

# 利用岩石化学成分计算花岗岩类实际矿物的新方法

王凤岗, 戎嘉树

(核工业北京地质研究院, 中核集团 铀资源勘查与评价技术重点实验室, 北京 100029)

**摘要:** 介绍一种在三氏算法(戎嘉树等人于20世纪70年代初提出的一种用岩石化学成分计算花岗岩类实际矿物含量的方法)的基础上经长期实践并不断创新而发展起来的一种新的实际矿物含量的计算方法。该方法针对准铝质花岗岩类、铝过饱和、铝强过饱和花岗岩类分别设计了相应的计算方法,同时也兼顾了碱交代花岗岩及碱长花岗岩,不仅适用于新鲜岩石,也适用于部分蚀变的岩石。该方法在处理岩石化学分析数据的归纳和组合上尽量与实际存在的矿物相结合,力求计算结果与岩石中实际存在的矿物相符。计算过程中提出了长石的修正系数 $\chi$ ,用其修正岩石中钾长石和斜长石的含量,从而确保计算结果与实际相符。计算得到主要造岩矿物(Q、Or、Pl、Bi、Ms、Hb)的含量和反映岩石化学特征的两类参数(Ot、An<sub>pl</sub>、K-Na、a、b、Mg)及相关图解。该方法不仅可以计算出岩石中主要造岩矿物的含量,同时还可以反映岩石化学特征、演化过程及其成矿专属性等。

**关键词:** 岩石化学成分;算法;实际矿物;标准矿物;花岗岩类

中图分类号: P588.12<sup>+</sup>1; P574.2

文献标识码: A

文章编号: 1000-6524(2020)01-0129-12

## A new method for calculating actual minerals of granitoids by using chemical components of rocks

WANG Feng-gang and RONG Jia-shu

(Beijing Research Institute of Uranium Geology, CNNC Key laboratory of Uranium Resource Exploration and Evaluation Technology, Beijing 100029, China)

**Abstract:** The petrochemical method proposed in this paper is a new method developed through long-term practice and continuous innovation on the basis of Sansi algorithm, a petrochemical method to calculate the actual mineral content of granitoids from the chemical composition of rocks, which was put forward by Rong Jiashu in the 1970s. It designs corresponding calculating method for quasi-aluminous granitoids, aluminum supersaturated granitoids and aluminum strongly supersaturated granitoids, and simultaneously considers alkali metasomatic granites (or alkali feldspar granites). It is applicable not only to fresh rocks but also to partly altered rocks. This method is combined with the actual minerals as much as possible in dealing with the induction and assemblage of petrochemical analysis data and aims to make the calculation result consistent with the actual minerals in the rocks. The calculation process puts forward the correction coefficient  $\chi$  of feldspar, which may correct the content of potassium feldspar and plagioclase in the rocks and ensure that the calculated results are consistent with the actual situation. Two kinds of parameters and related diagrams are obtained through the calculating results, one representing the percent content of the main forming minerals, such as Q, Or, Pl, Bi, Ms and Hb, the other reflecting the chemical characteristics of rocks, such as Ot, An<sub>pl</sub>, K-Na, a, b and Mg. This method can not only calculate the content of the

收稿日期: 2017-05-15; 接受日期: 2019-11-20; 编辑: 郝艳丽

基金项目: 中国核工业地质局铀矿地质科研项目(201807-03, 201807)

作者简介: 王凤岗(1977-), 男, 高级工程师, 主要从事岩石矿物学及铀矿地质研究, E-mail: wfg9818@163.com。

main rock-forming minerals but also reflect the petrochemical characteristics, evolution process and metallogenic specificity.

**Key words:** petrochemical components; calculation method; actual minerals; normative minerals; granitoids

**Fund support:** China Nuclear Geology (201807-3, 201807)

在岩石学研究过程中,往往涉及到岩石的实际矿物(mode mineral)和标准矿物(norm mineral),前者是薄片或手标本上实际能看到的矿物,而后者是根据岩石化学成分计算出来的矿物(桑隆康等,2012)。目前的标准矿物计算方法有传统的 CIPW 法(Cross *et al.*, 1902)、尼格里法(Niggli, 1936)、查氏算法(Заварицкий, 1960)等。

以往流行的标准矿物计算方法得到的结果与实际矿物组成相差甚大,如 CIPW 法在计算岩石的矿物成分时,仅仅考虑到各种组分间的化学组合关系。尼格里法与 CIPW 法相似,但它采用的标准矿物不受限制,可以有深带、中带和浅带之分,且计算结果以标准矿物分子百分比表示而不是质量百分比表示,与 CIPW 法相比该算法虽然有一定的优势,但其缺点与 CIPW 法也相似。查氏算法在我国应用颇广,该算法尽管能反映出酸性、中性、基性岩石之间的差别,但在相似岩石的对比研究上却比较粗略,且把铝过饱和、铝强过饱和岩石中剩余的铝加入到暗色矿物中显然是不合理的,将硅和钛加在一起并把三价铁都计算到硅酸盐中去的做法主观人为因素太多,不符合客观实际。鉴于上述原因,一些学者(白文吉等,1979;叶瑛,1987)对原有的算法提出了改进,甚至有些学者(朱为方,1979;王文广,2009)提出了一些新的算法。

20 世纪 70 年代,戎嘉树等在工作中提出了一种适用于花岗岩类的实际矿物计算方法,因其所在单位为北京三所(现核工业北京地质研究院),故称为三氏算法。由于受核工业系统保密需要等原因,三氏算法仅在核工业地矿系统内部交流使用,也未公开发表,仅在个别文献中有所提及(沈纪利,1981)。与其他岩石计算方法相比,三氏算法具有以下特征:① 该算法是实际矿物的计算方法,在处理岩石化学分析数据的归纳和组合上尽量与实际存在的矿物相结合。② 计算过程简单明了,操作性强。③ 通过三氏参数和图解,能体现出不同花岗岩的差异性,从而直观、有效地反映出岩体的演化过程和演化规律。④ 可通过研究岩浆的演化和岩石化学与某些成矿元素的内在联系,建立不同岩石的成矿专属性,为指

寻找矿服务。

近年来,由于新技术、新方法的广泛应用,岩石化学计算方法逐渐被忽略,但鉴于岩石化学计算是岩石学重要的分支,特别是在花岗岩类准确定名等方面仍具有重要的作用,有必要进一步继承并不断改进。本方法基于三氏算法发展而来,主要在以下几个方面进行了改进:提倡系统、综合的研究理念;优化了计算方案,使计算过程更加清晰、简捷,即使无相关知识背景人员也能完成计算;添加了计算公式,可根据公式编写计算程序,提高计算效率;拓展了应用范围,如部分蚀变花岗岩及碱交代花岗岩(碱长花岗岩)等;对原三氏算法中一些不合理的进行了调整,如铝过饱和岩石剩余的铝的配分问题及矿物符号不规范问题等;对配比过程中常见的问题进行了探讨,并提出了相应的建议。

## 1 计算原理

因各种造岩矿物(包括副矿物)均是按原子数以一定的比例配置,故首先要将化学分析的质量分数换算成原子数。根据造岩矿物中正电原子数的比例关系,配分各造岩矿物的原子数,进而求出各造岩矿物在岩石中的含量百分数。

一些可出现在多种造岩矿物中的原子,采用成分固定的矿物先配,成分多变的矿物后配的原则,如  $\text{Fe}^{3+}$  在磁铁矿中组成比例是固定的,而在黑云母中不固定,故  $\text{Fe}^{3+}$  应先配磁铁矿,剩余的再配黑云母。化学分析结果中的 P,大多来自磷灰石。当岩石中 CaO 含量很低时,P 可能来自独居石或磷钇矿。岩石化学分析结果中的  $\text{Fe}^{3+}$  主要来自磁铁矿和黑云母。化学分析结果中的 Ti 主要来自钛铁矿、榍石、金红石,鉴于花岗岩中  $\text{TiO}_2$  含量甚微,如含钛矿物无法判别,可按钛铁矿处理。

化学分析结果中的 K,主要来自钾长石、黑云母,因上述两种矿物中 K:Al=1:1,故可先按 K:Al=1:1 预算含钾矿物( $\Sigma\text{K}$ )所需要的铝原子数。此时,通常会以下列几种情况:①  $\text{K} + \text{Na} + 2(\text{Ca} - 1.5\text{P}) > \text{Al} > \text{K} + \text{Na}$ ; ②  $\text{Al} > \text{K} + \text{Na} + 2(\text{Ca} -$

1.5 P), 且  $Al - K - Na - 2(Ca - 1.5 P) < 1/3[(Mg + Mn + Fe^{2+}) - 0.5 Fe^{3+}]$ ; ③  $Al > K + Na + 2(Ca - 1.5 P)$ , 且  $Al - K - Na - 2(Ca - 1.5 P) > 1/3[(Mg + Mn + Fe^{2+}) - 0.5 Fe^{3+}]$ 。根据上述关系, 可将花岗岩划分为3个系列, 其中①为准铝质系列(或钙饱和系列), 配完磷灰石及钙长石后铝就全部用完了, 还有Ca剩余, 剩余的Ca进入到角闪石等矿物中。②属铝过饱和系列, 通过磷灰石及钙长石的计算, 则Ca原子被用完, 且配完钾质矿物(K: Al = 1:1)、钠长石、钙长石后还有Al剩余。③属铝强过饱和系列, 在配完钾长石、黑云母后还有铝的剩余, 则剩余的铝进入到白云母中、堇青石、石榴石等含铝矿物中。上述序列是计算的基础, 不同的序列矿物组合不同, 计算过程也不相同。

最终, 剩余的Si形成石英。

当岩石中明显出现萤石时, 则应在岩石化学分析的项目中分析氟的含量, 而后根据F的原子数配上相应的Ca原子数, 避免把铝过饱和的岩石当成正常序列的岩石来计算, 导致计算出来的矿物组合结果与实际情况不一致。另外需特别注意的是, 有些磷灰石、黑云母中的F含量也很高, 如氟磷灰石, 上述矿物对F的配分也有影响, 因此如岩石化学分析结果中有氟含量, 在配比过程中最好先采用电子探针等对可能含氟的矿物进行成分测定。

## 2 计算过程

### 2.1 确定岩石系列及矿物相

#### 2.1.1 确定岩石系列

由于不同的岩石系列所含的矿物不同, 以至于计算过程也有所差别, 因此, 在计算前首先要根据岩石化学分析结果确定岩石所属系列, 然后再进行后续的计算。上文已提到, 根据岩石化学特征, 可划分出3个主要的计算序列, 即准铝质系列(或钙饱和系列)、铝过饱和系列及铝强过饱和系列, 此外, 考虑到花岗岩类中的碱长花岗岩或碱交代形成的花岗岩有其特殊性, 故将其单独划分为一个系列。

#### 2.1.2 确定矿物相

为了避免盲目计算, 在计算前要先了解所计算的岩石由哪些矿物组成, 只计算出现的矿物, 从而使计算结果最大程度与实际相吻合。此项工作通常要在显微镜下进行, 将观察到的矿物记录下来。当通过显微镜无法确定其矿物组成时, 也可根据全岩X

衍射等方法确定其矿物相, 然后再计算。

### 2.2 准铝质系列(或钙饱和系列)花岗岩类计算过程

即  $K + Na + 2(Ca - 1.5 P) > Al > K + Na$ , 常见有以下两种情况:

#### 2.2.1 方案一(岩石新鲜, 没有后期方解石脉的干扰)

(1) 做出计算表格

根据显微镜观察到的实际矿物并根据所属系列做出相应的表格。

(2) 将质量分数换算成原子数

将各氧化物质量分数换算成原子数, 即化学分析质量数除以相应氧化物的分子量, 计算结果乘1 000后取整数(具体见计算实例)。

(3) 计算磷灰石( $A_p$ )正电原子数

把全部P原子数以Ca:P = 3:2配上Ca原子, 计算出磷灰石 $[Ca_3(PO_4)_2]$ 的正电原子数, 计算公式为:  $A_p = P + 1.5 P = 2.5 P$ 。

(4) 计算磁铁矿(Mt)正电原子数

全部的 $Fe^{3+}$ 以 $Fe^{3+}: Fe^{2+} = 2:1$ 计算出磁铁矿( $FeO \cdot Fe_2O_3$ )的正电原子数, 计算公式为:  $Mt = 1.5 Fe^{3+}$ 。

(5) 计算钛铁矿(II)正电原子数

全部的Ti以Ti:  $Fe^{2+} = 1:1$ 计算出钛铁矿( $TiO_2 \cdot FeO$ )正电原子数, 计算公式为:  $II = 2 Ti$ 。

(6) 预算含钾矿物( $\Sigma K$ )所需的铝原子数

以K: Al = 1:1配置所需的Al原子数。此步骤十分关键, 否则会影响后续步骤顺利进行。

(7) 计算端员钠长石(Ab)正电原子数

把全部的Na原子数按Na: Al: Si = 1:1:3的比例配上Al和Si, 计算出钠长石( $NaAlSi_3O_8$ )的正电原子数, 计算公式为:  $Ab = 5 Na$ 。

(8) 计算钙长石(An)正电原子数

把Al原子数减去总预留的Al(即 $\Sigma K$ )原子数和配比钠长石的Al原子数, 再按Ca: Al: Si = 1:2:2的比例配上Al和Si, 计算出钙长石( $CaAl_2Si_2O_8$ )的正电原子数, 计算公式为:  $An = 0.5 \times 5(Al - K - Na)$ 。

(9) 求出剩余的钙原子( $Ca'$ )

即钙原子总数减去参加钙长石和磷灰石后的钙原子数, 计算公式为:  $Ca' = Ca - 1.5 P - 0.5(Al - K - Na)$ 。

(10) 计算角闪石(Hb)正电原子数

根据剩余的钙原子数(Ca'),按Ca:(Fe<sup>2+</sup>, Mg):Si=1:2.5:4的比例配上Fe<sup>2+</sup>和Si,计算出角闪石[Ca<sub>2</sub>(Mg,Fe)<sub>5</sub>Si<sub>8</sub>O<sub>22</sub>(OH)<sub>2</sub>]的正电原子数,计算公式为:  $Hb = 7.5 [Ca - 1.5 P - 0.5 (Al - K - Na)]$ 。

#### (11) 计算黑云母(Bi)正电原子数

从剩余的Fe<sup>2+</sup>和Mn、Mg原子数总和,按K:(Fe<sup>2+</sup>, Mg, Mn):Al:Si=1:3:1:3的比例配上K、Al和Si,计算黑云母[K(Mg,Fe<sup>2+</sup>, Mn)<sub>3</sub>AlSi<sub>3</sub>O<sub>10</sub>(OH)<sub>2</sub>]原子数,计算公式为:  $Bi = 8/3 \{ [(Mg + Mn + Fe^{2+}) - 0.5 Fe^{3+} - Ti - 2.5 [Ca - 1.5 P - 0.5 (Al - K - Na)]] \}$ ,或  $Bi = 8/3 [(Mg + Mn + Fe^{2+}) - 0.5 Fe^{3+} - Ti - 2.5 Ca']$ 。

#### (12) 计算钾长石(Kf)的正电原子数

把钾的总原子数减去参加云母类矿物的钾原子,再把剩余的全部钾原子按K:Al:Si=1:1:3的比例配上Al和Si,计算出钾长石(KAlSi<sub>3</sub>O<sub>8</sub>)的正电原子数,计算公式为:  $Kf = 5 \{ K - 1/3 \{ (Mg + Mn + Fe^{2+}) - 0.5 Fe^{3+} - Ti - 2.5 [Ca - 1.5 P - 0.5 (Al - K - Na)]] \}$ 。

#### (13) 计算石英(Q)正电原子数

把硅的原子总数减去参加矿物的原子数,剩余的硅就是石英的正电原子数,计算公式为:  $Q = Si - 3 Na - 3 K - (Al - Na - K) - 4 Hb / 7.5$ 。

(14) 按  $Ap + Mt + Il + Ab + An + Hb + Bi + Kf + Q = 100$ ,算出各矿物正电原子含量百分数。

如岩石中出现榍石(Sph)而不是钛铁矿时,则可将计算过程中(5)按照Ca:Ti:Si=1:1:1的比例计算出榍石[CaTiSiO<sub>5</sub>]的正电原子数,计算公式为:  $Sph = 3 Ti$ 。后面的计算过程不变,但由于此步计算Ti配比了Ca和Si而未使用Fe<sup>2+</sup>,随后的计算要进行相应的变化,计算公式也要做出相应的调整。

2.2.2 方案二(岩石新鲜,有后期方解石脉的干扰,CO<sub>2</sub>数据可靠)

(1)~(6)同方案一。

#### (7) 计算方解石(Cal)正电原子数

把全部的C原子数按C:Ca=1:1的比例配上C和Ca,计算出方解石(CaCO<sub>3</sub>)的正电原子数,计算公式为:  $Cal = 2 C$ 。

#### (8) 计算钠长石(Ab)正电原子数

把全部的Na原子数按Na:Al:Si=1:1:3的比例配上Al和Si,计算出钠长石的正电原子数,计算公式为:  $Ab = 5 Na$ 。

#### (9) 计算钙长石(An)正电原子数

把Ca原子数减去组成磷灰石和方解石的Ca原子数,再按Ca:Al:Si=1:2:2的比例配上Al和Si,计算出钙长石的正电原子数,计算公式为:  $An = 0.5 \times 5 (Al - K - Na)$ 。

#### (10) 求出剩余的钙原子(Ca')

即钙原子总数减去参加方解石、钙长石和磷灰石后的钙原子数,计算公式为:  $Ca' = Ca - 1.5 P - C - An / 5$ 。

#### (11) 计算角闪石(Hb)正电原子数

根据剩余的钙原子数(Ca'),按Ca:(Fe<sup>2+</sup>, Mg):Si=1:2.5:4的比例配上Fe<sup>2+</sup>和Si,计算出角闪石的正电原子数,计算公式为:  $Hb = 7.5 [Ca - 1.5 P - C - 0.5 (Al - K - Na)]$ ,或  $Hb = 7.5 Ca'$ 。

#### (12) 计算黑云母(Bi)正电原子数

从剩余的Fe<sup>2+</sup>和Mn、Mg原子数总和,按K:(Fe<sup>2+</sup>, Mg, Mn):Al:Si=1:3:1:3的比例配上K、Al和Si,计算黑云母原子数,计算公式为:  $Bi = 8/3 \{ [(Mg + Mn + Fe^{2+}) - 0.5 Fe^{3+} - Ti - 2.5 (Ca - 1.5 P - C - An / 5)] \}$ ,或  $Bi = 8/3 [(Mg + Mn + Fe^{2+}) - 0.5 Fe^{3+} - Ti - 2.5 Ca']$ 。

#### (13) 计算钾长石(Kf)的正电原子数

把钾的总原子数减去参加云母类矿物的钾原子,再把剩余的全部钾原子按K:Al:Si=1:1:3的比例配上Al和Si,计算出钾长石的正电原子数,计算公式为:  $Kf = 5 \{ K - 1/3 [(Mg + Mn + Fe^{2+}) - 0.5 Fe^{3+} - Ti - 2.5 (Ca - 1.5 P - C - An / 5)] \}$ 。

#### (14) 计算石英(Q)正电原子数

把硅的原子总数减去参加矿物的原子数,剩余的硅就是石英的原子数,计算公式为:  $Q = Si - 3 Na - 3 K - (Al - Na - K) - 4 Hb / 7.5$ 。

(15) 按  $Ap + Mt + Il + Cal + Ab + An + Hb + Bi + Kf + Q = 100$ ,算出各矿物正电原子含量百分数。

### 2.3 铝过饱和和花岗岩类计算过程

即  $Al > K + Na + 2(Ca - 1.5 P)$ ,  $Al - K - Na - 2(Ca - 1.5 P) < 1/3 [(Mg + Mn + Fe^{2+}) - 0.5 Fe^{3+}]$ 。

(1)~(7)计算过程及计算公式与正常序列方案一相同。

#### (8) 计算钙长石(An)正电原子数

把Ca原子数减去磷灰石中的Ca原子数,剩余的Ca再按Ca:Al:Si=1:2:2的比例配上Al和Si,计算出钙长石[CaAl<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>8</sub>]的正电原子数,计算公式为:  $An = 5(Ca - 1.5 P)$ 。

(9) 计算剩余的铝( $Al'$ )正电原子数

$$Al' = Al - K - Na - 2(Ca - 1.5P).$$

(10) 计算黑云母(Bi)正电原子数

从剩余的  $Fe^{2+}$  和 Mn、Mg 原子数总和中, 按 K:

( $Fe^{2+}$ , Mg, Mn): Al: Si = 1: 3: (1 ~ 2): 3 的比例配上 K、Al 和 Si, 计算黑云母原子数, 计算公式为:  $Bi = 8/3[(Mg + Mn + Fe^{2+}) - 0.5 Fe^{3+} - Ti] + [Al - K - Na - 2(Ca - 1.5P)]$ , 或  $Bi = 8/3[(Mg + Mn + Fe^{2+}) - 0.5 Fe^{3+} - Ti] + Al'$ 。

(11) 计算钾长石(Kf)的原子数

把钾的总原子数减去参加云母类矿物的钾原子, 再把剩余的全部钾原子按 K: Al: Si = 1: 1: 3 的比例配上 Al 和 Si, 计算公式为:  $Kf = 5 \{ K - 1/3[(Mg + Mn + Fe^{2+}) - 0.5 Fe^{3+} - Ti] \}$ 。

(12) 计算石英(Q)正电原子数

把硅的原子总数减去参加矿物的原子数, 剩余的硅就是石英的原子数, 计算公式为:  $Q = Si - 3Na - 3K - 2(Ca - 1.5P)$ 。

(14) 按  $Ap + Mt + Il + Ab + An + Bi + Kf + Q = 100$ , 算出各矿物正电原子含量百分数。

#### 2.4 铝强过饱和和花岗岩类换算过程

即  $Al > K + Na + 2(Ca - 1.5P)$ ,  $Al - K - Na - 2(Ca - 1.5P) > 1/3[(Mg + Mn + Fe^{2+}) - 0.5 Fe^{3+}]$ 。

(1) ~ (8) 计算过程及计算公式与铝过饱和和序列相同。

(9) 计算黑云母(Bi)正电原子数

从剩余的  $Fe^{2+}$  和 Mn、Mg 原子数总和, 按 K:

( $Fe^{2+}$ , Mg, Mn): Al: Si = 1: 3: 2: 3 的比例配上 K、Al 和 Si, 计算黑云母原子数, 计算公式为:  $Bi = 3[(Mg + Mn + Fe^{2+}) - 0.5 Fe^{3+} - Ti]$ 。

(10) 计算剩余的铝( $Al'$ )正电原子数

在计算完黑云母后还有铝的剩余, 剩余铝计算公式为:  $Al' = Al - K - Na - 2(Ca - 1.5P) - 1/3[(Fe^{2+} + Mg + Mn) - 0.5 Fe^{3+} - Ti]$ 。

(11) 计算白云母(Ms)和钾长石(Kf)的正电原子数

对于铝过饱和岩石, 在配完黑云母后, 除对应  $\sum K$  按 1: 1 预留的 Al 外还会有 Al 的剩余, 即  $Al'$ , 此时没有参加配比的 Al 和 K 不是 1: 1 关系, 故不能按铝过饱和或正常序列配比钾长石, 因白云母 K: Al = 1: 3, 而钾长石 K: Al = 1: 1, 可根据上述关系建立二元方程计算 K 和 Al 在钾长石和白云母中的配比关系。

(12) 计算石英(Q)正电原子数

把硅的原子总数减去参加矿物的原子数, 剩余的硅就是石英的原子数。

(13) 按  $Ap + Mt + Il + Ab + An + Hb + Bi + Kf + Q = 100$ , 算出各矿物的正电原子含量百分数。

#### 2.5 碱交代花岗岩(碱长花岗岩)类计算过程

本文以甘肃茂岭钠交代花岗岩为例。碱交代(钠交代)后形成碱交代花岗岩(钠交代花岗岩), 原来的斜长石转为钠长石, 原来的钾长石或部分或全部转变为钠长石, 黑云母及角闪石等彻底变为绿泥石, 出现的矿物主要有磷灰石( $Ap$ )、锐钛矿(Leuc)、钠长石( $Ab$ )、钙长石( $An$ )、方解石( $Cal$ )、绿泥石( $Chl_1$ )、赤铁矿( $Hm$ )、绢云母( $Ser$ )、钾长石( $Kf$ )、石英( $Q$ )。

(1) ~ (3) 同正常岩石序列方案。

(4) 计算锐钛矿(Leuc)正电原子数

以全部 Ti 配成白钛矿 [ $TiO_2$ ], 计算公式为  $Leuc = Ti$ 。

(5) 计算端员钠长石( $Ab$ )正电原子数

把全部的 Na 原子数按 Na: Al: Si = 1: 1: 3 的比例配上 Al 和 Si, 计算出端员钠长石的正电原子数, 计算公式为:  $Ab = 5Na$ 。

(6) 计算端员钙长石( $An$ )正电原子数

经测量, 端员钠长石的平均  $An$  值为 1, 故  $An/(An + Ab) = 1/100$ , 于是  $An = Ab/99$ , 然后按 Ca: Al: Si = 1: 2: 2, 算出组成端员钙长石的 Ca、Al 和 Si 阳离子数。组成  $An$  的 Ca 离子数为  $(1/5) \times (Ab/99)$ , Al 离子数为  $(2/5) \times (Ab/99)$ , Si 离子数为  $(2/5) \times (Ab/99)$ , 故端员钙长石的计算公式为:  $An = (1/5) \times (Ab/99) + (2/5) \times (Ab/99) + (2/5) \times (Ab/99) = Ab/99 = 5Na/99$ 。若  $Ca - 1.5P < (1/5) \times (Ab/99)$ , 则  $An = Ca - 1.5P + 2(Ca - 1.5P) + 2(Ca - 1.5P) = 5(Ca - 1.5P)$ , 此时, Ca 已全部用完, 就不用计算方解石了。

(7) 计算钾长石(Kf)正电原子数

将全部 K 按 K: Al: Si = 1: 1: 3 的比例配上相应的 Al 和 Si, 构成钾长石, 计算公式为:  $Kf = 5K$ 。

(8) 计算方解石( $Cal$ )正电原子数

方解石中的 Ca 与 C 之比应为 1: 1, 但  $CO_2$  的测定准确性不如 CaO 高, 故考虑如下计算, 剩余的钙全部进入方解石, 但  $CO_2$  中的 C 进入方解石则视以下情况而定:

若  $C > Ca'$  或无数据时, 取与剩余 Ca 等量的 C 组

成方解石,计算公式为:  $Cal = 2[Ca - 1.5P - Na/99]$ ;

若  $C \leq Ca'$  时,取所有的 C 组成方解石,计算公式为:  $Cal = (Ca - 1.5P - Na/99) + C$

#### (9) 计算绿泥石(Chl)正电原子数

本计算中的绿泥石成分是根据 8 个电子探针分析结果得出的平均值,并以此为依据进行配比,计算绿泥石存在以下 4 种情况:

① 以全部的 Mg、Mn 和  $Fe^{2+}$  阳离子数的和作为 1,配上 0.24 倍数的  $Fe^{3+}$ 、0.54 倍数的 Al、0.85 倍数的 Si,构成绿泥石(Chl),计算公式为:  $Chl = (Mg + Mn + Fe^{2+}) + 0.24(Mg + Mn + Fe^{2+}) + 0.54(Mg + Mn + Fe^{2+}) + 0.85(Mg + Mn + Fe^{2+})$ ;

② 如  $Fe^{3+}$  阳离子数不够,即  $Fe^{3+} < 0.24(Mg + Mn + Fe^{2+})$ ,则以  $Fe^{3+}$  代替  $0.24(Mg + Mn + Fe^{2+})$ ,即  $Chl = (Mg + Mn + Fe^{2+}) + Fe^{3+} + 0.54(Mg + Mn + Fe^{2+}) + 0.85(Mg + Mn + Fe^{2+})$ ;

③ 如这时余下的铝阳离子数不够,即  $Al - Na - 2Na/99 - K < 0.54(Mg + Mn + Fe^{2+})$ ,则以  $Al - Na - 2Na/99 - K$  代替  $0.54(Mg + Mn + Fe^{2+})$ ,即  $Chl = (Mg + Mn + Fe^{2+}) + 0.24(Mg + Mn + Fe^{2+}) + Al - Na - 2Na/99 - K + 0.85(Mg + Mn + Fe^{2+})$ ;

④ 如这时余下的硅离子数不够,即  $Si - 3Na - 2Na/99 - 3K < 0.85(Mg + Mn + Fe^{2+})$ ,则以  $Si - 3Na - 2Na/99 - 3K$  代替  $0.85(Mg + Mn + Fe^{2+})$ ,即  $Chl = (Mg + Mn + Fe^{2+}) + 0.24(Mg + Mn + Fe^{2+}) + 0.54(Mg + Mn + Fe^{2+}) + Si - 3Na - 2Na/99 - 3K$ 。

#### (10) 计算赤铁矿(Hm)正电原子数

全部的  $Fe^{3+}$  减去用于配置绿泥石用掉的  $Fe^{3+}$ ,剩余的  $Fe^{3+}$  组成赤铁矿,计算公式为:  $Hm = Fe^{3+} - 0.24(Mg + Mn + Fe^{2+})$ 。如  $Fe^{3+} < 0.24(Mg + Mn + Fe^{2+})$ ,则不计算 Hm。

#### (11) 计算石英(Q)正电原子数

当有多余的 Si 剩余,即  $Si - 3Na - 2Na/99 - 4.5K > 0.85(Mg + Mn + Fe^{2+})$  时,则计算石英,计算公式为:  $Q = Si - 3Na - 2Na/99 - 3K - 0.85(Mg + Mn + Fe^{2+})$ ;当无多余 Si 剩余,即  $Si - 3Na - 2Na/99 - 3K < 0.85(Mg + Mn + Fe^{2+})$ ,则已无硅的多余,不计算石英。

#### (12) 多余铝(Al')

计算多余铝,计算公式为:  $Al' = Al - Na - 2Na/99 - K - 0.54(Mg + Mn + Fe^{2+})$ 。如  $Al - Na - 2Na/99 - K < 0.54(Mg + Mn + Fe^{2+})$ ,则不计算多余的铝。

(13) 以  $Ap + Mt + Leuc + Ab + An + Ser + Cal + Chl + Q + Al' = 100$ ,计算以上各矿物的正电原子含量百分数。

## 2.6 计算检验

上述所有计算过程完毕后,需检查计算后的各种矿物原子数之和与竖列的原始原子数总和是否一致。一致,则说明计算过程无误;不一致,需复检,一直到一致为止。

## 2.7 长石含量校正

通常,在花岗岩类岩石中,钾长石中含斜长石成分远多于斜长石中含钾长石成分,如条纹长石中斜长石(主要为钠长石)含量很高,甚至在反条纹长石中斜长石成分要多于钾长石,因此,上述计算结果中所得到的理论值可能与实际情况存在差距,甚至是错误的,如可能会将正长花岗岩误计算为二长花岗岩。

为获取更为准确的结果,需要对长石含量进行校正。校正通常有 3 种方法:

(1) 显微镜统计法:如岩石中存在较多条纹长石,可初步对条纹长石中钾长石和斜长石进行统计,但总体代表性较差,故效果也较差。

(2) 长石染色法:通过染色(王琦等,1982),区分不同的长石并进行统计。此方法操作简单,准确性尚可。

(3) 化学分析法:挑选岩石中的长石单矿物进行化学分析。此方法最准确,但过程最复杂,周期也最长。

为了校正上述偏差,本文选择了广东诸广山花岗岩体中 41 个钾长石和 8 个斜长石单矿物样品作为计算实例进行了化学分析,将所需的  $K_2O$ 、 $Na_2O$ 、 $CaO$  分析结果列于表 1 及表 2 中。

从表 1 及表 2 中可以看出,钾长石中含斜长石约为 28%,而斜长石中钾长石只有 9.07%。设岩石中理论计算出钾长石、斜长石含量分别为  $K_{理论}$ 、 $P_{理论}$ ,则实际的钾长石含量  $K_{实际} = K_{理论} + \chi$ ,实际斜长石含量  $P_{实际} = P_{理论} - \chi$ , $\chi$  为含量修正值,即钾长石中所含的斜长石与斜长石中所含的钾长石之差。结合表 1、表 2,可形成以下关系:  $\chi = (K_{理论} + \chi) - (P_{理论} - \chi)$ ,即  $\chi = 0.44 K_{理论} - 0.14 P_{理论}$ 。

## 3 计算实例

分别选取准铝质花岗岩、铝过饱和花岗岩、铝强过饱和花岗岩和碱交代花岗岩为例进行计算,其中

表 1 钾长石化学分析结果  $w_B/\%$

Table 1 Chemical analyses of potash feldspar

序号	样号	主岩	K <sub>2</sub> O	Na <sub>2</sub> O	CaO
1	3-9	不等粒黑云母花岗岩	11.80	2.84	0.63
2	3-9-1	不等粒黑云母花岗岩	11.53	3.53	0.50
3	3-9-2	不等粒黑云母花岗岩	13.28	2.36	0.38
4	3-12	斑状黑云母花岗岩	12.53	2.26	0.84
5	3-12-1	斑状黑云母花岗岩	12.13	2.10	0.59
6	3-12-2	斑状黑云母花岗岩	12.18	1.74	0.55
7	3-12-3	花岗闪长岩	12.18	2.06	0.69
8	3-17	花岗闪长岩	12.73	1.65	0.40
9	3-17-1	花岗闪长岩	12.18	1.61	0.40
10	3-17-2	斑状黑云母花岗岩	12.18	1.89	0.44
11	3-18	斑状黑云母花岗岩	12.18	1.85	0.49
12	3-18-1	斑状黑云母花岗岩	12.03	1.79	0.40
13	3-18-2	斑状黑云母花岗岩	12.40	1.85	0.40
14	3-21	斑状二云母花岗岩	11.35	2.74	0.40
15	3-22	斑状二云母花岗岩	9.78	3.89	0.36
16	3-22-1	斑状二云母花岗岩	11.20	3.06	0.29
17	3-58	斑状黑云母花岗岩	11.00	2.90	0.49
18	3-58-1	斑状黑云母花岗岩	11.53	2.65	0.36
19	3-58-2	斑状黑云母花岗岩	11.20	2.96	0.43
20	3-69	斑状黑云母花岗岩	11.90	3.00	0.39
21	3-69-1	斑状黑云母花岗岩	12.50	2.44	0.24
22	3-69-2	斑状黑云母花岗岩	11.73	2.85	0.49
23	7-1	不等粒黑云母花岗岩	12.98	2.71	0.26
24	7-12	斑状二云母花岗岩	9.55	3.79	0.55
25	7-12-1	斑状二云母花岗岩	10.48	3.55	0.44
26	7-22	不等粒黑云母花岗岩	10.05	3.38	0.55
27	7-22-1	不等粒黑云母花岗岩	10.73	3.19	0.35
28	7-32	中细粒二云母花岗岩	12.65	1.99	0.19
29	7-34	不等粒黑云母花岗岩	10.33	3.16	0.70
30	7-34-1	不等粒黑云母花岗岩	11.73	3.10	0.39
31	7-35	不等粒黑云母花岗岩	11.88	1.99	0.39
32	7-35-1	不等粒黑云母花岗岩	11.73	2.51	0.30
33	7-46	细粒二云母花岗岩	11.73	2.80	0.21
34	7-49	斑状黑云母花岗岩	11.03	3.43	0.51
35	7-49-1	斑状黑云母花岗岩	11.73	3.10	0.44
36	7-49-2	斑状黑云母花岗岩	12.20	2.80	0.30
37	7-49-3	斑状黑云母花岗岩	11.75	2.80	0.44
38	3-25	斑状二云母花岗岩	12.03	2.80	0.39
39	3-61	花岗斑岩	12.20	2.51	0.29
40	4-28	斑状二云母花岗岩	11.75	2.80	0.39
41	4-36	斑状二云母花岗岩	12.20	2.61	0.35
平均含量			11.47	2.66	0.43
金属原子数			243	86	8
总原子数			337		
百分数			72.11	25.52	2.37

表 2 斜长石化学分析结果  $w_B/\%$

Table 2 Chemical analyses of plagioclase

序号	样号	主岩	K <sub>2</sub> O	Na <sub>2</sub> O	CaO
1	3-9-3	不等粒黑云母花岗岩	2.85	6.81	4.78
2	3-17-4	花岗闪长岩	1.48	5.01	9.15
3	3-21-1	斑状二云母花岗岩	2.55	7.98	3.13
4	3-21-2	斑状二云母花岗岩	1.38	7.71	3.79
5	7-1-1	不等粒黑云母花岗岩	1.03	8.73	2.98
6	7-32-1	中细粒二云母花岗岩	0.58	10.40	2.64
7	7-46-1	细粒二云母花岗岩	0.78	9.63	1.12
8	7-49-4	斑状二云母花岗岩	1.19	6.75	2.26
平均含量			1.48	7.88	3.73
金属原子数			32	254	67
总原子数			353		
百分数			9.07	71.95	18.98

选取的代表性岩石分别为闪长花岗岩、黑云母花岗岩、二云母花岗岩和钠交代花岗岩，计算实例分别见表 3 ~ 表 6。表中黑体加下划线数字(如 **6**)为岩石中不同矿物配比计算时的参照数值。

#### 4 在花岗岩类岩石研究中的应用

计算完毕后，通过岩石参数的选择和作图，可了解花岗岩类岩石特征、演化特征及成矿专属性等。

##### 4.1 参数的选择

本算法共选取两类参数，分别为代表主要造岩矿物的参数和反映岩石化学特征的参数。

###### (1) 代表主要造岩矿物的参数

该类型参数包括 Q(石英含量)、Or(修正后的钾长石含量)、Pl(修正后的斜长石含量)、Bi(黑云母含量)、Ms(白云母含量)和 Hb(角闪石含量)。

该类参数可表明主要造岩矿物的含量，并根据矿物的含量确定岩石具体名称。其中参数中的 Q、Bi、Ms、Hb 可直接从计算表中得出，而 Or、Pl 则需要通过校正计算得出。

###### (2) 反映岩石化学特征的参数

该类参数包括 Ot、An<sub>pl</sub>、K-Na、a、b 和 Mg。其中，Ot 表示钾长石占长石的百分数， $Ot = [Or / (Or + Pl)] \times 100\%$ ；An<sub>pl</sub> 表示斜长石号码， $An_{pl} = (An / Pl) \times 100\%$ ；K-Na 表示 K、Na 相对含量，K > Na 时为正值，K < Na 时为负值；a 表示岩石碱度， $a = K + Na$ ；b 表示暗色矿物总含量， $b = Bi + Hb + Mt + Ti$ ；Mg 表示 Mg 的相对含量。

上述反映岩石基本化学特征的参数，还可以反映花岗岩的演化过程和不同岩类的成矿专属性等。

表3 准铝质花岗岩系列岩石计算实例  
Table 3 Example of calculation for normal granite rock series

氧化物	$w_B/\%$	正电原子数	矿物正电原子数										
			Ap	Mt	Il	( $\Sigma K$ )	Ab	An	(Ca')	Hb	Bi	Kf	Q
SiO <sub>2</sub>	64.40	1 072					270	123		10	78.7	197.4	393
TiO <sub>2</sub>	0.52	6			<u>6</u>								
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	15.56	305				(92)	90	<u>123</u>			26.2	65.8	
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.78	10		<u>10</u>									
FeO	3.80	53		5	6								
MnO	0.10	1								6.3	<u>78.7</u>		
MgO	1.73	42											
CaO	3.91	70	6					61.5	(2.5)	<u>2.5</u>			
Na <sub>2</sub> O	2.79	90					<u>90</u>						
K <sub>2</sub> O	4.33	92				(92)					26.2	<u>65.8</u>	
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0.29	4	<u>4</u>										
总计		1 745	10	15	12		450	307.5		18.8	209.9	328.8	393
百分数/%		100	0.57	0.86	0.69		25.79	17.62		1.08	12.03	18.84	22.52

注: Ap—磷灰石; Mt—磁铁矿; Il—钛铁矿;  $\Sigma K$ —预算含钾数; Ab—钠长石; An—钙长石; Ca'—剩余的钙原子数; Hb—角闪石; Bi—黑云母; Kf—钾长石; Q—石英; Chl—绿泥石; Al'—剩余铝,下同。

表4 铝过饱和花岗岩系列岩石计算实例  
Table 4 Example of calculation for aluminum supersaturated granite series

氧化物	$w_B/\%$	正电原子数	矿物正电原子数									
			Ap	Mt	Il	( $\Sigma K$ )	Ab	An	(Al')	Bi	Kf	Q
SiO <sub>2</sub>	70.29	1 170					276	63		66	240	525
TiO <sub>2</sub>	0.47	6			<u>6</u>							
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.98	274				(102)	92	63	(17)	22 + 17	80	
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.36	4		<u>4</u>								
FeO	3.09	43		2	6							
MnO	0.05	1								<u>66</u>		
MgO	1.18	30										
CaO	1.99	36	4.5					<u>31.5</u>				
Na <sub>2</sub> O	2.85	92					<u>92</u>					
K <sub>2</sub> O	4.83	<u>102</u>				(102)				22	<u>80</u>	
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0.27	3	<u>3</u>									
总计		1 761	7.5	6	12		460	157.5		193	400	525
百分数/%		100	0.43	0.34	0.68		26.12	8.94		10.96	22.71	29.81

表5 铝强过饱和花岗岩系列岩石计算实例  
Table 5 Example of calculation for aluminum strong supersaturated granite series

氧化物	$w_B/\%$	正电原子数	矿物正电原子数										
			Ap	Mt	Il	( $\Sigma K$ )	Ab	An	Bi	(Al')	Ms	Kf	Q
SiO <sub>2</sub>	72.19	1 202					294	20	37.5		48	249	553.5
TiO <sub>2</sub>	0.18	2			<u>2</u>								
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.01	274				(112)	98	20	26	(18)	<u>48</u>	83	
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.14	1		<u>1</u>									
FeO	2.00	28		0.5	2								
MnO	0.05	-							<u>37.5</u>				
MgO	0.51	<u>12</u>											
CaO	0.72	13	3					<u>10</u>					
Na <sub>2</sub> O	3.04	98					<u>98</u>						
K <sub>2</sub> O	5.33	112				(112)			13		16	<u>83</u>	
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0.20	2	<u>2</u>										
总计		1 744	5	1.5	4		490	50	113		112	415	553.5
百分数/%		100	0.29	0.3	0.3	/	28.10	2.87	6.48		6.42	23.80	31.74



表 6 碱交代花岗岩计算实例  
Table 6 Example of calculation for alkali metasomatic granite rock

氧化物	$w_B/\%$	正电原子数	矿物正电原子数										
			Ap	Leuc	Ab	An	Kf	Cal	Chl*	Hm	Q	Al'	
SiO <sub>2</sub>	65.47	1 090			789	5.4	12			28		255.6	
TiO <sub>2</sub>	0.35	4		<u>4</u>									
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	16.01	314			263	5.4	4			17.8			23.8
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2.41	30								7.9	22.1		
FeO	1.20	17											
MnO	0.04	1								<u>33</u>			
MgO	0.60	15											
CaO	1.59	28	12			<u>2.7</u>				<u>13.3</u>			
Na <sub>2</sub> O	8.15	263			<u>263</u>								
K <sub>2</sub> O	0.18	4					<u>4</u>				15		
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0.56	8	<u>8</u>										
CO <sub>2</sub>	0.53	12								<u>12</u>			
总计		1 786	20	4	1315	13.5	20	25.3	86.8	22.1	255.6	23.9	
百分数/%		100	1.12	0.22	73.63	0.76	1.12	1.42	4.86	1.24	14.31	1.34	

注：绿泥石成分依据 8 个电子探针分析结果配比得出，8 个测点平均组成为：SiO<sub>2</sub> = 29.93%，Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> = 16.27%，Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> = 11.01%，FeO = 11.75，MnO = 0.33，MgO = 16.87，CaO = 0.20，Total = 86.36。

## 4.2 作图方法与图解

### 4.2.1 作图方法

以右端为 Pl、左端为 Or 作横坐标，从右向左表示钾长石比值 Ot 的增长，在 Ot = 50% 的位置作一纵坐标，向上表示岩石的 Q 值，向下表示 b 值。

根据 Ot、Q、b 这 3 个参数可以在图的上、下两部分定出相应的两个投影点 P<sub>1</sub> 和 P<sub>2</sub> (图 1)。再把其他几个参数分别在 Q-Or-Pl 浅色矿物投影区 (第 II 象限) 和 b-Or-Pl 暗色矿物投影区 (第 III 象限)

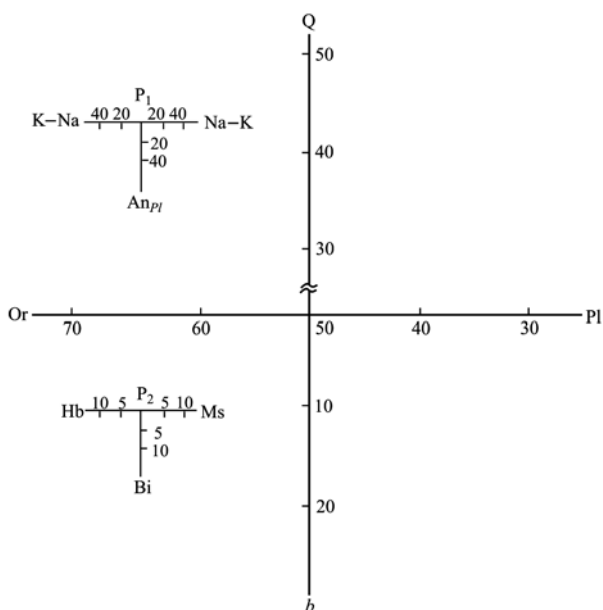


图 1 岩石化学图解

Fig. 1 Petrochemical diagram

两个区内以向量形式表示出来。

在浅色矿物投影区 (第 II 象限) 内，以 P<sub>1</sub> 为起点，向下取 An<sub>Pl</sub>，向左取 K - Na 的正值，向右取 K - Na 的正值，它们的尺度取横坐标的 1/10。

在暗色矿物投影区 (第 III 象限) 内，以 P<sub>2</sub> 为起点，向下取 Bi 值，向左取 Hb 值，向右取 Ms 值，尺度为纵坐标的 1/2。

### 4.2.2 图解作用

#### (1) 区分各类岩石

依据岩石中的 K<sub>2</sub>O、Na<sub>2</sub>O、CaO、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的关系，可将花岗岩类岩石分为正常系列岩石和铝过饱和岩石。

正常系列岩石：P<sub>2</sub> 的向量偏向左下方，岩石中出现含 Ca 的暗色矿物，如花岗闪长岩、含角闪石花岗岩等。

铝过饱和岩石：P<sub>2</sub> 的向量垂直向下或偏右下方。P<sub>2</sub> 向量垂直向下，说明岩石中无 Hb 和 Ms，即为黑云母花岗岩。P<sub>2</sub> 向量偏向右下方，则说明岩石中含白云母，向量越偏右，铝过饱和和越强烈，含白云母越多，岩石应为二云母花岗岩，甚至为白云母花岗岩。

P<sub>1</sub> 向量向下的长短可代表岩石中斜长石的成分，即 An<sub>Pl</sub> 值。

#### (2) 岩石定名

P<sub>1</sub> 是根据 Q 值和 Ot 值定出来的，因此，可以根据 P<sub>1</sub> 的投影位置按某种定量矿物分类对岩石命名。

#### (3) 判别岩石酸度

当 P<sub>1</sub> 与 P<sub>2</sub> 的投影点越靠近，则岩石越偏酸性，

岩石中含石英量也就越多,暗色组分越少。

#### (4) 判别岩石中 K、Na 相对含量

当  $P_1$  偏向左方,说明岩石中  $K > Na$ ; 偏向右方,说明  $Na > K$ 。

#### (5) 反映岩石中暗色矿物的组分

根据  $P_2$  投影点位置的上下,可以知道暗色矿物的总含量,而从  $P_2$  的方向和长短,可以判断岩石中暗色矿物的种类及含量。

#### (6) 反映复式岩体的演化过程和演化规律

对于复式岩体,将不同演化阶段的岩石分别投图,可从图解中了解复式岩体的演化过程和演化规律。

#### (7) 了解岩体成矿的专属性

与花岗岩有关的矿产,往往与岩体演化到某一阶段或具有某一特定特征的花岗岩有关,通过参数的选择,可以了解岩体成矿的专属性。

## 5 讨论

对于花岗岩类实际矿物化学换算存在以下几个方面的困难:一是钾长石与斜长石调整系数问题;二是矿物配比问题;三是强过铝岩石系列中剩余铝的分配问题;四是计算方法的适用性问题。

### 5.1 长石调整系数问题

因钾钠长石之间不等量类质同像广泛存在及条纹长石的存在,因此计算过程中十分有必要对长石的含量进行合理调整,如前文所述的长石含量校正。朱为方(1979)曾提出一个简易的修正公式。值得注意的是,不同地区,长石含量修正值  $\chi$  也不同,即使是同一地区,甚至是同一岩体,长石含量修正值也有差别,而该值直接关系到计算结果的准确性,因此在计算过程中切勿机械套用,而是要结合实际情况合理应用。

此外,计算所得的斜长石号码是岩石中所有斜长石的平均号码,因此可能会出现计算结果与独立斜长石的号码不一致的情况。通常,受钠长石化及去钙化等作用影响,计算所得的斜长石号码要比薄片测定中的斜长石号码稍低。

### 5.2 矿物配比中存在的问题

花岗岩中, K、Na、Al、Si 通常占岩石绝大多数,且主要存在于钾长石、钠长石(钙长石次要)和石英中。上述3种矿物无论组合或成分都很稳定,因此,计算的难点在于副矿物的确定及暗色矿物成分不固定问题。

#### (1) 副矿物的确定

计算过程中,笼统的将 P 都与 Ca 配成磷灰石是简单化的做法。当岩石中 CaO 含量很低时, P 可能不形成磷灰石,而形成独居石、磷钇矿等。据广东一些岩体实际统计结果(戎嘉树, 1959)看,当  $CaO > 0.7\%$  时,出现较多的磷灰石,而当  $CaO < 0.7\%$  时,则出现独居石和磷钇矿,基本不见磷灰石。因磷灰石中的附加阴离子不易确定,如无特殊要求,配磷灰石过程中可统一按  $Ca:P = 3:2$  (如考虑附加阴离子则为  $5:3$ )。花岗岩中的钛既可来自钛铁矿,也可来自榍石、黑云母等,笼统地将钛算成钛铁矿也不尽合理。据广东某些岩体资料统计(戎嘉树, 1959),当岩石中  $K + Na/Al$  (原子数比)  $< 0.7$ 、 $CaO > 2\%$  时出现较多榍石,而很少有钛铁矿,当岩石中  $K + Na/Al > 0.7$ 、 $CaO < 2\%$  时则出现钛铁矿,而不见榍石。因花岗岩中黄铁矿、萤石等也较为常见,因此将铁(包括  $Fe_2O_3$  及  $FeO$ ) 配到磁铁矿、钛铁矿及黑云母中而不考虑黄铁矿的做法也不尽合理。同理,钙的配比中不考虑萤石也存在问题。

#### (2) 暗色矿物成分不固定问题

对于紫苏辉石、黑云母、角闪石等矿物,由于其 Fe、Mg、Si、Al 等阳离子比例关系不固定,且常含有 Ti、Cr、Mn、Ni 等元素参与类质同象替换,因此,在计算其质量分数时就不能以一个固定的矿物分子量来计算,通常运用统计值(通式)替代,但由于不同地区上述矿物成分差别很大,因此,统计出的数值不具代表性,从而造成计算结果失真的情况出现。

#### (3) 化学分析数据的全面性问题

通常,化学分析结果仅为常规分析项(13项),而无 S、F、Y、 $CO_2$ 、 $H_2O^+$  等,因此在计算过程中诸如黄铁矿、萤石、磷钇矿、方解石等相应的矿物在含量上不好确定。

#### (4) 多解性问题

当一种阳离子在多种矿物中均出现时,往往会出现多解性问题,如 P,既可以存在于磷灰石中,也可存在于磷钇矿、独居石中。Ca 既可以存在于磷灰石中,也可以存在于萤石、钙长石等中。同样的还有 Fe、Ti 等。针对上述副矿物计算中存在的问题,不同的算法处理的方式也不同,但由于岩性不同、地域不同等,上述经验值仅在某一特定地区适用,而不具有广泛的代表性,建议不宜套用(除非同一区域)。就本算法而言,具体配哪种矿物合适要结合显微镜下观察或重砂分选结果确定,仅配出现的矿物,未出现的矿物不配,从而解决了副矿物配比中到底应该配

哪种矿物合适及化学计算中矿物多解性的问题,同时也尽可能确保计算结果与实际相吻合。对于化学成分不固定问题,本算法认为应对黑云母、角闪石等成分不固定矿物开展电子探针成分测试(光薄片),取其综合值或均值再进行配比为好。同时,在化学分析过程中,尽量分析岩石中的S、F、CO<sub>2</sub>含量,从而有利于副矿物的进一步配分。

然而,花岗岩中矿物变化远比想象中的更为复杂,不可能完全、完美地解决配比中存在的问题,如F即可出现在萤石中,也可呈附加阴离子的形式存在于黑云母、角闪石及磷灰石中。同理,除以碳酸盐形式存在外,C也可呈附加阴离子形式存在,从而使配分更加复杂化。但由于花岗岩中K、Na、Al、Si通常占总阳离子数的95%以上,且其95%又为钾长石、钠长石(钙长石次要)和石英,上述3种矿物无论其组合或成分都很稳定(朱为方,1979),加之副矿物配分对最终配比效果影响不大,因此,在副矿物配分中宜采用就简原则,从而使换算更加简单、易行。当确实需要了解某些副矿物的含量时,应采用重砂方法更为稳妥。

### 5.3 铝过饱和系列中剩余铝的配比问题

对于铝过饱和系列岩石,在配比完所有的矿物后还有铝的剩余,甚至有时铝剩余较多,可达10%左右甚至更多。CIPW标准矿物将剩余的铝计算成刚玉,但刚玉在花岗岩类型中极少出现,从而导致计算结果与实际情况不符。关于多余的铝,建议从以下几个方面考虑:

① 结合镜下详细观察及重砂分选结果,确定是否存在黄玉、堇青石、铁铝榴石等富铝矿物,如有则按上述富铝矿物配比;② 当没有富铝副矿物存在而又有少量铝剩余时,可将剩余铝配比为高岭石;③ 当即没有富铝矿物存在又有较多剩余铝时,剩余的铝很难处理,造成这种现象的原因可能是在计算过程将黑云母、白云母等富铝矿物按标准分子式进行铝的配比,而实际上述矿物铝的含量比配比的要高,出现这种情况时要结合电子探针成分分析结果按矿物实际含量(或配比)重新计算;④ 当上述3种情况都不存在而又有较多铝剩余时,可能是由于矿物交代作用引起,要根据实际情况综合考虑,进一步优化计算过程。

### 5.4 本算法的适用范围

根据铝饱和指数可将岩石分为准铝质( $A/CNK < 1$ )岩石、过铝质( $A/CNK > 1$ )岩石、强过铝质( $A/CNK > 1.1$ )岩石及过碱质( $A/NK < 1$ )岩石(桑隆康

等,2012)。本算法分类中的准铝质系列(或钙饱和系列)、铝过饱和序列及铝强过饱和序列总体上也是以铝饱和指数为基础划分的,但因计算过程中不仅要考虑 $A/CNK$ 及 $A/NK$ 之间的关系,同时还要根据原子组合及其配比关系,因此在处理 $A/CNK$ 之间的关系时要去掉磷灰石(包括方解石和萤石)等含钙矿物中的Ca的影响,同时,还要兼顾K、Al之间的关系,因此本算法中的分类可看做是在铝饱和指数分类基础上的进一步细化,二者略有区别。由此可见,本算法主要适用于准铝质、过铝质及强过铝质花岗岩类,常见的岩石主要有闪长花岗岩类、黑云母花岗岩类、二云母花岗岩类、白云母花岗岩类以及碱长花岗岩类等,而对于过碱性( $A/NK < 1$ )花岗岩类(如碱性花岗岩类)则不完全适用。

### 5.5 计算效果及应用

运用本算法对江西省铜厂角闪黑云花岗岩、西华山黑云母花岗岩、阳储岭黑云母二长花岗岩及湘赣粤三省交界处诸广山黑云母花岗岩、二云母花岗岩等岩体薄片统计结果与计算结果进行了对比,结果显示,石英、钾长石、斜长石含量差别不超过4%,一般为1%~3%,黑云母差别在3%以内,角闪石差别在3.5%以内,因副矿物本身含量较少,总体误差都不大。甘肃茂岭碱交代花岗岩的计算结果与镜下统计结果也具有相近的结果。同时,对本算法计算结果与朱为方算法(朱为方,1979)也进行了较系统的对比分析,石英、钾长石、斜长石等主要矿物含量较为吻合,黑云母等矿物计算结果也较为接近。

通过对我国华南邓阜仙、诸广山等复式岩体进行图解分析发现,邓阜仙复式岩体从早期斑状黑云母花岗岩到中期二云母花岗岩再到晚期白云母花岗岩,矢量方向先是指向左(即 $K > Na$ ),到了晚期改指向右(即 $Na > K$ ),说明演化特征早期以K为主,到中期K和Na接近,到晚期以Na为主。诸广山岩体也具有相似的演化特征。通过图解可直观反映出在岩体演化过程中存在一个明显的“钠转折”现象,进一步研究发现,铀矿化主要形成于这个转折期。我国华南典型复式岩体的图解结果可直观地反映岩体演化过程、演化规律及岩体演化与矿化之间的关系。

## 6 结论

该计算方法不但针对准铝质花岗岩类、铝过饱和、铝强过饱和和花岗岩类,也兼顾了碱交代花岗岩及碱长花岗岩,不仅适用于新鲜岩石,也适用于部分蚀

变的岩石。该计算方法在处理岩石化学分析数据的归纳和组合上尽量与实际存在的矿物相结合,力求计算结果与岩石中实际存在的矿物相符合。计算过程中提出了长石的修正系数 $\chi$ ,用其修正岩石中钾长石和斜长石的含量,从而确保计算结果与实际相符。计算得到主要造岩矿物(Q、Or、Pl、Bi、Ms、Hb)的含量和反映岩石化学特征的两类参数( $Ot$ 、 $An_{pl}$ 、 $K-Na$ 、 $a$ 、 $b$ 、 $Mg$ )并可以生成相关图解。该方法不仅可以计算出岩石中主要造岩矿物的含量,同时还可以反映岩石化学特征、演化过程及其成矿专属性等。

但到目前为止,没有哪一种计算方法是万能的,都有其适用范围和局限性,因此,计算过程中要结合显微镜观察(确定岩石中实际存在的矿物)、重砂分选(确定显微镜无法观察到的副矿物及含量很少的矿物)、电子探针等方法才能取得理想的效果。

本文中所列举的计算过程是一般的计算过程,重点在于介绍计算原理、计算思路。因岩石变化多样,故本算法不一定适用于所有花岗岩类,如碱过饱和花岗岩( $K+Na>Al$ )。另外,本文所列的矿物组合是最常见的矿物组合,但因岩石中矿物组合也是变化多样的,如铝强过饱和花岗岩类中可能出现的堇青石、石榴石等含铝矿物而不是白云母,因此计算过程也要根据实际情况做出相应的调整。

## References

- Bai Wenji. 1979. Criticism and improvement opinions on the principle of A H Эварипкий petrochemical calculating method[J]. Geological Review, 25(2): 70~84 (in Chinese).
- Cross W, Iddings J P, Pirsson L V, et al. 1902. A quantitative chemico-mineralogical classification and nomenclature of igneous rocks[J]. The Journal of Geology, 10: 555~690.
- Niggli P. 1936. Ueber Molekularnormen zur Gesteinsbe-chaung[J]. Schweiz. Mineral. Petrogr. Mitt., 16: 295~317.
- Rong Jiashu. 1959. Nanling Intrusive Rocks: Preliminary Comprehensive Study Report[M]. Beijing: Geological Publishing House, 1~230(in Chinese).
- Sang Longkang and Ma Changqian. 2012. Petrology[M]. Beijing: Geological Publishing House, 46~192(in Chinese).
- Shen Jili. 1981. Comment on "Petrochemical method for natural minerals of granitoids" of Zhu Weifang—Concurrently Sanshi method and A Rittman method[J]. Geology and Exploration, (10): 36~43(in Chinese).
- Wang Qi and Zhang Guohua. 1982. On stain method for distinguishing quartz and feldspar debris[J]. Transactions of Oceanology and Limnology, (2): 32~37(in Chinese with English abstract).
- Wang Wenguang. 2009. A new method for calculating mineral composition of with microscopic observing and molecular mass counting[J]. Uranium Geology, 25(6): 344~348(in Chinese with English abstract).
- Ye Ying. 1987. A discussion on some problems concerning petrochemical calculations of acid-intermediate igneous rocks and their solution approach[J]. Acta Petrologica Sinica, (3): 74~82(in Chinese with English abstract).
- Zhu Weifang. 1979. Petrochemical method for natural minerals of granitoids[J]. Geology and Exploration, (8): 35~49(in Chinese).
- Заварицкий А. Н. 1960. Пересчет химических анализов изверженных Горных пород[M]. Госгеолтехиздат, 3~80(in Russian).

## 附中文参考文献

- 白文吉. 1979. 对 A. H. 查瓦里茨基的岩石化学计算方法原理的批评与改进意见[J]. 地质论评, 25(2): 70~84.
- 戎嘉树. 1959. 南岭侵入岩: 初步综合研究报告[M]. 北京: 地质出版社, 1~230.
- 桑隆康, 马昌前. 2012. 岩石学[M]. 北京: 地质出版社, 46~192.
- 沈纪利. 1981. 评朱为方“花岗岩类自然矿物岩石化学换算方法”——兼论三氏及里氏算法[J]. 地质与勘探, (10): 36~43.
- 王琦, 张国华. 1982. 关于石英、长石碎屑颗粒的染色方法[J]. 海洋湖沼通报, (2): 32~37.
- 王文广. 2009. 一种计算岩石中矿物组成的新方法[J]. 铀矿地质, 25(6): 344~348.
- 叶瑛. 1987. 中酸性火成岩岩石化学计算若干问题的讨论及解决方案[J]. 岩石学报, (3): 74~82.
- 朱为方. 1979. 花岗岩类自然矿物岩石化学换算法[J]. 地质与勘探, (8): 35~49.