岩浆岩综合碱度指数 (CAI) 的计算方法和意义

邹海波 徐洪武 周新民

(南京大学地球科学系)

根据酸碱电子理论、软硬酸碱理论,可以得到岩浆岩综合碱度指数(CAI)的计算公式,即 $CAI = 0.98 \times X_{TiO_2} + 3.62 \times X_{Al_2O_3} + 2.95 \times X_{Fe_2O_3} + 6.54 \times X_{FeO} + 4.96 \times X_{MnO} + 7.11 \times X_{MgO} + 8.32 \times X_{CaO} + 12.07 \times X_{Na_2O} + 13.05 \times X_{K_2O}$,其中 X 是摩尔分数。CAI值可以更准确地反映岩浆岩的碱性程度,据CAI划分岩浆岩的类型具有许多优点。

关键词:酸碱电子理论;软硬酸碱理论;综合碱度指数(CAI)

岩浆岩岩石学根据SiO₂含量、全碱饱和程度以及所含长石的性质和数量,将岩浆岩划分为五大类:超基性岩、基性岩、中性岩、酸性岩和碱性岩。这里所指的全碱是指(K₂O+Na₂O)总含量(重量百分数)。岩浆岩岩石学中皮科克(Peacock)钙碱系数、里特曼(Rittmann)指数、莱特(Wright)碱率度可以反映岩系的碱性程度。在这3个岩系指数中亦是用(K₂O+Na₂O)作为全碱含量。我们可以发现岩石学中的酸碱概念与化学中的酸碱概念有所不同,为了实现二者的统一,殷纯焜等(1985)根据酸碱的质子理论,提出用相对羟基亲合能作为矿物和岩石的酸碱度指标^[1],但这样计算出的参数仍是以水溶液的反应为基础,其含义和应用范围有一定局限性。王希渠(1988)基于酸碱电子论,用各金属氧化物与SiO₂的反应焓值作为它们相对于SiO₂对矿物和岩石相对碱度的贡献,综合各氧化物的碱度贡献便可得到

矿物和岩石的相对碱度值^[2]。但这种计算所用的反应焓变不应当用标准焓变 ΔH_0 ,而应当用发生反应的温度条件下的反应焓变 $\Delta H_T = \Delta H_0 + \int_{298}^T \Delta C_p \cdot dT$,并且该计算使橄榄石与花岗闪长岩的相对碱度近似,而且Al³⁺、Fe³⁺、Ti⁴⁺对碱度的贡献难于计算。本文从酸碱电子论出发,依据戴安邦(1978)提出的酸碱软硬度的势标度^[3],提出一种新的岩浆岩碱度指数——综合碱度指数CAI(Comprehensive Alkalinity Index)的计算方法。

1. 综合碱度指数CAI的计算方法

(1) 酸碱软硬度的势标度及亲强 化学酸碱概念由酸碱水离子论、酸碱质子论发展到酸碱电子论。电子论的酸碱又称广义酸碱,可由通式 $A^+ : B \rightarrow A : B$ 表示。广义酸碱包括的物质种类极为广泛,绝大多数的化合物都可看作酸碱的加合物。在广义酸碱电子论的基础上, Pearson (1968)提出了软硬酸碱的概念和“软亲软、硬亲硬”的软硬酸

综合碱度指数计算资料*

表 1

	Si ⁴⁺	Ti ⁴⁺	Al ³⁺	Fe ³⁺	Fe ²⁺	Mn ²⁺	Mg ²⁺	Ca ²⁺	Na ⁺	K ⁺
P_A	3.7	3.48	2.89	3.04	-0.83	-0.30	2.11	1.84	1.00	0.78
$P_{A-O^{2-}}$	1.654	1.556	1.292	1.359	0.149	0.053	0.943	0.822	0.447	0.349
$P_{Al_1O-OH^-}$	6.45	6.07	5.04	5.30	0.09	0.03	3.68	3.21	1.74	1.36
$\lg K_1(A-OH^-)$	—	—	—	—	4.52	3.9	2.53	1.51	0.57	—
$P'_{A-O^{2-}}$	1.654	1.556	1.292	1.359	1.000	1.158	0.943	0.822	0.447	0.349
C_A	0	0.98	3.62	2.95	6.54	4.96	7.11	8.32	12.07	13.05

* $P_{O^{2-}} = -3.35$, P_A 据戴安邦^[3], —表示没有数据。

碱原理^[4],但这只是个经验的定性总结。关于酸碱的软硬标度,许多学者进行了探讨^[5,6],但没有一个定量指标把酸碱的软硬性和它们的化学性质结合起来。1978年戴安邦提出了势标度的概念,并用势标度表达酸碱软硬度,不用任何经验参数可算出与酸碱加合物稳定性具有联系的酸碱相亲强度。酸碱软硬度的势标度公式为:

$$SH_A = \sum I \cdot P_n / n - 2.5 \times Z^* / r_c - 1$$

$$SH_B = \sum E \cdot A_n / n - 5.68 \times Z^* / r_c + 30.3g$$

式中 SH_A 、 SH_B 分别是酸碱的软硬度; $\sum I \cdot P_n$ 为 n 级电离势的加和; $\sum E \cdot A_n$ 为 n 级电子亲合势的加和; Z^* 为原子的有效核电荷; r_c 为共价半径; Z^* / r_c 为原子势。

为了使酸和碱的亲势大致相等,令 $P_A = \sqrt{SH_A}$ 、 $P_B = SH_B$,则酸碱加合物的亲强 P_{AB} 为:

$$P_A > 0 \text{ 时, } P_{AB} = P_A \left(\frac{P_B}{6.06} \pm 1 \right) \quad (1)$$

$$P_A < 0 \text{ 时, } P_{AB} = P_A \left(\frac{P_B}{4.08} \pm 1 \right) \quad (2)$$

公式中 P_A 、 P_B 同号时用“-”号,异号时用“+”号。

表1列出了岩浆岩中主要的10种阳离子的 P_A 值、 $P_{A-O^{2-}}$ 、 P_{A-OH^-} 值。

P_{AB} 基本上能反映酸碱加合物的稳定性,并可与大多数酸碱加合物的 $\lg K_1$ 相比较。但对于 Fe^{2+} 、 Mn^{2+} 这两个过渡元素离子来

说,它们的 P_{AB} 与 $\lg K_1$ 相差较大(见表1),出现这种差距的原因主要在于软硬酸碱理论还不十分完善^[3]。

为了获得较客观的 $P_{Mn^{2+}-O^{2-}}$ 、 $P_{Fe^{2+}-O^{2-}}$ 值,笔者采用 $Fe^{2+}-OH^-$ 、 $Mn^{2+}-OH^-$ 的 $\lg K_1$ 代替 $P_{Fe^{2+}-OH^-}$ 、 $P_{Mn^{2+}-OH^-}$,即令:

$$P'_{Fe^{2+}-OH^-} = \lg K_1(Fe^{2+}-OH^-)$$

$$P'_{Mn^{2+}-OH^-} = \lg K_1(Mn^{2+}-OH^-)$$

据公式(1)、(2)可得:

$$\frac{P'_{Mn^{2+}-O^{2-}}}{P'_{Mn^{2+}-OH^-}} = \frac{P_{Al^{3+}-O^{2-}}}{P_{Al^{3+}-OH^-}}$$

$$\frac{P'_{Fe^{2+}-O^{2-}}}{P'_{Fe^{2+}-OH^-}} = \frac{P_{Al^{3+}-O^{2-}}}{P_{Al^{3+}-OH^-}}$$

代入相应数据可得:

$$P'_{Mn^{2+}-O^{2-}} = 1.158$$

$$P'_{Fe^{2+}-O^{2-}} = 1.000$$

对于 Mn^{2+} 、 Fe^{2+} 以外的阳离子,其 $P'_{AB} = P_{AB}$,从而也将修正以后的岩浆岩10种阳离子的 P'_{AB} 值列于表1。

(2) 综合碱度指数(CAI)概念及计算公式 依据酸碱电子论和软硬酸碱的势标度,可以计算出组成岩浆岩的各种氧化物对岩石和矿物碱性的贡献程度大小,综合各种氧化物对岩石和矿物的碱性的贡献,所得到的值就是综合碱度指数CAI。

组成岩浆岩的主要化学成分是 SiO_2 、 TiO_2 、 Al_2O_3 、 Fe_2O_3 、 FeO 、 MnO 、 MgO 、 CaO 、 Na_2O 、 K_2O 等10种氧化物,每种氧化物都可看作阳离子酸与阴离子碱的结合。在硅酸盐结构中, O^{2-} 是给出电子对的碱。

主要造岩标准矿物的综合碱度指数 表 2

矿物名称	代号	分子式	CAI
镁橄榄石	Fo	2MgO·SiO ₂	4.74
铁橄榄石	Fa	2FeO·SiO ₂	4.36
钾霞石	Kp	K ₂ O·Al ₂ O ₃ ·2SiO ₂	4.17
透辉石	Di	CaO·MgO·2SiO ₂	3.86
霞石	Ne	Na ₂ O·Al ₂ O ₃ ·2SiO ₂	3.79
顽火辉石	En	MgO·SiO ₂	3.56
铁辉石	Fs	FeO·SiO ₂	3.27
钙长石	An	CaO·Al ₂ O ₃ ·2SiO ₂	2.99
白榴石	Lc	K ₂ O·Al ₂ O ₃ ·4SiO ₂	2.78
霓石	Ac	Na ₂ O·Fe ₂ O ₃ ·4SiO ₂	2.50
钾长石	Or	K ₂ O·Al ₂ O ₃ ·6SiO ₂	2.08
钠长石	Ab	Na ₂ O·Al ₂ O ₃ ·6SiO ₂	1.96
石英	Q	SiO ₂	0

矿物或熔体的碱性强弱取决于氧原子的状态和给出电子对的综合能力。O²⁻是强碱(P_{O²⁻} = -3.35)，如果与它结合的酸的硬度越高，所形成的酸碱配合物的P_{AH}越大，O²⁻给出电子对的能力越低，其碱性越弱。岩浆岩的主要阳离子中，Si⁴⁺的势标度最高，其P_{A-O}最大，可使强碱O²⁻给出电子对的能力最低，其碱性最弱。可令SiO₂对碱度的贡献为0，其它氧化物对岩石碱性程度的贡献系数C为：

$$C_A = 10 \times (P_{Si^{4+}-O^{2-}} - P'_{A-O^{2-}})$$

所得的各氧化物的C值见表1。

综合各氧化物对岩石碱性程度的贡献，得到的值为综合碱度(CAI)：

岩浆岩的CAI-SiO₂wt%图解

各类岩浆岩的CAI值

表 3

氧化物	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
SiO ₂	40.16	40.49	39.39	43.54	43.95	40.91	41.93	52.33	41.30	41.70	34.73	35.38	41.25
TiO ₂	0.20	0.02	0.06	0.81	0.10	0.65	0.97	0.10	0.81	1.63	1.62	1.11	1.59
Al ₂ O ₃	0.84	0.86	0.47	3.99	4.82	5.00	6.37	3.54	9.43	9.22	2.88	2.73	12.03
Fe ₂ O ₃	1.88	2.84	2.92	2.51	2.20	4.64	4.08	2.61	5.30	3.30	6.10	6.68	5.67
FeO	11.87	5.54	5.42	9.84	6.34	7.97	10.85	5.19	8.86	12.18	3.13	6.22	7.29
MnO	0.20	0.16	0.20	0.21	0.19	0.07	0.20	0.15	0.29	0.19	0.13	0	0.54
MgO	43.16	46.32	46.49	34.02	36.81	30.82	12.13	23.92	19.94	19.12	31.41	31.83	11.22
CaO	0.75	0.70	0.22	3.46	3.57	4.41	16.03	10.29	8.01	1.55	5.79	5.99	11.88
Na ₂ O	2.31	0.10	0.14	0.56	0.63	0.58	0.82	0.43	1.20	1.35	0.33	0.26	3.40
K ₂ O	0.14	0.04	0.09	0.25	0.21	0.36	0.49	0.35	0.39	0.73	1.17	0.14	1.30
CAI	4.71	4.57	4.61	4.20	4.25	4.18	3.38	3.66	3.87	3.58	4.44	4.44	3.00
氧化物	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26
SiO ₂	42.25	37.46	42.59	41.29	42.58	45.97	55.38	48.24	48.36	50.39	50.28	50.40	46.83
TiO ₂	2.52	0.10	0.35	0.90	1.14	2.34	0.66	0.97	1.32	1.13	0.89	0.15	0.97
Al ₂ O ₃	15.26	32.31	27.42	22.74	18.46	16.64	21.30	17.88	16.84	16.06	17.67	28.30	17.38
Fe ₂ O ₃	8.43	9.86	2.49	3.76	4.01	2.94	2.42	3.16	2.55	2.43	1.30	1.06	1.91
FeO	5.46	0.99	1.89	4.46	4.19	8.27	2.00	5.95	7.92	7.86	7.46	1.12	8.20
MnO	0	0.07	0.69	0.03	0.20	0.26	0.19	0.13	0.18	0.17	0.14	0.05	0.14
MgO	5.49	0.39	0.69	4.13	3.22	5.73	0.57	7.51	8.06	8.37	9.27	1.25	10.13
CaO	9.75	4.51	4.38	10.13	11.38	10.45	1.98	10.99	11.07	9.20	9.72	12.46	11.26
Na ₂ O	4.45	13.00	14.12	6.85	9.55	5.06	8.84	2.55	2.26	2.61	1.96	3.67	2.03
K ₂ O	1.95	4.20	3.82	3.55	2.55	1.37	5.34	0.89	0.56	0.79	0.63	0.74	0.40
CAI	3.38	3.87	3.78	3.72	3.85	3.40	2.68	3.16	3.19	3.08	3.10	2.75	3.37
氧化物	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39
SiO ₂	48.01	46.88	48.64	48.66	40.5	49.06	48.88	49.20	50.7	49.3	50.19	48.8	47.1
TiO ₂	1.55	2.81	1.86	0.97	10.5	1.36	2.19	2.03	2.1	1.8	0.75	1.3	2.7
Al ₂ O ₃	17.22	17.07	17.96	12.36	10.4	15.70	13.97	16.09	14.4	15.2	17.58	15.7	15.3
Fe ₂ O ₃	2.90	3.62	4.31	3.08	0	5.38	3.59	2.72	3.2	2.4	2.84	3.8	4.3
FeO	7.68	5.94	5.58	5.66	18.5	6.37	9.78	7.77	9.8	8.0	7.19	6.6	8.3
MnO	0.15	0.16	0.19	0.13	0.28	0.31	0.17	0.18	0.2	0.17	0.25	0.15	0.17
MgO	7.45	4.85	4.00	8.09	7.0	6.17	6.70	6.44	6.2	8.3	7.39	6.1	7.0
CaO	10.80	9.49	8.89	10.46	11.6	8.95	9.38	10.46	9.4	10.8	10.50	7.1	9.0
Na ₂ O	2.28	5.09	4.30	2.71	0.41	3.11	2.59	3.01	2.6	2.6	2.75	4.4	3.4
K ₂ O	0.53	2.64	2.28	5.15	0.696	1.52	0.69	0.14	1.0	0.24	0.40	1.0	1.2
CAI	3.14	3.27	3.02	3.44	3.36	3.00	3.06	3.04	2.99	3.16	3.08	2.99	3.18

续表 3

氧化物	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52
SiO ₂	40.5	37.07	47.11	44.20	45.55	56.90	54.89	51.86	56.71	55.36	59.41	61.86	69.15
TiO ₂	11.8	3.86	1.25	1.64	2.33	0.59	0	1.50	0.84	1.12	0.83	0.58	0.56
Al ₂ O ₃	8.7	12.82	15.74	15.64	14.97	20.17	21.28	16.40	16.67	16.58	17.12	16.91	14.63
Fe ₂ O ₃	0	8.75	4.54	4.35	4.77	2.26	3.04	2.73	3.16	2.57	2.19	2.32	1.22
FeO	19.0	6.39	4.54	6.14	4.64	1.85	1.49	6.97	4.40	4.58	2.83	2.63	2.27
MnO	0.25	0.26	0.27	0.19	0.61	0.19	0.01	0.16	0.13	0.13	0.08	0.11	0.06
MgO	7.6	6.14	5.24	8.89	6.41	0.58	0.66	5.12	4.17	3.67	2.02	0.96	0.99
CaO	10.2	14.20	11.01	9.74	10.16	1.88	2.31	2.42	6.74	6.76	4.06	2.54	2.45
Na ₂ O	0.50	4.09	2.02	4.03	2.76	8.72	5.62	3.36	3.39	3.51	3.92	5.46	3.35
K ₂ O	0.29	2.07	6.72	1.83	4.04	5.42	8.39	1.33	2.12	4.68	6.53	5.91	4.58
CAI	3.32	3.85	3.35	3.50	3.34	2.61	2.62	2.91	2.50	2.70	2.40	2.25	1.71
氧化物	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65
SiO ₂	61.69	54.20	54.02	58.31	61.95	58.68	58.65	58.05	58.31	63.58	72.08	66.88	65.01
TiO ₂	0.66	1.31	1.18	0.66	0.73	0.18	0.79	1.16	1.71	0.64	0.37	0.57	0.57
Al ₂ O ₃	16.21	17.17	17.22	18.05	18.03	17.29	17.43	17.15	13.77	16.67	13.96	15.66	15.94
Fe ₂ O ₃	2.54	3.48	3.83	2.54	2.33	2.97	3.21	3.30	3.37	2.24	0.86	1.33	1.74
FeO	3.77	5.49	3.98	2.02	1.51	3.96	3.48	2.54	6.48	3.00	1.67	2.59	2.65
MnO	0.10	0.15	0.12	0.14	0.13	0.12	0.10	0.13	0.23	0.11	0.06	0.07	0.07
MgO	2.80	4.36	3.87	2.07	0.63	3.14	3.28	2.16	2.27	2.12	0.52	1.57	1.91
CaO	5.38	7.92	6.76	4.25	1.81	7.13	6.26	5.13	5.58	5.13	1.33	3.56	4.42
Na ₂ O	5.37	3.67	3.32	3.85	6.55	3.24	3.82	4.57	3.91	3.98	3.08	3.84	3.70
K ₂ O	2.10	1.11	4.43	7.38	5.53	1.27	1.99	3.60	1.88	1.40	5.04	3.07	2.75
CAI	2.13	2.65	2.70	2.48	2.22	2.31	2.35	2.35	2.30	2.02	1.53	1.85	1.95

续表 3

氧化物	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79
SiO ₂	66.15	71.08	71.27	64.98	71.99	65.74	73.74	73.66	72.08	66.27	73.54	72.31	75.45	77.08
TiO ₂	0.62	0.40	0.25	0.52	0.21	0.75	0.12	0.22	0.33	0.66	0.29	0.42	0.17	0.15
Al ₂ O ₃	15.56	11.28	14.25	16.33	13.81	15.89	15.00	13.45	13.49	15.39	11.43	10.88	13.11	11.98
Fe ₂ O ₃	1.36	4.28	1.24	1.89	1.37	1.81	0.08	1.25	1.45	2.14	2.97	2.92	1.14	1.26
FeO	3.42	2.19	1.62	2.4	1.72	2.52	0.63	0.75	0.88	2.23	1.08	2.42	0.66	0.68
MnO	0.08	0.11	0.08	0.09	0.21	0.13	0.02	0.03	0.08	0.07	0.04	0.14	0.29	0.05
MgO	1.94	0.25	0.80	1.94	0.81	1.64	0.42	0.32	0.32	1.57	0.16	0.15	0.34	0.63
CaO	4.65	0.84	1.62	3.70	1.55	3.27	0.93	1.13	1.20	3.68	0.28	0.68	0.83	0.77
Na ₂ O	3.90	4.92	3.79	3.67	3.42	3.29	4.18	2.99	3.38	4.13	4.65	5.17	5.88	5.42
K ₂ O	1.42	4.21	4.03	2.95	3.81	3.67	4.12	5.35	4.46	3.01	4.53	4.42	1.26	1.15
CAI	1.89	1.59	1.56	1.90	1.48	1.84	1.45	1.40	1.41	1.88	1.44	1.59	1.33	1.26

1—纯橄岩 (诺科斯); 2—纯橄岩 (Daly); 3—纯橄岩 (黎形); 4—橄岩 (诺科斯); 5—二辉橄岩 (Daly); 6—角闪橄岩 (Daly); 7—异剥岩 (Daly); 8—二辉岩 (Daly); 9—苦橄岩 (Daly); 10—苦橄岩 (Daly); 11—国外金伯利岩 (Wilshine); 12—麦美奇岩 (武汉地院); 13—玻基辉橄岩 (Daly); 14—玻基辉岩 (Daly); 15—磷霞岩 (武汉地院); 16—磷霞岩; 17—霓霞岩 (武汉地院); 18—霓霞岩 (诺科斯); 19—霞斜岩 (诺科斯); 20—霞石正长岩 (诺科斯); 21—辉长岩 (Daly); 22—辉长岩 (诺科斯); 23—苏长岩 (Daly); 24—苏长岩 (诺科斯); 25—斜长岩 (Daly); 26—橄辉岩 (诺科斯); 27—角闪辉长岩 (诺科斯); 28—碱性辉长岩 (诺科斯); 29—碱性辉长岩 (Daly); 30—正长辉长岩 (Daly); 31—月球玄武岩 (列文生); 32—玄武岩 (Daly); 33—高原玄武岩 (Daly); 34—洋脊玄武岩 (Engel); 35—拉斑玄武岩 (海恩特曼); 36—大洋拉斑玄武岩 (海恩特曼); 37—高铝玄武岩 (久野); 38—高铝玄武岩 (海恩特曼); 39—碱性橄岩玄武岩 (海恩特曼); 40—月球玄武岩 (列文生等); 41—霞石岩 (诺科斯); 42—白榴岩 (诺科斯); 43—霞石岩玄武岩 (久野); 44—白榴岩玄武岩 (Daly); 45—霞石响岩 (诺科斯); 46—白榴岩 (Daly); 47—闪长岩 (诺科斯); 48—闪长岩 (Daly); 49—二长岩 (诺科斯); 50—正长岩 (诺科斯); 51—碱性正长岩 (诺科斯); 52—石英二长岩 (诺科斯); 53—石英闪长岩 (Daly); 54—安山岩 (Daly); 55—粗安岩 (诺科斯); 56—粗面岩 (诺科斯); 57—碱性粗面岩 (诺科斯); 58—岛弧钙碱性安山岩 (McBirney); 59—大陆边缘钙碱性安山岩 (McBirney); 60—大陆内部安山岩; 61—非造山富铁安山岩 (McBirney); 62—英安岩 (武汉地院); 63—花岗岩 (诺科斯); 64—花岗闪长岩 (诺科斯); 65—花岗闪长岩 (Daly); 66—英云闪长岩 (诺科斯); 67—过碱性花岗岩 (诺科斯); 68—花岗岩 (黎形); 69—花岗闪长岩 (黎形); 70—黑云母花岗岩 (黎形); 71—石英二长岩 (黎形); 72—碱性花岗岩 (Daly); 73—流纹岩 (诺科斯); 74—流纹岩 (Daly); 75—流纹英安岩 (诺科斯); 67—碱性流纹岩 (Daly); 77—碱流岩 (诺科斯); 78—石英角斑岩 (Daly); 79—石英角斑岩 (黎形)。

$$CAI = \sum_i C_i \cdot X_i$$

其中 X_i 为各氧化物的摩尔分数, 则:

$$\begin{aligned} CAI = & 0.98 \times X_{TiO_2} + 3.62 \times X_{Al_2O_3} \\ & + 2.95 \times X_{Fe_2O_3} + 6.54 \times X_{FeO} \\ & + 4.96 \times X_{MnO} + 7.11 \times X_{MgO} \\ & + 8.32 \times X_{CaO} + 12.07 \\ & \times X_{Na_2O} + 13.05 \times X_{K_2O} \quad (3) \end{aligned}$$

2. CAI的意义及讨论

根据公式(3), 可以计算出主要造岩标准矿物的CAI值(表2)。由表2可见, 镁橄榄石的CAI值最高, 石英最低, 矿物的CAI碱性强弱顺序比较合理。而殷纯嘏等^[1]得出的矿物碱性顺序使辉石类矿物比钾霞石、霞石碱性强; 王希渠^[2]得出的矿物碱性顺序使钾长石、钠长石比橄榄石碱性强。

笔者引用了Daly、诺科斯、黎形等人的各类型岩浆岩平均化学成分数据79组^[7,8,9], 分别计算了它们的CAI值(表3), 并在CAI-SiO₂wt%直角坐标上投点(图), 该图所得的结果与通常的岩浆岩分类相一致。

用CAI值来反映岩浆岩的碱性程度, 具有以下优点:

1. CAI值是基于酸碱电子论得出, 应用范围广, 它比较客观、综合地反映了各类氧化物对岩石碱性程度的贡献。

2. CAI值可以将地质学中酸碱概念与化学中的广义酸碱概念相统一, 有助于澄清传统地质学的酸性、基性、碱性概念的混乱。

3. 据CAI值可以划分岩浆岩的大类,

超基性岩CAI>3.5; 基性岩3.0<CAI<3.5; 中性岩2.0<CAI<3.0; 酸性岩CAI<2.0。据CAI值对岩浆岩的划分标准比据SiO₂wt%更符合岩石镜下的矿物组合。例如, 月球玄武岩SiO₂=40.5%, 尽管该值小于45%, 但由于含较高的对CAI值贡献较小的TiO₂和Al₂O₂, 使其CAI变化于3.32~3.36之间, 仍然小于3.5, 故属于基性岩范畴; 又如二辉岩, SiO₂=52.33%。该值大于52%, 但其CAI=3.66, 即大于3.5, 而属超基性岩范畴。

4. 对于传统的碱性岩, 可以据它们的CAI值分别归于超基性、基性、中性岩类, 这种划分也与野外岩石共生组合相一致。如碱霞岩(CAI>3.78)、霓霞岩(CAI>3.72)、霞石岩(CAI=3.85), 它们的CAI值都属于超基性岩范畴, 野外岩石共生组合也表明这些岩石与超基性岩共生。

参 考 文 献

- [1] 殷纯嘏等, 《国际交流地质学术论文集》, 地质出版社, 1985年。
- [2] 王希渠, 现代地质, 1988, 第2卷。
- [3] 戴安邦, 化学通报, 1978, 第26卷。
- [4] Pearson, R. G., J. Chem. Edu., 1968, 45.
- [5] Chan, E. C. M., J. Chem. Edu., 1975, 52.
- [6] Yinst, A., Inorg. Chem., 1967, 6.
- [7] 南京大学地质系岩矿室, 《火成岩岩石学》, 地质出版社, 1980年。
- [8] 邱家骥, 《岩浆岩岩石学》, 地质出版社, 1984年。
- [9] Hughes, C.J., Igneous Petrology, Elsevier Scientific Publishing Company, 1982.

Comprehensive Alkalinity Index (CAI) of Magmatite: Calculating Method and Its Significance

Zou Haibo Xu Hongwu Zhou Xinmin

Based upon electronic theory of acid and base and in combination with theory of acids and bases (including hard and soft ones), the authors have derived a formula for calculating the comprehensive alkalinity index of magmatic rocks as following:

$$\begin{aligned} CAI = & 0.98 \times X_{TiO_2} + 3.62 \times X_{Al_2O_3} + 2.95 \times X_{Fe_2O_3} + 6.54 \times X_{FeO} + \\ & + 4.96 \times X_{MnO} + 7.11 \times X_{MgO} + 8.32 \times X_{CaO} + 12.07 \times X_{Na_2O} + \\ & + 13.05 \times X_{K_2O} \quad (\text{where } X \text{ is the molar fraction}), \end{aligned}$$

The alkalinity of a magmatic rock can be more accurately expressed by the value of CAI.