血吸虫（Schistosoma japanese）成虫氨酸色谱，如谱 2，谱中"♂"为雄虫，"♀为雌虫。

宿主血液氨酸色谱，如谱 3，谱中"I"为正常人体血液，"II"为牛血，"III"为家兔血液，"IV"为小白鼠血液。

据实验结果分析，安徽芜湖地区肋壳钉螺与无肋钉螺的足肌氨酸，在层析中，未能证明有种属区别（谱 1）。血吸虫成虫的虫体氨酸与中间宿主——钉螺的足肌氨酸于色谱中，至为近似。血吸虫宿主——人、畜血液的氨酸色谱（谱 3）均具有与血吸虫色谱相应的氨酸色斑。

据以上三种色谱的相互比较，于血吸虫成虫的氨酸色谱上，多出了一个明显的未知氨酸，该氨酸色斑于谱上的迁移率（Rf）相当于 0.6—0.7 之间（接近缬、酪、甲硫等氨酸的位置），同时可见该氨酸色斑于雄虫体内要明显地大于雌虫（谱 2）。有关这一氨酸于血吸虫体内如何代谢，在虫体的生理、生化机制上有何作用？均有待进一步研究。另外，该氨酸在血吸虫病学中有否意义，更值得探讨。

本工作蒙江西省寄生虫病研究所孙振中教授指导和本所夏健、牟鹏文所长审阅，特致谢意。

庫水硼鎂石的晶体結构分析

叶　大　年

（中国科学院地质研究所）

库水硼镁石（$Mg_2B_6O_{11}\cdot 15H_2O$ Kurnakovite）是一种少见的镁的含水硼酸盐矿物。首次发现于苏联哈萨克斯坦[1]，第二次发现是在美国的加州[2]，而 Heinrich 将其誤认为是多水硼镁石（$Mg_2B_6O_{11}\cdot 15H_2O$ inderite）了，因此造成了在名称上英文和俄文之间的混乱。后来沙勒和姆罗斯[3]把这个问题澄清了，指出库水硼镁石和多水硼镁石是一对同质多象变体，前者是三斜的，后者是单斜的。

本工作中所用样品系谢先德同志提供，曾由谢先德等做过详细的矿物学和结晶学研究[4,5]。本文作者又重新测定了晶胞參数：

$a=8.36\pm0.02$ Å，$b=10.72\pm0.02$ Å，$c=6.42\pm0.02$ Å，$\alpha=98°25'\pm10'$，$\beta=106°6'\pm10'$，$\gamma=108°12'\pm10'$。

晶胞体积 493.2 Å^3，理论密度 1.842（实测：1.847±0.01）。单位晶胞有一个分子 $Mg_2B_6O_{11}\cdot 15H_2O$，空间羣为 PI。

实验中用一个 0.2×0.3mm 大小的晶面发育完整的晶体，以晶体形态特征为依据，顺利地进行了定向。用 Cu 靶收集了 $hk0$、$hk1$、$hk2$、$hk3$、$0kl$ 的强度数据，强度数据用迭片法收集，并以$\sqrt{2}$为间距用同一晶体作了强度标尺。

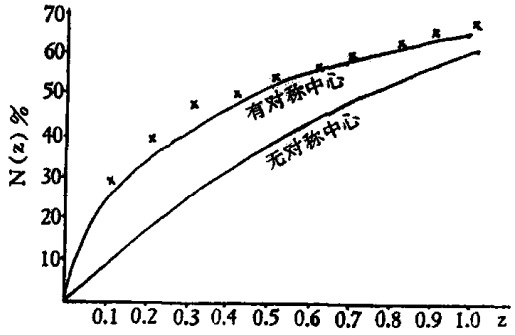


图 1　库水硼镁石 $hk0$ 反射强度的分布与有无对称中心的理论曲线的对比

收集到的强度作了 Lp 因子的修正，并用威尔逊法[6]作了还原和温度因子的修正。

利用 $hk0$ 晶带的强度数据，用荷维尔斯[7]法验证了晶体是有对称中心的，空间群为 $P\bar{1}$。图 1 中各点差不多都在有对称中心的曲线上。

库水硼镁石与多水硼镁石有同样的化学成分，克莱斯特[8]曾假设它们都具有两个硼氧四面体和一个硼氧三角形联成的环状骨干。红外线吸收光谱的研究[9]，证明库水硼镁石、多水硼镁石和板硼石结构上有相似之处。拍契[10]等对多水硼镁石和库水硼镁石作出了核磁共振谱的分析，证明两者分子中有三种硼位置，其中两种是四次配位，另一种是三次配位。在此以前已知的板硼石结构中[11]，有两个四面体和一个三角形环的存在。不久前多水硼镁石的结构被鲁曼诺娃等[12]测定了，这种环状硼氧骨干再次被证实在矿物中是存在的。因此可以推测库水硼镁石也可能具有这样的骨干，加之，由谢先德等的研究资料看出，库水硼镁石与多水硼镁石的差热曲线和脱水失重曲线几乎是一样的，我们就更坚信这一点了。这样对我们分析库水硼镁石的结构提供了有利条件。

由于分子中不存在重原子，所以利用派特逊函数法是有困难的[13]，等重量的峯较多，不易找出由对称中心联系起来的一对原子之间的向量（哈克尔峯）。但是我们运用了一种综合的方法[14]，找出了 Mg 原子的近似的 x，y 座标，因而也就解释了派特逊投影 $P_{(uv)}$，用重迭法求出了最小函数。因为最小函数图中极值仍较多而弥散，故配合以试探法（Trial and error），经过 17 次试探，提出了试用结构的 x，y 座标，并作出第一张电子密度图。这张电子密度图基本上反映了结构的模型，然而还有一些"诡峯"。为了很好地进行座标修正，我们紧接着进行了一次誤差合成（Error-synthesis[15]），由誤差合成图上显示了大多数原子都必须作大幅度的移动。结合晶体化学性质：键长和键角，我们用连续富利叶合成的方法对原子的 x 和 y 座标进行了五次修正，下面列出的是第五次富利叶合成后修正的原子座标：

	x	y		x	y
Mg	0.217	0.235	O_9^{**}	−0.033	0.167
O_1^{*}	0.700	0.235	O_{10}^{**}	0.050	0.217
O_2^{**}	0.367	0.235	O_{11}^{**}	0.180	0.417
O_3	0.505	0.137	O_{12}^{*}	0.467	0.334
O_4	0.495	0.097	O_{13}^{**}	0.158	0.650
O_5^{*}	0.280	−0.126	B_1	0.550	0.217
O_6	0.285	0.067	B_2	0.310	−0.010
O_7^{*}	0.235	−0.015	B_3	0.350	−0.015
O_8^{*}	0.235	0.037			

O*——氢氧根，O**——水。

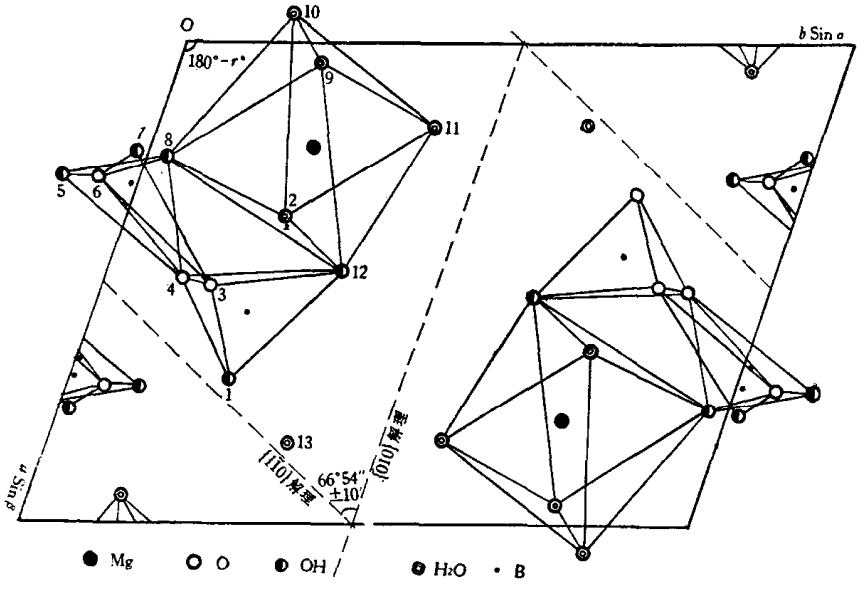


图 2　库水硼镁石结构沿 Z 轴的投影

晶体结构的配位多面体形态如图 2 所示，分子的基本单元部分与多水硼镁石完全一样，仅仅方位定向不同而已。

结构中水、氢氧根和氧的位置分配是根据电价平衡来确定的。

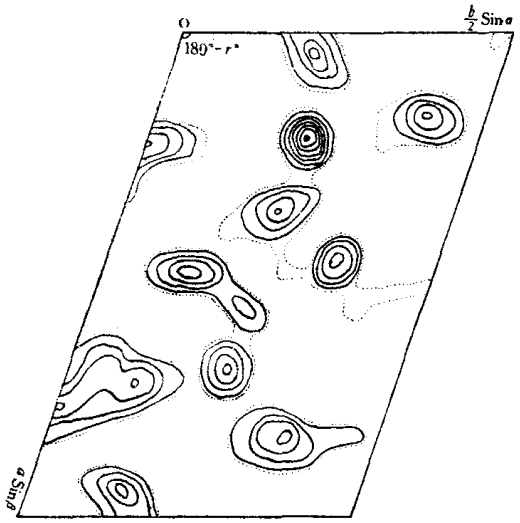


图 3　第五次富利叶合成的电子密度沿 Z 轴的投影

由电子密度(图 3)看来，O_3 与 O_4、O_5^*、O_6、O_7^* 和 O_8^{**}，以及 B_2、B_3 在 (001) 面投影上相重迭，故 O_3、O_4、O_5^*、O_6、O_7^* 和 O_8^{**} 的座标 (以及 B_2、B_3) 是不够十分精确的。原子的 x，y 座标的进一步修正以及 z 座标的探求工作正在继续进行。

库水硼镁石结构分析的结果证明克莱斯特的假设是完全正确的。板硼石族的矿物 (按谢先德分类[16]) 中就只剩变水方硼石的结构未测定了。

由图 2 可以看出(010)方向和($1\bar{1}0$)方向是薄弱的方向，这正好解释了库水硼镁石的两组完好的解理 {010} 和 {$1\bar{1}0$}。解理夹角计算值为 66°54′±10′ (实测 67°)。

库水硼镁石和多水硼镁石是一对引人注意的同质多象变体，由于“分子”的基本单元一样，都是 $MgB_3O_3(OH)_5 \cdot OH_2O$，均有一个不参加配位多面体的水分子以氢键与前者相连，两者分子式均为 $[MgB_3O_3(OH)_5 \cdot 4H_2O] \cdot H_2O$。这就难怪它们的红外线吸收光谱、核磁共振谱，以及差热、脱水失重曲线都很相似了。

本工作是在导师何作霖教授指导与关怀下进行的，工作过程中曾得到彭志忠副教授自始至终的热心帮助和鼓励，承蒙谢先德同志提供样品和张培善同志的协助，全文最后经何作霖教授审阅，作者在此一併致谢。

[1] Годлевский М. Н., *Докл. АНСССР*, **28**, 7, 639—641 (1940).
[2] Heinrich E. W., *Am. Min.*, **31**, 1—2, 71—76 (1946).
[3] Schaller W. I. and Mrose M. E., *Am. Min.*, **45**, 5—6, 732—734 (1960).
[4] Се Сянь-дэ и Чжи Мянь-пин, *Scientia Sinica*, **12**, 4, 575—585 (1963).
[5] Се Сянь-дэ, Лю Лай-боа и Пэн Чжи-чжун, *Scientia Sinica*, **13**. 1, 168—169 (1964).
[6] Willson A. J. C., *Nature*, 150, 152 (1942).
[7] Howells E. R., Phillips D. C. and Rogers D., *Acta Cryst.*, **3**, 210 (1950).
[8] Christ C. L., *Am. Min.*, **45**, 3—4, 334—340 (1960).
[9] Menke Horst, *Jenaer. Jahrb. Teil 1 Jena*, 239—247 (1961).
[10] Petch H. E., Pennington K. S. and Cuthbert J. D., *Am. Min.*, **47**, 3—4, 401—404 (1962).
[11] Clark J. R. and Christ C. L., *Acta. Cryst.*, **12**, 162 (1959).
[12] Руманова И. М. и Аширов А., *Кристаллография*, **8**, 4, 517—534 (1963).
[13] Порай-Кошиц М. А., Практический курс рентгеностуктурного анализа, том. 2, стр. 438, Издательство ГМУ, 1960.
[14] 叶大年，本期科学通报，735 页。
[15] Crowfoot D., Bunn C. W., Rogers-Low B. W. and Turner-Jones A., The X ray Crystallographic Inverstigation of the Structure of Penicillin, Chapter 2. of The Chemistry of Penicillin, Princeton University Press, 1949.
[16] 谢先德，地质论评，**22**，3，210 (1964)。