

doi:10.3969/j.issn.2097-0013.2021.03.009

CIPW 标准矿物计算方法与程序设计

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: CIPW 标准矿物计算方法是一百多年前由 Cross、Iddings、Pirsson 和 Washington 四位学者设计的岩浆岩岩石化学数据的处理方法, 至今在岩浆岩研究中仍发挥着重要的作用。国外学者先后开发了多款软件及 Excel 工作表, 但国内在相关的软件开发方面却显得薄弱。本文在全面评估 CIPW 标准矿物计算方法的基础上, 介绍了作者应用 Excel VBA 设计的一套计算机程序, 该程序除了可计算出标准矿物组成以外, 还可计算常用的岩石化学参数。经与前人的计算结果对比表明, 该程序的计算结果正确的、可靠的。

关键词: CIPW 标准矿物; 岩浆岩; 岩石化学; 程序设计

中图分类号: P588.1

文献标识码: A

文章编号: 2097-0013(2021)03-0348-13

Lu Y F, Li W X. Calculation Method and VBA Program of CIPW Norm Minerals. *South China Geology*, 2021, 37(3):348-360.

Abstract: CIPW norm mineral calculation is a petrochemical data processing method for magmatic rocks designed by Cross, Iddings, Pirsson and Washington more than 100 years ago, which still plays an important role in the study of magmatic rocks. Foreign scholars have developed a number of software and excel worksheet, but domestic software development is still weak. Based on the comprehensive introduction of the calculation method of CIPW norm minerals, the authors have designed a computer program with Excel VBA. In addition to calculating the norm mineral composition, the program also calculates the commonly used petrochemical parameters. By compared with the results of predecessors, the calculation results by the program are proved to be correct and reliable.

Key Words: CIPW norm minerals; magmatic rocks; petrochemistry; programming

CIPW 标准矿物计算方法是将岩石氧化物质量百分数换算为氧化物分子数, 然后按照一定的规则结合成若干理想成分的标准矿物 (也有称标准矿物分子) 的方法。该方法最初由美国的三位岩石学家 Cross、Iddings 和 Pirsson 及一位地球化学家 Washington^[1-2] 共同设计, 为纪念他们的贡献, 后人以他们姓名的首字母组合成 CIPW 表示该计算方法^[3]。该方法自创立以来 100 多年的时间里, 很

收稿日期: 2021-5-16; 修回日期: 2021-7-7

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

多学者都曾尝试进行改进,但总的来说变化不是很大,所遵循的规则基本一致,只是在部分细节上有所不同。

虽然“标准矿物”与实际矿物之间存在一定的差异,但将其作为一个统一的对比标准,对研究岩石学问题非常有用。很多岩石学家专门建立了以标准矿物为基础的岩石分类图解,如 Q'-Anor-F' 分类图解^[4-5]、CI-An% 分类法分类图解^[6-7]、花岗岩类 An-Ab-Or 分类图解^[7] 和含副长石的标准矿物 -MgO 分类图解^[8] 等。也有不少学者将标准矿物用于岩石系列划分,如 Irvine 和 Baragar^[6] 所建立的 Ol'-Ne'-Q' 图解和 Cpx-Ol-Opx 图解(划分碱性系列和亚碱性系列)、An-Ab'-Or 图解(划分钠质系列和钾质系列)等。此外,一些传统上用实际矿物建立的有关图解,有被标准矿物图解代替的趋势。

CIPW 标准矿物计算是岩浆岩岩石学研究中必不可少的计算方法,在大多数岩浆岩岩石学专著和教材中都有介绍^[9-13]。随着计算机的普及,用于 CIPW 标准矿物计算的软件^[14-20] 与 Excel 表格越来越多,其中由美国联合学院 (Union College) Hollolcher^[21] 教授根据 Johannsen(1931)^[22] 的计算步骤设计的 Excel 表格深受广大地质工作者的欢迎,也是目前国内使用的主流软件(表格)之一。Holloch-

er 的工作表早期版本一次只能计算一个样品,升级后一次可以处理多件样品,但仍存在一些不足,如表格设计复杂、缺乏灵活的选项(如是否需要进行铁调整、是否需要闭合等)、所有样品只能统一按给定的 $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{Fe}_2\text{O}_3^{\dagger}$ 比值进行调整等。Lowenstern^[15] 的软件缺少铁调整和闭合功能。由于国外软件均为英文界面,开发于英文版 Windows 和 Office 环境,这在一定程度上也影响了这些软件在国内的推广与应用。另一方面,目前,国内还没有学者们共同认可的、自主开发的相关中文版软件。本文介绍的 CIPW 标准矿物计算方法与程序设计与作者另一篇论文介绍的“Pb-Sr-Nd-Hf 同位素参数计算”^[23] 一样,是作者编写并经多次修改完善的一款专业软件,是 Geokit 软件的一个组件^[24]。

1 岩石化学与 CIPW 标准矿物组成

1.1 CIPW 标准矿物的数据构成及标准矿物组成

参与标准矿物计算的参数大多数为主量元素的氧化物和少量微量元素(表 1)。目前主量元素含量通常采用 XRF 分析方法获得,其中铁的分析结果是铁的总量,通常以 Fe_2O_3 形式给出(本文记作 $\text{Fe}_2\text{O}_3^{\dagger}$),这一结果不能分解成 Fe_2O_3 和 FeO 两部分。

表 1 用于 CIPW 标准矿物计算的标准矿物分子式、分子量和氧化物的分子量
Table 1 Molecular formulas, molecular weights of CIPW norm minerals and oxides

氧化物(元素)		标准矿物					
分子式	分子量	标准矿物名称	代号*	分子式	分子量	密度(g/cm ³)	
SiO ₂	60.0843	石英 Quartz	Q	SiO ₂	60.0843	2.65	
TiO ₂	79.8658	正长石 Orthoclase	Or	K ₂ O·Al ₂ O ₃ ·6SiO ₂	556.6631	2.56	
Al ₂ O ₃	101.9613	钠长石 Albite	Ab	Na ₂ O·Al ₂ O ₃ ·6SiO ₂	524.446	2.62	
Fe ₂ O ₃	159.6882	钙长石 Anorthite	An	CaO·Al ₂ O ₃ ·2SiO ₂	278.2093	2.76	
FeO	71.8424	白榴石 Leucite	Lc	K ₂ O·Al ₂ O ₃ ·4SiO ₂	436.4945	2.49	
MnO	70.9374	霞石 Nepheline	Ne	Na ₂ O·Al ₂ O ₃ ·2SiO ₂	284.1088	2.56	
MgO	40.3044	钾霞石 Kaliophilite	Kp	K ₂ O·Al ₂ O ₃ ·2SiO ₂	316.3259	6.20	
CaO	56.0774	刚玉 Corundum	C	Al ₂ O ₃	101.9613	3.98	
Na ₂ O	61.9789	锥辉石 Acmite	Ac	Na ₂ O·Fe ₂ O ₃ ·4SiO ₂	462.0043	3.60	
K ₂ O	94.1960	硅灰石 Wollastonite	Wo	CaO·SiO ₂	116.1637	2.68	
P ₂ O ₅	141.9445	透辉石 Diopside	Di	CaO·FmO·2SiO ₂	216.5504 ^①	3.24	
CO ₂	44.0098	紫苏辉石 Hypersthene	Hy	FmO·SiO ₂	100.3887 ^①	3.30	
SO ₃	80.0582	橄欖石 Olivine	Ol	2FmO·SiO ₂	140.6931 ^①	3.50	
S	32.0660	磁铁矿 Magnetite	Mt	FeO·Fe ₂ O ₃	231.53062	5.20	
F	18.9984	赤铁矿 Hematite	Hm	Fe ₂ O ₃	159.6882	5.25	

续表 1

氧化物 (元素)		标准矿物					
分子式	分子量	标准矿物名称	代号*	分子式	分子量	密度 (g/cm ³)	
<i>Cl</i>	35.4530	钛铁矿 Ilmenite	Il	FeO·TiO ₂	151.7082	4.75	
<i>Sr</i>	87.62	磷灰石 Apatite	Ap	3CaO·P ₂ O ₅ ·0.33CaF ₂	328.6822 ^①	3.20	
<i>Ba</i>	137.327	黄铁矿 Pyrite	Py	FeS ₂	135.9624 ^②	4.99	
<i>Ni</i>	58.6934	锆石 Zircon	Zr	ZrO ₂ ·SiO ₂	183.3131	4.56	
<i>Cr</i>	51.9961	榍石 Titanite	Tn	CaO·TiO ₂ ·SiO ₂	196.0275	3.50	
<i>Zr</i>	91.224	金红石 Rutile	Ru	TiO ₂	79.8658	4.20	
		钙钛矿 Perovskite	Pf	CaO·TiO ₂	135.9432	4.00	
		硅酸钠 Sodium metasilicate	Ns	Na ₂ O·SiO ₂	135.9432	2.40	
		硅酸钾 Potassium metasilicate	Ks	K ₂ O·SiO ₂	154.2803	2.50	
		硬石膏 Anhydrite	Ah	CaO·SO ₃	136.1356	2.96	
		斜硅钙石 Larnite	La	2CaO·SiO ₂	172.2391	3.27	
		铬铁矿 Chromite	Cm	Cr ₂ O ₃ ·FeO	223.8326	5.09	
		萤石 Fluorite	Fl	CaF ₂	94.0742 ^②	3.18	
		岩盐 Halite	Hl	NaCl	66.4425 ^②	2.17	
		方解石 Calcite	Cc	CaO·CO ₂	100.0872	2.71	
		碳酸钠 Sodium carbonate	Nc	Na ₂ O·CO ₂	105.9887	2.53	
		无水芒硝 Thenardite	Th	Na ₂ O·SO ₃	142.0371	2.68	
		方铁矿 Wustite	Wu	FmO	40.3044 ^①	5.88	

注:*CIPW 标准矿物代号通常用小写字母表示,但在相关的应用(如 Cpx-Ol-Opx, An-Ab'-Or 等图解)中则多用首字母大写来表示,本文亦采用首字母大写格式以便与常规的矿物缩写一致.①表中 FmO 代表(FeO+MgO),FmO 的分子量随 Mg/Fe 比值的变化而改变,并导致橄榄石、紫苏辉石和透辉石的分子量发生变化;磷灰石的分子量随 Cl 和 F 的加入及加入量变化而变化;②该类矿物的分子量隐含氧原子的原子量,其中 Py = FeO+2 × S; Fl = CaO+2 × F, Hl = 0.5Na₂O+Cl.

表 1 中列出的氧化物 (元素) 比较多,但不是每件样品都需要分析这么多项目,其中正体 (非斜体) 字部分的数据就可以满足计算 CIPW 标准矿物需要,而斜体字部分的氧化物 (元素) 对结果影响不大。一般来说,全分析数据应有以下组分: SiO₂、TiO₂、Al₂O₃、Fe₂O₃、FeO、MnO、MgO、CaO、Na₂O、K₂O、P₂O₅、H₂O⁺ (±H₂O、LOI),其中 H₂O⁺ 为结构水,如黑云母、角闪石等矿物晶格中的羟基(OH),H₂O 为吸附水,LOI 为灼失量(Loss On Ignition),也称烧失量,是地质样品在加热过程中的损失的组分,主要为水和 CO₂ 及有机质,它通常是挥发份的总和。由于 P₂O₅ 的存在与否会影响部分含 Ca 岩石的化学参数,因此建议计算 CIPW 标准矿物时加入 P₂O₅ 这一组分。偏基性的岩石还应分析 MnO、Cr、Ni、Sr 和 Ba; 花岗岩类,特别是高分异花岗岩最好包含 F(Cl) 及 Zr。

CIPW 标准矿物及相关参数也一并列于表 1 中,其中矿物密度用于计算体积分数。这里列出的标准矿物种类很多,但对于单个样品来说,所出现

的矿物并不多,具体会有哪些矿物要看岩石类型(如花岗岩类与基性岩的矿物组合有明显的不同)及所给元素的种类,如没有 Zr,就不会出现锆石,没有 F 也就没有萤石等等。

1.2 全分析数据的预处理

有了全分析数据也不一定适合做进一步的标准矿物计算,还要对数据质量进行判断,并对有关数据进行预处理。

1.2.1 数据质量判断

通常情况下,岩石样品各分析项目的总和应在 99.75% ~ 100.25% 之间,超出范围的样品很有可能存在分析质量的问题,在没有查明原因前,不宜使用。

1.2.2 氧化铁的调整

(1) 为什么要进行氧化铁调整?

Fe 是变价元素,Fe³⁺/Fe²⁺ 比值受控于氧化还原状态。影响氧化还原状态的因素很多,如岩石的产状(喷出岩氧化程度高于侵入岩)、火山岩相特征(一般火山熔岩的顶部气化程度高于下部)、岩石的酸碱程度(酸性程度越高,氧化程度也越高)、构

造环境以及后期的次生变化(如围岩蚀变和风化作用都会引起氧化程度的增高)等。虽然 Fe^{3+} 和 Fe^{2+} 都是铁,但两者的地球化学行为不同,因此两者比例的变化会导致地球化学系统的一系列变化。表 2 中 A、B 是同一样品, B 经过热处理后部分 Fe^{2+} 被氧化成 Fe^{3+} , 两样品 CIPW 标准矿物计算结果也截然不同。

表 2 橄榄玄武岩 (A) 及其热处理后岩石 (B) 的化学成分与标准矿物

Table 2 Chemical composition of olivine basalt (A) and its heat treated (B) and CIPW Norm minerals

氧化物	样品		CIPW 法 标准矿物	标准矿物 (wt %)	
	A	B		A	B
SiO_2	50.87	50.87	Q	-	5.82
TiO_2	0.79	0.79	Or	3.34	3.34
Al_2O_3	17.62	17.62	Ab	24.63	24.63
Fe_2O_3	1.60	11.5	An	33.36	33.36
FeO	9.94	0.98	Di	10.58	9.94
MnO	0.08	0.08	Hy	18.9	11
MgO	6.25	6.25	Ol	5.83	-
CaO	9.32	9.32	Mt	2.32	1.16
Na_2O	2.94	2.94	Hm	-	10.72
K_2O	0.59	0.59	Il	1.52	1.52
总和	100.00	100.94			

造成上述标准矿物成分及数量变化的原因是 Fe_2O_3 的增加使得更多的 FeO 与 Fe_2O_3 分子以 1:1 比例结合成磁铁矿,因此后续计算透辉石、紫苏辉石、橄榄石等暗色矿物时可供结合的 FeO 分子将减少、甚至用完(赤铁矿的形成是 FeO 用完的标志);同时由于 FeO 的减少,使得本来应与 FeO 结合的 SiO_2 富余出来,最终导致 SiO_2 的过饱和而形成石英。

(2) 如何判断 Fe_2O_3 是否超标?

① 以 TiO_2 为标准

由于岩石中 TiO_2 较为稳定,不易受风化蚀变等因素的影响,而 TiO_2 与 Fe_2O_3 有一定的关系。Irvine 和 Baragar^[6] 认为,对于玄武岩中 Fe_2O_3 可接受的上限应该是: $w(\text{Fe}_2\text{O}_3)=w(\text{TiO}_2)+1.5$, Fe_2O_3 的含量若大于此值,说明 Fe_2O_3 超标。

在不特指玄武岩的情况下可用以下公式进行判别:若 $w(\text{Fe}_2\text{O}_3)>0.830w(\text{TiO}_2)+1.60$,则说明样品不新鲜,氧化度高。

② 以氧化度为标准

氧化度的定义为:

$$\text{OX}=w(\text{FeO})/w(\text{FeO}+\text{Fe}_2\text{O}_3) \quad (1)$$

OX 值越小,岩石的氧化程度越高,反之亦然。

Le Maitre^[25] 通过对大量样品的统计分析,发现火山岩的 OX 值上限与岩石化学成分之间存在

如下关系:

$$\text{OX}=0.93-0.0042 w(\text{SiO}_2)-0.022 w(\text{K}_2\text{O}+\text{Na}_2\text{O}) \quad (2)$$

此处把用 (1) 式获得的 OX 值标记为 $\text{OX}_{\text{实}}$,而将由 (2) 式计算得到的 OX 值,标记为 $\text{OX}_{\text{允}}$

如果 $\text{OX}_{\text{实}}>\text{OX}_{\text{允}}$,表明岩石是新鲜的,反之则表明岩石受到了次生氧化作用的影响。因此在做相关的数据处理时,若 $\text{OX}_{\text{实}}<\text{OX}_{\text{允}}$,需要调整。

对于深成岩, $\text{OX}_{\text{允}}$ 的计算公式调整为:

$$\text{OX}_{\text{允}}=0.88-0.0016 w(\text{SiO}_2)-0.027 w(\text{K}_2\text{O}+\text{Na}_2\text{O}) \quad (3)$$

目前多数学者在进行氧化铁调整时多采用 Le Matre^[25] 的方法。

(3) 调整方法与实例

对于 Fe_2O_3 超标的样品,在调整前先将全部铁换算成 Fe_2O_3 ,然后根据 $\text{OX}_{\text{允}}$ 值计算最大的 Fe_2O_3 值作为保留值,将剩余的 Fe_2O_3 换算为 FeO。

具体算法是:将 Fe_2O_3 值调整到允许的最大值,并将多余的 Fe_2O_3 转换为 FeO。根据质量守恒定律,由 Fe_2O_3 调换成 FeO 应当乘以 0.8998,即 $w(\text{FeO})=0.8998 w(\text{Fe}_2\text{O}_3)$ 。在精度要求不是特别高时,可近似表示为 $w(\text{FeO})=0.9 w(\text{Fe}_2\text{O}_3)$ 。

下面以四个实例(表 3)具体介绍。

表3 氧化铁调整实例(按深成岩)

Table 3 Examples for iron oxide adjustment

样号	SiO ₂	Na ₂ O	K ₂ O	调整前		OX _实	OX _允	是否需要调整	调整后	
				Fe ₂ O ₃	FeO				Fe ₂ O ₃	FeO
实例1	69.62	3.04	4.28	0.28	2.54	0.90	0.57	不需要	0.28	2.54
实例2	63.25	3.68	3.63	3.21	1.56	0.33	0.58	需要	1.94	2.70
实例3	65.92	3.02	4.97	5.65	-	0	0.56	需要	2.35	2.97
实例4	65.92	3.02	4.97	-	5.09	1	0.56	需要	2.35	2.97

实例1: $OX_{实} > OX_{允}$, 不需要调整。

实例2: $OX_{实} < OX_{允}$, 需要调整。方法如下:

$$\textcircled{1} w(\text{Fe}_2\text{O}_3^t) = w(\text{Fe}_2\text{O}_3) + 1.11w(\text{FeO}) = 4.94$$

$$\textcircled{2} w(\text{FeO})/w(\text{FeO} + \text{Fe}_2\text{O}_3) = 0.58 \quad (4)$$

$$1.11w(\text{FeO}) + w(\text{Fe}_2\text{O}_3) = 4.94 \quad (5)$$

③ 联立(4)式和(5)式, 解得 $w(\text{FeO}) = 2.70$, $w(\text{Fe}_2\text{O}_3) = 1.94$ 。

实例3: 因只有三价铁, 故需要调整, 方法同实例2的第②-③步, 也与下列实例4的第②-③步完全一致, 此处从略。

实例4: 只有二价铁, 如果FeO是FeO^t, 则需要调整, 否则不需要调整。调整方法:

$$\textcircled{1} w(\text{Fe}_2\text{O}_3^t) = 1.11w(\text{FeO}) = 5.65$$

$$\textcircled{2} w(\text{FeO})/w(\text{FeO} + \text{Fe}_2\text{O}_3) = 0.56 \quad (6)$$

$$1.11w(\text{FeO}) + w(\text{Fe}_2\text{O}_3) = 5.65 \quad (7)$$

③ 联立(6)式和(7)式, 解得 $w(\text{FeO}) = 2.97$, $w(\text{Fe}_2\text{O}_3) = 2.35$ 。

需要注意的是, 不是所有数据处理都要进行氧化铁调整。下列几种情况是不能进行调整的:

① 凡是要研究岩石的氧化程度, 而不需要计算标准矿物者, 岩石中Fe₂O₃、FeO不应调整。

② 凡是计算标准矿物的岩石, Fe₂O₃不超过理论上限值者, 一般也不需要调整; 只有超过上限值者, 才需要调整。

③ 如果岩石样品足够新鲜, 在分析构造环境有关信息时, 不进行Fe₂O₃、FeO调整。

1.3 挥发份处理

挥发份包括H₂O⁺、H₂O⁻、CO₂及LOI。如果 $w(\text{H}_2\text{O}^+)$ 大于2%, $w(\text{CO}_2)$ 大于0.5%, 或二者总和大于2.5%, 数据不能直接使用。如果知道产生这一结果的原因, 可对其进行相应的处理。如杏仁状玄武岩, 若根据手标本或镜下鉴定结果, 确认杏仁

体是由方解石充填而成, 其分析结果CO₂肯定不低。由于方解石并不是岩浆本身的成分, 因此需从分析结果中予以扣除。此时可根据方解石中 $w(\text{CaO}):w(\text{CO}_2) = 1.27$ 的比例, 扣除由方解石杏仁体带入的CaO, 然后再进行如下的“闭合”处理。

1.4 闭合

也就是将参与计算的全部组分的总和换算成100%, 再求算各组分的百分含量。

2 CIPW 计算方法

2.1 计算过程

[1] 全分析结果的预处理, 包括铁调整、挥发份处理和闭合。

[2] 将预处理后的氧化物除以对应的分子量得到分子数, 如 $w(\text{SiO}_2) = 68.71\%$, 则其分子数为:

$$n(\text{SiO}_2) = w(\text{SiO}_2) / 60.0843 = 68.71 / 60.0843 = 1.14356$$

以下步骤中的分子(元素)都是指分子数(摩尔数)。

[3] 次要组份处理

[3a] 将MnO和NiO的分子数加到FeO的分子数中, 因为Mn与Fe易呈类质同象置换;

[3b] 将SrO、BaO的分子数加到CaO的分子数中。因为Sr、Ba常与Ca进行类质同象置换。

[4] 副矿物计算

[4a] 用3.33倍的CaO与P₂O₅结合形成磷灰石, 如果分析结果中有Cl和F, 则先参与磷灰石的计算。

[4b] Cl和F的副矿物: 如果 $Cl > 0.66 P_2O_5$, Cl先根据磷灰石的量进行核减($Cl' = Cl - 0.66 P_2O_5$), 剩余的Cl(即Cl')形成NaCl; 如果 $Cl < 0.66 P_2O_5$, 则Cl全部进入磷灰石, 不足部分以F来补充, 最后剩

余的 F 组成萤石。如果 $F+Cl < 0.66 P_2O_5$, F、Cl 都进入磷灰石, 就不会出现萤石。

[4c] S 与 FeO 形成黄铁矿, SO_3 与等量 CaO 结合生成无水石膏。

[4d] 如果 $FeO > TiO_2$, 用等量的 FeO 和 TiO_2 形成钛铁矿; 如果 $FeO < TiO_2$, 过量的 TiO_2 和相同量的 CaO (限形成钙长石后剩余的 CaO) 先形成榍石, 如果仍有过量的 TiO_2 , 则形成金红石。

[4e] Cr_2O_3 与等量的 FeO 形成铬铁矿, 如果 FeO 不足, 以 MgO 补充, 形成镁铬铁矿。

[5] K_2O 与等量的 Al_2O_3 结合形成正长石。

[6] 剩余的 Al_2O_3 与等量的 Na_2O 形成钠长石; 若 Al_2O_3 不足, 则跳转到第 [10] 步。

[7] 如果仍有 Al_2O_3 剩余, 则与等量的 CaO 形成钙长石。

[8] 还有 Al_2O_3 多余, 形成刚玉。刚玉的存在是 Al 过饱和的标志。

[9] 如果 CaO 与 Al_2O_3 形成钙长石后有 CaO 剩余, 则形成透辉石中的硅灰石, 见第 [14]、[15] 步。

[10] 与 Al_2O_3 结合形成钠长石后多余的 Na_2O 分配给锥辉石, 这时无钙长石 (An); 如果还有剩余的 Na_2O , 则与 Fe_2O_3 结合形成霞石, 若形成霞石后仍有过剩的 Na_2O , 则形成硅酸钠。

[11] 如果剩余的 $Fe_2O_3 > Na_2O$, 则剩余的 Fe_2O_3 与 FeO 结合形成磁铁矿。

[12] 如果与 FeO 形成磁铁矿后, 仍有 Fe_2O_3 剩余, 则剩余部分形成赤铁矿。

[13] 将 MgO 与剩余的 FeO 合并, 形成 Fm ($Fm = MgO + FeO$), 并根据它们的比例计算出 FmO 的分子量及相应矿物的分子量, 其后用 Fm 生成硅灰石、紫苏辉石及橄榄石。

[14] 计算钙长石后剩余的 CaO 和等量的 Fm 形成透辉石。所以透辉石和硅灰石的出现是 Al 不饱和的标志矿物。

[15] 如果仍有 CaO 剩余, 则形成硅灰石, 因此硅灰石不与紫苏辉石、橄榄石共生。

[16] 如果是 Fm 剩余, 则构成紫苏辉石。[15]、[16] 两个进程只能存在 1 个。

[17] 按照前面所述的分子式比例, 把 SiO_2 分配到榍石、锥辉石、正长石、钠长石、钙长石、透辉

石、硅灰石或紫苏辉石中。

[18] 剩余的 SiO_2 形成石英。石英出现是 SiO_2 过饱和的标志

[19] 如果 SiO_2 不足, 在第 [17] 步中从形成紫苏辉石的 SiO_2 扣除, 这时有剩余, 就按照以下方程将其分配到紫苏辉石和橄榄石中:

$$x = 2S - M, \quad y = M - x$$

x 是紫苏辉石的分子数, y 是橄榄石的分子数, M 是可用的 Fm 的数值, S 是可用的 SiO_2 数值。如果 SiO_2 没有达到 Fm 的一半, 则 Fm 都形成橄榄石。如果 SiO_2 不足, 需要把榍石中的 SiO_2 释放出来, 由榍石释放出的 CaO 和 TiO_2 计算成钙钛矿。

[20] 如果 SiO_2 仍然不足, 将由钠长石转化为霞石释放出的 SiO_2 来补充。

$$x = (s - 2n) / 4, \quad y = n - x$$

式中 x 是钠长石的分子数, y 是霞石的分子数, n 是可用的 Na_2O , s 是可用的 SiO_2 数值。

[21] 如果第 [20] 步中的 SiO_2 未达到 Na_2O 的两倍, 则 Na_2O 都形成霞石。不足的 SiO_2 是通过将部分钾 (正) 长石转变为石榴石而获得。如果全部钾长石释放出的硅仍不以满足 Fm 形成橄榄石的需要, 即 SiO_2 仍然不足, 需要依次将硅灰石转变为斜硅钙石、以及将透辉石分解为斜硅钙石 + 橄榄石并释放出 SiO_2 来补充。如果 SiO_2 还是不足, 则将形成的橄榄石转变为方铁矿 (Fe, Mg)O。

[22] 用标准矿物分子数乘以其分子量获得最后的标准矿物质量百分数。如果要计算标准矿物的体积百分数, 则将质量分数除以各矿物的密度, 然后计算各矿物的相对百分数。之所以要将质量分数转变为体积分数, 是因为: 我们通常使用的实际矿物 (如 QAP 分类图解) 都是镜下鉴定给出的结果, 而镜下鉴定与统计结果都是以矿物的体积分数表示的。

以上过程用计算机的流程图可表示为图 1。

此外, 在标准矿物的具体应用过程中还涉及到数据的进一步处理, 如钠长石 (Ab) 在自然界并不是一个可以独立存在的矿物, 其中一部分与钾长石呈类质同像, 形成钾长石, 另一部分与钙长石类质同像, 形成斜长石。这就存在钠长石在钾长石与钙长石中的分配比例问题。

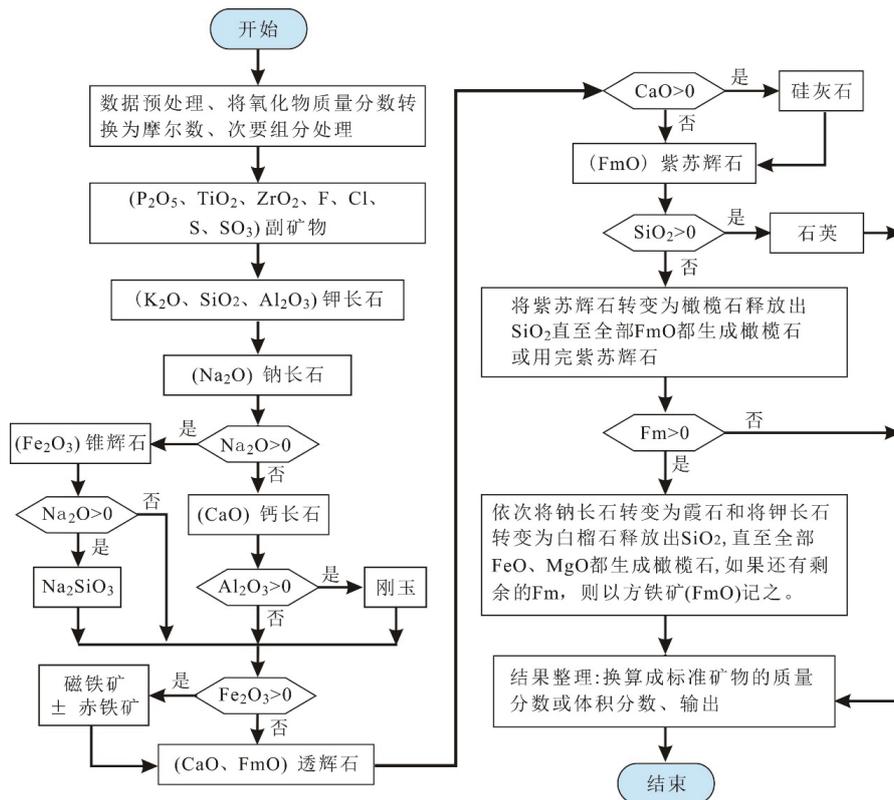


图1 CIPW 标准矿物计算流程图

Fig. 1 Flow chart of CIPW Norm Mineral calculation

说明:括号中的氧化物(元素)是当前过程需要引入的组分,副矿物计算部分也还需要使用部分主量组分,图中未列出.在计算透辉石前,将MgO与FeO合并为一个参数($FmO = MgO + FeO$),并计算硅酸盐矿物的镁指数($MgO' = MgO/FmO$)及FmO与相关矿物的分子量.

(1)关于钠长石的分配问题,不同学者采用的方法有所不同。对此,刘宝良^[26]曾对多种方法做过对比研究,认为按如下方案将Ab分配到碱性长石(A)和斜长石(P)中比较合理:

$A = Or \times T$, $P = An \times T$, 其中 $T = (Or + An + Ab) / (Or + An)$

(2)关于斜长石的牌号($An\%$)计算,有 $An\% = An / (An + Ab) \times 100$ 和 $An\% = An / (An + 2Ab) \times 100$ 两种算法。本文采用第二种算法,因为斜长石的分子式可以看作是由两个 Na^+ 替换钙长石的一个 Ca^{2+} 而构成,也就是两个钠长石分子相当于一个钙长石分子。但无论是采用哪种算法,式中的Ab都应该是分配到斜长石中的Ab,而不是全部Ab,也就是 $An\% = An / [An + 2(P - An)] \times 100$ 。

2.2 几点改进说明

本程序的计算过程对传统的计算方法做了如下几处修改:

(1)F、Cl的处理:以往学者介绍的方法都是把Cl分配给NaCl,F分配给萤石来处理,但在[4b]中,Geokit软件在计算时优先将Cl和F分配给磷灰石,只有剩余的Cl、F才形成岩盐和萤石。这是因为岩浆岩中基本不会出现岩盐,而磷灰石中可以含有F、Cl和OH。

(2)很多计算方法中, SO_3 优先与 Na_2O 结合生成无水芒硝,在Geokit中改为优先生成无水石膏,这是因为在岩浆岩中,无水芒硝存在的可能性远小于无水石膏;

(3)为保证各种氧化物(离子)在极端富集的情况下有归宿,CIPW标准矿物系统设置了一些矿物作为这些剩余组分的归宿,此处称之为终结矿物。如剩余的 SiO_2 以石英的形式存在,其它组分分别是: TiO_2 为金红石, Al_2O_3 为刚玉, Fe_2O_3 为赤铁矿, CaO 为硅灰石, Na_2O 为硅酸钠, K_2O 是硅酸钾;而 P_2O_5 本来就是作为副矿物磷灰石来处理的,当

然这些终结矿物大部分是合理的,在岩浆岩中也是广泛存在的,如石英、金红石、刚玉和磷灰石等。作者注意到,这其中只有剩余的 FeO(MgO) 没有终结矿物。因此,Geokit 在第 [21] 步时设置了一个方铁矿 Fe(Mg)O。实际上,在富铁玄武岩和粗面岩及隕石中确实存在方铁矿,国家岩矿化石标本资源共享平台网站对此矿物有专门的介绍^[27],另外在一些幔源岩浆岩中也发现了该矿物的存在^[28-31]。

3 CIPW 计算结果的检查

标准矿物计算完成后要对计算结果进行检查,即要对计算结果的正确性作判断。判断标准是:

(1) 所有矿物不能出现负值。

(2) 矿物总量(质量分数)在没有对原始数据进行闭合时应与氧化物总量基本一致(±0.02%);如果做了闭合处理,则总量应接近 100%(±0.02%),所产生的误差一部分是由小数部分四舍五入导致的结果,另一部分是部分矿物的分子量计算不够严密导致的,如 MnO、NiO 加入到 FeO 中有时是以 FeO 的分子量来计算的(尽管两者很接近)。至于磷灰石中由于 Cl、F 的加入而引起磷灰石分子量的变化,SrO、BaO 加入到 CaO 中引起含钙矿物分子量的变化,程序中都已做了相应的处理,不会再产生新的误差。

经上述步骤计算得到岩石的标准矿物组合,不同的矿物组合代表了不同的岩石类型,通过表 4 可对计算结果的正确性作出相应的判断。

需要注意的是,由 CIPW 计算出的矿物是理想(标准)的矿物,与实际矿物存在一定的差异。如在矿物种类方面:花岗岩中常见的角闪石和黑云母没有计算。因此,CIPW 计算较适用于中基性及超基性岩石,对花岗质岩石来说比较有用的是对长英质矿物的评价以及铝饱和度的评价。此外,自然界多数矿物存在类质同象置换,如在透辉石中有少量 Al₂O₃ 和 Na₂O。CIPW 计算也不涉及岩石的结构,故不能用于岩石的命名(但专门用标准矿物建立的分类方法除外)。如果确实需要用标准矿物代替实际矿物投影到相关的图解中,建议用标准矿物的体积分数。

4 程序使用简介

CIPW 标准矿物计算是作者开发的 Geokit 软件中的组成部分之一。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 CIPW 标准矿物计算工作簿后,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 5)。

表 4 CIPW 标准矿物组合一览表(不包括副矿物)

Table 4 Assemblages of CIPW Norm minerals (excluding accessory minerals)

标准矿物组合 SiO ₂ 饱和程度	岩石类型		正常类型		铝过饱和类型		碱过饱和类型	
	Q	Di	Q	Hy	Q	Ac	Or	Di
硅过饱和 $n(\text{SiO}_2) > n(\text{MgO}' + \text{FeO}')$	Or	Di	Q	Hy	Q	Ac	Or	Di
	Ab	Hy	Ab	Hy	Ab	Hy	Ab	Hy
	An		An		An			
硅低度不饱和 $n(\text{MgO}' + \text{FeO}') > n(\text{SiO}_2) > n(\text{MgO}' + \text{FeO}')/2$	Or	Di	Q	Hy	Q	Ac	Or	Ac
	Ab	Hy	Ab	Hy	Ab	Di	Ab	Di
	An	Ol	An	Ol	An	Hy		Hy
			C		C	Ol		Ol
硅极度不饱和 $n(\text{SiO}_2) < n(\text{MgO}' + \text{FeO}')/2$	Or		Q		Q	Ac	Or	Ac
	Ab		Ab		Ab	Di	(Ab)	Di
	An	Ol	An	Ol	An	Hy	Ne	Ol
	Ne		Ne		Ne	Ol	(Lc)	
			C		C			

注: $n(\text{MgO}' + \text{FeO}')$ 为第 [15] 步后剩余值;有括号的矿物代表可有可无。



图2 Geokit 菜单中的 CIPW 标准矿物及岩石化学参数计算菜单项

Fig. 2 Menu item for CIPW Norm minerals and petrochemical parameter calculation in geokit



图3 CIPW 标准矿物计算的用户工具栏

Fig. 3 User toolbar of CIPW Norm mineral calculation

表5 CIPW 标准矿物数据格式及示例数据

Table 5 Data format and examples for CIPW

样号	岩性	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	CO ₂	SO ₃	S	F	Cl	Sr	Ba	Ni	Cr	Zr
1	花岗岩	71.27	0.25	14.25	1.24	1.62	0.08	0.80	1.62	3.79	4.03	0.16	0.33									
3	二云母花岗岩	74.32	0.12	13.60	0.90	1.24	0.09	0.55	0.79	3.12	4.52	0.10	0.00									
8	石英斑岩	72.88	0.32	14.15	0.84	1.43	0.06	0.69	1.66	3.77	2.61	0.10	0.67									
10	花岗闪长岩	64.98	0.52	16.33	1.98	2.49	0.09	1.94	3.70	3.67	2.95	0.32	0.29									
11	英安岩	65.70	0.65	15.24	2.88	1.56	0.10	1.54	4.00	3.13	2.83	0.16	0.00									

点击工具栏中的开始计算按钮,会弹出一个选项窗口(图4)。选项窗口包括数据预处理(铁调整、闭合)及标准矿物的输出方式。选定后点击窗口中

的确定,即可完成当前工作表中所有样品的 CIPW 标准矿物及岩石化学参数计算,并将计算结果显示在同一工作簿的新工作表中。



图4 CIPW 标准矿物计算条件设置窗口

Fig. 4 Initial window for CIPW Norm mineral calculation

除标准矿物外, 计算结果中还给出了如下标准矿物和岩石化学参数: 碱性长石 (A)、斜长石 (Pl)、斜长石牌号 (An%)、分异指数 (DI)、颜色指数 (CI)、固结指数 (SI)、A/NK、A/CNK、AR、 σ ($\sigma 43$ 、 $\sigma 25$)、R1、R2、F1、F2、F3、A/MF、C/MF 等, 其中:

$$\text{分异指数: } DI = Qz + Or + Ab + Ne + Lc + Kp$$

$$\text{颜色指数: } CI = Ol + Di + Hy + Mt + il + Hm + Cm$$

$$\text{固结指数: } SI = w(\text{MgO}) \times 100 / w(\text{MgO} + \text{FeO} + \text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O})$$

$$A/NK = n(\text{Al}_2\text{O}_3) / n(\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O});$$

$$A/CNK = n(\text{Al}_2\text{O}_3) / n(\text{CaO} + \text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O});$$

$$\text{碱度率: } AR = w[\text{Al}_2\text{O}_3 + \text{CaO} + (\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O})] / w[\text{Al}_2\text{O}_3 + \text{CaO} - (\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O})];$$

当 $w(\text{SiO}_2) > 50$, $w(\text{K}_2\text{O}) / w(\text{Na}_2\text{O})$ 大于 1 而小于 2.5 时, $w(\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O}) = 2w(\text{Na}_2\text{O})$;

里特曼指数 σ : $\sigma 43 = w(\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O})^2 / [w(\text{SiO}_2) - 43]$; 适用于大多数岩石类型。 $\sigma 43$ 可写作 σ 。

$\sigma 25 = w(\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O})^2 / [w(\text{SiO}_2) - 25]$; 适用于 $w(\text{SiO}_2) < 43$ 的超基性岩

$$R1 = 4n(\text{Si}) - 11n(\text{Na} + \text{K}) - 2n(\text{Fe} + \text{Ti}); R2 = 6n(\text{Ca}) + 2n(\text{Mg}) + n(\text{Al})$$

$$F1 = 0.0088 w(\text{SiO}_2) - 0.00774 w(\text{TiO}_2) + 0.0102 w(\text{Al}_2\text{O}_3) + 0.0066 w(\text{FeO}^{\text{I}}) - 0.0017 w(\text{MgO}) - 0.0143 w(\text{CaO}) - 0.0155 w(\text{Na}_2\text{O}) - 0.0007 w(\text{K}_2\text{O});$$

$$F2 = -0.013 w(\text{SiO}_2) - 0.0185 w(\text{TiO}_2) - 0.0129 w(\text{Al}_2\text{O}_3) - 0.0134 w(\text{FeO}^{\text{I}}) - 0.03w(\text{MgO}) - 0.0204 w(\text{CaO}) - 0.048 w(\text{Na}_2\text{O}) + 0.0715 w(\text{K}_2\text{O});$$

$$F3 = -0.0221 w(\text{SiO}_2) - 0.0532 w(\text{TiO}_2) - 0.0361 w(\text{Al}_2\text{O}_3) - 0.0016 w(\text{FeO}^{\text{I}}) - 0.031 w(\text{MgO}) - 0.0237 w(\text{CaO}) - 0.0614 w(\text{Na}_2\text{O}) - 0.0289 w(\text{K}_2\text{O});$$

$$A/MF = n(\text{Al}_2\text{O}_3) / n(\text{FeO}^{\text{I}} + \text{MgO}); C/MF = n(\text{CaO}) / n(\text{FeO}^{\text{I}} + \text{MgO})$$

需要注意的是, 这些参数并不总是有用, 不需

要把所有的参数都列到论文(报告)中, 如 $\sigma 25$ 一般不会用到。

F1、F2 和 F3 只适用于基性岩, 而且只有在用到 F1-F2, F2-F3 构造环境判别图^[32]时才有用。

R1 和 R2 只适用于花岗岩类, 而且只有在同一篇文章(报告)中用到 R1-R2 图解^[33-34]时, 该参数才需要给出, 否则不应该出现在表中。

A/MF 和 C/MF 两参数只有在论文(报告)中用到 A/MF-C/MF 图解^[35]时, 才需要列出。

总之, 只有论文(报告)中用到的参数才列出, 否则不应该列出, 避免出现冗余参数。

5 计算实例与对比

作者开发的 Geokit 软件工具包中包含 CIPW 计算模块, 目前已有众多用户在使用。

为说明软件的可靠性, 这里给了部分样品的计算实例, 并与前人的结果进行对比(表 6)。表 6 中数据引自南京大学地质系矿物岩石学教研室的 1980 年版《火成岩岩石学》^[9]的附录七(中国岩浆岩平均值及 CIPW 标准矿物成分), 样号为原书附录七中的样品序号; 原表中同时也给出了每件样品的 CIPW 标准矿物值。为与原书计算结果进行对比, 本文在进行 CIPW 标准矿物计算时没有进行氧化铁校正, 也没有对成分数据进行闭合。

可以看出, 本文对绝大部分样品的计算结果与原文一致, 仅个别标准矿物与原文有差异。经检查发现, Geokit 计算结果与原文明显不同的样品, 原文中标准矿物的总量与氧化物总量有显著差异, 而在用 Geokit 计算的结果, 矿物总量与氧化物的总量是一致的。这说明这些样品可能是原文数据存在错录(如 22 号样品中的石英)或漏录(如 11 号样品中的赤铁矿)现象。

表 6 CIPW 标准矿物计算实例

Table 6 Calculation examples and comparison of CIPW norm minerals and comparison

样号	1	3	8	10	11	12	14	15	18	21	22	25	26	27	29
岩性	花岗岩	二云母花岗岩	石英斑岩	花岗闪长岩	英安岩	石英二长岩	石英闪长岩	安山岩	辉石安山岩	辉石正长岩	粗面岩	苏长辉长岩	玄武岩	白榴玄武岩	粗面玄武岩
SiO ₂	71.27	74.32	72.88	64.98	65.7	65.74	60.15	56.75	55.25	57.92	64.33	48.79	48.28	46.83	49.16
TiO ₂	0.25	0.12	0.32	0.52	0.65	0.75	0.73	0.76	0.52	0.85	0.51	1.01	2.21	2.48	2.19

续表 6

样号	1	3	8	10	11	12	14	15	18	21	22	25	26	27	29
Al ₂ O ₃	14.25	13.60	14.15	16.33	15.24	15.89	16.70	18.65	20.22	17.50	16.03	12.90	14.99	13.16	14.76
Fe ₂ O ₃	1.24	0.90	0.84	1.89	2.88	1.87	2.84	3.58	3.75	3.17	2.49	3.63	4.18	4.85	3.44
FeO	1.62	1.24	1.43	2.49	1.56	2.52	3.49	3.26	3.28	2.57	3.17	10.57	6.95	6.37	6.99
MnO	0.08	0.09	0.06	0.09	0.10	0.13	0.14	0.15	0.08	0.09	0.16	0.30	0.20	0.11	0.13
MgO	0.80	0.55	0.69	1.94	1.54	1.67	2.54	3.42	3.51	1.76	0.31	8.34	7.00	8.22	7.06
CaO	1.62	0.79	1.66	3.70	4.00	3.27	4.63	6.97	8.12	5.54	1.30	9.43	8.07	8.07	7.70
Na ₂ O	3.79	3.12	3.77	3.67	3.13	3.29	3.68	3.07	2.57	5.51	5.43	2.21	3.40	3.53	3.53
K ₂ O	4.03	4.52	2.61	2.95	2.83	3.67	2.65	2.01	1.34	4.49	5.35	0.81	2.51	4.18	2.88
P ₂ O ₅	0.16	0.10	0.10	0.32	0.16	0.20	0.46	0.49	0.56	0.31	0.09	0.23	0.60	0.95	0.74
CO ₂	0.33		0.67	0.29		0.34	0.75	0.15			0.54	0.24	0.35		0.51
合计	99.44	99.35	99.18	99.17	97.79	99.34	98.76	99.26	99.20	99.71	99.71	98.46	98.74	98.75	99.09
石英	29.72	35.96	37.80	22.16	26.25	23.60	16.82	12.02	13.11		9.28				
(Q)	29.73	35.97	37.81	22.17	26.21	23.65	17.19	12.03	13.11		3.29				
钙长石	4.91	3.27	3.35	14.43	18.80	12.77	15.22	30.43	36.63	9.76	2.45	22.89	18.23	7.72	15.92
(An)	4.91	3.27	3.35	14.43	18.80	12.77	15.22	30.43	36.62	9.76	2.45	22.89	18.23	7.72	15.92
钠长石	32.07	26.40	31.90	31.05	26.49	27.84	31.14	25.98	21.75	42.40	45.95	18.70	27.36	11.35	28.45
(Ab)	32.07	26.40	31.90	31.05	26.48	27.84	31.14	25.98	21.74	42.46	45.94	18.70	27.36	11.35	28.45
正长石	23.82	26.71	15.42	17.43	16.72	21.69	15.66	11.88	7.92	26.53	31.62	4.79	14.83	24.70	17.02
(Or)	23.81	26.71	15.42	17.43	16.72	21.69	15.66	11.88	7.92	26.53	31.61	4.79	14.83	24.70	17.02
霞石										2.29			0.76	10.03	0.77
(Ne)										2.25			0.76	10.03	0.77
刚玉	1.85	2.38	3.90	1.81	0.14	1.83	2.20	0.27	1.12		0.41				
(C)	1.85	2.38	3.89	1.81	0.14	1.83	2.20	0.22	1.12		0.41				
透辉石										11.08		17.10	12.57	20.69	11.43
(Di)										11.08		17.10	12.57	20.70	11.43
紫苏辉石	3.68	2.87	3.23	7.15	3.84	6.25	9.44	10.57	10.96		3.99	24.12			
(Hy)	3.68	2.87	3.23	7.15	3.91	6.17	9.44	10.57	10.95		3.99	24.12			
硅灰石										0.72					
(Wo)										0.72					
橄榄石												2.61	12.54	10.31	13.48
(Ol)												2.61	12.54	10.31	13.48
钛铁矿	0.47	0.23	0.61	0.99	1.23	1.42	1.39	1.44	0.99	1.61	0.97	1.92	4.2	4.71	4.16
(Il)	0.47	0.23	0.61	0.99	1.23	1.42	1.39	1.44	0.99	1.61	0.97	1.92	4.20	4.71	4.16
磁铁矿	1.80	1.30	1.22	2.74	3.47	2.71	4.12	5.19	5.44	4.60	3.61	5.26	6.06	7.03	4.99
(Mt)	1.80	1.30	1.22	2.74	3.47	2.71	4.12	5.19	5.44	4.60	3.61	5.26	6.06	7.03	4.99
赤铁矿				0.49											
(Hm)				0.49											
磷灰石	0.37	0.23	0.23	0.74	0.37	0.46	1.07	1.13	1.30	0.72	0.21	0.53	1.39	2.20	1.71
(Ap)	0.37	0.23	0.23	0.74	0.37	0.46	1.07	1.14	1.30	0.72	0.21	0.53	1.39	2.20	1.71
方解石	0.75		1.52	0.66		0.77	1.71	0.34			1.23	0.55	0.80		1.16
(Cc)	0.75		1.52	0.66		0.77	1.71	0.34			1.23	0.55	0.80		1.16
合计	99.44	99.35	99.18	99.17	97.79	99.34	98.77	99.25	99.21	99.70	99.71	98.47	98.74	98.74	99.09
	99.44	99.36	99.18	99.17	97.33	99.31	99.14	99.22	99.19	99.73	93.71	98.47	98.74	98.75	99.09

注:为方便与原文数据进行对比,本表中所有样品在计算时未作铁校正和闭合处理.原文中有H₂O的分析数据,此处未录入,表中氧化物总量也不包括H₂O的量;每个标准矿物有两行数据,第一行为Geokit的计算结果,第二行为原文中的数据.

为进一步验证 Geokit 软件中 CIPW 计算方法的可靠性,我们还与近年一些学者开发的软件的计算结果进行了比对。表 7 中的实例数据取自 Pruseth^[18],由对比结果可以看出,Geokit 计算的结果与 Pruseth^[18]的 New Formulas 程序和 Verma 等^[16]

的 SINCLAS 程序的计算结果是完全一致的。将该组数据利用 Lowenstern(2002)^[15]的 NormCalc JBL 程序进行计算,个别矿物存在 ± 0.01 的差异。需要说明的是,因氧化物的分析精度只能到小数点后两位,因此标准矿物也只能保留两位小数。

表 7 Geokit 计算的 CIPW 标准矿物与前人软件计算结果的对比

Table 7 Comparison of CIPW norm minerals calculated by Geokit with other softwares

氧化物	含量 (Wt%)	CIPW 标准矿物				
		标准矿物	Geokit	New Formulas ^[18]	SINCLAS*	NormCalc_JBL ^[15]
SiO ₂	44.906	Or	1.81	1.814	1.814	1.81
TiO ₂	2.709	Ab	15.57	15.569	15.569	15.57
Al ₂ O ₃	14.945	An	31.61	31.612	31.612	31.61
Fe ₂ O ₃	1.927	Di	16.47	16.471	16.471	16.48
FeO	12.85	Hy	7.63	7.629	7.629	7.64
MnO	0.215	Ol	18.14	18.136	18.135	18.13
MgO	9.057	Mt	2.79	2.793	2.794	2.79
CaO	10.887	Il	5.15	5.145	5.145	5.15
Na ₂ O	1.84	Ap	0.83	0.832	0.829	0.83
K ₂ O	0.307					
P ₂ O ₅	0.36					
合计	100.003		100.00	100.001	99.998	100.02

*注: SINCLAS 的计算结果引自文献 [17],表中氧化物及前人的计算的标准矿物仍按原文保留小数后 3 位。

6 结语

CIPW 标准矿物计算方法历经一百多年,至今仍具有相当的生命力,其在岩浆岩研究中具有重要的意义。然而国内在相关的软件开发方面仍然存在不足。本文介绍的由作者开发的 CIPW 计算程序,经与前人的计算结果对比,证明了程序的可靠性。因而,Geokit 软件之 CIPW 计算程序可以很好地服务于广大地学工作者。

参考文献:

- [1] Cross C W, Iddings J P, Pirsson L V, Washington H S. A quantitative chemico-mineralogical classification and nomenclature of igneous rocks[J]. The Journal of Geology, 1902, 10(6): 555-690.
- [2] Cross C W, Iddings J P, Pirsson L V, Washington H S. Quantitative classification of igneous rocks [M]. Chicago: University of Chicago Press, 1903.
- [3] Kelsey C H. Calculation of the CIPW norm[J]. Miner-

alogical Magazine, 1965, 34: 276-282.

- [4] Streckeisen A, Le Maitre R W. A Chemical approximation to modal QAPF classification of the igneous rocks[J]. Neus Jahrbuch fur Mineralogie, 1979, 136(2): 169-206.
- [5] Whalen J B and Frost C D. The Q-ANOR diagram: a tool for the petrogenetic and tectonomagmatic characterization of granitic suites[C]. Geological Society of America Abstracts with Programs, 23, 45(3):24. <https://www.researchgate.net/publication/257137199>.
- [6] Irvine T N, Baragar W R A. A Guide to the Chemical Classification of the Common Volcanic Rocks [J]. Canadian Journal of Earth Sciences, 1971, 8(5): 523-548.
- [7] 邱家骧. 碱度在火山岩岩石学及地质学上的意义 [J]. 地质与勘探, 1982, (4): 2-10.
- [8] O' Connor J T. A classification for quartz-rich igneous rocks based on feldspar ratios [G]. U.S. Geol. Surv. Prof. Paper, 1965, 525B, B79-B84.
- [9] 南京大学地质系矿物岩石学教研室. 火成岩岩石学 [M]. 北京:地质出版社, 1980.

- [10] 邱家骧. 岩浆岩岩石学 [M]. 北京:地质出版社, 1985.
- [11] 邱家骧. 应用岩浆岩岩石学 [M]. 北京:地质出版社, 1991.
- [12] 邱家骧, 林景仟. 岩石化学 [M]. 北京:地质出版社, 1991:1-276.
- [13] Best M G. Igneous and Metamorphic Petrology (2nd ed.) [M]. Oxford: Blackwell, 2003:661-665.
- [14] Bickel C E. The CIPW Normative Calculation[J]. Journal of Geological Education, 1979, 27:80-82.
- [15] Lowenstern J B. CIPW norm calculation software. USGS[OL]. 2000, http://volcanoes.usgs.gov/observatories/yvo/jlowenstern/other/software_jbl.html.
- [16] Verma S P, Torres-Alvarado I S, Sotelo-Rodríguez Z T. SINCLAS: Standard igneous norm and volcanic rock classification system[J]. Computers and Geosciences, 2002, 28(5): 711-715.
- [17] Zhou J B, Li X H. GeoPlot: An Excel VBA program for geochemical data plotting[J]. Computers & Geosciences, 2006, 32: 554-560.
- [18] Pruseth K L. Calculation of the CIPW Norm: New Formulas[J]. Journal of Earth System Science, 2009, 118(1): 101-113.
- [19] Al-Mishwat A T. Cipwfull: a Software Program for Calculation of Comprehensive CIPW Norms of Igneous Rocks[J]. Mathematical Geosciences, 2015, 47(4): 441-453.
- [20] González-Guzmán R. NORRRM: A Free Software to Calculate the CIPW Norm[J]. Open Journal of Geology, 2016, 6: 30-38. <http://dx.doi.org/10.4236/ojg.2016.61004>.
- [21] Hollocher K. NORM4 macro-enabled version for multiple samples[OL]. 2019. http://minerva.union.edu/hollochkc_petrology/other_files/norm4.xlsx.
- [22] Johannsen A. A Descriptive Petrography of the Igneous Rocks[M]. Chicago: University of Chicago Press, 1931.
- [23] 路远发. Pb-Sr-Nd-Hf 同位素参数计算及程序设计 [J]. 华南地质, 2021 37(2):233- 245.
- [24] 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.
- [25] Le maitre R W. Some Problems of the Projection of Chemical Data Into Mineralogical Classifications[J]. Contributions to Mineralogy and Petrology, 1976, 56(2): 181-189.
- [26] 刘宝良. CIPW 标准矿物计算法应用时存在问题的探讨 [J]. 地质与资源, 2001, 10(3): 180-184.
- [27] 国家岩矿化石标本资源共享平台, 方铁矿 [OL].<http://www.nimrf.cugb.edu.cn/kwx/detail?id=2923>.
- [28] 李仔栓. 甘肃金川铜镍矿矿相学、成岩与成矿关系研究 [D]. 中国地质大学 (北京) 硕士学位论文, 2018.
- [29] 白文吉, 杨经绥, 施倪承, 方青松, 代明泉, 熊明, 颜秉刚. 西藏罗布莎蛇绿岩地幔岩中首次发现超高压矿物方铁矿和自然铁 [J]. 地质论评, 2004, 50 (2):184-188.
- [30] 白文吉, 任玉峰, 杨经绥, 方青松, 颜秉刚, 戎合. 记录地幔中存在氧元素的自然铁 - 方铁矿组合 [J]. 地球学报, 2006, 27(1):43-49.
- [31] 赵元艺, 李小赛, 刘妍, 汪傲, 郭硕. 西藏申扎侧波积异地区深源喷出型铁钴镍矿石的发现及意义 [J]. 地球科学与环境学报, 2013, 35(03):1-19.
- [32] Pearce J A. Statistical Analysis of Major Element Patterns in Basalts[J]. Journal of Petrology, 1976, 17(1): 15-43.
- [33] De la Roche H, Leterrier J, Grandclaude P, Marchal M. A classification of volcanic and plutonic rocks using R1R2-diagram and major-element analyses -- Its relationships with current nomenclature[J]. Chemical Geology, 1980, 29: 183-210.
- [34] Batchelor R A and Bowden P. Petrogenetic Interpretation of Granitoid Rock Series Using Multicationic Parameters[J]. Chemical Geology, 1985, 48: 43-55.
- [35] Alther R, Holl A, Hegner E, Langer C, Kreuzer H. High-potassium, calc-alkaline I-type plutonism in the European Variscides: Northern Vosges (France) and northern Schwarzwald (Germany) [J]. Lithos, 2000,50(1):51-73.