

doi:10.3969/j.issn.2097-0013.2021.04.009

花岗岩类自然矿物岩石化学换算及程序设计

路远发, 李文霞^{*}

LU Yuan-Fa, LI Wen-Xia

(长江大学资源与环境学院, 武汉 430100)

(College of Resources and Environment, Yangtze University, Wuhan 430100, Hubei)

摘要:花岗岩类自然矿物岩石化学换算是由我国学者朱为方和唐春景设计的针对花岗岩类的标准矿物计算方法。该方法相对于 CIPW 标准矿物计算做了很大的改进, 突出的表现在: (1) 几乎能计算出花岗岩中所有的矿物, 如各类云母、角闪石、堇青石、夕线石, 使标准矿物与实际矿物的组成更加接近; (2) 部分矿物的化学组成 (如云母、角闪石) 会随主岩的成分变化而变化, 能够反映这些矿物广泛的类质同象特征; (3) 对过铝质花岗岩, 将铝区分为四次配位和六次配位, 使标准矿物组成更接近实际矿物; (4) 能正确计算平时罕见的花岗岩矿物组成。本文在简单介绍花岗岩类自然矿物岩石化学换算方法的基础上, 应用 Excel VBA 设计了一套计算机程序。经检验, 程序的计算结果是正确、可靠的, 同时, 软件具有界面简单、使用方便的特点。

关键词: 自然矿物岩石化学换算; 花岗岩类; 岩石化学; 程序设计

中图分类号: P588.12; P584

文献标识码: A

文章编号: 2097-0013(2021)04-0445-13

Lu Y F and Li W X. Petrochemical Calculation Method and VBA Program for Natural Mineral of Granitoids. *South China Geology*, 2021, 37(4):445-457.

Abstract: Petrochemical calculation method for natural mineral of granitoids is norm mineral calculation designed by Chinese scholars Zhu Weifang and Tang Chunjing. Compared with CIPW norm mineral calculation, this method is greatly improved as follows: (1) Almost all minerals in granitoids, such as various mica, hornblende, cordierite and sillimanite, can be calculated, which makes the composition of norm minerals closer to that of modal minerals; (2) The chemical composition of some minerals (such as mica and hornblende) will change with the composition of host rock, which can reflect the broad isomorphic characteristics of these minerals; (3) For peraluminous granites, the aluminum is divided into four-order coordination and six-order coordination, so that the norm mineral composition is closer to that of modal minerals; (4) The mineral composition of granitoids with rare minerals can also be accurately calculated. Based on a brief introduction to the geochemical calculation methods of natural minerals in granitoids, the authors have designed a set of computer program with Excel VBA. The calculation result of the program is correct and reliable after test. The software is also friendly in interface and convenient in use.

Key words: natural mineral calculation method; granitoids; petrochemistry; VBA program

收稿日期: 2021-7-22; 修回日期: 2021-9-13

基金项目: 国家自然科学基金项目“矿物岩石地球化学数据处理中文平台 (编号 40673001)”

第一作者: 路远发 (1959—), 男, 教授, 研究方向为岩矿地球化学与同位素地球化学, E-mail: lyuanfa@vip.163.com

* 通讯作者: 李文霞 (1978—), 女, 博士, 讲师, 研究方向为岩石地球化学, E-mail: visalee2013@126.com

标准矿物换算是一种将岩石化学组成按一定的规则转换成理想矿物组成的一种数据处理方法,最经典的应属 CIPW 标准矿物计算^[1]。该方法对基性-超基性岩有比较好的适用性,因为基性-超基性岩的实际矿物在标准矿物中基本上都是存在的。但对于花岗岩类来说,CIPW 标准矿物计算方法显示出明显的不足,如花岗岩中除最主要的长英质矿物外,通常含一定量的黑云母(白云母)和角闪石;对于过铝质花岗岩来说,可能还含有一定量的堇青石、夕线石。这些花岗岩中广泛存在的矿物,在 CIPW 标准矿物中都是不存在的。因此标准矿物与实际矿物之间存在显著差异。为弥补这一不足,不少学者对 CIPW 标准矿物计算方法进行了改进,或设计了全新的计算方法,如 Rittman^[2]设计的火成岩稳定矿物组合计算方法和王炎庭等^[3]、蒙晓莲^[4]设计的花岗岩类岩石化学计算新方法,以及朱为方等^[5-6]设计的对花岗岩类的自然标准矿物计算法。沈纪利^[7]对上述三种计算结果进行比较,认为朱为方等设计的计算方法无论是在计算原理的科学性、计算过程的简便性、应用范围及结果的准确性等方面都优于其他两种换算方法。

花岗岩类自然矿物岩石化学换算法自创建至今已 40 余年,虽然有岩石学专著和教材对其做过介绍^[8-9],但长期以来基本处于无人问津的状态。究其原因可能有二:其一是缺少软件,创建者虽然给出了详细的计算机程序流程图,但以当年计算机的普及程度和水平,很少有地球化学学者能将其转化为程序;创建者虽然写出了适用于 TQ-16 计算机的程序,但遗憾的是并未得到推广(当年的程序代码是穿录在纸带上的,也不便于推广与传播)。其二,缺少国际对比环境,因国外学者只使用 CIPW,没有国际使用先例,因此该方法在国内也未得到重视。该方法虽然沉寂多年,但以作者长期的地球化学数据处理经验,认为该方法对于花岗岩类,到目前为止仍是最好的标准矿物换算方法,其计算结果与花岗岩中的实际矿物组成非常接近。

传统地质学家们认为,岩石分类命名还是以岩矿鉴定为基础,以实际矿物组成来分类比较可靠,尤其是对花岗岩类来说,矿物结晶粗大,容易鉴别。然而,花岗岩类的实际矿物分类命名并不完善,

存在明显的缺陷。一方面,一些矿物的准确鉴定并非易事,比如长石类矿物,特别是斜长石系列矿物的种属鉴定,一些有经验的鉴定专家也会“犯错”,如南岭地区一些与钨锡矿床有关的花岗岩类,一直被认定为黑云母花岗岩、二长花岗岩等,但经过电子探针分析,原先被鉴定为斜长石的矿物都是 $An < 5\%$ 的钠长石^[10]。又如云母类矿物,一般在镜下只能鉴定出白云母和黑云母,更详细的种属划分会难倒绝大部分岩矿鉴定专家。另一方面,准确估计岩石中的矿物含量也非易事。因花岗岩矿物晶体粗大,一个薄片上承载的信息量有限,加之花岗岩中矿物分布常常不均匀,因此要准确估计矿物含量,需要通过大量薄片鉴定的结果进行统计。如今岩石化学分析手段已经十分先进,也很经济、快捷,因此利用岩石化学特征及标准矿物对岩石进行分类渐成趋势。就花岗岩类的标准矿物来说,自然矿物岩石化学换算明显优于 CIPW 标准矿物计算。

本文将对花岗岩类自然矿物岩石化学换算作简单介绍,并给出相应计算机程序。希望能“激活”该方法,为广大岩石学家及相关地质矿产工作者提供便利。

1 花岗岩类自然矿物岩石化学换算法的基本原理

每种造岩矿物都是按一定比例关系的离子数(即摩尔数)结合而成,因此把岩石化学获得的质量分数换算成阳离子数(摩尔数)来研究岩石的化学特征是较为合理的。该方法首先把氧化物的质量分数换算成阳离子数,然后根据岩浆结晶化学的基本规律,按自然矿物阳离子之间的比例关系构建出不同矿物组合中的自然矿物,最后换算成阳离子的百分数。

根据花岗岩中主要化学组成之间的关系,可将花岗岩划分为三大系列七种自然矿物组合。主要判别指标有:

钙过饱和指数: $Ca' = [K + Na + 2(Ca - Ca_{Ap}) - Al]/2$, 代表过饱和的钙阳离子数,式中 Ca_{Ap} 表示磷灰石中的钙,下同。

② 铝过饱和指数: $Al' = Al - [K + Na + 2(Ca -$

$\text{Ca}_{\text{Ap}}]$],代表过饱和的铝阳离子数。

③ 钠过饱和指数: $\text{Na}' = [\text{K} + \text{Na} + 2(\text{Ca} - \text{Ca}_{\text{Ap}} - \text{Al})]$,代表过饱和的钠阳离子数。

以上三个指数之间存在如下关系:

$$\text{Na}' = 2\text{Ca}' - \text{Al}'$$

④ $\Sigma \text{DO} = \Sigma w(\text{TiO}_2 + \text{FeO} + \text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{MgO} + \text{MnO})$,这些都是形成暗色矿物的氧化物。

⑤ 其它,计算过程中还会使用一些氧化物的质量分数作为判别组合的标志,如 $w(\text{CaO})$ 、 $w(\text{Na}_2\text{O})$ 、 $w(\text{Na}_2\text{O})/w(\text{CaO})$ 、 $w(\text{MgO})$ 、 $w(\text{Li}_2\text{O})$ 等。

1.1 钙过饱和系列

(1) 岩石化学特征标志

① $\text{Ca}' > 0$

(2) 矿物组合及判别标志

本类型有两个矿物组合,分别为:

① 榍石-角闪石-黑云母-磁铁矿-长英矿物组合(简称 Tn-Amp 组合)

判别标志: $w(\text{CaO}) > 1\%$, $\Sigma \text{DO} > 3\%$

矿物组合包括:毒砂、黄铁矿、磁铁矿、钛铁矿、磷灰石、榍石、角闪石、± 紫苏辉石、黑云母、钙长石、钠长石、钾长石、石英等。当 ΣDO 较高时(可达 10%),在将 Fm ($\text{Fm} = \text{Fe}^{2+} + \text{Mn} + \text{Mg}$) 分配给其它含铁(镁)矿物后,如尚有多余,可构建成紫苏辉石(Hy)。朱为方等^[5-6]将其另划分为一个组合,即辉石-角闪石-黑云母-磁铁矿-长英矿物组合(简称 Pr-Amp 组合),但其计算过程与 Tn-Amp 完全一致,只是多出一个紫苏辉石而已。笔者认为没有必要单独划出一个组合,因而我们将其合并到 Tn-Amp 组合。实际上紫苏辉石不仅出现在 Tn-Amp 组合中,在铝过饱和系列的 Cd-Bi 组合中也会出现。

② 萤石-黑云母-长英矿物组合(简称 Fl-Bi 组合)

判别标志: $w(\text{CaO}) \leq 1\%$ 和(或) $\Sigma \text{DO} < 3\%$

矿物组合包括:毒砂、黄铁矿、磁铁矿、钛铁矿、磷灰石、钙长石、萤石、黑云母、钠长石、斜长石和石英等。

1.2 铝过饱和系列

(1) 岩石化学特征标志: $\text{Al}' > 0$

(2) 矿物组合及判别标志

本类型有三个矿物组合,分别为:

① 白云母-黑云母-长英矿物组合(简称 Ms-Bi 组合)

判别标志: $w(\text{MgO}) < 1\%$, $\Sigma \text{DO} < 4\%$, $\text{Li} / (\text{Li} + \text{Fm}) < 0.10$ (如有磷锂铝石,式中 Li 为形成磷锂铝石后的剩余值,下同)

本组合的自然矿物按计算顺序依次为:毒砂、黄铁矿、钛铁矿、磷灰石、钙长石、黑云母、白云母、钠长石、钾长石和石英等。

② 堇青石-黑云母-夕线石-长英矿物组合(简称 Cd-Bi 组合)

判别标志: $w(\text{MgO}) > 1\%$, $\Sigma \text{DO} > 4\%$, $\text{Fe}^{3+} / (\text{Fe}^{3+} + \text{Fe}^{2+}) < 0.35$

本组合的自然矿物按计算顺序依次为:毒砂、黄铁矿、钛铁矿、磷灰石、钙长石、黑云母、堇青石、夕线石、(紫苏辉石)、钠长石、钾长石和石英等。需要说明的是,朱为方和唐春景^[6]设计的该组合中并无紫苏辉石,但在实际数据处理过程中偶尔会出现剩余铝的量不足以形成黑云母、堇青石,导致有多余的 Fm 存在。若按原计算流程 $\text{Cd} \rightarrow \text{Sl}$ 计算,会出现 Sl 为负值的现象。此时我们应该将多余的 Fm 划归为紫苏辉石(Hy)而不是夕线石(Sl)。这与铝饱和系列并不矛盾,因为铝过饱和是指 Al 与 K、Na、Ca 组成长石后有多余的铝(即 $\text{Al}' > 0$)。

③ 含锂云母-(白云母)-黄玉-长英矿物组合(简称 Lit-Top 组合)

判别标志: $\Sigma \text{DO} < 3\%$, $\text{Li} / (\text{Li} + \text{Fm}) \geq 0.10$

本组合的自然矿物按计算顺序依次为:毒砂、黄铁矿、磁铁矿、钛铁矿、磷锂石或磷锂铝石、含锂的云母(包括锂白云母、锂云母、铁锂云母、黑磷云母、绿磷云母)、黄玉、钙长石、钠长石、钾长石和石英等。

本组合的换算,岩石化学分析项目中最好有 Li_2O ,这样可以较好地计算出云母的类型,同时要严格剔除高岭石化的样品。

1.3 钠过饱和系列

(1) 岩石化学特征标志

① $\text{Na}' > 0$; ② $w(\text{Na}_2\text{O}/\text{CaO}) \geq 8$

(2) 矿物组合及判别标志

钠过饱和系列花岗岩的自然矿物组合以出现

碱性暗色矿物为特征,常见的自然矿物按计算顺序有:毒砂、黄铁矿、钛铁矿、磷灰石、钠闪石、± 霓辉石、± 钠铁闪石、± 磁铁矿、± 赤铁矿、± 黑云母、钙长石、钾长石和石英等(带有“±”的矿物存在与否取决于岩石化学成分)。钠过饱和系列可进一步划分为两个矿物组合,分别为:

① 霓辉石 - 钠闪石 - 长英矿物组合(简称 Aeg-Aie 组合)

判别标志: $\text{Na}' / \text{Fe}^{3+} \leq 1$

② 霓辉石 - 钠铁闪石 - 长英矿物组合(简称

Aie-Arf 组合)

判别标志: $\text{Na}' / \text{Fe}^{3+} > 1$

由上述基本原理可以看出,自然矿物换算法基本上涵盖了花岗岩类中的各类矿物及其变种,现将各矿物及其分子式列于表 1 中。在后续的计算过程中,需要根据矿物分子式的离子配比来计算矿物的离子数据。

由上介绍可知,花岗岩类自然矿物可分为三大系列七种矿物组合(朱为方和唐春景的原著^[6]中称为八种组合)。

表 1 花岗岩类自然矿物岩石化学换算所用到的标准矿物

Table 1 Norm minerals for natural mineral petrochemical calculation of granite

矿物(中文名)	矿物(英文名)	缩写	分子式
锆石	Zircon	Zr	$\text{ZrO}_2 \cdot \text{SiO}_2$
毒砂	Arsenopyrite	Ars	FeAsS
黄铁矿	Pyrite	Py	FeS_2
磁铁矿	Magnetite	Mt	$\text{FeO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$
赤铁矿	Hematite	Hm	Fe_2O_3
钛铁矿	Ilmenite	Il	$\text{FeO} \cdot \text{TiO}_2$
榍石	Titanite	Tn	CaTiSiO_5
磷灰石	Apatite	Ap	$\text{Ca}_5[\text{PO}_4]_3(\text{F}, \text{Cl}, \text{OH})$
磷铝石	Lucinite	Luc	$\text{Al}[\text{PO}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
磷锂铝石	Montebrasite	Mon	$\text{LiAl}[\text{PO}_4] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
萤石	Fluorite	Fl	CaF_2
堇青石	Cordierite	Cd	$\text{Al}_3\text{Fm}_2[\text{Si}_5\text{AlO}_{18}]^{①}$
黄玉	Topaz	Top	$\text{Al}_2[\text{SiO}_4](\text{F}, \text{OH})_2$
黑云母	Biotite	Bi	$\text{KFm}_3[\text{AlSi}_3\text{O}_{10}](\text{OH})_2$ (钙过饱和系列) $\text{KFm}_{2.5}\text{Al}_{0.5}^{VI}[\text{AlSi}_3\text{O}_{10}](\text{OH})_2$ (铝过饱和系列)
白云母	Muscovite	Ms	$\text{KAl}^{VI}_2[\text{AlSi}_3\text{O}_{10}](\text{HO})_2$ (可含不定量 Li 和 Fm, 形成含 Li 白云母 MsLi)
锂白云母	lithian muscovite	Lims	$\text{K}[\text{Li}_{1.25}\text{Al}_{1.25}][\text{Si}_4\text{O}_{10}](\text{OH}, \text{F})_2$
锂云母	Lepidolite	Lit	$\text{K}[\text{Li}_{1.5}\text{Al}^{VI}_{1.5}][\text{AlSi}_3\text{O}_{10}](\text{F}, \text{OH})_2$
铁锂云母	Zinnwaldite	Zin	$\text{K}[\text{LiAlFm}][\text{AlSi}_3\text{O}_{10}](\text{OH}, \text{F})_2$
黑磷云母	Protolithionite	Pro	$\text{K}[\text{Li}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{Fm}_2][\text{AlSi}_3\text{O}_{10}](\text{OH}, \text{F})_2$
绿磷云母	Cryophyllite	Cry	$\text{K}[\text{Li}_{1.5}\text{AlFm}_{0.5}][\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5}\text{O}_{10}](\text{OH}, \text{F})_2$
角闪石	Amphibole	Amp	$\text{Ca}_2\text{Fm}_5\text{Si}_8\text{O}_{22}(\text{OH}, \text{F})_2$
钠闪石	Riebeckite	Rie	$\text{NaFe}^{2+}_3\text{Fe}^{3+}_2[\text{Si}_4\text{O}_{11}]$
钠铁闪石	Arfredsonite	Arf	$\text{Na}_3\text{Fe}^{2+}_4\text{Fe}^{3+}_1[\text{Si}_4\text{O}_{11}]_2$
夕线石	Sillimanite	Sil	$\text{Al}_2[\text{SiO}_4]\text{O}$
霓辉石	Aegirine	Aeg	$\text{NaFe}[\text{Si}_2\text{O}_6]$
紫苏辉石	Hypersthene	Hy ^②	$\text{FmO} \cdot \text{SiO}_2$
钙长石	Anorthite	An	$\text{Ca}[\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_8]$
钠长石	Albite	Ab	$\text{Na}[\text{AlSi}_3\text{O}_8]$
钾长石	K-Feldspar	Or 或 Fk	$\text{K}[\text{AlSi}_3\text{O}_8]$
斜长石	Plagioclase	Pl	$\text{Pl}=\text{Ab}+\text{An}, \text{An}\%=100\text{An}/(\text{An}+\text{Ab})$
石英	Quartz	Q ^②	SiO_2

① $\text{Fm}=\text{Fe}^{2+}+\text{Mn}+\text{Mg}$,除了磁铁矿、赤铁矿外,硅酸矿物中统一以 Fm 表示,不再区分具体元素;②原著用 Qu 表示石英,Pr 表示紫苏辉石,为与 CIPW 标准矿物相一致,本文仍分别用 Q 和 Hy 表示。

2 花岗岩类自然矿物岩石化学换算过程简介

2.1 计算过程

【1】全分析结果的预处理,挥发份处理。对于氧化铁的调整问题,由于三价铁有特殊的作用,比如是钠过饱和系列中有关矿物非常重要的组成,一般情况下不作调整,只有在分析结果仅有总铁的情况下才进行调整。由于该方法最终结果是用矿物的阳离子数除以总阳离子数得到矿物的含量,因此无需对氧化物进行闭合(即换算到 100%)。

【2】将预处理后的氧化物质量分数换算成阳离子数。氧化物(元素)的质量分数除以对应的分子(原子)量得到分子数,再根据各离子在分子中所占的比例换算成离子数(不包括 O^{2-} 、 OH^- 、 H^+ 和 F 及 H_2O 水分子,下同)。

以 Na_2O 为例,如 $w(Na_2O)=3.56\%$,则其分子数为:

$$n(Na_2O)=w(Na_2O)/61.9789=3.56/61.9789=0.0574$$

因一个 Na_2O 分子中含有两个 Na 离子,所以 Na(除 Fe 在特殊情况下标注价态外,其它离子均不标注价态)的数量为:

$$n(Na)=n(Na_2O) \times 2=0.0574 \times 2=0.1148$$

其它氧化物(单质)以此类推。

【3】次要组份处理。

Rb 和 Cs 没有独立矿物,一般与 K 形成类质同象置换。因此将 Rb 和 Cs 合并到 K 中;Mn 在花岗岩中没有独立矿物,常与 Fe 形成类质同象置换,因此将其并入 Fe^{2+} 中;Li 含量虽然并不高,但作为云母的重要组分,不能当作次要组分处理。

【4】副矿物的离子数及岩石系列判别指数计算。

【4a】P 的处理:

$n(Ca)/n(P) \geq 6$ 时, P 与 Ca 形成磷灰石(Ap): $Ca_5[PO_4]_3(F,Cl,OH)$

① $P_{Ap}=P$, ② $Ca_{Ap}=1.67 P_{Ap}$, ③ $Ap=①+②=P_{Ap}+Ca_{Ap}=2.67P$

$n(Ca)/n(P) < 6$, 且 $w(Li_2O) > 0.8$ 时, 形成磷锂铝石(Mon): $LiAl[PO_4] \cdot 6H_2O$

① $P_{Mon}=P$, ② $Al_{Mon}=P_{Mon}$, ③ $Li_{Mon}=P_{Mon}$, ④ $Mon=$

① + ② + ③ = $P_{Mon} + Al_{Mon} + Li_{Mon} = 3P$

$n(Ca)/n(P) < 6$, 且 $w(Li_2O) \leq 0.8$ 时, 形成磷铝石(Luc): $Al[PO_4] \cdot 2H_2O$

① $P_{Luc}=P$, ② $Al_{Luc}=P_{Luc}$, ③ $Luc=①+②=P_{Luc}+P_{Luc}=2P$

上述三种含磷矿物,除磷(P)外,还分别用到 Ca、Al、Li,在相应的矿物形成后要从总量中予以扣除(下同)。

【4b】S 与 Fe^{2+} 形成黄铁矿,如有 As,则 S 与 As 先形成毒砂,剩余的 S 再形成黄铁矿。

毒砂(Ars): $FeAsS$

$\therefore Fe_{Ars}=As_{Ars}=S_{Ars}, \therefore Ars=3As$

黄铁矿(Py): FeS_2

① $S_{Py}=S$, ② $Fe_{Py}=S_{Py}/2$, ③ $Py=①+②=1.5S$ (黄铁矿中的 S 为形成毒砂后的剩余 S)

【4c】计算完上述副矿物后,计算 Al' 、 Ca' 、 Na' 及 ΣDO 。

【5】根据 Al' 、 Ca' 和 Na' 判别标志确定应计算的矿物组合。不同的岩石系列和不同的矿物组合,计算的顺序不同,详见流程图(图 1)。因为铝过饱和和系列相对来说比较复杂,下面以铝过饱和系列为例,对其计算过程进行介绍。

【6】计算磁铁矿-钛铁矿-钙长石阳离子数(下面列出各种组合的共有部分)

【6a】计算磁铁矿(Mt): $Fe_2O_3 \cdot FeO$, 其中有部分三价铁(Fe^{3+})计入磁铁矿

① $Fe_{Mt}^{3+}=Fe^{3+}$ (Fe_{Mt}^{3+} 代表磁铁矿中的 Fe^{3+} 数,下同), ② $Fe_{Mt}^{2+}=\frac{1}{2}Fe_{Mt}^{3+}$, ③ $Mt=①+②=Fe_{Mt}^{2+}+Fe_{Mt}^{3+}=1.5 Fe_{Mt}^{3+}$

【6b】计算钛铁矿(Il): $FeO \cdot TiO_2$, 全部钛计入钛铁矿

① $Ti_{Il}=Ti$, ② $Fe_{Il}^{2+}=Ti_{Il}$, ③ $Il=Fe_{Il}^{2+}+Ti_{Il}=2Ti_{Il}$ 此处如前,填加 = ① + ②

【6c】计算钙长石(An): $Ca[Al_2Si_2O_8]$

① $Ca_{An}=[Al-(K+Na)]/2$, ② $Al_{An}=Si_{An}=2Ca_{An}$, ③ $An=①+②=Ca_{An}+Al_{An}+Si_{An}=5Ca_{An}$

【7】如果 $\Sigma DO < 3\%$, 且 $Li/(Li+Fm) \geq 0.1$, 则计算锂云母-黄玉组合(Lit-Top)

因 $Li/(Li+Fm)$ 比值的不同,含锂云母会形成不同的变种,参见表 2。

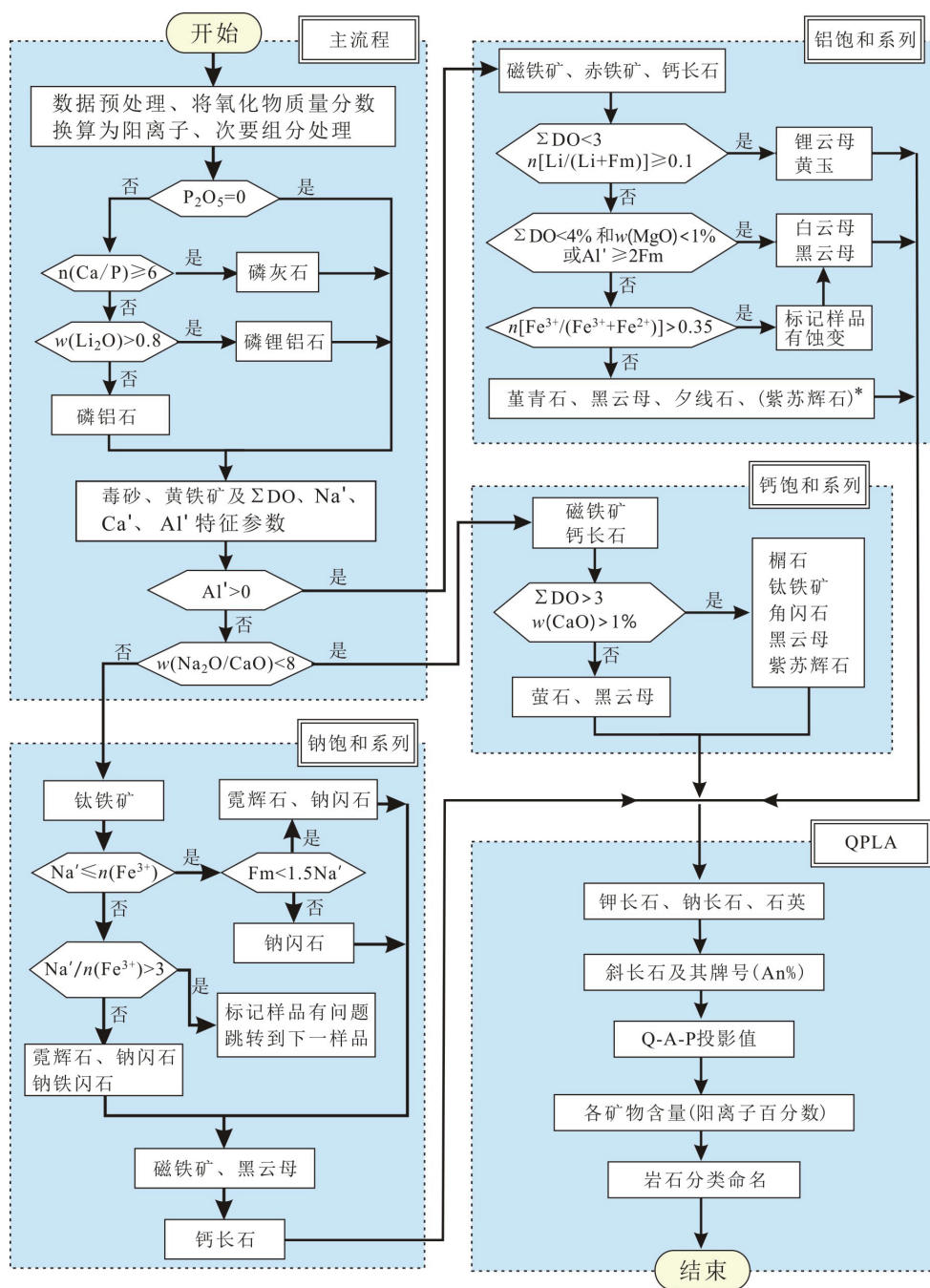


图1 花岗岩类自然矿物岩石换算流程图

Fig. 1 Flow chart of Natural Mineral calculate of Granitoids

说明: 1. 几个虚线框并不是流程图的元素,各框内是相对独立的一组流程,在其右上角压线的双线框中有名称;2. 各矿物的具体计算过程未列出详细流程;3. 各过程中的所有组分均是指计算到该阶段的剩余值。* 朱为方和唐春景的原文^[6]中,Cd-Bi-Si组合中并没有紫苏辉石,此处作了一点调整,详见正文的计算步骤[9]。

以下以铁锂云母(Zin)为例,计算其所占离子数。根据Zin的分子式,得:

① $Fm_{Zin} = Fm$, ② $Li_{Zin} = Li$, ③ $K_{Zin} = (Fm_{Zin} + Li_{Zin})/2$, ④ $Si_{Zin} = 3K_{Zin}$, ⑤ $Al_{Zin}^{IV} = K_{Zin}$

⑥ $\therefore (3Al_{Zin}^{IV} + Li_{Zin} + 2Fm_{Zin})/6 = (Fm_{Zin} + Li_{Zin})/2$
 $\therefore Al_{Zin}^{IV} = (2Li + Fm)/3$

⑦ $Zin = K_{Zin} + Li_{Zin} + Al_{Zin}^{IV} + Fm_{Zin} + Al_{Zin}^{IV} + Si_{Zin}$

上式在 $Al' > Al_{Zin}^{IV}$ 时成立,余Al计算黄玉

表 2 含锂云母的变种

Table 2 Variation of Li-bearing Micas

Li/(Li+Fm) 值	矿物种类	分子式 *
<0.1 (不属于 Lit-Top 组合)	含 Li 黑云母 (Bi)	$\text{KFm}_{2.5}\text{Al}^{\text{VI}}_{0.5}[\text{AlSi}_3\text{O}_{10}](\text{OH})_2$
0.1~0.35	黑磷云母 (Pro)	$\text{K}[\text{Li}_{0.5}\text{Al}^{\text{VI}}_{0.5}\text{Fm}_2][\text{AlSi}_3\text{O}_{10}](\text{OH}, \text{F})_2$
0.35~0.63	铁锂云母 (Zin)	$\text{K}[\text{LiAl}^{\text{VI}}\text{Fm}][\text{AlSi}_3\text{O}_{10}](\text{OH}, \text{F})_2$
0.63~0.88	绿磷云母 (Cry)	$\text{K}[\text{Li}_{1.5}\text{Al}^{\text{VI}}\text{Fm}_{0.5}][\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5}\text{O}_{10}](\text{OH}, \text{F})_2$
>0.88, 且 Li /Al' <1.5	锂云母 (Lit)	$\text{K}[\text{Li}_{1.5}\text{Al}^{\text{VI}}_{1.5}][\text{AlSi}_3\text{O}_{10}](\text{F}, \text{OH})_2$
>0.88, 且 Li /Al' >3	锂白云母 (Lims)	$\text{K}[\text{Li}_{1.25}\text{Al}^{\text{VI}}_{1.25}][\text{Si}_4\text{O}_{10}](\text{OH}, \text{F})_2$

* 分子式中的 Al^{VI} 是指八面体 (6 次配位) 中的 Al, 区别于 Si (Al)-O 四面体 (四次配位) 中的 Al.

(Top): $\text{Al}_2[\text{SiO}_4](\text{F}, \text{OH})_2$

① $\text{Al}_{\text{Top}} = \text{Al}$, ② $\text{Si}_{\text{Top}} = \text{Al}_{\text{Top}}/2$, ③ $\text{Top} =$
① + ② = 1.5Al

当 $\text{Al}' < \text{Al}_{\text{Zin}}^{\text{IV}}$ 时, 铁锂云母的计算步骤为:

① $\text{Li}_{\text{Zin}} = \text{Li}$, ② $\text{Fm}_{\text{Zin}} = \text{Fm}$, ③ $\text{Al}_{\text{Zin}}^{\text{IV}} = \text{Al}'$, ④ 算
 $\text{K}_{\text{Zin}} = (3\text{Al}' + 2\text{Fm}_{\text{Zin}} + \text{Li}_{\text{Zin}})/6$
⑤ $\text{Al}_{\text{Zin}}^{\text{IV}} = \text{K}_{\text{Zin}}$, ⑥ $\text{Si}_{\text{Zin}} = 3\text{K}_{\text{Zin}}$, ⑦ Zin
 $=$ ① + ② + ③ + ④ + ⑤ + ⑥ = $\text{Li}_{\text{Zin}} + \text{Fm}_{\text{Zin}} + \text{Al}_{\text{Zin}}^{\text{IV}}$
 $+ \text{K}_{\text{Zin}} + \text{Al}_{\text{Zin}}^{\text{IV}} + \text{Si}_{\text{Zin}}$

此时因 $\text{Al}' = 0$, 不出现黄玉。

其它含锂云母的计算参见铁锂云母, 此处从略。

在 Li 含量甚微, 不足以参与矿物命名 (表 2) 时, 也不能进入黑云母时, Li 进入白云母, 形成含锂白云母 (MsLi)。

【8】如果 $\Sigma \text{DO} < 4\%$, 且 $w(\text{MgO}) < 1\%$ 或 $\text{Al}' \geq 2\text{Fm}$, 计算白云母 - 黑云母组合 (Bi-Ms)

【8a】如果含 Li (表 2 中第一个含锂矿物), 则形成含 Li 黑云母。需要先计算 Al^{VI} 的值: 根据电价平衡, 得 $\text{Al}_{\text{Bi}}^{\text{VI}} = (\text{Fm} - 2.5\text{Li})/7.5$ 。

【8a-1】如果 $\text{Al}_{\text{Bi}}^{\text{VI}} < \text{Al}'$, 则:

① $\text{Li}_{\text{Bi}} = \text{Li}$, ② $\text{Fm}_{\text{Bi}} = \text{Fm}$, ③ $\text{K}_{\text{Bi}} = \text{Fm}_{\text{Bi}}/2.5$, ④
 $\text{Al}_{\text{Bi}}^{\text{VI}} = (\text{Fm} - 2.5\text{Li})/7.5$, ⑤ $\text{Si}_{\text{Bi}} = 3\text{K}_{\text{Bi}}$,
⑥ $\text{Al}_{\text{Bi}}^{\text{IV}} = \text{K}_{\text{Bi}}$, ⑦ $\text{Bi} =$ ① + ② + ③ + ④ + ⑤ + ⑥
 $= \text{Li}_{\text{Bi}} + \text{Fm}_{\text{Bi}} + \text{K}_{\text{Bi}} + \text{Al}_{\text{Bi}}^{\text{IV}} + \text{Si}_{\text{Bi}} + \text{Al}_{\text{Bi}}^{\text{IV}}$

余铝 (仍用 Al' 表示) 形成白云母 (Ms):
 $\text{KAl}^{\text{VI}}_2[\text{AlSi}_3\text{O}_{10}](\text{HO})_2$, 计算步骤如下:

① $\text{Al}_{\text{Ms}}^{\text{IV}} = \text{Al}'$, ② $\text{K}_{\text{Ms}} = \text{Al}_{\text{Ms}}^{\text{IV}}/2$, ③ $\text{Al}_{\text{Ms}}^{\text{IV}} = \text{K}_{\text{Ms}}$, ④ Si_{Ms}

$= 3\text{K}_{\text{Ms}}$,

⑤ $\text{Ms} =$ ① + ② + ③ + ④ = $\text{Al}_{\text{Ms}}^{\text{IV}} + \text{K}_{\text{Ms}} + \text{Al}_{\text{Ms}}^{\text{IV}} +$
 $\text{Si}_{\text{Ms}} = 7\text{K}_{\text{Ms}}$

【8a-2】如果 $\text{Al}_{\text{Ms}}^{\text{IV}} > \text{Al}'$, 则黑云母按如下步骤计

$\text{Al}_{\text{Ms}}^{\text{IV}} = \text{Al}'$, ② $\text{Li}_{\text{Bi}} = \text{Li}$, ③ $\text{Fm}_{\text{Bi}} = \text{Fm}$, ④ $\text{K}_{\text{Bi}} = (3$
 $\text{Al}' + 2\text{Fm}_{\text{Bi}} + \text{Li}_{\text{Bi}})/6$,

⑤ $\text{Si}_{\text{Bi}} = 3\text{K}_{\text{Bi}}$, ⑥ $\text{Al}_{\text{Ms}}^{\text{IV}} = \text{K}_{\text{Bi}}$, ⑦ $\text{Bi} =$ ① + ② +
③ + ④ + ⑤ + ⑥ = $\text{Al}_{\text{Ms}}^{\text{IV}} + \text{Li}_{\text{Bi}} + \text{Fm}_{\text{Bi}} + \text{K}_{\text{Bi}} +$
 $\text{Si}_{\text{Bi}} + \text{Al}_{\text{Ms}}^{\text{IV}}$

此时无多余的过剩铝, 因而无白云母。

【9】在不符合上述【7】、【8】的条件下, 需要判断样品是否有蚀变: 如果 $n[\text{Fe}^{3+}/(\text{Fe}^{3+} + \text{Fe}^{2+})] > 0.35$, 表明样品有蚀变, 需要对样品做标记, 但仍按 Ms-Bi 组合计算。如果 $n[\text{Fe}^{3+}/(\text{Fe}^{3+} + \text{Fe}^{2+})] < 0.35$, 则按堇青石 - 黑云母 - 夕线石 (Cd-Bi) 组合计算。在 Cd-Bi 组合中, 主要涉及 Fm 、 Al' 在黑云母和夕线石中的分配。朱为方等^[6]给出如下方案:

① 当 $\text{Al}' \leq \text{Fm}/5$ 时, 只出现黑云母
② 当 $\text{Fm}/5 < \text{Al}' < 2\text{Fm}$ 时, 出现黑云母和堇青石

③ 当 $\text{Al}' = 2\text{Fm}$ 时, 仅出现堇青石
④ 当 $\text{Al}' > 2\text{Fm}$ 时, 出现堇青石和夕线石

由上述方案可知, 第③和④种情况下不会出现黑云母, 但自然界中含堇青石 ($\pm$ 夕线石) 花岗岩基本上都是堇青石与黑云母共生, 而且还可以出现紫苏辉石^[11-15]。因此本文对这部分作出微调, 即无论 Al' 与 Fm 的比例如何, 首先将部分 Al' 分配到黑云母中, 其分配比例按 $\text{K}_{\text{Bi}} = (2\text{Fm} - \text{Al}')/4.5$ 计

算^[6],但前提是 $K_{Bi} < K$, 否则不计算黑云母, 剩余的 Al' 、 Fm 分配给堇青石、夕线石和紫苏辉石。

【9a】黑云母 (Bi): $KFm_{2.5}Al_{0.5}^{IV}[AlSi_3O_{10}](OH)_2$

① $K_{Bi} = (2Fm - Al')/4.5$, ② $Fm_{Bi} = 2.5K_{Bi}$,
③ $Al_{Bi}^{IV} = 0.5 K_{Bi}$, ④ $Si_{Bi} = 3K_{Bi}$, ⑤ $Al_{Bi}^{IV} = K_{Bi}$, ⑥ $Bi =$
① + ② + ③ + ④ + ⑤ = $K_{Bi} + Fm_{Bi} + Al_{Bi}^{IV} +$
 $Si_{Bi} + Al_{Bi}^{IV}$

【9b】若 $Al' > 2Fm$, 则 Fm 全部分配给堇青石, 多余的 Al' 分配给夕线石。

堇青石 (Cd): $Al_3Fm_2[Si_5AlO_{18}]$

① $Fm_{Cd} = Fm$, ② $Al_{Cd} = 2Fm_{Cd}$, ③ $Si_{Cd} =$
 $2.5Fm_{Cd}$, ④ $Cd = ① + ② + ③ = Fm_{Cd} + Al_{Cd} + Si_{Cd} =$
 $5.5Fm_{Cd}$

夕线石 (Sl): $Al_2[SiO_4]O$

① $Al_{Sl} = Al'$, ② $Si_{Sl} = Al_{Sl}/2$, ③ $Sl = ① + ② =$
 $Al_{Sl} + Si_{Sl} = 1.5Al_{Sl}$, 此时无紫苏辉石。

【9c】若 $Al' < 2Fm$, 则 Al' 全部分配给堇青石, 多余的 Fm 分配给紫苏辉石。

堇青石 (Cd):

① $Al_{Cd} = Al'$, ② $Fm_{Cd} = Al_{Cd}/2$, ③ $Si_{Cd} =$
 $1.25Al_{Cd}$, ④ $Cd = ① + ② + ③ = Al_{Cd} + Fm_{Cd} + Si_{Cd}$

紫苏辉石 (Hy): $FmO \cdot SiO_2$

① $Fm_{Hy} = Fm$, ② $Si_{Hy} = Fm_{Hy}$, ③ $Hy = ① + ② =$
 $Fm_{Hy} + Si_{Hy} = 2Fm_{Hy}$

至此, 铝过饱和系列的所有矿物计算完毕, 最后转到共有模块部分: 长英质矿物计算, 即步骤【10】。

其它系列计算过程参见图 1。详细的计算过程此处从略, 有兴趣的读者可参阅朱为方和唐春景^[6]的原著。

【10】长英质矿物及 Q-A-P 图解的投影参数计算 (图 1 中 QPLA)。

因铝过饱和系列和钙过饱和系列的钙长石在进入各系列时已经计算, 而钠过饱和系列不存在钙长石。因此, 该步骤中不含钙长石的计算。

【10a】钾长石 (Or): $K[AlSi_3O_8]$

① $K_{Or} = K$, ② $Al_{Or} = K_{Or}$, ③ $Si_{Or} = 3K_{Or}$, ④ $Or =$
 $① + ② + ③ = 5K$

【10b】钠长石 (Ab): $Na[AlSi_3O_8]$

① $Na_{Ab} = Na$, ② $Al_{Ab} = Na_{Ab}$, ③ $Si_{Ab} = 3Na_{Ab}$,

④ $Ab = ① + ② + ③ = 5Na$

【10c】因 K 、 Na 在钠长石和钾长石之间的类质同像替换, 需对上述计算得到的纯钾长石和钠长石分子数进行重新分配。以 Ab' 和 Or' 分别代表纯钠长石和纯钾长石分子 (即【10a】和【10b】的计算结果), 钾长石中 $Ab'/Or' = 0.253/0.747$; 钠长石中 $Ab'/Or' = 0.927/0.073$, 若以 Ab 、 Or 代表真实的钠长石和钾长石分子数, 则:

$Ab = 1.07Ab' - 0.35Or'$, $Or = (Ab' + Or') - Ab$

若 $Ab < 0$, 则 $Ab = 0$, $Or = Ab' + Or'$;

若 $Ab > Ab' + Or'$, 则 $Ab = Ab' + Or'$, $Or = 0$

【10d】石英 (Q): SiO_2

$Q = Si'$

【10e】计算斜长石牌号:

关于斜长石牌号 ($An\%$) 的计算, 有两个公式, 分别为:

① $An\% = An \times 100 / (An + Ab)$

② $An\% = An \times 100 / (An + 2Ab)$

朱为方和唐春景^[6]采用第一个公式, 本程序采用的是第二个公式, 理由见文献 [1, 11]。

【10f】计算 Q-A-P 三角形投影图的参数 (P 代表斜长石, A 代表碱性长石)。

若 $An\% \geq 10$, 则 $P = An + Ab$, $A = Or$

若 $An\% < 10$, 则 $P = 0$, $A = Or + Ab + An$

设 $T = Q + P + A$

则投影值为: $Q\% = 100 Q/T$; $P\% = 100 P/T$; $A\% = 100 A/T$

【11】最后把各矿物离子数换算成占总离子数的百分比, 即矿物含量。

方法是矿物的离子数除以总离子数 (Sum), 以 Hy 为例:

$Hy(\%) = 100 \times Hy/Sum$, 其它矿物以此类推。

【12】岩石自动分类命名

本程序还设计了花岗岩类自动分类命名功能, 可根据标准矿物的计算结果自动给出对应的岩石系列、组合类型和岩石名称。分类命名的原则如下:

① 根据 $Q\%$ 值的大小和 A/P 比值, 自动判别在 Q-A-P 分类图中的位置, 获得根名称。

② 按 $\geq 1.0\%$ (含量下限用户可自行设置) 的副矿物 (次要矿物) 参与分类命名的原则, 筛选出参与

命名的副矿物种类。

③ 将筛选出的副矿物按由少到多的顺序放置到根名称前面(含量越少越靠前),形成完整的分类命名,如黑云母角闪石二长花岗岩。如果黑云母和白云母同时出现,则不分含量高低,统一以二云母代之,如二云母碱长花岗岩。

④ 如果岩石的颜色指数(CI)小于 5%,在根名称前加上“浅色”二字,如钠闪石黑云母浅色碱长花岗岩(表 4、表 6 中例 7)。关于颜色指数,详见后述。

2.2 关于分异指数(DI)和颜色指数(CI)的计算

DI 和 CI 是指示岩浆结晶分异程度的两个重要指标。由于本方法与 CIPW 标准矿物所获得的矿物组合有显著差异,因此,CIPW 标准矿物中的 DI 和 CI 计算公式在此已不再适用。基本原则是将能反映结晶分异的矿物都计入到 DI 中,而有颜色的矿物则计入到 CI 中。同时,CI 也是岩石分类命名的重要参数之一^[17-19]。朱为方和唐春景的原著中并未给出 DI 和 CI 的计算公式。

前人对镁铁质矿物(M)及颜色指数(CI)的概念有较为详细的介绍,其中镁铁质矿物包括所有含铁矿物及相关矿物,包括云母类矿物、角闪石、辉石、橄榄石、不透明矿物,副矿物如锆石、磷灰石、榍石、绿帘石、褐帘石、石榴子石、黄长石、原生碳酸盐矿物等。但考虑到磷灰石、白云母及原生碳酸盐矿物通常被认为是无色矿物,因此颜色指数应将其剔除。以此为参考,在自然矿物换算中我们按如下公式分别计算 DI 和 CI(矿物符号所代表的矿物参见表 1):

$$DI = Q + Or + Ab + Ms + Cry + Lims + MsLi + Lit + Top + Mon$$

$$CI = Py + Mt + Il + Hm + Tn + Zr + Top + Luc + Mon + Amp + Bi + Pro + Zin + Cry + Lit + Cd + Hy + Ric + Aeg + Arf$$

通常情况下,DI 所包含的矿物与 CI 包含的矿物是不重复的,但考虑到两个指标的意义并不完全相同(反),DI 主要反映结晶分异作用,白云母及其含 Li 的变种归为分异指数应该没有问题,Li 元素本身就是高分异花岗岩的重要指标,出现含 Li 的矿物通常是高分异的结果,因此可以将 Cry 和 Lit 纳

入 DI 矿物(若矿物分子式中有含 Fm,且 $Fm \geq 1$,则不记入 DI 中);同理 Mon 也被纳入 DI 矿物。而部分含 Li 矿物是有颜色的,因此该类云母也同时列入到 CI 矿物中,如 Pro、Zin、Cry、Lit。此处,这类矿物除 Lit 外,矿物分子中 Fm 均 ≥ 1 ,Lit 虽然不含铁镁,但通常有颜色,如淡紫色、粉红色或黄绿色等。

2.3 相对于 CIPW 标准矿物的改进及存在的不足

朱为方和唐春景^[6]总结了该方法相对于 CIPW 法的 9 条改进,其中以下几点最为突出:

① 矿物组成方面。几乎列入了花岗岩类中所能见到的全部常见造岩矿物和副矿物,这是 CIPW 标准矿物计算无法做到的。

② 该方法计算的部分矿物,如角闪石、云母类矿物的组成是随主岩成分的变化而变化的,这一点较好地揭示了矿物中复杂的类质同象现象。其中,建立的含锂云母系列的化学指标及方法,可给出云母矿物的近似分子式。

③ 依据铝的四次配位和六次配位的不同存在形式来计算含铝的矿物,进而确定暗色矿物及其他副矿物的组合与数量,其设计更为合理,故计算结果更接近于花岗岩类自然矿物的组合与数量。

④ 除适用于常见的各种花岗岩类自然矿物的换算外(例如角闪石-榍石-黑云母花岗岩、黑云母花岗岩、二云母花岗岩、白云母花岗岩),还适用于不常见的花岗岩类自然矿物换算,如含钠辉石、钠闪石的碱性花岗岩,含锂的二云母系列花岗岩及堇青石花岗岩等。

该方法对于花岗岩类标准矿物计算来说,比 CIPW 法有了很大的改进,但仍然存在一些不足,主要有以下几点:

① 过铝质花岗岩中可能还会出现石榴子石,目前该方法还没有涉及到。

② 虽然理论上硅饱和系列不应该存在橄榄石,但实际上还是有一些花岗岩类是有橄榄石的,这可能是标准矿物计算无法解决的一个问题。

③ 本方法在计算过程中使用了不少以氧化物的质量分数,如 $w(\text{CaO})$ 、 $w(\text{Na}_2\text{O})$ 、 $w(\text{Na}_2\text{O})/w(\text{CaO})$ 、 $w(\text{MgO})$ 、 $w(\text{Li}_2\text{O})$ 等,作为系列或组合的判别指标,这是不够严谨的,也是最需要改进的地方。

3 计算结果的检查

所有标准矿物换算均需要对结果进行检查,并对其正确性作出判断。与 CIPW 标准矿物换算^[1]的判断标准基本一致:

① 所有矿物不能出现负值。

② 矿物总量应为 100.00 ± 0.02 , 所产生的误差主要是小数部分四舍五入的结果。该换算方法最终没有换算到质量分数, 因此不存在分子量取值对结果的影响。需要注意的是, 离子总量与分配到各矿物中的离子总量要分别计算, 前者在各氧化物(单质)质量分数换算成离子数时就已做出统计。各矿物所占的比例是用矿物的离子数除以该离子总量得到, 不可用已形成矿物的离子数来统计总量。如果矿物总量 <100 , 则表明有部分阳离子没有分配到矿物中; 反之, 如矿物总量 >100 , 则表明部分阳离子可能被重复利用(在部分矿物形成时没有及时扣除), 这些结果都是不正确的。

③ 矿物组合特征: 前已述及, 不同的系列、不

同的矿物组合, 出现的自然矿物是不同的, 通过矿物组合有助于我们判断计算结果是否正确。表 3 列出了各岩石组合类型应该出现的特征矿物(不含各组合中共有的矿物, 如长英质矿物及绝大部分副矿物)。

4 花岗岩类自然矿物岩石化学换算程序

花岗岩类自然矿物岩石化学换算程序是作者根据朱为方的方法^[5]设计的一个 Excel VBA 程序, 也是 Geokit 软件(路远发, 2004)^[20]的组成部分。用户可以点击 Geokit 菜单中的相关菜单项(图 2), 打开数据处理工作簿。

打开工作簿后, 系统会生成一个用户工具栏(图 3)(Excel2003 显示在工具栏中, 其它版本的 Excel 则显示在“加载项”中), 同时用户可以看到一个带有(示例)数据的工作表(表 4)。点击工作栏中的“矿物计算”按钮, 会弹出一个窗口(图 4), 对计算的相关条件进行设置。设置完成后, 点击窗口中的“确定”按钮, 即可将工作表中的岩石化学数

表 3 花岗岩类不同岩石系列及组合的特征矿物

Table 3 Characteristic minerals of different rock series and assemblages in granitoids

系列	组合类型	特征矿物组合
钙过饱和	Tn-Amp	榍石、角闪石、(紫苏辉石)
	Fl-Bi 组合	萤石、黑云母
铝过饱和	Ms-Bi	黑云母、白云母
	Cd-Bi	黑云母、堇青石、夕线石、(紫苏辉石)
	Lit-Top	磷锂石或磷锂铝石、含锂的云母、黄玉
钠过饱和	Aeg-Aie	霓辉石、钠闪石
	Aie-Anf	霓辉石、钠铁闪石

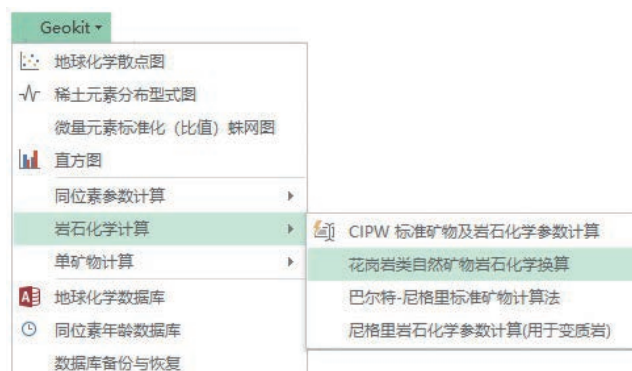


图 2 Geokit 菜单中的花岗岩类自然矿物岩石化学换算菜单项

Fig. 2 Menu item for Natural Mineral calculation of granite in geokit

据换算成标准矿物。Geokit 中带有多个地球化学数据库,如同位素年代学数据库、稳定同位素地球化学数据库和元素地球化学数据库。如果用户已经将岩石化学数据存入数据库中,可以点击工具栏中的“导入数据”按钮,从数据库中调入数据,关于数据库的使用方法参见软件的用户手册。



图 3 花岗岩自然矿物岩石化学计算用户工具栏

Fig. 3 User toolbar of natural mineral petrochemical calculation of granite

表 4 花岗岩类自然矿物岩石化学换算数据格式及示例数据 *

Table 4 Data format and examples for natural mineral petrochemical calculation of granite		SiO ₂	TiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	FeO	MnO	MgO	CaO	Na ₂ O	K ₂ O	P ₂ O ₅	LiO ₂	S	As	Rb ₂ O	Cs ₂ O	Zr
例 1	磁铁矿角闪石黑云母闪长花岗岩	65.28	0.45	15.09	1.45	3.18	0.056	2.78	4.37	3.32	3.24	0.105						
例 2	萤石黑云母浅色碱长花岗岩	73.87	0.12	12.13	0.33	0.95	0.04	0.08	1.22	3.62	5.08	0.019						
例 3	二云母碱长花岗岩	73.89	0.024	12.45	0.83	1.83	0.075	0.37	0.50	3.63	4.26	0.06						
例 4	堇青石黑云母二长花岗岩	70.84	0.40	13.43	0.28	3.59	0.049	1.10	1.55	2.25	4.43	0.11						
例 5	黄玉绿磷云母碱长花岗岩	73.24	0.015	15.29	0.08	0.34	0.26	0.005	0.49	4.75	3.94	0.39	0.252			0.250	0.012	
例 6	磷锂铝石锂云母钠长石花岗岩	67.94	0.008	17.75	0.07	0.22	0.14	0.004	0.14	6.15	2.51	0.423	1.500	220		0.318	0.056	
例 7	钠闪石黑云母浅色碱长花岗岩	76.40	0.13	11.55	0.98	1.64	0.04	0.07	0.21	4.1	4.26							
例 8	钠闪石浅色碱长花岗岩	76.57	0.12	12.14	1.76	0.45	0.09	0.16	0.27	4.3	4.60	0.01						

* 样品号为参考文献 [6] 中实例的编号;以氧化物形式给出的,单位为 wt%,以元素形式给出的单位为 μ g/g.



图 4 花岗岩类自然矿物岩石化学换算条件设置窗口

Fig. 4 Initial window for natural mineral petrochemical calculation of granite

5 计算实例与对比

为了检查程序的可靠性,本文对原著 [6] 中提供的部分数据进行计算,结果表明,Geokit 的计算结果与原作者的计算结果一致(表 5),表明 Geokit 中花岗

岩类自然矿物换算程序是正确的。此外,程序带有自动分类命名功能,自动分类命名的结果也基本一致(表 6),反映程序的自动分类命名功能也是正确的,得出的分类结果是可信的。

表 5 花岗岩类自然矿物岩石化学换算实例及与文献 [6] 对比表 (岩石化学数据见表 4)

Table 5 Examples for natural mineral petrochemical calculation of granite and Comparison with reference

样品号 ^①	例 1	例 2	例 3	例 4	例 5	例 6	例 7	例 8
黄铁矿						0.06	0.06	
磷灰石	0.22	0.2	0.04	0.04	0.13	0.1	0.24	0.02
磁铁矿	1.53	1.53	0.36	0.36	0.90	0.9	0.30	0.3
榍石	0.95	0.9						
角闪石	4.13	4.1						
黑云母	12.09	12.1	1.88	1.87	5.56	5.6	9.87	9.8
钛铁矿			0.17	0.17	0.03	0.03	0.58	0.6
萤石			0.85	0.85				
白云母				3.14	3.4			
堇青石					5.74	5.8		
磷铝石						0.61	0.61	
绿磷云母						5.04	5.05	
黄玉						2.76	2.76	
磷锂铝石							0.97	0.97
锂云母							25.08	25.08
钠闪石							1.57	1.4
霓辉石								2.79
赤铁矿								0.18
钙长石	16.91	17.0	1.91	1.90	2.16	2.2	7.26	7.2
钠长石	28.14	28	25.54	25.54	28.96	28	15.14	15
钾长石	13.84	13	38.01	38.01	25.06	25.6	27.01	27
斜长石	45.05	14	27.45	27.44	31.11	30.2	22.4	22.2
石英	22.18	22.3	31.24	32.00	34.07	34.2	33.85	34.1
An% ^②	37.35	45	6.96	6.9	6.94	7.3	32.42	32.4
DI	64.16		94.79		91.23		76	
CI	18.7		3.26		6.49		16.49	
P%	55.57	56					26.9	26.7
A%	17.07	16.2	67.70	65.54	62.25	61	32.44	32.4
Q%	27.36	27.8	32.3	34.46	37.75	39	40.66	40.9

① 每件样品有两列结果,左侧为 Geokit 的计算结果,右侧 (斜体字) 是原著给出的结果。② 为与原文对比,此处所用的公式为 $An\% = An \times 100 / (An + Ab)$,这与前文介绍的有所不同。

表 6 岩石系列、矿物组合及分类命名对照表

Table 6 Comparison of rock series, mineral assemblage type, classification and nomenclature

样品号	样品名 (原岩石名称)	岩石系列	组合类型	分类命名 (geokit 的命名结果) ^①
例 1	磁铁矿角闪石黑云母闪长花岗岩 ^②	Ca-Over	Tn-Amp	磁铁矿角闪石黑云母花岗闪长岩
例 2	萤石黑云母浅色碱长花岗岩	Ca-Over	Fl-Bi	黑云母浅色碱长花岗岩
例 3	二云母碱长花岗岩	Al-Over	Bi-Ms	二云母碱长花岗岩
例 4	堇青石黑云母二长花岗岩	Al-Over	Cd-Bi	堇青石黑云母二长花岗岩
例 5	黄玉绿磷云母碱长花岗岩	Al-Over	Lit-Top	黄玉绿磷云母碱长花岗岩
例 6	磷锂铝石锂云母钠长石花岗岩	Al-Over	Lit-Top	锂云母碱长花岗岩
例 7	钠闪石黑云母浅色碱长花岗岩	Na-Over	Aeg-Rie	钠闪石黑云母浅色碱长花岗岩
例 8	钠闪石浅色碱长花岗岩	Na-Over	Aeg-Rie	钠闪石浅色碱长花岗岩

① 前缀中参与岩石命名的次要矿物 (>1%) 按含量由低到高的顺序排列;② 闪长花岗岩是文献 [6] 中自带的分类系统中的一种岩石类型,此处我们仍按国际地科联的分类方案,称其为花岗闪长岩。

6 结语

花岗岩类自然矿物岩石化学换算是一个适用于花岗岩类标准矿物计算的方法,由全岩岩石化学数据换算出的标准矿物接近岩石的真实矿物组成。对于花岗岩类标准矿物的计算,花岗岩类自然矿物岩石化学换算法明显优于 CIPW 法。但一直以来,广大学者忽视了该方法的优点。随着岩石地球化学研究的不断深入,对花岗岩分类命名的准确性要求越来越高,自然矿物岩石化学换算花岗岩类标准矿物的计算方法,将会逐渐受到应有的重视。本文在简单介绍该方法的基础上,开发了相应的软件。该软件界面友好、使用简便、结果可靠,便于研究者使用。

参考文献:

- [1] 路远发,李文霞. CIPW 标准矿物计算方法与程序设计[J]. 华南地质, 2021, 37(3): 348–360.
- [2] Rittmann A. Stable mineral assemblages of igneous rocks: A method of calculation[M]. Berlin: Springer, 1973:1–262.
- [3] 王炎庭,戎嘉树. 花岗岩类岩石化学计算新方法的探讨[C]. 地质部书刊编辑室编辑. 国际交流地质学术论文集: 为二十六届国际地质大会撰写, (2) 矿物岩石地球化学. 北京: 地质出版社, 1980:116–121.
- [4] 蒙晓莲. 花岗岩类岩石化学计算新方法程序[J]. 华东地质学院学报, 1987, 10(4):88–94.
- [5] 朱为方. 花岗岩类自然矿物岩石化学换算法[J]. 地质与勘探, 1979, (8): 35–49.
- [6] 朱为方,唐春景. 花岗岩类自然矿物岩石化学换算法及其应用[M]. 贵阳: 贵州人民出版社, 1983:1–106.
- [7] 沈纪利. 评朱为方“花岗岩类自然矿物岩石化学换算方法”——兼论三氏及里氏计算法[J]. 地质与勘探, 1981, (10): 36–43.
- [8] 邱家骧,林景仟. 岩石化学[M]. 北京: 地质出版社, 1991: 1–276.
- [9] 邱家骧. 应用岩浆岩岩石学[M]. 北京: 地质出版社, 1991:1–418.
- [10] 祝新友,王京彬,王艳丽,程细音,何鹏,傅其斌,李顺庭. 南岭锡钨多金属矿区碱长花岗岩的厘定及其意义[J]. 中国地质, 2012, 39(2):359–381.
- [11] 何令仪,方清浩,冯君储. 台马紫苏辉石花岗斑岩体的地质背景和形成时代[J]. 桂林冶金地质学院学报, 1986, 6(3): 217–228.
- [12] 方清浩,冯君储,何令仪. 台马 S- 型超浅成紫苏辉石花岗斑岩的特征和成因[J]. 桂林冶金地质学院学报, 1984, 4(3): 9–21.
- [13] Speer J A. Petrology of cordierite and almandine-bearing granitoid plutons of the southern appalachian piedmont, U.S.A.[J]. Canadian Mineralogist, 1981, 19(1): 33–46.
- [14] Flood R H, Shaw S A. Cordierite-bearing Granite Suite From the New England Batholith[J]. Contributions to Mineralogy and Petrology, 52(3): 157–164.
- [15] 汪绍年. 广西大容山 – 十万大山岩带紫苏辉石堇青石花岗岩套矿物学研究[J]. 广西地质, 1995, 8(1), 1–13.
- [16] 刘宝良. CIPW 标准矿物算法应用时存在问题的探讨[J]. 地质与资源, 2001, 10(3): 180–184.
- [17] Streckeisen A. Classification and nomenclature of plutonic rocks recommendations of the IUGS subcommission on the systematics of Igneous Rocks[J]. Geologische Rundschau, 1974, 63(2): 773–786.
- [18] Streckeisen A. To each plutonic rock its proper name[J]. Earth-Science Reviews, 1976, 12(1): 1–33.
- [19] Streckeisen A. Classification and nomenclature of volcanic rocks, lamprophyres, carbonatites, and melilitic rocks: Recommendations and suggestions of the IUGS Subcommission on the Systematics of Igneous Rocks[J]. Geology, 1979, 77(7): 331–335.
- [20] 路远发. GeoKit: 一个用 VBA 构建的地球化学工具软件包[J]. 地球化学, 2004, 33(5): 459–464.