

矿物化学式计算方法

徐登科 编著

地质出版社

矿物化学式计算方法

徐登科 编著

地质出版社

内 容 提 要

本书比较详细地介绍了目前国内外计算矿物化学式的九种主要方法及其有关的一些理论基础。其中第九种《铂族矿物化学式绝对含量计算法》是一种新的方法，已成功地应用于实际生产中。同时对每种方法的原理、计算步骤作了简明的介绍，并附有四十余个计算实例。

另外对于计算矿物化学式密切有关的问题，象如何运用相关几何分析判明矿物中的类质同象和混入物；单矿物分离和元素分析的几点研究途径；如何判断矿物化学式计算的误差也作了探讨性的分析研究。

本书适合于矿物分析及岩矿鉴定人员参考使用。

矿物化学式计算方法

徐登科编著

国家地质总局书刊编辑室编辑

地质出版社出版

地质印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行·各地新华书店经售

1977年8月北京第一版·1977年8月北京第一次印刷

印数1—7,400册·定价0.50元

统一书号：15038·新210

目 录

前言	1
第一章 决定矿物化学式的一些重要因素	3
(一) 配位数和最紧密堆积	3
(二) 负电性	5
(三) 类质同象	6
(四) 矿物化学式中的水	8
(1) 吸附水	8
(2) 结晶水	8
(3) 结构水或化合水	9
第二章 计算矿物化学式的一些理论基础	10
(一) 定比原理	10
(二) 阿佛加德罗常数 6.023×10^{-23}	11
(三) 分子数	12
(四) 原子数	13
第三章 矿物化学式的述写方式	14
(一) 单质元素	14
(二) 金属互化物	14
(三) 具有金属键的硫砷锑铋化合物	15
(四) 离子化合物	15
第四章 如何运用相关几何分析判明矿物	
中的类质同象和混入物	16
(一) 相关几何分析	16
(二) 矿物中各元素成分的相关系数特征及其应用	17
第五章 矿物化学式及其计算方法	27
(一) 简单的原子及分子比值法	27
(二) 氧原子计算法	28

(1) 通式已知的一般氧原子算法	29
(2) 关于含氢氧根 OH^{1-} 矿物化学式的氧原子算法	31
(3) 关于含 F^{1-} , Cl^{1-} , S^{2-} 矿物化学式的氧原子算法	35
(4) 根据部分氧计算矿物化学式的氧原子算法	37
(5) 根据正负电价平衡计算矿物化学式的氧原子算法	40
(三) 根据给定阳离子计算矿物化学式	43
(四) 某些非氧化物矿物化学式的算法	47
(五) 单位晶胞算法	48
(1) 根据单位晶胞内原子系数计算矿物化学式	48
(2) 根据单位晶胞内氧离子数计算矿物化学式	51
(六) 变生矿物化学式算法	54
(1) JI. C. 博罗金法	55
(2) A. A. 库哈林科及 A. C. 谢尔格夫法	55
(七) 关于“纯矿物”化学式算法	59
(八) 关于“复合矿物”化学式算法	62
(九) 铂族元素矿物化学式绝对含量算法	65
(1) 方法的产生	65
(2) 计算原理	66
(3) 光栅光谱分析铂族元素矿物简介	67
(4) 计算实例	68
(5) 存在问题及解决办法	69
第六章 单矿物分离和元素分析的几点研究途径	71
(一) 加强矿物浮选的应用	71
(二) 用物相分析方法快速取得矿物化学全分析	75
(三) 用光谱分析中的次灵敏线来研究矿物高含量化学成分	76
第七章 如何判断矿物化学式计算的误差	78
(一) 计算误差	78
(二) 与化学分析不精确有关的误差	78
附表一 氧化物及元素的分子数及原子数换算表	84

附表二	相关系数检验表·····	138
附表三	某些元素光栅光谱次灵敏线·····	138
附录一	矿物分析偶然误差允许范围简表·····	139
参考文献	·····	142

前 言

矿物的化学成分是矿物分类的基础。通常根据矿物化学全分析所得各元素化合物重量百分比,按元素性质和类质同象替代原则,计算出矿物化学式来表示矿物的组成。

对矿物化学式的详细研究,可以了解元素在矿物晶格中的赋存状态和矿物的物理性质与化学成分的内在联系。有助于判明元素的地球化学特征。因此研究矿物的化学组成和确定它的化学式,对于工业利用和科学研究都具有重要意义。

矿物化学式计算法是随着社会生产发展及矿物学,晶体构造学,晶体化学,分析化学等学科的产生发展而建立丰富起来的。其中定组成定律,倍比定律,分子原子说,分子配位说等,为矿物化学式的计算奠定了理论基础。

截至目前的几种主要计算方法,是从不同的原理出发进行运算处理,其中归纳法(最大公约数法)和单位晶胞计算法是矿物化学式计算的基本方法。通过归纳法将矿物中一些复杂的元素分布约简成一个带有普遍性的矿物通式,从而把矿物化学式研究引上了严密的科学轨道。根据矿物晶体结构,及晶体化学研究表明,矿物单位晶胞内的氧原子数及阳离子元素的原子数是固定值。并且元素的阴阳离子其电价必须保持平衡,在此基础上引伸出其他多种矿物化学式计算方法。

本书叙述的前八种算法,都是用单矿物化学全分析所得各组份相对百分含量来计算矿物化学式。而第九种《铂族矿物化学式绝对含量算法》是以组份的绝对含量来计算矿物化学式。这是我们在生产实践中总结出来的一种新算法。因为某些矿种很难求出矿物的相对百分含量。例如1—2粒铂族矿物,粒径 <0.1 毫米,要作矿物化学式计算就会遇到矿物称重和分析仪器灵敏度两个困难。当前虽然有了电子探针分析可以在矿物微区作测定,

但它的分析精度达不到计算化学式的要求。我们采用大型光栅光谱分析克服了上述困难，经过一些运算处理，就可以利用矿物绝对含量来计算矿物化学式。当然这一新方法还希望同志们进一步探讨研究。

此外，本书对于计算矿物化学式密切有关的问题，象如何运用相关几何分析判明矿物中的类质同象和混入物；单矿物分离和元素分析的几点研究途径；如何判断矿物化学式计算的误差等也作了探讨性的分析研究。

第一章 决定矿物化学式的一些重要因素

(一) 配位数和最紧密堆积

元素在空间上的排列趋向于原（离）子间吸引最强，接触距离最小，占有最小空间，以达到最稳定结合。而围绕一个原子，离子最紧密排列着的其他原子，离子的数目称为原子及离子的配位数。

对阴阳离子排列的规律，L. 鲍林提出了著名的排列法则：

离子晶体结构中一切化学上相同的离子周围其他各种离子的排列也都相同。这样，围绕着每一阳离子，阴离子按配位多面体角顶的位置排布。阴阳离子距离等于 $(R^+ + R^-)$ 配位数的多少因 R^+/R^- 而定。阴离子半径比例和配位数之间的关系如图 1 所示：

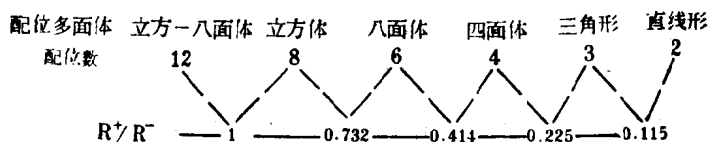


图 1 离子半径比例 R^+/R^- 与配位数关系

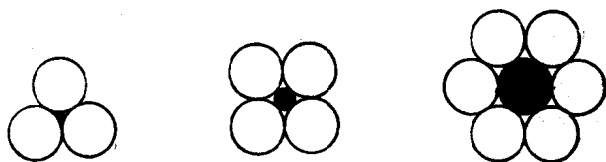


图 2 离子半径比例与配位数关系图解

配位多面体具有彼此尽量减少公用面、棱、角的趋势。因共棱或公面过多，阳离子间距离缩短，静电斥力增加，稳定性降低，因此阳离子尽量远离。如硅酸盐矿物中硅氧四面体或公用角顶，或彼此孤立，而不共棱共面。不管何种情况，阴阳离子的结合必须在空间上排列最紧密，空隙最少，密度最大，配位体大小形状相当，几何上最有序，力学上最稳定，即结合关系保持最小自由能。

表 1 常见阳离子的配位数表

配位数	阳 离 子
3	B^{3+} 、 C^{4+} 、 N^{5+}
4	Be^{2+} 、 B^{3+} 、 Az^{3+} 、 Si^{4+} 、 P^{5+} 、 S^{6+} 、 Cl^{7+} 、 U^{6+} 、 Cr^{6+} 、 Zn^{2+} 、 Ga^{3+} 、 Ge^{4+} 、 As^{5+} 、 Se^{6+}
6	Li^{1+} 、 Mg^{2+} 、 Al^{3+} 、 Ti^{4+} 、 Ca^{2+} 、 Mn^{2+} 、 Fe^{3+} 、 Co^{2+} 、 Ni^{2+} 、 Cu^{2+} 、 Zn^{2+} 、 Ga^{3+} 、 Nb^{5+} 、 Ta^{5+} 、 Sn^{4+}
6~8	Na^{1+} 、 K^{1+} 、 Ca^{2+} 、 Sr^{2+} 、 Cs^{1+} 、 Ba^{2+} 、 Ce^{4+} 、 Hf^{4+} 、 Th^{4+} 、 U^{4+} 、
8~12	Na^{1+} 、 K^{1+} 、 Ca^{2+} 、 Sr^{2+} 、 Cs^{1+} 、 Ba^{2+} 、 Ca^{3+} 、 Ce^{3+} 、 Pb^{2+}

配位数的多少决定着化合物的稳定程度，一般多为偶数配位如表一。因偶数配位造成几何上的对称比较稳定。奇数少见，配位数相同的离子可以发生置换。

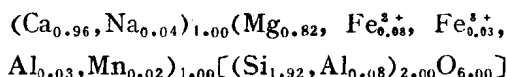
在计算矿物化学式时，应明确阴阳离子之间的配位关系及它们在化学式中的原子系数，以便作为求公约数的基础。如具二八面体构造的白云母 $KAZ_2(AZSi_3)O_{10}(OH)_2$ 通式为：

$XY_2Z_4O_{10}(OH)_2$ 其中X为大阳离子；Y是配位数为六的阳离子 Al^{3+} 、 Fe^{3+} 。Z是四次配位离子。具三八面体构造的金云母 $KMg_3(AZ, Si)O_{10}(OH)_2$ 其通式 $XY_3Z_4O_{10}(OH)_2$ 。X是配位数为12的

大阳离子，Y为六次配位阳离子 Fe^{2+} ， Mg^{2+} ， Mn^{2+} ，Z是四次配位的阳离子。

如果按阳离子法计算云母化学式时，其公约数是根据六次与四次配位的阳离子的原子系数求出的。所以具二八面体构造的白云母 $Y + Z = 6$ 。具三八面体构造的金云母按 $Y + Z = 7$ 去除Si, Al, Ti, Fe, Mn的总原子数求出公约数。

又如在计算矿物化学式时，同一个元素可以同时处于不同配位的位置。例如辉石中的Al可以同时处于四次及六次配位的位置上。当计算矿物化学式时，Al要首先满足呈类质同象替换具四次配位的硅酸根中的Si的理论系数。剩余的Al写到配位数为6的元素组中。



又如在正长石亚族的矿物里， K^{1+} 和 Na^{1+} 的配位数都是8，因此它们可以广泛的成类质同象替换，形成透长石 $\text{K}[\text{AlSi}_3\text{O}_8]$ ，钠透长石 $(\text{K}, \text{Na})[\text{AlSi}_3\text{O}_8]$ ；正长石 $\text{K}[\text{AlSi}_3\text{O}_8]$ 与钠正长石 $(\text{Na}, \text{K})[\text{AlSi}_3\text{O}_8]$ 。但在白云母 $\text{KAl}_2[\text{AlSi}_3\text{O}_{10}](\text{OH})_2$ 中由于钾的配位数是12，钾被钠的替代就不发生。

再如六次配位的Al能被 Fe^{3+} ， Cr^{3+} ，甚至 Mg^{2+} 类质同象替换而四次配位的Al则被 Si^{4+} 替换。

以上说明在计算矿物化学式时，应考虑元素配位数的重要作用。

(二) 负电性

负电性通常表示原子吸引排斥电子的能力，也代表原子与价电子间结合的牢固性。元素结合形成离子键时，负电性差距愈大，电子愈容易向负电性大的一方转移。而当负电性相同或相近时，吸引电子能力相等和相似，电子为双方公用而形成共价键。如果排斥电子的能力相似，电子流动弥漫于离子间，则金属键性愈强。

负电性直接影响着离子的类质同象, 虽然有些元素的离子半径相似, 电价相等, 配位数相近, 但负电性差别较大, 故不能成类质同象置换, 如 $\text{Cu}^{1+}(0.96 \text{ \AA}) - \text{Na}^{1+}(0.98 \text{ \AA})$, $\text{Ca}^{2+}(1.06 \text{ \AA}) - \text{H}_2^{2+}(1.12 \text{ \AA})$ 即不能相互替代。元素周期表中元素负电性由左向右递增。所以在分析整理矿物化学式及元素间相互置换的可能性时, 要考虑负电性的大小。例如:

碲金银矿	AuAgTe	正确
	AgAuTe	错误
氟碳铈矿	$6 \{(\text{Ce}, \text{La}, \text{Di})[\text{CO}_3 \cdot \text{F}]\}$	正确
	$6 \{(\text{Ce}, \text{La}, \text{Di})[\text{F} \cdot \text{CO}_3]\}$	错误
日光榴石	$\text{Mn}_8[\text{Be} \cdot \text{SiO}_4]\text{S}_2$	正确
	$\text{Mn}_8[\text{Si} \cdot \text{BeO}_4]\text{S}_2$	错误
斜硅镁石	$8\text{MgO} \cdot 4\text{SiO}_2 \cdot \text{Mg}(\text{OH} \cdot \text{F})_2$	正确
	$8\text{MgO} \cdot 4\text{SiO}_2 \cdot \text{Mg}(\text{F} \cdot \text{OH})_2$	错误
钙霞石	$3\text{NaAlSiO}_4 \cdot \text{CaCO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	正确
	$3\text{NaSiAlO}_4 \cdot \text{CaCO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	错误

(三) 类质同象

这是相互类似的两种 (或两种以上) 元素或元素群发生单向或相互代替, 占据同一构造位置, 而晶格性质改变不大, 替代时要化学键性相同, 负电性相近, 离子半径差别不大, 配位数适当, 代换前后总电价不变。

在述写矿物化学式时, 应把可能进行类质同象替换的元素写在一个括号内用逗号隔开。那种表示矿物化学成分中各种组份的数量比的“实验式”, 不能反映元素在矿物晶格构造中的赋存状态及元素相互结合关系。而实际上最能反映矿物化学组成性质的是它的化学式如山西某地透辉石典型式为: CaMgSiO_6 。而详细的化学式为 $(\text{Ca}_{0.92}, \text{Na}_{0.04})_{0.96}(\text{Mg}_{0.80}, \text{Fe}_{0.09}, \text{Al}_{0.02})_{1.02}[(\text{Si}_{1.96}, \text{Al}_{0.04})]_{2.00}\text{O}_6$ 。同一括号内置换元素可由多到少排列。不必按电价大小, 但是同一种元素以不同价态出现在同一种矿物中时, 就

应按电价由小到大从左到右排列。如：

黑锰矿 $\text{Mn}^{2+}\text{Mn}_2^{3+}\text{O}_4$

铜 蓝 $\text{Cu}_2^{+}\text{Cu}^{2+}[\text{S}_2]^{2-}\text{S}^{2-}$

辉镍矿 $\text{Ni}^{2+}\text{Ni}_2^{3+}\text{S}_4^{2-}$

红硒铜矿 $\text{Cu}_2^{+}\text{Cu}^{2+}\text{Se}_2^{2-}$

另外研究元素在类质同象置换过程中的性质和数量对比对正确计算矿物化学式和确定元素在矿物晶格中赋存状态都是很必要的。尤其对离子化合物，类质同象替换前后必须使正负电价平衡以保持矿物晶格的稳定性。

在同价离子替换时，只要离子数相等，电荷就会平衡。如在橄榄石中 Fe^{2+} 置换 Mg^{2+} ，在微斜长石中 Na^{1+} 置换 K^{1+} ，稀土矿物中 La^{3+} 置换 Ce^{3+} 。

在异价离子发生置换时，必须使电价得到补偿。可按以下方式进行：

(1) 少量高价正离子被多量低价正离子替换，或反之。如在云母中 3Mg^{2+} 替换 2Al^{3+} ，霞石中 2Na^{1+} 替换 Ca^{2+} 。磁黄铁矿中 2Fe^{3+} ，替换 3Fe^{2+} 。

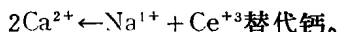
(2) 一个高价的正离子和一个低价正离子同时置换两个中间电价的正离子。如在斜长石中 $\text{Si}^{4+} + \text{Na}^{1+}$ 置换 $\text{Ca}^{2+} + \text{Al}^{3+}$ 。磷灰石中 $\text{Ce}^{3+} + \text{Na}^{1+}$ 替换 2Ca^{2+} 辉石中 $\text{Na}^{1+} + \text{Fe}^{3+}$ 替换 $\text{Mg}^{2+} + \text{Ca}^{2+}$ 。在榍石中 $\text{Na}^{1+} + \text{Ce}^{3+}$ 替换 2Ca^{3+} 。

(3) 高价正离子替换低价正离子时，剩余正电荷被较高价负离子替换低价负离子时所多余的负电荷补偿。例如在磷灰石中 $\text{Ce}^{3+} + \text{O}^{2-}$ 替换 $\text{Ca}^{2+} + \text{F}^{1-}$ 。

(4) 低价阳离子替换高价阳离子所亏损的正电荷由附加的阳离子补偿。如角闪石中 $\text{Al}^{3+} + \text{Na}^{1+}$ 替换 Si^{4+} ，绿柱石中 $\text{Li}^{1+} + \text{Cs}^{1+}$ 替换 B^{2+} ，其中的 Na^{1+} 和 Cs^{1+} 均为附加阳离子。

掌握元素类质同象替换规律可以正确地计算矿物化学式。反过来也可以从矿物化学式中判断元素相互替代方式和途径。如磷铈钠石的晶体化学式为： $(\text{Ca}_{0.37}, \text{Na}_{0.23}, \text{Ce}_{0.22}, \text{Sr}_{0.16}, \text{Ba}_{0.03})_{1.01}$

[CO₃]。从式中可以看出在碳铈钠石晶体格架内含有相同数量的钠和铈原子。它们按固定的方式



根据同一个或同一族矿物元素间类质同象替代的种类和数量多少，可以划分出不同的矿物种属，或预测新矿物。这在铂族元素矿物分类中尤显突出。如钌硫铈矿(Rh, Pd, Pt) AsS；钌硫铈矿(Rh, Ru, Pt) AsS；又如钙钛矿CaTiO₃，当Nb代替Ti致Nb:Ti=2:5时形成钛铌铁钙矿。Ce代替Ca至Ce:Ca=4:7时形成铈钙钛矿，同时具有Ce及Nb时称为钛铌钙铈矿。

在计算整理矿物化学式时，根据元素的离子半径，电价等性质相近或相同的特征，按类质同象替代条件和方式将其合并，以便使矿物化学式表达得更确切合理。尤其要考虑元素类质同象替换前后保持电价平衡。如锌日光榴石化学式为(Zn_{5.64}, Mn_{1.64}, Fe_{1.06})_{8.34}Be_{5.49}Si_{5.21}O_{24.05}S_{2.05}。约简后(Zn, Mn, Fe)_{4.17}Be_{2.75}Si_{2.61}O_{12.12}S_{1.03}，或为(Zn, Mn, Fe)₄[(BeSiO₄)₃S]。由于被Mn²⁺，Fe²⁺，类质同象替换虽然离子系数不足，但三者系数之和仍达到了4，这样就使整个化合物正负电价保持了平衡。

由于元素间类质同象相互替代的结果，也会引起矿物晶胞参数，比重及折光率的变化。

综上所述，研究元素的类质同象替换规律对正确计算矿物化学式是很有意义的。

(四) 矿物化学式中的水

自然界含水矿物很多。它在矿物内部存在形式和结合性是很复杂的。有时矿物的性质直接受着水的性质的影响。水的常见类型和性质如表二。

(1) 吸附水 吸附水是以机械吸附方式成中性水分子状态存在于矿物表面或其内部。不参加矿物晶格。当温度高于110℃时则逸散，它可以呈气态、液态、和固态存在于矿物中。

(2) 结晶水 它是成中性水分子参加矿物晶格并占据一定

表 2 水的常见类型和性质

主 要 类 型		矿物及矿物集合体中水的种类
不参加晶格	吸附水 (中性 H_2O 分子)	湿存水, 薄膜水, 毛细管水 胶体水, 气态水, 固态水, 液态水
参加晶格	结晶水 (中性 H_2O 分子)	结晶水化物的水 沸石水 层间水
参加晶格	结构水 (呈 OH^{1-} 、 H^+ 、 H_3O^+)	结构水

构造位置。常作为配位数围绕某一离子形成络离子或“结晶水化物”。结晶水的数量与矿物的其他成分常呈简单比例。如石膏 $\text{Ca}[\text{SO}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ 、苏打 $\text{NaCO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ 、水方硼石 $\text{CaMgB}_6\text{O}_{11} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 。结晶水由于参加矿物晶格其联系力比吸附水要大的多。

(3) 结构水或化合水 常以 H_2O^+ 表示, 结构水呈 H^+ , OH^- , H_3O^+ 等离子形式参加矿物晶格。占据一定构造位置, 具有一定比例, 也是最牢固的。只有晶格遭到破坏时才逸出。通常以 OH^- 最常见。 H_3O^+ 离子少见也不稳定容易分解 $\text{H}_3\text{O}^+ \rightarrow \text{H}^+ + \text{H}_2\text{O}$ 。由于 H_3O^+ 与 K^{1+} 大小相近, 白云母 $\text{KAl}_2(\text{AlSi}_3\text{O}_{10})(\text{OH})_2$ 在风化过程中 K^{1+} 容易被 H_3O^+ 置换形成水云母 $(\text{K}, \text{H}_3\text{O}^+)\text{Al}_2(\text{AlSi}_3\text{O}_{10})(\text{OH})_2$

含结构水的矿物如 滑石 $\text{Mg}_3(\text{Si}_4\text{O}_{10})(\text{OH})_2$, 蛇纹石 $\text{Mg}_6(\text{Si}_4\text{O}_{10})(\text{OH})_8$, 高岭石 $\text{Al}_2(\text{Si}_4\text{O}_{10})(\text{OH})_2$, 水镁石 $\text{Mg}(\text{OH})_2$ 。结构水和结晶水在计算矿物化学式时, 都要考虑它们的有无及数量多少, 并参与矿物化学式的计算。

第二章 计算矿物化学式 的一些理论基础

(一) 定比原理

定比是指组成矿物化学成分中的原子、离子、分子它们之间的重量百分比是整数比。即恒定值。

如某地磁铁矿化学分析结果 $\text{FeO}=31.25\%$, $\text{Fe}_2\text{O}_3=68.75\%$
 FeO 分子量=71.85, Fe_2O_3 分子量=159.70。故 FeO 与 Fe_2O_3 分子比为

$$71.85\text{FeO}:159.70\text{Fe}_2\text{O}_3=31.25:68.75$$

$$\frac{\text{FeO}}{\text{Fe}_2\text{O}_3} = \frac{31.25}{71.85} : \frac{68.75}{159.70}$$

$$\frac{\text{FeO}}{\text{Fe}_2\text{O}_3} = 1.01:1$$

其化学式可写成 FeO 、 Fe_2O_3 或 Fe_3O_4 。。又如金绿宝石其化学组成 $\text{BeO}=19.8\%$, $\text{Al}_2\text{O}_3=80.2\%$, BeO 分子量=25, Al_2O_3 分子量=102, BeO 与 Al_2O_3 分子比为

$$25\text{BeO}:102\text{Al}_2\text{O}_3=19.8\%:80.2\%$$

$$\frac{\text{BeO}}{\text{Al}_2\text{O}_3} = \frac{19.8}{25} : \frac{80.2}{102}$$

$$\frac{\text{BeO}}{\text{Al}_2\text{O}_3} = \frac{20196}{20050} \approx 1:1$$

其化学式可简写为 $\text{BeO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$ 或 BeAl_2O_4 。以上只是化学式比较简单的矿物, 事实上由于类质同象替代的复杂性, 一般矿物化学式只是一个近似的整数比。如燕山某地 氟磷 灰石 详细化学式

为: $(\text{Ca}_{4.97}, \text{Na}_{0.05}, \text{Fe}_{0.03}, \text{K}_{0.01})_{5.96} [(\text{P}_{2.91} \cdot \text{C}_{0.01})_{2.92} \text{O}_{12}] (\text{F}_{1.20} \cdot \text{OH}_{0.09})_{1.29}$ 可简化写成: $\text{Ca}_5\text{F}(\text{PO}_4)_3$ 。又如山西某地钙铁石榴石详细化学式为:

$(\text{Ca}_{2.87}, \text{Mg}_{0.08}, \text{Fe}_{0.95}^{2+}, \text{Mn}_{0.02})_{3.04} (\text{Fe}_{1.75}^{3+}, \text{Al}_{0.21})_{1.96} [\text{Si}_{3.02} \text{O}_{12}]$ 。
可简化写成 $\text{Ca}_3\text{Fe}_2[\text{SiO}_4]_3$ 。

(二) 阿佛加德罗常数 6.023×10^{23}

在计算单位晶胞分子量时,要经常应用阿佛加德罗常数,简称阿氏常数。它表示每一克分子或克原子任何元素内都含有 6.023×10^{23} 个分子或原子。

我们知道氧的原子量为16, 而一个氧原子的重量若以克计算则等于 2.6563×10^{-23} 克, 为了计算氧化物方便, 人们把氧原子量的 $1/16$ 作为一个氧单位。其重量等于 $26563 \times 10^{-23} / 16 = 1.6602 \times 10^{-24}$ 克。一克原子的氧等于 $1 / 1.6602 \times 10^{-24} = 6.023 \times 10^{23}$ 氧原子也即氧单位。

阿氏常数在矿物单位晶胞计算过程中要经常应用。矿物晶胞体积的计算以X光结构分析为基础, 在测出了矿物晶轴在三度空

表 4 七大晶系单位晶胞体积

晶系	晶胞体积		公 式
	α, β, γ	a, b, c	
三斜	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$a \neq b \neq c$	$2abc \cdot \sqrt{\sin \alpha \cdot \sin(\beta - \alpha) \sin(\beta - \gamma) \sin(\gamma - \alpha)}$ $\beta = \frac{1}{2}(\alpha + \gamma)$
单斜	$\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta \neq 90^\circ$	$a \neq b \neq c$	$abc \cdot \sqrt{1 - \cos^2 \beta} = abc \sin \beta$
斜方	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a \neq b \neq c$	abc
四方	$\alpha = \beta \neq \gamma = 90^\circ$	$a = b \neq c$	$a^2 c$
等轴	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a = b = c$	a^3
六方	$\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	$a = b \neq c$	$a^2 c \sqrt{1 - \cos^2 120^\circ} = a^2 c \sqrt{\sin^2 120^\circ}$ $= 0.866 a^2 c$
三方	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	$a = b = c$ $= \text{arh}$	$2a^3 \sqrt{\sin^3 \frac{\alpha}{2} \cdot \sin^3 \frac{\alpha}{2}}$