DOI:10.13686/j.cnki.dzyzy.2001.03.010

·问题讨论·

文章编号:1671-1947(2001)03-0180-05

CIPW标准矿物计算法应用时存在问题的探讨

刘宝良
(辽宁省国土资源规划院,辽宁 沈阳 110031)

摘 要:CIPW法是当今最广泛应用的岩石化学计算法之一,其目的在于提供模拟矿物成分和相对数量,为岩石正确命名提供依据.作者在应用CIPW法过程中,发现不同教科书上的计算原理及方法存在差异,给实际应用造成不便;本文就斜长石牌号的计算方法、CIPW计算原理以及钠长石分配方法等问题进行了探讨.

关键词:CIPW;应用;计算方法
文献标识码:A 中图分类号:P585.3

岩石化学计算法分为两类:一是数值特征法,如尼格里数值法、扎瓦里茨基数值法等;二是标准矿物法,如CIPW法、里特曼法、尼格里—巴尔特阳离子法、含黑云母计算法(DGNU)等.其中CIPW法是当今最广泛应用的岩石化学计算法之一.它是1900~1903年期间由4位美国学者W.Cross,J.Iddings,L.Pirsson和H.Washington创立的,后经不断改革完善,成为一种通过模拟矿物成分和相对数量来为岩石正确命名提供依据的方法.

CIPW法应用起来简便,无人为因素干扰,加之经过世界各国岩石学家几十年的应用已获得大量各类岩石(均属火成岩)CIPW标准矿物数据,从而在岩石分类命名上可直接进行对比研究.目前,CIPW法主要应用于以下几个方面:

(1)对结晶差的熔岩,其矿物成分可以通过标准矿物计算大致求得;

(2)岩浆岩结晶实验的物理化学相图应用,多是以CIPW标准矿物的质量分数(百分数)进行投影的;

(3)对已知岩石进行物化条件的成因分析,须将化学分析结果换算成CIPW标准矿物,再投到有关相图中;

(4)一些岩石学中常用参数是通过CIPW标准矿物进行换算的.

收稿日期:2001-07-12.张哲编辑.

由此可见,CIPW法在岩石学方面具有极其重要的作用.

笔者在应用CIPW法过程中,发现不同教科书上的计算原理及方法存在差异,给实际应用造成不便,选择哪一种计算原理和方法为准?关于钠长石分配方法,不同人采用不同方法,究竟哪一种方法更科学、更合理?下面,就上述有关问题进行探讨.

1 CIPW标准矿物计算法简述

CIPW计算法是把岩石化学成分中各主要氧化物按其化学性质结合成标准矿物.所谓标准矿物是一种理想的矿物,与实际矿物在种类上、数量上均有差别,但可作为统一的对比标准.

计算步骤:

(1)将各氧化物质量分数换算成分子数;

(2)将微量组分结合成副矿物(如磷灰石、钛铁矿等);

(3)将主要组分结合成标准矿物,首先判别岩石化学类型,按不同类型选择计算公式:

A.正常类型 $CaO'+K_2O+Na_2O>Al_2O_3>K_2O+Na_2O$(均为分子数,$CaO'$为经步骤2后剩余CaO分子数)

B.铝过饱和类型 $Al_2O_3>K_2O+Na_2O+CaO'$

C.碱过饱和类型 $K_2O+Na_2O>Al_2O_3$

以A为例计算:

①$x K_2O + x Al_2O_3 + 6x SiO_2 = x Or$（钾长石）

②$x Na_2O + x Al_2O_3 + 6x SiO_2 = x Ab$（钠长石）

③余 $Al_2O_3' = Al_2O_3 - (K_2O + Na_2O)$

④$x Al_2O_3' + x CaO + 2x SiO_2 = x An$（钙长石）

余 $CaO'' = CaO' - Al_2O_3'$

⑤$x CaO'' + x SiO_2 = x Wo$（硅灰石）

⑥$x Fe_2O_3 + x FeO = x Mt$（磁铁矿）

a. 若 FeO 全部用于形成钛铁矿（Il），则

$x Fe_2O_3 = x Hm$（赤铁矿）

b. 若经步骤 2 后，有剩余 FeO，且 $Fe_2O_3 > FeO$，则

$x FeO + x Fe_2O_3 = x Mt$

余 $Fe_2O_3' = Fe_2O_3 - FeO$

$x Fe_2O_3' = x Hm$

c. 若经步骤 2 后，有剩余 FeO，且 $FeO > Fe_2O_3$，则

$x Fe_2O_3 + x FeO = x Mt$

余 $FeO' = FeO - Fe_2O_3$

⑦将 Wo 与 Hy（紫苏辉石）结合成 Di（透辉石）

因为Di 中 Wo∶Hy＝1∶1

而 Hy＝En（顽火辉石）＋Fs（正铁辉石）

所以 En＋Fs＝Wo

Fs∶En＝FeO′∶MgO

余 $FeO'' = FeO' - Fs$

$MgO' = MgO - En$

⑧若 $SiO_2' > MgO' + FeO''$，属 SiO_2 过饱和，SiO_2'为经①～⑦步骤所余SiO_2 分子数.

$x_1 MgO' + x_1 SiO_2 = x_1 En'$

$x_2 FeO'' + x_2 SiO_2 = x_2 Fs'$

$Hy = En' + Fs'$

余 $SiO_2'' = SiO_2' - (x_1 + x_2) = Q$（石英）

⑨将计算的标准矿物分子数乘以分子量转换成标准矿物的质量分数（百分数）.

2　问题探讨

2.1　斜长石牌号的计算方法

根据 CIPW 法所计算出的标准矿物钙长石（An）及钠长石（Ab）分子数可换算出斜长石牌号.

武汉地质学院 1980 年出版的《岩浆岩岩石学》下册中给出的计算公式:

$$\frac{An}{An+Ab} \times 100 \qquad (1)$$

邱家骧 1985 年出版的《岩浆岩岩石学》中给出的计算公式:

$$\frac{An}{An+2Ab} \times 100 \qquad (2)$$

在矿物学上，矿物分子均以结构式表示，如钠长石为$Na[AlSi_3O_8]$，钙长石为 $Na[Al_2Si_2O_8]$. 在自然界，钠长石与钙长石经常以固溶体形式产出，即形成斜长石(Pl). 在斜长石中 Na^+、Ca^{2+} 占据八面体位置，而 Al^{3+}、Si^{4+} 占据四面体位置. Na^+、Si^{4+} 同时与 Ca^{2+}、Al^{3+}以 1∶1 比例进行类质同像替代（$Na^+ + Si^{4+} \leftrightarrows Ca^{2+} + Al^{3+}$），即钠长石分子与钙长石分子进行 1∶1 比例替代. 而斜长石牌号就是指钙长石分子在斜长石中所占的百分比，用公式表示为:

$$\frac{An}{An+Ab} \times 100 \qquad (Pl = An + Ab)$$

问题在于: CIPW 法标准矿物分子是以氧化物形式给出的，如:

钠长石为 $Na_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 6SiO_2 \rightarrow 2(Na[AlSi_3O_8])$

钙长石为 $CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 2SiO_2 \rightarrow Ca[Al_2Si_2O_8]$

经转化形式可以看出: 钠长石标准矿物分子数量等于用结构式表示的矿物分子的 2 倍，而钙长石标准分子数量与结构式表示的矿物分子相等. 因此，在计算斜长石牌号时，Ab 数量(代入值)应为 CIPW 法计算所得钠长石分子数的 2 倍，即:

$$\frac{An}{An+2Ab} \times 100$$

这种公式是正确的.

利用 CIPW 法计算出的 Ab 及 An 分子数所换算成的斜长石牌号理论上要比薄片下实测牌号偏小，这是由于在自然界中，Ab 一部分与 An 形成固溶体矿物斜长石(Pl)，而另一部分与 Or(钾长石)形成固溶体矿物歪长石($(Na, K)[AlSi_3O_8]$)及微斜长石($(K, Na)[AlSi_3O_8]$). 在计算时，将全部 Ab 与 An 结合成 Pl，导致 An 在 Pl 中比例降低，即斜长石牌号变小.

2.2　在 $MgO' + FeO > SiO_2' > (MgO' + FeO'')$情况下的计算原理

在计算步骤⑧中，若 $MgO' + FeO'' > SiO_2' > 0.5(MgO' + FeO'')$，即经①～⑦计算后所余 SiO_2 分子数小于所余 MgO 及 FeO 分子数之和，但大于所余 MgO 与 FeO 分子数之和一半，属 SiO_2 不饱和(矿物组合中饱和矿物与不饱和矿物共存). 这时，SiO_2 不能满足全部形式 Hy 需要，但又比全部形成 Ol(橄榄石)所需量多，所以只能形成一部分 Hy 及一部分 Ol.

武汉地质学院 1980 年《岩浆岩岩石学》下册中提

出如下假设:

①$Hy+Ol=SiO_2'$

$Hy+2Ol=MgO'+FeO''$

长春地质学院 1979 年《岩浆岩岩石学》中提出如下假设:

②$Hy+Ol=MgO'+FeO''$

$Hy+0.5Ol=SiO_2'$

推导验证:

①经解方程得出表达式:

$Hy=2SiO_2'+(MgO'+FeO'')$

$Ol=(MgO'+FeO'')-SiO_2'$

②经解方程得出表达式:

$Hy=2SiO_2'-(MgO'+FeO'')$

$Ol=2(MgO'+FeO''-SiO_2')$

从上述表达式可以看出,无论①假设还是②假设计算结果 Hy 数值总是相同的,而 Ol 数值不同,这说明必有一种假设是错误的.

根据 2 种假设中 Hy 表达式(结果)是相同的,将 Hy 当作已知,通过数学变换求出 Ol 表达式,若其与哪一种假设所得表达式相同,则说明那种假设是正确的.

由于在 CIPW 法中 Ol 最终给出形式是 Fa(铁橄榄石)及 Fo(镁橄榄石),Hy 最终给出形式是 En 及 Fs,故在推导过程中引入 Fo、Fa、En 及 Fs.

假设 Hy 是已知的,

因 $En+Fs=Hy$, $En:Fs=MgO':FeO''$

则 $En=\frac{MgO'}{MgO'+FeO''}\cdot Hy$

$Fs=\frac{FeO''}{MgO'+FeO''}\cdot Hy$

因为 $Fn=MgO\cdot SiO_2$

(一个分子的 En 需用 1 个分子 MgO)

$Fs=FeO\cdot SiO_2$

(一个分子的 Es 需用 1 个分子 FeO)

所以余 $MgO''=MgO'-En$

$=\frac{MgO'(MgO'+FeO''-Hy)}{MgO'+FeO''}$

(用于形成 Fo)

$FeO'''=FeO''-Fs$

$=\frac{FeO''(MgO'+FeO''-Hy)}{MgO'+FeO''}$

(用于形成 Fa)

又因为 $Fo=2MgO\cdot SiO_2$

(一个分子的 Fo 需用 2 个分子 MgO)

$Fa=2FeO\cdot SiO_2$

(一个分子的 Fa 需用 2 个分子 FeO)

所以 $Fo=0.5MgO''$, $Fa=0.5FeO'''$

$Ol=Fo+Fa=0.5MgO''+0.5FeO'''$

$=0.5(MgO'+FeO''-Hy)$

将 $Hy=2SiO_2'-(MgO'+FeO'')$ 代入上式得:

$Ol=MgO'+FeO''-SiO_2$

推导所得 Ol 表达式与①假设中所得 Ol 表达式一致,说明①假设是合理、正确的.

2.3 钠长石分配方法

碱性长石(A)和斜长石(P)的相对数量是岩石命名时重要的参考指标,因此如何将计算的钠长石(Ab)合理分配到钾长石(Or)和钙长石(An)中会直接影响岩石准确定名.

目前,钠长石分配法基本有两种:勒·曼特尔法(Le Maitre)及里特曼法(Rittmann).

(1)勒·曼特尔钠长石分配有 4 种方案:

①$A=Or+Ab$, $P=An$

②$A=Or$, $P=An+Ab$

③$A=Or+0.5Ab$, $P=An+0.5Ab$

④$A=Or\times T$, $P=An\times T$, 其中分配系数 $T=(Or+Ab+An)/(Or+An)$

勒·曼特尔将近 2 万个岩石化学数据按上述 4 种方案进行钠长石分配,并在 QAPF 图解上投影,发现按①、②、③分配钠长石,投影点过于集中,分辨率低,不利于岩类划分,而按④分配钠长石,投影点分布均匀,有利于岩类划分.

但是,有许多学者认为勒·曼特尔的第④方案夸大了碱性长石的数量,因为 T 总大于 1.诺科斯依据几种岩石化学成分平均值计算 Or、Ab、An 后按 T 分配系数法进行钠长石分配,结果 A/P 比值明显偏高.原来的安山岩被定为粗安岩,正常的拉斑玄武岩被定为粗安玄武岩等.

(2)里特曼法是根据 3 种长石端元组分在不同温度下的不混溶相平衡资料,采用图解法确定岩石中碱性长石和斜长石的数量(图解有 2 种:纯火山岩相及纯侵入岩相图解).

步骤如下:

①已知标准矿物 Or、Ab、An 的质量分数(%),求出 Or%及 An%.

$Or+Ab+An=F$

$$Or\%=\frac{Or}{F}\times 100,\quad An\%=\frac{An}{F}\times 100$$

②根据 Or%及 An%值在图解上查出纵座标及横座标得一交汇点 X.

③X 点所在曲线数值代表共存碱性长石及斜长石总量中的透长石百分比,其数值与 F 乘积代表岩石中碱性长石(A)的质量分数(%), F 减 A 为斜长石质量分数(%).

(3)通过表 1 可以看出,采用不同方法分配钠长石对岩石定名有很大影响, 里特曼钠长石分配法使岩石定名更接近实际.因此,在现有条件下,里特曼钠长石分配方法更可取.

表 1　不同钠长石分配方法岩石定名比较

Table 1　Comparison in rock naming for different Ab distributing methods

岩石名称		安山岩平均值	拉斑玄武安山岩平均值	正常拉斑玄武岩平均值	流纹英安岩平均值
标准矿物	Or	6.7	6.1	5.0	26.7
	Ab	30.9	27.2	18.9	30.9
	An	27.2	18.1	25.9	9.5
勒·曼特尔法	T	1.9115	2.1240	1.6117	1.8536
	A	19.8	25.2	16.2	73.8
	P	80.2	74.8	83.6	26.2
	投影区域*	9	9	9	3a
里特曼法	A	0	0	0	35
	P	100	100	100	75
	投影区域*	10	10	10	3b

*投影区域是按斯特雷凯逊(Streckeisen)火山岩分类的 QAPF 图解中区域代号: 9—粗安岩或粗安玄武岩; 10—玄武岩或安山岩; 3a—纹岩; 3b—英安流纹岩.

3　结　论

通过对以上问题评述及探讨,得出如下结论:

(1)利用 CIPW 法计算得出的标准矿物 Ab 及 An 分子数,换算斜长石牌号,应采用如下公式:

$$\frac{An}{An+2Ab}\times 100$$

(2)CIPW 法计算步骤⑧中,若出现 $MgO'+FeO''>SiO_2>0.5(MgO'+FeO'')$时,则采用如下假设:

$$Hy+Ol+SiO_2'$$

$$Hy+2Ol=MgO'+FeO''$$

(3)在实际工作中,里特曼的钠长石分配法,使岩石定名更合理、更接近真实,建议采用.

参考文献:

[1] 武汉地质学院矿物教研室. 结晶学及矿物学(下册)[M]. 北京: 地质出版社, 1979.

[2] 刘昌实, 等. 岩石化学与多元统计[M]. 北京: 地质出版社, 1987.

[3] 武汉地质学院岩石教研室. 岩浆岩岩石学(下册)[M]. 北京: 地质出版社, 1980.

[4] 长春地质学院岩石教研室. 岩浆岩岩石学[M]. 北京: 地质出版社. 1979.

[5] 邱家骥. 岩浆岩岩石学[M]. 北京: 地质出版社, 1985.

[6] 区域地质矿产地质司. 火山岩地区区域地质调查方法指南[M]. 北京: 地质出版社, 1987.

DISCUSSION ON SOME PROBLEMS ABOUT CIPW METHOD IN APPLICATION

LIU Bao-liang

(*Liaoning Institute of Land and Resource Planning, Shenyang* 110031, *China*)

Abstract: CIPW is one of the most extensively used petrochemistry calculating methods. Its purpose is to provide a basis for rock naming by simulating mineral components and relative amounts. The author found that the calculating principles and methods in different textbooks are various, that is unconvenient in practical application. After discussing the calculating method of plagioclase serial number, CIPW calculating principle and albite distributing way, the author concluds that: 1) as calculating the plagioclase serial number, the amount of albite should adopt two times of albite molecular number; 2) when $MgO'+FeO''>SiO_2'>0.5(MgO'+FeO'')$, we should use the following hypotheses: $Hy+Ol=SiO_2'$, and $Hy+2Ol=MgO'+FeO''$; and 3) Rittmann method is suggested to name rocks, as it is more reasonable and accurate.

Key words: CIPW; application; calculating method

(下转 189 页)

creasing the information density, the weakly magnetic orebodies in typical metallogenic provinces can be outlined simply by the different magnetic susceptibilities and residual magnetization. Some examples are given, such as the delineating of the boundary between Dashiqiao and Gaixian formations of Liaohe group in Jinshangou gold field, and the delineating of the boundary between the granite and the felsic mylonite in Fuxin.

Key words: high-precision magnetic measurement; geologic mapping; weakly magnetic orebody; micromagnetic measurement

作者简介: 张立军 (1966—), 男, 高级工程师, 1988 年毕业于中国地质大学 (武汉) 物探系, 从事地球物理、地球化学研究工作; 通讯地址: 沈阳市北陵大街 29 号　辽宁省国土资源厅化石资源保护管理处, 邮政编码 110033.

(上接第 183 页)

作者简介: 刘宝良 (1963—), 男, 硕士, 高级工程师, 1988 年毕业于长春地质学院岩化系矿物学专业, 先后从事过岩石矿物的测试和方法研究、非金属矿寻找和开发利用以及区域地质调查等工作, 现在辽宁省国土资源规划院主管地矿业务; 通讯地址: 沈阳市皇姑区香炉山路 5 号, 邮政编码 110031, E-mail: lngtgh@china.com