



基础土壤学研究的方法论思考：基于土壤化学的视角*

李 航 杨 刚

(土壤多尺度界面过程与调控重庆市重点实验室, 西南大学资源环境学院 重庆 400716)

摘 要 长期以来, 不少人片面地认为, 土壤学在学科属性上仅是应用型的, 在研究手段上仅是实验型的, 在研究方法上必须是整体综合的。本文系统地分析了这些片面认识对土壤学发展的危害, 提出土壤学发展应特别强调“分析”的方法, 并在深入分析的基础上实现自然而系统的综合。阐述了土壤学研究的三个基本观点: 一是充分认识土壤系统的特殊性根基在于其对物质亚原子结构的重大影响。与普通水溶液中的情况相比, 土壤中的离子、原子和分子在本质上已发生了很大变化。所以, 如果土壤确实从亚原子尺度上改变了物质的结构与性质, 开展土壤学中独特的量子效应研究将是重要的。其次, 充分考虑土壤系统的特殊性, 在方法上应从宏观尺度、介观尺度、分子尺度至亚原子尺度对土壤进行逐级分解简化, 并借助于量子力学原理和方法, 最终, 在亚原子尺度上彻底剖析土壤, 以获得土壤学自己的科学基础。第三, 以土壤中独特的量子效应为基础的研究, 可构建“亚原子结构—土壤微观机制—宏观效应”三者间的直接关联, 由此实现土壤中不同尺度间科学原理的自然转换, 最终构建独立的土壤学知识体系。

关键词 先分析后综合; 多尺度分解; 亚原子结构; 量子力学

中图分类号 S15; N3 **文献标识码** A

美国土壤学会前主席Gardner曾说: “一些人(错误地)认为与土壤有关的知识值得了解的已完全了解, 目前要做的仅仅是对这些知识加以适当的应用而已。即使学识渊博的科学家也常常错误地认为, 其他学科发现的自然科学规律和理论, 不需要任何想象和创新就可以直接运用于土壤学的研究当中。在他们看来, 土壤学不过是应用生物学、应用化学或者应用物理学的一种表现形式”; 并指出: “所有那些认为我们对土壤完全了解的人们, 会发现自己已经置身于一百年前相信科学知识是有极限的自然科学家的行列”^[1]。的确, 当今土壤学的研究现状堪忧: 一是与土壤有关的应用研究越来越火热, 但与其基础理论和原理相关的研究相对惨淡; 其次是越来越多的冠以“土壤学”的研究却偏离了“土壤”本身。虽然, 在学科交叉领域出现暂时性的偏离是非常必要的, 但如果越来越多的研究长期偏离“土壤”这一独特体系而渐行渐远, “土壤学”这门学科或将最终被“撕裂”。尤其值得注

意的是, 今天的“土壤学”教科书与半个世纪前的相比, 其核心知识内容几乎无变化, 过时的甚至错误的概念与知识俯拾即是。这些现象似乎给基础土壤学的未来展现了一幅悲凉的画面。

基础土壤学作为一门独特的自然科学, 它还有未来吗? 如果有, 如何叩开这扇“未来”大门? 这可能是近10~20年间基础土壤学研究者共同思考的一个重要问题, 而且, 目前仍未找到准确的答案。本文认为, 当今最紧迫的任务是对土壤学这门学科的发展进行深刻的“方法论”思考(更确切地说是“反思”), 以期获得叩开“未来”知识大门的钥匙。本文旨在抛出一些经过认真思考的有关方法论的浅见, 以求得学术界对基础土壤学研究“方法论”的关注和再思考。

1 对“盲人摸象”寓意的反思

中国人对“盲人摸象”的故事并不陌生, 它

* 国家自然科学基金重点项目(41530855)资助 Supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 41530855)

作者简介: 李 航(1963—), 教授, 主要从事界面化学与土壤化学的研究。E-mail: lihanswu@163.com

收稿日期: 2017-03-31; 收到修改稿日期: 2017-05-02; 优先数字出版日期(www.cnki.net): 2017-05-04

给我们的启示是：不能片面地看待和认识问题，否则将得出错误的、甚至荒谬的结论，如同“只能片面”地认识那头大象的盲人们，有的声称大象像扇子，有的声称像柱子，还有的坚持认为像绳子，……这里强调“只能片面”这几个字，是因为盲人不可能用眼睛“看清”大象的全貌。

在土壤学界，已经到了不得不认真反思这个故事寓意的时候。试问：土壤学研究者面对“土壤”这个复杂的实体，与盲人面对那头大象的外观形态在本质上又有何区别？我们虽然有明亮的眼睛，能够看清土壤中的电子如何运动吗？能够看清土壤中原子、离子和分子如何相互作用吗？能够看清 Ca^{2+} 如何强化腐殖质与黏土之间相互作用从而提高团聚体的稳定性吗？能够看清 H^+ 的吸附如何引起硅氧四面体和铝氧八面体解体进而导致 Al^{3+} 的释放和土壤酸化吗？……答案是显而易见的：“绝不可能！”

其实，人们在面对一个实体的内在运行机制与盲人面对一头大象的外观形态时，在很多方面是类似的。除了采用“盲人摸象”式的探索与研究之外，还能有什么更好的方法可揭示土壤内部复杂过程的发生机制？面对土壤的内部运行机制，研究者就如同“盲人”。我们应该向那些摸象的盲人学习，因为他们摸到的“大腿”、“耳朵”等虽然均不能代表大象，却是大象身体真实存在的一部分，盲人毕竟用自己的方式获得了正确的局部信息。试想，如果盲人能够做到不“以偏概全”，坚信各自获得了正确的局部信息，那么，这些盲人就将“继续摸下去”，以获得更多的局部信息。毫无疑问，最终，大象的完整形象将清晰地呈现于盲人的脑海之中。这就是我们所熟悉的“先分析后综合”的方法论。但非常遗憾，在这个故事中，最重要的这后半部分并未出现。如果这后半部分在故事中出现了，或许它可带给人们更有益的启示。

2 人类自然科学发展史的启示

人类已经创立了如此发达的现代自然科学，大多基于“先分析后综合”的方法论基础。正如罗杰·科茨^[2]在《自然哲学的数学原理》的序言中所说：“从某些选择的现象用分析法导出自然界的力和更单纯的力的定律，然后由它们通过综合法给出其他现象的构造。这是最佳的哲学方法，是

我们无与伦比的作者（牛顿）认为应优先采用的方法”。

为什么亚里斯多德“运动的物体要继续运动，必须有力来维持”的错误理论统治了人类长达近2 000年？原因有两方面：一是地球上任何一个物体的运动均是受多个力同时支配的复杂受力系统，如果不对这个复杂受力系统进行“选择性”的分解、简化和抽象，就仅能获得表象信息，无法洞察其内在本质；二是由于这种非本质的表象性理论与人们的感官所获得的经验正好相符，所以，这些表象性理论能够迅速被人们所接受并传播。而且，要纠正这种偏见也将极其困难。这正如“坚实的土块可被雨滴直接击碎”这一荒谬的表象性解释一经提出便立即被土壤学界普遍接受，并至今作为土壤流失主要动力的正统解释一样。

在亚里斯多德提出上述理论大约2 000年后，伽利略从一个地球上根本不存在的、极其简化的抽象运动实验中发现了运动的本质，这个极简的抽象实验就是考查一个获得初始速度的球体在不受任何外力作用下的运动状态。基于该抽象运动实验，伽利略否定了亚里斯多德长达2 000年的错误理论，并正确认识到“力不是维持物体运动的原因”。后来，牛顿对伽利略的那个极其简化的抽象实验做了进一步的研究，即：考虑在斜面上仅有一个力（即重力），而在平直面上无任何外力存在。基于这样一个在地球上永远找不到的极其简化的力学系统，牛顿再次挖掘到了伟大的真理，建立了影响人类科学与技术发展的牛顿第一定律和第二定律。有人肯定会问：基于一个在地球上根本就不存在的如此简化的受力系统，所得理论有实际意义吗？因为，地球上一个最简单的真实受力系统（如推动一块大石头）均是由多个力同时发生作用的。今天，土壤学界的不少研究者可能会给出这样的回答：这种研究除了可“忽悠”出几篇论文外，无任何实际应用价值，原因是，如此简单的受力系统在地球上根本就不存在。比如，剖析 $0.000\ 1\ \text{mol L}^{-1}\ \text{K}^+$ 和 $0.000\ 1\ \text{mol L}^{-1}\ \text{Na}^+$ 导致土壤团聚体稳定性差异的本质原因时，立即会遭到“实验设计不合理”这样的质疑（就像质疑伽利略和牛顿的抽象实验设计一样）：（1）没有任何一个土壤只含 K^+ 或 Na^+ ，所以，这种简化所得结论对于一个真实的复杂土壤而言将是无用的或错误的；（2）大多数土壤中 Na^+ 含量很低， K^+ 浓度也不可能恰好等于 $0.000\ 1\ \text{mol L}^{-1}$ ，所以，这种研



究毫无实际意义。于是，这些人建议实验设计应该考虑与真实土壤相一致的电解质条件。毫无疑问，如果真的这么做了，就会像亚里士多德那样，除了可以得到一些表现性现象之外，任何内在本质的信息均不可能获得。然而，基于简化和抽象而建立起来的牛顿力学在任意复杂力学体系均能成功应用，这一既定事实启示我们，决不能轻视或低估这种基于“极端简化”所推演出来的科学发现。恰恰相反，很多时候唯有借助这种简化才能挖掘出现象内部所蕴含的本质，而且，一旦这样的本质被发现，它将适用于任意的复杂条件。

毫无疑问，重视综合而轻视分析的惯性思维将严重阻碍土壤学的发展。常听到一些人在质疑基于分析的土壤学研究时说：原本是要研究那头活的“猪”，但你却研究了“猪”身上的一根毛。请读者思考一下，如果要始终保持这头“猪”处于“活”的完整状态，能够开展的研究将是什么呢？只能是：例如，用不同养分配比的饲料输入“猪”的胃中，然后测定“猪”的体重、身高、体长和排泄物量等表现性指标，最后，采用统计分析方法讨论输入与输出之间的关系。今天的大多数土壤学研究不正是沿用这条路吗？这样的研究能够带来重大发现吗？能揭示“猪”体内某个器官的结构与功能吗？亦或能够揭示器官上某个细胞的结构与功能吗？值得庆幸的是，研究那头“猪”的生物学家们认识到分析方法的重要性并广泛采用，他们从那根被轻视的“猪毛”上提取到了一个DNA分子，并由此重新构建了那头活的“猪”。这些基于分析方法的研究，不仅引发了分子生物学的兴起与蓬勃发展，并带来了DNA检测、转基因食品和疫苗等重要技术革命。

实际上，从牛顿力学、电磁学、量子力学、相对论到描述复杂系统的热力学以及分子生物学的相继建立，人们大多采用了这样的分析方法。

3 基础土壤学研究的方法论思考

当然，本文并非全盘否定目前的土壤学研究的方法论基础，而是认为，土壤学研究应该充分认识分析方法的重要性，并以“先分析后综合”的“最佳哲学方法”来指导未来土壤学的研究。本文认为，当前土壤学研究应特别重视以下三种分析方法的实践和应用。

3.1 基于解剖和分解的分析

基于解剖和分解的分析方法在土壤物质组成的研究中曾发挥了重要作用，使得我们今天能够更加清晰地了解土壤矿物、土壤有机物、土壤水以及土壤生物的组成和状态，虽然土壤微生物的组成状况至今仍未得到彻底的解决^[3]。在土壤物质组成研究中，人们较好地采用了基于解剖和分解的分析方法，但在土壤性质和过程的研究方面，这种方法的贯彻和应用相当不彻底。在土壤性质和过程的描述方面，目前的土壤学几乎直接借用了物理、化学和生物学知识，很少考虑土壤自身的特殊性。要建立真正属于土壤学的相关理论，应该逐级地解剖土壤，从宏观、介观、分子、原子甚至亚原子尺度上充分认识土壤系统的特殊性，并最终通过在亚原子尺度上的彻底分解，获得土壤学自己的科学基础，才有可能最终建立起独立的土壤学知识体系。

此处仅举一个例子来阐述本方法的应用。

前面提到，目前人们普遍认为，雨滴撞击是土壤团聚体破碎并引发土壤流失的关键推动力^[4]。然而，逐级分解的研究方法将使我们发现，这仅是一种表象性认识。

首先，我们将视野从土壤聚焦至其中的一个团聚体，并将该团聚体分解至土粒间相互作用的最小单元：任意两相邻土粒间的相互作用。研究发现，当土壤（黏土）团聚体处于风干状态时，其中任意两相邻土粒间的引力压强竟然高达 10^8 Pa^[5-9]。因此，雨滴撞击产生的不足 10^5 Pa的撞击力压强^[10]绝不可能使吸引在一起的两相邻土粒分开并造成团聚体的解体。除雨滴撞击力之外的其他作用力（渗透压、非均匀膨胀和闭蓄空气压缩等）压强均远小于 10^8 Pa，同样不足以导致该团聚体的解体。这表明，水进入风干状态的土壤团聚体后还产生了未知作用力。为了找到这种未知作用力，需要将研究对象做进一步分解。

现在将研究对象进一步分解并聚焦至单个土粒。此时，首先看到的是土粒表面上的电荷，而且发现其电荷密度可达 $10^{14} \sim 10^{15}$ 个 cm^{-2} ^[6]，并在土粒表面附近形成 $10^8 \sim 10^9$ V m^{-1} 的强电场^[7]，而且，该电场使两相邻土粒间形成了很强的静电排斥压^[6-7]。进一步研究发现，土粒间的静电排斥压随土壤含水量的增加（电解质浓度的降低）而急剧增强^[7]。与此同时，除电荷外，还将看到土粒表面因强大静电场而聚集了大量水分子，这些水分子使

两相邻土粒间产生一种新的排斥压——表面水合排斥压^[7, 11-12]。定量研究表明,这两种排斥压的总强度高达 10^9 Pa^[6-7]。显然,这个排斥压足够去抗衡 10^8 Pa的引力压强,并导致土壤团聚体的猛烈膨胀和破碎。仅有当土壤团聚体膨胀破碎至土粒间平均距离超过3~5 nm时,雨滴撞击力才起支配作用并控制后续过程的进行^[6-7]。

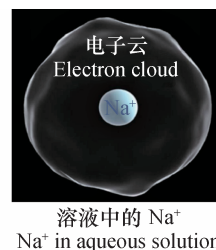
然而,进一步的实验发现,当那个风干的土壤团聚体分别含 K^+ 或 Na^+ 时,其稳定性表现出了成倍的差异^[13-14]。经典理论告诉我们: K^+ 和 Na^+ 虽同价,但离子半径和水合半径有差异。因此,这种不可思议的巨大差异是否来自于这两种离子不同的体积或水合体积呢?要回答这个问题,必须将研究对象进一步分解至分子与原子尺度。

当从分子和原子尺度上研究“离子— H_2O —土粒”相互作用时,发现实测的“ K^+ —土粒”相互作用能几乎等于其基于点电荷的理论计算值的两倍^[15-16]。显然,基于分子与原子尺度的离子体积和水合作用不能解释这一结果。因为,考虑离子半径或水合半径时的实测能量必定小于基于点电荷的理论计算值。所以,离子与土粒表面间肯定存在一种基于亚原子尺度的未知相互作用,而且, K^+ 和 Na^+ 的上述差异应该来自于这种未知的相互作用。

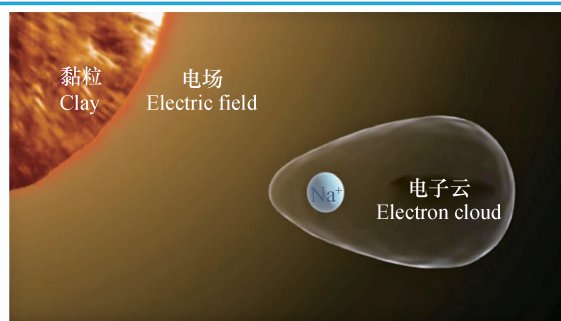
现在让我们的视野进入亚原子尺度,即 K^+ 和 Na^+ 的原子内部。这时,所看到的两个离子的不同将不再是离子体积或水合效应,而是离子的电子层结构之间的差异。由于土粒表面附近存在很强的电场和被该电场强烈活化了的表面氧原子,它们使靠近黏土表面的离子(或原子)的能量和量子状态发生了巨大改变^[15-17]。定量研究发现,黏土中的这种独特的量子效应使 Na^+ 、 K^+ 和 Cs^+ 分别表现出了+1.18、+1.94和+2.40个表观电荷^[15-16],而在无黏粒的水介质中它们至多表现出+1个表观电荷。研究表明,基于亚原子尺度的上述剖析, K^+ 和 Na^+ 引起的上述差异可得到圆满解释。

为了形象地表达黏土中独特的量子效应,图1给出了黏粒表面附近离子电子云发生强烈形变(电子能量和量子状态的巨大改变而引发的非经典极化作用)的示意图。

上述讨论清晰地表明,若不从宏观、介观、分子/原子至亚原子尺度对土壤逐级进行分解,并最终在亚原子尺度上解释土壤中独特的量子效应,很难真正揭示降水导致土壤团聚体破碎的内在机制。



溶液中的 Na^+
Na⁺ in aqueous solution



黏粒表面附近的 Na^+
Na⁺ near clay surface

图1 离子在黏粒强电场中的非经典极化(核外电子能量和量子状态的变化)示意图

Fig. 1 Schematic diagram of ionic non-classic polarization (changes in extranuclear electronic energy and quantum state) in high field of clay

3.2 基于简化和抽象的分析

要充分揭示土壤相关过程的内在规律,仅仅依靠分解和解剖的方法是不够的,还应在此方法的基础上简化并抽象化研究体系。正如前面讨论人类自然科学发展历程时所启示的那样,无论简单系统还是复杂系统,人们大多采用了这样的方法。

对于像土壤和生物那样的复杂系统而言,这种简化抽象显得尤为重要。目前,土壤学研究现状总体上表现出了宏观与微观研究的严重脱节。其主要原因是土壤系统过于复杂,在宏观与微观之间建立关联是一项极具挑战性的任务。目前,开展土壤微观机制(如界面化学反应)相关研究的很少关注土壤宏观表现(如前面提到的水土流失);而开展水土流失宏观研究的,主要关注外在因素或外营力作用(如植被状况、地表覆盖、坡度、地形地貌和降雨强度等)的影响,而对内在因素至多也仅关注到土壤矿物/有机组成、土壤机械组成、土壤结构孔隙等层面,几乎未涉及或关联水土流失发生的基于原子与分子层面的深层次科学基础。

为与前面的讨论内容相呼应,此处举一个关于金属离子界面反应如何影响土壤水运动的例子。土壤结构与孔隙的稳定性取决于水进入土壤团聚体

后土粒间的作用力，而这些作用力又是由包括金属离子界面反应在内的各种界面过程决定的。由于土壤结构与孔隙的稳定性不仅影响到地表水入渗和土壤水传输，也影响土粒向水中的分散过程。所以，土壤中固液界面反应的微观过程必定影响土壤水入渗、土壤水运动和水土流失等宏观现象的发生。

现在，将一个真实土壤进行简化和抽象化：从田间取回紫色土（紫色湿润锥形土），将其中所有阳离子分别用 Li^+ 、 Na^+ 或 K^+ 代换，所有阴离子用 Cl^- 代换，从而得到经“简化抽象”了的“ X^+ -紫色土”（其中 $\text{X}^+=\text{Li}^+$ 、 Na^+ 或 K^+ ）。图2是入渗时间为150 min时“ X^+ -紫色土”中水的垂直分布图^[18]。

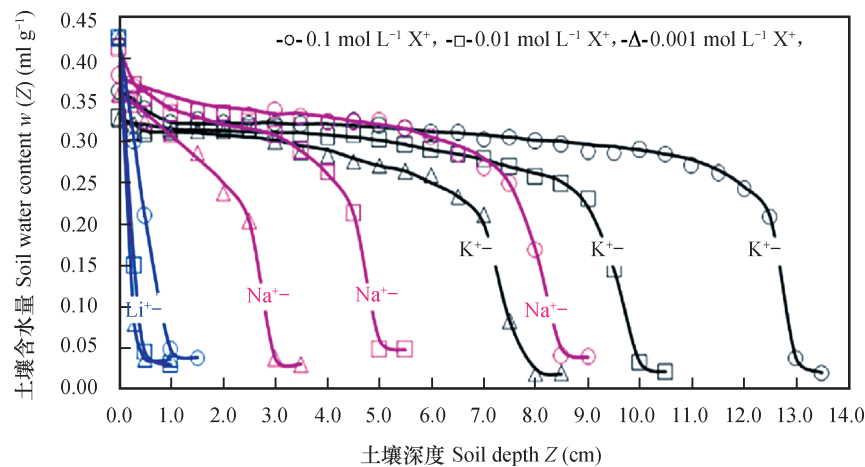


图2 同一紫色土（ X^+ -紫色土）含不同一价阳离子（ Li^+ 、 Na^+ 或 K^+ ）时水分入渗150 min后的含水量分布^[18]

Fig. 2 Distribution of soil moisture content in the same purple soil containing cations (Li^+ , Na^+ or K^+) different in valence after 150 min of infiltration^[18]

图2表明，同一土壤仅因阳离子不同而导致土壤水运动速度的差异是相当惊人的。通过这种“简化与抽象”，不仅可看到这种不可思议的实验现象，而且可找到影响土壤水运动的本质原因。《土壤学》相关教科书中提到：土壤水势梯度决定土壤水运动速度，这是借用了热力学中自由能的概念建立起来的理论。但这仅仅是一个表象性的理论，还需要刨根究底：土壤水的自由能又是由什么物理机制决定的呢？通过这种简化抽象，发现影响土壤水运动的本质原因是：金属离子界面反应中的静电效应和量子效应深刻影响了土壤中的电场，以及土壤矿物—矿物和矿物—有机相互作用力的性质和强度，进而影响了土壤水的势能梯度，并最终影响了土壤水的运动速度^[18]。而且，该研究还提供了一种新的可能：人们可通过调节这种界面上的静电和量子效应来调节土壤这一多孔介质水分传输速度。

诚然，田间紫色土中水的运动速度与经上述简化抽象后的紫色土可能大相径庭，但通过简化抽象揭示了科学本质：金属离子界面反应的量子效应和静电效应深刻影响（甚至控制着）土壤水的运动，将普遍适用于任何复杂的土壤系统。这正如伽利略

和牛顿对运动和力学系统进行简化抽象，虽然真实的球体运动情况和简化抽象后的可能截然不同，但简化抽象后揭示的力学和运动学本质则适用于任何真实而复杂的系统。

3.3 基于计算和模拟的分析

此处所谈的计算和模拟特指量子力学计算和基于量子力学的理论模拟。因为，正是基于量子力学计算才建立了现代自然科学及其实验手段，而且，历史上“无一例外”地证明了量子力学的理论计算结果能够准确地反映微观世界的部分内在规律。例如，求解量子力学基本方程——薛定谔方程得到原子核外的电子构象等，虽然至今仍未得到实验的“直接”证实，然而，若没有这样的纯理论计算就没有现代自然科学。所以，如果黏土确实从亚原子尺度上改变了物质的原子结构与性质，那么，开展土壤学中独特的量子力学计算将是重要的。

下面举两个例子说明土壤系统独特的量子力学计算的重要价值。

第一个例子是蛭石或伊利石中 K^+ -O键的形成。蛭石或伊利石中 K^+ 嵌入了由六个氧原子所形成的复三方孔隙，并形成了 K^+ -O键（内圈配合^[19]）。但

同样的2:1型矿物,蒙脱石却不能形成那个 K^+-O 键(外圈配合^[19])。原因是什么?传统的土壤学解释为,黏土带负电而 K^+ 带正电,并且, K^+ 离子半径与那个孔的半径相当,所以就嵌进去了。非常遗憾,这个缺乏基本说服力的解释,几乎被整个土壤学界所接受。第一,蒙脱石也带负电,而且也有那个复三方孔隙,为什么 K^+ 却无法嵌入蒙脱石的复三方孔隙而形成 K^+-O 键?其次,在水溶液中 K^+ 是水化了的,那么, K^+ 嵌入蛭石或伊利石复三方孔隙时这些水分子是如何被剥掉的?第三,正负电荷相吸的确可使 K^+ 向黏粒表面氧原子靠近,但是,当二者之间的距离到达一定程度后, K^+ 的电子云与复三方孔隙中六个氧的电子云之间的强烈排斥将导致, K^+ 的电子云边界与孔隙周围六个氧的电子云边界之间必须维持相当的距离。然而,当将这个排斥空间考虑进去后, K^+ 就进不去了(那个复三方孔隙的直径是 0.26 nm ^[19],而 K^+ 的直径约为 $0.266\sim 0.304\text{ nm}$ ^[20])。显然,唯一可能的解释是: K^+ 与蛭石或伊利石复三方孔隙的氧原子之间存在十分强烈的量子力学效应,进而产生了极强的 K^+-O 键合作用。相比而言, K^+ 在蒙脱石上却不存在如此强烈的量子力学效应,因而,无法形成强的 K^+-O 键。当然,实验也证明, K^+ 在蒙脱石表面上也存在独特的量子力学效应^[15-16, 21],只是其强度较蛭石或伊利石 K^+-O 键的强度弱。由于蛭石或伊利石形成时,其同晶替代主要发生在离晶体表面最近的硅氧四面体中,而蒙脱石的同晶替代则主要发生在铝八面体中^[19],所以,伊利石的表面电场和表面氧原子的活性(由电子的量子态决定)均远大于蒙脱石。显然,要揭示黏土中这种独特量子效应的物理机制,必须开展基于量子力学的计算和模拟研究。

第二个例子是土壤酸化发生机制。不少研究土壤的人均简单理解了“酸化”这一概念,认为土壤pH降低就意味着土壤酸化了。有许多因素可导致土壤pH出现暂时性的降低(如施铵态氮肥或秸秆还田),而当导致pH降低的这些因素(或氢离子来源)消失后,土壤pH又会逐渐恢复。因此,应将这种暂时性pH下降称为“假性酸化”。土壤学教科书明确指出,土壤是否真正酸化,不完全在于土壤pH的高低,而在于有无铝八面体解体而导致的 Al^{3+} 释放,并使部分土壤胶体转变成铝质胶体。只是不同酸化程度的土壤,铝八面体的破坏程度和

铝离子积累程度不同。然而,一旦出现铝八面体解体和铝离子释放后,土壤要自然恢复至中性将是不可能的。所以,土壤酸化的基本标志应是:土壤pH降低后难以自然恢复至中性的情况。当然,此处关注的是酸化发生的机制。土壤学教科书已经提到,铝八面体解体和铝离子释放的前提是 H^+ 在黏粒表面的吸附要达到一定数量。问题的关键是, H^+ 在黏粒表面的吸附如何导致硅四面体和铝八面体解体?这涉及黏土这一特定系统中亚原子尺度上的原子轨道(如 $H-O$ -原子)信息,同样地,开展土壤中的量子力学计算能够给出最终的答案。

上述例子仅仅是土壤众多(包括物理、化学和生物学)过程中的“冰山一角”。但这些例子已经清晰地表明:由于土壤系统的特殊性,在很多时候,必须从亚原子尺度去重新审视和认识,而揭示亚原子尺度内在规律最有力的手段就是求解给定体系的薛定谔方程。因此,以量子力学为基础的计算和模拟方法在土壤学研究中必将发挥重要作用。当然,实际上土壤学研究一般从观察实验现象开始,然后才有理论研究,土壤这一独特系统的量子效应研究就是以实验现象为基础的理论研究。

4 结论

土壤学发展应特别强调分析方法的应用,并在深入分析的基础上实现自然而系统的综合。本文认为土壤学研究应充分认识土壤系统的特殊性根基在于其对物质亚原子结构的独特影响,并认为开展土壤学中独特的量子效应研究将是重要的。基于此特殊性,本文提出在方法上应该从宏观、介观、分子至亚原子尺度对土壤进行逐级分解简化,并借助于量子力学原理和方法,最终在亚原子尺度上彻底剖析土壤。在此基础上构建“亚原子结构—土壤微观机制—宏观效应”三者间的直接关联,实现土壤中不同尺度间科学原理的自然转换,从而最终构建独立的土壤学知识体系。必须指出,本文仅提供了一个关于基础土壤学研究方法论的思考。在所提观点的论证过程中,虽然仅用了几个例子作为其论点的支撑,易给读者留下“以偏概全”的印象,但这些例子所反映的土壤系统的特殊性,足以表达建立土壤学独立知识体系的必要性,以及采用以“分析”为基础的方法的重要性。同时,必须基于土壤本身去认识土壤的相关过程,从而建立土壤学自己的

知识体系，而不是仅仅将其他学科的知识直接引进，因为黏土体系中的问题仅有土壤学才普遍关注，黏土体系中亚原子尺度的独特效应也仅有土壤中才普遍存在。

参考文献

- [1] Gardner W R. 前言//美国土壤学会. 陈杰, 骆国保. 译. 基础土壤科学研究的契机. 北京: 中国农业出版社, 1995
Gardner W R. Preface//Soil Science Society of America. Chen J, Luo B G. trans. Opportunities in basic soil science research (In Chinese). Beijing: China Agriculture Press, 1995
- [2] 罗杰·科茨. 序言//牛顿. 赵振江. 译. 自然哲学的数学原理. 北京: 商务印书馆, 2006
Cotes R. Preface // Newton I. Zhao Z J. trans. Mathematic principles in natural philosophy (In Chinese). Beijing: The Commercial Press, 2006
- [3] 贾仲君. 2015年诺贝尔生理学或医学奖的启示——土壤微生物分离培养推动了寄生虫病防治. 土壤学报, 2016, 53 (1) : 12—15
Jia Z J. 2015 Nobel Prize and soil microbiology-Culture-dependent study warrants more attention (In Chinese). Acta Pedologica Sinica, 2016, 53 (1) : 12—15
- [4] Le Bissonnais Y. Aggregate stability and assessment of soil crustability and erodibility: I. Theory and methodology. European Journal of Soil Science, 2016, 67 (1) : 11—21
- [5] Li H, Peng X H, Wu L S, et al. Surface potential dependence of the Hamaker constant. Journal of Physical Chemistry C, 2009, 113 (11) : 4419—4425
- [6] Hu F N, Xu C Y, Li H, et al. Particles interaction forces and their effects on soil aggregates breakdown. Soil & Tillage Research, 2015, 147: 1—9
- [7] Li S, Li H, Xu C Y, et al. Particle interaction forces induce soil particle transport during rainfall. Soil Science Society of America Journal, 2013, 77: 1563—1571
- [8] Yu Z H, Li H, Liu X M, et al. Influence of soil electric field on water movement in soil. Soil & Tillage Research, 2016, 155: 263—270
- [9] Li Q Y, Tang Y, He X H, et al. Approach to theoretical estimation of the activation energy of particle aggregation taking ionic nonclassical polarization into account. AIP Advances, 2015, 5 (10) : Article number: 107218
- [10] Nearing M A, Bradford J M, Holtz R D. Measurement of waterdrop impact pressures on soil surfaces. Soil Science Society of America Journal, 1987, 51 (5) : 1302—1306
- [11] Pashley R M. Hydration forces between mica surfaces in electrolyte solutions. Advances in Colloid and Interface Science, 1982, 16 (1) : 57—62
- [12] Leng Y S. Hydration force between mica surfaces in aqueous KCl electrolyte solution. Langmuir, 2012, 28 (12) : 5339—5349
- [13] Xu C Y, Li H, Hu F N, et al. Non-classical polarization of cations increases the stability of clay aggregates: Specific ion effects on the stability of aggregates. European Journal of Soil Science, 2015, 66 (3) : 615—623
- [14] Huang X R, Li H, Li S, et al. Role of cationic polarization in humus-increased soil aggregate stability. European Journal of Soil Science, 2016, 67 (3) : 341—350
- [15] Liu X M, Li H, Du W, et al. Hofmeister effects on cation exchange equilibrium: Quantification of ion exchange selectivity. Journal of Physical Chemistry C, 2013, 117 (12) : 6245—6251
- [16] Du W, Li R, Liu X M, et al. Specific ion effects on ion exchange kinetics in charged clay. Colloids and Surfaces A: Physicochemical Engineering Aspects, 2016, 509: 427—432
- [17] Liu X M, Li H, Li R, et al. Strong non-classical induction forces in ion-surface interactions: General origin of Hofmeister effects. Scientific Reports, 2014, 4: Article number: 5047
- [18] Yu Z H, Li H, Liu X M, et al. Specific ion effects on soil water movement. Soil & Tillage Research, 2016, 161: 63—70
- [19] Sposito G. The surface chemistry of soils. Oxford: Oxford University Press. 1984
- [20] Tansel B. Significance of thermodynamic and physical characteristics on permeation of ions during membrane separation: Hydrated radius, hydration free energy and viscous effects. Separation and Purification Technology, 2012, 86: 119—126
- [21] 樊会敏, 赵艳, 刘新敏, 等. 非对称混合电解质体系中恒电荷颗粒表面与Stern电位的测定, 土壤学报, 2015, 52 (2) : 446—452
Fan H M, Zhao Y, Liu X M, et al. Principle for determination of surface potential and Stern potential of constantly charged particles in asymmetric mixed electrolyte solutions (In Chinese). Acta Pedologica Sinica, 2015, 52 (2) : 446—452

Rethink the Methodologies in Basic Soil Science Research: From the Perspective of Soil Chemistry

LI Hang YANG Gang

(Chongqing Key Laboratory of Soil Multi-Scale Interfacial Processes, College of Resources and Environment, Southwest University, Chongqing 400716, China)

Abstract For a long time, quite a number of people one-sidedly believe that soil science is merely an applied science, and its research tools are merely experimental, while its research methodology should be holistic and integrative. In this paper, systems analysis was done of the perniciousness of this one-sided presumption to development of the soil science, and it was proposed that development of the soil science in future should stress the use of analytical methods and a natural systematic integration should be realized on the basis of such in-depth analyses. Three basic viewpoints were then put forward and elaborated: 1) it is essential to be fully aware that the peculiarities of the soil systems root in their fundamental impacts on subatomic structures. For example, in common aqueous solutions, Li^+ , K^+ and Cs^+ will definitely not exceed +1.00 in effective charge and instead should fall below +1.00 due to cationic volumes and hydration effects; however, their effective charges burgeon respectively to +1.05, +1.94 and +2.40 when these ions are placed at the interface of clays in aqueous solutions, as a result of the profound impact of clay on the energetic and quantum states of these cation electrons. In other words, cations (as well as atoms and molecules) at clay interfaces are essentially different from those in aqueous solutions. 2) Considering peculiarities of the soil systems, methodologically the soils should be hierarchized by scale i.e. macroscopic, mesoscopic, molecular, atomic and subatomic scales, and eventually analyzed by means of the principles and methodology of quantum mechanics at the subatomic scale. And 3) Through researches based on the quantum effect unique to the soil, direct correlations between subatomic structures, soil microscopic mechanisms and macroeffect could be established, hence to realize, an natural conversion of scientific principles between different scales of soil. And in the end an independent and self-consistent pedological knowledge system will be constituted. Here it is a must to emphasize that this paper is intended to provide some ideas about methodology of the research on basic soil science. Although it may be too much of a generalization for our arguments to be just supported by several special examples, the particularities of the soil systems those samples reflect sufficiently express the necessity to establish an independent and self-consistent knowledge system for soil science, and the importance of analytical methods in the establishment.

Key words Analysis and synthesis; Multi-scale decomposition; Electronic shell structure; Quantum mechanics

(责任编辑: 陈荣府)