; 若两个集合既不是同关系, 又不是反关系, 称此关系为差异性关系, 简称异关系。用“同异反关系度”来描述 H(A, B) 同异反关系 (identical-discrepancy-contrary) 的程度, 定义为:

$$\mu_{A-B} = \frac{S}{N} + \frac{F}{N}i + \frac{P}{N}j$$

式中: μ_{A-B} 为集合 A 和集合 B 的同异反关系度, 简称关系度; N 为集对具有的特性总数; S 为集对中 2 个集合共同具有的特征数; P 为集对中两个集合相互对立的特征数; $F = N - S - P$ 为集对中两个集合既不共同具有又不相互对立的特征数; S/N 、 F/N 和 P/N 分别称为同一度、差异度和对立度; i 和 j 具有双重含义: 为标记作用时, i 表示差异, j 表示对立; 为参数作用时, 可以取值, $-1 \leq i \leq 1$, j 一般取 -1 。采用模糊综合评价的方法判定集合 A 和集合 B 特征

的同异反关系。当同一度较大时,可以说两个集合的关系具有很好的同一性,当差异度较大时,说明两个集合的具有明显的差异性,当对立度较大时,说明两个集合具有明显的对立性。

2 结果与讨论

2.1 金属理化性质与地壳丰度的相关性

金属元素的地壳丰度和理化性质的结构参数值见表 1。21 种金属理化性质参数值与对数处理后

的地壳丰度的相关性分析表明:其中 10 种理化参数和其地壳丰度显著相关($P \leq 0.05$),其他理化性质和地壳丰度不具有显著相关性($P > 0.05$)。这 10 种理化参数是 AN、AW、 X_m 、EA、 ρ 、 σ_p 、 Z^* 、 Z^{*2}/r 、 ΔE_0 和 X_m^2r (其中 AN 和 AW 可作为一个理化性质处理,本文中只列出 AN),按照理化性质和地壳丰度值相关系数 R^2 降序排列,这 9 种显著相关的金属元素理化参数分别为 X_m^2r 、 ρ 、AN、 Z^* 、 X_m 、 σ_p 、EA、 Z^{*2}/r 和 ΔE_0 ,详见表 2;通过 95%置信区间的统计

表 1 42 种金属元素的地壳丰度和相应的部分理化参数
Table 1 The crustal abundances and the physicalchemical properties of 42 metals

序号	EL	AN	CA	IE	AW	X_m	EAA	ρ	σ_p	Z^*	Z^{*2}/r	ΔE_0
1	Li	3	21	519	6.94	0.98	0.62	0.53	0.25	2.3	7.56	3.05
2	Be	4	1.3	900	9.01	1.57	0.55	1.85	0.17	6.5	43.11	1.85
3	Na	11	23000	498	22.99	0.93	0.44	0.97	0.21	7.5	72.11	2.71
4	Mg	12	28000	736	24.31	1.31	0.50	1.74	0.17	8.5	131.36	2.37
5	Al	13	83000	577	26.98	1.61	0.02	2.70	0.14	—	—	1.66
6	K	19	17000	1310	39.09	0.82	0.19	0.86	0.23	7.4	41.17	2.93
7	Ca	20	52000	590	40.78	1	0.08	1.55	0.18	8.4	67.20	2.87
8	Sc	21	18	632	44.96	1.36	0.53	2.99	—	9.4	106.45	2.08
9	Ti	22	6400	661	47.88	1.54	0.67	4.54	—	—	—	0.50
10	V	23	140	653	50.94	1.63	0.15	6.11	—	—	—	1.00
11	Cr	24	110	653	52.00	1.66	0.66	7.19	0.11	11.35	198.19	—
12	Mn	25	130	715	54.94	1.55	1.16	7.43	0.13	11.65	149.14	—
13	Fe	26	58000	761	55.85	1.83	1.24	7.87	0.13	—	—	—
14	Co	27	25	757	58.93	1.91	0.30	8.90	0.13	12.95	204.51	0.28
15	Ni	28	89	736	58.69	1.9	1.23	8.90	0.13	13.6	237.12	0.26
16	Cu	29	63	745	63.55	1.65	0.81	8.96	0.10	14.25	282.03	—
17	Zn	30	94	904	65.39	1.81	0.49	7.13	0.12	14.9	267.48	0.76
18	Ga	31	18	577	69.72	2.01	0.11	5.91	0.10	—	—	0.56
19	Ge	32	1.4	782	72.61	2.01	0.31	5.32	0.14	—	—	—
20	As	33	2.2	966	74.92	2.18	0.43	5.72	0.11	17.20	428.75	—
21	Rb	37	78	402	85.47	0.82	0.89	1.63	0.17	8.9	53.16	2.98
22	Sr	38	480	548	87.62	0.95	0.75	2.54	0.15	9.9	83.06	2.90
23	Y	39	24	636	88.91	1.22	1.05	4.47	—	10.9	125.06	2.37
24	Zr	40	130	669	91.22	1.33	0.56	6.51	—	—	—	1.45
25	Nb	41	19	653	92.91	1.6	1.30	8.57	—	—	—	1.10
26	Mo	42	1.3	695	95.94	2.16	0.30	10.22	—	—	—	0.08
27	Pd	46	0.01	803	106.42	2.2	1.11	12.02	—	—	—	0.95
28	Ag	47	0.08	732	107.87	1.93	1.07	10.50	0.07	15.4	209.88	0.80
29	Cd	48	0.2	866	112.41	1.69	0.47	8.65	0.08	16.4	274.45	0.40
30	In	49	0.1	556	114.82	1.78	0.15	7.31	0.10	—	—	0.49
31	Sn	50	1.7	707	118.71	1.96	0.50	7.31	0.15	—	—	—
32	Sb	51	60	833	121.76	2.05	0.32	6.68	0.12	18.7	388.54	—
33	Cs	55	1.4	377	132.91	0.79	0.85	1.87	0.22	8.9	46.59	3.03
34	Ba	56	390	502	137.33	0.89	2.13	3.59	0.18	9.9	71.02	2.91
35	La	57	39	540	138.91	1.1	2.31	6.15	—	10.9	103.31	2.38
36	Ta	73	1.6	577	180.95	1.5	0.20	16.65	0.04	—	—	0.60
37	W	74	1.1	770	183.84	2.36	0.36	19.35	0.07	—	—	0.10
38	Pt	78	0.05	866	195.08	2.28	0.62	21.45	—	—	—	—
39	Au	79	0.035	891	196.97	2.54	0.55	19.32	0.04	—	—	—
40	Hg	80	0.09	1008	200.59	2	0.44	13.55	0.07	18.5	305.58	—
41	Tl	81	0.5	590	204.38	2.04	0.50	11.85	0.10	—	—	—
42	Pb	82	12	715	207.20	2.33	0.02	11.35	0.13	19.8	297.00	—

注:表中“—”表示暂无相应数据。

表 2 9 种金属理化性质和地壳丰度对数值的相关分析结果

Table 2 The correlations between physicochemical properties of 9 metals and logarithm of their crustal abundances										
		Correlations								
		X_m^2r	P	AN(AW)	Z^*	X_m	σ_p	EA	Z^{*2}/r	ΔE_0
log(CA)	Pearson Correlation	-0.672	-0.628	-0.622	-0.586	-0.561	0.524	-0.519	-0.497	0.471
	Sig. (2-tailed)	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.002	0.001	0.011	0.010
	R^2	0.451	0.395	0.387	0.343	0.315	0.275	0.27	0.247	0.222
	N	30	42	42	25	42	31	37	25	29

学检验, P 值都小于 0.05, 达到了统计学显著水平, 具有统计学意义。金属元素地壳丰度的对数值与 9 种理化参数的变化趋势如图 1。除了软指数和电势与地壳丰度的对数值成正相关外, 其它理化参数和地壳丰度的对数值均为负相关。这表明, 随着金属元素地壳丰度的增加, 这些金属原子或离子的 ρ 、 Z^* 、AN、 Z^{*2}/r 、 X_m 和 EA 都呈逐渐降低的趋势, 而 σ_p 和 ΔE_0 却相反。虽然地壳丰度随着理化参数的增加会有周期性的起伏, 但是其总体的变化趋势是清晰的, 即随着理化参数数值的增大, 地壳丰度也呈现增加或者下降的总趋势(图 1)。进一步重点分析和地壳丰度关系极显著的四种代表性理化参

数, 即原子序数(原子量)、共价指数、电负性和有效核电荷。将数据归一化后, 分别对这四组决定系数较高的数据进行集对分析, 得到的关系度分别为式(1)至(4)。可以看出, 地壳丰度的对数值和共价指数、原子密度、有效核电荷数以及电负性具有的同度分别为 0.6333、0.6667、0.6000 和 0.7381, 均大于了 0.6000, 证明了四组集对的确都存在一定程度上的趋同性, 和相关分析的结果一致。

$$\begin{aligned}\mu_{\log CA-X_m^2r} &= \frac{19}{30} + \frac{4}{30}i + \frac{7}{30}j \\ &= 0.6333 + 0.1333i + 0.2333j \\ \mu_{\log CA-\rho} &= \frac{28}{42} + \frac{4}{42}i + \frac{10}{42}j\end{aligned}\tag{1}$$

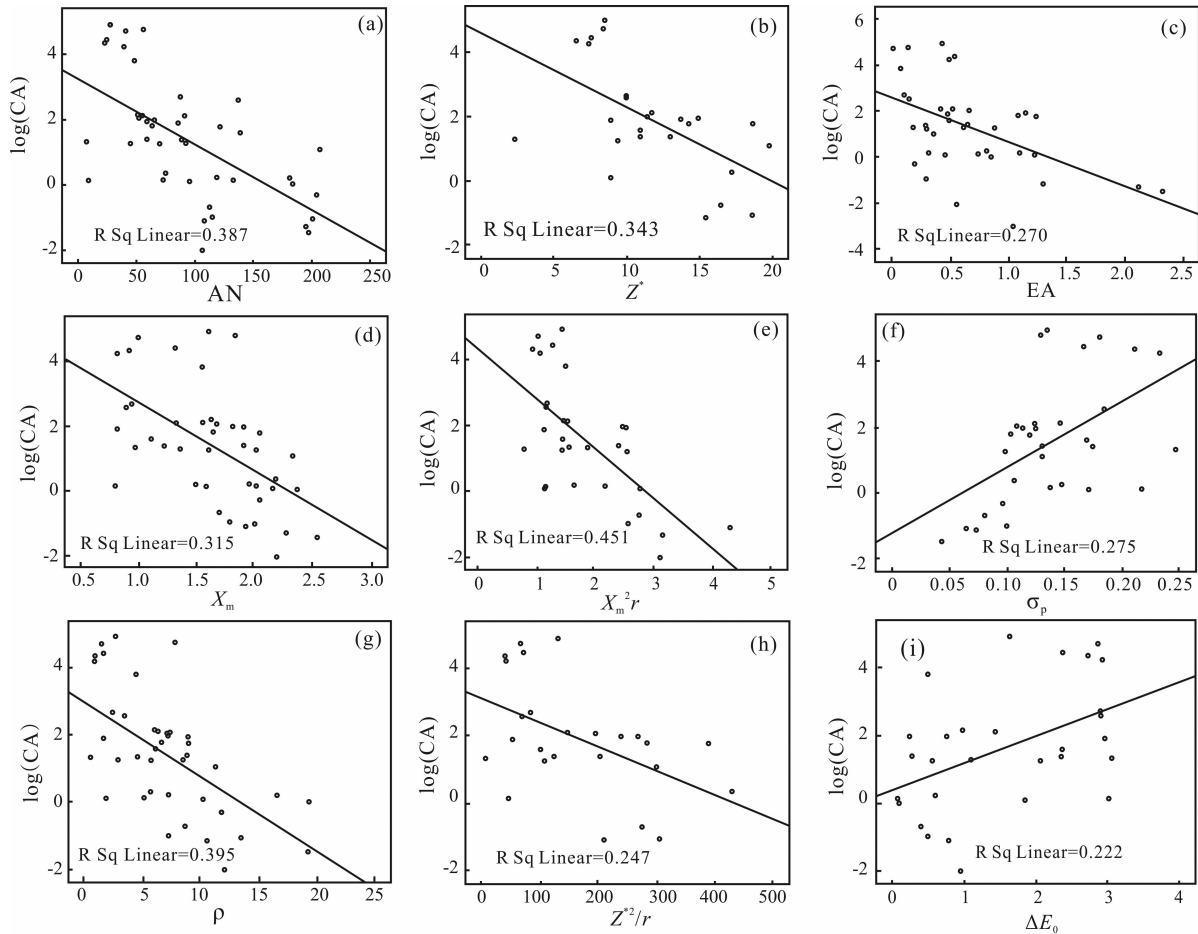


图 1 金属理化性质和地壳丰度的关系图

Fig.1 Relationships between metals' physicochemical properties and their crustal abundance

$$= 0.6667 + 0.0952i + 0.2381j \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \mu_{\log CA-Z^*} &= \frac{15}{25} + \frac{3}{25}i + \frac{7}{25}j \\ &= 0.6000 + 0.1200i + 0.2810j \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \mu_{\log CA-X_m} &= \frac{31}{42} + \frac{3}{42}i + \frac{8}{42}j \\ &= 0.7381 + 0.0714i + 0.1905j \end{aligned} \quad (4)$$

2.1 金属理化性质和其地壳丰度关系的原因分析

研究表明了金属元素的地壳丰度和原子序数呈现负相关的总趋势,即原子序数越大,元素的地壳丰度越小(图 1a)。这一研究结果与已有的研究报道一致(Hamilton *et al.*, 1972; 王素贤等, 1996),同时和元素的宇宙丰度曲线(规律)相吻合(图 2; 陈道公等, 1994; 韩吟文等, 2003)。金属元素随原子序数的丰度变化规律还可以由元素形成的理论之一,即被普遍认同的 B^2FH 理论(Burbidge *et al.*, 1957)来证明。 B^2FH 理论认为:氢元素是丰度最大的元素,其他的元素都是起源于氢元素。因为质子是稳定的而中子是不稳定的,经过一系列物理过程,包括氢燃烧、氦燃烧、 α 过程、 e 过程、 s 过程等,最终形成各种元素。另外,元素敛集率曲线表明原子序数较大的铁和镍元素处达到了最大的稳定性。然而,铁和镍元素在整个银河系的物质中所占的比例却不到 1%,原因可能是尽管原子核趋向最稳定的组态,但是要达到这样一个稳定状态需要经过很多很复杂且漫长的反应过程。因此,在元素周期表上表现为随着原子序数增大,元素的地壳丰度反而越小。元素丰度的规律也进一步表明了地壳中元素的丰度一方面取决于元素原子的结构及其稳定性,另一方面还要受长时间尺度内物质分异演化的影响。同时,在恒星演化中,其内部的热核反应(核合成)也改变着不同区域元素丰度(胡中为, 1991)。

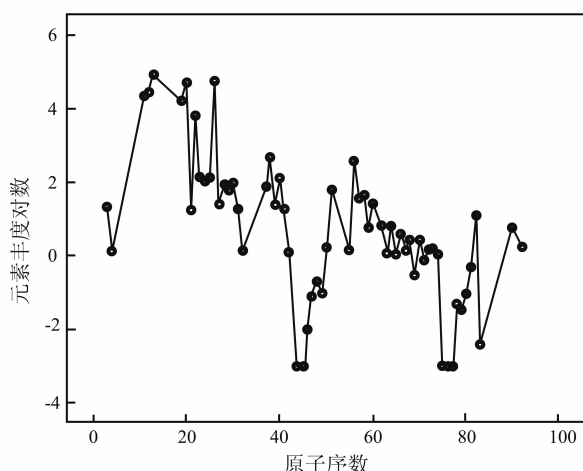


图 2 元素宇宙丰度曲线

Fig.2 The curve of elements' abundance

除了原子序数,金属元素的其它几种理化性质和地壳丰度之间也存在着密切的关系。研究表明,原子核是原子最重要的组成部分,它对元素的化学性质起着决定性作用(徐兰平, 1987)。原子核控制着核外电子的行为,与之共同决定元素及其化合物的性质。核外电子的排布遵循着特定的规律,并受到原子核的吸引,进而围绕原子核有规律地运动。有效核电荷是指原子核对核外指定电子的实际作用力,反映了指定电子的能级的高低;有效核电荷 Z^* 越大,能量越低,有效核电荷 Z^* 越小,能量越高(胡乔生和杨衍超, 2002)。有效核电荷的周期性规律研究表明了同一周期元素的有效核电荷从左到右增大,同族元素从上到下也呈现增大趋势(汪漠荣, 1985)。因此,有效核电荷数随着原子序数的增加虽有周期性的变化,但总体来看,呈现增大趋势。从而可推断元素的有效核电荷数和地壳丰度也是呈现负相关的关系,这与本研究统计分析的结果相符(图 1b)。另外,有效核电荷对原子半径、离子半径、电离能、电子亲和能、电负性等理化参数均产生了影响(汪漠荣, 1985)。金属元素的有效核电荷越大,其原子得到电子的能力愈强,电子亲和能也愈大。因此,金属元素的电子亲和能与有效核电荷数一样,与地壳丰度呈现负相关,如图 1c。有效核电荷 Z^* 愈大,原子核对成键价电子的引力亦愈大,即电负性愈大,因而金属元素地壳丰度和电负性呈负相关的变化趋势,如图 1d。另外,金属元素原子(离子)的半径随着原子序数的增加是增大的,共价指数和电负性以及离子半径的关系即 X_m^2r 表明,共价指数随着电负性和离子半径的增加而增大,因此金属元素的共价指数和地壳丰度也成负相关关系,如图 1e。

综上,元素的最初形成决定了元素的丰度规律,这一规律也折射出金属元素的理化性质与其丰度的关系,本研究就揭示了它们之间存在的关系。其中,和 $\log(CA)$ 关系最显著的是 X_m^2r 、 ρ 、 $AN(AW)$, P 值均小于 0.01。金属元素理化性质的稳定性最终决定了其丰度的相对稳定性,反过来,金属元素的丰度也制约着其在环境中的分布情况(隋延辉和戚长谋, 2005)和参与地球化学过程的浓度,从而支配着金属元素的地球化学行为。

2.1 金属元素地壳丰度后期演化的影响因素

由金属元素的形成至现在这一漫长元素演化过程形成了目前地球元素的丰度特征,但也只是一定阶段演化的结果,而非最终结果。地球乃至整个宇宙的元素丰度都在不断地发生着变化。丰度最

大的氢元素被合成转化为氦元素,进而合成了其他更重的元素,于是氢元素的丰度在变小,其他原子序数的丰度在变大(Hammond,2002)。与生命起源经历了无机、有机和生物化学3个物质演化阶段(Ponnamperuma,1964)类似,元素也经历着一系列复杂而缓慢的演化过程。金属元素的丰度制约着其在环境中的分布状况(隋延辉和戚长谋,2005)和参与地球化学过程的含量,进而支配着元素的地球化学行为。例如,金属元素的丰度约束了其在环境中的离子浓度,进而影响其亲和性,由图1c可推测金属元素的浓度越大,亲和性可能会越小。同时,亲和性也与离子的价态有关,人为改变离子价态直接影响其亲和性的倾向和强度。虽然自然本底中元素的丰度短时间内不会有大幅度的明显变化,但是随着生命活动长期作用和人类科学技术的进步,尤其是物质的分异演化规律受到人为活动剧烈的影响,必然会影响到元素的自然本底含量及其分布,扰乱金属元素的地球化学循环(Khorasanipour and Aftabi,2010)。例如近些年来重金属污染事件,通常是因为人为活动干扰了金属元素的自然分布和环境化学行为。影响元素丰度的环境因素很多,同时这些因素往往对元素的理化性质也产生一定的作用,进而影响着局部地理区域环境中元素的丰度甚至赋存状态等(Walker *et al.*,2012)。其中,人类活动剧烈地改变某些环境因素,从而影响元素的理化反应过程,甚至影响元素的丰度和价态转化。例如,自然矿物中d区金属元素由于紧密聚集难以分开,而使得金属的离子半径随着氧化状态增高离子半径变小(Walker *et al.*,2012),如果人类活动改变了自然矿物的聚集情况,就可能对该区金属元素的理化性质产生影响,比如随着氧化状态的增高离子半径变小的幅度可能会降低等。

3 结论

本文采用了相关性分析和集对分析的方法,从大的环境背景研究了元素地壳丰度和理化性质的关系,得出金属离子的十种理化参数包括AN、AW、 X_m 、EA、 ρ 、 σ_p 、 Z^* 、 Z^{*2}/r 、 ΔE_0 和 X_m^2/r ,与地壳丰度呈现显著相关性。其中,除 σ_p 和 ΔE_0 与 $\log(CA)$ 成正相关外,其它理化参数均与 $\log(CA)$ 成负相关,即随着金属元素地壳丰度的增加,金属原子或离子的 ρ 、 Z^* 、AN、 Z^{*2}/r 、 X_m^2/r 、 X_m 和EA都呈逐渐降低的趋势,而 σ_p 和 ΔE_0 却相反。这表明了金属理化性质和其地壳丰度有着密切的关系,一定程度上支持了地球演化以及元素的宇宙丰度演变规律,有助于进

一步研究特定区域的地质地球化学性质、特定元素的迁移转化等以及对岩石、矿产资源的开发和利用。

参考文献 (References):

- Burbidge E, Burbidge G, Fowler William, Hoyle F. 1957. Synthesis of the Elements in Stars. *Reviews of Modern Physics*, 29(4): 547-650
- Biesinger K E, Christensen G M. 1972. Effects of various metals on survival, growth, reproduction and metabolism of *Daphnia magna*. *Journal of the Fisheries Research Board of Canada*, 29(12): 1691-1700
- Hammond C R. 2002. *The Elements. Handbook of Chemistry and Physics* CRC Press
- Hamilton E I, Minskim J, Cleary J J. 1972. The Concentration and Distribution of Some Stable Elements in Healthy Human Tissues from the United Kingdom. *The Science of the Total Environment*, 1: 341-374
- Jacobson K, Turner Bruce J E. 1980. The Interaction of Cadmium and Certain Other Metal Ions with Proteins and Nucleic Acids. *Toxicology*, 16(1): 1-37
- Jacobson K, Turner Bruce J E, Christie N T, Owenby R Keith. 1983. Toxic and Biochemical Effects of Divalent Metal Ions in *Drosophila*: Correlation to Effects in Mice and to Chemical Softness Parameters. *The Science of the Total Environment*, 28(1-3): 355-366
- Kaiser Klaus L E. 1985. Correlation of metal ion toxicities to mice. *The Science of the Total Environment*, 46: 113-119
- Khargarot B S, Ray P K. 1989. Investigation of Correlation between Physico-chemical Properties of Metals and Their Toxicity to the Water Flea *Daphnia magna* Straus. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 18: 109-120
- Khorasanipour Mehdi and Aftabi Alijan. 2010. Environmental geochemistry of toxic heavy metals in soils around Sarcheshmeh porphyry copper mine smelter plant, Rafsanjan, Kerman, Iran. *Environmental Earth Sciences*, 62(3): 449-465
- Mccloskey J T, Newman M C, Clark S B. 1996. Predicting the Relative Toxicity of Metal-ions Using Ion Characteristics Microtox Bioluminescence Assay. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 15(10): 1730-1737
- Mendes L F, Bastos E L, Stevani C V. 2010. Prediction of Metal Cation Toxicity to the Bioluminescent Fungus *Gerronema Viridilucens*. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 29(10): 2177-2181
- Meng Q, Richmond-Bryant J, Lu S E, Buckley B, Welsh W J, Whitsel E A, Hanna A, Yeatts K B, Warren J, Herring A H, Xiu A. 2013. Cardiovascular outcomes and the physical and chemical properties of metal ions found in particulate matter air pollution: A QICAR study. *Environmental Health Perspectives*, 121(5): 558-564
- Owenby D R, Newman M C. 2003. Advances in quantitative ion character-activity relationships(QICARs) using metal-ligand binding characteristics to predict metal toxicity. *Quant. Struct.-Act. Relat.*, (22): 1-6
- Ponnamperuma Cyril. 1964. chemical evolution and the origin of life. *Nature*, 201: 337-340

- Sylvester Paul J, Campbell Ian H, Bowyer Deborah A. 1997. Niobium/Uranium evidence for early formation of the continental crust. *Science*, 275: 521-523
- Tatara Christopher P, Newman Michael C, McCloskey John T, Williams Phillip L. 1997. Predicting relative metal toxicity with ion characteristics *Caenorhabditis elegans* IX50. *Aquatic Toxicology*, (39): 279-290
- Tatara Christopher P, Newman Michael C, McCloskey John T, Williams Phillip L. 1998. Use of ion characteristics to predict relative toxicity of mono-, di- and trivalent metal ions *Caenorhabditis*. *Aquatic Toxicology*, (42): 255-269
- Turner James E, Williams M Wendy, Hingerty Brian E, Hayden Thomas L. 1987. Multiparameter Correlations between Properties of Metal Ions and Their Acute Toxicity in Mice. *QSAR in Environmental Toxicology-II*. D. Reidel Publishing Company: 375-383
- Walker John D, Newman Michael C, Enache Monica. 2012. *Fundamental QSARs for Metal Ions*. CRC Press
- Walker John D, Enache Monica, Dearden John C. 2007. Quantitative Cationic Activity Relationships for Predicting Toxicity of Metal Ions from Physicochemical Properties and Natural Occurrence Levels. *QSAR & Combinatorial Science*, 26(4): 522-527
- Wolterbeek H T and Verburg T G. 2001. Predicting metal toxicity revisited general properties vs. specific effects. *The Science of the Total Environment*, 279: 87-115
- Zhou D M, Li L Z, Peijnenburg Willie J G M, Ownby David R, Jan Hendriks A, Wang P, Li D D. 2011. A QICAR approach for quantifying binding constants for metal-ligand complexes. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 74(4): 1036-1042
- 陈道公, 支霞臣, 杨海涛. 1994. 地球化学. 合肥: 中国科学技术大学出版社
- 胡中为. 1991. 元素的宇宙丰度与起源. *自然杂志*, 14(5): 335-361
- 胡乔生, 杨衍超. 2002. 有效核电荷近似算法及其应用. *宜春学院学报(自然科学)*, 24(6): 15-17
- 李梦龙, 李功兵, 曹庆文, 周翠松. 2008. 化学数据速查手册. 北京: 化学工业出版社
- 韩吟文, 马振东, 韩吟文, 马振东, 张宏飞, 张本仁, 李方林, 高山, 鲍征宇. 2003. 地球化学. 北京: 地质出版社
- 黎彤. 1976. 化学元素的地球丰度. *地球化学*, (3): 167-174
- 戚长谋, 郝立波, 甘树才. 2000. 关于元素丰度问题. *长春科技大学学报*, 30(4): 336-337
- 隋延辉, 戚长谋. 2005. 关于元素丰度与元素的分散和成相. *吉林地质*, 24(1): 5
- 汪漠荣. 1985. 有效核电荷及其应用. *阜阳师范学院学报(自然科学版)*, (1): 78-97
- 王素贤, 梁玉珍, 张维冰. 1996. 元素丰度与原子结构的关系. *齐齐哈尔师范学院学报(自然科学版)*, 16(1): 43-46
- 徐兰平. 1987. 化学元素的起源问题. *天文学进展*, 5(1): 55-66
- 张华伟, 赵刚. 2000. 恒星化学元素丰度研究新进展. *天文学进展*, 18(1): 56-66
- 张素华, 徐一仁. 1987. 元素丰度与核结构. *浙江师范大学学报(自然科学版)*, (2): 132-136
- 张运陶, 肖胜兰. 2004. 金属硫化物溶解性的结构信息挖掘. *计算机与应用化学*, 21(5): 690-694

•学会之声•

中国矿物岩石地球化学学会创办《矿岩地化学会快讯》网刊

在中国矿物岩石地球化学学会理事会的领导下,在广大会员的支持下,在学会秘书长的积极努力下,经过一年多的筹备,《矿岩地化学会快讯》(英文简称:CSMPG News)正式出刊了!

作为学会出版的会刊(电子),其宗旨是为会员提供优质高效服务、加强会员的归属感和认同感,增强学会的吸引力和凝聚力,以推动科技进步、培育青年人才、造就科学大师;其目标是将其打造成学会与广大会员沟通与交流的平台。长期以来,我会一直将服务会员作为学会的重要工作,但限于人力物力的匮乏,在服务形式和内容、学会与会员互动等方面还存在较大的提升空间。在学会第八届理事会的领导下,在中国科协学会能力提升专项的支持下,学会秘书处贯彻落实“服务会员为抓手,集思广益促发展”的项目要求,拟充分利用信息化平台,提高学会对会员的服务能力,增强会员的归属感和主人翁意识。其中,以电子邮件的方式定期向会员推送学会动态、学术会议通知,宣传报道我国矿物学、岩石学和地球化学等领域的研究亮点,回顾学会的发展历程等就构成了《矿岩地化学会快讯》(CSMPG News)的主要内容。

我们知道,襁褓中的“快讯”还不成熟,需要广大会员的关心和培育。如果您有好的建议和意见,或者您有信息需要发布,请及时向《矿岩地化学会快讯》编辑部或学会秘书处反馈(联系邮箱:csmpg_kx@vip.skleg.cn)。愿我们共同努力,将《矿岩地化学会快讯》真正打造成互联网时代的会员之家!