

历史自然种类和矿物学：在必要情况下将偶然性系统化

摘要：科学的进步取决于分类体系的制定（将自然物体或现象系统地“自然”分类）。由于可阐释成功的科学理论，这些分类代表了自然界真实的划分。在物理科学中，理论强大的分类体系（例如元素周期表）通常与时间无关。同样，国际矿物学协会的新矿物，命名和分类委员会对矿物物种的标准分类是取决于理想化的化学成分和晶体结构，而化学成分和晶体结构是根据化学原理和固体物理而选择的不依赖时间的属性。但是，在行星演化的历史背景下考虑矿物种类时，必须采用与时间相关的分类方案。基于对矿物在行星的起源和发展中所发挥的作用，我们提出了一种“演化”的矿物分类体系。由于缺乏能够解释宇宙化学组成随时间复杂化的综合理论，我们建议采用自举法进行矿物分类，该方法基于野外地质研究，天文观测，实验室实验以及对天然样品及其环境的分析。这种方法具有阐明宇宙化学复杂化普遍原理的潜力。

多数学科把所研究的物象系统地分类(类别)。将一种类型称为“天然”，就等于推测它代表了自然界真实的划分，即独立于人类约定，利益和行为的一种分组。自然种类分类体系在阐明成功的科学理论中起着核心作用。理论概括是归纳推理的来源，并由自然类型来表述。真实天然分类是成功归纳的科学分类方案的要求。如果由科学分类体系划分出的类别不符合可靠归纳的理论概括，则该分类是不充分的，需要进行修改（增强，修订甚至替换）。

本文中，我们考虑了用于矿物学学科的历史自然种类体系的发展前景。地质学和行星科学本质就是历史科学。通过对信息丰富且持续记录过去 50 亿年行星历史的矿物的研究可获得许多见解。正如 Cleland 所论证的那样，自然科学中的历史推理需要在当今众多和多样的物质属性中区分哪些属性可提供过去事件及过程的可靠记录。这为科学地重建原本无法获得的过去事件和过程提供了理论上的希望。因此，不同于按照化学和结构上的相似和差异进行分类，该矿物分类体系根据成因历史信息将固体物质分为几类，这将使以历史为导向的地质学家和行星科学家得以受益。

然而，制定科学上富有成果的历史矿物种类的概念具有挑战性。自然科学中使用的分类方案几乎始终是独立的，即旨在适应有关自然界的普遍而永恒的原理。一些哲学家拒绝历史自然

物种的科学可行性，理由是它们代表了偶然的或“意外的”（非法律的）时间模式。在自然科学中，最具历史自然特征的是生物科学。进化物种概念的发展是为了划分生物体中来自共同祖先的特性(同源性)和不来自共同祖先的特性(类比性)之间的历史区别，这是达尔文自然选择进化论的核心。仅检查生物体的明显特征并不能揭示哪些是同源的，哪些是相似的。确实，在达尔文提出自然选择进化论之前，分类学家首先将生物分类体系建立在外形态学的基础上，然后再基于内部解剖学和生理学的相似性以及生物之间的差异。他们缺乏区分同源性和类比性的原则基础。行星科学家的处境与达尔文之前的生物学家相似，令人不安。他们缺乏统一的理论来判断相似的环境条件下产生的固体物质是否同成因。

本文着重于国际矿物学协会新矿物，命名和分类委员会（IMA）当前对矿物进行分类所面临的挑战和机遇。类似于化学元素周期表提供的理论框架，为地球科学提供了一种通用框架的 IMA 矿物分类体系被广泛接受。在 IMA 矿物系统中，根据“主要”化学元素组成的相似性和差异性以及化学元素在晶体结构中的排列，5600 种不同的固体物质被分为矿物种类。但为了进行分类，其他一些特征常常会被忽略（尽管并非总是如此）。

我们考虑了历史自然矿物分类的三方面。首先，我们回顾了标准 IMA 分类协议及其在多大程度上为地球科学中的归纳推理提供了富有科学成果的理论支撑。在这种情况下，我们简要地考虑了 IMA 系统在阐明成功的科学理论中所起的核心作用。特别是，IMA 系统反映并扩大了固态理论，该理论认为，材料的性质源于其元素组成以及原子键合成更高阶结构的方式。这是 IMA 矿物学系统被许多地球科学家持久推崇的原因。

其次，针对历史地质学家的需求，我们概述了 IMA 系统的潜在缺陷。IMA 分类协议将某些固体物质一起归入同一矿物物种，尽管这些固体物质形成在行星演化的不同阶段及不同的物理和化学条件。IMA 还将某些在相同条件下产生的固体物质分解为不同的矿物种类。从理解固体物质及其组成的行星的起源、形成过程和条件的角度来看，这样的合并和分解将会产生误导。另外，根据 IMA 协议，多种天然固体物质不满足矿物分类标准，因为它们是无定形的。值得注意的是，这些非系统化的固体物质间的差异携带着重要的历史信息，如凝聚颗粒如何形成以及它们在行星形成和发展中的作用。

第三，我们探索了根据历史自然种类概念来制定矿物分类协议的前景。Carlos Santana 最近认为：IMA 系统不将矿物视为天然物种。实际上，他认为对物质进行天然分类是无用的。我们同意 Santana 认为在当前的 IMA 体系不提供天然分类的观点。但与 Santana 不同，我们不会否认物质天然分类的前景。相反，我们将 IMA 分类协议的时不变性诊断为问题的根源。特别是，我们考虑了一个新兴的“矿物学演化系统”，该系统根据矿物的历史背景以及随之产生的属性的特殊组合对矿物进行分类。采用历史矿物种类进行分类的最严峻挑战之一是目前对固体物质及其组成的行星的起源和发展的理解具有高度的背景性。与化学和物理学相反，非规律性的历史偶然性在行星地球科学家的归纳推理中起着举足轻重的作用。为了解决这个问题，我们基于过去两个世纪从地质野外研究，天文观测，实验室实验以及对天然样本及其环境的分析中获得的大量信息，提出了一种自举方法。

IMA 矿物分类系统

基于 19 世纪 James Dwight Dana 的化学框架，现代 IMA 矿物系统基于理想化的主要元素组成和几何晶体结构的独特组合，将固体物质分为矿物种类，该分类不受时间和复杂的形成条件的影响。例如，IMA 将“石英”定义为理想化石英原子结构中的纯二氧化硅 (SiO_2)，而不考虑其形成环境。石英不同于 SiO_2 的其他“多形体”，如柯世英和斯石英，由于不同的压力或形成温度，它们具有不同的硅和氧原子间的周期性排列。石英也不同于它的“同晶形体”块磷铝矿 (AlPO_4)，两者具有相同的晶体结构，但化学成分不同。这样，石英就由其化学成分和晶体结构来共同定义。

关于 IMA 分类系统的一个不言而喻的潜在问题是，理想组构的石英在自然界（或实验室）是不存在的，因为每个石英标本都具有无数的痕量和微量元素，同位素变化，流体和固体包裹体，结构缺陷，晶体尺寸和形状以及许多其他信息丰富的属性，这些属性互不相同。IMA 成功地对地球上绝大多数自然凝聚固体进行了系统分类，但是它没有包含那些非理想的属性，而这些非理想的属性正可揭示每个样本的历史细节。

在某些情况下，IMA 协议中对矿物化学和结构的理想化导致分类方面的挑战。考虑天然晶体的化学成分。天然固体通常包含多种不同的元素，经常有数十种不同浓度的元素。为对给定的矿物标本进行分类，将其中一些元素理想化为“必需”元素，同时将其他元素标记为“痕

量”元素或“污染物”，这反映了在固体物质结构和性质上哪些化学元素将是最有成效的理论推测。例如，铍被认为是~100种 IMA 批准的矿物中必不可少的元素，即在确定每种矿物的晶体结构和特性方面，Be 都是至关重要的。Be 还被发现是许多矿物中的微量元素或次要元素，其中 Be 并不是必不可少的元素，对于这类矿物 Be 没有被纳入矿物的定义中。

几乎总是基于晶体中一个原子位置上是否占据一半以上的原子位来判断所含元素是否必不可少的。但是，仍有一些重要且令人混淆的情况。例如，在金属合金中，可以在一个晶粒中包含多种元素，即使元素明显少于原子位置的一半，通常用最丰富的元素来定义矿物名称。因此，组成为 $\text{Os}_{0.26}\text{Ru}_{0.25}\text{Ir}_{0.25}\text{Pt}_{0.24}$ 的天然金属晶粒被称为“钺”，因为 Os 是几种元素中含量最高的，而组成几乎相同的晶粒 ($\text{Os}_{0.25}\text{Ru}_{0.26}\text{Ir}_{0.25}\text{Pt}_{0.24}$) 称为“钶”，因为与其他元素相比，Ru 略有过量。尽管如此，用于识别矿物种类的 IMA 协议仍具有明确定义及分类的优点。但是，正如在下一节中讨论的，这些明确定义的矿物种类并未为地球科学的所有领域提供令人满意的理论框架。

在其他一些有趣的例子中，微量元素似乎对于“固定”特定晶体结构必不可少，因此，微量元素必须是矿物种类定义中必不可少的元素。例如，某些含有 Ca 元素的矿物因含有少量的大原子 Ba 可导致固体结构“膨胀”。因此，可从坍塌和变形的晶体结构转变为高对称性的“完全膨胀”形式。而在 IMA 系统中，不同晶体结构对称性的增加需要命名不同的矿物种类名称。在这种情况下，甚至百分之几的钡原子也是十分重要的。因此，自然世界的复杂性排除了根据理想的端元组成来定义每种矿物的企图。IMA 协议足以对这些有趣的特殊矿物进行分类。但是，旨在保留 IMA 矿物系统实用性的特殊规则对整个地球科学中的归纳推理不一定有用。

天然样本的实际晶体结构总是偏离 IMA 采用的元素间的理想化结构。这些天然偏差表现为结构上的“混乱”，“双晶”，“堆垛层错”，“错位”，“分带”，甚至是“缺陷”，而出于分类目的，这些通常而被忽略。

为将固体物质划分为矿物种类，Dana 对理想成分和结构性质的选择是偶然的，因为现代平衡化学和热力学已经将这些性质和某些地质上重要的物理性质（如硬度、熔点、密度、脆性、光性和电性）密切联系。对于如岩石学，地球物理学和材料科学等主要与固体的时不变物理

性质有关的领域，IMA 矿物分类系统非常有效。地球物理学家可能并不关心矿物的起源或过去发生的改变。他们可能只关心其明显的物理性质，例如可能导致地震的脆性破裂。

实际上，IMA 矿物分类系统满足了地球科学领域的大多数需求，例如岩石力学，地震学和构造地质学。现代 IMA 系统牢固地立足于材料科学，固体化学和物理学，旨在促进对固体材料的物理性质及其经历的地质过程的研究，以用于非历史性的理论，例如发现新的化学元素和化合物，同时了解结晶固体的性质以及实际应用（例如，预测地震的可能性或建造结构合理的大坝）。

此外，基于理想化的化学成分和晶体结构的 IMA 矿物分类在固体理论的发展中起了重要作用——材料的性质是组成材料的原子及原子结构排列的结果。因此，矿物学为材料科学的进步做出了重要贡献，例如发现放射性元素的诺贝尔奖（玛丽·斯卡洛多斯卡·居里，皮埃尔·居里和安东尼·贝克勒尔，物理学，1903 年；玛丽·居里，化学，1913 年），氟的发现（亨利·莫桑，化学，1906 年），X 射线晶体学（马克斯·冯·劳厄，物理学，1914 年；威廉·亨利·布拉格和劳伦斯·布拉格，物理学，1915 年），晶体的电子衍射（克林顿·戴维森和乔治·汤姆森，物理学，1937 年），高压相变（珀西·布里奇曼，物理学，1946 年）和化学键合原理（利纳斯·鲍林，化学，1954 年）。

IMA 系统和行星演化

国际矿物协会的新矿物，命名和分类委员会系统成功地建立了明确的标准，以区分 5600 多种不同的矿物，每年发现并批准 100 种新矿物。该系统为构成地球和其他行星的大多数固体物质提供了必不可少的术语，同时例证了固态物理学和化学的理论原理。

然而 IMA 矿物分类方案并未包含有关这些矿物的形成背景及随时间变化的信息，因此，对于想要了解矿物的时间背景的行星科学家，地球生物学家，古生物学家和其他具有历史导向的地球科学家来说，这是不够的。IMA 协议无法告知星际空间中构成行星的物质的形成方式；集聚在一起并随后被物理、化学或生物过程改变，产生新的固体种类，这些物质在发展和维护多样化的行星环境方面起着重要作用。在这种历史方法中，具有理想化学成分和晶体结构的指定矿物（如金刚石或石英）可能会在多种历史背景下出现，并具有不同的微量元

素，结构缺陷以及独特的尺寸和形状。

IMA 矿物系统的设计不包含反映历史背景的“特质”。IMA 系统将固体物质分类为不保存历史信息矿物。IMA 系统不仅会将具有不同成因历史的固体物质归为一类，而且还会将成因相同的固体物质划分成不同类型，从而使其类别不足以科学地推断地球和其他行星如何形成并随时间变化。

以金刚石为例，IMA 协议将其定义为理想金刚石结构内的纯碳。IMA 系统无法区分 50 亿年前在不断膨胀冷却的星云中气相沉积的纳米金刚石，5 亿年前由含碳水溶液在高温和高压下形成的幔源金刚石，以及 5,000 年前陨石撞击富碳沉积物而形成的金刚石。IMA 系统将这三个类型都归类为“金刚石”，因为它们都是金刚石晶体结构中的纯碳，因此尽管将上述矿物归为一类，但这些矿物具有明显不同的历史形成条件以及相关的物理和化学性质。当考虑矿物的历史背景时，最好将金刚石分为几种。类似的情况也出现在许多矿物上，尤其是在非生物和生物环境中形成的方解石，石英和磷灰石等常见矿物，其形态，微量元素以及其他物理和化学属性都显著不同。

尽管具有基本相同的成因，IMA 却导致将固体物质拆分为不同的矿物种类。由两个或多个元素相互替代从而导致成分连续的固溶体很好地说明了这一问题。例如，铁和镁以固溶形式存在于橄榄石，辉石，云母和石榴石等许多常见的矿物结构中。铁和镁的端元分别定义为不同的矿物。例如，镁橄榄石 (Mg_2SiO_4) 和铁橄榄石 (Fe_2SiO_4) 代表了连续化学成分的端元，而在自然界中，铁和镁的混合比约为 50:50 的样品并不少见，此种情况无论称为那种端元都不合适。此外，许多晶体是“分带的”导致矿物具有具有渐变的 (Fe/Mg) 元素比及振荡变化的成分，一些区域以铁为主，而其他区域以镁为主。IMA 将单个分带的颗粒定义为两个不同的端元，但这两个端元都不能代表实际的晶体组成。同样的情况也出现在数百种 IMA 定义的矿物物种上，包括占地壳体积和质量超过 99% 的大多数常见成岩矿物。

将天然矿物拆分和归并为 IMA 端元矿物不仅是临时的，而且可能会对中间成分矿物的正确命名产生混淆，从而掩盖了各个样本不同形成模式的信息。再次以镁橄榄石为例，镁橄榄石是地球上地幔中的主要矿物。在这种情况下，镁橄榄石出现在源于地球深部的火山岩中，通

常有 10%铁替代镁。这种含铁的镁橄榄石在成分上不同于含镁矿物白云石在地壳浅部变质形成的近端元的 Mg_2SiO_4 。因此，通过忽略橄榄石中铁含量的差异（将镁橄榄石和铁橄榄石分成两个物种），但将所有 Mg_2SiO_4 混为一种“镁橄榄石”，就丢失了样品重要的成因信息。

矿物固溶体的复杂性以及带来的分类难题，无法通过对 IMA 系统进行简单的修改来解决。甚至在某些情况下，IMA 命名法似乎与自身的准则大相径庭。以成岩矿物单斜辉石为例，成分一般用“四角图”（图 1）来表示，其成分介于三个理想化的辉石端元之间：顽辉石（EN： $Mg_2Si_2O_6$ ），铁辉石（FS： $Fe_2Si_2O_6$ ）和硅灰石（WO： $Ca_2Si_2O_6$ ）。这三个端元可以表示为一个“三元图”。由于辉石成分不能具有超过 50%的钙原子；因此，辉石四边形由四个端元来界定：EN，FS，透辉石（DI： $CaMgSi_2O_6$ ）和钙铁辉石（HD： $CaFeSi_2O_6$ ），如图 1 所示。

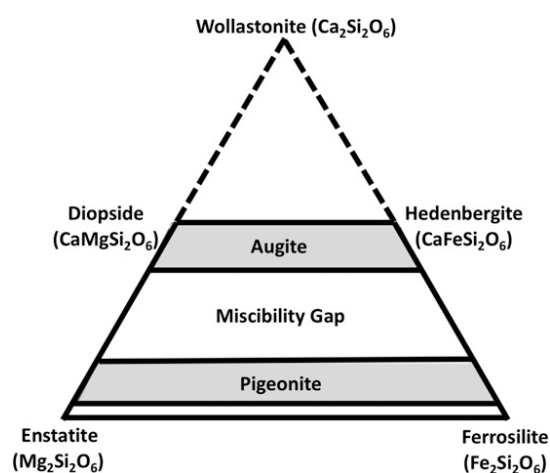


图 1 辉石成分 $(Mg,Fe,Ca)_2Si_2O_6$ 的四角图。大多数天然辉石不在四角图的任一个角附近，因此被称为“普通辉石”或“易变辉石”。

某些辉石的成分接近 EN，FS，DI 或 HD 端元组分，因此可以明确地命名为四个端元中的一种。但是，绝大多数单斜辉石的成分都位于四角图之间，IMA 通过批准另外两个名称来命名这种情况。“普通辉石”定义为钙原子约为 35-50%的辉石。另外，“易变辉石”定义为具有 5-15%钙原子的辉石。（请注意，很少观察到钙原子为 15%-35%的辉石）。普通辉石和易变辉石定义为边界内具有任意化学组分的固溶体，这与大多数其他 IMA 命名原则不一致。

对于产在原始陨石中的一组辉石，这种情况变得更加混乱，陨石中的辉石含有大量的替代 Mg，Fe 和 Ca 的其他元素（例如铝和钛）。因此，此种辉石组成明显位于四角图之外。抛开

辉石命名法原则，这些辉石被陨石研究界统称为“深绿辉石”。

关于 IMA 协议的第三个问题，除了合并和拆分问题外，还涉及 IMA 系统通常不包括的天然凝聚相。在几乎所有情况下，IMA 都不会识别非晶态物质（液态汞和蛋白石除外）。然而，数量惊人的凝聚行星物质，包括不同种类的火山玻璃（例如“黑曜石”）；土壤中结晶度低的粘土相；以及一系列生物衍生的固体（例如琥珀，煤和干酪根），缺乏明确的晶体结构，因此没有被归入 IMA 矿物系统之内。但是，这些物相对解释行星演化可能至关重要。例如，好奇号火星车测试的许多火星土壤都含有超过 50 wt% 的非晶态物质。火星土壤的这些成分被认为是在古老的湖泊中以凝胶形式沉淀的，因此有一个重要的故事可以讲述火星表面的早期历史。我们得出的结论是，尽管 IMA 分类系统在许多地质领域中起着至关重要的作用，并且在化学和物理学领域具有牢固的理论基础，但该分类系统并不适用于诸如行星科学等地质历史领域。

结果

行星地球科学家需要一种更具历史意义的矿物分类方案，该方案将固体物质按照形成过程和条件的相似性和差异性进行分类。但是，该历史自然种类的概念是有问题的。科学中使用的绝大多数分类系统都是时间无关的。仅根据属性之间的相似性和差异性将物理实体分为几类，而不考虑成因。化学元素周期表提供了一个经典的例子。元素是否为氦仅取决于其原子数，该原子数等于其原子核中的质子数。氦是由恒星内部的核聚变反应以及铀和钍等重元素的放射性衰变产生的，这与它作为氦元素的身份无关。忽略产生元素氦的条件和过程的理由是基于化学理论的。氦气的化学性质（无色，无味等）及其化学行为（与元素周期表中其他元素缺乏反应性）不取决于其产生方式；例如，普遍的化学原理解释了为什么自然界中不存在含氦矿物。

真正具有历史意义的自然物种是在进化生物学中。并非生物之间的所有相似性都与理解其进化关联性有关。仅根据形态和结构的相似性将生物分为进化的类型是错误的。进化生物学家需要区分共同祖先(同源性)导致的相似性和非同源(类比性)产生的相似性。在达尔文理论出现之前，不需要在同源和类比之间进行区分。生物物种被视为是单独创造和不变的，本质上是永恒的。17 世纪有关蝙蝠是否为鸟类的辩论提供了一个突出的例证。辩论基于两者都有

翅膀的事实，并围绕着它们的翅膀是否足够相似来将它们归为同一类动物的问题展开。哲学家约翰·洛克（John Locke，30岁）驳斥了这场辩论毫无意义，并呼吁争议者做出随意的决定。他认为，解决争论没有原则上的区别。然而，随着达尔文进化论的到来，很明显辩论并非毫无意义。蝙蝠和鸟类的翅膀是相似的，但不是同源的。蝙蝠和鸟类没有共同的有翼祖先。相比之下，鲸鱼和斑马的乳腺现在被认为是类似的，因为它们来自一个共同的哺乳动物祖先。然而，直到18世纪中叶，鲸鱼仍被归类为鱼，因为它们在外部形态和生活方式上更类似鱼。Linnaeus在1735年的《自然系统》第一版中将鲸鱼归类为鱼，这一保持到1756年的第九版。但是，在1770年代，包括林奈（Linnaeus）在内的大多数分类学家都将鲸鱼归类为哺乳动物。这样做的理由仍然是基于生物之间明显的相似性和差异性，更具体地说，是基于鲸鱼，鱼类和哺乳动物的内部解剖和生理特征。他们认为鲸鱼更像哺乳动物，而不是鱼类，例如，因为它们有肺和四室的心脏，温血动物，并哺育幼崽。直到达尔文理论出现，才认识到鲸类动物和其他哺乳动物之间这种内部相似性的历史意义。达尔文进化论解释了对于理解生物体之间的相互关系，为什么生物体内的解剖学和生理学（以及我们现在知道的基因组学）的相似比外部形态和生活方式更有意义。达尔文之前根据其内部解剖学和生理学将生物划分为生物种类的做法在事后看来是正确的。因为这一侥幸的做法符合达尔文进化论的内涵。

不幸的是，进化生物学并没有提供一个很好的模型来发展历史矿物种类的概念。将生物体分类为历史进化类型是基于不同的属性(生物体特征)，这些属性是同源的结果。行星地球科学家通常不关心根据矿物是否共享祖先而将矿物分组，[尽管Heaney介绍了矿物进化树的概念]。相反，他们关心的是根据产生这些矿物的成因过程和物理化学条件的相似性和差异性，来将矿物归类。因此，历史地球科学中归纳的成因概念不同于进化生物学中的成因。然而，在矿物学和生物学上仍存在一些有启发性的相似之处。就像在进化生物学中一样，仅是固体物质特征之间的相似性不足以将它们系统地分类为历史自然类型。IMA系统将固体归类为金刚石这一事实几乎无法说明其形成所涉及的条件和过程，因为IMA系统使用的物性（理想化的主要元素组成和晶体结构）组合并未包含历史信息。

行星科学家面临的挑战是，鉴定出揭示行星物质起源和演化最可靠的固体物质的特征组合，以及它们在地球行星演化中的作用。固体材料的许多特性可以揭示矿物的共生模式，而IMA将这些特性视为相对于理想主元素组成和晶体结构的无关紧要的偏差。微量的碳或氮同位素

可以揭示以往超新星爆炸的矿物起源。独特的形态可以明确指出微生物沉淀的晶体。这些信息丰富，具有潜在历史意义的属性包括微量和次要元素，同位素比率，流体和固体包裹体，晶体的大小和形状，共生的矿物，结构缺陷以及许多其他物理和化学特征。

IMA 所定义的金剛石提供了很好的例证。星云中的金剛石与地幔衍生的金剛石的不同之处在于它们的碳同位素组成，形态和地质背景。所有这些特性均未被 IMA 系统考虑。在不同压力下，由不同类型的碳溶液在高压下形成的幔源金剛石在是否存在氮杂质（“I 型”金剛石）或特征性金属包裹体（“II 型”金剛石）方面有进一步的区别。实际上，IMA 定义的金剛石至少包含五种不同历史的矿物类型，每种矿物均具有一套独特的明显特征，这些特征可提供有关它们形成条件，过程和时间的关键信息。

制定演化的矿物分类所面临的挑战是确定在地球的演化过程中哪些信息丰富的矿物学特征可提供具历史意义的信息。当前 IMA 矿物分类系统不足以满足此目的。

通过什么过程可以设计出这种具历史意义的矿物分类系统？理想情况下，地球学家可以诉诸类似达尔文生物进化论的新兴的行星物质发展理论，将本质上的地质同源性与单纯的地质相似性区分开来。这种历史方法的许多方面已经具备。专家组已研究并解释了恒星大气、星际空间中冷却的分子云、形成太阳系的早期阶段的恒星云以及为新兴行星和卫星提供原材料的第一代星子中的矿物形成模式。同样，科学家们专注于地球演化的最早阶段，即地核，地幔和地壳的分异。海洋和大气层的形成；全球尺度构造的发展；随之而来的矿体的就位；微生物生命的起源；主导许多近地表矿物形成的生物圈的出现。对地球地质演化过程的定性探索即将到来，并为矿物学的演化提供了框架。缺乏的是将地球演化的各个不同阶段整合到一个矿物属性信息丰富的演化的理论框架中。

讨论

分类系统的科学实用性在于，它们能够在多样性中揭示统一性，以便对自然现象领域进行归纳（解释性和预测性）推理。将固体物质分为矿物种类的 IMA 系统提供了很好的例证。它建立在理想化的化学成分和晶体结构的双重支柱上，阐述了现代化学理论和固体物理学，特别是物质的性质是其成分和化学元素排列的结果。成分和晶体结构不仅为固体物质划分为不

同的矿物种类提供了基础，而且为理解其属性之间的许多异同提供了原理。

但是，IMA 系统仅关心矿物的非时间属性。天然矿物形成环境随时间的演变以及随之而来的矿物及其属性的变化在其分类方案中不起作用。而后者是成功归纳推理行星物质起源及其在地球和其他陆地行星演化中的作用的关键。

鉴于这些考虑，出现了以下问题：将固体物质分类为历史矿物种类的理论基础是什么？是否有历史性的化学理论可以指导矿物成因分类学的发展？我们是否可以鉴定与矿物起源和“演化”相关的潜在统一的历史原理，而不是关联松散的经验法则。

所需要的矿物分类系统能够区分具有历史信息的物质与不具有历史信息的物质之间的相似和不同之处，同时揭示出物质的成因。从这个意义上讲，我们的目的与达尔文生物进化论的目的相当，通过对生物之间差异（形态，解剖学和生理学）的实证观察为区分不同生物群体（同源或非同源）之间的相似性和差异性奠定了理论基础（遗传和自然选择的结果）。但是，如前所述，非生命固体物质不具有遗传性（可遗传变异的物理来源），也不能进行自然选择，化学意义上的“在化学元素的不稳定排列中选择热力学上更稳定的相”除外。简而言之，类似于达尔文进化论为生物体提供的原理，历史地球科学家目前缺乏将固体物质分为矿物种类的统一成因学原理。

凝结的行星物质和行星体的起源和发展可以基于哪些非生物学，成因学原理？有充分的理由认为存在这样的原则，尽管很明显，但我们对这些原则的理解仍处于初步阶段。一个被广泛接受的模型认为，宇宙始于大约 138 亿年前的大爆炸，然后相继经历了许多物理化学阶段，每个阶段都使宇宙的化学和结构复杂化，最终产生了支持第一批生物出现的行星环境。在这种情况下，矿物演化只是“宇宙化学演化”或“宇宙演化”理论框架的一个方面。宇宙化学演化把达尔文的理论作为一个特例，是恒星和行星物质日益复杂化（广义上讲是进化）的诸多方面之一。由于局部环境特征的逐步复杂化（包括压力，温度，化学成分，尤其是这些变量的时间顺序和变化率），出现了新的化合物，包括我们称之为矿物的各种天然凝聚固相。随着时间的流逝，其中某些环境在化学和结构上变得足够复杂，足以发展出符合达尔文进化论的生物。

宇宙化学演化所依据的一般原理的逻辑特征——它们是确定性的还是概率性的，它们代表时间无关的过程还是本身与时间无关——尚不清楚。迄今为止，科学界广泛认可的唯一非时间自然定律是热力学第二定律，但它的性质是错误的，因为时间和复杂化的方向背道而驰。在这种情况下，许多研究人员推测，对于开放的、自我构建的物理化学系统，尤其是有机体和生物圈，可能还有其他热力学定律。但是，我们仍然对宇宙日益复杂化的成因仍然不知。

宇宙演化模型希望解释的是，存在着一种时间上不对称的、日益复杂的模式：138 亿年前大爆炸产生不久后，一些原子由新凝聚的夸克和轻子形成。然后由原子形成分子；原子和分子通过引力凝聚产生了恒星。而恒星则进行了核合成，产生了元素周期表中的大部分化学元素。

在动荡，冷却的星云中，出现了第一批矿物，这些矿物成为了小行星、行星和卫星的组成部分。行星成为矿物演化的引擎，因为多样的化学和物理过程将元素构成新的组合，组合的元素又会受到新的压力和温度机制的影响。在地球上，或许宇宙内的无数平行世界上，富含矿物质的环境促进了生命的起源，继而随着生命和岩石的共同进化，发展了新的矿物形成环境。确实，所有的细胞都有生物化学上的提醒，提醒我们生命开始的艰难，超过三分之二的矿物物种是通过地球近地表环境的生物变化而产生的。

基于固体物质历史启示和信息丰富的化学、物理和生物属性，我们提出了一种自举的方法来建立矿物分类系统，尽管不了解其统一理论原则的本质。我们把宇宙所表现出的时间上不对称的日益复杂的模式作为此类原理存在的有力证据。核心思想是收集历史上揭示各种属性的集群。如同在进化生物学中一样，应将具有共同变化的特征视为历史自然种类的错误指标。仅凭属性共变这一事实，还不足以得出它们代表历史自然种类的结论。例如在进化生物学中，以及 IMA 系统在许多地质应用中所强调的，由于非历史原因，属性经常共变。因此，重要的是，不要仅仅依靠属性的共变来读取其历史意义。关键是寻找最能揭示共变成因的属性。

可以从高度相关的经验法则开始来完成此收集。随着越来越多的证据积累，最初似乎是历史上完全不相干的属性集群间的统一模式可能会出现。可以根据这些发现来修改分类，以提高分类体系的范围和可靠性，从而提高其支持日益强大的归纳推理的能力。以这种方式，由高

度关联的经验法则发展的历史矿物种类演化体系,可能在日益复杂化的宇宙模式背后发现尚未理解的统一原理的确切本质。

三种并行(自举)方法发展了所提出的矿物学演化系统。首先,我们基于数百年来地质野外研究,天文观测,实验室实验以及对天然样品及其环境的理论分析,对数十种形成矿物的独特环境进行分类。大量的研究(大部分来自矿物本身)记录了行星演化的各个阶段,其中许多是根据古代沉积物推断出来的,另一部分是在当今活动地球上观察到的。矿物学的演化论必须建立在这个基础之上。

其次,我们仍借助由 IMA 分类系统划分的详细的矿物分类。在众多定义的矿物的历史属性中,化学成分和晶体结构必须包括在内。从这个意义上讲,任何历史矿物分类体系都基于 IMA 标准。

第三,我们已经开始开发和扩大矿物数据库,这将为定义独特的历史自然种类提供定量基础。每个矿物标本都是信息丰富的具有数百个可量化属性的物体。我们认为,收集起来的矿物属性保存了该矿物的历史起源以及随后在一系列环境中发生变化的记录。此外,如果有足够多的样本和无数仔细测量的属性,我们可以应用聚类分析方法来区分给定的 IMA 矿物的不同种群。因此,诸如大小,形状,颜色,包裹体,同位素和微量元素之类的特征应足以区分星际金刚石,地幔金刚石和撞击金刚石。同样,属性的“特征”(从 IMA 角度来看)的组合可用于识别生物与非生物成因矿物。

要实现这一愿景,需要两项平行的研究工作。首先,我们必须回顾和综合过去 200 年来记录已知矿物的历史形成模式的大量研究文献。这种综合是必然的,不完整的和推测性的,但是新兴的历史框架将为演化系统提供理论背景。同时,这种框架对于比较和对比不同行星和卫星(例如地球和火星)的矿物演化至关重要。

同时,一项关键的长期工作必须是将现有的和新的矿物数据资源整合到一个可获取的,综合的“FAIR”(可查找,可访问,可共同操作,可重复利用)的存储库中,该数据库可为数百万个样本列出数百个属性。对历史自然种类的精确定义只能通过对大量特征鲜明的标本的多维

分析来实现。这样的努力已经开始，但是成功地开发、扩展和管理这样的数据资源将成为后续矿物学家的永恒挑战。

我们并不是主张一种进化(成因)的矿物分类系统应该取代传统的矿物分类系统(IMA)。正如哲学家约翰·杜普雷(John Dupre')所建议的那样，原则上，可以用各种不同的方式对任何一组实物进行分类。一种概念的科学价值(或自然性)取决于它所创立的分类在多大程度上支持概括的归纳推理。IMA 系统成功地支持地球，行星和固体科学领域中与时间无关的归纳概括，而这正是它最初设计的目的。但是，IMA 系统不支持历史地球科学，尤其是在对比行星演化方面。因此，在地球和行星科学领域中，需要一种具有历史导向的矿物分类系统。

历史矿物种类分类学是否应该被视为对标准的、独立于时间的 IMA 矿物学系统的补充，还是在历史背景下取代它，这是一个有待解决的哲学问题。但是，值得注意的是，生物科学中的物种概念在实践中是多元的，例如，结构生物学家使用类型学(形态/表型)物种概念，进化生物学家使用进化(遗传进化)物种概念。尽管付出了巨大的努力，生物学家仍未提出适用于整个生物科学的生物物种的概念，并且一些生物学家开始质疑单一的物种概念是否可行。尚不清楚地球科学是否最终将面临同样的困境。

(翻译：何畅通/地质地球所矿产室；校对：周起凤，[秦克章](#)/地质地球所矿产室)