

www.yskw.ac.cn

里特曼标准矿物换算因数算法及评估

刘 德 林

(安徽省地质矿产局 322 地质队, 马鞍山 243034)

主题词 岩石化学计算(里特曼法)矿物换算因数 岩石密度

提 要 里特曼因数共有40个,实际上不敷使用,可运用里特曼稳定矿物组成原理来计算矿物换算因数,同理,还可计算出火成岩岩石密度的近似值。增补两个矿物换算因数:高岭石 1.02;硬石膏1.19。

1 问题的提出

应用里特曼法计算火成岩稳定矿物组合,对厘定岩石大类、岩石命名、以及火山岩、

次火山岩和蚀变岩的组分研究作用较大。由于微机日渐推广,采用 B₆-18 EXE 程序^①,输入岩石化学全分析数据,便能很快完成计算输出结果。判读计算结果发现有相当数量样品虽能通过程序,但是标准矿物出现了“负组分”的明显错误。产生原因是程序设计不完善,它仅有里特曼计算方法的第①、②、⑥步骤,缺少第③、④、⑤步骤的计算机语言。于是那些出现错误的样品必须经人工手算改正。众所周知,里特曼法最后计算步骤内,为了把矿物组合计算成体积百分比,须使用里特曼原著的因数表^[1](表内有 40 个因数)。将各标准矿物的原子数乘以各自的矿物换算因数,得出体积当量及总和,然后计算出各标准矿物的体积百分比。但具体计算上常出现一些表外矿物,由于无因数可查而使计算被迫中断。因此,阐明因数含义,推导出求解方法势在必行。进一步探索发现,可以避开里特曼的换算因数,而直接计算出体积百分比,在推导中还可获得火成岩岩石密度的计算方法。

2 标准矿物换算因数的含义、算法及其实例

里特曼书中的因数原无名称,现可命名为“标准(稳定)矿物换算因数”(以下简称因数),其实际含义为:岩石内某种标准矿物的体积百分比与组成该种标准矿物的各氧化物总重量百分比之间的比值。根据含义引导出以下算法步骤:

2.1 计算标准矿物的重量百分比 (wt%)*

先按里特曼法算出各标准矿物的原子数,根据标准矿物由若干饱和矿物组成,而饱和矿物又由若干氧化物组成及其组成的双重比例关系计算出各氧化物的原子数、分子数以及重量百分比的总和。

2.2 计算标准矿物的体积百分比 (V%)*

2.2.1 计算标准矿物的体积 (V_i) 数值上等于标准矿物重量百分比 (wt%_{*i*}) 除以其密度 (D_i)。密度一般查表获得并取其最小值,以公式表示:(设:岩石单位重量为 100(g),则 wt%_{*i*} 即为 w_{t_i})

$$V_i = \frac{w_{t_i}}{D_i} \quad (1)$$

2.2.2 计算标准矿物的体积百分比 (V%_{*i*}) 将岩石中每个标准矿物体积 (V_i) 算出,再求出体积的总和 (ΣV_i)、代入下列公式,即可求得:

$$V\%_i = \frac{V_i}{\Sigma V_i} \times 100\% \quad (2)$$

2.3 计算标准矿物换算因数 (η_i)

根据标准矿物换算因数的含义,其公式如下:

$$\eta_i = \frac{V\%_i}{w_{t_i}} \quad (3)$$

则可算出岩石中全部标准矿物的换算因数。

2.4 岩石密度的近似计算

① 福建省地质矿产局区调队主编,1989,专题调查研究第 7 号,地质科学程序集:184

* *i* 表示各标准矿物组分

将岩石化学全分析结果, 根据里特曼法算出所有稳定矿物原子数后, 再按上述步骤计算出岩石中全部组分的总体积 (ΣV_i), 事实上这个总和已相当于岩石的单位体积数 (V) 即:

$$V \approx \Sigma V_i \quad (4)$$

因为在岩石计算中, H_2O 没有参与组分的计算, 有人做过研究^[2]: 岩浆中每1%的水能使岩浆密度降低 0.08 g/cm^3 , 而岩石中水的影响尚不清楚, 所以两个体积数之间只能是近似相等。而岩石的单位体积数 (V) 等于 100 倍岩石密度 (D) 的倒数, 即

$$V = \frac{100}{D} \quad (5)$$

将 (4) 式代入 (5) 式, 得:

$$D_c = \frac{100}{V} \approx \frac{100}{\Sigma V_i} \quad (6)$$

(式中, D_c 为计算的岩石密度) 岩石密度的近似值则可算出。

2.5 计算实例

安徽芜湖上马湖的硅化石英斑岩的计算, 详见表 1。以高岭石组分为例, 设硅化石英斑岩重量为 100(克), 计算其换算因数见表 3 及表 1。将高岭石耗用各氧化物 (其中 SiO_2 11.54% Al_2O_3 9.78%) 的总量 21.32%、高岭石密度 $2.6(\text{g/cm}^3)$ 代入 (1) 式, 得体积数 (V_i): $V_i = \frac{wt_i}{D_i} = \frac{21.32}{2.6} = 8.20$, 表 3 已算得各组分总体积 $\Sigma V_i = 37.58$, 将其代入

(2) 式得体积百分比 ($V\%_i$): $V\%_i = \frac{8.20}{37.58} \times 100\% = 21.82\%$, 再代入 (3) 式, 求得高岭石换算因数 (η_i):

$$\eta_i = \frac{V\%_i}{wt\%_i} = \frac{21.82}{21.32} = 1.02, \text{ 最后用 (6) 式算出岩石密度 } (D_c):$$

$$D_c = \frac{100}{\Sigma V_i} = \frac{100}{37.58} = 2.66$$

3 标准矿物换算因数计算法的评估

计算方法可补全矿物换算因数, 使里特曼法计算顺利进行, 参见实例, 由表 3 中算出的矿物换算因数高岭石(1.02); 硬石膏(1.19)代入表 2 的 () 内, 才能完成计算。

运用岩石化学分析结果, 按里特曼法原理对岩石稳定矿物组合进行分解和反演算, 计算出岩石密度的近似值, 其精度与合理性比公式法^[3]略高, 但仍须在实践中进一步验证。

里特曼在叙述岩石化学计算的基本原则说:^[1]“本书提出的计算方法的基本特点是以经验为根据, 并使用实际矿物的平均成分, 当然, 组成矿物平均成分并非在一切岩石中都恒定不变, 而是随岩石的不同类型而异, ……对造岩矿物以及母岩的分析数据加以统计学的评价”, 而对其技术处理及统一方法缺少交代, 因此, 里特曼因数难免带有一定的经验性和地域性(如意大利火山岩区)。从理论上说, 矿物换算因数并非常量而应该为变量, 只是为便于计算权宜地处理为常量, 事实上将算出的矿物换算因数和里特曼因数作比较(参见表

矿物的分解及换算因数的计算

of normative minerals and the computation of conversion factors

高岭石				石英		平均长石 (透长石82% 钙长石18%)					磁铁矿		钛铁矿		磷灰石		石膏	
sil	$\Delta Q'$	原子数	wt%	$\Delta Q''$	wt%	Or	Ab	An	原子数	wt%	Mto	wt%	Il	wt%	Ap	wt%	Ah	wt%
96	96	192	11.54	1010	60.68	96	6	14	116	6.98								
													3	0.20				
192		192	9.78			32	2	14	48	2.45								
											1	0.08	1	0.08				
													2	0.11				
								7	7	0.37					0.40	0.02	2	0.10
							2		2	0.60								
						32			32	1.50								
															0.25	0.02		
																	2	0.17
288	96	384	21.32	1010	60.68	160	10	35	205	11.90	1	0.08	6	0.39	0.65	0.04	4	0.27

注: Mto——进入磁铁矿的铁原子数

Or——钾长石 (透长石)

Ab——钠长石

An——钙长石

sil——硅灰石

"-160"——消耗原子数总量

ΔQ 、 $\Delta Q'$ 、 $\Delta Q''$ ——剩余的氧化硅的原子数

其它代号已在表格内注明

表 2 里特曼岩石化学计算结果
Table 2 Rittmann's petrochemical calculations

标准矿物	原子数	因数	体积当量	体积百分比
紫苏辉石	20	1.00	20	0.97
高岭石	384	(1.02)	391.68	19.01
石英	1010	1.36	1376.60	66.82
透长石	168	1.28	215.04	10.44
钙长石	37	1.21	44.77	2.17
磷灰石	0.65	1.14	0.73	0.04
石膏	4	(1.19)	4.76	0.23
磁铁矿	1	0.91	0.91	0.04
钛铁矿	6	0.93	5.58	0.27
合计*	1630.65		2060.07	

() 表示增补的换算因数; * 未包括水原子数198

表 3 标准矿物换算因数的计算
Table 3 Calculation of conversion factors of normative minerals

标准矿物	原子数	wt% _i	D _i	V _i	V% _i	因数 i
紫苏辉石	20	1.26	3.30	0.36	0.96	0.76
高岭石	384	21.32	2.60	8.20	21.82	1.02
石英	1010	60.68	2.51	24.18	64.34	1.06
透长石	168	9.76	2.57	3.80	10.11	1.03
钙长石	37	2.14	2.72	0.79	2.10	0.98
磷灰石	0.65	0.04	3.18	0.01	0.03	0.75
石膏	4	0.27	2.30	0.12	0.32	1.19
磁铁矿	1	0.08	4.90	0.02	0.05	0.67
钛铁矿	6	0.38	4.00	0.10	0.26	0.68
合计*	1630.65			ΣV _i = 37.58	岩石计算密度 $D_c = \frac{100}{37.58} = 2.66$	

注: i—表示各标准矿物; D—密度; V—体积; wt%—百分重量; D_c—岩石计算密度

* 未包括水原子数198

2、表3所列因数)差别较大,因此,在岩石小区内、应该对各类代表性岩石进行稳定矿物组分的计算,核对里特曼因数的变异。同时建立岩区内稳定矿物换算因数表,以便更有效地研究本地区岩石组分的特征,

通过安徽芜湖上马湖地区岩石的研究、将计算的矿物组合与镜下观察对比、效果比较好。首先否定了该地区原已厘定、归属为蝌蚪山组的一套酸性火山岩系的存在;确定该区出露岩性为强蚀变的一套硅化石英斑岩、次生石英岩化的岩浆岩。进一步工作证实本区岩浆活动活跃,岩浆系列演化迅速,表现在由中基性岩浆侵入和占位的过程中,它随之迅速演变为酸性岩,热液蚀变和热液活动发育,但规模有限。对相继发现的岩体接触带以及接触交代型铁铜矿体、金矿(化)体,提供了充分的岩石学依据。

参 考 文 献

- 1 A·里特曼. 火成岩的稳定矿物组合的计算方法. 金秉慧译. 北京: 地质出版社, 1979.
- 2 侯增谦. 岩浆密度及其重要意义. 岩石矿物学杂志, 1990, 9(4): 311
- 3 叶大年, 从柏林主编. 岩矿实验室工作方法. 北京: 地质出版社, 1981. 62

**Calculation and Evaluation of Conversion Factors
of Rittmann Normative Minerals**

Liu Delin

(No. 322 Geological Party, Anhui Bureau of Geology and Mineral Resources)

Key words: petrochemical calculation (Rittmann method); conversion factor of mineral; density of rock

Abstract

There have been 40 Rittmann factors, which can not fully satisfy the needs in practical use. The Rittmann principle of stable mineral composition might be employed to calculate mineral conversion factors and also to evaluate approximate values of petrological rocks. As a result, two mineral conversion factors have been added to the list: kaolinite 1.02; anhydrite 1.19.