

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

з лабораторних занять з курсів
«Аналіз петрохімічних даних» і
«Геодинамічні реконструкції»

Частина 1

ЛЬВІВ 2013

Методичні вказівки з лабораторних занять з курсів «Аналіз петрохімічних даних» і «Геодинамічні реконструкції» / укл.: Степанов В.Б., Генералова Л.В., Дворжак Т.С. – Львівський національний університет імені Івана Франка, 2013. – 44 с.

Укладачі: канд. геол.-мін. наук, доцент *Степанов В.Б.*,
канд. геол. наук, доцент *Генералова Л.В.*,
інженер *Дворжак Т.С.*

Рецензент: канд. геол.-мін. наук, доцент *Бекеша С.М.*
(Львівський національний університет
імені Івана Франка)

Відповідальний за випуск: зав. кафедри, професор *Сіворонов А.О.*

Редактор: *Лариса Сідлович*

Відповідальний за друк: *Олена Старунько*

*Затверджено
на засіданні Вченої ради
геологічного факультету
(протокол № 2/6 від 12.06.2013 р.)*

ВСТУП

Вивчення хімізму гірських порід – це особлива область знань – петрохімія. У завдання петрохімії входить не лише вивчення хімізму гірських порід і їхніх асоціацій, а й встановлення закономірностей у компонентному та фазовому (мінералогічному) складі порід, а також вивчення причин варіацій мінералогічного складу, які спостерігаються. Традиційно петрохімію розглядають як частину описової петрографії, у якій гірські породи досліджуються з позицій їхнього хімічного складу. Історично склалося так, що петрохімічні дані спочатку мали тільки підтверджувати петрографічні визначення гірських порід. Початок наукового аналізу петрохімічної інформації ознаменувався використанням даних фізичної хімії для побудови петрологічних моделей і їхньої перевірки на основі емпіричної петрохімічної інформації. У подальшому сфера використання петрохімічних досліджень значно розширилась. Їх використовують для класифікації гірських порід, фаціально-формаційного, металогенічного, геотектонічного, геодинамічного аналізів, оскільки вони являють собою вельми ефективний метод пізнання закономірностей природних геологічних процесів.

Хімічний склад гірських порід у петрохімії виражають у вигляді масових вмістів оксидів петрогенних елементів (у %). Така форма представлення результатів зберігалася з тих часів, коли хімічні аналізи гірської породи і мінералів робили розчиненням проби і подальшим визначенням елементів за допомогою групового осадження. При цьому найбільш раціональна така послідовність запису: SiO_2 , TiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , FeO , MnO , MgO , CaO , Na_2O , K_2O , P_2O_5 , H_2O^+ , H_2O^- . Коли в аналізах наведений вміст і інших елементів, то їх розміщують поряд із відповідними за валентністю головними породоутворюючими елементами. Дані про вміст CO_2 , Cl , F , S^{2-} , S^{6+} і т.і. слід розміщувати перед даними про вміст води.

Роль головних породоутворюючих оксидів у різних типах гірських порід неоднозначна, що відзначено і проаналізовано багатьма дослідниками (Четверіков, Заварицький, Ніглі, Барт та ін.). Склад складних кисневих сполук прийнято відображати за допомогою співвідношення оксидів, при цьому кількісні співвідношення вказуються у вигляді коефіцієнтів при відповідних оксидах. Наприклад, склад ортоклазу відображають як $\text{K}_2\text{O} \times \text{Al}_2\text{O}_3 \times 6\text{SiO}_2$, мусковіту $\text{K}_2\text{O} \times \text{Al}_2\text{O}_3 \times 6\text{SiO}_2 \times 2\text{H}_2\text{O}$ і т.і.

Враховуючи досягнення кристалохімії, слід було б відмовитися від такого відображення складу й оперувати катіонами замість оксидів, тому що фактично таких співвідношень оксидів не спостерігається. Практично спосіб вираження даних аналізу в оксидах

представляє деякі зручності за своєю простотою і тому його використовують при сучасних дослідженнях.

В ідеальному випадку в розпорядженні дослідника мають бути і хімічний склад породи, і її кількісний мінералогічний склад, отриманий точними, не залежними один від одного методами. На жаль, у більшості випадків дослідник оперує обмеженою кількістю хімічних аналізів порід.

ВИЗНАЧЕННЯ ХІМІЧНОГО СКЛАДУ ЗА МІНЕРАЛОГІЧНИМ АНАЛІЗОМ ШЛІФІВ І ЗА ІНТЕРПРЕ- ТАЦІЄЮ ДИФРАКТОМЕТРИЧНИХ ДАНИХ ПОРІД

Визначення хімічного складу порід не становить труднощів, якщо отримати його шляхом підрахунку мінералів у шліфах. Це можливо зробити за допомогою інтеграційного столика Андіна за відповідною методикою, наведеною в роботі Р.Н. Кочурової [5]

Для розрахунку хімічного складу породи, крім її кількісного мінерального складу, потрібно знати хімічні склади мінералів. Останні беруть із петрографічних і мінералогічних довідників або із робіт по окремих регіонах. Найповніші аналізи породоутворюючих мінералів із різних порід наведені в роботах П. Чирвінського, Я. Вісьневського та ін. [10,1]. Хімічні аналізи мінералів у цих роботах даються в вагових процентах. Тому отримані при кількісних підрахунках об'ємні співвідношення мінералів (виражені в об'ємних %) треба перевести у вагове процентне співвідношення. Для цього спочатку слід вирахувати вагові кількості кожного мінералу. Вагові кількості визначаються множенням об'ємних процентів кожного мінералу на його питому вагу, яка наводиться, як правило, разом із хімічним аналізом. Хід перерахунків зручно записувати у вигляді таблиці. У табл. 1 показаний приклад розрахунку кількісного співвідношення мінералів, вираженого у вагових % в діориті.

Таблиця 1

Розрахунок кількісних співвідношень мінералів

Назва мінералів	Лінійні кількості	Об'ємні %	Питома вага	Вагові кількості	Вагові %
Плагіоклаз №40	72,30	46,13	2,68	199,76	58,0
Рогова обманка	70,15	44,7	3,3	147,51	39,7
Кварц	4,15	2,74	2,7	7,39	2,1
Епідот	10,10	6,45	3,26	21,12	5,2
Сума	156,70	100	-	375,78	100

Після визначення вагового співвідношення мінералів (у вагових %) необхідно взяти із довідників їх хімічний склад і розрахувати хімічний склад породи. Методика перерахунку мінералогічного складу породи на хімічний така:

1. Скласти таблицю (табл. 2), в першу графу якої вписати назви мінералів, а в другу – вміст цих мінералів у вагових процентах.
2. Для кожного мінералу у відповідних графах проставити вміст оксидів, який отримують таким чином: беруть хімічний склад кожного мінералу з довідників і приводять до 100%, розраховують норму (вміст 1% кожного оксиду в мінералі), яку множать на процентний вміст мінералу в породі.
3. Вміст оксидів підсумовують за вертикаллю і для контролю – за горизонталлю (див. табл. 2). При цьому відхилення від 100% не має перевищувати кількох десятих часток.

Таблиця 2

Розрахунок хімічного складу граніто-гнейсу за даними мінералогічного аналізу шліфа.

Назва мінералу	Вміст у вагових %	SiO ₂	TiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	FeO	MgO	CaO	K ₂ O	Na ₂ O	H ₂ O
Мікро-клин-пеліт	44,54	28,95		8,46				0,27	5,34	0,96	
Кварц	35,34	5,34									
Альбіт-олігоклаз	12,32	8,01		2,59				0,31	0,14	1,14	
Біотит	5,56	2,00	0,07	0,94	0,45	0,78	0,48	0,05	0,46	0,05	0,16
Альмандин	2,24	81		0,49	0,11	0,60	0,08	0,02			
Сума	100	5,11	0,07	12,48	0,56	1,38	0,56	0,65	5,94	2,15	0,16

4. Також можна використовувати номограми Вісьневського [1]. Для побудови номограми взяти аркуш міліметрового паперу розміром 60×80 см. В основі короткої сторони проводять горизонтальну лінію довжиною 50 см, з кінців якої проводять вертикальні лінії довжиною до 70 см у відповідності до максимального вмісту окремих оксидів, що, як правило, не перевищує 70% (рис.1).

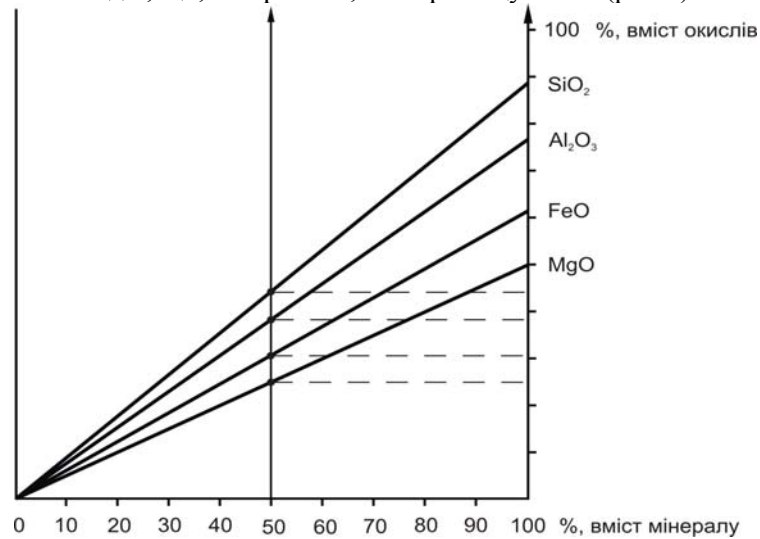


Рис.1. Номограма Вісьневського.

На горизонтальній лінії номограми відзначають вміст мінералу від 0% в лівому її кінці, до 100% – у правому, тобто 1% мінералу дорівнює 5 мм (див. рис.1). На правій – вертикальній лінії – відзначають вміст оксидів, які є у складі мінералу, в масштабі 1% оксиду дорівнює 10 мм. Потім ці точки поєднують лініями-променями з нульовою точкою горизонтальної лінії, і номограма готова до використання. При перерахунку мінералогічного складу на хімічний – кількість даного мінералу береться на горизонтальній лінії номограми. Відповідні кількості оксидів отримуємо на перетині ліній-променів із вертикальною лінією міліметрівки, яка проходить через точку вмісту мінералу (тобто на перпендикулярі до лінії вмісту).

Слід відзначити, що точність номограми тим більша, чим крутіший промінь. При малих вмістах оксидів промінь спрямований полого і точність знижується. В цьому випадку рекомендація – збільшити масштаб для даного оксиду в кілька разів.

Для розрахунків мінералогічного складу і перерахунків його на хімічний можна використовувати і рентгенівський (дифрактометричний) аналіз (для мікрозернистих порід типу аргілітів).

Методика така: а) зняти дифрактограму породи; б) використовуючи базу рентгенівських даних [6], ідентифікувати кожен мінерал, який входить до складу породи; в) на дифрактограмі, за допомогою лінійки, виміряти (в мм) інтенсивність усіх піків кожного мінералу; г) отримані дані по всіх мінералах, які входять до складу породи, підсумувати, і суму прийняти за 100%; д) скласти відповідну пропорцію, із якої знайти вміст кожного мінералу в об'ємних %; є) об'ємні проценти перерахувати у вагові проценти, а подальші розрахунки продовжити за методикою, наведеною раніше в пунктах 1–3.

Отримавши хімічний склад породи одним із проаналізованих методів, провести петрохімічні перерахунки.

ПЕТРОХІМІЧНІ ПЕРЕРАХУНКИ

Петрохімічні перерахунки проводять з метою поєднання оксидів, які входять до складу гірських порід, у незначну кількість характерних груп, що дає змогу графічно відображати хімічні склади, порівнювати їх і виявляти закономірності змін.

В основі багатьох петрохімічних перерахунків лежить один із трьох принципів групування оксидів. Перший принцип – поєднання оксидів за валентністю (метод Левінсона-Лесинга). Другий принцип – поєднання оксидів за роллю їх у побудові породоутворюючих мінералів (методи Озанна Заварицького, Ніглі). Третій принцип – поєднання оксидів у групи, які відповідають складам мінералів, що найбільш часто зустрічаються (методи Кроса, Іддінгса, Пірсона, Вашингтона [CIPW], Кузнецова). Крім того, розроблені методи перерахунків, які використовуються для вирішення спеціальних завдань і в основу яких можуть бути покладені інші принципи, що відрізняються від раніше перелічених [3].

МЕТОД О.М. ЗАВАРИЦЬКОГО – ПЕРЕРАХУНОК ХІМІЧНОГО СКЛАДУ ГІРСЬКОЇ ПОРОДИ НА ЧИСЛОВУ ХАРАКТЕРИСТИКУ

Цей метод є одним із досконалих методів перерахунку хімічних складів магматичних гірських порід. Числова характеристика, яку отримують у результаті перерахунків відображає головні особ-

ливості хімізму порід, що дає змогу виявити закономірності в різноманітності хімічних складів і є основою для їхньої систематики.

При перерахунку хімічного складу на числову характеристику: 1) хімічні елементи поєднуються у групи за однаковою роллю їх у складі породоутворюючих мінералів і 2) розрахунок йде за відношенням чисел атомів елементів, а не за молекулярними відношеннями оксидів, як це прийнято в інших методах. Другий принцип прийнятий у зв'язку з тим, що у вузлах кристалічних ґраток мінералів містяться іони або атоми, а не оксиди, тому відношення атомів більш повно відображають особливості хімізму гірських порід, ніж відношення оксидів [9].

За методом О.М. Заварицького вираховуються співвідношення між такими елементами як: **Si:Al:Fe:Mg:Ca:Na:K**, що досить однозначно характеризує хімічний склад породи. Кисень окремо не виділяється тому, що його кількість точно визначається сумою катіонів. Залізо враховується тільки у двовалентній закисній формі, тому що ступінь окислення його часто залежить від випадкових причин і справжній вміст оксидного заліза не може бути оцінений об'єктивно. Кількість водню не враховується у зв'язку з тим, що вміст води у гірській породі недостатньо стійкий і залежить, головним чином, від ступеня змінення породи. Із інших хімічних елементів, які входять до складу породи в помітних кількостях, титан сумують з кременем, а манган – з залізом. У результаті перерахунку отримують чотири параметри основної та сім параметрів додаткової числової характеристики. Крім того, визначається число Q (кварцове число). Чотири основні параметри a, c, або c, b і s у сумі становлять 100%. Вони позначають:

- a – відносне число атомів лужних металів, які входять до складу алюмосилікатів;
- c – відносне число атомів кальцію, які входять до складу алюмосилікатів. У породах, які пересичені лугами, Ca-алюмосилікат відсутній, тому в основній характеристиці використовують параметр c, який показує відносне число атомів Na, для яких не вистачило Al, щоб утворити лужні алюмосилікати;
- b – відносне число всіх металевих атомів (за винятком кремнію і титану), які не входять до складу алюмосилікатів і беруть участь у будові простих силікатів;
- s – відносне число атомів кремнію разом з титаном.

Параметри додаткової характеристики показують: **a', f', m', c'** – відносну участь у складі фемічних мінералів відповідно – Al, Fe, Mg, Ca; **n** – відносний вміст Na у складі лужних алюмосилікатів; **t** – вміст титану у групі s; **g** – вміст оксидного заліза у групі B (у складі

фемічних мінералів). Число Q характеризує ступінь насиченості породи кремнеземом. Коли Q – додатне, воно відображає відносне число надлишкових атомів кремнію, які не зв'язані з основами, коли Q від'ємне – недостачу кремнію для насиченості всіх основ [4].

Порядок перерахунку такий:

1. Вагові процентні вмісти оксидів перераховуємо в молекулярні кількості (табл., додаток 1).
2. Молекулярні кількості SiO_2 та TiO_2 підсумовуємо, і цю суму позначаємо як S .
3. Беремо суму молекулярних кількостей K_2O та Na_2O . Коли вона менша, ніж кількість Al_2O_3 або дорівнює йому, її подвоюємо й отримуємо величину A .
- 3а. Якщо $K_2O+Na_2O > Al_2O_3$, то величину A отримуємо, подвоївши Al_2O_3 , а надлишок, який дорівнює $(K_2O+Na_2O)-Al_2O_3$, множимо на два і позначаємо \bar{C} .
4. Беремо різницю $Al_2O_3-(K_2O+Na_2O)$. Коли вона менша або дорівнює CaO , то її позначаємо як C .
- 4а. Коли $Al_2O_3 > K_2O+Na_2O+CaO$, то C дорівнює CaO , і в цьому випадку надлишок Al_2O_3 , якій дорівнює $Al_2O_3-(K_2O+Na_2O+CaO)$, перемножуємо на 2 і додаємо до величини B .
5. Подвоївши кількість Fe_2O_3 і додавши його до кількості $FeO(+MnO)$ отримуємо FeO' . У випадку, коли $K_2O+Na_2O > Al_2O_3$, величину FeO' зменшуємо на величину C .
- 5а. У дуже рідкісних випадках $\bar{C} > FeO'$. Тоді різницю $\bar{C}-FeO'$ позначаємо як Na' , що є надлишком натрію: $Na' = [(K_2O+Na_2O)-Al_2O_3]-FeO'$. Величина \bar{C} в цьому випадку дорівнює FeO' .
6. Визначаємо $CaO' = CaO - C$
7. Підсумовуємо FeO' , MgO і CaO' , отримуємо величину B .
- 7а. Коли є надлишок алюмінію (тоді відсутнє CaO'), величину B отримуємо, підсумувавши FeO' , MgO і $2 Al_2O_3$.
- 7б. Коли є надлишок Na (тоді відсутнє FeO'), величину B отримуємо, підсумувавши MgO , CaO , Na' .
8. Відношення $A : C : B : S$ або $A : \bar{C} : B : S$ приводимо до 100 за формулами:

$$a = \frac{100 \times A}{N} \quad c = \frac{100 \times C}{N} \quad b = \frac{100 \times B}{N} \quad s = \frac{100 \times S}{N}$$

де $N=A+C+B+S$, тобто відношення $a : c : b : s$ (або $a : \bar{c} : b : s$) виражають у відсотках.

Так отримуємо основну числову характеристику хімічного складу породи.

Крім неї, для характеристики складу породи використовують додаткові параметри:

$$f' = \frac{\text{FeO}'}{B} \times 100 \quad m' = \frac{\text{Mg}}{B} \times 100 \quad c' = \frac{\text{CaO}'}{B} \times 100$$

Для порід, які перенасичені глиноземом, окрім перелічених додаткових параметрів, розраховують :

$$a' = \frac{2 \text{Al}_2\text{O}_3}{B} \times 100$$

У породах, які пересичені лугами, величина FeO' позначає кількість закису заліза, вже зменшену на величину C . У рідкісних випадках, коли $C > \text{FeO}'$, утворюється надлишок Na' , і тоді виникає додатковий параметр (у цьому випадку f' відсутній):

$$n' = \frac{\text{Na}'}{B} \times 100$$

Число Q розраховують за формулою:

$$Q = s - (3a + 2c + b) \text{ або } Q = s - (3a + 2c + b).$$

Таким чином, залежно від результатів перерахунку утворюються чотири класи хімічних складів гірських порід, які мають такі числові характеристики:

- 1) Склади нормальні ($\text{CaO} + \text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O} > \text{Al}_2\text{O}_3 > \text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O}$):
a:c:b:s; f':m':c'; n; t; g; Q.
- 2) Склади, перенасичені глиноземом: ($\text{Al}_2\text{O}_3 > \text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O} + \text{CaO}$):
a:c:b:s; a':f':m'; n; t; g; Q.
- 3) Склади, перенасичені лугами: ($\text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O} > \text{Al}_2\text{O}_3$):
a : c b : s; f' : m' : c'; n; t; g; Q.
- 4) Дуже рідкісні склади, сильно перенасичені лугами:
a: c:b : s; n':m':c'; n; t; g; Q.

Після переведення вагових % у молекулярні кількості потрібно оцінити, до яких порід: нормального ряду, плюмазитового ряду чи лужного ряду (пункти 1–3) належать досліджувані породи, а потім проводити перерахунки.

ПОБУДОВА ВЕКТОРНОЇ ПЕТРОХІМІЧНОЇ ДІАГРАМИ

Відображення хімічних складів гірських порід графічно чи на діаграмах дає змогу порівнювати їх і виявляти емпіричним шляхом закономірності петрохімії.

До появи методу О.М. Заварицького використовували кілька методик проектування складів порід, і в усіх випадках склади відображали точкою на діаграмі. О.М. Заварицький застосував новий вид діаграм, на яких склади порід відображуються векторами. Цей метод відображення дає змогу на графіку показати семикомпонентний склад, тобто відобразити геометрично всі головні особливості хімізму гірських порід.

В основі діаграми лежить принцип бароцентричних координат. Головна числова характеристика, яка складена чотирма параметрами, відображена точкою у прямокутному тетраедрі проекції, а додаткові параметри – вектори. У вершинах тетраедру проекції розташовані **a**, **c**, **b**, **s**.

Оскільки на практиці користуватись об'ємною фігурою незручно, академік О.М. Заварицький пропонує відображати склад на площинах розгорнутого тетраедра. Тетраедр розгорнутий уздовж ребра **sb** на дві площинні проекції **sab** і **scb**. У такій проекції склади, які характеризуються трьома або двома нульовими параметрами, будуть відображені однією точкою, а всі інші – двома точками проекції.

Побудову графіка виконують таким чином (рис. 2а):

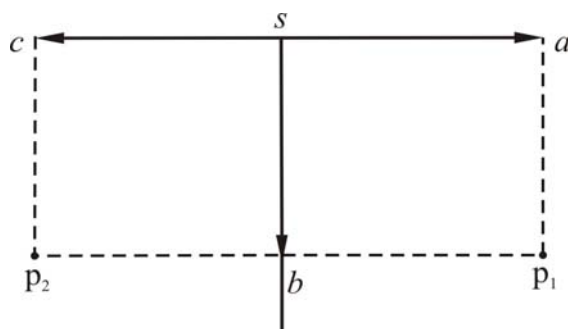


Рис. 2а. Проектування результатів досліджень.
Вектори діаграми у проекції на площину.

Від вихідної точки **s** донизу по вертикалі відкладають параметр **b**, вправо по горизонталі – параметр **a** і вліво – параметр **c**.

Від кінця відкладених відрізків проводять лінії, паралельні ребрам тетраедра, перетин яких дає дві точки: одну на площині

$\mathbf{scb}(p_2)$, другу – на площині $\mathbf{sab}(p_1)$. При наявності параметра \bar{c} відрізок \mathbf{sc} відкладають у тому ж напрямі, що і параметр \mathbf{a} (рис. 2б), тобто вправо від \mathbf{s} і, таким чином, дві точки, які відображають такий склад, будуть лежати на одній площині \mathbf{sab} (див. рис. 2б).

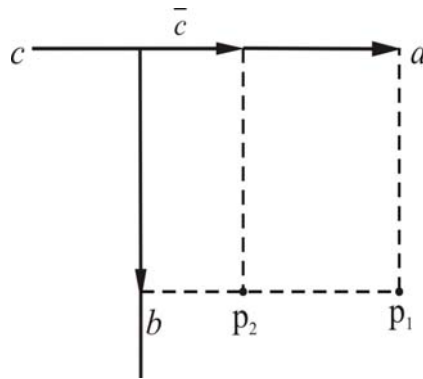


Рис. 2б. Проектування результатів досліджень.

Побудову додаткових параметрів проводять у масштабі, в 10 разів меншому, ніж прийнятий для основної характеристики. Параметри f' , m' , c' або a' , f' , m' відображають на площині \mathbf{sab} (рис. 2в).

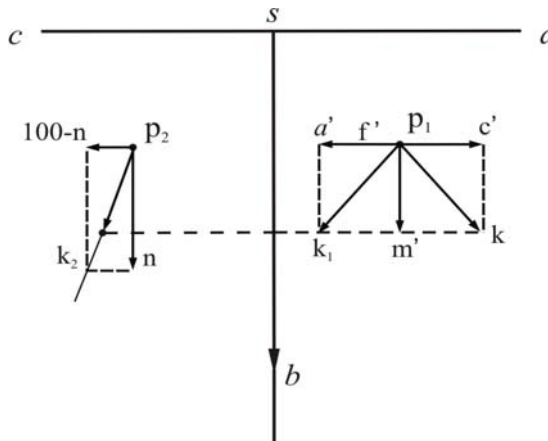


Рис. 2в. Проектування результатів досліджень.

У точці P_1 , яка відображає параметр основної характеристики, розташований параметр f' . Від цієї точки як від вихідної вправо відкладають відрізок, який відповідає c' , і вниз, від кінця його, відрізок, який відповідає m' . Отриману точку з'єднують з вихідною прямою і на кінці доповнюють вістрям. Якщо в додатковій характеристиці

бере участь параметр a' замість c' , то відрізок, який відповідає a' , відкладають від вихідної точки вліво. Вниз від нього відкладають m' , і вектор, отриманий при такій побудові, має лівий нахил.

При характеристиці порід, сильно перенасичених лугами, відсутній параметр f' , і замість нього розраховують параметр n' . У цьому випадку при побудові вектора вихідною точкою буде не f' , а n' , і вектор проводять пунктиром.

Параметр додаткової характеристики n відображають на лівій площині діаграми – scb . З цією метою від точки основної характеристики P_2 , яка розташована на цій площині як вихідна, вниз відкладають величину n і вліво – $100-n$. Поєднавши отриману точку з вихідною, отримуємо вектор, нахил якого покаже співвідношення Na і K у складі лужних алюмосилікатів. Довжину вектора приймають такою, яка дорівнює довжині стрілки, що відображає склад цієї ж породи на площадці sab . Це зручно, тому що дає змогу легко порівняти два вектори однієї й тієї ж породи.

Петрохімічна діаграма дає уявлення про головні особливості хімічного складу гірських порід за місцем розташування векторів на діаграмі, їхньої довжиною та напрямком [2].

Розташування векторів у нижній частині діаграми вказує на великий вміст у породі фемічних компонентів, наближення їх до вершини s – на підвищений вміст кремнезему. Коли вектори розташовані близько до осі sb – у породі мало алюмосилікатів. Коли вектор віддалений від осі sb вправо – у породі багато лужних алюмосилікатів (лужних польових шпатів), а коли вліво – багато алюмосилікатів кальцію (плагіоклазів).

Розташування обох векторів на одній площині sab (при наявності \bar{c}) вказує на пересичення породи лугами.

Вектор на площині sab має лівий нахил у тому разі, коли порода належить до плюмазитового ряду, тобто коли вона перенасичена глиноземом; напрямок вектора вправо свідчить про те, що порода належить до нормального ряду. Крутий нахил цього вектора вправо вказує на великий вміст у складі фемічних мінералів магнію, а пологий нахил – на значний вміст у них кальцію. Напрямок вектора який розташований на площині scb , є показником співвідношення Na і K , які містяться в лужних алюмосилікатах. Крутий нахил вектора вказує на великий вміст у лужних польових шпатах Na , пологий – на велику кількість у них K .

Довжина вектора, розташованого на площині sab , відображає відносну кількість у породі заліза. Чим коротший вектор, тим більше заліза містять фемічні мінерали. Вектор перетворюється на

точку, коли залізо буде представлено єдиним катіоном у складі фермічних мінералів.

Як приклад розглянемо перерахунок андезибазальту [8] (табл. 3)

Таблиця 3

Перерахунок хімічного аналізу андезитобазальту (див. рис. 3, точка Іа)

Компоненти	Масова частка, %	Молекулярна кількість	Числові характеристики	
			Символ	Значення
SiO ₂ TiO ₂	54.50 0.98	905 } 12 } 917	S	A=122 C=111 B=300 S=917 N=1450
Al ₂ O ₃	17.56	172-61=111	C	
Fe ₂ O ₃	5.75	36x2=72 } 39 } 112	B	a=8.4
FeO	2.70	1 } 141 } 300		c=7.6
MnO	0.10			b=20.7
MgO	5.65	158-111=47		s=63.3
CaO	8.85			
Na ₂ O	3.14	51 } 10 } 61 × 2=122	A	
K ₂ O	0.93			
P ₂ O ₅	0.15			
S	0.22			
Cl	0.05			
H ₂ O	0.10			
Сума	100.48			100

Спочатку перерахуємо масовий процентний вміст оксидів на молекулярні кількості. Сумуючи SiO₂ і TiO₂, отримуємо S (917). Для отримання A (122) сумуємо Na₂O і K₂O (61) та множимо суму на 2. Для отримання C (111) і кількості Al₂O₃ (172) вираховуємо суму Na₂O+K₂O (61). Віднімаючи кількість польовошпатового вапна

(111) із усієї кількості CaO (158) отримуємо кількість CaO, яке входить до складу групи **b** (CaO'=47). Подвоюючи кількість Fe₂O₃, перераховуємо його таким чином на FeO. Цю величину (72) об'єднуємо з FeO (39) і MnO (1) й отримуємо FeO' (112). Для розрахунку В (300) сумуємо FeO' (112), MgO (141) і CaO' (47). Визначаємо N=A(122)+C(111)+B(300)+S'=1450. Перераховуємо А, С, В, S у проценти: а (8,4), с (7,6) b (20,7), s (63,3).

Додаткові числові характеристики розраховуємо за формулами:

$$f' = \frac{113}{300} \times 100 = 37 \qquad m' = \frac{141}{300} \times 100 = 47$$

$$c' = \frac{47}{300} \times 100 = 16 \qquad n = \frac{51}{61} \times 100 = 84$$

$$t = \frac{92}{917} \times 100 = 1,3 \qquad g = \frac{72}{300} \times 100 = 24$$

Результати перерахунку наносимо на діаграму (рис. 3), точка Iа.

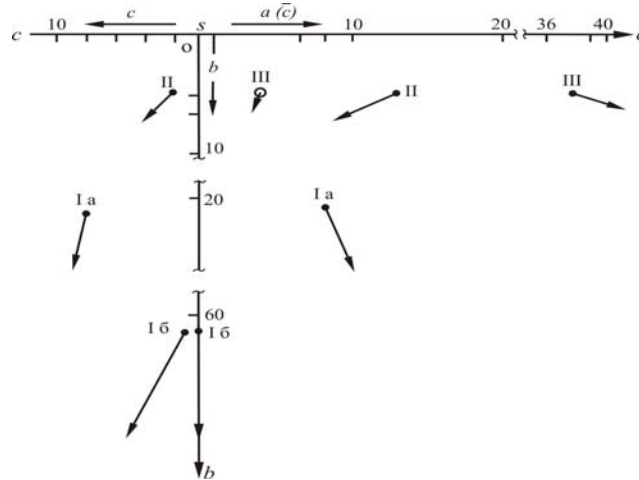


Рис. 3. Результати перерахунку андезитобазальту на векторній петрохімічній діаграмі О.М. ЗАВАРИЦЬКОГО

На діаграмі видно, що це порода нормального ряду з високим вмістом кольорових мінералів ($b = 20,7$) і відносно великою основністю плагіоклазу ($c = 7,6$). Кольорові компоненти породи характеризуються високим вмістом Mg ($m' = 47$) і Fe ($f' = 37$) і низьким вмістом Ca ($c' = 16$). Вміст K у породі низький ($n = 84$), оскільки вектор на площині **scb** нахилений круто вниз.

МЕТОД О.О. ПРЕДОВСЬКОГО

Метод перерахунку хімічних аналізів використовується для вирішення таких задач: 1) розпізнавання первинної природи метаморфізованих вулканогенних і осадових порід; 2) порівняння складу осадів областей живлення і синхронних вулканітів; 3) характеристики складу асоціацій вулканогенних і осадових порід; 4) дослідження еволюції осадового і вулканогенно-осадового процесу в часі та в просторі [7].

Як основні параметри при перерахунках використовують фемічність (F), окрему глиноземистість (A) і калійність (K) гірських порід. Вибір цих параметрів визначається основним завданням методу – розпізнати первинну природу метаморфічних гірських порід. Для цього параметри перерахунку мають відображати принципову різницю в хімізмі седиментогенних і магматогенних утворень.

Першою з таких особливостей є відокремлення кремнезему від фемічних компонентів, що характеризує процеси гіпергенного звітрювання і осадової диференціації. Оцінка фемічності (основності) гірських порід (у молекулярних кількостях):

$$F = \frac{\text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{FeO} + \text{MgO}}{\text{SiO}_2}$$

дає змогу серед алюмосилікатних осадових утворень виділяти більш кислі продукти по мірі збільшення загальної «зрілості» осадків – до мономінеральних кварцових псамітів.

Друга важлива особливість екзогенного породоутворення – це накопичення глинозему, яке характеризується параметром A (окрема глиноземистість). Цей параметр вираховують за формулою (в молекулярних кількостях):

$$A = \text{Al}_2\text{O}_3 - (\text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O} + \text{CaO})$$

Він описує ступінь звітрювання вихідних порід і масштаб осадової диференціації речовини, оскільки в ході цих процесів збільшується частка глинозему вільного або такого, який входить до складу шаруватих силікатів або, навпаки, зменшується частка цього компонента, зв'язаного в каркасних та інших побудовах. Змен-

шення CaO на величину CO₂ (CaO'=CaO-CO₂ в молекулярних кількостях) дає змогу врахувати частку карбонатної речовини у змішаних за складом осадових породах.

I, Також суттєвою тенденцією процесів звітрювання і осадко-накопичення є накопичення калію відносно натрію. Параметр K=K₂O-Na₂O (в молекулярних кількостях) і характеризує цю тенденцію.

Крім перелічених основних параметрів, для діагностики глинистих і близьких до них порід використовуються співвідношення окремих компонентів: SiO₂/Al₂O₃, MgO/Al₂O₃, (FeO+Fe₂O₃)/MgO, які вираховують у молекулярних кількостях[див.: 8].

Послідовність розрахунків

- 1) Переводять масові частки оксидів у % в молекулярні кількості.
- 2) Додають молекулярні кількості FeO+Fe₂O₃+MgO.
- 3) Ділять суму молекулярних кількостей фемічних оксидів на молекулярну кількість SiO₂, отримують параметр F.
- 4) Знаходять параметр K як різницю молекулярних кількостей K₂O і Na₂O.
- 5) Коли в породі є CO₂ (в кількості до 10%) вираховують її молекулярну кількість із кількості CaO і отримують CaO'.
- 6) Сумують молекулярну кількість CaO' з молекулярними кількостями K₂O і Na₂O.
- 7) Отриману в п.6 суму віднімають від молекулярної кількості Al₂O₃ і отримують параметр A.
- 8) Для безлужних глиноземисто-залізисто-магнезіальних порід визначають співвідношення (в молекулярних кількостях): SiO₂/Al₂O₃, MgO/Al₂O₃, (FeO+Fe₂O₃)/MgO.
- 9) Отримані дані наносять на діаграми.

Найбільш загальною діаграмою є ФАК (рис. 4)

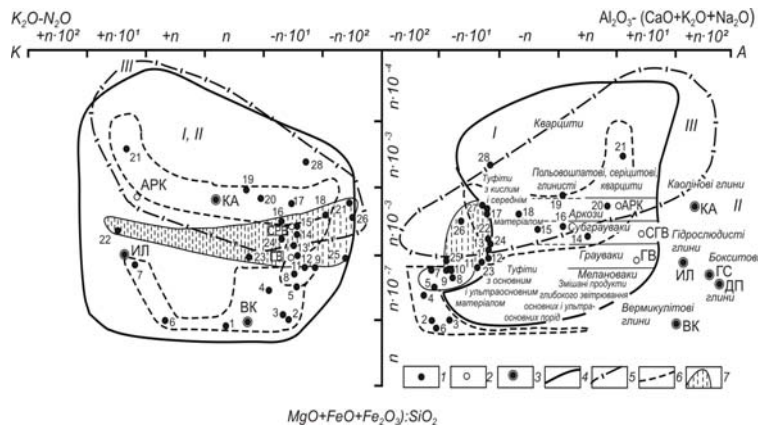


Рис. 4. Діаграма ФАК для реконструкції первинного складу метаморфізованих алюмосилікатних магматичних і осадових порід. За О.О. Предовським (1980) [7].

Точки складів: 1 – вивержених порід; 2 – осадових порід; 3 – мінералів; межі: 4 – поля зернистих осадових порід (у правій частині діаграми) та об'єднаного поля уламкових порід і глин (у лівій частині); 5 – поля хомогенних силіцидів; 6 – поля магматичних порід (зверху донизу – кислих, середніх і кислих, основних, ультраосновних); 7 – поля лужних магматитів. *Поля осадових і вулканогенно-осадових порід*: I – зернисті осадові та змішані породи; II – пеліти; III – хомогенні силіцити; *середні склади порід*: ГВ – грауваки, СГВ – субграуваки, АРК – аркози; *середні склади мінералів*: КА – каолінит, ИЛ – гідрослюди, ВК – вермікулит, ГС – гібсит, ДП – діаспор. *Середні склади вивержених порід*: 1 – дуніт, 2 – верліт, 3 – пікрит, 4 – діалагіт, 5 – еклогіт, 6 – кімберліт, 7 – лейцитит, 8 – габро, 9 – спіліт, 10 – есексит, 11 – діорит, 12 – кварцовий діорит, 13 – гранодіорит, 14 – дацит, 15 – граніт олігоклазовий, 16 – граніт вапнисто-лужний, 17 – комендит, 18 – тронд'єміт, 19 – апліт, 20 – ріоліт, 21 – граніт пегматоїдний, 22 – вітербіт, 23 – сієніт вапнисто-лужний, 24 – трахіт, 25 – луяврит, 26 – уртіт, 27 – маріуполіт, 28 – анортозит.

На діаграмі ФАК (див. рис.4) показані границі полів магматичних порід, зернистих осадових і змішаних порід, уламкових осадових порід і глин, хомогенних силіцидів. За лужністю (в лівій частині діаграми) всі групи порід перекриваються полем глин, і їхнє розчленування дуже проблематичне. Однак за фемічністю – окремою глиноземистістю (права частина діаграми) надійно відділяються

магматити ультраосновного, основного і лужного складу від осадових утворень. Для середніх і кислих магматитів спостерігається перекриття з уламковими осадами і частково з хомогенними силіцидами. Чітко відділяються глини та боксити. Фігуративні точки для окремих типів магматичних гірських порід і деяких породоутворюючих мінералів дають змогу орієнтуватися в межах тих чи інших полів діаграми. Для більш детального аналізу кластогенних, глинистих і глиноземисто-залізисто-магнезіальних безлужних утворень запропоновані спеціальні діаграми.

За допомогою діаграми АF для кластогенних алюмосилікатних осадових утворень (рис. 5) можна розділити ці утворення за окремою глиноземистістю (на високоглинисті, глинисті, малоглинисті й перехідні до туфітів утворення) і за фемічністю (на кварцові, польвошпат-кварцові і слюдисто-кварцові, аркозові, субграувакові, граувакові й мелановакові породи).

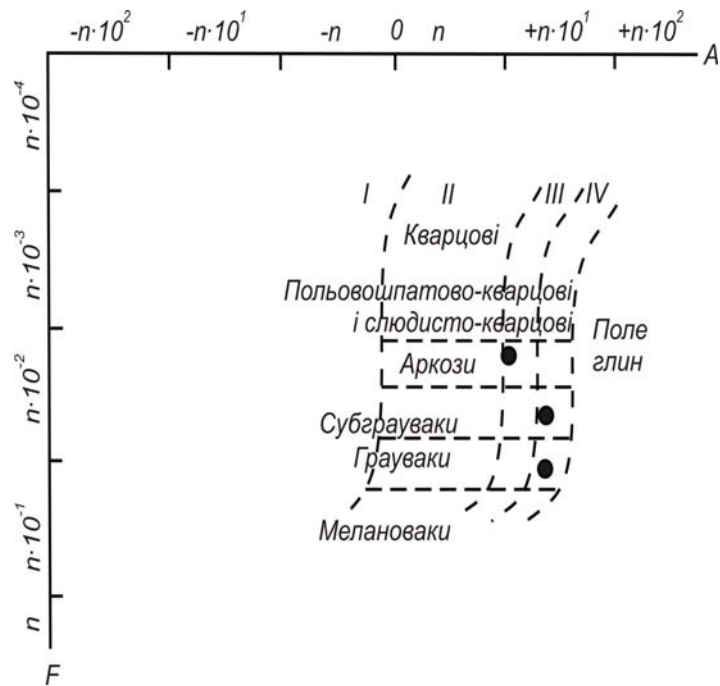


Рис. 5. Співвідношення полів кластогенних осадових утворень у зоні АF (за Предовським). По вертикалі – класи за немічністю – від кварцових порід до мелановак. По горизонталі – різниця за часною глиноземистістю: 1– перехідні до туфітів і туфіти; 11– малоглинисті; 111– глинисті; 1V– високоглинисті. Точки – середні значення порід по класах.

Оскільки розрахунок за своєю технікою вельми простий, наведемо лише один приклад перерахунку хімічного аналізу кварц-біотитового сланцю з кордієритом (табл. 4) [8].

Таблиця 4

Перерахунок хімічного аналізу кварц-біотитового сланцю з кордієритом

Компоненти	Масова частка, %	Молекулярна кількість	Розрахунок	Коефіцієнт
SiO ₂	61,92	1030		
TiO ₂	0,79			
Al ₂ O ₃	15,25	150	150-69 = 81	<i>A</i>
Fe ₂ O ₃	4,63	29	} 164:1030=0,159	<i>F</i>
FeO	5,52	77		
MnO	0,12			
MgO	2,34	58		
CaO	1,62	29	29-15=14	CaO'
Na ₂ O	1,13	18	18+37+14=69	
K ₂ O	3,50	37	37-18=19	<i>K</i>
CO ₂	0,63	15		

При перерахунку хімічного аналізу сланцю додаємо молекулярні кількості фемічних компонентів (FeO+Fe₂O₃+MgO=77+29+58=164) і ділимо суму на молекулярну кількість SiO₂ (1030).

Отримана величина $F=164:1030=0,159$ характеризує основність (або фемічність) породи. Визначаємо калійність як різницю $K_2O-Na_2O=37-18=19$. Оскільки в породі є CO₂, зменшуємо частку CaO на молекулярну кількість CO₂ і отримуємо $CaO'=29-15=14$. Додаючи цю величину до молекулярної кількості K₂O і Na₂O, вираховуємо отриману суму з молекулярної кількості Al₂O₃ – $150-(14+37+18)=81$. Таким чином, окрема глиноземистість сланцю, який аналізується, дорівнює 81. За діграмами (див. рис. 4 та рис. 5) ви-

значаємо, що вихідна порода являє собою високоглиноземисту грауваку.

Карбонатні породи з масовим вмістом $>10\%$ CO_2 перераховуємо окремо. Для них вираховуємо такі параметри: окрема глиноземистість $A = \text{Al}_2\text{O}_3 - (\text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O})$, магнезійність MgO/CaO , калійність $\text{K}_2\text{O} - \text{Na}_2\text{O}$. Комбінований розгляд цих параметрів дає можливість класифікувати карбонатні утворення за генетичними типами, виділяючи продукти осадконакопичення у платформних умовах (чисті й особливо чисті вапняки та доломіти) і карбонатні породи з різними домішками силікатного (терігенного або вулканогенного) матеріалу (рис. 6).

Як приклад, розглянемо перерахунок хімічного аналізу діоксидового кальцифіру (табл. 5.) [8]

Таблиця 5

Перерахунок хімічного аналізу діоксидового кальцифіру

Компоненти	Масова частка, %	Молекулярна (формульна) кількість	Розрахунок	Коефіцієнт
SiO_2	34,18	569		
TiO_2	0,51			
Al_2O_3	6,85	68	$68 - (11 + 31) = 26$	<i>A</i>
Fe_2O_3	1,09	7	}	<i>F</i>
FeO	2,05	29		
MnO	0,15			
MgO	3,76	93	$93 : 498 = 0,187$	<i>M</i>
CaO	27,89	498		
Na_2O	1,89	31		
K_2O	1,02	11	$11 - 31 = -20$	<i>K</i>
P_2O_5	0,08			
CO_2	29,52	670		

Наносимо за цими характеристиками фігуративні точки на діаграму (МКА) і встановлюємо (рис. 6), що вихідна порода була доломітовим вапняком із домішкою вулканогенно-уламкового матеріалу. На це вказує поєднання полів **8** (права частина діаграми) і **13** (ліва частина діаграми).

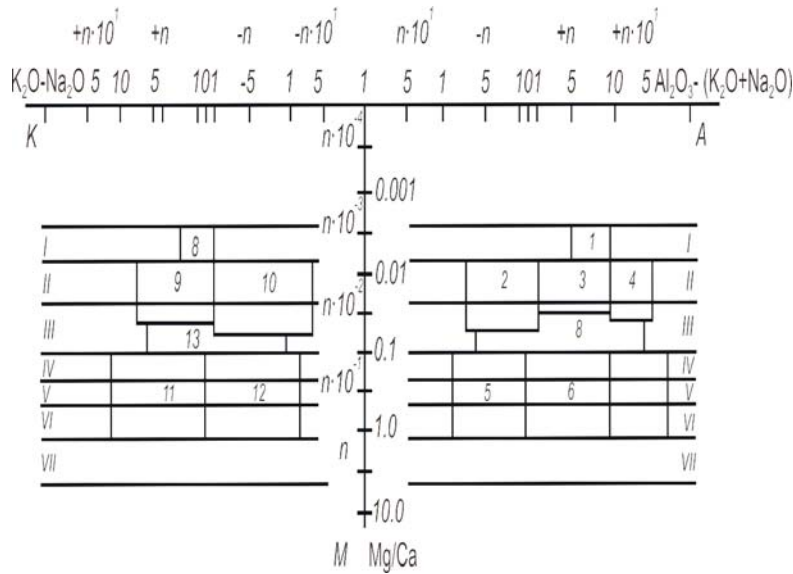


Рис. 6 Діаграма МАК для систематики й інтерпретації складів карбонатних осадових і метаосадових порід. За О.О. Предовським (1980) [7]. Градації за співвідношенням магnezії та вапна: I – вапняки з мінімальним складом магnezії; II – вапняки звичайні; III – вапняки слабомагnezіальні; IV – вапняки доломітові; V – доломіти вапнякові; VI – доломіти; VII – доломіти з домішкою магnezиту. 1–9 – особливо чисті від магnezії та силікатної домішки вапняки стабільних зон седиментації; 3, 10 – звичайні вапняки; 4, 10 – глинисті й чисті вапняки; 2, 11 – травертини, вапнисті туфи, вапняки окремих вулканогенно-осадових фацій; 13, 3 – різні типи слабомагnezіальних вапняків – від таких, які містять теригенну глинисту домішку з високими значеннями параметрів А та К до порід віддалених вулканогенно-осадових фацій з низькими значеннями А та К; 5, 6, 7 у поєднанні з 11 – різноманітні доломітові вапняки, вапнисті доломіти іа доломіти, найчастіше підлегли теригенно-осадовим фаціям; 5, 6, 7 у поєднанні з 12 – ті ж породи, але підлегли вулканогенно-осадовим фаціям, у тому числі кременісті доломіти різних епох.

Наприкінці слід зазначити дві особливості петрохімічних перерахунків за методом О.О. Предовського. Перша – поодинокі аналізи не дають надійних висновків. Друга – хоча на діаграмах і використовують «гранулометричні» терміни – пісковик, глина тощо, використання діаграм дає відповідь лише на питання про ступінь хімічної зрілості осадової породи, а не про розмірність її уламкової частини. Тому в практиці перерахунків трапляються випадки, коли глинисті породи при нанесенні на ФАК-діаграму опяняються в полі пісковиків. Вірогідно, в цих випадках проявляються відмінності кластогенних глин від хомогенних (останні завжди розташовані в полі глинистих порід) [див.:8].

МЕТОД Т. БАРТА

Метод перерахунку був запропонований для порівняння метасоматичних порід з метою оцінки привносу–виносу речовини при процесах заміщення зі збереженням об'єму. Метод став відомим як «кисневий метод Т. Барта», тому що базовою для порівняння була вибрана «стандартна комірка», в якій міститься 160 іонів кисню. Для зручності розрахунку С.Д. Четвериков запропонував проводити розрахунок на 1600 кисню (щоб уникнути використання дрібних чисел) [9].

Перерахунок нескладний і зводиться до кількох операцій:

1. Вагові проценти хімічного аналізу перераховують на атомні кількості.
2. Вираховують кількості атомів кисню, пов'язані з електропозитивними елементами. Для цього: а) кількість атомів Si та Ti множать на 2, тому що за формулою діоксиду кремнію і титану на кожний атом цих елементів припадає по два атоми кисню; б) кількість атомів Al^{+3} та Fe^{+3} множать на 1,5; в) для двовалентних елементів (Fe^{+2} , Mn^{+2} , Mg^{+2} , Ca^{+2} тощо) кількість кисню дорівнює кількості цих елементів; г) для лужних елементів (Na, K, Li) множать на 0,5.
3. Для визначення кількості кисню, пов'язаного з водородом, можна виходити з двох принципів: або вважати, що весь водород пов'язаний у гідроксильні групи, або ж вважати, що в мінералах є сформовані молекули води. У першому випадку кількість кисню, пов'язаного з водородом, буде дорівнювати кількості атомів кисню, а в другому – тільки половині. У більшості випадків використовують перший варіант, тому що в більшості мінералів гірських порід кисень входить у

гідроксильні групи та значно рідше буває пов'язаний у кристалізаційній воді (цеоліти, гіпс тощо).

4. Визначають суму атомів кисню, який входить в оксиди, визначені в результаті аналізу.
5. Визначають кількість атомів кожного елементу в стандартній комірці, виходячи з пропорції: кількість атомів елементу, який міститься в стандартній комірці дорівнює атомній кількості елемента помноженій на відношення 1600 до суми атомів кисню.
6. Складають «формулу» породи, яка містить всі атоми з коефіцієнтами, вирахованими за п.5. При цьому кількість атомів кисню визначають як різницю: 1600 мінус кількість гідроксильних груп.
7. Порівнюючи отримані формули для двох або декількох порід визначаємо кількість привнесених або винесених атомів кожного елемента.

Для пояснення ходу розрахунку розглядаємо приклад наведений Т. Бартом: перерахунок аналізу жильної породи типу *мінети* одного з родовищ Норвегії. Ця порода утворилася в результаті метасоматозу породи типу метадолериту (табл. 6) [9].

Таблиця 6

Роговообманкова мінета (за Т. Бартом)

Оксиди	Вагові %	Атомні кількості	Множники	Атомні кількості кисню	Кількість електропозитивних іонів у стандартній комірці
SiO ₂	52.68	878	2	1756	477
TiO ₂	0.71	34	2	68	18
Al ₂ O ₃	14.02	274	1.5	411	149
Fe ₂ O ₃	5.04	62	1.5	93	34
FeO+MnO	6.40	89	1	89	48
MgO	3.35	83	1	83	45
CaO	6.42	114	1	114	62
Na ₂ O	2.43	78	0.5	39	42
K ₂ O	3.30	70	0.5	35	38
P ₂ O ₅	1.30	18	2.5	45	9
H ₂ O	1.89	212	1	212	115
Сума	99.54	1912		2945	1037

Послідовність розрахунків

1. Вагові проценти перераховують на атомні кількості.
2. Вираховують кількості атомів кисню, пов'язаних з даним елементом, шляхом множення на вказаний у відповідному стовпчику (див. табл. 6) множник.
3. Сумують загальну кількість кисню, пов'язаного в оксидах.
4. Вираховують кількість атомів окремих електропозитивних елементів у стандартній комірці множенням їх атомної кількості на множник $1600/2945=0,543$. Наприклад, кількість атомів $Al=274 \times 0,543=149$.
5. Формула породи:
 $K_{38}Na_{42}Ca_{62}Mg_{45}(Fe^{+2}+Fe^{+3})_{82}Al_{149}Ti_{18}Si_{477}P_9(O_{1485}OH_{115})$.
Формула вихідної метадолеритової (діабазової) породи –
 $K_{14}Na_{45}Ca_{90}Mg_{59}(Fe^{+2}+Fe^{+3})_{107}Al_{160}Ti_{19}Si_{485}P_2(O_{1506}OH_{94})$.
Зміни при метасоматозі такі: принесені – K, P, OH; винесені – Na, Fe, Ti, Ca, Al, Mg, Si.

Нанесення результатів перерахунку на прямокутну діаграму, де по осі ординат наносяться відповідні елементи (Si, Ca, Na, тощо), а по осі абсцис – точки порід (незмінені та змінені) дає змогу більш наочно спостерігати хід змінення складу порід під впливом метасоматичних перетворень.

МЕТОД О.О. МАРАКУШЕВА

Головним завданням методу є отримання оцінки кислотності-основності гірських порід на основі термодинамічних характеристик реакцій мінералоутворення. Для цього необхідно дати єдину форму вираження хімічного складу гірських порід у зручному для порівняння вигляді, який не залежить від генетичних особливостей породи і її мінерального складу. Важливо також простежити змінювання кислотно-основних властивостей гірських порід залежно від умов їх утворення (головним чином, від температури і тиску). Для характеристики порід і мінералів зручно використовувати їх спорідненість до протону: чим вона вища, тим сильніше проявляються основні властивості речовин. Хімічна спорідненість речовини до протону визначається приростом вільної енергії речовин, які беруть участь у реакції – $\Delta Z_{Tk}^{H_2O}$. Відлік основності мінералів ведеться по відношенню до води для $\Delta Z_{Tk}=0$. Тому в символах і є введений індекс H_2O . Ця величина ($\Delta Z_{Tk}^{H_2O}$) і характеризує основність твердих або розплавлених кисневих поєднань металів, розрахунок реакцій

(на один протон) дає можливість зробити пряме зіставлення хімічних сполук (поєднань) металів з різним ступенем окиснення [8].

Є два способи для оцінки $Z_{Тк}^{H_2O}$ Δ (загальної основності) гірських порід. Перший спосіб – сумування величин $\Delta Z_{Тк}^{H_2O}$ для оксидів металів, які входять до складу породи. По суті, це єдина об’єктивна можливість зіставити загальну основність розплавів, скловмісних магматичних порід і прихованокристалічних порід іншого генезису. Для повнокристалічних порід із відомим мінеральним складом загальну основність гірської породи можна отримати також іншим способом: як суму $\Delta Z_{Тк}^{H_2O}$ мінералів, котрі входять до складу породи. При цьому загальна основність гірської породи буде меншою (ніж при розрахунках першим способом), тому що основність складних сполук (більшість головних породоутворюючих мінералів) не визначається простою сумою основностей оксидів, із яких складається мінерал, унаслідок ефекту кислотно-основної взаємодії речовин при реакціях мінералоутворення.

Як видно з табл. 7, величина $\Delta Z_{Тк}^{H_2O}$ для одного й того ж оксиду в розрахунку на один іон металу коливається залежно від типу кристалічної ґратки.

Таблиця 7

Показники основності оксидів елементів, які входять до складу нормативних мінералів, з розрахунку на один іон (Meⁿ⁺) [8 з доповненнями]

Іон	Сполука	$\Delta Z \frac{H_2O}{Тк}$, кДж			
		298°	600°	900 ^l	1200°
P ⁵⁺	Апатит	-95,0	-102,9	-108,8	-113,0
Si ⁴⁺	Кварц, силікати, алюмосилікати	-31,4	-20,9	15,9	-13,4
Ti ⁴⁺	Рутил, титанати	-77,8	-69,9	-66,1	-63,2
C ⁴⁺	Карбонати, газ (CO ₂)	-49,0	-36,0	-28,5	-24,3
Zr ⁴⁺	Циркон	-53,6	-46,0	-41,0	-36,8

Al ³⁺	Алюмосилікати	36,8	31,4	30,1	29,3
	Силікати алюмінію	38,9	33,9	32,6	32,2
	Діаспор	39,7	34,7	31,8	–
	Беміт	46,6	35,6	32,6	–
	Гібсит	41,0	36,4	33,9	–
	Корунд	41,8	36,8	36,0	35,6
Cr ³⁺	Хроміт	-0,08	6,7	9,6	11,3
Fe ³⁺	Силікати, гематит	-24,7	-20,9	-18,8	-18,4
Fe ²⁺	Ортосилікати (олівін, гранати)	47,3	51,9	58,6	
	Метасилікати (піроксени, амфіболи)	46,0	49,8	54,0	65,7
	Слюди	46,0	49,4	53,6	61,9
	Кордієрит	44,4	46,4	53,1	61,5
	Глини	51,5	55,2	61,5	59,4
	Титаніт	41,8	41,8	48,1	55,2
	Шпінель	22,6	23,4	24,3	25,1
	Хроміт	16,7	18,0	19,7	20,9
	Магнетит	33,9	35,1	34,7	34,7
	Сидерит	21,8	74,5	127,2	179,5
	Піротин	11,3	15,9	20,5	24,7
	Пірит	15,5	20,1	24,3	28,5
	Вольфраміт	17,2	18,4	20,1	21,3
	Mn ²⁺	Ортосилікати	71,5	83,7	92,9
Метасилікати		71,5	83,3	91,6	100,8
Mg ²⁺	Ортосилікати	82,8	95,4	105,4	115,9
	Метасилікати	78,2	91,2	102,5	112,4
	Слюди	75,3	87,4	100,0	112,1
	Кордієрит	74,5	84,1	97,1	110,0
	Глини	91,2	104,2	114,6	–
	Шпінель	77,8	89,5	98,7	107,5
	Магнезит	48,5	113,4	168,2	230,5
	Хлормагнезит	53,6	102,1	141,4	179,1
	Селаїт	-69,5	-22,2	15,9	54,4

Ca ²⁺	Ортосилікати	113,4	128,4	134,3	140,2
	Піроксени	88,3	104,2	118,8	133,9
	Амфіболи	84,1	96,2	107,1	118,4
	Цоїзит	80,3	89,1	100,0	
	Анортит	82,8	91,2	98,3	105,0
	Глини	50,6	105,9	163,2	-17,6
	Апатит	66,5	50,2	18,4	228,4
	Кальцит	46,4	110,0	169,9	129,7
	Гідрофіліт	-6,7	42,3	86,2	70,3
	Флюорит	-63,2	-14,2	30,1	35,6
	Ангідрит	-172,0	-99,2	-31,8	
Na ⁺	Альбіт	40,2	68,2	95,0	121,8
	Глини	52,7	105,9	159,0	153,6
	Нефелін	61,5	90,0	122,2	174,1
	Жадеїт	49,4	87,9	131,0	169,5
	Лужні амфіболи	53,1	92,5	131,8	125,9
	Парагоніт	44,4	72,4	99,9	145,2
	Віліоміт	-7,5	41,8	94,1	128,0
	Галіт	-26,8	24,7	76,6	101,7
	Тенардит	-72,8	-13,4	44,8	
K ⁺	Калішпат	23,8	60,2	95,0	125,9
	Глини (гідрослюда)	27,6	61,5	94,6	128,0
	Лейцит	51,0	91,2	142,3	192,5
	Кальсиліт	74,9	107,9	142,7	167,8
	Біотит (флогопіт-аніт) Біотит	40,6	77,4	105,9	134,3
	(істоніт-сидерофіліт)	38,5	76,6	104,2	133,5
	Мусковіт	23,0	59,4	51,0	125,1
K ⁺	Омфацит	36,4	74,9	106,7	138,5
	Лужні амфіболи	41,4	78,2	106,7	135,1
	Каробіт	17,2	76,1	132,6	188,3
	Сильвін	-31,0	28,	86,2	144,3
	Арканіт	-77,0	-9,2	57,3	122,6
S ²⁻	Сульфіди, газ (H ₂ S)	-23,4	-51,9	-66,5	-77,8
F ⁻	Фториди, газ (HF)	-78,2	-81,2	-83,7	-86,2
Cl ⁻	Хлориди, газ (HCl)	-107,1	-121,3	-130,1	-137,2

Для розрахунку загальної основності гірської породи необхідне приведення хімічного аналізу до стандартної форми. Таке приведення полегшує подальші розрахунки. Крім того, воно зручне для прямого безпосереднього зіставлення різних гірських порід між собою. Такою формою є еквівалентна формула – сума атомних кількостей елементів, які входять до складу породи, еквівалентних одному протону (або 0,5 атома кисню). При розрахунках еквівалентної формули і величини загальної основності гірської породи кількість води в породі не враховується, тому що неможливо зіставляти магматичні, метаморфічні й осадові породи, які різко відрізняються за вмістом води. З іншого боку CO₂ обов'язково береться до уваги, тому що вона характеризується значною від'ємною величиною

$$\Delta Z_{\frac{H_2O}{TK}}$$

У табл. 7 і 8 величини ΔZ наведені для чотирьох значень температури – 298К, 600К, 900К і 1200К. Вибір константи визначається з метою перерахунку: порівняння загальної основності та складу гірських порід з класифікаційними цілями або, наприклад, для реконструкції дометаморфічного стану породи, з'ясування еволюції складу і загальної основності порід при зміні РТ умов їх формування тощо. У першому випадку розрахунок проводиться для всіх порід при одній температурі (наприклад, 298К), в другому – вибираються константи, більш близькі до реальних умов породоутворення.

Таблиця 8

Показники основності оксидів елементів, які входять до складу гірських порід, з розрахунку на один іон (Meⁿ⁺) [8, з доповненнями]

Іон	$\Delta Z_{\frac{H_2O}{TK}}$, кДж			
	298К	600К	900К	1200К
P ⁵⁺	-95,0	-102,9	-108,8	-113,0
Si ⁴⁺	-31,4	-20,9	-15,9	-13,4
Ti ⁴⁺	-77,8	-69,9	-66,1	-63,2
C ⁴⁺	-49,0	-36,0	-28,5	-24,3
Cr ³⁺	-0,08	6,7	9,6	11,3
Al ³⁺	41,8	36,8	36,0	35,6
Fe ³⁺	-24,7	-20,9	-18,8	-18,4
Fe ²⁺	56,1	58,2	61,1	65,7
Mn ²⁺	96,7	108,8	118,8	123,0
Mg ²⁺	114,6	127,2	137,7	146,4
Ca ²⁺	177,4	193,3	207,9	222,6
Na ⁺	187,9	221,8	257,7	292,9
K ⁺	236,0	277,4	318,0	360,7
S ⁶⁺	-162,8	-221,8	-254,0	-277,4
S ²⁻	-23,4	-51,9	-66,5	-77,8
F ⁻	-78,2	-81,2	-83,7	-86,2
Cl ⁻	-107,1	-121,3	-130,1	-137,2

Оскільки протонні еквіваленти, розраховані на один протон (або 0,5 атома кисню), дуже малі, що не завжди зручно, О.О. Маракушев для перерахунків запропонував усі розрахунки виконувати на 100 протонів (50 атомів кисню), і тільки кінцеву величину ΔZ приводити до одного протону.

Розрахунок загальної основності гірської породи без урахування її мінерального складу відбувається за такою схемою:

1. Масові частки оксидів у процентах перераховуються за таблицями на молекулярні кількості (див. додаток).
2. Визначають атомні кількості катіонів (множенням молекулярних кількостей того чи іншого оксиду на число катіонів в оксиді).
3. Визначають атомні кількості кисню (множенням відповідних молекулярних кількостей на число іонів кисню, які входять у формулу оксиду (на 2 для SiO_2 , TiO_2 ; на 3 для Fe_2O_3 , Al_2O_3 тощо)).
4. Визначають суму атомних кількостей кисню.
5. Розраховують загальний множник (ділять 50 на суму атомних кількостей кисню).
6. Знаходять протонні еквіваленти катіонів (множенням їх атомних кількостей на загальний множник). Сума протонних еквівалентів катіонів (з урахуванням їх валентностей) має дорівнювати 100. Перевіряємо це. Для цього множимо протонні еквіваленти на валентність катіонів (на 4 для Si, Ti, C; на 3 для Al і Fe; на 2 для Fe, Mn, Mg, Ca; на 1 для K, Na; на 5 для P) і додаємо отримані величини. Коли сума не дорівнює 100, приводимо її до 100 у відповідності з загальними правилами.
7. Вираховують пай кожного катіона в ΔZ гірської породи, для цього множать протонний еквівалент на ΔZ з табл. 8 (при цьому треба враховувати температуру).
8. Сумують величини ΔZ і знаходять $\Delta Z_{T_k}^{H_2O}$ для гірської породи в цілому (отриману величину зменшують у 100 разів для приведення до одного протона).
9. Виписують еквівалентну формулу породи (в розрахунку на 50 атомів кисню).

Розрахунок загальної основності повнокристалічної гірської породи з урахуванням її мінерального складу на початкових стадіях проводять як у попередньому випадку. Однак розрахунок пая катіонів у п.7 відрізняється від попереднього випадку: залежно від мінерального складу породи один і той самий катіон може

траплятися у складі одного або кількох мінералів, і це слід брати до уваги при розрахунках.

7а. В полімінеральній породі для кожного катіона, який трапляється в декількох мінералах, проводиться вирахування частки кожного мінералу від їх загальної кількості. Так, у сланці, який складається (в %) із Q 40; Pl 5; Bi 25; Gr 5; Crd 15; Sill 10, кальцій є в плагіоклазі та гранаті, а Mg і Fe⁺² – в біотиті, гранаті й кордієриті. Тому для розрахунку пая ΔZ , який вносить у ΔZ породи кальцій, необхідно розраховувати його окремо від кальцію із плагіоклазу і із гранату. У відповідності з вмістом цих мінералів у породі (5% плагіоклаза і 5% граната) – 50% буде становити пай плагіоклазового кальцію і 50% – гранатового кальцію. Для магнію і Fe⁺² (в породі 25% Bi, 5% Gr і 15% Crd) відповідно маємо 56% біотитової долі, 11% гранатової і 33% кордієритової.

7б. Вираховуємо пай кожного катіона в ΔZ гірської породи, множачи протонний еквівалент катіона (частку протонного еквіваленту) на відповідну величину ΔZ , взяту із табл. 7.

Завершення розрахунку (пп. 8, 9) також, як і початок, не відрізняється від першого випадку. (див.:8)

Як приклад розглянемо перерахунок хімічного аналізу перидотиту (табл. 9).

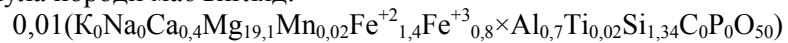
Таблиця 9

Перерахунок хімічного аналізу перидотиту

Компоненти	Масова частка %	Молекулярна кількість	Атомна кількість катіонів (у дужках множник)	Атомна кількість кисню (в дужках множник)	Протонний еквівалент-число атомів металу на 50 атомів кисню	Приведення протонного еквіваленту до 100 одиниць	Виправлений протонний еквівалент	Енергетичний пай катіона $\Delta Z \frac{H_2O}{TK}$, кДж
SiO ₂	41.18	686	(1) 686	(2) 1372	13.0	52.0 53.6	13.4	-420.5

TiO ₂	0.06	1	(1) 1	(2) 2	0.02	0.08	0.02	-1.7
Al ₂ O ₃	1.80	18	(2) 36	(3) 54	0.7	2.1	0.7	29.3
Fe ₂ O ₃	3.51	22	(2) 44	(3) 66	0.8	2.4	0.8	-19.7
FeO	5.39	75	(1) 75	(1) 75	1.4	2.8	1.4	78.7
MnO	0.12	1	(1) 1	(1) 1	0.02	0.08	0.02	2.1
MgO	40.18	997	(1) 997	(1) 997	18.9	37.8 38.2	19.1	2189.5
CaO	1.32	23	(1) 23	(1) 23	0.4	0.8	0.4	71.1
Na ₂ O	0.05	-	(2)	(1)	-	-	-	-
K ₂ O	0.03	-	(2)	(1)	-	-	-	-
CO ₂	--	-	(1)	(2)	-	-	-	-
Сума				2590		98.06 100.06		1928.8

Знаходимо молекулярні кількості для всіх оксидів (графа 3), вираховуємо атомні кількості катіонів (графа 4) і кисню (графа 5), суму атомних кількостей кисню і, розділивши 50 на цю суму (2590), отримуємо загальний множник (0,019). Множенням атомних кількостей катіонів на загальний множник вираховуємо протонні еквіваленти цих катіонів (графа 6). При перевірці виявляється, що сума протонних еквівалентів (з урахуванням валентності катіонів) не дорівнює 100. Тому вводимо поправку (графа 7) і отримуємо виправлені величини протонних еквівалентів (графа 8). Перемножимо їх на величини ΔZ_{298K} для кожного оксиду за табл. 7, сумуємо результати (графа 9) і знаходимо ΔZ_{298K} для породи в розрахунку на 100 протонів. Таким чином, істинна загальна основність перидотиту (в розрахунку на один протон) дорівнює +19,39 кДж. Еквівалентна формула породи має вигляд:



Для визначення загальної основності перидотиту з урахуванням його мінерального складу розраховуємо співвідношення олівіну і енстатиту (які становлять у породі 67 і 30% відповідно) на 100%, тобто 69% Ol і 31%En (табл. 10).

**Розрахунок загальної основності перидотиту з урахуванням
його мінерального складу**

Катіони	Протонний екві- валент катіона	ΔZ_{298K} за табл. 46	Енергетичний пай катіона ΔZ_{298K}
Si ⁴⁺	13.4	-31.4	-420.5
Ti ⁴⁺	0.02	-77.8	-1.7
Al ³⁺	0.7	36.8	25.9
Fe ³⁺	0.8	-24.7	-19.7
Fe ²⁺	1.4	47.3(69%)	45.6
		46.0(31%)	20.1
Mn ²⁺	0.02	71.5	1.3
Mg ²⁺	19.1	82.8(69%)	1091.6
		78.2(31%)	463.2
Ca ²⁺	0.4	88.3	36.4
Сума			1241.0

Приводячи величину ΔZ гірської породи до одного протона (+12,41кДж), зверніть увагу, що вона в 1,5 разу менша, ніж та сама величина, розрахована по оксидах без урахування мінерального складу породи. Зниження загальної основності породи на 6,91 кДж є результат кислотно-основної взаємодії при кристалізації мінералів перидотиту із розплаву.

При зіставленні між собою хімічних складів гірських порід, перерахованих за методом О.О. Маракушева, можна користуватись як еквівалентними формулами, так і різними діаграмами або коефіцієнтами, в загальному вигляді, які характеризують склад породи. Слід відзначити, що метод не має канонічних діаграм. Найбільш цікаві деякі коефіцієнти, розраховані у протонних еквівалентах катіонів для характеристики тих чи інших суттєвих особливостей порід. Серед них слід відзначити: коефіцієнт глиноземистості – $A' = Al:(Al+Na+K+2Ca)$; коефіцієнт залізистості – $Fe' = Fe:(Fe+Mg)$ (залізо враховується сумарно дво- і тривалентне); коефіцієнт калієвості – $K' = K:(K+Na)$ [8].

ЗАКЛЮЧЕННЯ

Наведена методика отримання петрохімічної інформації та розглянуті нечисленні методи петрохімічних перерахунків дають нам змогу в загальних рисах аналізувати петрохімічні особливості магматичних, метаморфічних, метасоматичних і осадових порід, використовуючи той чи інший метод.

ЛІТЕРАТУРА

1. *Висьневский Я.С.* Универсальные таблицы для пересчета состава горных пород / Я.С. Висьневский – Ташкент: Наука, 1965. – 198 с.
2. *Даминава А.М.* Петрография магматических горных пород / А.М. Даминава – М.: Недра, 1967. – 232 с.
3. *Ефремова С.В.* Петрохимические методы исследования горных пород / С.В. Ефремова, К.Г. Стафеев – М.: Недра, 1985. – 511 с.
4. *Заварицкий А.Н.* Пересчет химических анализов изверженных горных пород / А.Н. Заварицкий – М.: Госгеолтехиздат, 1960. – 156 с.
5. *Кочурова Р.Н.* Геометрические методы количественно-минералогического анализа горных пород / Р.Н. Кочурова – Л.: Изд-во Ленинград. ун-та, 1957. – 66 с.
6. *Михеев В.И.* Рентгенометрический определитель минералов / В.И. Михеев – М.: Госгеолтехиздат, 1957. – 868 с.
7. *Предовский А.А.* Геохимическая реконструкция первичного состава метаморфизованных вулканогенно-осадочных образований докембрия / А.А. Предовский – Апатиты: Изд-во АН СССР, 1970. – 114с.
8. *Соболев Р.Н.* Методы петрохимических пересчетов горных пород и минералов / Р.Н. Соболев, В.И. Фельдман – М.: Недра, 1984.– 224 с.
9. *Четвериков С.Д.* Руководство к петрохимическим пересчетам / С.Д. Четвериков – М.: Госгеолтехиздат, 1956. – 245 с.
10. *Чирвинский П.Н.* Средний химический состав главных минералов изверженных, метаморфических и осадочных пород / П.Н. Чирвинский – Харьков: Изд-во Харьков. ун-та им. Горького, 1953. – 95 с.

Додаток І (для розрахунків молекулярних кількостей)
Кремній Si (кременекислота SiO₂; молекулярна вага 60,06)

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
35	583	584	586	589	587	591	593	594	596	598	35
36	599	601	603	604	606	608	609	611	613	614	36
37	616	618	619	621	623	624	626	628	629	631	37
38	633	634	636	638	639	641	643	644	646	648	38
39	649	651	653	654	656	658	659	661	663	664	39
40	666	668	669	671	673	674	676	678	679	681	40
41	683	684	686	688	689	691	693	694	696	698	41
42	699	701	703	704	706	708	709	711	713	714	42
43	716	718	719	721	723	724	726	728	729	731	43
44	733	734	736	738	739	741	743	744	746	748	44
45	749	751	753	754	756	758	759	761	763	764	45
46	766	768	769	771	773	774	776	778	779	781	46
47	783	784	786	788	789	791	793	794	796	798	47
48	799	801	803	804	806	808	809	811	813	814	48
49	816	818	819	821	823	824	826	828	829	831	49
50	833	834	836	838	839	841	843	844	846	848	50
51	849	851	853	854	856	858	859	861	863	864	51
52	866	868	869	871	873	874	876	878	879	881	52
53	883	884	886	888	889	891	892	894	896	897	53
54	899	901	902	904	906	907	909	911	912	914	54
55	916	917	919	921	922	924	926	927	929	931	55

57	949	951	952	954	956	957	959	961	962	964	57
58	966	967	969	971	972	974	976	977	979	981	58
59	982	984	986	987	990	991	992	994	996	997	59
60	999	1001	1002	1004	1006	1007	1009	1011	1012	1014	60
61	1016	1017	1019	1021	1022	1024	1026	1027	1029	1031	61
62	1032	1034	1036	1037	1039	1041	1042	1044	1046	1047	62
63	1049	1051	1052	1054	1056	1057	1059	1061	1062	1064	63
64	1066	1067	1069	1071	1072	1074	1076	1077	1079	1081	64
65	1082	1084	1086	1087	1089	1091	1092	1094	1096	1097	65
66	1099	1101	1102	1104	1106	1107	1109	1111	1112	1114	66
67	1116	1117	1119	1121	1122	1124	1125	1127	1129	1130	67
68	1132	1134	1135	1137	1139	1140	1142	1144	1145	1147	68
69	1149	1150	1152	1154	1155	1157	1159	1160	1162	1164	69
70	1165	1167	1169	1170	1172	1174	1175	1177	1179	1180	70
71	1182	1184	1185	1187	1189	1190	1192	1194	1195	1197	71
72	1199	1200	1202	1204	1205	1207	1209	1210	1212	1214	72
73	1215	1217	1219	1220	1222	1224	1225	1227	1229	1230	73
74	1232	1234	1235	1237	1239	1240	1242	1244	1245	1247	74
75	1249	1250	1252	1254	1255	1257	1259	1260	1262	1264	75
76	1265	1267	1269	1270	1272	1274	1275	1277	1279	1280	76
77	1282	1284	1285	1287	1289	1290	1292	1294	1295	1297	77

Титан Ті (діоксин титану TiO_2 ; молекулярна вага 79,90)

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	000	001	003	004	005	006	008	009	010	011	0
1	013	014	015	016	018	019	020	021	023	024	1
2	025	026	028	029	030	031	033	034	035	036	2
3	038	039	040	041	043	044	045	046	048	049	3
4	650	051	053	054	055	056	058	059	060	061	4
5	063	064	065	066	068	069	070	071	073	074	5
6	075	076	078	079	080	081	083	084	085	086	6
7	088	089	090	091	093	094	095	096	098	099	7
8	100	101	103	104	105	106	108	109	110	111	8
9	113	114	115	116	118	119	120	121	123	124	9

Алюміній А1 (глинозем Al_2O_3 ; молекулярна вага 101,94)

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	000	002	004	006	008	010	012	014	016	018	0
1	020	022	024	026	028	030	032	034	036	038	1
2	040	042	044	046	048	050	050	052	054	066	2
3	058	060	062	064	066	068	070	072	074	076	3
4	078	080	082	084	086	088	090	092	094	096	4
5	098	100	102	104	106	108	110	112	114	116	5
6	118	120	122	124	126	128	130	132	134	136	6
7	138	140	142	144	146	148	150	150	152	154	7

8	156	158	160	162	164	166	168	170	172	174	8
9	176	178	180	182	184	186	188	190	192	194	9
10	196	198	200	202	204	206	208	210	212	214	10
11	216	218	220	222	224	226	228	230	232	234	11
12	236	238	240	242	244	246	248	250	250	252	12
13	254	256	258	260	262	264	266	268	270	272	13
14	274	276	278	280	282	284	286	288	290	292	14
15	294	296	298	300	302	304	305	308	310	312	15
16	314	316	318	320	322	324	326	328	330	332	16
17	334	336	338	340	342	344	346	348	350	352	17
18	354	356	356	358	360	362	364	366	368	370	18
19	372	374	376	378	380	382	384	386	388	390	19
20	392	394	396	398	400	402	404	406	408	410	20
21	412	414	416	418	420	422	424	426	428	430	21
22	432	434	436	438	440	442	444	446	448	450	22
23	452	454	456	458	458	460	462	464	466	468	23
24	470	472	474	476	478	480	482	484	486	488	24
25	490	492	494	496	498	500	502	504	506	508	25
26	510	512	514	516	518	520	522	524	526	528	26
27	530	532	534	536	538	540	542	544	546	548	27
28	550	552	554	556	558	560	562	562	564	566	28
29	568	570	572	574	576	578	580	582	584	586	29

Тривалентне залізо Fe⁺³
(триоксид заліза Fe₂O₃; молекулярна вага 159,68)

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	000	001	002	004	006	006	008	008	010	012	0
1	012	014	014	016	018	018	020	022	022	024	1
2	024	026	028	028	030	032	032	034	034	036	2
3	038	038	040	042	042	044	046	046	048	048	3
4	050	052	052	054	056	056	058	058	060	060	4
5	062	064	066	066	068	068	070	072	072	074	5
6	076	076	078	078	080	082	082	084	086	086	6
7	088	088	090	092	092	094	096	096	098	098	7
8	100	102	102	104	106	106	108	108	110	112	8
9	112	114	116	116	118	118	120	122	122	124	9
10	126	126	128	128	130	132	132	134	136	136	10
11	138	138	140	142	142	144	146	146	148	148	11
12	150	152	152	154	156	156	158	158	160	162	12
13	162	164	166	166	168	168	170	172	172	174	13
14	176	176	178	180	180	182	182	184	186	186	14
15	188	190	190	192	192	194	196	196	198	200	15
16	200	202	202	204	206	206	208	210	210	212	18
17	212	214	216	216	218	220	220	222	222	224	17
18	226	226	228	230	230	232	232	234	236	236	18
19	238	240	240	242	242	244	246	246	248	250	19

Двовалентне залізо Fe⁺² (оксид заліза FeO, молекулярна вага 71,94)

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	000	001	003	004	006	007	008	010	011	012	0
1	014	015	017	018	019	021	022	024	025	026	1
2	028	029	031	032	033	035	036	038	039	040	2
3	042	043	044	046	047	049	050	051	053	054	3
4	056	057	058	060	061	063	064	065	067	068	4
5	070	071	072	074	075	077	078	079	081	082	5
6	083	085	086	088	089	090	092	093	095	096	6
7	097	099	100	102	103	104	106	107	109	110	7
8	111	113	114	115	117	118	120	121	122	124	8
9	125	127	128	129	131	132	134	135	136	138	9
10	139	141	142	143	145	146	148	149	150	152	10
11	153	154	156	157	159	160	161	163	164	165	11
12	167	168	170	471	173	174	175	177	178	180	12

Двовалентний манган Mn⁺ (оксид MnO; молекулярна вага 70,93)

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	000	001	003	004	006	007	008	010	011	013	0
1	014	015	017	018	020	021	023	024	025	027	1
2	028	030	031	032	034	035	037	038	039	041	2
3	042	044	045	046	048	049	051	052	054	055	3

Магній Mg (магнезія MgO; молекулярна вага 40,32)

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	000	003	005	007	010	012	015	017	020	022	0
1	025	027	030	032	035	037	040	042	045	047	1
2	050	052	055	057	059	062	065	067	069	072	2
3	074	077	079	082	084	087	089	092	094	097	3
4	099	102	104	107	109	112	114	117	119	121	4
5	124	127	129	132	134	136	139	141	144	146	5
6	149	151	154	156	159	161	164	166	169	171	6
7	174	176	179	181	183	186	189	191	194	196	7
8	198	201	203	206	208	211	213	216	218	221	8
9	223	226	228	231	233	236	238	241	243	245	9
10	248	250	253	256	258	260	263	265	268	270	10
11	273	275	278	280	283	285	288	290	293	295	11
12	298	300	303	305	307	310	312	315	317	320	12
13	322	325	327	330	332	335	337	340	342	345	13
14	347	350	352	355	357	360	362	365	367	369	14
15	372	374	377	379	382	384	387	389	392	394	15
16	397	399	402	404	407	409	412	414	417	419	16
17	422	424	427	429	432	434	436	439	441	444	17
18	446	449	451	454	456	459	461	464	466	469	18
19	471	474	476	479	481	484	486	489	491	494	19
20	496	499	501	503	506	508	511	513	516	518	20

21	521	523	526	528	531	533	536	538	541	543	21
22	547	548	551	553	556	558	560	563	566	568	22
23	570	573	575	578	580	583	585	588	590	593	23
24	595	598	600	603	605	608	610	613	615	618	24
25	620	622	625	628	630	632	635	637	640	642	25
26	645	647	650	652	655	657	660	662	665	667	26
27	670	672	675	677	680	682	685	687	690	692	27
28	694	697	699	702	704	707	709	712	714	717	28
29	719	722	724	727	729	732	734	737	739	742	29
30	744	746	749	751	754	756	759	761	764	766	30
31	769	771	774	776	779	781	784	786	789	791	31
32	794	796	799	801	804	806	808	811	814	816	32
33	819	821	823	826	828	831	833	836	838	841	33
34	843	846	848	851	853	856	858	861	863	866	34
35	868	870	873	876	878	881	883	885	888	890	35
36	893	895	898	900	903	905	908	910	913	915	36
37	918	920	923	925	928	930	932	935	937	940	37
38	942	945	947	950	952	955	957	960	962	965	38
39	967	970	972	975	977	980	982	985	987	990	39
40	992	994	997	999	1002	1004	1007	1009	1012	1014	40

Кальцій Са (вапно СаО; молекулярна вага 56,08)

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	000	002	004	005	007	009	011	013	014	016	0
1	018	020	021	023	025	027	029	030	032	034	1
2	036	038	039	041	043	045	046	048	050	052	2
3	054	055	057	059	061	062	064	066	068	070	3
4	071	073	075	077	079	080	082	084	086	087	4
5	089	091	093	095	096	098	100	102	103	105	5
6	107	109	111	112	114	116	118	120	121	123	6
7	125	127	128	130	132	134	136	137	139	141	7
8	143	144	146	148	150	152	153	155	157	159	8
9	161	162	164	166	168	169	171	173	175	177	9
10	178	180	182	184	185	187	189	191	193	194	10
11	196	198	200	201	203	205	207	209	210	212	11
12	214	216	218	219	221	223	225	227	228	230	12
13	232	234	235	237	239	241	243	244	246	248	13
14	250	251	253	255	257	259	260	262	264	266	14
15	268	269	271	273	275	276	278	280	282	284	15
16	285	287	289	291	292	294	296	298	300	301	16
17	303	305	307	308	310	312	314	316	317	319	17
18	321	323	324	326	328	330	332	334	335	337	18
19	339	341	342	344	346	348	349	351	353	355	19
20	357	358	360	362	364	366	367	369	371	373	20
21	375	376	378	380	382	383	385	387	389	391	21
22	392	394	396	398	399	401	403	405	407	408	22
23	410	412	414	416	417	419	421	423	424	426	23
24	428	430	432	433	435	437	439	440	442	444	24

Натрій Na (оксид натрію Na₂O; молекулярна вага 61,994)

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	000	004	006	010	012	016	020	022	026	030	0
1	032	036	038	042	046	048	052	054	058	062	1
2	064	068	070	074	078	080	084	088	090	094	2
3	096	100	104	106	110	112	116	120	122	126	3
4	130	132	136	138	142	146	148	152	154	158	4
5	162	164	168	170	174	178	180	184	188	190	5
6	194	196	200	204	206	210	212	216	220	222	6
7	226	230	232	236	238	242	246	248	252	254	7
8	258	262	264	268	270	274	278	280	284	288	8
9	290	294	296	300	304	306	310	312	316	320	9
10	322	326	330	332	336	338	342	346	348	352	10
11	354	358	362	364	368	370	374	378	380	382	11
12	388	390	394	396	400	404	406	410	412	416	12
13	420	422	426	430	432	436	438	442	446	448	13
14	452	454	458	462	464	468	470	474	478	480	14
15	484	488	490	494	496	500	504	506	510	512	15
16	516	520	522	526	530	532	536	538	542	546	16
17	548	552	554	558	562	564	568	570	574	578	17
18	580	584	588	590	594	596	600	604	606	610	18
19	612	616	620	622	626	630	632	636	638	642	19

Калій (оксид калію K_2O ; молекулярна вага 94,20)

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	000	002	004	006	008	010	012	014	018	020	0
1	022	024	026	028	030	032	034	036	038	040	1
2	042	044	046	048	050	054	056	058	060	062	2
3	064	066	068	070	072	074	076	078	080	082	3
4	084	088	090	092	094	096	038	100	102	104	4
5	106	108	110	112	114	116	118	122	124	126	5
6	128	130	132	134	136	138	140	142	144	146	6
7	148	150	152	154	158	160	162	164	166	168	7
8	170	172	174	176	178	180	182	184	186	188	8
9	190	194	196	198	200	202	204	206	208	210	9
10	212	214	216	218	220	222	224	228	230	232	10
11	234	236	238	240	242	244	246	248	250	252	11
12	254	256	258	262	264	266	268	270	272	274	12
13	276	278	280	284	284	286	288	290	292	296	13
14	298	300	302	304	306	308	310	312	314	316	14
15	318	320	322	324	326	330	332	334	336	638	15
16	340	342	344	346	348	350	352	354	356	358	16
17	360	362	366	368	370	372	374	376	378	380	17
18	382	384	386	388	390	392	394	396	400	402	18
19	404	406	408	410	412	414	416	418	420	422	19

Гідроген Н (вода H₂O; молекулярна вага 18,016)

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	000	012	022	034	044	056	066	078	088	100	0
1	112	122	134	144	156	166	178	184	200	212	1
2	222	234	244	256	266	278	288	300	310	322	2
3	332	344	356	366	378	388	400	410	422	434	3
4	444	456	266	478	488	500	510	522	532	544	4
5	554	566	578	588	600	610	622	632	644	656	5
6	666	678	688	700	710	722	732	744	754	766	6
7	778	788	800	810	822	832	844	854	866	876	7
8	888	900	910	922	932	944	954	966	976	988	8
9	1000	1010	1022	1032	1044	1054	1066	1076	1088	1100	9

Фосфор Р (фосфорний ангідрид P₂O₅; молекулярна вага 142,04)

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	000	002	002	004	006	008	008	010	012	012	0
1	014	016	016	018	020	022	022	024	026	026	1
2	028	030	030	032	034	036	036	038	040	040	2
3	042	044	046	046	048	050	050	052	054	054	3
4	056	058	060	060	062	064	064	066	068	070	4
5	070	072	074	074	076	078	078	080	082	084	5