

ВАРУДНИК

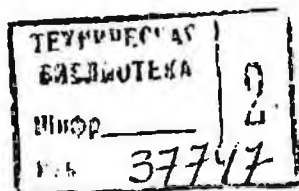
**ОБЪЕМНО-
И НОРМАТИВНО-
АТОМНЫЕ
ПЕТРОХИМИЧЕСКИЕ
СИСТЕМЫ
ПЕРЕСЧЕТОВ**

2004

552
P83

В. А. РУДНИК

ОБЪЕМНО-
И НОРМАТИВНО-
АТОМНЫЕ
ПЕТРОХИМИЧЕСКИЕ
СИСТЕМЫ
ПЕРЕСЧЕТОВ



МОСКВА, «НЕДРА», 1978

Рудник В. А. Объемно- и нормативно-атомные петрохимические системы пересчетов. М., «Недра», 1978, 268 с.

Дано обоснование различных способов сравнения химизма горных пород. Рассмотрены такие системы расчета состава горных пород, как объемно-атомная, формульно-объемная и формульно-атомная, а также их взаимосвязь. На конкретных примерах показано использование этих систем для установления закономерностей, в том числе и термодинамических, метасоматического минерало- и породообразования, а также для сравнения химического состава горных пород. Приведены таблицы рассчитанных параметров более чем для 500 минералов и другие справочные материалы, имеющие значение при самых разнообразных пересчетах, необходимых в геолого-петрологических, минералогических, геохимических и термодинамических исследованиях.

Работа рассчитана на петрографов, минералогов и геохимиков, а также будет полезна студентам геологических факультетов и вузов.

Табл. 55, пл. 15, список лит. — 130 назв.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Растущий с каждым годом объем сведений о химическом составе горных пород требует координации приемов обработки аналитических данных в первую очередь для получения сопоставимых между собой результатов их пересчета, различающихся в зависимости от задач исследования. Создание подобной системы сравнения аналитических данных приобретает особое значение в связи с расширением проблем, связанных с петрохимическими исследованиями горных пород. Ранее автором были проанализированы различные системы расчета баланса вещества в процессе метасоматического пороодо- и рудообразования и предложена рациональная атомно-объемная система сравнительного анализа пород и руд. Чтобы получить возможность сравнения горных пород различного состава и генезиса и возможных вариантов реализации конкретного химического состава породы в определенный минеральный парагенезис, была предложена формульно-атомная система пересчета. В то же время было показано, что для получения субмодального состава горной породы, наиболее близко отвечающего реальному составу, а также для контроля результатов химического анализа горных пород и расчета их количественного минерального состава и состава самих минеральных составляющих может быть использована формульно-объемная система пересчета. Настоящая книга посвящена проблеме сопоставления результатов расчета по этим системам.

Однако не менее важно и практическое использование любой из систем пересчетов. Проблема сопоставления имеет три аспекта, каждый из которых важен уже сам по себе, определяя возможность использования данной конкретной системы пересчета.

1. Любой геологический процесс (а именно для выявления его закономерностей и создаются системы пересчетов) может быть отражен соответственно многообразию его сторон и связей огромной, неограниченной в пределе совокупностью моделей, которую целесообразно путем абстрагирования от менее существенных сторон и связей свести к одной модели, адекватно и наиболее полно отражающей существо процесса во всем многообразии его проявления в природе.

2. Возможность решения на базе данной системы пересчета большего объема геологических задач и в первую очередь теоретического моделирования на основе законов физической химии и в связи с этим в представлении природного процесса в виде сложной динамической, а в первом приближении — статической физико-химической модели.

3. Простота системы пересчета, без чего ни одна из систем не может рассчитывать на широкое ее использование, даже если она полностью соответствует всем другим необходимым требованиям.

Именно поэтому в настоящей книге помимо обоснования способов сравнения химизма горных пород и сопоставления между собой атомно-объемной, формульно-объемной и формульно-атомной систем приводится большое число таблиц с различными кристаллохимическими параметрами и коэффициентами пересчета, в том числе более чем для 500 важнейших минералов. Наличие подобных таблиц, сопровождающихся краткими пояснениями, значительно расширяет значение работы, которая может быть использована как справочная при проведении самых разнообразных пересчетов и подсчетов, необходимых

в геолого-петрологических, минералогических и геохимических исследованиях. В связи с тем, что настоящая работа является логическим продолжением и развитием ранее вышедшей книги «Нормативная система пересчета применительно к эндогенному литогенезу», в ней приведены ссылки на приложения к этой работе. Приложения включают атомные веса химических элементов; таблицы для приведения к 100% по массе результатов химических анализов, для нахождения величин атомного количества элементов и молекулярных количеств окислов по результатам химических анализов, для нахождения атомного процентного содержания элементов по величине их атомных количеств; нормативные минералы, их символы и формулы; символы, названия и положение нормативных минералов; соотношения между базисными соединениями и нормативными минералами; идеализированные составы нормативных минералов изверженных и метаморфических пород и их главные кристаллохимические константы; рассчитанные коэффициенты для определения количества элементов в стандартном объеме.

В предлагаемой книге рассмотрено использование объемно- и нормативно-атомных систем для установления закономерностей метасоматического минерало- и породообразования и сравнения химического состава горных пород, намечены пути использования рассмотренных систем для термодинамического анализа геологических явлений и в первую очередь метасоматического минерало- и породообразования.

Автор выражает благодарность Н. П. Сакович, Н. М. Кузнецовой, Т. П. Аверкиевой за помощь в расчетах табличных приложений и особенно Т. Д. Елкиной за помощь в подготовке книги.

УСЛОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

K_d — поправочный коэффициент на общую пористость; см. формулы (19б) и (19г);
 K_y — коэффициент уплотнения, показывающий, какую часть от 100 составляет суммарное содержание атомов в данном стандартном объеме массы вещества $V_{\Sigma m} = V_{const}^m$ рассматриваемой породы или несколько какой-то стандартный объем массы вещества V_{const}^m горной породы, занимаемый 100 атомами, меньше $V_{\Sigma m}$ данной породы, содержащей 100 атомов элемента; см. формулы (13а) и (13б);

$M_m, M_1, M_2, \dots, M_f$ — формульная масса (ранее молекулярный вес) соответственно минерала m , первого, второго и т. д. до f -го минерала, т. е. масса формульной единицы минерала m в граммах, увеличенная в 10^{26} раз; см. прил. 5;

M_o, M_i^o — формульная масса (ранее молекулярный вес) соответственно оксида и оксида с элементом i ; см. прил. 2, а также прил. 3 в работе [87];

$\Pi, \Pi_o, \Pi_k, \Pi_k'$ — пористость общая соответственно любой породы, исходной неизменной породы, конечной метасоматически измененной и конечной метасоматически измененной и уплотненной породы; см. формулы (19а, 19в) и (89);

Π_{oo}, Π_{pk} — пористость продукта реакций прогрессивного метаморфизма соответственно до условного уплотнения и после уплотнения; см. формулы (91), (92);

$P_{io}, P_{ik}, P_{ik}', P_{ik}''$ — содержание элемента i в граммах в объеме 1000 см^3 соответственно в исходной неизменной породе, в метасоматически измененной и неуплотненной породе ($P_{ik} = P_{io}'$, см. формулы (68) и (71а)), в конечной метасоматически измененной и уплотненной породе;

P_i, P_{io}, P_{ik} — масса (ранее вес) элемента i в геометрическом объеме породы в 1000 см^3 в граммах в исходной и конечной породах; см. формулы (23а), (23б), (68);

ΔP_i — баланс вещества (привнос — вынос) элемента i в граммах из расчета на геометрический объем (т. е. с учетом пористости) в 1000 см^3 ; см. формулу (60б);

$\Delta P_i, \Delta P_i'$ — привнос — вынос элемента i в граммах из расчета на геометрический объем в 1000 см^3 соответственно в условиях постоянства геологического объема породы (см. формулу (60б)) и в условиях его изменения (см. формулы (66) и (72а)) из расчета на определенный начальный объем неизменной породы;

$P_{k\gamma}, P_{k\gamma}^a, P_{k\gamma}^b$ — конечная масса всего вещества в граммах рассматриваемого объема породы или всей зоны метасоматического изменения и уплотнения ($V_k, V_k^a = V_k^b$) в граммах соответственно любой породы, породы в зоне a и породы в зоне b ; см. формулы (61) и (74);

P_{oi}, P_{ki} — масса химического компонента i (элемента или оксида) в граммах соответственно в объеме V_o (см^3) исходной метасоматически неизменной и неуплотненной породы и в объеме V_k' метасоматически измененной и уплотненной породы; см. формулы (63а) и (63б);

$\Delta P_{i\gamma}$ — количество припосенного (или вынесенного) химического компонента (оксида и элемента) в граммах из расчета на определенный конечный объем V_k' (см^3) метасоматически измененной и уплотненной породы (см. формулы (61), (64б));

V_o, V_k, V_o', V_k' — объем геометрический в см^3 соответственно исходной неизменной породы, конечной метасоматически измененной породы ($V_k = V_o$), метасоматически измененной породы до ее уплотнения ($V_o' = V_o = V_k$), конечной метасоматически измененной и уплотненной породы (см. формулы (62б), (62в)).

a_i — атомная масса (ранее атомный вес) элемента i .

A_i, A_k, A_o, A_a — атомное количество соответственно элемента i и катиона k , кислорода и аниона a в химическом составе горной породы; см. формулы (6а) и (6б), а также прил. 3 в работе [87].

$A_m^i, A_1^i, A_2^i, \dots, A_f^i, A_m^a$ — атомное количество элемента i соответственно в составе минерала m , первого, второго и т. д. вплоть до f -го, а также аниона a в составе минерала; см. формулы (6а) и (6б), а также прил. 3 в работе [87];

$C_o, C_o^a, C_o^b, C_k, C_k^a, C_k^b$ — содержание устойчивого химического компонента в процентах по массе (оксида (C_{oo}, C_{ok}) или элемента (C_{io}, C_{ik})) соответственно в неизменной

исходной породе любого состава, составов A и B , за счет которых возникли зоны a и b , и в конечной породе любого состава после ее метасоматического изменения и уплотнения, а также в зонах a и b , возникших за счет пород составов A и B ; см. формулы (61)–(70), а также (74).

C_p^{298} — удельная стандартная теплоемкость вещества, т. е. теплоемкость вещества при стандартных условиях ($T = 298, 15 \text{ K}$ [25°C] и $p = 1 \text{ атм}$), приведенная к объему его формульной единицы; размерность — $\text{кал}/(\text{Å}^3 \cdot \text{град}) \cdot 10^{-23}$; находится в прил. 6 (графы 7–9) и прил. 7 (графа 5).

D_S, D_{-S}^a, D_{+S}^b — коэффициент перемещения в $\text{г}/\text{см}^3$ соответственно элемента S , выноса элемента S из зоны a (коэффициент выноса) и привноса элемента S в зону b (коэффициент привноса); см. формулы (76а), (76б).

$D_{P_i}^a, D_{P_i}^b$ — коэффициенты перемещения элемента i в граммах на геометрический объем в 1000 см^3 соответственно выноса элемента i из зоны a и привноса элемента i в зону b ; см. формулы (77а) и (77б).

DN_i — коэффициент перемещения элемента i в количествах атомов из расчета на стандартный геометрический объем в $10\,000 \text{ Å}^3$ неуплотненной породы.

DN_{-i}^a, DN_{+i}^b — то же, но соответственно коэффициент выноса элемента i из зоны a и привноса элемента i в зону b ; см. формулы (78а) и (78б).

$d, d_a, d_b, d_k, d_{-i}^a, d_{+i}^b$ — объемная плотность (ранее объемный вес) горной породы в $\text{г}/\text{см}^3$ соответственно для любой породы экспериментально установленная (см. [59]), для любой породы вычисленная (см. формулы (15) и (18)), исходной метасоматически неизменной породы, конечной метасоматически измененной породы, породы метасоматически измененной без учета ее уплотнения ($d_0^a = d_k$, см. формулу (73б)), конечной метасоматически измененной и уплотненной породы (см. формулы (62г), (65)).

$d_0^a, d_0^b, d_k^a, d_k^b$ — объемная плотность (ранее объемный вес) горной породы в $\text{г}/\text{см}^3$ соответственно неизменных исходных пород (d_0) состава A и B , за счет которых возникли зоны a и b , и конечных метасоматически измененных и уплотненных пород (d_k) зоны a , развитых за счет породы состава A , и зоны b , развитых за счет породы состава B ; см. формулы (74), (75).

d_V, d_a — объемная плотность (ранее объемный вес) породы соответственно экспериментально установленная и вычисленная, $\text{г}/\text{см}^3$ [34] (см. формулы (15а, 15б) и (18)).

F_{am}^V — количество атомов анионов в объеме 1000 Å^3 массы вещества породы, связанное с отдельным минералом m ; см. формулу (35).

$F_i^V, F_k^V, F_a^V, F_m^V$ — питраминное содержание (количество атомов в стандартном объеме массы вещества горной породы в 1000 Å^3) соответственно элемента i , катиона k (формулы (31а) и (31в)), кислорода, аниона a ; см. формулы (11), (12а, 12б), (14а, 14б), (16), (21б), (29а), (31а), (31в), (40а), (44г), (54).

$F_i^{\bar{V}}$ — количество атомов элемента i в каком-то произвольном объеме массы вещества породы.

F_i, F_a, F_k, F_m — содержание (в атомн. %) соответственно элемента i , аниона a , катиона k , минерала m ; см. формулы (5), (7), (52в), а также прил. 4 в работе [87].

F_m^m — содержание (в атомн. %) элемента i в минерале m ; см. формулу (9), а также прил. 4 в работе [87].

F_m^V — общее количество атомов элементов, приходящееся на минерал m в стандартном объеме массы вещества породы (в 1000 Å^3), т. е. содержание минерала m в объемно-атомных питраминях; см. формулы (44а) и (52а).

f — число минералов в горной породе.

f — функция содержания элементов в породе или минерале.

ΔH_{298}^V — стандартная удельная энтальпия вещества, т. е. изменение энтальпии системы при образовании данного вещества из простых химических веществ (элементов) в стандартных условиях ($T = 298,15 \text{ K}$ [25°C] и $p = 1 \text{ атм}$) из расчета на объем одной формульной единицы этого вещества; размерность ($\text{кал}/\text{Å}^3$) $\cdot 10^{-23}$; для сложных веществ обычно имеет отрицательное значение; см. прил. 6 (графа 4).

h — число катионов в горной породе, входящих в состав окислов.

K_m^i — число минералов m в породе, содержащих данный элемент i .

K_y — коэффициент «усадки»; см. формулу (73в).

K_{+S} — коэффициент, показывающий количества привносимого компонента S в левой части реакции (в стехеометрической записи); см. формулы (86) и (101).

K_m , K_{m_0} , K_{m_k} , K_{m_p} — коэффициенты, показывающие число формульных единиц соответственно минерала m , участвующего в реакции замещения, исходного минерала m_0 реакции, конечного продукта реакции — минерала m_k , исходного минерала m , которое преобразовано в процессе прогрессивного метаморфизма в новый минерал.

$K_{m_k}^V$ — коэффициент изобъемности, показывающий количество формульных единиц конечного минерала реакции m_k , которое может образоваться при изобъемном (исевдоморфном) метасоматическом замещении исходного минерала m_0 ; см. формулы (85а), (85б).

$K_{m_0}^x$, $K_{m_k}^y$ — коэффициенты, показывающие количество формульных единиц в условиях изобъемных реакций соответственно начального минерала m_0 в исходной породе X и конечного минерала m_k в конечной породе Y из расчета на общий стандартный геометрический объем 1000 \AA^3 ; см. формулы (99), (100).

$K_{m_p}^V$ — коэффициент, показывающий количество формульных единиц соответственно минерала m_p , образующегося в изобъемных условиях регрессивного метаморфизма за счет минералов прогрессивной стадии метаморфизма (этого же минерала m_p) и реликтового минерала (m_r), остающегося в изобъемных условиях регрессивного метаморфизма; см. формулы (92) и (94).

K_{+S}^V , K_{-S}^V , K_{-i}^V — коэффициент, показывающий количество формульных единиц или атомов соответственно привносимого компонента $+S$, выносимого компонента $-S$ и элемента i с учетом объемного эффекта реакций; см. формулы (86), (87а), (87б), (88).

K_j^V , K_r^V — коэффициент, показывающий количество формульных единиц индивидуального вещества (минерала, жидкости, газа, элемента, иона) соответственно исходного (от 1 до j) и конечного (от 1 до r) продуктов реакции, приведенной в равнообъемную форму.

K_S^x , K_S^y — количество компонента S (F, H_2O и др.) соответственно привнесенного в исходную породу X (или вынесенного из нее) в расчете на $V_{m_0}^x$ (или $K_{m_0}^x$) минерала m_0 , и привнесенного (или вынесенного) в процессе данной реакции из расчета на $V_{m_0}^y$ (или $K_{m_0}^y$) минерала m_0 ; см. формулу (101).

K_V — поправочный коэффициент за отклонение вычисленного объема массы вещества минеральных составляющих породы от стандартного $V_{const} = 1000 \text{ \AA}^3$; см. формулы (39) и (46б).

I_0 , I_k — расстояние между двумя прослоями устойчивых пород соответственно в пределах метасоматически неизменных образований и в пределах метасоматически измененных и уплотненных образований; см. формулу (73в).

Mk_0 — молекулярное количество оксида $Mk_0 = 1000 \cdot (P_i^0: M_i^0)$; см. прил. 3 в работе [87] и формулы (6в) и (6г).

N_i^V , N_k^V , N_O^V , N_a^V , $N_{i_0}^V$, $N_{i_k}^V$ — количество атомов в стандартном геометрическом объеме породы (т. е. с учетом ее пористости) в $10\,000 \text{ \AA}^3$ соответственно элемента i , катиона k , кислорода и аниона a (см. формулу (33)), элемента i в исходной и конечной породах (69); см. формулы (17), (21а), (22), (24), (25а), (28), (29), (40б).

$N_{i_0}^{V'}$, $N_{i_k}^{V'}$ — количество элемента i в стандартном геометрическом объеме $10\,000 \text{ \AA}^3$ метасоматически измененной породы соответственно до ее уплотнения ($N_{i_0}^{V'} = N_{i_k}^{V'}$; см. формулы (69) и (71б)) и после ее уплотнения.

N_m^i , N_1^i , N_2^i , ..., N_f^i — количество атомов элемента i в объеме $10\,000 \text{ \AA}^3$ соответственно минерала m , первого, второго и т. д., вплоть до f -го; см. формулы (25б), (27а), (27б), прил. 3.

N_m^V — общее количество атомов элементов, приходящееся на минерал m в стандартном геометрическом объеме породы (в $10\,000 \text{ \AA}^3$); см. формулу (41).

n_i^0 — количество атомов i -го элемента в формульной единице i -го оксида ($i = 1, 2, \dots, h-1$).

n_m^i , n_1^i , n_2^i , ..., n_f^i , n_m^a — количество атомов элемента i в формульной единице соответственно минерала m , первого, второго и т. д., вплоть до f -го, а также аниона a в формульной единице минерала m (см. прил. 3 и 4, табл. 27).

n_i^0 , n_O^0 — количество атомов в формульной единице i -го оксида соответственно элемента i и кислорода ($i = 1, 2, \dots, h-1$).

$n_{m_0}^S, n_{m_k}^S$ — количество формульных единиц (окислов) или атомов элемента S , содержащегося соответственно в формульной единице исходного минерала m_0 (левой части реакции) и конечного продукта реакции (правой части реакции) — m_k ; компонент S выносится в результате реакции (см. формулы (87a), (87б)).

$n_{m_0}^i, n_{m_k}^i, n_s^i$ — количество атомов элемента i соответственно в формульной единице исходного минерала реакции m_0 , конечного минерала реакции m_k и в привносимом компоненте S ; элемент i выносится в процессе реакции (см. формулу (88)).

$\Delta V_i^V, \Delta V_i^V$ — привнос — вынос элемента i в количествах атомов из расчета на стандартный геометрический объем в $10\,000 \text{ \AA}^3$ соответственно в условиях постоянства геологического объема (см. формулу (60a)) и в условиях его изменения (см. формулы (70) и (72б)).

ΔV_i^V — баланс вещества (привнос — вынос) количества атомов элемента i из расчета на стандартный геометрический объем, т. е. с учетом пористости, в $10\,000 \text{ \AA}^3$; см. формулу (60a).

$P_i, P_i^o, P_{O_i}, P_a, P_{i_0}, P_{i_0}^o, P_{i_k}, P_{i_k}^o$ — содержание в горной породе в процентах по массе (весовых процентах) соответственно элемента i , окисла с элементом i , кислорода, аниона a , элемента i и окисла с элементом i в исходной породе, элемента i и окисла с элементом i в конечной породе; см. формулы (1a) и (1б).

$P_{i_0}, P_{i_0}^o, P_{i_k}, P_{i_k}^o$ — содержание элемента i в % по массе соответственно в исходной неизменной породе, в метасоматически измененной и неуплотненной породе ($P_{i_k} = P_{i_0}^o$), в конечной метасоматически измененной и измененной и уплотненной породе.

P_i^V, P_o^V — объемно-массовое содержание соответственно элемента i и окисла o , т. е. массовые процентные содержания, приведенные к изобъемно сооставляемым величинам, согласно формулам

$$P_i^V = \frac{\delta}{2.65} P_i = 0.001 \cdot a_i \cdot A_i \frac{\delta}{2.65};$$

$$P_o^V = \frac{\delta}{2.65} P_i^o.$$

$P_m, P_1, P_2, \dots, P_f$ — содержание соответственно минерала m , первого, второго и т. д., вплоть до f -го в процентах по массе (весовых процентах) от общего состава горной породы, определенное экспериментально (аналитическим путем).

$P_m, P_1, P_2, \dots, P_f$ — то же, но рассчитанное; см. формулы (45a), (45б), (48).

P_m^i — массовое (весовое) процентное содержание элемента i в минерале m ; см. формулу (3).

$P_{oS}^a, P_{oS}^b, P_{kS}^a, P_{kS}^b$ — содержание химического компонента S (окисла или элемента) в % по массе соответственно в исходных неизменных породах (P_{oS}) составов A и B , за счет которых возникли зоны a и b , и в конечных метасоматически измененных и уплотненных породах (P_{kS}) в зонах a и b ; см. формулы (74)–(76).

$P_{O_0}, P_{O_0}^o, P_{O_k}, P_{O_k}^o$ — содержание окисла в массовых процентах соответственно в исходной неизменной породе, метасоматически измененной и неуплотненной породе ($P_{O_k} = P_{O_0}^o$), в конечной метасоматически измененной и измененной и уплотненной породе.

P_{O_i} и P_{k_i} — содержание химического компонента i (окисла или элемента) соответственно в неизменной исходной породе и в конечной породе — после ее метасоматического изменения и уплотнения; в % по массе (см. формулы (63a) и (63б)).

p — давление, атм, бар, кбар (см. прил. 15).

Q_m — коэффициент изобъемности, показывающий, какую часть от величины стандартного объема массы вещества в 1000 \AA^3 составляет объем одной формульной единицы минерала m ; см. прил. 5 (графа 21 и формула (12)) и формулу (90).

q_m — коэффициент, показывающий отношение общего количества атомов в стандартном объеме массы вещества (1000 \AA^3) данного минерала m к 100 атомам идеального минерала, в котором эти 100 атомов занимают объем в 1000 \AA^3 ; см. прил. 5 (графа 19) и формулу (37).

$1/q_m$ — коэффициент относительной плотности упаковки атомов в минерале m , показывающий величину 0,1 стандартного объема массы вещества минерала, приходящуюся на каждый атом в минерале m ; см. прил. 5 (графа 20) и формулу (37).

R — газовая постоянная; см. прил. 16.

S_{298}^V — стандартная удельная энтропия веществ, т. е. энтропия при стандартных условиях ($T = 298,15 \text{ K}$ [25° C] и $p = 1$ атм) из расчета на объем одной формульной единицы

вещества; размерность (кал/ф. ед.)·10⁻²³ = уд.-э. ед., см. прил. 15); почти всегда имеет положительное значение; см. прил. 6 (графа 6) и 7 (графа 4).

$S_{298}^V, j; S_{298}^V, r$ — то же для вещества j в исходных продуктах и вещества r в конечных продуктах реакции.

ΔS_{298}^V — удельный энтропийный эффект образования данного вещества из химически чистых элементов при стандартных условиях ($T = 298,15^\circ \text{K}$ [25°C] и $p = 1$ атм) из расчета на объем одной формульной единицы этого вещества; размерность (кал/ф. ед.)·10⁻²³ = уд.-э. ед. (см. прил. 15); почти всегда имеет отрицательное значение.

$(\Delta S_{\text{реак}}^V)_{298}$ — удельный энтропийный эффект химической реакции, протекающей в стандартных условиях ($T = 298,15 \text{ K}$ [25°C] и $p = 1$ атм); размерность (кал/ф. ед.)·10⁻²³ = уд.-э. ед.; см. формулу (107).

T — температура, К.

t — температура, °С.

V_M — объем массы вещества породы, занимаемый $\sum_{i=1}^n F_i$ атомами, в Å^3 ; см. формулы (50а) и (50б).

$V_c^g = V_{\text{const}}^g$ — постоянная величина геометрического объема породы, т. е. с учетом ее пористости.

$V_c = V_{\text{const}}^m$ — постоянная величина объема массы вещества породы или минерала, т. е. без учета их пористости (1000 Å^3).

V_g — объем геологический, соответствующий геометрическому объему, т. е. объему породы с учетом как объема минеральных составляющих, так и всей пористости.

$V_m^0, V_1^0, V_2^0, \dots, V_f^0$ — величина объема элементарной ячейки соответственно минерала m , первого, второго и т. д., вплоть до f -го в Å^3 ; см. прил. 5 (графа 15) и формулы прил. 5.

V_m^m — объем формульной единицы минерала m , Å^3 ; см. прил. 5 (графа 16) и формулу (9) в прил. 5.

$V_m^r, V_{m_0}^r, V_{m_k}^r, V_{m_{\Pi}}^r, V_{m_P}^r, V_{m_L}^r$ — объем в частях от стандартного объема массы вещества ($V_{\text{const}} = 1000 \text{ Å}^3$) соответственно минерала m ; исходного минерала реакции m_0 ; конечного минерала реакции m_k ; регрессивного минерала, находящегося в прогрессивной части реакции (m_{Π}) и в регрессивной (m_P); реликтового минерала в регрессивной части реакции (m_L); см. формулы (38), (83), (91), (93).

V_m^I — тысячные доли стандартного объема массы вещества породы в 1000 Å^3 , приходящегося на минерал m в формульно-атомном нормативном составе породы; см. формулы (46в) и (46г);

$\frac{V_{m_k}^r}{m_k}$ — коэффициент, показывающий, какую часть от объема исходного минерала реакции m_0 занимает объем конечного продукта реакции m_k ; см. формулу (84а).

$V_{\Sigma m}$ — объем массы вещества породы, т. е. объем ее минеральных составляющих без учета пористости породы, Å^3 .

$V_{\Sigma m}^{\Sigma X}$ — объем массы вещества, занимаемый рассчитанными нормативными минеральными компонентами; см. формулу (49а).

$V_{m_k}^y$ — объем минерала m_k конечного продукта данной частной реакции из расчета на стандартный геометрический объем в конечной породе Y , соответствующий $\psi_{m_0}^x$ содержания минерала m_0 в исходной породе X ; см. формулу (98а).

$V_n^p = \Delta V_n^p$ — приращение объема пористости реакции в частях от величины стандартного объема $V_c = 1000 \text{ Å}^3$; см. формулу (97).

W_{m}^I — тысячные доли стандартного объема в 1000 Å^3 массы вещества породы, приходящегося на один атом формульной единицы минерала m ; см. прил. 5 (графа 22), формулу (36) и табл. 27.

ΔZ_{298}^V — стандартная удельная свободная энергия (изобарный потенциал) веществ, т. е. изменение изобарного потенциала в системе при протекании в ней реакции образования данного химического соединения из химических элементов в стандартных условиях ($T = 298,15 \text{ K}$ [25°C] и $p = 1$ атм) из расчета на объем одной формульной единицы этого вещества; размерность (ккал/ф. ед.)·10⁻²³ = уд.-изб.-п. ед. (см. прил. 15); обычно имеет отрицательное значение; см. прил. 6 (графа 5), прил. 7 (графа 3) и прил. 8 (графа 2).

$\Delta Z_{298, j}^V$; $\Delta Z_{298, r}^V$ — то же для вещества j в исходных продуктах и вещества r в конечных продуктах реакции; в уд.-пзб.-п. ед.

$\Delta Z_{f, 298}^V$ — то же для неорганических веществ в водных растворах; см. прил. 7 (графа 3) и прил. 8 (графа 2).

$(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{T, p}$ — приращение удельного изобарного потенциала системы реакции при прокапке в пей реакции при температуре T и давлении p ; см. формулу (104); в уд.-пзб.-п. ед.

$(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{298}$ — изменение удельного изобарного потенциала системы реакции при прокапке в пей реакции в стандартных условиях ($T = 298,15 \text{ K}$ [25°C] и $p = 1 \text{ атм}$); см. формулу (105); в уд.-пзб.-п. ед.

$(\Delta Z^V)_T$ — изменение удельного изобарного потенциала компоненты при приращении температуры реакции (при $p = 1 \text{ атм}$); размерность (ккал/ф. ед.) $\cdot 10^{-23} = \text{уд.-пзб.-п. ед.}$; см. прил. 15.

$(\Delta Z^V)_p$ — изменение удельного изобарного потенциала компоненты за счет приращения давления (при $T = 298,15^\circ \text{K}$); размерность (ккал/ф. ед.) $\cdot 10^{-23} = \text{уд.-пзб.-п. ед.}$; см. прил. 15.

Z_p^r, Z_p^o — число независимых параметров функции содержания каждого из присутствующих в породе p соответственно химических элементов и оксидов при выражении их содержания в % по массе (весовых); см. формулы (2а) и (2б).

Z_m^r, Z_m^o — то же, но для минерала m ; см. формулы (4а) и (4б).

$z_m^0, z_1^0, z_2^0, \dots, z_f^0$ — число формульных единиц соответственно минерала m , первого, второго и т. д., вплоть до f -го; см. прил. 5, графа 10.

$\gamma_m, \gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_f$ — плотность (удельный вес) соответственно минерала m , первого, второго и т. д. до f -го минерала, определенная экспериментально.

$\gamma'_m, \gamma'_1, \gamma'_2, \dots, \gamma'_f$ — то же, но рассчитанная (рентгеновская плотность); см. прил. 5 (графа 11) и формулу (8) прил. 5.

δ, δ_a — минералогическая плотность (удельный вес) породы, установленная экспериментально и вычисленная, г/см^3 [87]; см. формулы (15а), (15б).

$\delta, \delta_a, \delta_b, \delta_k, \delta_0, \delta'_k$ — минералогическая плотность (удельный вес) горной породы в г/см^3 соответственно неизменной исходной породе, экспериментально установленная (см. [59]), для любой породы вычисленная (см. формулы (15а) и (15б)), исходной метасоматически неизменной породы, конечной метасоматически измененной породы, породы, метасоматически измененной, без учета ее уплотнения ($\delta_0 = \delta_k$), конечной метасоматически измененной и уплотненной породы (см. формулу (62)).

$\delta_a^a, \delta_b^b, \delta_k^k, \delta_0^0$ — минералогическая плотность (ранее удельный вес) горной породы в г/см^3 соответственно неизменных исходных пород (δ_0) составов A и B , за счет которых возникли зоны a и b , и конечных метасоматически измененных и уплотненных пород (δ_k) зоны a , развитых за счет породы состава A , и зоны b , развитых за счет породы состава B ; см. формулы (74).

e_p^r — число независимых параметров функции содержания каждого из присутствующих в породе p химических элементов при выражении их содержания в атомн. %; см. формулу (8).

e_m^r — то же, но для минерала m ; см. формулу (10).

$\psi_{m, n}, \psi_m, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_f$ — содержание в породе в объемных процентах соответственно минерала m с учетом пористости, минерала m , первого, второго и т. д. до f -го минерала без учета пористости.

$\psi'_{m, n}, \psi'_m, \psi'_1, \psi'_2, \dots, \psi'_f$ — то же, но рассчитанное; см. формулы (42а), (42б), (44б), (103).

ψ_{m0}^x — содержание минерала m_0 в объемных процентах в исходной породе X с учетом ее общей пористости (определяется экспериментально).

ρ — число всех анионов, а также катионов, приведенных в результате анализа в атомной форме (например, $\text{O}, \text{F}, \text{Cl}, \text{S}$ и т. д.).

$\Omega_m, \Omega_{m, n}$ — формульно-атомный нормативный состав породы, т. е. количество формульных единиц каждого минерального компонента на расчет на 100 атомов породы, соответственно без учета ее пористости и с учетом; см. работу [87].

$\Omega_v, \Omega_{v, n}$ — формульно-объемный нормативный состав породы, т. е. количество формульных единиц каждого минерального компонента в стандартном объеме породы в 1000 \AA^3 , соответственно без учета ее пористости и с учетом; см. формулы (46а) и (52б).

$\mathfrak{M}_p, \mathfrak{M}_{p\pi}$ — нормативный формульно-массовый состав породы, т. е. содержание формульной единицы каждого минерального компонента в % по массе, соответственно без учета пористости породы и с учетом; см. формулу (48).

$\mathfrak{M}_\psi, \mathfrak{M}_{\psi\pi}$ — нормативный объемно-процентный состав породы, т. е. содержание формульных единиц каждого минерального компонента (в объемн. %), соответственно без учета пористости породы и с ее учетом; см. формулы (47а), (47б) и (47в).

$\mathfrak{M}_p, \mathfrak{M}_{p\pi}$ — нормативный формульно-массовый состав породы (содержание формульной единицы каждого минерального компонента в % по массе), отвечающей ее модальному составу (\mathfrak{M}), т. е. формульно-массовый субмодальный состав, соответственно без учета пористости породы и с ее учетом; см. формулы (45а) и (45б).

$\mathfrak{M}_\psi, \mathfrak{M}_{\psi\pi}$ — нормативный объемно-процентный состав породы (содержание формульной единицы каждого минерального компонента в объемн. %), отвечающий ее модальному составу (\mathfrak{M}), т. е. объемно-процентный субмодальный состав; см. формулы (42а), (42б).

$\mathfrak{M}'_m, \mathfrak{M}'_{m\pi}$ — формульно-атомный нормативный состав породы (количество формульных единиц каждого минерального компонента из расчета на 100 атомов породы), отвечающий ее модальному составу (\mathfrak{M}), т. е. формульно-атомный субмодальный состав, соответственно без учета пористости породы и с ее учетом; см. формулы (55а, 55б), (56а, 56б), (57а, 57б), (58), (59).

$\mathfrak{M}'_v, \mathfrak{M}'_{v\pi}$ — формульно-объемный нормативный состав породы (количество формульных единиц каждого минерального компонента в стандартном объеме породы в 1000 \AA^3), отвечающий ее модальному составу (\mathfrak{M}), т. е. формульно-объемный субмодальный состав, соответственно без учета пористости породы и с учетом; см. формулы (43а), (43б), (44в).

$\mathfrak{K}_i, \mathfrak{K}_o$ — переходные коэффициенты для расчета содержания количества атомов элементов в стандартном объеме массы вещества (F^i_v) и геометрическом объеме (N^i_v) породы соответственно для элемента i при выражении содержания химических компонентов в массовых процентах этого элемента i и для окисла с элементом i при выражении содержания химических компонентов в окисной форме; устанавливается по прил. 1; см. формулы (3а) и (3б).

$\sum A_i, \sum A_o$ — атомное количество в химическом составе горной породы соответственно всех элементов и всех анионов.

$\sum F^i_m, \sum F^a_m$ — количество атомов соответственно всех элементов и анионов в стандартном объеме 1000 \AA^3 минерала m ; см. прил. 3, 4 и 5 (графы 17 и 18).

$\sum F^i_v, \sum F^a_v$ — интрамольное содержание (количество атомов в стандартном объеме массы вещества горной породы в 1000 \AA^3) соответственно всех элементов i и всех анионов a ; см. прил. 3, 4 и формулы (30а), (51), (53а), (53б).

$\sum F^{iv}_m, \sum F^{av}_m$ — количество атомов соответственно всех элементов и всех анионов в объеме 1000 \AA^3 массы (без учета пористости) минерала m ; см. прил. 3 и 4.

$\sum_{i=1}^{h+p} K^i_m$ — общее число минералов m в породе, содержащих каждый элемент i от 1-го до $(h+p)$ -го.

$\sum N^i_v, \sum N^a_v$ — количество атомов в стандартном геометрическом объеме породы (т. е. с учетом ее пористости) в $10\,000 \text{ \AA}^3$ соответственно всех элементов и всех анионов; см. формулы (30б) и (34).

$\sum n^i_m, \sum n^a_m$ — количество соответственно атомов всех элементов i и всех анионов a в формульной единице минерала m ; см. прил. 5 (графы 13 и 14).

$\sum V'_m, \sum V'_{m0}, \sum V'_{mk}$ — объем в частях от стандартного объема массы вещества $V_{\text{const}} = 1000 \text{ \AA}^3$, занимаемый соответственно минералами породы {при условии, что 100 атомн. % соответствуют 100 атомам; см. формулу (38)}, исходными и конечными продуктами реакции {см. формулу (83)}.

$\sum_{\frac{m0}{mk}} V'_{mk}$ — коэффициент, показывающий, какую часть от объема исходных продуктов реакции ($\sum V'_{m0}$) занимает объем конечных продуктов реакции ($\sum V'_{mk}$) {см. формулу (84б)}.

$\Delta Z^T_{\text{реак}}, \Delta Z^p_{\text{реак}}$ — величина приращения удельного изобарного потенциала реакции (ΔZ^V) соответственно за счет изменения температуры (при $p = \text{const}$) и давления (при $T = \text{const}$), размерность (ккал/ф. ед.) $\cdot 10^{-23} = \text{уд. изб. п. ед.}$; см. формулы (10б), (114) и (115).

Часть первая

О СПОСОБАХ СРАВНЕНИЯ ХИМИЗМА ГОРНЫХ ПОРОД РАЗЛИЧНОГО СОСТАВА И ГЕНЕЗИСА

Химический состав горных пород является одним из наиболее существенных признаков, а в некоторых случаях и единственным критерием для отнесения их к той или иной классификационной группе и для установления миграции вещества в процессе метасоматического образования пород. В связи с этим результаты химических анализов как минералов, так и пород являются очень важными параметрами, которые, будучи рационально пересчитаны, в совокупности с результатами определений по другим методам исследования позволяют устанавливать кристаллохимические формулы исследуемых минералов и дают возможность судить о петрохимических и генетических особенностях пород.

В настоящее время имеется очень много различных систем пересчета, основанных на группировке компонентов пород в различные характеристики [30, 31, 108] и вычисления количественных соотношений минеральных компонентов — минеральных молекул [52, 79, 108, 113—124, 128—130]. При этом для целей выражения химического состава минералов и пород используются как массовые (весовые), так и молекулярные, но чаще атомные проценты. В последнее время многие исследователи из-за существенных недостатков существующих систем пересчета считают, что непосредственное сравнение результатов химических анализов может сказать больше о различии и сходстве сравниваемых пород, чем какие-либо из пересчетов. При этом одни исследователи допускают возможность производить такие сравнения в массовых процентах, а другие используют атомные и молекулярные проценты*.

Несомненно, в зависимости от особенностей группировки компонентов — результатов химических анализов — те или иные методы обладают большей или меньшей информативностью, лучше или хуже выявляют особенности химизма горных пород и процессов их формирования. Но как бы ни группировались компоненты результатов химических анализов, ни один из используемых методов сравнения и пересчета в общем случае не может быть признан универсальным, позволяющим производить сравнение между собой результатов химических анализов изверженных, метаморфических, метасоматических и осадочных пород без потери существенной информации.

По-видимому, для решения конкретных задач должны подбираться свои наиболее информативные системы петрохимических пересчетов и сравнения. Необходимость подобного подхода в сравнении химизма горных пород в значительной степени обусловлена тем, что существующие способы выражения состава пород отражают лишь массовые (весовые) соотношения элементов (окислов) в 100 г порошка или соотношения между атомами элементов (группами атомов в оксидах) из расчета на 100 атомов, а не состав самой породы или руды, которые являются вполне индивидуализированными геологическими объек-

* Неприемлемость такого способа сравнения химических анализов для установления закономерностей миграции вещества в процессе метасоматического минерало- и порообразовании была уже показана в работе Ю. В. Казидыпа и В. А. Рудника [34].

тами. Эти геологические объекты имеют вполне определенные для каждого вида минерала, а следовательно, и породы как геологического тела, состоящего из минералов, кристаллохимические особенности, которые обуславливают их трехмерное пространственное измерение.

В связи с этим химизм пород наиболее объективно может быть отражен системой, учитывающей кристаллохимическую индивидуальность их минеральных составляющих, т. е. их минеральный парагенезис [34, 42, 83, 87, 90]. Такая система должна учитывать определенные особенности упаковки атомов в минералах и, в частности, объем их элементарных ячеек, функцией которых являются объем минералов и содержание в них атомов различных элементов. Определенный объем породы также является функцией объема элементарной ячейки, но не одного минерала, а всех составляющих ее минеральных видов и, кроме того, функцией их объемного процентного содержания.

Удовлетворяют ли существующие пересчеты этим требованиям?

На этот вопрос можно ответить, лишь сравнив химический состав различных пород между собой из расчета на постоянный физический объем, занимаемый массой вещества пород, т. е. произведя изобъемное сравнение их химизма (при условии, что в общем случае пористость в породах отсутствует). Для наиболее наглядного выявления искажения химизма изобъемно сравниваемых пород по существующим системам пересчета все они могут быть разделены на методы, основанные на сравнении результатов анализов (непосредственно или путем объединения в характеристические группы и «минеральные молекулы») в массовых процентах окислов и элементов и в атомных и молекулярных процентах.

Глава I

МАССОВОЕ ПРОЦЕНТНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ПРИ ИЗОБЪЕМНОМ СРАВНЕНИИ ХИМИЗМА ГОРНЫХ ПОРОД

Величина массового (ранее весового) процентного содержания любого элемента i (P_i) или окисла i_2O_y (P_i^o), входящего в состав породы, показывает, сколько граммов из 100 г породы приходится на данный элемент i или i_2O_y , где y — валентность катиона в окисле. Сравнение между собой массовых процентов различных пород предусматривает сопоставление содержаний элементов или окислов по массе из расчета на 100 г порошка соответствующей породы. В этом отношении процентные содержания компонентов по массе отражают объективную истину. Но эта истина односторонняя.

Так, в поисково-разведочной практике и при геохимических исследованиях больший массовый процент вещества в общем случае еще отнюдь не означает и большего абсолютного содержания этого вещества в данной породе по сравнению с другими. Это усложняет корреляцию содержаний элементов в различных породах и приводит к созданию различных систем, в которых делается попытка устранить этот недостаток способа сравнения процентных содержаний элементов по массе. С другой стороны, сопоставление между собой 100 г пород затуманивает их петрохимическую индивидуальность, так как одно и то же количество атомов различных элементов может занимать разный объем и иметь различную массу. В связи с этим сравниваются между собой разные объемы

пород. А это, в свою очередь, приводит к тому, что одному и тому же результату химического анализа породы в массовых процентах соответствует большое количество пород с самым разнообразным качественным и количественным минеральным составом. Не имеется однозначной взаимосвязи и между результатом химического анализа минерала в массовых процентах и типом минерала.

Чтобы избежать указанных недостатков корреляции и петрографо-минералогической многозначности результатов химических анализов пород, необходимо сравнивать их химизм из расчета на одинаковый объем массы вещества. Однако сравнение горных пород по массовым процентам составляющих их компонентов малоэффективно, так как величина массового процентного содержания любого элемента или оксида, входящего в состав породы, обусловлена не только абсолютным массовым содержанием данного элемента или оксида в определенном объеме породы. Она зависит также от абсолютного массового содержания каждого другого элемента (или оксида), входящего в состав породы, иначе говоря, от количества атомов (F_i^V) каждого элемента i и его атомной массы (a_i) в данном объеме массы породы, без учета ее пористости, например, в $V_{\text{const}} = 1000 \text{ \AA}^3$. А величина F_i^V , в свою очередь, обусловлена содержанием элемента i в каждом из m минералов породы (F_i^m) и величиной объемного процентного содержания каждого минерала m с элементом i в породе (ψ_m). Исходя из зависимостей между величинами F_i^V , F_i^m , a_i , ψ_m , выведенными ранее (см. работу [34], формулы 39г, 39д, 40а, 40б), значение массового процентного содержания элемента i (P_i) в каком-то постоянном объеме массы вещества $V_{\Sigma m}$ горной породы p выражается сложной функциональной зависимостью [90]

$$P_i = f \frac{a_i \cdot f \left[\sum_{m=1}^f \psi_m \cdot f (n_m^i \cdot f_m^i) \right]}{\sum_{i=1}^{h-p} f \left[a_i \cdot f \sum_{m=1}^f \psi_m \cdot f (n_m^i \cdot f_m^i) \right]} \quad (1a)$$

Это выражение может быть развернуто таким образом:

$$P_i = 100\% \frac{a_i \sum_{m=1}^f \left(\psi_m \frac{n_m^i \cdot z_m^0}{V_m^0} \right)}{\sum_{i=1}^{h-p} \left[a_i \sum_{m=1}^f \left(\psi_m \frac{n_m^i \cdot z_m^0}{V_m^0} \right) \right]} \quad (1b)$$

где z_m^0 — число формульных единиц минерала m в объеме его элементарной ячейки; V_m^0 — величина объема элементарной ячейки минерала m ; n_m^i — количество атомов элемента i в формульной единице минерала m ; $\sum_{m=1}^f$ — сумма содержаний элемента i по всем минералам породы от 1-го до f -го.

Из формул (1a) и (1b) следует, что на величину P_i влияет изменение любого параметра функции содержания каждого из присутствующих в составе породы элементов (a_i , ψ_m , n_m^i , V_m^0 , z_m^0). Число таких независимых параметров в породе p (Z_i^p) составляет:

$$Z_i^p = 3K_m^i + \sum_{i=1}^{h-p} K_m^i + (h+p) - 1, \quad (2a)$$

где $\sum_{i=1}^{h+\rho} K_m^i$ — общее число минералов m в породе p , содержащих каждый элемент i от первого до $(h + \rho)$ -го; K_m^i — число минералов m породы p , содержащих данный элемент i ; $(h + \rho)$ — общее количество элементов i в химическом составе породы p .

Для рядового гранита, состоящего из кварца, плагиоклаза и микроклина с примесью биотита, с общим числом элементов, содержащихся в нем в заметном количестве, — 10 (O, Si, Al, Fe, Mg, Ca, Na, K, H, Ti), число независимых переменных, влияющих на массовое процентное содержание, — 40.

Число независимых параметров (Z_o^p), определяющих массовое процентное содержание оксида с элементом i — i_2O_y (P_i^p) в каком-то объеме массы вещества $V_{\Sigma m}$ породы p , выразится формулой

$$Z_o^p = 2K_m^i + \sum_{i=1}^{h+\rho} K_m^i + 2(h + \rho) - 3. \quad (26)$$

Для того же гранита величина $Z_o^p = 44$, т. е. на 4 параметра больше, чем Z_i^p . Для минералов величина массового процентного содержания элемента i (P_m^i) в расчете на какой-то его объем выразится проще, чем для породы:

$$P_m^i = 100\% \frac{a_i \cdot n_m^i}{\sum_{i=1}^{h+\rho} (a_i \cdot n_m^i)}, \quad (3)$$

а число независимых параметров (Z_i^m), определяющих массовое процентное содержание элемента i при изобъемном сравнении минералов, выразится формулой (4а), а оксида i_2O_y с элементом i (Z_o^m) — формулой (4б):

$$Z_i^m = 2(h + \rho); \quad (4a)$$

$$Z_o^m = 3(h + \rho) - 3. \quad (4b)$$

Анализ функций массового процентного содержания элементов и оксидов пород и минералов из расчета на определенный объем массы их вещества (формулы 1—4) позволяет сделать следующие заключения:

1) массовое процентное содержание компонентов в породе является сложной функцией содержания атомов элементов и их атомных масс в каком-то объеме породы, который для 100 г каждой породы имеет свою определенную величину, а в общем случае может иметь самое разнообразное значение;

2) массовое процентное содержание химических компонентов в породе и в минерале в каком-то постоянном объеме V_{const} массы их вещества не является только функцией массы данного компонента, а определяется также и массой каждого химического компонента (элемента или оксида), входящего в состав породы и (или) минерала;

3) массовое процентное содержание элемента i в объеме V_{const} массы вещества породы или минерала является функцией меньшего числа независимых переменных, чем массовое процентное содержание оксида этого же элемента;

4) массовое процентное содержание оксида или элемента в породах одинакового или близкого минерального состава из расчета на V_{const} массы вещества определяется меньшим числом параметров, чем в породах различного минерального состава;

5) минимальным числом независимых переменных, влияющих на массовое процентное содержание химического компонента (оксида или элемента) в расчете на объем V_{const} массы вещества, характеризуются отдельные минералы, но и здесь минимальное число аргументов не опускается ниже величины $2(h + p)$.

Изложенное свидетельствует о том, что массовые процентные содержания элементов в породах и минералах в общем случае являются изообъемно несопоставимыми величинами из-за того, что они не только функции массы каждого из элементов. Более того, сравнение массовых процентных содержаний элементов (табл. 2) и оксидов (табл. 1 и 4) различных по составу пород с объемно-массовыми содержаниями (массовыми процентами, приведенными к изообъемно сопоставимым величинам)* элементов и оксидов (соответственно P_i^V и P_o^V) этих же пород (табл. 3 и 5) показывает отсутствие строгой закономерности в соотношениях между массовыми процентами элементов (и особенно оксидов) и объемно-массовыми содержаниями этих же элементов (см. рис. 1 и 2). Эти эмпирические данные подтверждают вывод об отсутствии прямой функциональной зависимости между кристаллохимическими особенностями минералов, слагающих породу, и результатами химических анализов этой же породы в массовых процентах [34, 90]. И именно поэтому массовое процентное содержание химических компонентов в породе, как не допускающее строгой минералогической интерпретации химизма породы, не используются в большинстве из существующих методов пересчета результатов химических анализов горных пород [30, 31, 52, 79, 108, 113—118].

По этим же причинам массовое процентное содержание как породообразующих элементов, так и элементов-примесей в общем случае менее информативно для целей корреляционного анализа парагенезисов элементов пород различного состава сравнительно с величинами масс этих элементов из расчета на определенный объем горной породы, на что в свое время было указано рядом исследователей [14, 92, 119] (хотя существуют и противоположные недостаточно обоснованные представления [21]).

В отдельных частных случаях массовое процентное содержание элементов может быть использовано для целей изообъемного сопоставления пород и корреляционного анализа. Эти частные случаи таковы [34]:

- 1) сравнение пород близкого минерального состава одной и той же классификационной группы с близкими величинами минералогической плотности;
- 2) сопоставление микросодержаний элементов в породах близкого состава, различия величины минералогической плотности которых не превышают 20—30%.

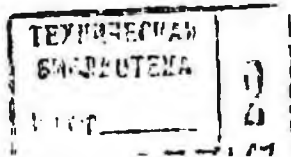
В природе закономерности, отвечающие этим частным случаям, достаточно широко распространены, в связи с чем результаты корреляции и других методов сопоставления массовых процентных содержаний компонентов выявляют существующие природные закономерности. Этот вывод имеет особое значение в связи с имеющими место значительными лабораторными дисперсиями в определении содержания элементов и, как следствие, случайными и систематическими расхождениями и погрешностями в их определении разными методами, методами и лабораториями [104, 112]. Нивелирующее значение на различие объемно-массовых и массовых процентных содержаний элементов оказывают непредставительность опробования, заражение в процессе пробоподготовки и изменение состава проб при хранении.

* По методике, изложенной ранее [34, с. 8 и с. 28—29].

Средние плотности и химический состав главнейших типов изверженных горных пород

№ п/п	Порода	d		Число определений d	в % по массе окислов (P_i^0)											H_2O^+	P_2O_5
		d_{min}	d_{max}		SiO_2	TiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	FeO	MnO	MgO	CaO	Na_2O	K_2O			
1	Дунит (серпентинит)	2,96		219	40,49	0,02	0,86	2,84	5,54	0,16	46,32	0,70	0,10	0,04	2,88	0,05	
2	Перидотит (гарцбургит)	2,66—3,20	3,27	10	40,65	0,11	1,25	2,53	6,15	0,18	42,36	1,29	0,29	0,13	5,02	0,04	
3	Перидотит (верлит)	3,24—3,20	2,88	110	45,07	0,64	5,75	3,43	9,53	0,26	22,88	7,48	1,14	0,57	3,10	0,15	
4	Оливиновое габбро	2,87—2,99	3,06	1 335	46,49	1,17	17,73	3,66	6,17	0,17	8,86	11,48	2,16	0,78	1,04	0,29	
5	Пироксенит (диаллагит)	3,02—3,08	3,20	58	46,93	0,97	6,37	4,08	10,85	0,20	12,13	16,03	0,82	0,49	1,01	0,12	
6	Габбро (без оливина)	2,90—3,40	2,95	3 665	49,50	0,84	18,00	2,80	5,80	0,12	6,62	10,64	2,82	0,98	1,60	0,28	
7	Порит (без оливина)	2,85—3,05	3,05	15	50,39	1,13	16,06	2,43	7,86	0,17	8,37	9,20	2,61	0,79	0,79	0,20	
8	Апортозит	2,85—3,22	2,66	38	50,40	0,15	28,30	1,06	1,12	0,05	1,25	12,40	3,67	0,74	0,75	0,05	
9	Дюрцит	2,59—2,73	2,81	3 552	50,77	0,84	16,67	3,16	4,40	0,13	4,17	6,74	3,39	2,12	1,36	0,25	
10	Кварцевый дюрцит	2,67—2,92	2,75	524	61,59	0,60	16,21	2,54	3,77	0,10	2,80	5,38	3,37	2,10	1,22	0,26	
11	Гранодюрцит	2,65—2,81	2,69	3 373	65,01	0,57	15,94	1,74	2,65	0,07	1,91	4,42	3,70	2,75	1,04	0,20	
12	Гравит	2,62—2,78	2,57	10 358	69,21	0,41	14,41	1,98	1,67	0,12	1,15	2,19	3,48	4,23	0,85	0,30	
13	Салсит	2,53—2,70	2,62	1 049	58,65	0,86	16,38	3,65	3,09	0,15	3,06	4,45	3,48	4,70	1,13	0,31	
		2,47—2,65															

* Так как пористость рассматриваемых пород меньше 6% [102] и сравниваются среднестатистические значения объемной плотности (графа 3) из полного числа определений (графа 4) со средними химическими составами пород, то можно допустить, что значения объемной плотности (d) рассматриваемых пород близки и величинам минералогической плотности этих пород (d). Данные химического состава пород приведены по Доли [26], а объемной плотности — по Н. Б. Дорган [102].



Химический состав главнейших типов изверженных горных пород
в % по массе элементов (P_i)

Таблица 2

№ п/п	Порода	Si	Ti	Al	Fe ⁺⁺	Fe ⁺	Mn	Mg	Ca	Na	K	H(OH)	P	O	Σ
1	Дунит	18,93	0,01	0,46	1,90	4,30	0,12	27,91	0,48	0,07	0,03	0,32	0,02	44,99	99,54
2	Перидотит (гарцбургит)	19,01	0,05	0,67	1,79	4,75	0,14	25,55	0,92	0,21	0,11	0,56	0,02	46,22	100,00
3	Перидотит (верлит)	21,07	0,38	3,05	2,35	7,37	0,20	13,81	5,37	0,85	0,47	0,35	0,07	44,61	99,95
4	Оливиновое габбро	21,74	0,72	9,39	2,57	4,80	0,13	5,35	8,21	1,58	0,64	0,11	0,12	44,69	100,05
5	Пироксенит (диаллагит)	21,93	0,57	3,40	2,90	8,43	0,15	7,29	11,46	0,59	0,41	0,11	0,05	42,75	100,05
6	Габбро (без оливины)	23,15	0,48	9,55	1,90	4,52	0,09	3,99	7,62	2,07	0,81	0,18	0,12	45,46	99,94
7	Норит (без оливины)	23,57	0,67	8,50	1,68	6,14	0,13	5,03	6,57	1,93	0,66	0,09	0,09	44,93	99,99
8	Анортозит	23,57	0,10	15,00	0,73	0,84	0,04	0,75	8,90	2,71	0,61	0,08	0,02	46,64	99,99
9	Диорит	26,54	0,48	8,82	2,18	3,41	0,10	2,50	4,81	2,53	1,76	0,15	0,11	46,46	99,85
10	Кварцевый диорит	28,82	0,38	8,58	1,79	2,90	0,08	1,68	3,85	2,48	1,74	0,14	0,11	47,44	99,99
11	Гранодиорит	30,39	0,33	8,42	1,23	2,07	0,05	1,14	3,17	2,76	2,28	0,12	0,09	47,81	99,86
12	Грапит	32,36	0,24	7,61	1,40	1,28	0,09	0,68	1,56	2,57	3,51	0,09	0,13	48,48	100,00
13	Спеллит	27,41	0,53	8,68	2,57	2,40	0,12	1,84	3,17	2,57	3,97	0,13	0,13	46,48	100,00

Таблица 3

Объемно-массовый состав главнейших типов изверженных горных пород (P_V)

№ п/п	Порода	Si	Ti	Al	Fe ⁺⁺	Fe ⁺	Mn	Mg	Ca	Na	K	H(OH)	P	O	Σ
1	Дунит	18,68	0,01	0,45	1,87	4,24	0,12	27,54	0,47	0,07	0,03	0,31	0,02	44,39	98,20
2	Перидотит (гарцбургит)	20,72	0,05	0,73	1,95	5,18	0,15	27,85	1,00	0,23	0,12	0,61	0,02	50,38	108,99
3	Перидотит (верлит)	20,23	0,36	2,93	2,25	7,07	0,19	13,26	5,15	0,82	0,45	0,34	0,07	42,82	95,94
4	Оливиновое габбро	22,17	0,73	9,58	2,62	4,90	0,13	5,46	8,37	1,61	0,65	0,11	0,10	45,58	102,01
5	Пироксенит (диаллагит)	23,39	0,61	3,63	3,09	8,99	0,16	7,78	12,22	0,63	0,44	0,12	0,05	45,60	106,71
6	Габбро (без оливины)	22,76	0,47	9,39	1,87	4,44	0,09	3,92	7,49	2,03	0,80	0,18	0,12	44,70	97,25
7	Норит (без оливины)	23,96	0,68	8,64	1,71	6,24	0,13	5,11	6,68	1,96	0,67	0,09	0,09	45,68	101,64
8	Анортозит	20,90	0,09	13,30	0,65	0,74	0,03	0,66	7,89	2,40	0,54	0,07	0,02	41,35	88,64
9	Диорит	24,86	0,45	8,26	2,04	3,19	0,09	2,34	4,50	2,37	1,65	0,14	0,10	43,52	93,51
10	Кварцевый диорит	26,42	0,35	7,86	1,84	2,66	0,07	1,54	3,53	2,27	1,59	0,13	0,10	43,49	91,65
11	Гранодиорит	27,25	0,30	7,55	1,10	1,86	0,04	1,02	2,84	2,47	2,04	0,11	0,08	42,87	89,53
12	Грапит	27,72	0,21	6,52	1,20	1,10	0,08	0,58	1,34	2,20	3,01	0,08	0,11	41,53	85,68
13	Спеллит	23,94	0,46	7,58	2,24	2,10	0,10	1,61	2,77	2,24	3,47	0,11	0,11	40,59	87,32

Таблица 4

Химический состав некоторых магматических, метаморфических и метасоматических горных пород
в % по массе окислов (P_1^0)

М п/п	Порода	δ	П	SiO ₂	TiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	FeO	MnO	MgO	CaO	Na ₂ O	K ₂ O	H ₂ O+	H ₂ O-	P ₂ O ₅	CO ₂	Σ
1	Bi-Ho плагногнейс	2,87	1,04	50,39	0,82	15,58	1,26	7,38	0,16	8,10	9,20	3,24	0,90	2,72	0,16	—	—	100
2	Bi-Ho плагногнейс	2,73	1,46	59,98	0,98	17,25	0,63	6,12	0,08	3,91	2,41	2,81	2,73	2,84	0,26	—	—	100
3	Bi-Ho плагногнейс	2,86	—	55,06	1,20	15,87	2,36	5,62	0,14	4,82	7,22	4,04	1,91	1,25	0,25	—	—	100
4	Sill-Bi-Gr гнейс	2,73	—	69,34	0,55	13,58	0,92	2,85	0,06	1,50	3,47	3,65	2,06	1,04	0,23	0,30	—	100
5	Gr содержащий Bi гранит (а)	2,67	—	74,00	0,13	13,29	0,25	1,91	0,04	0,63	1,05	3,00	4,59	0,66	0,25	0,15	0,06	100
6	Bi-Ho Q диорит	2,70	1,48	62,91	0,80	15,89	1,26	5,11	0,08	2,60	4,22	2,99	1,56	2,32	0,26	—	—	100
7	Bi-Ho плагногранит	2,68	1,10	67,50	0,38	15,67	0,46	2,53	0,02	1,65	4,78	4,13	1,38	1,28	0,22	—	—	100
8	Bi-Ho Q диорит	2,75	—	59,01	0,60	19,84	1,94	3,39	0,06	1,92	6,30	4,42	1,16	0,92	0,09	—	—	100
9	Метасоматический гранит	2,69	2,60	68,21	0,34	14,84	0,30	3,50	0,07	0,91	2,84	3,92	3,22	1,70	—	—	—	100
10	Q-Mi метасоматит	2,84	3,52	55,21	1,04	15,03	0,98	6,55	0,14	6,22	6,20	2,38	3,67	2,48	0,10	—	—	100
11	Q-Mi метасоматит	2,73	1,86	77,46	0,13	11,61	0,61	0,85	0,02	0,15	0,50	3,32	4,90	0,39	0,03	0,03	—	100
12	Габбро-порит	3,16	0,4	48,20	2,00	12,25	5,70	11,73	0,28	6,05	10,39	2,38	0,47	0,35	0,20	—	—	100
13	Gr скарн	3,38	7,1	36,95	0,06	0,42	27,96	0,15	0,18	1,32	31,68	—	—	—	—	—	—	100
14	Мрамор	2,87	1,1	0,77	0,03	0,17	0,06	0,02	0,05	0,56	55,06	—	—	—	—	0,09	1,19	100
15	Диоритовый порфирит	2,91	—	54,32	0,85	16,24	1,84	5,87	0,10	4,48	6,59	2,28	3,88	2,39	0,03	0,13	43,26	100
16	Окварцованный порфирит	2,74	—	69,36	0,80	12,41	1,33	4,11	0,10	0,60	2,50	2,61	4,61	1,03	0,17	0,15	0,22	100
17	Q-Ab-Mi метасоматит	2,84	—	62,46	0,77	13,75	1,09	5,47	0,10	1,63	3,70	3,68	4,98	1,91	0,19	0,27	—	100
18	Q-Mi метасоматит	2,68	—	77,46	0,13	11,61	0,61	0,85	0,02	0,15	0,50	3,32	4,89	0,39	0,03	0,03	—	100
19	Диафторитовый сланец	2,89	—	54,49	1,00	16,08	3,93	3,56	0,11	3,39	7,98	3,40	2,49	1,83	0,38	0,17	1,20	100
20	Q-Ab-Mi метасоматит	2,67	—	71,85	0,20	14,61	0,86	1,36	0,03	0,66	1,80	3,89	3,69	0,43	0,20	0,05	0,25	100
21	Диабаз	3,03	—	49,36	3,75	8,76	6,40	9,60	0,29	11,55	6,25	2,19	1,20	0,51	0,14	—	—	100

Результаты анализов № 1—13 и 16—21 из коллекции автора; № 14 и 15—на работы В. Г. Боголепова [8]. Все результаты анализов приведены автором к 100%, при этом TR₂O₃ включены в Al₂O₃, Li₂O—в Na₂O, Rb₂O—в K₂O, BaO—в CaO (эти примеси составляют тысячные и первые сотые доли процента).

Таблица 5

Объемно-массовый химический состав некоторых магматических, метаморфических и метасоматических пород (P_0^V)

М п/п	Порода	K _п	SiO ₂	TiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	FeO	MnO	MgO	CaO	Na ₂ O	K ₂ O	H ₂ O+	P ₂ O ₅	CO ₂	$\frac{\delta}{2,65}$
1	Bi-Ho плагногнейс	0,99	54,57	0,89	16,87	1,36	7,99	0,17	8,77	10,06	3,51	0,97	2,95	—	—	1,083
2	Bi-Ho плагногнейс	0,98	61,78	1,01	17,77	0,65	6,30	0,08	4,03	2,48	2,89	2,81	2,92	—	—	1,030
3	Bi-Ho плагногнейс	—	59,46	1,30	17,14	2,55	2,83	0,15	5,21	7,80	4,36	2,06	1,35	0,32	—	1,080
4	Sill-Bi-Gr гнейс	—	71,42	0,57	13,99	0,95	2,94	0,06	1,54	3,57	3,76	2,74	1,07	0,16	0,03	1,030
5	Gr-содержащий Bi гранит	—	74,59	0,13	13,40	0,25	1,92	0,04	0,63	1,06	3,02	4,63	0,66	0,15	0,06	1,008
6	Bi-Ho Q диорит	0,98	64,10	0,81	16,19	1,28	5,21	0,08	2,65	4,30	3,05	1,59	2,36	—	—	1,019
7	Bi-Ho плагногранит	0,99	68,24	0,38	15,84	0,46	2,56	0,02	1,67	4,83	4,17	1,39	1,29	—	—	1,011
8	Bi-Ho Q диорит	—	61,25	0,62	20,59	2,01	3,52	0,06	1,99	6,54	4,59	1,20	0,95	0,31	—	1,038
9	Метасоматический гранит	0,97	69,23	0,34	15,06	0,30	3,55	0,07	0,92	2,88	3,98	3,27	1,73	—	—	1,015
10	Q-Mi метасоматит	0,96	59,18	1,11	16,11	1,05	7,02	0,15	6,67	6,65	2,55	3,93	2,66	—	—	1,072
11	Q-Mi метасоматит	—	79,78	0,13	11,96	0,63	0,88	0,02	0,15	0,51	3,42	5,05	0,40	0,03	—	1,030
12	Габбро-порит	—	57,45	2,38	14,60	6,79	13,98	0,33	7,21	12,38	2,84	0,56	0,42	—	—	1,192
13	Gr скарн	0,93	47,15	0,08	0,54	35,68	0,19	0,23	1,68	40,42	—	—	—	0,11	1,52	1,276
14	Мрамор	0,99	0,83	0,03	0,18	0,06	0,02	0,05	0,61	59,63	—	—	—	0,02	46,85	1,083
15	Диоритовый порфирит	—	59,64	0,93	17,83	2,02	6,44	0,11	4,92	7,24	2,50	4,26	2,02	0,14	—	1,098
16	Окварцованный порфирит	—	71,72	0,83	12,83	1,37	4,25	0,10	0,02	2,58	2,70	4,77	1,06	0,15	0,23	1,034
17	Q-Ab-Mi метасоматит	—	66,96	0,82	14,74	1,17	5,86	0,11	1,75	3,97	3,94	5,34	2,05	0,29	—	1,072
18	Q-Mi метасоматит	—	78,31	0,13	11,63	0,62	0,86	0,02	0,15	0,51	3,36	4,94	0,39	0,03	—	1,011
19	Диафторитовый сланец	—	59,45	1,09	17,54	4,29	3,88	0,12	3,70	8,71	3,71	2,72	2,00	0,18	1,31	1,091
20	Q-Ab-Mi метасоматит	—	72,42	0,20	14,73	0,87	1,37	0,03	0,66	1,81	3,92	3,72	0,43	0,05	0,25	1,008
21	Диабаз	—	56,42	4,29	10,01	7,32	10,97	0,33	13,20	7,14	2,50	1,37	0,58	—	—	1,143

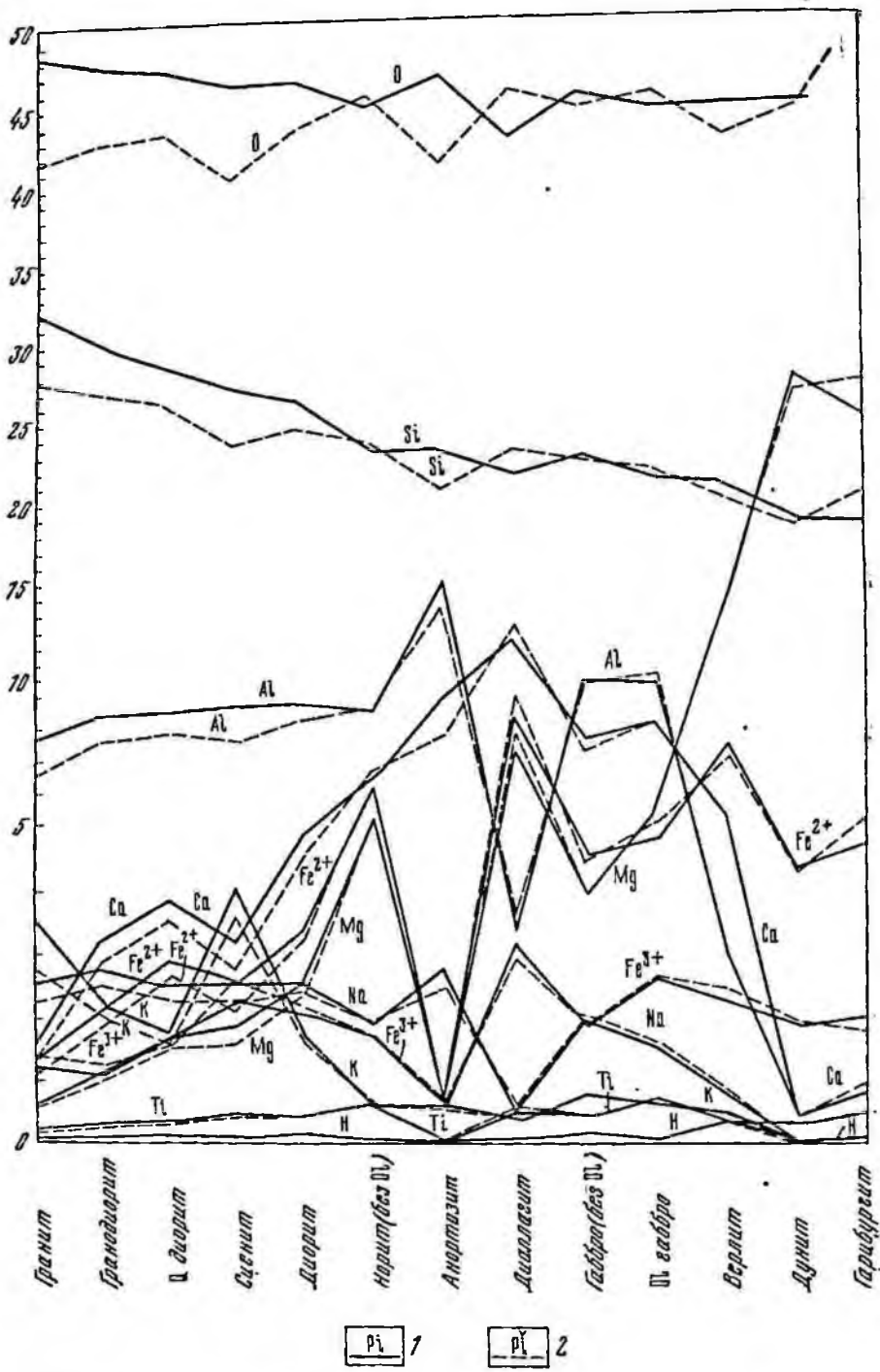


Рис. 1. Сравнение содержания элементов в некоторых магматических горных породах: 1 — в процентах по массе (P_1 — сплошные линии) и 2 — в объемно-массовых единицах (P_2 — пунктирные линии). По ординате отложены величины содержания элементов в процентах по массе и в объемно-массовых единицах.

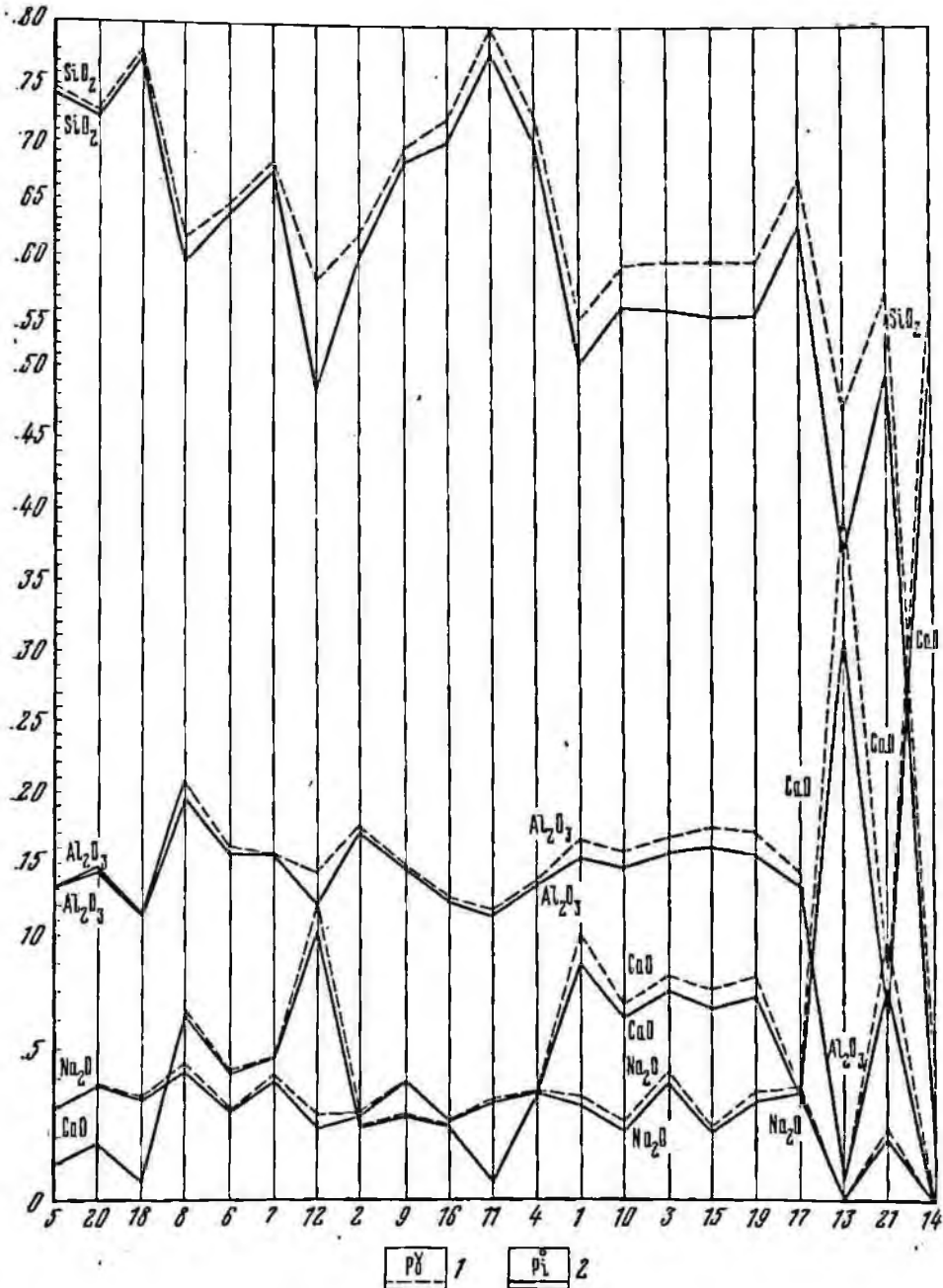


Рис. 2. Сравнение содержания окислов в некоторых метаморфических, метасоматических и магматических горных породах:

1 — в процентах по массе (P_1^0 — сплошные линии) и 2 — объемно-массовые единицы (P_2^0 — пунктирные линии). По ординате отложены величины содержания окислов в процентах по массе и объемно-массовых единицах, на абсциссе — номера, соответствующие порядковым номерам в табл. 4. и 5

Глава II

АТОМНОЕ ПРОЦЕНТНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ПРИ ПИЗОБЪЕМНОМ СРАВНЕНИИ ХИМИЗМА ГОРНЫХ ПОРОД

Величина атомного процентного содержания любого элемента i (F_i), входящего в состав породы или минерала, показывает, сколько атомов из 100 атомов породы или минерала приходится на данный элемент i . Атомный процент элемента i может быть выражен формулой

$$F_i = \frac{100 F_i^{\bar{V}}}{\sum_{i=1}^{h+\rho} F_i^{\bar{V}}} \% = \frac{100 A_i}{\sum_{i=1}^{h+\rho} A_i} \% \quad (5)$$

где $F_i^{\bar{V}}$ — количество атомов элемента i ; $\sum_{i=1}^{h+\rho} F_i^{\bar{V}}$ — общее количество атомов всех элементов от 1-го до $(h + \rho)$ -го в каком-то объеме массы вещества $V_{\Sigma, m}$ породы p или минерала m ; A_i — атомное количество элемента i ;

$\sum_{i=1}^{h+\rho} A_i$ — сумма атомных количеств всех элементов от 1-го до $(h + \rho)$ -го в этой же породе или минерале.

Атомное количество может быть найдено с помощью таблиц в прил. 3 в работе [87] или расчетным путем по формулам (6а) и (6б), где оно умножено на 1000 для получения целых чисел.

$$A_i = \frac{P_i}{a_i} 1000, \quad (6a)$$

$$A_i = \frac{P_i^{\circ} \cdot n_i^{\circ}}{M_i^{\circ}} 1000, \quad (6b)$$

где P_i и P_i° — массовое процентное содержание соответственно элемента i и оксида с элементом i ; n_i° — количество атомов i -го элемента в формульной единице i -го оксида; M_i° — формульная масса (ранее молекулярный вес) оксида с элементом i (находится с помощью прил. 2); a_i — атомная масса элемента i (находится с помощью прил. 2).

$$M_{k_i} = 1000 (P_i : a_i) = A_i, \quad (6в)$$

$$M_{k_o} = 1000 (P_i^{\circ} : M_i^{\circ}). \quad (6г)$$

Атомные проценты, как и молекулярные проценты, являются выражением химического состава породы или минерала на расчете на 100 атомов в каком-то своем для каждой породы объеме массы ее вещества. Но больший атомный процент данного элемента i далеко не всегда отражает большее абсолютное содержание этого атома в породе или в минерале сравнительно с другими породами и минералами. Сопоставление между собой 100 атомов пород и минералов без учета плотностей упаковок кристаллических решеток в минералах затушевывает их кристаллохимическую индивидуальность, так как одно и то же количество атомов может занимать различный объем. Это приводит к тому, что одному

химическому составу в атомных процентах может отвечать несколько (по меньше, чем химическому составу в массовых процентах) типов как пород, различающихся качественным и количественным минеральным составом, так и минералов (например, андалузит, силлиманит и дистен; кварц, коэзит и халцедон и т. д.; см. прил. 5, графа 17).

Таким образом, выражение химического состава пород и минералов в атомных процентах не дает возможности однозначно выразить связь между химическим и минеральным составом пород*. Для устранения этого недостатка следует производить сравнение химических составов пород и минералов из расчета на единый объем массы их вещества — V_{const}^m . Можно ли для этой цели использовать результаты анализов в атомных процентах? А. Б. Вистелпус [14] на этот вопрос отвечает отрицательно, отвергая в общем случае возможность корреляции элементов, выраженных в каких бы то ни было процентах. С таким мнением нельзя согласиться. Атомные проценты в отличие от массовых позволяют производить поэлементное сравнение пород в условиях замкнутых систем (в понимании Ф. Чейза) значительно проще, чем по методу, предлагаемому А. Б. Вистелпусом [14], О. В. Сармановым [92] и рядом других исследователей.

Этот вывод можно сделать из того, что атомное процентное содержание элемента i (F_i) является функцией (f) как абсолютного содержания его атомов из расчета на какой-то любой объем массы вещества $V_{\Sigma m}$ породы p (F_i^p), так и содержания атомов каждого другого элемента [90]:

$$F_i = f \frac{\left[\sum_m^f \psi_m \cdot f(n_m^i \cdot f_m^i) \right]}{\sum_{i=1}^{h+p} f \left[\sum_{m=1}^f \psi_m \cdot f(n_m^i \cdot f_m^i) \right]} \quad (7a)$$

Это выражение может быть развернуто, исходя из формул (39д), (39е), (39ж) и (39з), приведенных в книге [34], а также формул (5), (6а) и (6б) настоящей работы, следующим образом:

$$F_i = 100 \frac{\sum_{m=1}^f \left(\psi_m \cdot \frac{n_m^i \cdot z_m^0}{V_m^0} \right)}{\sum_{i=1}^{h+p} \left[\sum_{m=1}^f \left(\psi_m \cdot \frac{n_m^i \cdot z_m^0}{V_m^0} \right) \right]} \% \quad (7б)$$

где ψ_m — объемное процентное содержание каждого минерала m с элементом i в данной породе; n_m^i — количество атомов элемента i в формульной единице минерала m с элементом i ; z_m^0 — число формульных единиц в объеме элементарной ячейки минерала m ; V_m^0 — величина объема элементарной ячейки минерала m ; $\sum_{m=1}^f$ — сумма всех минералов от первого до f -го с элементом i в породе;

$\sum_{i=1}^{h+p}$ — сумма всех элементов i в породе от первого до $(h + p)$.

* Однако значение атомных процентов для сравнения различных пород в совокупности с атомно-объемными единицами измерения (пикграммными) тем не менее велико, особенно для метаморфических пород разных фаций метаморфизма [87].

Таким образом, из формулы (7б) видно, что на величину F_i в объеме $V_{\Sigma m}$ массы вещества каждой данной породы, которую можно принять за величину постоянную — V_{const}^m , что приведет к изобъемному сравнению значений F_i разных пород, влияет изменение любого параметра ψ_m , n_m^i , z_m^0 , V_m^0 функции содержания каждого из присутствующих в составе породы элементов. Число таких независимых параметров ϵ_i^p будет равно:

$$\epsilon_i^p = 3K_m^i + \sum_{i=1}^{h+p} (K_m^i) - 1. \quad (8)$$

Таким образом, число независимых параметров, определяющих величину атомного процента элемента i (F_i), для каждой данной породы p в объеме массы ее вещества $V_{\Sigma m}$ на $(h + p)$ меньше, чем число независимых переменных, определяющих массовое процентное содержание этого же элемента и в этом же объеме $V_{\Sigma m}$ рассматриваемой породы p (ср. формулы 2а и 8). Так, для гранита из 4 указанных минералов и 10 элементов величина $\epsilon_i^p = 30$. Следовательно, выражение содержания элементов в атомных процентах ближе отвечает изобъемному характеру сравнения химизма пород, чем использование массовых процентов. В этом случае отклонение получаемых результатов от абсолютного содержания числа атомов в определенном стандартном объеме обусловлено лишь тем, что не учитывается особенность плотнейших упаковок минералов. Но для пород, в которых качественный и количественный минеральный состав тождествен или близок между собой, атомные проценты практически соответствуют изобъемным единицам сравнения. Так, если сравниваются породы одного или близкого состава, то различие в величине F_i определяется целиком различием в содержании элемента i , так как общее количество элементов в сравниваемых породах из расчета на один и тот же объем $V_{\Sigma m}$ — величина практически постоянная. Таким образом, атомное процентное содержание любого элемента i в породах одного или близкого минерального состава определяется $\epsilon_i^p = K_m^i - 1$ независимыми параметрами, что целиком зависит от абсолютного количества данного элемента i в объеме массы вещества $V_{\Sigma m}$ породы p и не зависит или, вернее, очень мало зависит от содержания других элементов. Для пород типа указанного биотитового гранита величина F_{Si} определяется в основном тремя параметрами — объемным процентным содержанием трех минералов из четырех.

Следовательно, изобъемное сопоставление пород близкого минерального состава может производиться в атомных процентах, а получаемые величины вполне сопоставимы. Справедливость подобного заключения в практике проводимых исследований повышается из-за наличия значительных лабораторных дисперсий в определении содержания элементов и, как следствие, из-за существования существенных случайных и систематических расхождений и погрешностей в определении содержания элементов (неравноточности и неправильности результатов анализа), как правило, значительно превышающих природную дисперсию минералогической плотности сравниваемых горных пород. Непредставительность опробования, заражаемость и изменение состава проб при их обработке и хранении еще в большей степени нивелируют различия в химизме сравниваемых пород равнообъемным методом и в атомных процентах. Именно этими причинами может быть объяснено использование в большинстве систем пересчетов результатов химических анализов пород атомных процентов

элементов как процентов, выражающих сходства и различия химизма пород в условиях, наиболее приближающихся к изобъемным, по сравнению с массовыми процентными содержаниями.

Для минералов величина атомного процентного содержания выразится

$$F_i^m = \frac{n_m^i}{h + \rho \sum_{l=1}^i n_m^l}, \quad (9)$$

а число независимых параметров, определяющих величину F_i^m ,

$$\varepsilon_i^m = h + \rho. \quad (10)$$

Из рассмотрения формул (9) и (10) можно сделать вывод, что при изобъемном сопоставлении результатов химических анализов разных минералов величина F_i^m любого элемента i определяется не только величиной n_m^i , но зависит от $(h + \rho)$ независимых параметров, т. е. от значений содержания каждого элемента в формульной единице минерала. Таким образом, атомные проценты для различных минералов являются изобъемно несопоставимыми величинами. Но при сравнении между собой минералов одной группы с близкими величинами V_m^0 и одинаковыми z_m^0 или же близкими значениями отношения z_m^0/V_m^0 атомные проценты являются изобъемно вполне сопоставимыми величинами, так как содержание любого элемента определяется только его величиной n_m^i . Следовательно, для сравнения химизма минералов в пределах одной минеральной группы с близкими V_m^0 и z_m^0 или отношения z_m^0/V_m^0 атомные проценты вполне объективно выражают химический состав в изобъемных единицах сравнения и вполне коррелируемы между собой. Отказ некоторыми исследователями в этом случае, как и в случае сравнения пород близкого минерального состава, от использования атомных процентов для корреляции содержаний различных элементов и создание системы сравнения каждого элемента по отношению к содержанию кислорода ничем не оправданы.

Тем не менее и атомные проценты в общем случае не отражают кристаллохимических особенностей минеральных составляющих пород и отдельных минералов. Так, сравнение содержаний элементов в атомных процентах с объемно-атомными содержаниями (атомными процентами, приведенными в изобъемно-сопоставимые значения; % v) * показывает отсутствие строгой закономерности в соотношении между ними для главных породообразующих элементов (Si, Al, Na, K, Mg, Ca, H), хотя общая тенденция в их изменении при переходе от породы к породе более выдержана, чем для случая массовых процентов (ср. табл. 6 и 7, а также 8, 9 и 10; см. рис. 3 и 4). Это указывает на отсутствие прямой функциональной зависимости между кристаллохимическими особенностями пород и результатами химических анализов в атомных процентах. Различие в поведении атомных и объемно-атомных единиц измерения содержаний кислорода показывает, что молекулярные проценты в еще меньшей степени, чем атомные, отражают кристаллохимические изменения, имеющие место при переходе от одного типа пород к другому.

Таким образом, как уже отмечалось, одному и тому же результату химического анализа в атомных процентах может отвечать несколько совершенно

* Объемно-атомные содержания предложено называть объемно-атомными пиктрамилями, или пиктрамильными содержаниями, обозначая F_i^v % v [83, 90].

Химический состав главнейших типов изверженных горных пород в атомных процентах (F_i)

№ п/п	Порода	Si	Ti	Al	Fe ⁺⁺	Fe ⁺⁺⁺	Mn	Mg	Ca	Na	K	H ⁺ (OH)	P	HO-OH	Σ
1	Дунит (серпентинизированный)	13,21	0,01	0,33	0,67	1,51	0,04	22,50	0,24	0,06	0,02	6,27	0,02	55,12	100,00
2	Перидотит (гарцбургит)	12,64	0,02	0,47	0,60	1,59	0,04	19,63	0,43	0,17	0,06	10,38	0,02	53,95	100,00
3	Перидотит (верлит)	15,20	0,16	2,29	0,85	2,68	0,08	11,51	2,71	0,75	0,24	6,97	0,04	56,52	100,00
4	Оливиновое габбро	16,49	0,32	7,41	0,98	1,83	0,04	4,69	4,37	1,47	0,36	2,47	0,08	59,49	100,00
5	Пироксенит (диаллагит)	17,23	0,26	2,78	1,15	3,33	0,07	6,62	6,31	0,57	0,22	2,49	0,04	58,93	100,00
6	Габбро (без оливина)	17,19	0,21	7,39	0,71	1,69	0,04	3,42	3,96	1,88	0,44	3,71	0,08	59,28	100,00
7	Норит (без оливина)	17,93	0,30	6,73	0,64	2,35	0,04	4,42	3,51	1,79	0,36	1,87	0,06	60,00	100,00
8	Апортозит	17,44	0,04	11,55	0,27	0,31	0,02	0,65	4,61	2,46	0,33	1,73	0,02	60,57	100,00
9	Диорит	19,61	0,21	6,78	0,81	1,27	0,04	2,14	2,49	2,28	0,91	3,13	0,08	60,25	100,00
10	Кварцевый диорит	21,12	0,16	6,54	0,66	1,07	0,02	1,42	1,98	2,22	0,91	2,80	0,08	61,02	100,00
11	Гранодиорит	22,20	0,14	6,40	0,45	0,76	0,02	0,96	1,62	2,47	1,21	2,39	0,06	61,32	100,00
12	Гранит	23,58	0,10	5,77	0,51	0,47	0,04	0,57	0,80	2,29	1,86	1,92	0,08	62,01	100,00
13	Снегит	20,32	0,23	6,70	0,96	0,90	0,04	1,58	1,65	2,33	2,12	2,62	0,08	60,47	100,00

Таблица 7

Химический состав главнейших типов изверженных горных пород в объемно-атомных процентах (F_v)

№ п/п	Порода	Si	Ti	Al	Fe ⁺⁺	Fe ⁺⁺⁺	Mn	Mg	Ca	Na	K	H ⁺ (OH)	P	HO-OH	Σ
1	Дунит (серпентинизированный)	11,97	0,01	0,30	0,60	1,37	0,03	20,39	0,21	0,05	0,02	5,68	0,02	49,94	90,59
2	Перидотит (гарцбургит)	13,28	0,02	0,49	0,63	1,67	0,04	20,62	0,45	0,18	0,06	10,91	0,02	56,68	105,05
3	Перидотит (верлит)	12,96	0,14	1,95	0,73	2,28	0,07	9,81	2,32	0,64	0,21	5,94	0,03	48,18	85,26
4	Оливиновое габбро	14,21	0,27	6,39	0,85	1,58	0,04	4,04	3,76	1,27	0,31	2,13	0,07	51,28	86,20
5	Пироксенит (диаллагит)	14,99	0,23	2,42	1,00	2,90	0,06	5,76	5,49	0,50	0,19	2,17	0,04	51,30	87,05
6	Габбро (без оливина)	14,58	0,18	6,27	0,60	1,43	0,04	2,90	3,36	1,59	0,37	3,15	0,07	50,29	84,83
7	Норит (без оливина)	15,35	0,26	5,76	0,55	2,01	0,04	3,79	3,00	1,54	0,31	1,61	0,05	51,39	85,66
8	Апортозит	13,39	0,03	8,87	0,21	0,24	0,02	0,49	3,54	1,88	0,26	1,32	0,02	46,51	76,80
9	Диорит	15,93	0,17	5,51	0,66	1,03	0,03	1,74	2,02	1,85	0,74	2,55	0,07	48,96	81,26
10	Кварцевый диорит	16,93	0,13	5,25	0,53	0,86	0,02	1,14	1,58	1,78	0,73	2,24	0,06	48,92	80,17
11	Гранит	17,76	0,08	4,35	0,39	0,35	0,03	0,43	0,60	1,73	1,40	1,45	0,06	46,71	75,36
12	Гранодиорит	17,46	0,11	5,04	0,35	0,60	0,02	0,76	1,27	1,94	0,95	1,87	0,05	48,23	78,65
13	Снегит	15,34	0,17	5,06	0,72	0,68	0,03	1,19	1,24	1,76	1,60	1,98	0,06	45,67	75,50

Объемно-массовый химический состав некоторых магматических, метаморфических и метасоматических пород (P^V)

№ п/п	Порода	Si	Ti	Al	Fe ⁺	Fe ⁺⁺	Mn	Mg	Ca	Na	K	H ⁺ (OH)	P	C (CO ₂)	Σ
1	Вl-Нo плагногнейс	25,51	0,53	8,03	0,96	0,21	0,13	5,29	7,19	2,60	0,81	0,16	—	—	47,46
2	Вl-Нo плагногнейс	28,88	0,61	9,41	0,45	4,90	0,06	2,43	1,77	2,15	2,33	0,16	—	—	48,12
3	Вl-Нo плагногнейс	27,78	0,78	0,07	2,01	4,72	0,12	3,14	5,57	3,23	1,71	0,08	0,14	—	49,02
4	Sill-Bi-Gr гнейс	33,87	0,34	7,49	0,60	2,28	0,05	9,32	2,50	2,70	2,28	0,08	0,07	0,01	50,02
5	Gr-содержащий Вl гравит	34,85	0,08	7,09	0,17	1,50	0,03	0,38	0,70	2,24	3,84	0,04	0,07	0,02	49,12
6	Вl-Нo Q диорит	30,45	0,49	8,57	0,90	4,05	0,06	1,60	3,07	2,26	1,32	0,13	—	—	48,59
7	Вl-Нo плагногранит	32,38	0,23	8,380	0,32	1,99	0,01	1,01	3,45	3,10	1,16	0,07	—	—	40,15
8	Вl-Нo Q диорит	28,63	0,37	10,90	1,41	2,74	0,05	1,20	4,67	3,40	1,00	0,05	0,14	—	48,61
9	Метасоматический гранит	32,84	0,21	7,97	0,21	2,76	0,05	0,56	2,06	2,95	2,71	0,10	—	—	49,08
10	Q-Mi метасоматит	27,66	0,67	8,52	0,73	5,46	0,12	4,02	4,75	1,89	3,26	0,15	—	—	48,50
11	Q-Mi метасоматит	37,30	0,08	6,33	0,44	0,68	0,02	0,09	0,37	2,54	4,19	0,02	0,01	—	50,72
12	Габбро-норит	26,87	1,43	7,73	4,75	1,70	0,20	4,35	8,85	2,11	0,40	0,02	—	—	48,45
13	Gr скарн	22,03	0,04	0,28	24,94	0,15	0,18	1,02	28,88	—	—	—	0,05	0,41	49,55
14	Мрамор	0,39	0,02	0,10	0,04	0,02	0,04	0,36	42,62	—	—	—	0,01	12,79	51,91
15	Диоритовый порфирит	27,88	0,56	9,44	1,41	5,01	0,09	2,97	5,17	1,86	3,54	0,15	0,06	—	49,23
16	Окварцованный порфирит	34,01	0,50	6,79	0,96	3,30	0,08	0,37	1,85	2,00	3,96	0,06	0,07	0,08	49,72
17	Q-Ab-Mi метасоматит	31,79	0,50	7,80	0,82	4,55	0,08	1,05	2,83	2,93	4,79	0,11	0,13	—	50,10
18	Q-Mi метасоматит	36,62	0,08	6,21	0,43	0,67	0,01	0,09	3,62	2,49	4,11	0,02	0,01	—	49,78
19	Диафторитовый сланец	27,78	0,65	9,28	3,00	3,02	0,09	2,23	6,22	2,75	2,25	0,11	0,08	0,36	49,73
20	Q-Ab-Mi метасоматит	33,84	0,12	7,86	0,61	0,06	0,02	0,40	1,30	2,01	3,09	0,02	0,02	0,07	49,02
21	Диабаз	26,38	2,57	5,30	5,12	8,53	0,26	8,65	5,11	1,86	1,14	0,03	—	—	—

Таблица 9

Химический состав некоторых магматических, метаморфических и метасоматических пород в атомных процентах (F_i)

№ п/п	Порода	Si	Ti	Al	Fe ⁺⁺	Fe ⁺	Mn	Mg	Ca	Na	K	H ⁺ (OH)	P	C (CO ₂)	O	Σ
1	Вl-Нo плагногнейс	18,01	0,22	6,56	0,34	2,21	0,05	4,32	3,56	2,25	0,41	3,24	—	—	58,83	100
2	Вl-Нo плагногнейс	20,76	0,26	7,04	0,16	1,77	0,02	2,02	0,89	1,88	1,20	3,28	—	—	60,72	100
3	Вl-Нo плагногнейс	19,55	0,32	6,64	0,71	1,67	0,04	2,55	2,75	2,78	0,86	1,48	0,09	—	60,56	100
4	Sill-Bi-Gr гнейс	24,07	0,14	5,48	0,24	0,81	0,02	0,76	1,27	2,42	1,16	1,19	0,05	0,01	62,38	100
5	Gr-содержащий Вl гравит	25,45	0,03	5,39	0,06	0,55	0,01	0,32	0,39	2,00	2,01	0,76	0,04	0,03	62,96	100
6	Вl-Нo Q диорит	21,93	0,21	6,42	0,33	1,47	0,02	1,33	1,55	1,99	0,68	2,65	—	—	61,42	100
7	Вl-Нo плагногранит	23,30	0,10	6,28	0,12	0,72	0,01	0,86	1,74	2,72	0,60	1,45	—	—	62,10	100
8	Вl-Нo Q диорит	20,63	0,16	8,17	0,51	0,99	0,02	1,00	2,36	3,00	0,52	1,07	0,09	—	61,48	100
9	Метасоматический гранит	23,58	0,09	5,96	0,08	1,00	0,02	0,46	1,04	2,58	1,40	1,93	—	—	59,95	100
10	Q-Mi метасоматит	19,48	0,28	6,25	0,20	1,93	0,42	3,27	2,34	1,63	1,65	2,92	—	—	63,30	100
11	Q-Mi метасоматит	26,52	0,03	4,68	0,17	0,24	0,01	0,08	0,18	2,20	2,14	0,44	0,01	—	61,20	100
12	Габбро-норит	19,33	0,60	5,79	1,72	0,62	0,09	3,63	4,46	1,85	0,24	0,47	—	—	61,20	100
13	Gr скарн	15,25	0,01	0,24	8,68	0,04	0,06	0,81	14,00	—	—	—	0,03	0,67	60,21	100
14	Мрамор	0,26	0,008	0,07	0,015	0,006	0,014	0,28	19,67	—	—	—	0,006	19,69	60,02	100,39
15	Диоритовый порфирит	19,40	0,23	6,83	0,49	1,75	0,03	2,38	2,52	1,58	1,77	2,85	0,04	—	60,13	100
16	Окварцованный порфирит	24,35	0,21	5,00	0,35	1,19	0,03	0,31	0,93	1,75	2,03	1,19	0,04	0,10	62,46	100
17	Q-Mi-Ab метасоматит	22,01	0,20	5,62	0,28	1,59	0,03	0,84	1,38	2,48	2,38	2,21	0,08	—	60,90	100
18	Q-Mi метасоматит	26,52	0,03	4,69	0,16	0,24	0,01	0,08	0,18	2,20	2,14	0,44	0,01	—	63,30	100
19	Диафторитовый сланец	19,28	0,27	6,70	1,04	1,05	0,03	1,78	3,02	2,33	1,12	2,16	0,05	0,58	60,55	100
20	Q-Ab-Mi метасоматит	24,70	0,05	5,97	0,22	0,39	0,01	0,34	0,66	2,59	1,62	0,49	0,01	0,12	62,83	100
21	Диабаз	18,08	1,03	3,78	1,76	2,94	0,09	6,85	2,45	1,56	0,56	0,62	—	—	60,28	100

Химический состав некоторых магматических, метаморфических и метасоматических пород в объемно-атомных инграммах (F_1^V)

№ п/п	Порода	Si	Ti	Al	Fe ²⁺	Fe ³⁺	Mn	Mg	Ca	Na	K	H ⁺ (OH)	P	C (CO ₂)	O	Σ
1	Вt-Но плагиофнейс	14,500	0,177	5,284	0,273	1,776	0,039	3,474	2,964	1,808	0,330	2,610	—	—	47,354	80,480
2	Вt-Но плагиофнейс	16,417	0,202	5,565	0,130	1,401	0,019	1,595	0,707	1,491	0,953	2,592	—	—	48,019	79,091
3	Вt-Но плагиофнейс	15,789	0,259	5,364	0,574	1,348	0,034	2,060	2,218	2,246	0,699	1,195	0,073	—	48,915	80,774
4	Sill-Bi-Gr гнейс	19,253	0,113	4,381	0,189	0,652	0,014	0,612	1,018	1,937	0,929	0,949	0,037	0,011	49,906	80,001
5	Gr-содержащий Вt гранит	19,810	0,026	4,193	0,050	0,428	0,009	0,251	0,301	1,557	1,567	0,589	0,034	0,021	49,013	77,851
6	Вt-Но Q диорит	17,306	0,163	5,071	0,257	1,157	0,018	1,049	1,224	1,570	0,539	2,095	—	—	48,480	78,930
7	Вt-Но плагиогранит	18,406	0,077	4,962	0,093	0,568	0,004	0,661	1,376	2,152	0,473	1,147	—	—	49,044	78,963
8	Вt-Но Q диорит	16,273	0,124	6,448	0,402	0,782	0,014	0,789	1,861	2,363	0,408	0,846	0,070	—	48,503	78,883
9	Метасоматический гранит	18,666	0,069	4,717	0,061	0,790	0,015	0,366	0,821	2,050	1,108	1,529	—	—	48,972	79,164
10	Q-Mt метасоматит	15,721	0,223	5,044	0,210	1,560	0,034	2,640	1,892	1,314	1,333	2,355	—	—	48,394	80,720
11	Q-Mt метасоматит	21,200	0,027	3,745	0,126	0,194	0,005	0,061	0,147	1,762	1,711	0,356	0,007	—	50,608	79,940
12	Габбро-норит	15,271	0,476	4,574	1,359	0,485	0,075	2,857	3,527	1,462	0,190	0,370	—	—	48,348	78,994
13	Gr скари	12,521	0,015	0,168	7,129	0,043	0,052	0,667	11,502	—	—	—	0,026	0,550	40,446	82,119
14	Мрамор	0,221	0,007	0,058	0,013	0,005	0,012	0,240	16,975	—	—	—	0,005	6,994	51,794	86,324
15	Диоритовый порфирит	15,848	0,186	5,584	0,404	1,432	0,025	1,948	2,060	1,290	1,444	2,326	0,032	—	49,126	81,705
16	Окварцованный порфирит	19,330	0,165	4,018	0,275	0,944	0,023	0,246	0,736	1,390	1,616	0,944	0,035	0,082	49,606	79,410
17	Q-Ab-Mt метасоматит	18,070	0,165	4,614	0,233	1,302	0,024	0,692	1,129	2,032	1,954	1,814	0,065	—	49,990	82,084
18	Q-Mt метасоматит	20,813	0,026	3,677	0,123	0,191	0,004	0,060	0,144	1,730	1,676	0,350	0,007	—	49,673	78,474
19	Диафоритовый сланец	15,789	0,218	5,491	0,857	0,863	0,027	1,464	2,477	1,910	0,920	1,768	0,042	0,475	49,624	81,925
20	Q-Ab-Mt метасоматит	19,234	0,040	4,648	0,173	0,304	0,007	0,263	0,516	2,019	1,260	0,384	0,011	0,001	48,914	77,864
21	Диабаз	14,995	0,857	3,136	1,403	2,439	0,075	5,682	2,034	1,291	0,465	0,517	—	—	49,968	82,922

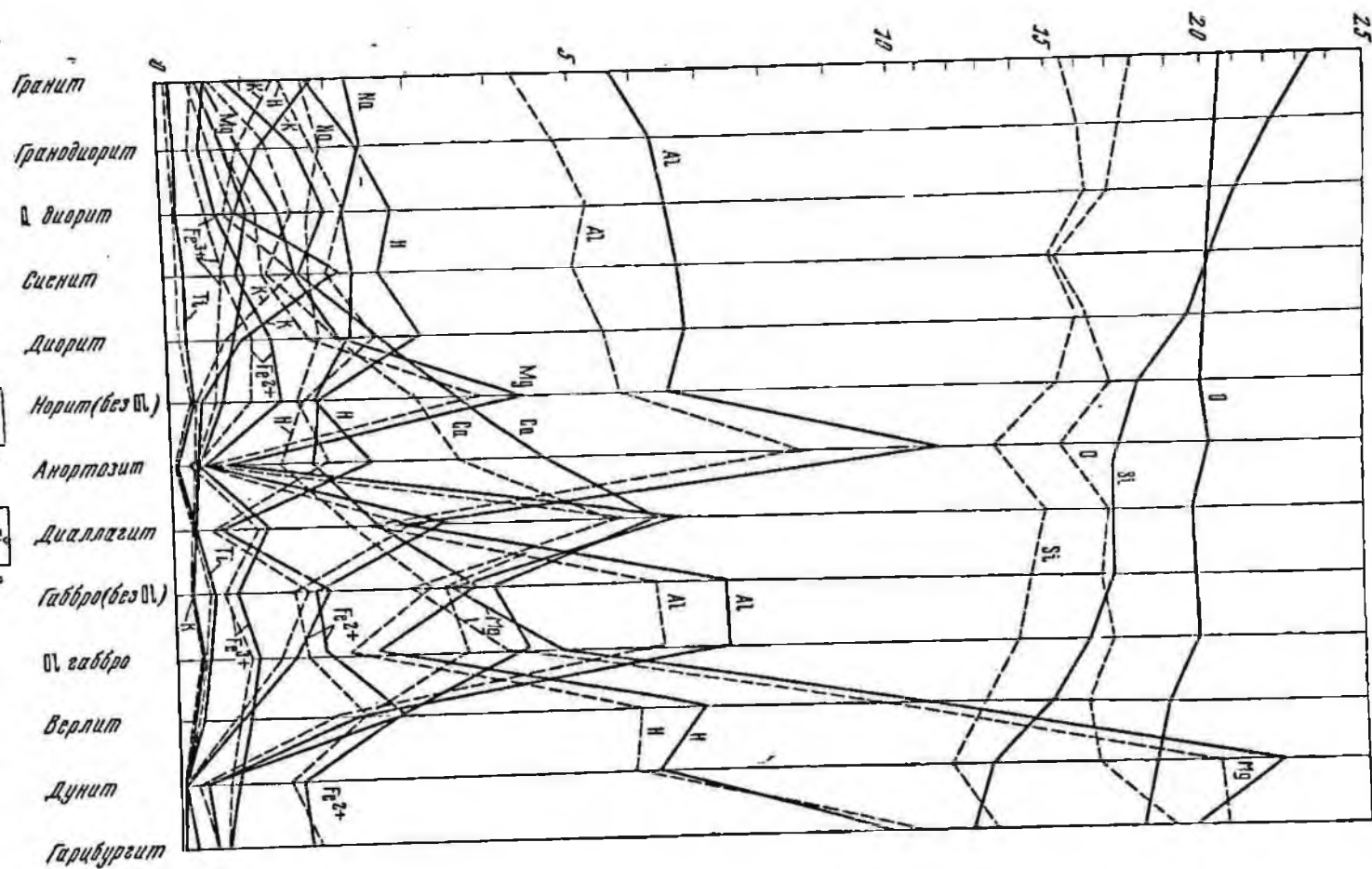


Рис. 3. Сравнение химического состава некоторых магматических горных пород: 1 — в атомных процентах (F_1^V — сплошные линии); 2 — в объемно-атомных инграммах (F_1^V — пунктирные линии) элементов. По ординате отложены величины содержания элементов в атомных процентах и в объемно-атомных инграммах

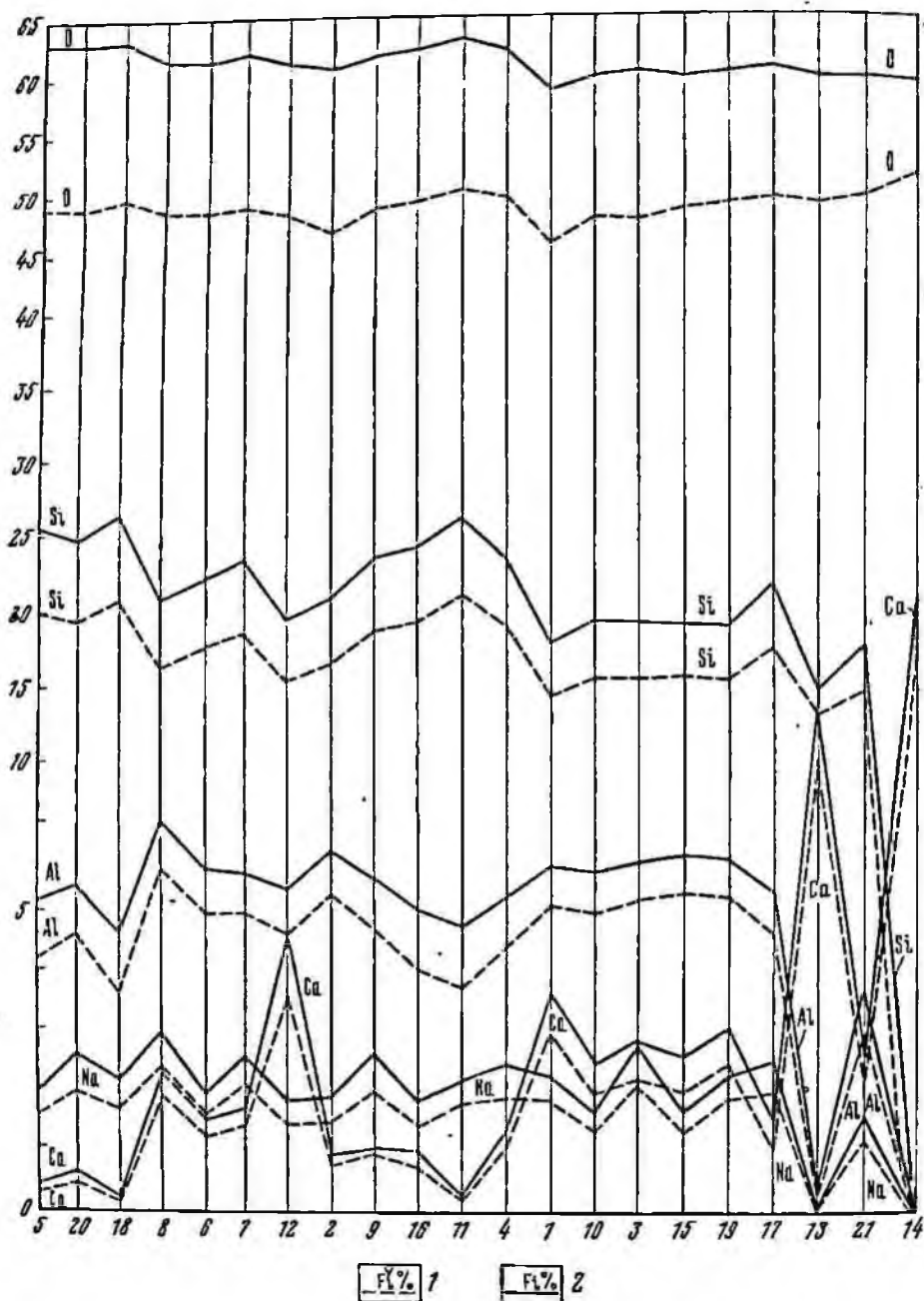


Рис. 4. Сравнение химического состава некоторых метаморфических, метасоматических и магматических горных пород:

1 — в атомных процентах (F_i — сплошные линии); 2 — в объемно-атомных интракристаллах (F_v — пунктирные линии) элементов. По ординате отложены величины содержания элементов в атомных процентах и объемно-атомных интракристаллах, на абсциссе — номера, соответствующие порядковым номерам в табл. 9 и 10.

различных по минеральному составу пород, а одинаковое атомное процентное содержание элемента в различных породах и минералах еще не свидетельствует об одинаковом количестве атомов этого элемента в пределах одного и того же объема массы вещества сравниваемых пород и минералов.

Однако наряду с задачей изобъемного сопоставления химизма пород в атомных единицах сравнения пересчет химических составов горных пород на атомные процентные содержания приобретает новый не менее важный смысл, особенно при изучении метаморфических пород, что специально рассмотрено в работе [87].

Глава III

ВЫРАЖЕНИЕ ХИМИЗМА ГОРНЫХ ПОРОД В ОБЪЕМНО-АТОМНЫХ ЕДИНИЦАХ

Как было показано, выражение результатов химических анализов пород в массовых, молекулярных и атомных процентах в общем случае приводит к потере ценной информации о петрокристаллохимической индивидуальности горных пород. Для того чтобы результаты химических анализов горных пород одновременно отражали и кристаллохимические особенности минеральных составляющих, необходимо, чтобы они учитывали определенные особенности упаковки атомов в минералах, слагающих породу, и, в частности, объем и содержание элементарных ячеек минералов, функцией которых является объем минералов, а в определенных случаях (например, при установлении баланса вещества метасоматических процессов) и пористость, существующую между этими минералами. Следовательно, содержание любого элемента i в породе (F_i^V) должно являться функцией объема (V_m^0) и содержания (z_m^0, n_m^i) элементарной ячейки каждого из f слагающих породу минералов, и, кроме того, функцией объемного процентного содержания каждого из этих минералов (Ψ_m), а в некоторых случаях и пористости (Π), существующей между минералами:

$$F_i^V = f \frac{\sum_{m=1}^f \left[\Psi_m \cdot f \left(\frac{n_m^i \cdot z_m^0}{V_m^0} \right) \right]}{\sum_{i=1}^{h-p} f \left[\sum_{m=1}^f \Psi_m \cdot f \left(\frac{n_m^i \cdot z_m^0}{V_m^0} \right) \right]} \quad (11)$$

Для того чтобы можно было сравнивать между собой породы любого состава и генезиса с помощью любых систем пересчетов, легко переходить от результата химического анализа к отвечающему ему минеральному составу, а также устанавливать химизм и характер реакций процессов метасоматического минералообразования и направленность реакций метаморфизма, способ выражения химического состава пород должен удовлетворять еще и следующим требованиям:

- 1) состав породы должен выражаться в атомных единицах измерения содержания элементов;
- 2) атомные единицы одновременно должны быть и изобъемными;

3) атомная единица измерения содержания каждого элемента одновременно должна выражать и количество атомов этого элемента в породе из расчета на какой-либо объем массы ее вещества;

4) атомные единицы измерения содержания элементов должны позволять легко переходить как к установлению содержания атомов элементов в единице геологического объема горных пород (с учетом их пористости), так и к атомным процентным содержаниям каждого химического элемента и минерального компонента, слагающего горную породу;

5) сумма атомных единиц элементов породы должна отвечать сумме всех атомов породы в данном объеме массы ее вещества и в общем случае равна 100;

6) сумма атомных единиц измерения содержания элементов породы в общем случае должна быть ≤ 100 .

Этим условиям будет удовлетворять выражение объемной атомной единицы измерения содержания элементов [см. формулу (76)] в виде

$$F_i^V = \frac{\sum_{m=1}^I \left(\psi_m \frac{n_m^i \cdot z_m^0}{V_m^0} \right) \cdot 100\%}{\sum_{i=1}^{h+p} \left[\sum_{m=1}^I \left(\psi_m \frac{n_m^i \cdot z_m^0}{V_m^0} \right) \right]} \cdot K_y \quad (12a)$$

или в виде формулы (см. в работе [34] формулы 39ж и 39з):

$$F_i^V = \frac{\sum_{m=1}^I \left(\psi_m \frac{n_m^i \cdot \gamma_m}{M_m} \right) \cdot 100\%}{\sum_{i=1}^{h+p} \left[\sum_{m=1}^I \left(\psi_m \frac{n_m^i \cdot \gamma_m}{M_m} \right) \right]} \cdot K_y, \quad (12b)$$

где $\sum_{m=1}^I$ — сумма всех минералов m от первого до f -го, содержащих в своем составе элемент i ; $\sum_{i=1}^{h+p}$ — сумма всех элементов i в составе породы от первого до $(h+p)$ -го; γ_m — плотность (удельный вес) минерала m ; ψ_m — объемное процентное содержание минерала m , в состав которого входит элемент i ; M_m — формульная масса (равно молекулярный вес) минерала m ; K_y — коэффициент уплотнения, показывающий, какую часть от 100 составляет суммарное содержание атомов в данном стандартном объеме $V_{\Sigma m} = V_{\text{const}}^m$ массы вещества рассматриваемой породы, или насколько какой-то стандартный объем $V_{\Sigma m} = V_{\text{const}}^{100}$ массы вещества, занимаемый 100 атомами, меньше объема V_p^{100} , отвечающего 100 атомам данной породы p :

$$K_y = \frac{F_p^{\bar{V}}}{F_{\text{const}}^V} = \frac{V_{\text{const}}^{100}}{V_p^{100}}, \quad (13a)$$

где $F_p^{\bar{V}}$ — количество атомов элементов данной породы p в объеме V_{const}^m массы ее вещества; $F_{\text{const}}^V = 100$ — количество атомов элементов какой-то идеальной породы или минерала в объеме V_{const}^m массы ее вещества.

Для удобства всех последующих расчетов и для удовлетворения поставленного условия, заключающегося в том, что в большинстве случаев для пород $\sum_{i=1}^{n+p} F_i^V \leq 100$, примем, что $F_{const}^V = 100$, отвечающее какому-то идеальному минералу, содержится в объеме 1000 \AA^3 *.

$$K_y = 0.01 F_p^V = 1000 \frac{1}{V_p^{100}}. \quad (135)$$

В этом случае величина F_i^V любого элемента i породы может быть найдена по формулам (14а) и (14б):

$$F_i^V = 100 \sum_{m=1}^f \left(\psi_m \frac{n_m^i \cdot z_m^0}{V_m^0} \right); \quad (14a)$$

$$F_i^V = 100 \sum_{m=1}^f \left(\psi_m \frac{n_m^i \cdot \gamma_m}{M_m} \right). \quad (14b)$$

Но такой метод нахождения объемно-атомной единицы измерения содержания элементов на основе определения объемного процентного содержания каждого минерала (ψ_m), числа атомов в формульной единице каждого минерала (n_m^i), определения плотностей (γ_m) и формульных масс (M_m) минералов при данных об объеме элементарной ячейки (V_m^0) и ее содержании (z_m^0) для каждого минерала в общем случае малоэффективен из-за своей трудоемкости и приближенности. Исключением составляет случай экспериментального определения указанных констант при отсутствии результатов химических анализов пород, когда могут быть рекомендованы расчеты по указанным формулам.

К определению рассматриваемых объемно-атомных единиц можно подойти и другим способом из знания результатов химических анализов и определения минералогической плотности горной породы (δ).

Величина минералогической плотности породы является средневзвешенной плотностью всех минералов, входящих в породу [83, 87]:

$$\delta_p = \frac{100}{\sum_{m=1}^f \frac{P_m}{\gamma_m}} = \frac{166}{\sum_{m=1}^f \left(\frac{V_m^0 \cdot P_m}{z_m^0 \cdot M_m} \right)}; \quad (15a)$$

$$\delta_p = 0.01 \sum_{m=1}^f (\gamma_m \cdot \psi_m) = 0.0166 \sum_{m=1}^f \left(\frac{z_m^0 \cdot M_m}{V_m^0} \psi_m \right), \quad (15b)$$

где γ_m — плотность (удельный вес) минерала m ; P_m — массовое процентное содержание минерала m ; M_m — формульная масса (молекулярный вес)

* $1 \text{ \AA} = 10^{-7} \text{ см}$. Условно принимается $1 \text{ \AA} \approx 1 \text{ кХ}$, так как такое допущение не отражается на точности производимых расчетов, ибо $1 \text{ кХ} = 1,00202 \text{ \AA}$, но значительно упрощает их. Величина X представляет собой $\frac{1}{3,02904} \cdot 10^3$ от величины межплоскостного расстояния d_{100} между плоскостями спайности кальцита, которое принимается равным $3,02904 \text{ \AA}$ при 18° C [65], в связи с чем и позволяет переходить к величинам, связанным с рентгеноструктурными измерениями.

минерала m . Используя зависимости между величиной объемной плотности (d) породы и кристаллохимическими особенностями слагающих породу минералов, а также между величинами атомного процентного содержания (F_i), количеством атомов (F_i^V) и атомным количеством (A_i) [83, 90], можно подойти к выводу содержания, заключающегося в предлагаемых объемно-атомных единицах измерения, отвечающих вышеупомянутым требованиям:

$$\begin{aligned}
 F_i^V &= F_i \cdot K_y = (100 \cdot F_i^{\bar{V}} \cdot 0.01 F_p^{\bar{V}}) : F_p^{\bar{V}} = (\delta \cdot V_{\text{const}}^m \cdot 0.01 P_i^o \cdot n_i^o) : (1.66 \cdot 10^{-24} \cdot M_i^o) = \\
 &= \frac{V_{\text{const}}^m}{1.66 \cdot 100 \cdot 10^{-24}} \cdot \frac{P_i^o \cdot n_i^o}{M_i^o} \cdot \delta = \frac{V_{\text{const}}^m}{1.66 \cdot 10^{-22}} \cdot \delta \cdot \frac{A_i}{1000} = \\
 &= \frac{1000}{1.66 \cdot 10^{-19} \cdot 10^{24}} \cdot A_i \cdot \delta = \frac{1}{166} \cdot A_i \delta = 0.024 \cdot 10^{-3} \cdot A_i \cdot \delta, \quad (16)
 \end{aligned}$$

где $V_{\text{const}}^m = 1000 \text{ \AA}^3 = \frac{1000}{10^{24}} \text{ см}^3$; P_i^o — массовое процентное содержание окисла с элементом i ; n_i^o — количество атомов элемента i в окисле; M_i^o — формульная масса окисла с элементом i ; δ — минералогическая плотность породы; $1.66 \cdot 10^{-24}$ — единица атомной массы (физическая шкала), равная $1/12$ массы атома изотопа $^{12}\text{C} = 12$ в граммах [50].

Для получения целых чисел атомных количеств (A_i) и возможности использования для их нахождения таблиц прил. 3 в работе [87] выражение $\frac{P_i^o \cdot n_i^o}{M_i^o}$ заменено частным $\frac{A_i}{1000}$. Расчетным путем атомное количество элементов находится по формулам (6а) и (6б).

Таким образом, для нахождения содержания любого элемента i в породе в объемно-атомных единицах измерения (F_i^V) достаточно умножить постоянный для данной породы коэффициент $6,024 \cdot 10^{-3}$ на величину атомного количества этого элемента i (A_i). Величина F_i^V одновременно показывает количество атомов каждого элемента i в стандартном объеме массы вещества породы $V_{\text{const}}^m = 1000 \text{ \AA}^3$.

Исходя из такого содержания объемно-атомной единицы измерения, она была названа объемно-атомной интрамилей [83, 90]. Объемно-атомная интрамиля, или интрамиля*, — это единица измерения содержания элементов в породах, рудах и минералах, показывающая количество атомов в стандартном объеме массы вещества породы в 1000 \AA^3 . Условное обозначение объемно-атомных интрамилей — % v (например, 85% v).

При расчете объемно-атомных интрамилей (F_i^V) следует помнить, что влияние величины пористости пород до 3% на результат расчетов практически не сказывается, так как она не выходит за пределы точности химических анализов. Поэтому при расчете объемно-атомных интрамилей для кристаллических сланцев, гнейсов, амфиболитов, продуктов гранитизации в условиях ультраметаморфизма и большинства интрузивных пород можно пользоваться как величинами объемных, так и минералогических плотностей [102]. Но для единообразия при расчете объемно-атомных интрамилей следует оперировать резуль-

* *Intra* (латин.) — внутри, *mille* (латин.) — тысяча. Образование термина «интрамиля» подобно терминам «процент» и «промилля», в которых приставка «про» (*pro* — латин.) переводится «по отношению».

татами минералогических плотностей (δ). Для примера приведены средние составы некоторых магматических пород по Дэли [26] в массовых процентах окислов (см. табл. 1), элементов (см. табл. 2), а также объемно-массовых единицах содержаний элементов (см. табл. 3). При этом в графе 3 табл. 1 указаны средние арифметические, максимальные и минимальные значения объемных плотностей пород, использованные при расчете в табл. 3, 6 и 7, а в графе 4 табл. 2 приведены количества произведенных определений объемной плотности пород. Во всех указанных случаях пористость не превышала 3—5%, а в большинстве случаев была и еще меньше [102]. Так как количество определений величин объемной плотности многих пород составляет сотни и даже тысячи определений, то их можно сопоставлять со средними составами пород (по Дэли) в массовых процентах и использовать для расчета объемно-массовых содержаний, что и сделано в табл. 3. При этом при расчетах интрамилльных содержаний (см. табл. 7) коэффициент 6,024 был заменен на 6,0, что очень мало сказалось на точности результатов, но упростило их. Результаты средних химических составов указанных пород в различных процентных выражениях нанесены на диаграммы (см. рис. 1 и 3), о которых упоминалось ранее. При расчетах объемно-атомных интрамиллей других типов пород (метаморфические, метасоматические, осадочные и рудные образования) следует пользоваться данными величин минералогической плотности δ .

В табл. 4, 5, 8—10 приведены данные о химических составах некоторых метаморфических, магматических и метасоматических пород, выраженные в массовых процентах окислов (см. табл. 4), в объемно-массовых единицах содержаний окислов (см. табл. 5) и элементов (см. табл. 8), в атомных процентах (см. табл. 9) и объемно-атомных (см. табл. 10) интрамиллях. При расчете использованы величины экспериментально определенной минералогической плотности пород (графа 3 в табл. 4). В табл. 5 (графа 3) приведен поправочный коэффициент за пористость (K_n), на который нужно умножить величины объемно-атомных интрамиллей (см. табл. 10) и объемно-массовых содержаний (см. табл. 5 и 8) для перехода к расчету величины привноса — выноса элементов в процессе метасоматизма, для пересчета результатов анализов на субмодальный состав в объемных единицах и для установления реакций метасоматического минералообразования. На рис. 1—4 произведено графическое сравнение химического состава указанных пород в различных единицах выражения содержаний химических компонентов, которое достаточно наглядно выявляет расхождения и отсутствие каких-либо закономерностей в отклонениях химических составов, выраженных в массовых и атомных процентах, от соответствующих объемно-весовых содержаний и от объемно-атомных интрамиллей.

Желательно для каждой сравниваемой породы представлять величину экспериментально определенной пористости, что имеет большое значение при проверке пересчетов результатов химических анализов разнообразных пористых метасоматитов в объемно-атомные интрамилли и на нормативные составы, отвечающие модалным составам, в особенности на объемно-процентный и формульно-объемный. При этом для установления закономерностей метасоматического минералообразования и породообразования, основанного на «правиле постоянства объемов», учет пористости совершенно обязателен. Введением поправочного коэффициента за пористость (K_n) в расчетную формулу объемно-атомного интрамилльного содержания [см. формулу (16)] или заменой в ней величины минералогической плотности (δ) на объемную плотность (d) достигается установление абсолютного количества атомов (N_i^V) элемента i в стандартном геометрическом объеме породы (V_{const}^g).

Таким образом, для возможностей применения и дальнейшего усовершенствования систем пересчетов и сравнения химического состава пород самого различного химизма и генезиса особый интерес представляет система выражения содержания вещества в породе в виде объемно-атомных пикрамидей, численно отвечающих абсолютному количеству атомов в объеме 1000 \AA^3 массы вещества породы (F^V) и позволяющих достаточно просто переходить к выражению содержания химических и минеральных компонентов в атомных процентах [83, 87]. Для целей установления закономерностей метасоматического минерало- и породообразования особое значение представляет система выражения содержания вещества в абсолютном количестве атомов из расчета на геометрический объем в $10 (00) \text{ \AA}^3$ породы, т. е. с учетом ее пористости (N^V). Обе системы «генетически связаны» между собой, исходят из одних и тех же петрокристаллохимических предпосылок, имеют одни и те же объекты применения и одинаковый математический аппарат и в целом взаимно дополняют друг друга. Поэтому они могут быть объединены под одним названием и рассматриваться как две разновидности атомно-объемной системы.

Часть вторая

АТОМНО-ОБЪЕМНАЯ СИСТЕМА ПЕРЕСЧЕТА

Глава I

ЗАДАЧИ И ПРЕДПОСЫЛКИ АТОМНО-ОБЪЕМНОЙ СИСТЕМЫ ПЕРЕСЧЕТА

Атомно-объемная система пересчета предназначена для сравнения химизма горных пород любого генезиса и установления привноса — выноса вещества, исходя из количества атомов химических элементов в некотором стандартном объеме. Такой способ сравнения точнее отражает истинную природу химических реакций при метасоматическом минералообразовании и значительно упрощает реконструкцию этих реакций для процессов, проходящих в условиях постоянства общего (геометрического) объема пород. Одной из задач атомно-объемной системы пересчетов является также выявление зависимости между минеральным и химическим составом пород любого состава и генезиса.

Основные положения атомно-объемной системы пересчета последовательно развиваются в работах [34, 83, 87, 90], которые базируются на реальных особенностях процессов метасоматического минерало- и пороодообразования. Как известно, процесс метасоматического минералообразования по своей природе может быть разделен на диффузионное и реакционное замещения [8, 34], а по характеру соотношений между исходными минералами и продуктами их изменения — на псевдоморфизацию и на замещение с перетолжением [19].

Под псевдоморфизацией понимают реакции замещения, приводящие к образованию твердых продуктов реакции только непосредственно на месте реакции, которая происходит между веществом минерала и действующим реагентом [19].

По этой причине новообразования фиксируются лишь в пределах объема и формы минерала, подвергающегося псевдоморфизации. Д. П. Григорьев [19] особо подчеркивает тот факт, что в противоположность псевдоморфизации при замещении с перетолжением реакция идет так, что новообразованием получается больше, чем может вместить объем замещаемого минерала, и твердые продукты изменения не только появляются непосредственно на месте замещения, но и откладываются после некоторого перемещения в окружении замещаемого минерала (нарастая на него, заполняя свободное пространство или вытесняя другие окружающие минералы), вследствие чего контуры первоначального минерала не сохраняются и новообразования получают объем и форму, отличные от объема и формы исходного минерала.

В реальном метасоматическом минерало- и пороодообразовании решающее значение имеет именно процесс «замещения с перетолжением». В этой связи особое значение принимает «правило равных объемов при метасоматизме».

Это правило еще справедливо для минеральных агрегатов, т. е. для пород и руд в условиях малых и средних глубин. В абиссальных условиях, где породы ведут себя пластично, возможны пластические деформации и перетекание вещества в процессе метасоматического пороодообразования, а также до

и после него. В подобных случаях необходимо приведение соответствующих доказательств, основанных на полевых наблюдениях, о постоянстве геологического объема пород в участках развития метасоматических процессов.

К сожалению, в истолковании правила равных объемов допускается принципиальная ошибка. Заключается она в том, что под «постоянством объема при метасоматизме» нередко понимается «постоянство порового пространства в породах». Н. П. Наковник [62] указывает, что правило равных объемов при метасоматозе не значит, что равные объемы исходной и измененной породы обязательно обладают равными поровыми пространствами. Он обращает внимание на то, что именно это подчеркивал и Линдгрэн, что видно из его статьи 1918 г.

В связи с таким ошибочным истолкованием «правила равных объемов» некоторые геологи указывают на то, что метасоматическое замещение часто сопровождается уменьшением объема породы, в связи с этим считают невозможным рассчитать действительное изменение вещества, происходящее при метасоматизме. Такие выводы, как показал В. И. Наковник [61, 62], основаны или на недоразумении, или на непонимании сущности «правила равных объемов». В ходе метасоматических преобразований меняются объем твердой части породы в единице ее геометрического объема и пористость внутри этого объема, но не сама величина геометрического (общего) объема, если, конечно, порода не подвергается воздействию внешних сил, под влиянием которых может происходить уменьшение объема породы (иногда весьма значительное) за счет уменьшения ее порового пространства. Но при подобных сравнительно редких изменениях объема породы и при достаточно широко проявленных процессах экзогенного уплотнения в целом ряде случаев возможно установление исходного объема породы [63].

В этом отношении особенно показательна работа Л. Л. Эймса «Объемные зависимости при реакциях замещения». Рассматривая объемные зависимости при реакции замещения кальцита андрадитом и найдя, что объем граната при использовании всего CaO на 22,3% больше объема кальцита, Л. Л. Эймс [34] делает вывод об увеличении объема в процессе этой реакции. В заключение Л. Л. Эймс подчеркивает, что хотя закон равных объемов нередко выражает соотношение объемов при замещении, но тем не менее реакции, ведущие к отрицательным изменениям объема, могут обусловить общее уменьшение объема. В действительности в этом случае мы имеем дело с «реакцией замещения с перетолжением» при постоянном геологическом объеме исходного и заместившего его минерала.

Объемные соотношения при реакциях замещения достаточно полно описаны во многих работах. Здесь рассмотрим только один случай, когда при неправильном толковании «правила равных объемов при метасоматизме» исследователи приходят к выводам, которые по существу являются ошибочными. В этом отношении показательны работы Р. Перрена и М. Рубо, в которых, по мнению этих авторов, при полной гранитизации объем пород увеличивается примерно на 8%, что соответствует их линейному расширению на 2%. Основанием для этого предположения послужило то, что одно и то же число атомов в полевых шпатах занимает несколько больший объем, чем в железо-магnezных минералах. В силу этого, полагая, что фельдшпатизация железо-магnezных минералов идет атом за атом, эти авторы и приходят к выводу об увеличении объема пород в процессе гранитизации. Однако этот вывод справедлив лишь в случае замещения полевыми шпатами исходных минералов в процессе реакций прогрессивного метаморфизма, при которых может происходить изменение геологического объема пород. В то же время общий геологический объем в про-

цессе метасоматической и палингено-метасоматической гранитизации может не только увеличиваться, но даже и уменьшаться, не говоря уже о его постоянстве, даже несмотря на развитие порфиробласт полевых шпатов, замещающих и раздвигающих в процессе роста прослои гнейсов и кристаллических сланцев. Таким образом, в областях развития процессов региональной гранитизации вопрос о закономерностях объемных соотношений должен решаться путем полевых наблюдений.

Б. В. Бродин в работе [8], посвященной роли диффузии при замещении минералов, подробно рассмотрел диффузионные процессы с увеличением, сохранением и уменьшением объема анионного каркаса минералов. Он пришел к выводу, что в процессе диффузионного замещения объем конечных твердых продуктов реакции может быть меньше, равен или больше объема исходных минералов, т. е. к тому же выводу, что и Ю. В. Казыцын [33] относительно реакционного метасоматического минералообразования. Метасоматическая реакция, приводящая к таким соотношениям, может быть определена как «псевдоморфизация» или «замещение с перетолжением». Установление объемного эффекта реакций метасоматического минералообразования и промежуточных продуктов реакции и их поведения позволило, исходя из «правила равных объемов при метасоматизме», выделить пять типов метасоматитов [33].

Как видно, при любом рассмотрении особенностей изменения химизма горных пород при метасоматических процессах все построения и расчеты должны исходить из равных объемов пород. Именно на этом принципе основаны все вычисления по атомно-объемной системе пересчетов. Вместе с тем постоянно наблюдающиеся при метасоматизме перетолжения вещества исходной породы (а часто и его перемещение) заставляет использовать некоторые особые приемы расчетов для установления химизма процесса в целом.

Глава II

СУЩНОСТЬ АТОМНО-ОБЪЕМНОЙ СИСТЕМЫ ПЕРЕСЧЕТА

Атомно-объемная система пересчетов предусматривает выражение химического состава пород двумя способами:

1) в объемно-атомных пнтрамплях химических элементов, обозначаемых далее в формулах индексом F_i^V . Под объемно-атомной пнтрамплей элемента понимается число его атомов, содержащихся в 1000 \AA^3 объема твердой фазы горной породы (объема массы вещества);

2) в количестве атомов химических элементов, содержащихся в $10\,000 \text{ \AA}^3$ общего (геометрического) объема породы. Эти количества атомов обозначаются в дальнейшем в формулах индексом N_i^V .

Как видно, величины F_i^V и N_i^V связаны простым соотношением друг с другом и поправочным коэффициентом на пористость породы:

$$N_i^V = 10 \cdot K_n \cdot F_i^V. \quad (17)$$

Оба способа выражения состава пород позволяют учесть кристаллохимические особенности входящих в нее минералов и плотность упаковки атомов в них; при этом второй способ отражает также пористость пород.

В зависимости от характера и количества исходных данных расчеты по атомно-объемной системе могут вестись в различных вариантах. Один из вариантов — рациональный — основан на использовании результатов полного химического анализа породы и величин экспериментального определения ее минералогической и объемной плотности*. Другие варианты основаны на использовании результатов количественно-минеральных подсчетов в шлифах и петрографическом определении пористости породы или измерении ее объемной плотности.

В ряде вариантов требуется знать химический состав породы и минералогическую плотность, вычисленные по данным количественно-минерального состава и петрографического определения пористости или путем измерений объемной массы породы.

Наиболее просто и достоверно определение количества атомов в стандартном геометрическом объеме ($10\ 000\ \text{Å}^3$) и в стандартном объеме массы вещества ($1000\ \text{Å}^3$) породы производится по результатам определения химического состава породы и соответственно объемной плотности (для получения N^V) и минералогической плотности (для получения F^V). Остальные варианты атомно-объемной системы значительно более трудоемки и употреблять их следует лишь в тех случаях, когда отсутствуют определения объемной (минералогической) плотности пород, а также результаты химических анализов. Наиболее точным и достоверным методом расчета содержания атомов в стандартном объеме пород после рационального варианта является метод, исходящий из расчета субмодального минерального состава и в первую очередь на основе формульно-объемной нормативной системы.

Поправка на пористость пород может быть введена различными способами. Самым простейшим из них является замена величины минералогической плотности породы (δ) величиной ее объемной плотности (d_v), определяемой экспериментально [34, 59]:

$$d_v = \delta - 0,01 \cdot \delta \cdot \Pi = \delta \cdot (1 - 0,01 \cdot \Pi) = K_n \cdot \delta. \quad (18)$$

Существует также мнение, что для сопоставления анализов пород с учетом их пористости требуется количественное определение пористости (в процентном выражении), для чего необходимо определять и объемные, и минералогические плотности. Н. П. Наковник относительно подобных представлений отмечает, что хотя очень интересно знать в количественном выражении величину пористости, но тем не менее для расчета анализов на равные объемы можно не определять удельных весов (минералогической плотности), а определять лишь объемные веса (плотности сравниваемых пород). Все это четко выявляется на основе формулы (18).

Другое дело, когда нет данных о величине объемной плотности пород (d_v) и количество атомов в геологическом объеме породы V_g (N^V) устанавливается исходя из данных об ее минералогической плотности или из величин объемного или процентного содержания минералов породы и их кристаллохимических особенностей. В этом случае для установления количества атомов в единице геометрического объема породы (N^V) с целью выяснения баланса вещества в метасоматических процессах необходимо в расчетные формулы вводить поправку на общую пористость $K_n = (1 - 0,01 \cdot \Pi)$. Имеется много способов определения пористости [59], но наиболее доступные в практике геолого-минерало-

* Ранее они именовались соответственно как удельный и объемный веса.

тических исследований могут быть объединены в две группы: лабораторные и петрографические методы определения пористости.

Лабораторные методы определения общей пористости сводятся к определению величин объемной плотности абсолютно сухой породы (d_v , Г/см³) и минералогической плотности породы (δ , Г/см³) желательнее из одного и того же образца [34, 59]. Расчет общей пористости (Π) производится по формуле

$$\Pi = 100 \left(1 - \frac{d_v}{\delta} \right), \% \quad (19 \text{ а})$$

тогда поправочный коэффициент на общую пористость (K_n) будет находиться с помощью следующего выражения:

$$K_n = \frac{d_v}{\delta} \cdot \quad (19 \text{ б})$$

Если ошибка определения минералогической плотности $\pm 0,01$, а объемной $\pm 0,02$, то пористость может быть вычислена с ошибкой, не превышающей 1% (объемного).

Перед определением величины объемной плотности (d_v) образцы следует просушить в термостате при 110° С для удаления гигроскопической воды, присутствующей в сообщающихся порах. Минералогическая плотность определяется из этих же образцов после их исправия. Химический анализ пород следует производить из образцов, также предварительно просушенных в термостате для удаления гигроскопической воды из сообщающихся пор. Установленное таким образом содержание H_2O^- будет соответствовать количеству воды в закрытых порах породы. Оно должно учитываться при расчете баланса вещества (вместе с «прямой» водой), а также при расчете реакций (отдельно от H_2O^+).

Существует мнение, что пористость пород, выходящих на поверхность, увеличивается (в результате процессов выщелачивания) по сравнению с пористостью пород, находящихся на глубине, поэтому для определения объемной плотности и пористости пород необходимо отбирать образцы в скважинах, глубоких шурфах и других горных выработках. В этом некоторые исследователи видят недостаток методов, оперирующих с объемными плотностями. В связи с этим следует еще раз подчеркнуть, что изменение пористости в результате выщелачивания не так сильно сказывается на результатах пересчетов, как изменение химического состава пород в результате этого процесса, так как величина пористости до 1—2% при расчетах в принципе может вообще не учитываться, ибо поправка на такую пористость меньше или соизмерима с общей погрешностью определения состава пород (см. с. 48). Но изменение химизма пород при выщелачивании, приводящем даже только к 2-процентному увеличению пористости, не говоря уже о более значительном ее изменении, будет весьма существенным в силу избирательного выщелачивания элементов и не может не сказаться на результатах пересчета. Следовательно, основная проблема при опробовании сводится к отбору проб из химически неизменных пород, не затронутых процессами выщелачивания, что достигается петрографическим контролем.

Общая пористость (Π), а следовательно, и поправочный коэффициент на пористость [$K_n = (1 - 0,01 \Pi)$] могут быть также определены петрографическим путем или подобраны по аналогии с подобными по составу и генезису породами, пористость которых определена экспериментально.

В первом случае образец исследуемой породы, предназначенный для изготовления из него шлифа и уже приполированный с одной стороны, проваривается в канадском бальзаме, окрашенном нигрозпином, или в бакелитовой смоле марки БСЛ-1, окрашенной радомшином. Затем после застывания канадского бальзама или полного окончания процесса полимеризации бакелита полированная поверхность тщательно протирается и доводится на сукне или матовом стекле с целью полного удаления бальзама или бакелитовой смолы. Образец наклеивается неокрашенным канадским бальзамом на предметное стекло, сошлифовывается и затем приполировывается с другой стороны обычным способом до стандартной толщины шлифа (до 0,03 мм) или несколько большей. Со стороны покровного стекла шлиф также покрывается тонким слоем подкрашенного канадского бальзама или бакелита с последующим тщательным его удалением с поверхности шлифа, после чего шлиф покрывается покровным стеклом.

На интегральноном столике или пунш-интеграторе подсчитывается площадь сечений, заполненных окрашенным канадским бальзамом или бакелитом (S_n). Отношением этой площади ко всей площади исследуемого шлифа (S_0) определяется общая пористость породы (Π), на основании которой находится и поправочный коэффициент на общую пористость ($1 - 0,01 \cdot \Pi$):

$$\Pi = \frac{S_n}{S_0} \cdot 100\%; \quad (19b)$$

$$K_n = (1 - 0,01 \cdot \Pi) = \left(1 - \frac{S_n}{S_0}\right). \quad (19r)$$

Существует метод Б. В. Залесского и О. Н. Короткова [34], по которому петрографическим путем определяется эффективная пористость (Π_2), которая всегда меньше общей пористости.

Определение общей пористости можно проводить и по методу Г. Гашвальда и П. А. Земятченского, предназначенного в основном для сопоставления эффективной и отрицательной (замкнутой) пористости пород со сравнительно крупными поровыми пространствами. По этому методу образец размером $7 \times 7 \times 4$ см проваривается в канадском бальзаме, окрашенном нигрозпином, затем шлифуется и полируется. Полированная поверхность пропитывается смесью вазелина и мела, остатки которых тщательно соскабливаются с поверхности, а полированная поверхность исследуется в отраженном свете. Сечения эффективных поровых каналов, заполненных окрашенным канадским бальзамом, кажутся черными, а песочающиеся пустоты (отрицательная пористость), заполненные мелом, ярко выделяются своей белой окраской. Общая площадь всех пор (S_n), отнесенная к общей площади породы (S_0), даст величину общей пористости ($\Pi = S_n/S_0 \cdot 100\%$) и поправочного коэффициента на пористость ($K_n = 1 - 0,01 \cdot \Pi$).

Многие из рассмотренных методов основаны на определении количественного минерального состава минеральных агрегатов под микроскопом. Во всех этих случаях необходимо учитывать наличие систематической ошибки метода количественного подсчета и аналитической ошибки, связанной с непредставительностью опробования.

Поправки в результаты анализа. Перед пересчетом химического анализа редкие элементы и элементы в небольших содержаниях объединяются с петрогенными [118] следующим образом: V_2O_5 с Fe_2O_3 ; MnO , NiO , CoO с FeO ; BaO и CrO с $1/2K_2O$; Rb_2O и Cs_2O с K_2O ; Li_2O с $2MgO$. Однако TiO_2 с $FeO + MgO$.

не объединяется, так же как остаются в виде самостоятельных соединений ZrO_2 , Cr_2O_3 , P_2O_5 , F, Cl, S углекислотный, S сульфидная и сульфатная.

Если в породе в значительных количествах содержатся сульфиды, то производятся поправки за их содержание по методике Г. М. Бендзе. Поправки имеет смысл производить в том случае, если содержание сульфидной серы больше 0,5% по массе. Поправки вводятся в результаты определения потерь при прокаливании (П.п.п.) и окисного железа (Fe_2O_3). При этом устанавливается содержание Fe-сульфидного, а П. п. п. заменяются, как правило, содержанием кристаллизационной воды (H_2O^+) согласно формуле (20), где P — содержание химического компонента (элемента или окисла) в % по массе; П.п.п._{рас} и П.п.п._{лаб} — потери при прокаливании, полученные соответственно расчетным и лабораторным путем; P_{Fe} (сульф.), P_{Fe} (пирита), $P_{Fe_2O_3}$ (испр.) — содержание соответственно железа в сульфидах, пирите, окиси железа после введения поправок.

$$П.п.п.рас = П.п.п.лаб - 0,62P_S + 0,11P_{FeO}; \quad (20a)$$

$$П.п.п.рас = П.п.п.лаб - 0,62P_S - 0,01P_{Cu} + 0,06P_{Zn} + 0,11P_{FeO}; \quad (20б)$$

$$P_{Fe} \text{ (сульф.)} = 0,89P_S - 0,03P_{Cu} - 0,44P_{Zn}; \quad (20в)$$

$$P_{Fe} \text{ (пирита)} = 0,89P_S; \quad (20г)$$

$$P_{Fe_2O_3} \text{ (исправ.)} = P_{Fe_2O_3} - 1,43P_{Fe} \text{ (сульф.)}; \quad (20д)$$

Формулы (20а) и (20г) используются, когда сульфиды представлены пиритом, а (20б) и (20в) — пиритом, халькопиритом и сфалеритом или пиритом и одним из указанных сульфидов. Формула (20д) используется в обоих случаях. П.п.п._{рас} обычно представлено H_2O^+ , если в породе не имеется значительных количеств не определявшихся анализом хлора, фтора и CO_2 . Величина Fe (сульф.) вводится в результат анализа наряду с Fe_2O_3 (испр.) и FeO.

Общая ошибка определения числа атомов в стандартном объеме породы оценена в работе [34], из которой следует, что максимальный предел ошибки определения N_i^V даже для SiO_2 составляет не более трех атомов на стандартный объем. Кроме того, для OH погрешность также достигает трех атомов на ячейку, что объясняется малой молекулярной массой H_2O . Ошибка определения числа атомов O, естественно, зависит главным образом от точности определения SiO_2 , как главного носителя кислорода породы, и составляет не более 2—3 атомов на стандартный объем.

Для других атомов Fe^{3+} , Fe^{2+} , Mg, Ca, Na, K верхний предел ошибки не превышает одного атома на ячейку (табл. 11).

Нижние пределы ошибки определения числа атомов в стандартном объеме ($\Delta N_{i, min}^V$), найденные на основе одной лишь аналитической погрешности без учета всех других ошибок, характеризуются значениями, в 10 раз меньшими по сравнению с $\Delta N_{i, max}^V$ (см. табл. 11). Следовательно, при написании равнообъемных формул гранитоидов и замещивших их метасоматитов обычно достаточно указывать целое число атомов в стандартном объеме.

Однако в случае необходимости могут указываться дробные (десятые, сотые) значения количеств атомов. Достоверность приводимых в этом случае значащих цифр должна контролироваться приведенными в табл. 11 пределами или специальными расчетами.

Таблица 11

Верхний и нижний пределы величины ΔN_i^V для породообразующих оксидов гранита (интервал вероятности 95%)*

Элементы	$P_i^0 \cdot \Delta d_V$	$d_V \cdot \Delta P_i^0$	$\Delta N_i^V \max$	$\Delta N_i^V \min$	$\Delta N_i^V, N_i^V \%$
Si	1,39	1,43	2,8	0,26	0,3—3
Ti	0,007	0,21	0,2	0,01	1—20
Al	0,31	0,87	1,4	0,19	0,4—3
Fe ³⁺	0,03	0,72	0,6	0,06	6—60
Fe ²⁺	0,03	0,87	0,8	0,04	0,7—10
Mn	0,001	0,05	0,04	0,009	0,9—40
Mg	0,02	0,61	0,9	0,03	1—15
Ca	0,05	0,61	0,7	0,09	1—10
Na	0,07	0,42	1,0	0,25	1—6
K	0,08	0,66	0,9	0,17	2—8
OH	0,01	0,42	2,9	0,02	0,1—10
O	—	—	2—3	0,3	0,1—1
P	0,002	0,05	0,04	0,005	0,05—40

* По данным Ю. В. Казнына [34]. Символ Δ в табл. 11 и 12 обозначает аналитическую погрешность определения величины, перед которой он стоит.

В табл. 12 сведены значения N_i^V , ΔN_i^V и ΔN_{in}^V для стандартного гранита. Из этой таблицы следует, что в пределах значений $\Delta \Pi = 1—2\%$ величина ошибки определения числа атомов в стандартном геометрическом объеме (ΔN_{in}^V) в зависимости от вариации пористости находится в интервале общей погрешности определения числа атомов в стандартном геометрическом объеме (ΔN_i^V) и лишь для кислорода заметно ее превосходит. Следовательно, при расчете числа атомов в стандартном геометрическом объеме можно обоснованно пренебрегать вариацией в различии пористости сравниваемых пород в пределах 1—2%.

Таблица 12

Значения N_i^V , ΔN_i^V и ΔN_{in}^V для стандартного гранита*

Элементы	N_i^V	ΔN_i^V	ΔN_{in}^V		Элементы	N_i^V	ΔN_i^V	ΔN_{in}^V	
			при Π 2%	при Π 1%				при Π 2%	при Π 1%
Si	176,0	2,8	3,5	1,8	Ca	7,0	0,7	0,14	0,07
Ti	1,0	0,2	0,02	0,01	Na	17,0	1,0	0,34	0,17
Al	51,0	1,4	1,0	0,5	K	11,0	0,9	0,22	0,11
Fe ³⁺	1,0	0,6	0,02	0,01	OH	28,0	2,9	0,56	0,28
Fe ²⁺	6,0	0,8	0,12	0,06	O	450,0	2—3,0	9,0	4,5
Mn	0,1	0,04	0,002	0,001	P	0,1	0,04	0,002	0,001
Mg	6,0	0,9	0,12	0,06					

* По данным Ю. В. Казнына [34]. Принимается, что для N_i^V и N_{in}^V значение $\Pi = 0$.

Глава III

ПРАКТИЧЕСКИЕ ПРИЕМЫ ПЕРЕСЧЕТА ПО АТОМНО-ОБЪЕМНОЙ СИСТЕМЕ

§ 1. РАСЧЕТЫ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ПОРОД

Расчеты вычислений по рациональному варианту производятся, исходя из массового процентного содержания окислов (P_o) или элементов (P_i) породы на основании формул (21а) и (21б) и с помощью прил. 1. Для определения интравильного содержания (F_i^V) используется величина минералогической плотности породы (δ), а для определения числа атомов элементов в геометрическом объеме породы (N_i^V) в $10\ 000 \text{ \AA}^3$ используется величина объемной плотности породы (d_V):

$$N_i^V = \frac{d_V}{16,6} \cdot A_i = P \cdot \mathcal{K} \cdot d_V, \quad (21a)$$

$$F_i^V = \frac{\delta}{166} \cdot A_i = 0,1P \cdot \mathcal{K} \cdot \delta, \quad (21б)$$

где A_i — атомное количество элемента i (см. формулы 6а и 6б и прил. 3 в работе [87]; \mathcal{K} — переходный коэффициент (соответственно для элемента i и окисла с элементом i) устанавливается по прил. 1.

Порядок расчета. Прежде всего сумму результатов анализа приводят к 100% (например, с помощью таблицы прил. 2 работы [87]; см. табл. 13). Затем находятся величины N_i^V и F_i^V на основе формул (21а) и (21б) путем перемножения массового процентного содержания химического компонента на коэффициент \mathcal{K} для этого компонента, который находят в таблице прил. 1, и на величину объемной (d_V) или 0,1 минералогической плотности породы (δ). Для элементов или окислов, отсутствующих в прил. 1, переходный коэффициент для которых не приведен, количество атомов рассчитывается на основании атомных количеств. Методика и примеры расчета приведены в работах [83] и [34].

На основе рассмотренного метода могут быть выведены формулы состава пород, по внешнему виду подобные формулам Барта. Точность расчета количества атомов элементов зависит как от рассматриваемого элемента (см. табл. 11, графу 4), так и от величины его содержания (см. табл. 11, графу 5). Чем меньше содержание компонента, тем больше знаков после запятой должно приводиться. Для ведущих элементов породы расчет ведется до целых единиц для величины N_i^V и до второго знака после запятой для величины F_i^V (см. примеры в табл. 13 и пределы погрешности в табл. 11). Количество атомов кислорода для каждого окисла находится путем увеличения количества атомов кремния, титана, углерода в 2 раза, алюминия, трехвалентного железа и бора в 1,5 раза, фосфора в 2,5 раза, серы (в SO_3) в 3 раза и уменьшения количества атомов натрия, калия, лития, воды в 2 раза. Количество атомов кислорода в окислах FeO , MnO , CaO , BaO , SrO равно количеству соответствующих катионов (см. табл. 13, графы 4, 5, 12, 13). Общее количество атомов кислорода находится путем суммирования частных содержаний атомов кислорода для каждого окисла.

Если данный элемент или окисел отсутствует в таблицах прил. 1, то он находится с помощью формул (6а), (6б), (21а), (21б).

Расчет содержания веществ по атомно-объемному методу (рациональный вариант)

Компо- ненты	Скарн $\delta = 3.83, d\gamma = 3.56$				Мрамор $\delta = 2.87, d\gamma = 2.84$				Элементы	F _Y	N _Y
	P, % по массе		Элементы		P, % по массе		Элементы				
	ре- зультат анализа дана	принад- лежит к 100% дана	катион	анион	резуль- тат ана- лиза	принад- лежит к 100% дана	катион	анион			
SiO ₂	36,07	36,95	37,02	74,04	Si	0,77	0,77	1,54	Si	0,22	2,19
TiO ₂	0,06	0,06	0,04	0,08	Ti	0,03	0,03	0,04	Ti	0,01	0,05
Al ₂ O ₃	0,41	0,42	0,50	0,75	Al	0,17	0,17	0,30	Al	0,06	0,57
Fe ₂ O ₃	27,30	27,96	21,08	31,50	Fe ²⁺	0,06	0,06	0,06	Fe ²⁺	0,01	0,11
FeO	0,15	0,15	0,13	0,13	Fe ²⁺	0,02	0,02	0,02	Fe ²⁺	0,01	0,06
MnO	0,18	0,18	0,15	0,15	Mn	0,05	0,05	0,04	Mn	0,01	0,11
MgO	1,29	1,32	1,97	1,97	Mg	0,56	0,56	0,84	Mg	0,24	2,38
CaO	30,94	31,68	34,02	34,02	Ca	55,20	55,06	59,13	Ca	16,97	163,93
Na ₂ O	—	—	—	—	Na ₂ O	—	—	—	Na	—	—
K ₂ O	—	—	—	—	K ₂ O	—	—	—	K	—	—
P ₂ O ₅	0,09	0,09	0,08	0,20	P ₂ O ₅	0,02	0,02	0,05	P	0,01	0,05
CO ₂	1,16	1,19	1,63	3,26	C(CO ₂)	43,37	43,26	118,44	C(CO ₂)	17,00	168,18
H ₂ O ⁺	—	—	—	—	H ₂ O ⁺	—	—	—	H(OH)	—	—
Σ	97,65	100,00	96,62	146,16	Σ k	100,25	100,00	180,46	Σ k	34,54	337,63

Формула скарна: $Si_{1,32}Ti_{0,14}Al_{1,3}Fe_{0,75}^{2+}Fe_{0,46}^{2+}Mn_{0,05}Mg_{7,0}Ca_{12}P_{0,28}[O_{500}(CO_2)_6]_{520}$
 Формула мрамора: $Si_{2,2}Ti_{0,09}Al_{0,6}Fe_{0,1}^{2+}Fe_{0,06}^{2+}Mn_{0,1}Mg_{2,4}Ca_{16}P_{0,08}[O_{176}(CO_2)_{10}]_{512}$

Рассмотренный метод определения количества атомов в стандартном объеме массы вещества породы (F_i^Y) или в геометрическом объеме породы (N_i^Y) является наиболее простым и быстрым из всех существующих методов. Количество операций в нем сведено до минимума благодаря прил. 1 (коэффициентов \mathcal{R}).

Если данных определения объемной плотности (d_V) не имеется, то количество атомов каждого элемента в геометрическом объеме породы в $10\,000 \text{ \AA}^3$ (N_i^Y) находится по формуле

$$N_i^Y = 10 \cdot K_n \cdot F_i^Y = [K_n \cdot 10 \cdot \left(\frac{\delta}{166} \cdot A_i \right)], \quad (22)$$

где K_n — поправочный коэффициент на общую пористость породы находится по формуле (19г).

Величины F_i^Y определяются с помощью прил. 1 по данным минералогической плотности (δ) и результатам химического анализа породы в процентах (по массе). Затем найденное значение величины F_i^Y умножается на 10 и на поправочный коэффициент, на пористость K_n и находятся величины N_i^Y .

Если, наконец, отсутствуют данные о минералогической плотности породы, то его величина может быть выражена через минералогические плотности минералов (γ_m), слагающих породу, следующим образом [83]:

$$\delta_n = 0.01 \sum_{m=1}^I (\gamma_m \cdot \psi_m) = 0.0166 \sum_{m=1}^I \left(\frac{z_m^0 \cdot M_m}{V_m^u} \cdot \psi_m \right); \quad (22a)$$

$$\delta_b = \frac{100}{\sum_{m=1}^I \left(\frac{P_m}{\gamma_m} \right)} = \frac{166}{\sum_{m=1}^I \left(\frac{V_m^0 P_m}{z_m^u M_m} \right)}. \quad (22b)$$

Однако для подобных случаев предусмотрены специальные методы расчета, излагаемые далее.

Определение массы (в граммах) любого элемента i в геометрическом объеме в 1000 см^3 (p_i) может быть произведено с помощью формул:

$$p_i = a_i \cdot d_V \cdot A_i \cdot 10^{-2}, \quad (23a)$$

$$p_i = 0.166 \cdot a_i \cdot N_i^Y, \quad (23b)$$

где a_i — атомная масса элемента i (см. прил. 2); A_i — атомное количество элемента (см. формулы 6a и 6б; прил. 3 в работе В. А. Рудника [87]); d_V — объемная плотность породы.

§ 2. РАСЧЕТЫ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЛИЧЕСТВЕННОГО МИНЕРАЛЬНОГО СОСТАВА ПОРОД

Определение объемно-атомных пикрамплей и числа атомов в стандартном геометрическом объеме по результатам количественных минералогических подсчетов производится в том случае, когда отсутствуют результаты химиче-

ского апалпа сравнимых пород. Состав пород в одних случаях рассчитывается, исходя из данных химизма минералов, полученных по их оптическим свойствам (с использованием известных справочников и руководств), в других — из среднего состава минерала, характерного для данного типа минеральной ассоциации. Такой способ определения состава пород возможен, если минералогическая плотность минерала установлена непосредственным измерением или по диаграммам «состав — свойство» по показателям преломления минерала.

В других случаях при невозможности определения минералогических плотностей минералов (γ_m) состав породы вычисляется, исходя из теоретических формул минералов и некоторых дополнительных данных.

Примеры таких расчетов показаны на ряде примеров, касающихся почти исключительно графатовых скарнов. При этом подсчитанное на интеграционном столике содержание минералов в объемных процентах несколько отличается от содержания, определенного путем пересчета химического состава на минеральный. В частности, при подсчете на столике завышено содержание кальцита и андрагита из-за неоднородности породы, не учтено содержание топкорассеянных гематита, апатита и кварца из-за невозможности их подсчета (ср. табл. 13, 18, 22). Такие расхождения наглядно выявляют возможности и недостатки всех предлагаемых методов.

1. Расчеты с определением состава минералов по оптическим свойствам. В зависимости от того, в какой форме приведен в справочниках состав минералов — в виде химических и структурно-химических формул или в процентах по массе элементов или окислов, составляющих минералы, — расчет ведется по формуле (24) или (25) с использованием в первом случае величин молекулярной массы минералов (M_m), а во втором — атомных количеств элементов, входящих в состав минералов (A_m^i). Рассмотрим оба случая.

а) *Состав минералов выражен в виде формулы.* В этом случае расчет ведется согласно равенству (24):

$$N_i^V = 10 \cdot K_n \cdot F_i^V = K_n \cdot \sum_{m=1}^f (N_m^i \cdot \psi_m) = K_n \cdot \sum_{m=1}^f \left(\frac{10\,000}{166} \cdot \frac{\gamma_m \cdot \psi_m}{M_m} \cdot n_m^i \right) =$$

$$= 60.24 \left(\frac{\gamma_1 \cdot \psi_1}{M_1} \cdot n_1^i + \frac{\gamma_2 \cdot \psi_2}{M_2} \cdot n_2^i + \dots + \frac{\gamma_f \cdot \psi_f}{M_f} \cdot n_f^i \right) \cdot K_n, \quad (24)$$

где N_i^V — количество атомов любого элемента i в геометрическом объеме (в $10\,000 \text{ \AA}^3$) породы; F_i^V — объемно-атомная пирамида элемента i , численно отвечающая количеству атомов элемента i в объеме в 1000 \AA^3 массы вещества породы; N_m^i — количество атомов элемента i в минерале m из расчета на его объем в $10\,000 \text{ \AA}^3$; $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_f$ — плотность соответственно первого, второго и т. д. до f -го минерала; $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_f$ — содержание в породе в объемных процентах соответственно первого, второго и т. д. до f -го минерала (пористость не учтена); M_1, M_2, \dots, M_f — молекулярная (формульная) масса соответственно первого, второго и т. д. до f -го минерала m ; $n_1^i, n_2^i, \dots, n_f^i$ — количество атомов элемента i в формуле соответственно первого, второго и т. д. до f -го минерала; K_n — поправочный коэффициент на пористость [см. формулы (19б), (19г)].

Порядок расчета. По данным оптических исследований устанавливаются и записываются химическая формула минерала, его плотность (γ_m) и молекулярная масса (M_m) (табл. 14, графы 2, 3, 4). Затем подсчитывается содержание каждого минерала в шлифах в объемных процентах с точностью до 0,5—1% (см. табл. 14, графу 5). Пористость при этом не учитывается. Затем для каждого минерала вычисляется переходный коэффициент $60,24 \cdot \gamma_m \cdot \psi_m / M_m$ (см. табл. 14, графу 6).

Далее определяется количество каждого элемента i в $10\,000 \text{ \AA}^3$ массы вещества породы соответственно для каждого минерала (см. табл. 14, графы 7—14) путем умножения полученной величины переходного коэффициента на число атомов элемента i в формуле минерала. Сложив количества атомов каждого элемента, связанные с соответствующими минералами, получаем содержание каждого элемента в объеме породы в $10\,000 \text{ \AA}^3$ без учета пористости, т. е. величины $10F_i^Y$. Затем умножим эти величины на поправочный коэффициент на общую пористость K_p [см. формулы (19б), (19г)] определяется количество каждого элемента (N_i^Y) в геометрическом объеме породы в $10\,000 \text{ \AA}^3$.

Содержание элемента i в граммах в геометрическом объеме породы в 1000 см^3 (p_i) можно определить по формуле (23б).

Точность расчета по рассматриваемому методу достаточно высока. Так, в приведенном примере отклонение общего количества атомов,

Таблица 14
Определение числа атомов в $10\,000 \text{ \AA}^3$ по атомно-объемной системе на основе количественных минеральных подсчетов

Минерал *	Формула минерала по данным оптических исследований	Плотность минерала γ_m	Молекулярная масса минерала M_m	Содержание минерала ψ_m , %	$60,24 \cdot \frac{\gamma_m \cdot \psi_m}{M_m}$	Число атомов в $10\,000 \text{ \AA}^3$									
						O	Si	Al	Fe ⁺⁺	Fe ³⁺	Mg	Ca	C	Σ	
Гроссулар	$\text{Ca}_3(\text{Al}_{0,95}\text{Fe}_{0,05}^{2+})_2[\text{SiO}_4]_3$	3,60	453,51	2	0,956	11,47	2,87	1,82	0,10	—	—	2,87	—	—	19,13
Андралит	$\text{Ca}_3\text{Fe}_2^{3+}[\text{SiO}_4]_3$	3,87	508,21	83	38,075	456,90	114,22	—	76,15	—	—	114,22	—	—	761,50
Дипонд	$\text{Ca}(\text{Mg}_{0,65}\text{Fe}_{0,35}^{2+})[\text{SiO}_3]_2$	3,33	218,09	8	7,301	44,17	14,72	—	—	0,37	—	7,38	—	—	73,61
Кальцит	CaCO_3	3,72	100,09	7	11,460	34,38	—	—	—	—	—	11,46	11,46	—	57,30
$10 \cdot F_i^Y$ — общее число атомов без учета пористости						546,01	131,81	1,82	76,25	0,37	0,99	135,91	11,46	—	911,54
N_i^Y — общее число атомов с учетом пористости ($K_p = 0,93$)						508,63	122,58	1,69	70,91	0,34	6,50	126,40	10,66	—	847,71

Формула породы: $\text{Si}_{1,93}\text{Al}_{1,7}\text{Fe}_{0,17}^{3+}\text{Fe}_{0,5}\text{Mg}_{0,5}\text{Ca}_{1,50}\text{C}_{11}\text{O}_{669}$

* Примесь гематита, кварца, апатита не поддается учету.

определенного данным способом, составляет около 2% от их содержания, установленного с помощью рационального варианта атомно-объемного метода (ср. данные расчета табл. 14, графы 7—15 и табл. 13, графы 10—25).

б) Состав минералов выражен в процентах (по массе) окислов или элементов. В этом случае расчет ведется по формуле (25а):

$$N_i^V = 10 \cdot K_n \cdot F_i^V = K_n \sum_{m=1}^f (N_m^i \cdot \psi_m) = K_n \cdot \frac{60,24}{100000} \sum_{m=1}^f (\gamma_m \cdot \psi_m \cdot A_m^i) = \\ = 60,24 \cdot 10^{-5} (\gamma_1 \cdot \psi_1 \cdot A_1^i + \gamma_2 \cdot \psi_2 \cdot A_2^i + \dots + \gamma_f \cdot \psi_f \cdot A_f^i) \cdot K_n, \quad (25a)$$

где N_i^V — количество атомов элемента i в стандартном геометрическом объеме ($10\,000 \text{ \AA}^3$) породы; K_n — поправочный коэффициент за общую пористость породы; N_m^i — количество атомов элемента i в объеме $10\,000 \text{ \AA}^3$ данного минерала m

$$N_m^i = \frac{\gamma_m \cdot A_m^i}{16,6}; \quad (25b)$$

$N_1^i, N_2^i, \dots, N_f^i$ — количество атомов элемента i в объеме $10\,000 \text{ \AA}^3$ соответственно первого, второго и т. д. до f -го минерала; $\gamma_m, \gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_f$ — плотность соответственно минерала m , первого, второго и т. д. до f -го минерала; $\psi_m, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_f$ — величина содержания соответственно минерала m , первого, второго и т. д. вплоть до f -го минерала в объемных процентах (пористость не учтена); $A_m^i, A_1^i, A_2^i, \dots, A_f^i$ — атомное количество элемента i соответственно в составе минерала m , первого, второго и т. д. f -го минерала.

Порядок расчета. По результатам оптических исследований устанавливаются и записываются химический состав минералов в процентах по массе (табл. 15, графы 3—14) и плотность минералов (см. табл. 15, графа 2). Данные химического состава минералов приводятся к 100% (с помощью таблиц прил. 2 в работе В. А. Рудника [87]). Затем по процентным содержаниям окислов находят атомные количества катионов и анионов для каждого минерала (см. табл. 15, графы 15—27) по формулам (6а) и (6б) или с помощью прил. 3 в книге В. А. Рудника [87].

Подсчитывается содержание каждого минерала в породе в объемных процентах (см. табл. 15, графу 28). После этого определяется количество атомов каждого элемента в $10\,000 \text{ \AA}^3$ породы соответственно для каждого минерала путем перемножения коэффициента $60,24 \cdot 10^{-5}$ на плотность минерала (γ_m), на его содержание в породе (ψ_m) и на атомное количество данного элемента в данном минерале (см. табл. 15; графы 29—41). Дальнейший ход расчета в точности совпадает с вышеизложенным для формулы (24) (см. табл. 14).

2. Расчеты с использованием теоретических составов минералов для своего применения требуют знания величин объема элементарной ячейки слагающих породу минералов (V_m^0) и чисел формульных единиц в них (z_m^0). Они могут быть рекомендованы в тех случаях, когда нет данных о плотности минералов. При этом расчеты ведутся исходя из теоретических формул минералов, иногда корректируемых в соответствии с их оптическими свойствами. Ниже рассматриваются приемы этих расчетов.

а) Расчеты с использованием теоретических составов минералов выполняются с помощью таблиц прил. 3 или по формулам (27а) и (27б).

Определение числа атомов в 10 000 Å³ по атомно-объемной системе на основе количественных минеральных подсчетов

Минерал	Плотность Минерала	Химический состав минералов, % по массе											Атомные количества										
		SiO ₂	TiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	FeO	MnO	MgO	CaO	H ₂ O	Na ₂ O	H ₂ O	Z	Si	Ti	Al	Fe ⁺⁺	Fe ⁺	Mg	Ca			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22		
Микроклин	2,585	61,13	—	19,40	—	—	—	—	1,00	11,71	2,68	—	98,92	—	—	—	—	—	—	—	—		
Альбит-олигоклаз	2,620	64,83	—	10,61	—	—	—	—	1,01	11,84	2,71	—	100,00	1079	384	—	—	—	—	—	18		
		64,60	—	21,40	—	—	—	—	2,51	11,2	8,22	—	98,91	—	—	—	—	—	—	—	—		
		0,531	—	21,70	—	—	—	—	2,54	11,3	9,32	—	100,00	1087	426	—	—	—	—	—	45		
Бютит	3,00	39,38	1,15	16,93	7,58	14,61	0,48	9,28	0,88	8,15	1,12	3,01	90,57	—	—	—	—	—	—	—	—		
		36,54	1,16	17,00	7,61	14,67	0,48	9,32	0,88	8,19	1,13	3,02	100,00	608	15	334	90	204	7	231	10		
Кварц	2,65	100,00	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	100,00	—	—	—	—	—	—	—	—		
		100,00	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	100,00	1668	—	—	—	—	—	—	—		

10 F_Y — общее количество атомов без учета пористости; N_Y — общее количество атомов с учетом пористости (K_n = 0,93)

Таблица 15

Минерал	Плотность Минерала	Атомные количества						Число атомов в стандартном объеме														
		K	O	H	Na	Al	Si	Al	Ti	Fe ⁺	Fe ⁺⁺	Ca	Mg	Mn	Fe ⁺	Fe ⁺⁺	Si	Na	II	O	Z	
1	2	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41		
Микроклин	2,585	—	—	—	—	—	30	—	17,04	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Альбит-олигоклаз	2,620	251	88	—	—	4742	34	50,41	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
		24	301	—	—	4003	8	58,53	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Бютит	3,08	174	30	332	—	4074	28	8,05	4,02	0,22	1,41	3,00	0,10	3,40	0,24	2,56	0,53	—	—	—	—	—
Кварц	2,65	—	—	—	—	4098	—	74,47	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
10 F _Y		—	—	—	—	—	—	192,30	45,80	0,22	1,41	3,00	0,10	3,40	3,50	15,58	20,85	4,80	—	—	—	—
N _Y		—	—	—	—	—	—	178,89	42,50	0,20	1,31	2,79	0,09	3,16	3,26	14,49	10,30	4,55	—	—	—	—

Формула породы: Si₁₇₉ Al₃₄ Ti₁₀ Fe_{3,4} Fe_{2,8} Fe_{3,4} Mg_{3,2} Ca₃ K₁₄ Na₁₀ [O₄₄₈]

Таблица 16

Определение числа атомов в 10 000 Å³ по атомно-объемной системе
на основе количественных минеральных подсчетов

Минерал *	Формула	Содержание минерала 0,01·ψ _m , об. %	Число атомов в стандартном объеме								
			O	Si	Al	Fe ²⁺	Fe ³⁺	Mg	Ca	C	Σ
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Гроссуляр	Ca ₃ Al ₂ [SiO ₄] ₃	0,02	11,6	2,9	1,9	—	—	—	2,9	—	19,3
Андрадит	Ca ₂ Fe ₂ ³⁺ [SiO ₄] ₃	0,83	455,0	114,0	—	76,0	—	—	114,0	—	759,0
Допсид	CaMg[Si ₂ O ₆]	0,08	44,1	14,7	—	—	—	7,4	7,4	—	73,6
Кальцит	Ca[CO ₃]	0,07	34,3	—	—	—	—	—	9,8	9,8	53,9
10F _i ^Y — общее число атомов без учета пористости			545,0	131,6	1,9	76,0	—	7,4	134,1	9,8	905,8
N _i ^Y — общее число атомов с учетом пористости (K _n = 0,93)			506,9	122,4	1,8	70,7	—	6,9	124,7	9,1	842,5

Формула породы: Si_{1,22} Al₂ Fe₇₁³⁺ Fe₀²⁺ Mg₇ Ca_{1,25} C₀ O₈₄₂.

* Примесь кварца, гематита, апатита не поддается учету.

Порядок расчета в этом случае следующий. Подсчитывается содержание каждого минерала в объемных процентах (ψ_m) с точностью до 0,5—1% (пористость при этом исключается из расчета) и записывается в виде величин, отнесенных к ста (ψ_m/100) (табл. 16, графа 3). Затем путем перемножения этих величин на числа атомов элементов, содержащихся в объеме 10 000 Å³ данного минерала (N_mⁱ), находят количества атомов каждого элемента в стандартном объеме массы вещества породы, связанное с этим минералом (см. табл. 16, графы 4—12).

Для 80 главнейших минералов рассчитаны содержания всех составляющих элементов в объеме 1000 Å³ (0,1N_mⁱ), которые приведены в таблицах прил. 3. Количества атомов, соответствующие процентному содержанию минералов в породе, найденные с помощью таблиц прил. 3, увеличиваются в 10 раз и представляются в графы 4—12 табл. 16.

Если необходимый минерал отсутствует в таблицах прил. 3, то для нахождения величины N_mⁱ могут быть использованы данные расчета общего количества атомов элементов в минералах в объеме 10 000 Å³ их массы (ΣN_mⁱ) и величина количества как всех атомов в формульной единице минерала (Σn_mⁱ), так и каждого элемента i (n_mⁱ), приведенные в прил. 5. Количество атомов каждого элемента i в стандартном объеме массы вещества породы, связанное с определенным минералом m (N_mⁱ·ψ_m), вычисляется по формуле

$$0,01 \cdot N_m^i \cdot \psi_m = \frac{\sum N_m^i}{\sum n_m^i} \cdot n_m^i \cdot \frac{\psi_m}{100}, \quad (26)$$

где величины ΣN_mⁱ и Σn_mⁱ и n_mⁱ находятся в прил. 5 (графы 13 и 17).

Определив содержание атомов элементов (связанные со всеми минералами породы) путем суммирования найденных количеств атомов каждого элемента по всем минералам $\{\sum (N_m^i \cdot \psi_m)\}$, устанавливаем общее количество атомов элементов в объеме 10 000 Å³ массы вещества породы при условии, что пористость в породе равна нулю (см. табл. 16, графы 4—12). После этого вводится поправка на пористость (K_p) (см. формулы (19б)—(19г)) и определяется количество атомов каждого элемента в стандартном геометрическом объеме породы.

В таблицах прил. 5 приведены данные для 514 породообразующих минералов. Если необходимо определить содержание атомов элементов в объеме 10 000 Å³ какого-либо другого, не указанного в этом приложении минерала, то это может быть осуществлено с помощью формулы (27а) или (27б):

$$N_m^i = 10\,000 \frac{n_m^i \cdot z_m^0}{V_m^0}; \quad (27а)$$

$$N_m^i \cdot \psi_m = 100 \frac{n_m^i z_m^0}{V_m^0} \psi_m, \quad (27б)$$

где ψ_m — содержание минерала в породе в объемных процентах (пористость не учтена); n_m^i — количество атомов элемента i в формульной единице минерала m (см. прил. 5, графу 13); z_m^0 — число формульных единиц минерала m в объеме его элементарной ячейки (см. прил. 5, графу 10); V_m^0 — величина объема элементарной ячейки минерала.

При определении данным способом (см. табл. 16) отклонение общего количества атомов (N_i^V) в геометрическом объеме 10 000 Å³ породы составляет около 2,5% от их содержания, установленного с помощью рационального варианта атомно-объемной системы (ср. результаты табл. 16, графы 4—12, табл. 14, графы 7—15 и табл. 13, графы 7—8). Подобные расчеты производят в тех случаях, когда нет результатов химико-аналитических определений и когда не требуется особой точности в расчетах, т. е. для грубой оценки состава.

б) Расчеты с использованием теоретических составов минералов, дополненных по результатам оптических исследований, выполняются на основании формулы (28).

$$\begin{aligned} N_i^V &= 10K_p F_i^V = K_p \sum_{m=1}^f \left(N_m^i \frac{\psi_m}{100} \right) = K_p \cdot 100 \sum_{m=1}^f \left(n_m^i \frac{z_m^0}{V_m^0} \psi_m \right) = \\ &= 100 \left(n_1^i \cdot \frac{z_1^0}{V_1^0} \psi_1 + n_2^i \frac{z_2^0}{V_2^0} \psi_2 + \dots + n_f^i \frac{z_f^0}{V_f^0} \psi_f \right) \cdot K_p, \end{aligned} \quad (28)$$

где N_i^V — количество атомов любого элемента i в стандартном геометрическом объеме (в 10 000 Å³) породы; F_i^V — объемно-атомная питрамия элемента i , численно равная количеству атомов элемента i в стандартном объеме в 1000 Å³ массы вещества породы; N_m^i — количество атомов элемента i в минерале m из расчета на стандартный объем в 10 000 Å³; $\psi_m, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_f$ — содержание в породе в объемных процентах соответственно минерала m , первого, второго и т. д. вплоть до f -го минерала (пористость не учтена); $n_m^i, n_1^i, n_2^i, \dots, n_f^i$ — количество атомов элемента i в формульной единице соответственно минерала m , первого, второго и т. д. вплоть до f -го; $V_m^0, V_1^0, V_2^0, \dots, V_f^0$ — величина объема элементарной ячейки соответственно минерала m , первого, второго и т. д. вплоть до f -го; $z_m^0, z_1^0, z_2^0, \dots, z_f^0$ — число формульных единиц соответственно минерала m , первого, второго и т. д. вплоть до f -го в объеме его элементарной ячейки.

Определение числа атомов в $10\,000 \text{ \AA}^3$ по атомно-объемной

Минерал *	Формула минерала по данным оптических исследований	Содержание минерала ψ_m , об. %	$\frac{z_m^0}{V_m^0}$
Гроссуляр	$\text{Ca}_3 (\text{Al}_{0,85} \text{Fe}_{0,05}^{3+})_2 [\text{SiO}_4]_3$	2	0,00481
Апдрайт	$\text{Ca}_3 \text{Fe}_2^{3+} [\text{SiO}_4]_3$	83	0,00458
Диопсид	$\text{Ca} (\text{Mg}_{0,85} \text{Fe}_{0,05}^{2+}) [\text{SiO}_3]_2$	8	0,00920
Гальцит	CaCO_3	7	0,01639

$10 F_i^V$ — общее число атомов без учета пористости

N_i^V — общее число атомов с учетом пористости ($K_p = 0,93$)

Формула породы: $\text{Si}_{122} \text{Al}_2 \text{Fe}_{71}^{3+}$

* Прямь гематита, кварца, апатита не поддается учету.

Порядок расчета количества атомов в стандартном объеме породы следующий. По данным оптических исследований устанавливаются и записываются химические формулы минералов исследуемых пород (табл. 17, графа 2). Затем подсчитывается содержание каждого минерала в шлифах в объемных процентах с точностью до 0,5—1% (см. табл. 17, графу 3). После этого для каждого минерала определяются коэффициенты z_m^0/V_m^0 (см. табл. 17, графу 4) и $z_m^0/V_m^0 \times \psi_m \cdot 100$ (см. табл. 17, графу 5); необходимые для этого величины можно найти в прил. 5 или в специальных справочниках, а величина V_m^0 может быть также рассчитана по формулам, приведенным перед таблицами прил. 5.

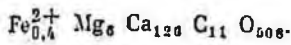
Далее определяется число атомов каждого элемента i в объеме массы вещества породы в $10\,000 \text{ \AA}^3$ соответственно для каждого минерала (см. табл. 17, графы 6—14) путем умножения полученной величины переходного коэффициента (см. табл. 17, графу 5) на число атомов элемента i в формуле минерала (см. табл. 17, графу 2). Сложив полученные количества атомов каждого элемента, связанные с соответствующими минералами, получаем число атомов каждого элемента в $10\,000 \text{ \AA}^3$ породы без учета ее пористости (иначе говоря, находим величины $10F_i^V$). Умножением этих величин на поправочный коэффициент на пористость K_p [см. формулы (19б), (19г)] определяется количество каждого элемента в том же объеме $10\,000 \text{ \AA}^3$, но уже с учетом пористости породы.

§ 3. РАСЧЕТЫ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ПОРОД И ДАННЫМ ОБ ИХ КОЛИЧЕСТВЕННОМ МИНЕРАЛЬНОМ СОСТАВЕ

Расчет объемно-атомных интрамилей и количества атомов в стандартном геометрическом объеме пород известного химического состава, но с неустановленными значениями минералогической и объемной плотностей, может производиться на основе теоретического вычисления этих двух последних величин по результатам количественного минерального подсчета в шлифах. В одном из своих вариантов расчеты ведутся с непосредственным определением значений δ_p

системе на основе количественных минеральных подсчетов

$\frac{z^0 m}{V^0 m} \psi_m \cdot 100$	Число атомов в стандартном объеме								
	O	Si	Al	Fe ²⁺	Fe ³⁺	Mg	Ca	C	Σ
0,982	11,5	2,9	1,8	0,11	—	—	2,9	—	19,2
38,014	456,2	114,0	—	76,0	—	—	114,0	—	760,2
7,360	44,2	14,7	—	—	0,4	7,0	7,4	—	73,7
11,473	34,4	—	—	—	—	—	—	11,5	57,4
	546,3	131,6	1,8	76,1	0,4	7,0	135,8	11,5	910,5
	508,1	122,4	1,7	70,8	0,4	6,5	126,3	10,7	846,9



и d_V , в другом они косвенно учитываются при помощи переводных коэффициентов. Порядок расчетов рассматривается ниже на двух примерах, где плотности минералов определяются по их оптическим свойствам. К ним близок и третий пример с использованием при расчетах сведений о теоретических составах минералов, дополненных их оптическими исследованиями.

1. Пересчет химических анализов с вычислением δ_n и d_V . Определение количества атомов в стандартном объеме породы по этому способу производится согласно формуле (29).

Формула (29) выведена из формул (21а), (22) и (18) с предварительным вычислением величины минералогической плотности породы (δ_n) по формуле (15б)

$$N_i^V = 10K_n F_i^V = K_n \frac{\delta_n}{16,6} A_i = (1 - 0,01\Pi) \frac{\delta_n}{16,6} A_i, \quad (29)$$

где N_i^V — количество атомов элемента i в стандартном геометрическом объеме ($10\ 000 \text{ \AA}^3$) породы; F_i^V — объемно-атомная центральная элемента i , численно отвечающая количеству атомов этого элемента в стандартном объеме 1000 \AA^3 массы вещества породы; A_i — атомное количество элемента i .

Порядок расчета следующий. Прежде всего сумму массовых процентов анализа приводят к 100% (табл. 18, графы 7, 8) с помощью таблиц прил. 2 работы [87]. Затем находят атомные количества катионов и анионов (см. табл. 18, графы 9, 10) с помощью таблиц прил. 3 работы [87] или по формулам (6а) и (6б). После этого подсчитывается содержание минералов в шлифах в объемных процентах (ψ_m) с точностью до 0,5—1% (см. табл. 18, графу 4). Пористость в расчет не берется. По данным оптических исследований или согласно минеральным парагенезисам устанавливаются плотности минералов (γ_m) (см. табл. 18, графу 3) и их химические формулы (см. табл. 18, графу 2).

Вычисляется значение минералогической плотности породы путем умножения коэффициента 0,01 на сумму произведений $\gamma_m \cdot \psi_m$ (их величины приведены в табл. 18, графе 5). Умножая величину минералогической плотности породы на поправочный коэффициент на пористость (K_n) находим величину объемной

Определение числа атомов в $10\,000 \text{ \AA}^3$ по атомно-объемной системе с расчетом δ_B по количественному минеральному составу

Минерал *	Формула	Плотность мине- рала γ_m	Содержание мине- рала ψ_m , об. %	$\gamma_m \cdot \psi_m$	Компо- нован породы	% по массе		Атомно- количество		Элементы	Количество атомов элементов в $10\,000 \text{ \AA}^3$	
						реактив- ная аналиты к 100%	приме- ся	катион	анион		$10 \cdot F_i^V$	N_i^V
Гроссулар	$\text{Ca}_3 (\text{Al}_{0,9} \text{Fe}_{0,1}^{3+})_2$ $[\text{SiO}_4]_3$	3,60	2	7,20	SiO_2	36,07	36,95	615,0	1230,0	Si	138,4	128,7
Апратит	$\text{Ca}_3 \text{Fe}_2^{3+} [\text{SiO}_4]_3$	3,87	83	321,21	TiO_2	0,06	0,06	0,8	1,6	Ti	0,2	0,2
Диопсид	$\text{Ca} (\text{Mg}_{0,96} \text{Fe}_{0,04}^{2+})$ $[\text{Si}_2\text{O}_6]$	3,33	8	26,64	Al_2O_3	0,41	0,42	8,2	12,3	Al	1,8	1,7
Кальцит	CaCO_3	2,72	7	19,04	Fe_2O_3 FeO MnO MgO CaO Na_2O K_2O P_2O_5 CO_2	27,30 0,15 0,18 1,29 30,94 0,00 0,09 1,16	27,96 0,15 0,18 1,32 31,68 0,00 0,09 1,19	350,3 2,1 2,5 32,7 564,9 — — 1,2 27,04	525,7 2,1 2,5 32,7 564,9 — — 3,0 54,08	Fe^{+3} Fe^{+2} Mn Mg Ca Na K P C(CO) O_3	78,8 0,5 0,6 7,4 127,1 — — 0,3 0,1 546,5	73,3 0,4 0,5 6,8 118,2 — — 0,2 5,7 508,2
Σ	—	—	400	374,09	Σ	97,65	100,00	1604,74	2428,88	Σ	907,7	843,9
								4033,62				

Формула породы: $\text{Si}_{128,7} \text{Ti}_{0,2} \text{Al}_{1,7} \text{Fe}_{73,3}^{3+} \text{Fe}_{0,1}^{2+} \text{Mn}_{0,6} \text{Mg}_{0,8} \text{Ca}_{118,2} \text{P}_{0,2} \text{C}_{4,7} \text{O}_{508,2} \text{K}_{0,3} \text{Na}_{0,1} \text{Ca}_{1,8} \text{CO}_3 = 3,741$;

$$\delta_B = K_{\text{п}} \cdot \delta_B = 0,93 \delta_B = 3,48.$$

* Примесь кварца, гематита, апатита во поддается учету.

плотности породы (d_v); поправочный коэффициент на пористость определяется по формуле (19г).

Умножением величины минералогической плотности (δ_a) на коэффициент $\frac{1}{16.6}$ и на атомное количество каждого катиона и аниона в отдельности по формуле (29) определяются числа атомов каждого элемента в $10\ 000 \text{ \AA}^3$ породы без учета ее пористости или для случая отсутствия пор, т. е. величины $10 \cdot F_a^V$ (см. табл. 18, графу 12). Для расчета значений N_a^V (числа атомов в $10\ 000 \text{ \AA}^3$ с учетом пористости) эти величины умножаются на поправочный коэффициент на пористость K_n .

Содержание каждого элемента i в граммах в геометрическом объеме породы в 1000 см^3 (p_i) находится по формулам (23а) и (23б).

Все указанные расчеты могут быть произведены и с помощью таблиц прил. 1, исходя из величин вычисленной минералогической (δ_a) и объемной (d_v) плотностей породы и массового процентного содержания окислов и элементов породы (см. табл. 13, графы 2—8 и табл. 18, графы 7—13).

2. Расчеты с помощью переводных коэффициентов на основе данных о химическом составе минералов выполняются с помощью формул (30а), (30б), (31а), (31б) и (31в).

По формулам (30а) и (30б) на основе подсчета количественного содержания минералов в шлифах в объемных процентах (ψ_m) определяется количество атомов всех анионов в стандартном геометрическом объеме ($10\ 000 \text{ \AA}^3$) породы ($\sum N_a^V$) и в стандартном объеме массы вещества (1000 \AA^3) породы ($\sum F_a^V$):

$$\sum F_a^V = F_O^V + F_F^V + F_{Cl}^V + F_S^V; \quad (30а)$$

$$\sum N_a^V = K_n 10 \sum F_a^V = 10K_n (F_O^V + F_F^V + F_{Cl}^V + F_S^V), \quad (30б)$$

где F_O^V , F_F^V , F_{Cl}^V , F_S^V — содержания в объеме 1000 \AA^3 массы вещества породы соответственно атомов кислорода, фтора, хлора и сульфидной серы, представляющие одновременно их объемно-атомные центриды, которые для каждого из этих элементов находятся по формуле (24), если состав минералов выражен в виде химических и структурно-химических формул (см. табл. 14, графы 7—15), или по формуле (25а), если состав минералов выражен в массовом процентном содержании окислов и элементов (см. табл. 15, графы 27—41);

$K_n = (1 - 0,01 \cdot \Pi)$ — поправочный коэффициент за пористость, находится по формуле (19г) или, что менее точно, по аналогии с подобными породами, для которых этот коэффициент известен.

Содержание каждого катиона определяется по формулам:

$$F_k^V = \frac{\sum F_a^V}{\sum A_a} \cdot A_k; \quad (31а)$$

$$N_k^V = \frac{\sum N_a^V}{\sum A_a} \cdot A_k, \quad (31б)$$

если же анионная составляющая в породе представлена только кислородом, то приведенные формулы (31а) и (31б) примут вид:

$$F_k^V = \frac{F_O^V}{A_O} \cdot A_k; \quad (31в)$$

$$N_k^V = \frac{N_O^V}{A_O} \cdot A_k, \quad (31г)$$

где $\sum A_a$ — общая сумма атомных количеств всех входящих в породу анионов по результату химического анализа; A_O — атомное количество кислорода в породе; A_k — атомное количество искомого катиона k по результатам анализа породы.

Когда анионная составляющая породы представлена лишь кислородом, то содержание атомов каждого катиона может быть найдено по формуле (32а) или (32б). При этом, если состав минералов выражен в виде химических формул, то расчеты ведутся по формуле (32а). Если же состав минералов дан в массовом процентном содержании оксидов элементов, то расчеты ведутся по формуле (32б).

$$N_k^V = \frac{N_O^V}{A_O} A_k = 10 \cdot K_n F_k^V = K_n \frac{10F_O^V}{A_O} \cdot A_k =$$

$$= K_n \frac{60.24}{A_O} \left(\frac{\gamma_1 \psi_1}{M_1} n_1^O + \frac{\gamma_2 \psi_2}{M_2} n_2^O + \dots + \frac{\gamma_f \psi_f}{M_f} n_f^O \right) \cdot A_k; \quad (32a)$$

$$N_k^V = \frac{N_O^V}{A_O} A_k = 10 K_n F_k^V = K_n \frac{10F_O^V}{A_O} A_k =$$

$$= K_n \frac{60.24 \cdot 10^{-5}}{A_O} (\gamma_1 \psi_1 A_1^O + \gamma_2 \psi_2 A_2^O + \dots + \gamma_f \psi_f A_f^O) A_k, \quad (32b)$$

где $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_f$ — величина объемного процентного содержания соответственно первого, второго и т. д. вплоть до f -го минерала (пористость не учтена);

$\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_f$ — плотность соответственно первого, второго и т. д. вплоть до f -го минерала;

M_1, M_2, \dots, M_f — формульная (молекулярная) масса соответственно первого, второго и т. д. вплоть до f -го минерала;

$n_1^O, n_2^O, \dots, n_f^O$ — количество атомов кислорода в химической формуле соответственно первого, второго и т. д. вплоть до f -го минерала;

$A_1^O, A_2^O, \dots, A_f^O$ — атомное количество кислорода в составе соответственно первого, второго и т. д. вплоть до f -го минерала.

Порядок расчета по рассматриваемому методу следующий. Прежде всего сумму массовых процентов в анализе приводят к 100% (табл. 19, графы 11, 12) с помощью прил. 2 в работе [87]. Затем по формулам (6а) и (6б) или с помощью прил. 3 в книге В. А. Рудника [87] находят атомные количества катионов и анионов (см. табл. 19, графы 13, 14) с точностью до 0,1% и сумму атомных количеств всех анионов ($\sum A_a$). Подсчитывается содержание минералов в шлифах в объемных процентах (ψ_m) (см. табл. 19, графу 5) с точностью до 0,5—1%; пористость в расчет не принимается. Дальнейший расчет проводится по одному из двух вариантов

а) По данным оптических исследований или согласно минеральным парагенезисам устанавливаются и записываются химические формулы минералов (см. табл. 19, графу 2), величины их плотности и молекулярной массы (см. табл. 19, графы 3, 4). После этого определяется переходный коэффициент (см. табл. 19, графу 6) по формуле

$$60.24 \frac{\gamma_m \cdot \psi_m}{M_m}$$

для каждого минерала в отдельности. Перемножением этого коэффициента на количество n_m^a аниона a в формуле минерала m получают содержание этого аниона в $10\,000 \text{ \AA}^3$ объема массы вещества (см. табл. 19, графы 7—9).

б) Если состав минералов в соответствующих справочниках дан не в виде химических формул, а в массовых процентных содержаниях оксидов, то записываются химический состав минералов и их плотность, как это показано в табл. 15 (графы 2 и 3—14). По процентному содержанию оксидов находят атомные

Определение числа атомов в 10 000 Аз по атомно-объемной системе с расчетом переводных коэффициентов по количеству минеральному составу

Минерал *	Формула	Плотность минерала γ_m	Масса минерала M_m	Содержание минерала ϕ_m , %	$60,24 \frac{\gamma_m \phi_m}{M_m}$	Число анионов в 10 000 Аз породы			Компоненты		% по массе		Атомные количества		Элементы		Количество катионов в 10 000 Аз		
						О	F	Cl	SiO ₂	TiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	FeO	MnO	MgO	CaO		Na ₂ O	K ₂ O
Гроссуляри	$Ca_3(Al_{0,9}Fe_{0,1})_2(SiO_4)_3$	3,60	453,51	2	0,956	11,5	—	—	—	SiO ₂	36,07	36,95	615,0	1230,0	Si	139,1	129,3	139,1	129,3
Андрезит	$Ca_3Fe_2+SiO_4)_3$	3,87	508,21	87	39,910	478,9	—	—	—	TiO ₂	0,06	0,06	0,8	4,6	Ti	0,2	0,2	0,2	0,2
Дюропид	$Ca(Mg_{0,05}Fe_{0,05}^{2+})_2(Si_2O_6)CaCO_3$	3,33	218,09	8	7,361	44,2	—	—	—	Al ₂ O ₃	0,41	0,42	8,2	12,3	Al	1,8	1,7	1,8	1,7
Кальцит	$(Si_2O_6)CaCO_3$	2,72	100,09	3	4,912	14,7	—	—	—	Fe ₂ O ₃	27,30	27,96	350,3	525,7	Fe ³⁺	79,2	73,7	79,2	73,7
										FeO	0,15	0,15	2,1	2,1	Fe ²⁺	0,5	0,4	0,5	0,4
										MnO	0,18	0,18	2,5	2,5	Mn	0,6	0,5	0,6	0,5
										MgO	1,29	1,32	32,7	32,7	Mg	7,4	6,9	7,4	6,9
										CaO	30,94	31,68	564,9	564,9	Ca	127,8	118,8	127,8	118,8
										Na ₂ O	0,00	0,00	—	—	Na	—	—	—	—
										K ₂ O	0,00	0,00	—	—	K	—	—	—	—
										P ₂ O ₅	0,06	0,09	1,2	3,0	P	0,3	0,2	0,3	0,2
										CO ₂	1,16	1,19	27,04	54,08	C	6,1	5,7	6,1	5,7
										H ₂ O	0,00	0,00	—	—	O	549,4	510,8	549,4	510,8
Сумма Σ	—	—	—	100	—	549,3	—	—	—	Σ	97,65	100,00	1604,74	2428,88	Σ	912,4	848,2	912,4	848,2

Формула породы: $Si_{12,3}Ti_{0,2}Al_{1,7}Fe_{73,7}^{+3}Fe_{0,4}^{+2}Mn_{0,6}Mg_{6,9}Ca_{11,8}Na_{0,2}K_{0,2}O_{510,8}$

$$K_n = 0,93; \quad \frac{\sum F_n^V}{\sum A_n} = \frac{F_O^V}{A_O} = \frac{54,93}{2428,88} = 0,02263; \quad \frac{\sum N_n^V}{\sum A_n} = \frac{N_O^V}{A_O} = \frac{510,8}{2428,88} = 0,2103,$$

* Примесь кварца, гемматита, апатита не поддается учету.

количества анионов в каждом минерале (A_m^a) (см. табл. 15, графы 15—27) по формулам (6a) и (6б) пп с помощью прил. 3 в работе [87]. Затем подсчитывается количество атомов каждого аниона в объеме массы вещества породы в $10\,000 \text{ \AA}^3$ соответственно для каждого минерала путем перемножения атомного количества искомого аниона в минерале (A_m^a), величины плотности минерала (γ_m), его содержания в объемных процентах (ψ_m) и коэффициента $60,24 \cdot 10^{-6}$ (см. табл. 15, графу 40).

Суммированием чисел в графах 7—9 табл. 19 получим содержание каждого аниона в $10\,000 \text{ \AA}^3$ породы для случая, когда пористость отсутствует, т. е. величиной $10F_a^v$ (в рассматриваемом здесь примере имеется только один тип анионов — кислород; соответствующая ему величина $10F_a^v$ равна 549,3). Умножив эти величины $10F_a^v$ на поправочный коэффициент на пористость K_p , определяем общее содержание каждого из анионов в $10\,000 \text{ \AA}^3$ породы с учетом ее пористости, т. е. находим значения N_a^v . В этом примере для кислорода $N_O^v = 0,93 \cdot 10F_O^v = 510,8$. Поправочный коэффициент на пористость определяется по формуле (19г) пп по аналогии с величиной поправочного коэффициента пород сходного состава, пористость которых известна.

Находим общее число всех анионов $10 \sum F_a^v$ в $10\,000 \text{ \AA}^3$ (в этом примере — 549,3) и делим его на сумму атомных количеств анионов $\sum A_a$ (по табл. 19 — 2428,88), рассчитывая таким способом переводный коэффициент $\sum F_a^v / \sum A_a$. Умножив этот коэффициент на удесятеренную величину атомного количества каждого катиона, находим его содержание в $10\,000 \text{ \AA}^3$ породы без учета ее пористости, т. е. величину $10F_i^v$ для каждого катиона (см. табл. 19, графу 16). Аналогичными вычислениями с помощью переводного коэффициента ($\sum N_a^v / \sum A_a$) и атомных количеств катионов определяются их содержания в $10\,000 \text{ \AA}^3$ породы с учетом ее пористости (см. табл. 19, графу 17). В примере $\sum N_a^v = 510,8$ (число анионов кислорода, уже подсчитанное ранее).

Содержание каждого элемента i в граммах в объеме 1000 см^3 (p_i) находится по формуле (23б).

3. Расчеты с использованием теоретических составов минералов с учетом результатов их оптического исследования осуществляются с помощью таблиц прил. 4 и 5, а для минералов, отсутствующих в этих таблицах, с помощью формул (27) (табл. 20).

Расчет количества анионов в объеме $10\,000 \text{ \AA}^3$ породы может быть произведен с помощью таблиц прил. 4 и 5, исходящих из теоретического состава минералов, но учитывающих все крайние члены изоморфных рядов минералов. Общее количество атомов анионов в минералах (с учетом возможных изоморфных рядов) является величиной достаточно стабильной (ср. минералы группы гранатов, карбонатов и т. д.; см. прил. 5, графу 18), использование которой при расчетах обеспечивает большую точность, чем та, которая может быть обеспечена введением в расчетные формулы величин плотности минералов (γ_m). В этом случае по данным объемного процентного содержания минералов в породе (ψ_m) непосредственно по таблицам прил. 5 (графа 18) находится содержание анионов в объеме $10\,000 \text{ \AA}^3$ массы вещества породы соответственно содержанию каждого минерала ($0,01 \cdot N_m^a \cdot \psi_m$).

Для 160 минералов составлены таблицы, по которым согласно объемному процентному содержанию минерала находится количество атомов анионов в объеме 1000 \AA^3 породы, приходящееся на данный минерал (см. прил. 4). Эти таблицы облегчают расчет количества анионов.

Определение числа атомов в 10 000 Å³ по атомно-объемной системе с расчетом δ_n по количественно-мигральному составу

Минерал *	Формула	Содержание минерала, об. %	Количество анионов в 10 000 Å ³ породы			Компоненты	% по массе		Атомные количества		Элементы	Количество атомов в объеме 10 000 Å ³ породы	
			O	F	Cl		результат анализа	приведенные к 100%	катион	анион		10 ⁴ ·F _i ^v	N _i ^v
Гроссуляр	Ca ₃ Al ₂ [SiO ₄] ₃	2	11,64	—	—	SiO ₂	36,07	615,0	1230,0	Si	138,0	128,4	
Андрадит	Ca ₃ Fe ₂ [SiO ₄] ₃	83	455,0	—	—	TiO ₂	0,06	0,8	1,6	Ti	0,2	0,2	
Диопсид	CaMg[Si ₂ O ₆]	8	44,2	—	—	Al ₂ O ₃	0,41	8,2	12,3	Al	1,8	1,7	
Кальцит	CaCO ₃	7	34,3	—	—	Fe ₂ O ₃	27,30	350,3	525,7	Fe ³⁺	78,6	73,1	
						FeO	0,15	2,1	2,1	Fe ²⁺	0,5	0,4	
						MnO	0,18	2,5	2,5	Mn	0,6	0,5	
						MgO	1,32	32,7	32,7	Mg	7,3	6,8	
						CaO	30,94	56,49	56,49	Ca	126,8	117,9	
						Na ₂ O	0,00	—	—	Na	—	—	
						K ₂ O	0,00	—	—	K	—	—	
						P ₂ O ₅	0,09	1,2	3,0	P	0,3	0,2	
						CO ₂	1,16	27,04	54,08	C(CO ₂)	0,1	5,6	
						H ₂ O	0,00	—	—	H(OH)	—	—	
Σ	—	100	545,1	—	—	Σ	97,65	604,74	2428,88	Σ	905,2	841,7	

Формула породы: Si_{138,4} Ti_{0,2} Al_{1,7} Fe_{73,1}³⁺ Fe_{0,4}²⁺ Mn_{0,6} Mg_{6,8} Ca_{117,9} P_{0,2} C_{5,6} O_{808,9}

$$K_n = 0,93; N_n^v = 506,9; \frac{\sum F_n^v}{\sum A_n} = \frac{F^v}{A^v} = 0,02214; \frac{\sum N_n^v}{\sum A_n} = \frac{N^v}{A^v} = 0,2087.$$

* Примесь кварца, гематита, апатита не поддается учету.

Минералы переменного состава разлагаются на крайние члены изоморфного ряда, в которых содержание анионов подсчитывается самостоятельно в соответствии с процентным содержанием их в породе, а затем суммированием найденных количеств атомов, отвечающих этим крайним членам изоморфного ряда, определяется содержание атомов анионов, соответствующее процентному содержанию самого минерала переменного состава (например, альбит и анортит, гроссуляр и андрадит, диопсид и геденбергит).

Содержание атомов анионов в рассматриваемом объеме породы, связанное с минералами, не приведенными в прил. 4 и 5, можно определить с помощью формулы (27а), которая лежит в основе указанных таблиц. Дальнейший расчет производится по изложенной выше схеме, а запись осуществляется по форме табл. 20.

Рассмотренные варианты пересчета химических анализов пород исходят из одних и тех же предпосылок и обладают одной и той же точностью. Но второй и третий методы, основанные на вычислении коэффициентов, требуют значительно большей затраты времени, поэтому в большинстве случаев рекомендуется применять метод пересчета, основанный на расчете минералогической плотности породы, и использовать при этом таблицы прил. 1. Методы пересчета химических анализов пород, исходящие из знаний химических формул минералов или их химических составов, рекомендуется применять в двух случаях: 1) когда в составе породы имеются минералы, содержащие анионы, не определявшиеся химическим анализом, что позволяет устанавливать их содержание; 2) когда желательно использовать данные о химическом составе минералов, слагающих породу.

§ 4. РАСЧЕТЫ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ПОРОД ПО ДАННЫМ ОБ ИХ СУБМОДАЛЬНОМ СОСТАВЕ

Вначале вычисляется субмодалный состав породы. Определение субмодалного состава производится в соответствии с качественным минеральным составом породы путем последовательного исключения окислов.

В табл. 21 приведен пример пересчета химического анализа гранатового скарна на субмодалный состав в процентах по массе и затем в объемных процентах. Минеральный состав гранатового скарна приведен в табл. 20 (графы 1, 2). При пересчете вначале массовые процентные содержания компонентов ($P\%$), химического анализа породы приводятся к 100% (см. табл. 21, графы 2, 3) с помощью таблиц прил. 2 работы [87]. Затем расчетным путем по формулам (6в) и (6г) или с помощью прил. 3 работы [87] находятся молекулярные количества каждого компонента, приведенного в результатах анализа (см. табл. 21, графу 4). После этого выписываются теоретические формулы минералов с указанием всех элементов, изоморфно замещающих главнейшие из приведенных в результатах анализа породы. Запись формулы минерала может производиться в виде структурно-химической формулы, но для простоты дальнейших вычислений желательно приводить и формулу минерала в виде окислов. Затем выписывается молекулярное количество компонента, входящее лишь в один минерал, и соответствующее ему содержание в процентах (по массе) того же компонента в анализе породы. Так, в табл. 21 в графе 5 выписано молекулярное количество P_2O_5 , а в графе 6 — соответствующее ему содержание P_2O_5 в анализе породы. Исходя из коэффициентов при окислах в формуле минерала путем составления пропорции находится молекулярное количество одного из компо-

Расчет субмолекулярного состава скварца

Компоненты	% по массе		Молекулярные коэффициенты	Апатит $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{X}$ $\times (\text{F}, \text{Cl})$ $9\text{CaO} \cdot 3\text{P}_2\text{O}_5 \cdot \text{X}$ $\times \text{Ca} \cdot (\text{F}, \text{Cl})_2$	Кальцит $\text{Ca}[\text{CO}_3]$ $\text{CaO} \cdot \text{CO}_2$	Диопсид		Гроссулар		Апфрит		Гематит		Кварц SiO_2	
	Реальность взвешивания	приведенные к 100%				$\text{Ca}(\text{Fe}, \text{Mg})\text{X}$ $\times (\text{Si}_2\text{O}_7)$ $\times (\text{Mg}, \text{Fe})\text{OX}$ $\times 2\text{SiO}_2$		$(\text{Ca}, \text{Mn})_2\text{X}$ $\times \text{Fe}^{2+}\text{X}$ $\times (\text{Si}, \text{Ti})\text{O}_2$ $\times (\text{Ca}, \text{Mn})\text{OX}$ $\times \text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{X}$ $\times 3(\text{Si}, \text{Ti})\text{O}_2$		$(\text{Ca}, \text{Mn})_2 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{X}$ $\times (\text{Si}, \text{Ti})\text{O}_2$ $\times (\text{Ca}, \text{Mn})\text{OX}$ $\times \text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{X}$ $\times 3(\text{Si}, \text{Ti})\text{O}_2$		Fe_2O_3			
						М/к	% по массе	М/к	% по массе	М/к	% по массе	М/к	% по массе		М/к
SiO_2	36,07	36,05	0,15, 0	—	—	60,60	4,18	12,30	0,74	400,46	20,47	—	—	42,84	2,50
TiO_2	0,00	0,06	0,8	—	—	—	—	4,10	0,42	0,80	0,08	—	—	—	—
Al_2O_3	0,41	0,42	4,1	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Fe_2O_3	27,30	27,86	175,1	—	—	2,10	0,15	—	—	163,75	26,15	11,35	1,81	—	—
FeO	0,15	0,15	2,1	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
MnO	0,18	0,18	2,5	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
MgO	1,29	1,32	32,7	—	—	32,70	1,32	—	—	2,50	0,18	—	—	—	—
CaO	30,84	31,68	564,9	—	—	34,80	1,05	12,30	0,80	488,78	27,41	—	—	—	—
P_2O_5	0,09	0,09	0,8	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
CO_2	1,10	1,19	270,4	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
F, Cl	—	—	(0,20)	(0,03)	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Σ	97,65	100,00	1424,84	2,80	0,20	130,20	7,00	28,70	1,85	1148,27	83,27	11,35	1,81	42,04	2,50
P_m	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
P'_m	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Расчитанная формула минерала			$9\text{CaO} \cdot 3\text{P}_2\text{O}_5 \cdot \text{X}$ $\times ((\text{a}, \text{F}, \text{Cl})_2)$	$\text{CaO} \cdot \text{CO}_2$	$\text{CaO}(\text{Mg}, \text{Fe})\text{X}$ $\times (\text{Fe}, \text{Mg})\text{X}$ $\times 2\text{SiO}_2$	$3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{X}$ $\times 3\text{SiO}_2$	$3(\text{Ca}, \text{Mn})\text{X}$ $\times \text{Mn}, 0,00\text{Mn})\text{OX}$ $\times \text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{X}$ $\times (\text{Si}, 0,09\text{Mn})\text{X}$ $\times \text{Ti}, 0,002\text{O}_2$	Fe_2O_3	SiO_2						
Плотность минерала (расчитанная по его формуле) γ_m	3,208		—	2,724	3,435	—	—	3,500	3,864	5,302	—	—	—	3,672	—
F'_m/V_m	0,002		—	0,005	2,281	—	—	0,514	21,560	0,341	—	—	—	0,050	—
Содержание минерала, об. %	без учета пористости (K _п =1)		0,22	3,73	8,54	—	—	1,93	80,70	1,28	—	—	—	3,50	—
	с учетом пористости (K _п =0,93)		0,21	3,47	7,94	—	—	1,80	75,05	1,19	—	—	—	3,34	—

ентов минерала (CaO для апатита) и затем также путем составления простой пропорции между общим молекулярным количеством этого компонента в породе и его содержанием (в % по массе), с одной стороны, и молекулярным количеством этого компонента, приходящимся на данный минерал, с другой, устанавливается процентное содержание (по массе) этого компонента, относящееся к рассматриваемому минералу. В приведенном примере для апатита для простоты вычислений принималось, что весь кальций связан с кислородом ($10\text{CaO} : 3\text{P}_2\text{O}_5$), хотя можно было бы учесть различие в атомных массах кислорода и галлоидов и ввести соответствующую поправку в результаты определения содержания апатита (в % по массе), которая выходила бы за пределы точности расчетов, почему она и не введена. Затем суммированием полученных содержаний компонентов, приходящихся на апатит, найдено его содержание в процентах (по массе) в породе (P'_m).

Таким же образом по величине молекулярного количества CO_2 и отвечающего ему содержания CO_2 в массовых процентах находится содержание кальция (см. табл. 21, графы 7, 8). Все Fe^{2+} введено в формулу диопсида, Mn и Ti — в формулу андрадита. Соотношение между коэффициентами для Mg и Fe^{2+} в формуле диопсида, Ca и Mn, а также Si и Ti в формуле андрадита устанавливается, исходя из соотношений между молекулярными количествами или процентными содержаниями (по массе) элементов в каждой из указанных пар.

Содержание диопсида установлено, исходя из суммарного содержания FeO и MgO, гроссуляра — из содержания Al_2O_3 , андрадита — из содержания CaO, представляющего собой остаток от общего молекулярного количества, а следовательно, и массового процентного содержания CaO в результате анализа породы после вычитания из него всего молекулярного количества CaO (соответственно и массового процентного содержания), связанного с апатитом, кальцитом, диопсидом и гроссуляром. Соответствующим образом установлено содержание гематита и кварца.

Сумма процентных содержаний (по массе) минералов вместе с нераспределившимся остатком (в рассматриваемом примере отсутствует), который не должен превышать 2—3% всего минерального состава, должна быть равна 100%. Сумма молекулярных количеств по всем минералам, включая и нераспределенный остаток их, должна соответствовать сумме молекулярных количеств результата химического анализа породы (контроль результатов пересчета). Как итог записываются установленные в результате пересчета формулы минералов.

Первый вариант расчета содержания атомов в породе на основе данных о химических составах и плотностях минералов основан на использовании формул (31а), (31б), (33) и (34).

По формуле (33), выведенной из формул (6а), (6б), (15а) и (18), устанавливается содержание в геометрическом объеме $10\,000 \text{ \AA}^3$ породы каждого из входящих в нее анионов:

$$\begin{aligned}
 N_a^V &= 10K_n F_a^V = K_n \delta_a \cdot 10^3 \sum_{m=1}^I N_m^a = K_n \frac{\delta_n \cdot 10^3}{16,6} \cdot \sum_{m=1}^I \left(\frac{n_m^a}{M_m} P'_m \right) = \\
 &= 60,24 \left(\frac{P'_1}{M_1} n_1^a + \frac{P'_2}{M_2} n_2^a + \dots + \frac{P'_f}{M_f} n_f^a \right) \frac{100K_n}{\left(\frac{P'_1}{\gamma_1} + \frac{P'_2}{\gamma_2} + \dots + \frac{P'_f}{\gamma_f} \right)} K_n \quad (33)
 \end{aligned}$$

Если в породе содержится несколько анионов, то общее количество их в стандартном объеме породы ($\sum N_a^V$) определяется суммированием содержания каждого из анионов, опре-

$$\sum N_a^V = 10 \cdot K_n \sum F_a^V = 10 K_n (F_O^V + F_F^V + F_{Cl}^V + F_S^V). \quad (34)$$

После этого находится количество атомов каждого катиона по формуле (31б) в геометрическом объеме в $10\,000 \text{ \AA}^3$ (N_k^V) и по формуле (31а) в объеме массы вещества породы в 1000 \AA^3 (F_k^V):

$$F_k^V = \frac{\sum F_a^V}{\sum A_a} \cdot A_k;$$

$$N_k^V = \frac{\sum N_a^V}{\sum A_a} \cdot A_k.$$

Если анионная часть минералов представлена только кислородом, то количество каждого катиона может быть найдено по формуле (31г) в геометрическом объеме породы в $10\,000 \text{ \AA}^3$ (N_k^V) и по формуле (31в) в объеме массы вещества породы в 1000 \AA^3 (F_k^V):

$$F_k^V = \frac{F_O^V}{A_O} A_k;$$

$$N_k^V = \frac{N_O^V}{A_O} A_k.$$

В формулах (33), (34) $\sum N_a^V$, N_a^V , N_O^V , N_F^V , N_{Cl}^V , N_S^V — сумма количества атомов соответственно всех анионов, данного аниона a , кислорода, фтора, хлора, сульфидной серы в стандартном геометрическом объеме ($10\,000 \text{ \AA}^3$) породы;

$\sum F_a^V$, F_a^V , F_O^V , F_F^V , F_{Cl}^V , F_S^V — сумма количества атомов соответственно всех анионов, данного аниона a , кислорода, фтора, хлора, сульфидной серы в стандартном объеме (1000 \AA^3) массы вещества породы, т. е. объемно-атомное центральное содержание соответственно всех анионов, данного аниона a , кислорода, фтора, хлора, сульфидной серы;

K_n — поправочный коэффициент на пористость породы;

P_m , P_1 , P_2 , ..., P_f — рассчитанное процентное содержание (по массе) соответственно минерала m , первого, второго и т. д. вплоть до f -го минерала;

γ_m , γ_1 , γ_2 , ..., γ_f — плотность соответственно минерала m , первого, второго и т. д. вплоть до f -го минерала;

M_m , M_1 , M_2 , ..., M_f — формульная масса соответственно минерала m , первого, второго и т. д. вплоть до f -го минерала;

n_m^a , n_1^a , n_2^a , ..., n_f^a — количество атомов данного аниона в химической формуле соответственно минерала m , первого, второго и т. д. вплоть до f -го минерала;

$\sum A_a$ — сумма атомных количеств всех анионов в породе по результатам химического анализа;

A_O — атомное количество кислорода в породе;

A_k — атомное количество данного катиона i в породе;

δ_a — вычисленная минералогическая плотность породы {находится по формуле (15а)}.

Величина плотности каждого минерала (γ_m) находится или экспериментально, или по соответствующим справочным руководствам, согласно установленным в результате пересчета химическим формулам минералов. Когда же эти формулы близки к теоретическим, приведенным в таблицах прил. 5, плотность (γ_m) каждого минерала находится по этому прил. 5 (графа 11).

Порядок расчетов по этому способу следующий. Вначале сумма процентов окислов (по массе) приводится к 100 (см. табл. 22, графы 13, 14) с помощью таблиц прил. 2 в работе В. А. Рудника [87]. Записывается вычисленный субмодальный состав породы (см. табл. 22, графу 3) в % по массе, который установлен на основе расчетов, результаты которых приведены в табл. 21.

Определение числа атомов в стандартном объеме по атомно-объемной системе на основе субмолекулярного состава породы

Минерал	Формула	R'_m	M_m	Z_m	V_m	V_m^*	V_m'	P'_m/V_m'	Число анионов в 10 000 Å ³			Компоненты		% по массе		Атомные количества		Элементы		Количество атомов в стандартном объеме образца		
									O	F	Cl	результаты анализа	примеси в 100%	катон	анон	Si	Ti	FY	NY			
Гроссуляр	$Ca_2Al_2[SiO_4]_2$	1.85	450.47	8	1664	3.599	0.514	11.1	—	—	—	—	—	—	36.07	36.95	615.0	1230.0	—	—	13.87	120.0
Андрадит	$(Ca_{0.992}Mn_{0.008})X \times Fe_{0.3}^{2+}[(Si_{10.998}X \times Ti_{0.002})O_{12} \times Ca(Mg_{0.94}Fe_{0.06})X \times Si_2O_6]$	83.27	508.60	8	1748	3.864	21.550	43.4	—	—	—	—	—	—	0.06	0.06	0.8	1.6	—	—	0.02	0.2
Диплоид	$Ca_2(Mg_{0.99}Fe_{0.01})O_{12}$	7.60	218.47	4	437	3.335	2.281	47.2	—	—	—	—	—	—	0.41	0.42	8.2	12.3	—	—	0.18	1.7
Кальцит	$CaCO_3$	2.71	100.09	2	422	2.724	0.995	18.3	—	—	—	—	—	—	27.30	27.96	350.3	525.7	—	—	7.90	73.5
Апатит	$Ca_5(PO_4)_3(F, Cl)$	0.20	504.34	2	522	3.208	0.062	1.1	—	—	—	—	—	—	0.15	0.15	2.1	2.1	—	—	0.05	0.4
Гематит	Fe_2O_3	1.81	459.70	2	400	5.302	0.341	7.7	—	—	—	—	—	—	0.18	0.18	2.5	2.5	—	—	0.06	0.5
Кварц	SiO_2	2.56	60.09	3	112	2.672	0.959	19.2	—	—	—	—	—	—	1.29	1.32	32.7	32.7	—	—	0.74	6.9
									—	—	—	—	—	—	30.94	31.68	564.9	564.9	—	—	12.74	118.5
									—	—	—	—	—	—	0.00	0.00	—	—	—	—	—	—
									—	—	—	—	—	—	0.00	0.00	—	—	—	—	—	—
									—	—	—	—	—	—	0.09	0.09	1.2	3.0	—	—	0.03	0.2
									—	—	—	—	—	—	1.19	1.19	27.04	54.08	—	—	0.61	5.7
									—	—	—	—	—	—	0.00	0.00	—	—	—	—	54.80	509.6
Σ	—	100.00	—	—	—	—	26.702	548.0	—	0.1	—	—	—	—	97.65	100.00	1604.74	2428.88	—	—	91.00	846.2

Формула породы: $Si_{120.0}Ti_{0.2}Al_{1.7}Fe_{2.7}^{2+}Fe_{0.3}^{2+}Mn_{0.008}Mg_{0.94}Ca_{118.5}P_{0.2}Sb_{0.7}(Cl, F)_{0.1}O_{609.6}$

$K_n = 0.93$; $\delta_n = \frac{100}{26.702} = 3.75$

На основе химических формул минералов (см. табл. 22, графу 2) устанавливается по прил. 5 (графа 12) или расчетным путем с помощью прил. 2 величина формульной массы каждого минерала (M_m) (см. табл. 22, графу 4). Далее по таблицам прил. 5 для каждого минерала находится величина плотности (γ'_m), приведенная в графе 11. Если же необходимый минерал отсутствует в приложениях, то по справочникам [24, 77, 111] устанавливаются величина числа формульных единиц (z_m^0) и объем его элементарной ячейки (V_m^0) (см. табл. 22, графы 5, 6). На основании этих данных находится плотность каждого минерала (γ'_m) как частное от деления на объем элементарной ячейки (V_m^0) произведения коэффициента 1,66 на число формульных единиц (z_m^0) и на формульную массу минерала (M_m) (см. табл. 22, графу 7, а также табл. 21).

Определяются частные от деления на плотность каждого минерала величины его массового процентного содержания (P'_m/γ'_m) (см. табл. 22, графу 8, а также табл. 21), а затем их сумма. Рассчитывается величина минералогической плотности породы как частное от деления 100 на эту сумму.

Затем подсчитывается величина $10F_{am}^V$ — количество анионов в объеме $10\,000 \text{ \AA}^3$ массы вещества, связанное с отдельными минералами (см. табл. 22, графы 9—11), по равенству

$$10F_{am}^V = 60,24 \delta_v \frac{P'_m}{M_m} n_m^a, \quad (35)$$

где n_m^a — число атомов данного аниона a в формуле минерала m .

Суммированием количеств атомов каждого аниона, связанных с отдельными минералами, получаем количество каждого аниона в $10\,000 \text{ \AA}^3$ объема массы вещества породы ($10F_a^V$), т. е. для случая, когда пористость пород не принимается во внимание. Для нахождения числа анионов в $10\,000 \text{ \AA}^3$ с учетом пористости пород величины $10F_a^V$ следует умножить на коэффициент пористости K_p [см. формулы (19б), (19г)]. Так, в рассматриваемом здесь примере ($K_p = 0,93$) для кислорода $N_O^V = 548,0 \cdot 0,93 = 509,6$; для хлора $N_{Cl}^V = 0,10 \times 0,93 \approx 0,10$. Затем определяется общее содержание анионов в $10\,000 \text{ \AA}^3$ с учетом и без учета пористости пород, т. е. величины $10 \sum F_a^V$ и $\sum N_a^V$. В настоящем примере они соответственно равны 548,0 и 509,6.

Следующий этап расчетов — нахождение атомных количеств катионов и анионов, соответствующих массовым процентам химического анализа (см. табл. 22, графы 15, 16), расчетным путем по формулам (6а) и (6б) или с помощью таблиц прил. 3 в работе [87].

После этого рассчитываются два переводных коэффициента. Для этого сумму атомов всех анионов в стандартном объеме массы вещества породы ($\sum F_a^V$) делят на сумму их атомных количеств ($\sum A_a$) [см. формулы (31а) и (31в)], а сумму всех анионов в стандартном геометрическом объеме породы ($\sum N_a^V$) — на сумму их атомных количеств ($\sum A_a$) [см. формулы (31б) и (31г)].

При помощи первого коэффициента (в рассматриваемом примере он равен 0,02256) вычисляется количество атомов каждого катиона (F_k^V) в стандартном объеме массы вещества (1000 \AA^3). Для этого переводной коэффициент умножается для каждого катиона на его атомное количество A_k . Полученное таким образом число отвечает объемно-атомной интрамилле данного катиона (см. табл. 22, графу 18). При помощи второго коэффициента (для примера в табл. 22 он оказался равным 0,2098) аналогичными действиями определяют содержание катионов в геометрическом объеме породы в $10\,000 \text{ \AA}^3$ N_k^V . Эти величины приведены в графе 19 табл. 22.

Таблица 23
 Определенные числа атомов в стандартном объеме в атомно-объемной системе на основе субъядильного состава породы
 (второй вариант)

Минерал	Формула	P _m '	N _m	z _m ^o	γ _m ^o	γ _m '	P _m ^o /γ _m	Компонента	% по массе		Атомное количество		Количество атомов в стандартном объеме	
									результата анализа	приведенные к 100%	катион	анион	Pγ	Nγ
Гроссуляр	Ca ₂ Al ₂ (SiO ₄) ₂	1.85	450,47	8	1664	3,599	0,514	SiO ₂	36,07	36,95	615,0	1230,0	13,86	129,3
Анпрацит	(Ca _{0,994} Mn _{0,006}) ₂ Fe ₂ ³⁺ X	83,27	508,60	8	1748	3,864	21,550	TiO ₂	0,06	0,00	0,8	1,0	0,02	0,2
Диопсид	X[(Si _{0,998} Ti _{0,002})O ₄] ₂	7,00	218,47	4	437	3,335	2,281	Al ₂ O ₃	0,41	0,42	8,2	12,3	0,18	1,7
Кальцит	CaCO ₃	2,71	100,09	2	422	2,724	0,995	Fe ₂ O ₃	27,30	27,96	350,3	525,7	7,89	73,6
Анацит	Ca ₂ (PO ₄) ₂ (F, Cl)	0,20	504,34	2	522	3,208	0,062	FeO	0,15	0,15	2,1	2,1	0,05	0,4
Гематит	Fe ₂ O ₃	1,81	159,70	2	100	5,302	0,341	MnO	0,18	0,18	2,5	2,5	0,06	0,5
Кварц	SiO ₂	2,56	60,09	3	112	2,072	0,959	MgO	1,29	1,32	32,7	32,7	0,74	6,9
								CaO	30,94	31,68	564,9	564,9	12,73	118,8
								Na ₂ O	0,00	0,00	—	—	—	—
								K ₂ O	0,00	0,00	—	—	—	—
								P ₂ O ₅	0,09	0,09	1,2	3,0	0,03	0,2
								CO ₂	1,16	1,19	27,04	54,08	0,61	5,7
								H ₂ O	0,00	0,00	—	—	54,74	510,7
Сумма Σ	—	100,00	—	—	—	—	26,702	Σ	97,65	100,00	1004,74	2428,88	90,91	848,0

Формула породы: Si_{129,3}Ti_{0,2}Al_{1,7}Fe_{2,8}³⁺Fe_{0,4}²⁺Mn_{0,6}Mg_{6,9}Ca_{118,8}PO₂Ca_{1,7}O_{510,7}.

K_n = 0,93; δ_n = $\frac{100}{26,702} = 3,75$; d_n = 3,49.

Величина N_k^V может быть установлена также и непосредственно из значения величины F_k^V путем умножения ее на $10 \cdot K_n$ [см. формулу (17)]; для рассматриваемого примера $N_k^V = 10 \cdot 0,93 \cdot F_k^V = 9,3 \cdot F_k^V$.

Содержание любого элемента i в граммах в объеме 1000 см^3 породы (p_i) может быть определено по формулам (23а) и (23б).

Второй вариант расчета содержания атомов в породе на основании рассчитанной минералогической плотности породы осуществляется по формулам (20) и (22) с предварительным определением плотности минералов (γ_m'), слагающих породу, с помощью таблиц прил. 5 (графа 11) или, если необходимый минерал отсутствует, — расчетным путем [см. в прил. 5 формулу (8)]. Минералогическая плотность породы в этом случае определяется также расчетным путем по формуле (15а).

Порядок расчета по рассматриваемому методу следующий. Исходя из формул минералов (табл. 23, графа 2), расчет которых приведен в табл. 21, находится величина их плотностей (см. табл. 23, графу 7, а также табл. 21) с помощью прил. 5 (графа 11).

Если рассчитанные формулы минералов существенно отличаются от приведенных в прил. 5, то плотности минералов определяются расчетным путем. В этом случае согласно полученным формулам минералов определяются величины их формульной массы (M_m) (см. табл. 23, графу 4) с помощью прил. 2. Затем по таблицам прил. 5 или специальным справочникам находятся для каждого минерала число формульных единиц (z_m^0) и объем элементарной ячейки (V_m^0) (см. табл. 23, графы 5—6). На основании этих данных определяется плотность каждого минерала (γ_m') путем деления на объем элементарной ячейки (V_m^0) произведения коэффициента 1,66 на величину числа формульных единиц (z_m^0) и на формульную массу минерала (M_m) (с. табл. 23, графу 7).

После этого для каждого минерала определяется величина частного от деления процента по массе в породе на его плотность (P_m'/γ_m') (см. табл. 23, графу 8), а затем подсчитывается их сумма. Делением на полученную сумму коэффициента 100 находится величина минералогической плотности породы (δ_B), где знак «в» означает вычисленное значение величины минералогической плотности горной породы. Путем умножения величины минералогической плотности породы (δ_B) на поправочный коэффициент пористости ($K_{п}$), найденный по формуле (19г), определяется значение вычисленной объемной плотности породы (d_B).

Затем с помощью прил. 2, приведенного в работе В. А. Рудника [87], результаты химического анализа пересчитываются на 100%. Наконец, по величине вычисленной минералогической плотности породы (δ_B) и массовому процентному содержанию химических компонентов (см. табл. 23, графу 11) с помощью приложения 1 определяется количество атомов каждого элемента i в объеме массы вещества породы в 1000 \AA^3 (F_i^V). Это и будут атомно-объемные интрамилли элементов (см. табл. 23, графу 15). Аналогично по величине объемной плотности породы (d_B) и массовым процентным содержаниям химических компонентов с помощью таблиц приложения 1 рассчитывается количество атомов каждого элемента (N_i^V) в геометрическом объеме породы в $10\,000 \text{ \AA}^3$ (см. табл. 23, графу 16).

Определение количества атомов в стандартном объеме породы может быть проведено по формулам (21а) и (21б) с предварительным нахождением атомных количеств по формулам (6а) и (6б) или с помощью приложения 3, приведенного в работе В. А. Рудника [87]. Содержание любого элемента i в граммах в объеме 1000 куб. см породы (p_i) может быть найдено по формулам (23а) и (23б).

Часть третья

ФОРМУЛЬНО-ОБЪЕМНАЯ И ФОРМУЛЬНО-АТОМНАЯ НОРМАТИВНЫЕ СИСТЕМЫ ПЕРЕСЧЕТА

Обоснование и различные области использования формульно-объемной системы приведены в работах Ю. В. Козицына, В. А. Рудника и др. [34, 83, 87, 90 и др.], а формульно-атомной — в монографии В. А. Рудника [87]. В настоящем разделе рассмотрены лишь области использования указанных систем для расчета количества атомов элементов в стандартном объеме горных пород, а также для установления формульно-атомного и формульно-объемного субмодальных составов пород.

Глава I

РАСЧЕТЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФОРМУЛЬНО-ОБЪЕМНОЙ НОРМАТИВНОЙ СИСТЕМЫ

Расчеты объемно-атомного и атомно-объемного содержания числа атомов в стандартном объеме и формульно-объемного субмодального состава основаны на знании результатов химического анализа горной породы и качественного минерального состава. Кроме того, установление формульно-объемного субмодального состава может проводиться и на основе данных о величинах плотности исследуемой горной породы, что значительно повышает точность результатов пересчета [87].

§ 1. РАСЧЕТЫ КОЛИЧЕСТВА АТОМОВ В СТАНДАРТНОМ ОБЪЕМЕ ПОРОД ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ИХ ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА И ДАННЫМ О КАЧЕСТВЕННОМ МИНЕРАЛЬНОМ СОСТАВЕ

Расчет объемно-атомных и атомно-объемных содержания числа атомов в стандартном геометрическом объеме породы по указанному способу выполняется по результатам полного химического анализа породы при отсутствии сведений о ее минералогической плотности. Последняя устанавливается по нормативному составу породы, который в отличие от рассмотренных ранее методов определяется в этом варианте расчетов по формульно-объемной нормативной системе [34].

Формульно-объемная система расчета нормативного состава пород и руд — наиболее объективная система расчета минерального состава пород и руд самого различного состава, генезиса и пористости. Детальное рассмотрение этой системы дано в работе [87].

Порядок пересчета химического анализа породы по предлагаемому методу следующий. По данным результатов химического анализа породы в процентах по массе (табл. 24, графы 1, 2) рассчитываются атомные количества (A_i) каждого элемента (см. табл. 24, графу 4) по формулам (6а), (6б) или с помощью

прил. 3 [87]. Затем находят атомные проценты (F_i) элементов по величине их атомного количества (см. табл. 24, графы 3—5) согласно формуле (5) или с помощью таблиц прил. 4 [87].

Затем последовательным исключением количества атомов, входящих лишь в один минерал в данной породе (подробнее методику этого пересчета см. на с. 66), производится расчет субмодалного состава породы на основании ее качественного минерального состава (см. табл. 24, графы 6—11). При этом должны учитываться данные оптических, спектральных и химических исследований по каждому из минералов породы, что позволяет уточнять их формулы для данного конкретного случая. Расчет ведется, исходя из формульных единиц минералов, в соответствии с формулами минералов, приведенными в таблицах прил. 5 или специальных справочниках с учетом возможных изоморфных замещений. При этом минералы, представляющие средние члены изоморфных рядов, разлагаются на крайние члены этих рядов (например, для граната гроссуляр-андрадитового ряда рассчитывается в отдельности содержание гроссуляровой и андрадитовой частей).

Суммированием атомных процентов каждого элемента, входящего в данный минерал m , находится общая величина атомного процентного содержания всех элементов, входящих в этот минерал m , т. е. находится атомное процентное содержание каждого минерала m (F_m) (см. табл. 24, графы 6—11). Суммированием атомного процентного содержания каждого элемента по всем минералам (по горизонтали в табл. 24) осуществляется проверка правильности расчета (см. табл. 24, графы 6—12). Величина атомного процента каждого элемента (F_i), полученная в графе 12 путем поминерального суммирования атомных процентов (см. табл. 24, графа 6—11), должна соответствовать величине атомного процента в графе 5 или отличаться от нее не более чем на 1—2%. В этом случае расчет произведен правильно.

После этого для каждого минерала выписывается (см. прил. 5, графу 22) величина коэффициента W_{im}^I , который показывает, какая часть стандартного объема $V_{\text{const}}^n = 1000 \text{ \AA}^3$ приходится на один атом данного минерала m (см. табл. 24).

Для минералов, отсутствующих в прил. 5, коэффициент W_{im}^I может быть найден по следующей формуле, исходя из соответствующих параметров элементарной ячейки {см. формулы (1)—(7) в прил. 5} минерала и его формулы

$$W_{im}^I = \frac{Q_m}{\sum n_m^i} = \frac{0.01}{q_m} V_{\text{const}} = 0.001 \frac{V_m^0}{z_m^0 \cdot \sum n_m^i} V_{\text{const}}, \quad (36)$$

где Q_m — коэффициент изообъемности, показывающий, какую часть от величины стандартного объема массы вещества в 1000 \AA^3 составляет объем одной формульной единицы минерала m (находится в прил. 5, графа 21); $\sum n_m^i$ — число всех атомов в формульной единице минерала m (см. прил. 5, графу 13); $\frac{1}{q_m}$ — величина относительной плотности упаковки атомов в минерале m (см. прил. 5, графу 20);

$$q_m = 10 \cdot \frac{z_m^0}{V_m^0} \sum n_m^i, \quad (37)$$

где V_m^0 — объем элементарной ячейки минерала m (см. прил. 5, графу 15); z_m^0 — число формульных единиц в объеме элементарной ячейки минерала m (см. прил. 5, графу 10).

Расчет числа атомов в стандартном объеме по атомно-объемной системе с вычислением формульно-объемного и объемно-процентного суммарных составов гранитного скерна при $K_n \approx 0,93$

Компоненты	% по массе P_0	Элемента	Атомные концентры-стуса A_i	Атомный % F_i	Адаит $Ca_2(PO_4)_2(F, Cl)$	Кальцит $CaCO_3$	Двоксида-гидроксиберит $Ca(Fe, Mn)(Si_2O_6)$	Андрадит-гроссулар $AD_2 \times [(Si, Ti)O_6]_n$	Гематит Fe_2O_3	Кварц SiO_2	Σ	Количество атомов и стандартном объеме породы																																																											
												F ₁	N ₁																																																										
SiO ₂	36,07	Si	615,0	15,25	—	—	1,72	15,50	—	1,03	15,25	13,76	128,0																																																										
TiO ₂	0,06	Ti	0,8	0,02	—	—	—	0,02	—	—	0,02	0,02	0,2																																																										
Al ₂ O ₃	0,41	Al	8,2	0,20	—	—	—	0,20	—	—	0,18	0,18	1,7																																																										
FeO	27,30	Fe ⁺⁺	850,3	8,68	—	—	0,05	8,14	0,54	—	8,68	7,83	72,8																																																										
FeO	0,15	Fe ⁺⁺	2,1	0,05	—	—	—	—	—	—	0,05	0,04	0,4																																																										
MnO	0,18	Mn	2,5	0,06	—	—	—	0,06	—	—	0,06	0,05	0,5																																																										
MgO	1,29	Mg	32,7	0,81	—	—	0,81	0,00	—	—	0,81	0,73	6,4																																																										
MgO	30,84	Mg	504,9	14,00	0,05	0,07	0,80	12,42	—	—	14,00	12,64	117,6																																																										
P ₂ O ₅	0,09	P	1,2	0,03	0,03	0,67	—	—	—	—	0,67	0,63	5,0																																																										
CO ₂	1,10	C(CO ₂)	27,04	0,67	0,01	0,67	—	—	—	—	0,67	0,63	5,0																																																										
(F, Cl)	—	F(Cl)	—	—	0,12	2,01	5,76	50,00	0,81	2,10	60,20	0,01	0,1																																																										
Σ	97,65		4033,61	100,00	0,21	3,35	8,60	83,34	1,35	3,13	99,98	90,22	830,3																																																										
Σ			F_m	0,21	0,0125V _C	3,35	8,60	83,34	1,35	3,13	0,008	0,0125V _C	—																																																										
															W _m	0,0025V _C	0,041V _C	0,0108V _C	0,093V _C	0,0109V _C	0,0135V _C	1,1086V _C																																																	
																							V _m	0,19	7,70	7,70	75,24	2,84	80,25																																										
																														F _V	0,23	8,39	8,39	82,90	3,50	100,00																																			
																																					$\Sigma N \psi = \psi_m$	0,18	7,21	7,21	69,01	2,04	83,39																												
																																												0,1 · N _m	0,21	7,80	7,80	77,11	3,81	93,00																					
																																																			$\Sigma \psi_n = \psi_{m \Pi}$	0,011A _p	0,60C _c	0,78P _m	0,24H _m	0,95Q															
																																																										ΣV	0,053Hed+0,73Di	0,72P _m	0,075Gros+3,70Andr	0,22H _m									
																																																																	ΣV _Π	0,014A _p	0,56C _c	0,05Hed+0,67Di	0,06Gros+3,44Andr		

Затем определяется величина объема (в частях от величины стандартного объема $V_{\text{const}} = 1000 \text{ \AA}^3$ породы), которую занимает каждый минерал m породы (V'_m) путем умножения коэффициента W_{im}^I или $0,01 V_{\text{const}}/q_m$ на величину атомного процента каждого минерала породы (F_m), предполагая, что один атомный процент соответствует одному атому (см. табл. 24):

$$V'_m = W_{im}^I F_m = \frac{Q_m}{\sum n_m^I} F_m = 0,01 \frac{F_m}{q_m} V_{\text{const}}. \quad (38)$$

Сложившем величии V'_m каждого минерала получаем объем в частях от стандартного объема массы вещества $V_{\text{const}} = 1000 \text{ \AA}^3$, занимаемый минералами породы ($\sum V'_m$), если 100 атомных процентов соответствуют 100 атомам (см. табл. 24, графу 12). Но так как мы исходим из величины стандартного объема массы вещества породы ($V_{\text{const}} = 1000 \text{ \AA}^3$), то для получения величин истинного абсолютного объема каждого минерала m (V_m) в породе, объемно-атомного и прамильного содержания минерала m (F_m^V), его объемного процентного (ψ_m) и формульно-объемного (\mathcal{M}_V) содержаний в стандартном объеме массы вещества породы p необходимо ввести поправочный коэффициент за отличие стандартного объема породы (V_{const}) от вычисленного ($\sum V'_m$)

$$K_V = \frac{V_{\text{const}}}{\sum V'_m}. \quad (39)$$

Для рассматриваемого примера (см. табл. 24)

$$K_V = \frac{V_{\text{const}}}{\sum V'_m} = \frac{V_{\text{const}}}{1,108 V_{\text{const}}} = \frac{1}{1,108} = 0,9025.$$

Затем находится количество атомов каждого элемента i в стандартном объеме массы вещества породы (F_i^V) путем перемножения величины атомного процента каждого элемента i (F_i) на коэффициент K_V (см. табл. 24, графу 13) и количество атомов в стандартном геометрическом объеме породы (N_i^V) умножением величины атомного процента каждого элемента i (F_i) на коэффициент $10K_V$ и поправочный коэффициент на пористость K_n (19г) по формулам (см. табл. 24, графы 13 и 14).

$$F_i^V = K_V F_i, \quad (40a)$$

$$N_i^V = 10K_n F_i^V = 10K_n K_V F_i. \quad (40b)$$

Точность расчета по предлагаемой системе достаточно высокая, что хорошо устанавливается при сравнении таблиц 24 (графы 13, 14) и 13 (графы 7—8), а также 24 (графы 6—11) и 21 (графы 5—18).

На основании предлагаемой методики может быть осуществлено определение формульно-объемного субмодального состава породы (\mathcal{M}_V), так же как и ее формульно-атомного (\mathcal{M}_m), формульно-массового (\mathcal{M}_p) и объемно-процентного (\mathcal{M}_ψ) субмодальных составов. Но поскольку расчет указанных субмодальных составов осуществляется исходя из значений установленных для каждого минерального компонента величин F_m^V и $0,1 \cdot N_m^V$ (см. табл. 24), которые могут быть определены в равной степени и на основании данных о плотности горной породы (табл. 25), то методика расчета субмодальных составов излагается в следующем параграфе.

Пересчет химического анализа гранатогеного скерита на формульно-объемный субмолекулярный состав
($d_V = 3,50$; $\delta = 3,83$; $\Pi = 7,1\%$; $K_n = 0,33$; P_m — широкое моноклинный)

Компонент	P, % по методу		Элемент	0,1 N · 10 ³	Минералы					Σ	
	результат	приведенные к 100%			Ca ₃ (PO ₄) ₂ (F, Cl)	Cc Ca[CO ₃]	Di-Hed Ca(Fe, Mg)(Si ₂ O ₇)	Andr-Gros (Ca, Mn) ₂ (Fe ²⁺ , Al) ₂ X × [(Si, Ti)O ₄] ₂	Hm Fe ₂ O ₃		O ₂ SiO ₂
SiO ₂	36,07	38,95	Si	13,14	—	—	1,49	10,74	—	0,01	13,14
TiO ₂	0,00	0,00	Ti	0,02	—	—	—	0,02	—	—	0,02
Al ₂ O ₃	0,41	0,42	Al	0,18	—	—	—	0,18	—	—	0,18
Fe ₂ O ₃	27,30	27,90	Fe ⁺⁺	7,68	—	—	—	7,00	—	0,68	7,68
MnO	0,15	0,15	Fe ⁺⁺	0,04	—	—	0,01	—	—	—	0,04
MgO	0,18	0,18	Mn	0,05	—	—	—	0,05	—	—	0,05
CaO	1,20	1,32	Ni ²⁺	0,70	—	—	0,70	—	—	—	0,70
CrO	30,04	31,68	Cr	12,07	0,04	—	0,74	10,71	—	—	12,07
P ₂ O ₅	0,00	0,00	P	0,02	—	—	—	—	—	—	0,02
CO ₂	1,18	1,10	C	0,58	—	—	—	—	—	—	0,58
			(F, Cl)	51,88	0,01	—	—	—	—	—	0,01
			O	—	0,10	—	4,48	43,03	—	0,73	43,87
Σ	97,65	100,00		86,16	0,17	2,89	7,43	71,73	1,21	2,73	86,16
				0,1 N _{Vm}	0,17	2,89	7,43	71,73	1,21	2,73	86,16
			100 W _{Vm} = 1/q _m		1,250	3,220	1,087	1,999	1,000	1,250	
			Σ W _{φm} = ψ _m n		0,21	3,53	8,08	78,83	1,21	3,41	93,27
			Σ V _V n		0,008	0,58	0,74	3,60	0,24	0,91	
			F _V = 0,1 $\frac{N_{Vm}}{K_{\Pi}}$		Ca ₃ (PO ₄) ₂ (F, Cl)	Ca[CO ₃]	Ca(Fe ²⁺ 0,74 Ni ²⁺ 0,04 / Mg ²⁺ 0,04) (Si ₂ O ₇)	(Ca _{0,995} Mn _{0,005}) ₂ X × (Fe _{0,08} Al _{0,02}) ₂ [(Si _{0,999} Ti _{0,001})O ₄] ₂	Fe ₂ O ₃	SiO ₂	
			Σ W _φ = ψ _m ' = $\frac{\psi_{m \Pi}}{K_{\Pi}}$		0,18	3,11	7,90	77,13	1,30	2,94	92,65
			Σ V _V		0,22	3,80	8,60	84,55	1,30	3,07	102,23
					0,011 Δ _p	0,02 Cc	0,80 P _m 0,04 Hed + 0,76 Di	0,076 Gros + 3,52 Andr	0,26 Hm	0,08 Q	

§ 2. РАСЧЕТЫ СУБМОДАЛЬНЫХ СОСТАВОВ ПОРОД ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ИХ ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА И ДАННЫМ О ПЛОТНОСТИ И КАЧЕСТВЕННОМ МИНЕРАЛЬНОМ СОСТАВЕ

Для целей познания закономерностей процессов метасоматического пороодообразования особое значение имеет установление субмодального минерального состава сравниваемых горных пород из расчета на стандартный геометрический объем породы в $10\,000 \text{ \AA}^3$ с учетом ее реальной общей пористости. Для целей же сравнения химизма и минерального состава пород различного состава, генезиса и различных уровней земной коры главнейшая роль принадлежит расчету субмодального минерального состава в стандартном объеме массы вещества пород в 1000 \AA^3 , т. е. без учета их пористости. В связи с этим в первом случае определение «субмодального состава с учетом пористости» производится, исходя из величины объемной плотности породы, а во втором случае для установления «субмодального состава без учета пористости» используется величина минералогической плотности породы (δ). Так как величины минералогической и объемной плотностей пород взаимно связаны и обусловлены ($d_v = K_p \cdot \delta$) вводом поправочного коэффициента на общую пористость ($K_p = 1 - 0,01 \Pi$), то может быть установлена и прямая функциональная зависимость между указанными субмодальными составами. Если известен качественный минеральный состав горной породы, то по данным объемных плотностей (d_v) находится величина количества атомов каждого элемента i в стандартном геометрическом объеме породы в $10\,000 \text{ \AA}^3$ N_i^V (см. табл. 25), а по данным минералогических плотностей (δ) определяется величина количества атомов каждого элемента i в стандартном объеме массы вещества породы в 1000 \AA^3 (F_i^V) (табл. 26). Метод расчета величин N_i^V и F_i^V , исходя из различных данных, рассмотрен ранее (с. 74—77).

Пересчет полученных величин содержания атомов элементов в стандартном объеме породы (N_i^V или F_i^V) на субмодальный минеральный состав наиболее рационально производить путем последовательного исключения количества атомов, входящих лишь в один минерал данной породы, на основе знания ее качественного минерального состава (см. табл. 25—26).

Расчет ведется, исходя из формульных единиц минералов, в соответствии с их теоретическими формулами (см. прил. 5) или формулами реальных минералов и с учетом возможных изоморфных замещений. При этом минералы, представляющие средние члены изоморфных рядов, разлагаются на крайние члены этих рядов (например, для граната гроссуляр-андрадитового ряда рассчитывается в отдельности содержание гроссуляровой и андрадитовой частей). Суммированием количеств атомов каждого элемента, приходящихся на данный минерал в общем стандартном объеме породы, находится общее количество атомов, приходящееся на этот минерал: величины $0,1 \cdot N_m^V$ для стандартного геометрического объема породы с учетом ее пористости (см. табл. 25) или F_m^V для стандартного объема массы вещества породы без учета ее пористости (см. табл. 26). Таким образом, приходим к тем же результатам, которые получены и при расчетах, исходя из значения атомного процентного содержания элементов в породе (F_i) и величины W_{im}^I для каждого составляющего ее минерала (ср. F_m^V в табл. 24 с F_m^V в табл. 25 и $0,1 \cdot N_m^V$ в этих же таблицах). Так как в примере табл. 26 $K_p = 0,99$, то $0,1 N_m^V \approx F_m^V$ и, следовательно, порядок расчета идентичен как для варианта, приведенного в табл. 25, так и для варианта, приведенного в табл. 26.

$$N_m^V = 10 F_m^V K_p.$$

(41)

Перечет химического анализа шратора на формульно-объемный субмолекулярный состав
($d_V = 2.8\%$; $H = 1.1\%$; $K_n = 0.99$; $Carb$ — карбиаты, C_i — кокс)

Компонент	P_i^0 , % по массе		Элементы	F_V^0, IN^0	Минералы					Σ
	результат анализа	принесенные к 100%			$Ca_3[PO_4]_2(F, Cl)$	$C_6[CO_3]$	P_m $CaMg[Si_2O_6]$	$Andr = Gros$ $Ca_2(Fe^{++}, Al)_2X$ $X[Si, Ti]O_4$	$Carb$	
SiO_2	0.77	0.77	Si	0.22	—	0.12	0.10	—	0.22	
TiO_2	0.03	0.03	Ti	0.01	—	—	0.01	—	0.01	
Al_2O_3	0.17	0.17	Al	0.06	—	—	0.06	—	0.06	
Fe_2O_3	0.06	0.06	Fe^{2+}	0.01	—	—	0.01	—	0.01	
FeO	0.02	0.02	Fe^{++}	0.01	—	—	—	0.01	0.01	
MnO	0.05	0.05	Mn	0.01	—	—	—	0.01	0.01	
MgO	0.58	0.58	Mg	0.24	—	0.06	—	—	0.24	
CaO	55.20	55.06	Ca	16.73	0.005	0.008	0.11	0.20	16.727 (+0.003) ост.	
P_2O_5	0.02	0.02	P	0.003	0.003	—	—	—	0.003	
CO_2	43.37	43.28	C	16.754	—	—	—	0.40	16.752 0.001	
Σ	100.25	100.00		51.057	0.012	0.36	0.42	1.20	51.042 (+0.015) ост.	
				85.104	0.021	0.64	0.71	2.00	85.085	
				$F_m^0 \approx 0,1N_m^0$	0.02	0.60	0.71	2.00	85,08 (+0,03) остат.	
				$100W_m^0 = 1/g_m$	1,25	1,087	1,042	1,000	103,33	
				$W_m^0 \approx W_m^0$ $\approx W_m^0$	0.02	0.05	0.73	2.20	103,33	
				$W_m^0 \approx W_m^0$	0.001 0.001Ap 0.001Ap	0.001 CaMg[Si ₂ O ₆] 0.06Di	0.037 Ca ₂ (Fe _{0.99} Al _{0.70}) ₂ X X[(Si _{0.93} Ti _{0.07})O ₄] ₂ 0.037Gr 0.03Gros+0.007Andr	0.20 (Mn _{0.03} Mg _{0.01} Fe _{0.08})X XCa[CO ₃] ₂ 0.20Coc 0.182Dot+0.012Ank+ +0.006Cl		

Суммированием содержащий атомов каждого элемента i по всем минералам осуществляется первая проверка правильности расчета. Количество атомов каждого элемента i , полученное путем поминерального суммирования ($0,1N_m^V$ или F_m^V), должно соответствовать исходной величине содержания атомов ($0,1N_i^V$ или F_i^V) или отличаться от нее не более чем на 1—2%. В этом случае расчет в первом приближении произведен правильно. Так, для примера в табл. 24 значения $\sum F_i^V$ и $\sum F_m^V$ составляют соответственно 90,22 и 90,25 в табл. 25 — $0,1\sum N_i^V$ и $0,1\sum N_m^V$ соответственно 86,16 и 86,16, а эти же величины в табл. 26 — 85,10 и 85,08. Это свидетельствует о правильности произведенных пересчетов.

Затем находится величина содержания каждого минерала в объемных процентах ($\psi_{m\pi}'$ и $\psi_{m\pi}$). При этом, если расчеты основаны на использовании величины N_i^V , исходя из стандартного геометрического объема породы в $10\,000 \text{ \AA}^3$, то определяется содержание минерального состава породы в объемных процентах с учетом ее пористости ($\psi_{m\pi}'$), т. е. устанавливается объемно-процентный субмодальный состав породы с учетом пористости ($\mathfrak{M}'_{\psi\pi}$; см. табл. 25 и 26).

$$\mathfrak{M}'_{\psi\pi} = \psi'_{m\pi} = \frac{0,1N_i^V}{q_m} = 0,1N_i^V \frac{1}{q_m} \quad (42a)$$

Если же расчеты основаны на использовании величины F_i^V , исходя из стандартного объема массы вещества в 1000 \AA^3 , то определяется содержание минерального состава породы в объемных процентах без учета ее пористости (ψ_m'), т. е. устанавливается объемно-процентный субмодальный состав породы без учета ее пористости (\mathfrak{M}'_{ψ} ; см. табл. 24 и 26).

$$\mathfrak{M}'_{\psi} = \psi'_m = \frac{F_m^V}{q_m} = F_m^V \frac{1}{q_m}, \quad (42b)$$

где $1/q_m$ — величина постоянная для каждой формульной единицы минерала, называемая коэффициентом относительной плотности упаковки атомов в минерале m и показывающая величину 0,1 стандартного объема массы вещества минерала m в 1000 \AA^3 , приходящуюся на каждый атом в этом минерале. Значение коэффициента $1/q_m$ для большого числа минералов приведено в прил. 5 (графа 20), а для отсутствующих минералов может быть найдено по формуле (37);

q_m — коэффициент, показывающий отношение общего количества атомов в данном минерале к таковому в условном идеальном минерале, в котором на 100 атомов приходится объем в 1000 \AA^3 массы вещества этого минерала. Значение коэффициента q_m может быть найдено в прил. 5 (графа 19), а для отсутствующих в нем минералов — по формуле (37) {см. с. 75}.

Суммированием объемных процентных содержащий каждого минерала ($\psi'_{m\pi}$) от первого до f -го, когда за исходные данные брались значения N_i^V , получается величина $\sum_{m=1}^f \psi'_{m\pi} = (100 - \Pi)\%$ для случая пористых пород, где Π —

общая пористость в объемных %, или $\sum_{m=1}^f \psi'_{m\pi} = 100\%$ для случая отсутствия в породе пористости. Если $\Pi = 0$ или $\Pi < 2\%$, то $\psi'_{m\pi}$ можно принять равным ψ_m' , т. е. $\psi'_{m\pi} \approx \psi_m'$.

Когда расчеты ведутся на стандартный объем массы вещества в 1000 \AA^3 , т. е. за исходные данные берутся значения F_i^V , то суммирование объемных

Главнейшие характеристики норма

Символ минерала	Название минерала	Формула минерального компонента	Кристалло	
			V_m^N	W_{im}^I
A	Ангидрит	$Ca[SO_4]$	76	0,0127
Ab	Альбит	$Na[AlSi_3O_8]$	166	0,0128
Ac	Акцит (эпирит)	$NaFe^{3+}[Si_2O_6]$	107	0,0107
KAc	К-акцит	$KFe^{3+}[Si_2O_6]$	107?	0,0107?
Ak	Акерманит	$Ca_2Mg[Si_2O_7]$	154	0,0128
Fe Ak	Fe-акерманит	$Ca_2Fe^{2+}[Si_2O_7]$	—	—
Akt	Актинолит	$Ca_2Mg_6[Si_8O_{22}](OH)_2$	457	0,0111
Fe Akt	Fe-актинолит	$Ca_2Fe_6^{2+}[Si_8O_{22}](OH)_2$	457	0,0111
Alm	Альмандин	$Fe_3^{2+}Al_2[Si_3O_{12}]$	191	0,0096
An	Анортит	$Ca[Al_2Si_2O_8]$	167	0,0129
Anc	Анальцит	$Na[AlSi_2O_6] \cdot H_2O$	161	0,0124
And	Андалузит	Al_2SiO_5	86	0,0108
Andr	Андрадит	$Ca_3Fe_3^{2+}[Si_3O_{12}]$	219	0,0109
Ann	Аннит (Fe-биотит)	$KFe_3^{2+}[AlSi_3O_{10}](OH)_2$	246	0,0112
Ant	Антигорит	$Mg_3[Si_2O_6](OH)_4$	178	0,0099
Fe Ant	Fe-антигорит	$Fe_3[Si_2O_6](OH)_4$	178?	0,0099
Anth ₁	Аптофиллит-1	$Mg_7[Si_8O_{22}](OH)_4$	431?	0,0105?
Anth ₂	Аптофиллит-2	$Mg_{3,5}Fe_2^{2+}[Si_6O_{22}](OH)_2$	431?	0,0105?
Ap	Апатит	$Ca_5[PO_4]_3F$	260	0,0124
Astr	Астрофиллит	$(K, Na)_3(Fe, Mn)_7Ti_2[Si_4O_{12}]_2 \cdot (O, OH, F)_7$	—	—
At	Амезит	$Mg_2Al[AlSiO_5](OH)_4$	171	0,0095
Fe At	Fe-амезит	$Fe_2Al[AlSiO_5](OH)_4$	171?	0,0095?
Bi	Биотит	$KMg_3[AlSi_3O_{10}](OH)_2$	245	0,0111
Mg Bi	Mg-биотит (флогопит)	$KMg_3[AlSi_3O_{10}](OH)_2$	248	0,0113
Fe Bi	Fe-биотит (анцит)	$KFe_3^{2+}[AlSi_3O_{10}](OH)_2$	246	0,0112
Bk	Баркевикит	$Na_2CaMg_4[Al_2Si_2O_{22}](OH)_2$	466	0,0111
Bru	Брусит	$Mg[OH]_2$	41	0,0081
Cal*	Кальцийалюминат	$CaAl_2O_4$	—	—
Canc	Канкринит	$Na_6Ca_2[Al_6Si_6O_{24}](C_2O_6) \cdot H_2O$	700	0,0135
Cc	Кальцит	$Ca[CO_3]$	61	0,0122
Cm	Хромит	$Fe^{2+}[Cr_2O_4]$	74	0,0105
Co	Корунд-α	Al_2O_3	42	0,0085
Cord	Кордиерит	$Mg_2Al_3[AlSi_5O_{16}]$	390	0,0134
Fe Cord	Fe-кордиерит	$Fe_2^{2+}Al_4Si_5O_{16}$	385?	0,0132?
Ca	Ларнит-β (кальцийортоосиликат)	$Ca_2[SiO_4]$	86	0,0122
Cr*	Кальцийфосфат	$Ca_3P_2O_8$	—	—
Di	Диопсид	$CaMg[Si_2O_6]$	110	0,0110
Ed	Эденит	$NaCa_2Mg_5[Al_1Si_7O_{22}](OH)_2$	456	0,0111
En	Энстатит	$Mg[SiO_3]$	52	0,0104
Fa	Фаялит	$Fe_2^{2+}[SiO_4]$	77	0,0110
Fas	Фассант	$CaAl[AlSiO_6]$	109*	0,0109?
Fo	Форстерит	$Mg_2[SiO_4]$	73	0,0104

* Символы нормативных минералов, набранные полужирным прямым шрифтом, соответствуют реально существующим минералам. Квадратики в графах 9–14 указывают минеральные компоненты компонентов, прямые крестики — типоморфные минеральные компоненты. К — катанорма, М — мезонор

химические параметры			Присутствие в нормах					
Σn_m^i	$P_m^i \cdot 10^{22}$	$M_m \cdot 10^{22}$	Типоморфные			Могут быть		
			К	М	Э	К	М	Э
6	22,690	136,14				×□	×□	×□
13	20,17	262,21				×□	×□	×□
10	23,401	231,01				×□	×□	×
10	24,711	247,11				×□		
12	22,720	272,64						
12	25,347	304,17	+					
41	21,738	891,247	+					
41	23,659	970,02					×□	×
20	24,889	497,78					×	×□
13	21,40	278,21				×	×	
13	16,935	220,16				×□	×□	
8	20,256	162,05	+	+□				
20	25,408	508,16					×	?
22	23,266	511,85	+					
18	15,395	277,11						
18	20,651	371,71						
41	19,044	780,79					?	×
41	21,736	891,16					?	×
21	24,015	504,32				×	×□	×□
18	15,485	278,70					×	?
18	18,987	341,77						
22	34,072	475,45				×	×□	
22	18,965	417,24	+					
22	23,266	511,85	+					
42	19,521	819,87		+□				
5	11,664	58,32			+			
55	19,464	1070,51				×		×
5	20,018	100,09				×□	×□	×□
7	31,977	223,84				×□	×□	×□
5	20,392	101,96				×□	×□	?
29	20,170	584,94				×□	?	
29	22,345	648,01				×□	×□	
7	24,606	172,24	+□					
10	21,656	216,56				×	×□	
42	19,863	834,23		+□				
5	20,08	100,40	+□					
7	29,111	203,76				×□	×□	
10	21,812	218,12				×	×	
7	20,101	140,69				×□	×□	

реальным соединениям, курсивным — остальным нормативным минералам. Символы со звездочками — ре- стандартных норм, косые крестики — возможность наличия в нормах соответствующих минеральных ма, Э — эпинорма. $Mg' = Mg + Fe^{2+} + Mn$.

Символ минерала	Название минерала	Формула минерального компонента	Кристалло	
			У _т	W _т
1	2	3	4	5
Flug	Флюголит (Mg-биотит)	KMg ₃ [AlSi ₃ O ₁₀](OH) ₂	248	0,0113
Ff	Флюорит	CaF ₂	41	0,0136
Fks	Кальциферриксинит	KFe ³⁺ SiO ₃		
Fns	Натрийферриксинит	NaFe ³⁺ SiO ₃		
Fg*	Ферриксинит	Fe ³⁺ SiO ₃	150	0,0125
Ge	Гельцит	Ca ₂ Al[AlSiO ₇]	150 ²	0,0125 ²
NaGe	Нагельцит	Ca ₂ Fe ³⁺ [AlSiO ₇]	150 ²	0,0125 ²
NaGc	Нагельцит	NaCaAl[Si ₂ O ₇]	150 ²	0,0125 ²
Glp/h	Гляукофан	Na ₂ Mg ₂ Al ₂ [Si ₂ O ₆](OH) ₂	442	0,0108
Gram	Грамацит	Ca ₂ (Mg ²⁺ , Fe ³⁺) ₂ [Si ₂ O ₆](OH) ₂	452	0,0110
Gros	Гроссуляр	Ca ₃ Al ₂ [Si ₂ O ₆] ₁₋₂	208	0,0104
Ha	Гацит	NaCl	45	0,0224
Hau	Хауит	Na ₂ Ca ₂ [Al ₂ Si ₆ O ₂₄](S ₂ O ₃)	759	0,0141
Hed	Геденбергит	CaFe ²⁺ [Si ₂ O ₆]	113	0,0113
Ho	Роговая обманка обыкновенная	Ca ₂ Mg ²⁺ Al[AlSi ₃ O ₁₀](OH) ₂	456	0,0111
Im	Имагит-с	Fe ²⁺ O ₃	50	0,0101
Ilz	Ильцит	Fe ²⁺ [Al ₂ O ₄]	67	0,0096
Ily	Ильцит	Fe[SiO ₃]	53	0,0106
Id	Идцит	NaAl[Si ₂ O ₆]	102	0,0102
Ilm	Ильменит	Fe ²⁺ [TiO ₃]	53	0,0106
Ist	Истцит	K ₂ Mg ₂ Al[Al ₂ Si ₂ O ₁₀](OH) ₄	496(7)	0,0113(7)
Kaol	Каолинит	Al ₂ [Si ₂ O ₅](OH) ₄	165	0,0049
ki	Кинцит	Ca ₂ Si ₂ O ₇	72	0,0090
Kl	Клинхоптор	Mg ₂ Al[AlSi ₂ O ₁₀](OH) ₂	340(7)	0,0094(7)
Kp	Калифолит (К-вертин)	K[AlSiO ₄]	101	0,0144
Ks*	Каликсит	K ₂ SiO ₄	451	0,0113
Kum	Кульдиптонит	Mg ₂ Fe ²⁺ [Si ₃ O ₁₀](OH) ₂	147	0,0147
Lc	Лейцит	K[AlSi ₃ O ₈]	490	0,0116
Lep	Лепидолит	K ₂ Li ₂ Al ₂ [Al ₂ Si ₂ O ₁₀](OH) ₂ F ₂	1109	0,0135
Ma ₁	Магнетит	Na ₈ [Al ₁₂ Si ₁₀ O ₄₈](Cl ₂) ₂	1129	0,0134
Ma ₂	Магнетит-маршалит	Na ₈ [Al ₁₂ Si ₁₀ O ₄₈](CO ₃) ₂		
Ma ₃	Магнетит-маршалит	Na ₈ [Al ₁₂ Si ₁₀ O ₄₈](SO ₄) ₂	1149	0,0135
Mar _g	Маргарит	Ca ₂ Al ₂ [Al ₂ Si ₂ O ₁₀](OH) ₄	444	0,0106
Me ₁	Мейонит	Ca ₈ [Al ₁₂ Si ₁₀ O ₄₈](OH) ₄	1109	0,0132
Me ₂	Карбонат-мейонит	Ca ₈ [Al ₁₂ Si ₁₀ O ₄₈](Cl ₂) ₂	1129	0,0128
Me ₃	Сульфат-мейонит	Ca ₈ [Al ₁₂ Si ₁₀ O ₄₈](S ₂ O ₈) ₂	1149	0,0128
Mgs	Матсцит	Mg[CO ₃]	46	0,0092
Mont	Монтчетсит	CaMg[SiO ₄]	85	0,0121
Ms ₁	Мусковит-1	K ₂ Al ₂ [Al ₂ Si ₂ O ₁₀](OH) ₄	469	0,0112
Ms ₂	Мусковит-2 (фенит)	K ₂ MgAl ₂ [AlSi ₂ O ₁₀](OH) ₄	469 ²	0,0112 ²
Mf	Марицит	Fe ³⁺ Fe ³⁺ O ₄	74	0,0106
Nc*	Накарбонат	Na ₂ [CO ₃]		

Σ n _m	химические параметры			Присутствие в нормах					
	p _m · 10 ¹⁰	M _m · 10 ¹⁰	K	Типоформы			Могут быть		
				K	M	3	K	M	3
6	7	8	9	10	11	12	13	14	
22	18,965	417,24	+						
3	26,027	78,08				×	×	×	
12	22,851	274,21	+						
12	25,254	303,05	+						
12	21,518	258,21	+						
41	20,003	844,72							
41	21,738	891,26							
20	22,523	450,46							
2	29,220	58,44							
54	20,826	1124,59							
10	24,810	238,10							
41	19,853	813,96							
5	31,938	159,69							
7	24,830	173,81							
5	26,386	131,93							
10	20,214	202,13							
5	30,35	151,75							
44	18,966(7)	826,05							
17	15,186	258,16							
8	20,256	162,05							
36	15,440	555,83							
7	22,596	158,17							
41	20,584	843,94							
10	21,826	218,26							
42	18,915	794,44							
82	20,612	1690,15							
84	19,991	1679,26							
85	20,180	1715,31							
42	18,962	796,39							
84	22,514	1891,18							
88	21,243	1869,40							
90	21,572	1941,50							
5	16,864	84,32							
7	16,864	456,46							
44	22,354	786,58							
7	18,104	832,76							
44	19,154	832,76							
7	33,077	231,54							
6	17,665	105,99							

Символ минерала	Название минерала	Формула минерального компонента	Кристалл	
			V_m^M	W_{im}^I
Ne	Нефелин	$Na[AlSiO_4]$	91	0,0130
Nos	Нозеан	$Na_8[Al_4Si_4O_{24}](SO_4)$	741	0,0151
Ns*	Натрийметасиликат	Na_2SiO_3		
Omph	Омфацин	$NaCaMg'Al[Si_2O_6]_2$	214	0,0107
Or	Кальевый полевошпат (ортотлаз, адуляр)	$K[AlSi_3O_8]$	184	0,0141
Ot	Оттрепит			
Mg Ot	Mg-оттрепит	$MgAl_2[SiO_4]O(OH)_2$	58	0,0045
Fe Ot	Fe-оттрепит	$Fe^{2+}Al_2[SiO_4]O(OH)_2$	58	0,0045
Pf	Перовскит	$Ca[TiO_3]$	56	0,0112
Pg	Парагонит	$Na_2Al_4[Al_2Si_6O_{22}](OH)_4$	431	0,0103
Pi	Пистацит (конечный член)	$Ca_2(Al, Fe)_3[SiO_4][Si_2O_7]O(OH)$	227	0,0103?
Pph	Пирофиллит	$Al_2[Si_4O_{10}](OH)_2$	211	0,0053
Pr	Пярлит	FeS_2	40	0,0132
Pyp	Пироп	$Mg_3Al_2[Si_3O_{12}]$	192	0,0096
Q	Кварц	SiO_2	38	0,0125
Rb ₁	Рибекит-1	$Na_3Fe_3^{2+}Fe^{2+}[Si_8O_{22}](OH)_2$	453	0,0111
Rb ₂	Рибекит-2 (арфведсопит)	$Na_3Fe_2^{2+}Fe^{3+}[Si_8O_{22}](OH)_2$	453	0,0111
Rb ₃	Рибекит-3	$Na_4(Mg, Fe)_2(Fe, Al)_2[Si_8O_{22}](OH)_2$	453	0,0109
Ru	Рутил	TiO_2	31	0,0104
Sid	Сидерит	$Fe[CO_3]$	49	0,0098
Sill ₁	Силлиманит	$Al_2[SiO_4]O$	81	0,0102
Sill ₂	Андалузит	Al_2SiO_5	86	0,0108
Sill ₃	Киванит	Al_2SiO_5	72	0,0090
Sod	Содалит	$Na_8[Al_6Si_6O_{24}]Cl_2$	707	0,0154
Sp	Шпинель	$Mg[Al_2O_4]$	66	0,0095
Spes	Спессартин	$Mn_2Al_2[Si_2O_{12}]$	196	0,0098
Spod	Сподумен	$LiAl[Si_2O_6]$	97	0,0097
Spur	Сперрит	$Ca_5[Si_7O_{18}](CO_3)$	244	0,0128
Staur	Ставролит	$FeAl_4Si_2O_{19}(OH)_2$	185	0,0088
Tc	Тальк	$Mg_3[Si_4O_{10}](OH)_2$	225	0,0054
Tb	Тевардит-α	$Na_2[SO_4]$	88	0,0126
Till	Тилленит	$Ca_5[Si_2O_7](CO_3)_2$	283	0,0129
Tit	Титанит (сфен)	$CaTi[SiO_4]O$	92	0,0116
Trem	Тремолит	$Ca_2Mg_5[Si_8O_{22}](OH)_2$	457	0,0111
Ts	«Молекула» Чермака	$CaAl[AlSiO_6]$	105?	0,0105
Ves	Везувин	$Ca_{10}Mg_{1/2}Al_4[(SiO_4)_5(Si_2O_7)_2 \cdot (OH)_4]$	718	0,0114
W	Вода	H_2O		
Wo	Волластонит-α	$Ca[SiO_3]$	66	0,0133
Zir	Циркон	$Zr[SiO_4]$	65	0,0108
Zo	Цопаит	$Ca_2Al_3[Si_2O_{11}]O(OH)$	227	0,0103
Zwd	Цинцивальдит	$K_2Li_2Fe_2Al_2[Al_2Si_6O_{26}]F_2(OH)_2$	475	0,0113
Xon	Ксенозит	$Ca_6[Si_6O_{17}](OH)_2$	428	0,0130

* Символы нормативных минералов, набранные полужирным прямым шрифтом, соответствуют реально существующим минералам. Квадратики в графах 9—14 указывают минеральные компоненты, прямые крестики — типоморфные минеральные компоненты. К — катагорма, М — мезонор

химические параметры			Присутствие в нормах					
$\sum n_m$	$r_m \cdot 10^{20}$	$M_m \cdot 10^{20}$	Типоморфные			Могут быть		
			К	М	Э	К	М	Э
7	20,293	142,06				×□	×□	
49	20,293	994,35	+					
20	21,975	439,50						
13	21,408	278,31	+			×□	×□	×
13	16,951	220,36			+□			
13	19,377	251,90			+□			
5	27,196	135,98			+	×	×□	
42	18,200	764,42						
22	21,964	483,21			+		×	×
20	18,016	360,32			+			
3	39,990	119,97				×□	×□	×□
20	20,158	403,16	+			×□	×□	×□
3	20,029	60,086					×□	×□
41	22,825	935,84					×□	×
42	22,829	958,83	+					
42	22,829	958,83			+□			
3	26,633	79,90	+□					
5	23,172	115,86				×□	×□	×□
8	20,256	162,05	+□					
8	20,256	162,05		+□				
8	20,256	162,05						
46	21,070	969,23						
7	20,324	142,27	+			×□	×□	
20	24,752	495,04	+					
10	18,609	186,08				×	×	
19	23,399	444,58			+	×□		
21	17,401	365,41		+□				
21	18,061	379,28			+			
7	20,291	142,04			+		×□	×□
22	22,209	488,59			+			
8	24,508	196,066					×□	×□
41	19,813	812,34				×(?)	×(?)	×
67	21,225	1422,09		+				
5	23,234	116,17				×□	×□	
6	30,552	183,31				×□	×□	×□
22	20,653	454,37					×	×□
42	20,766	872,16			+			
33	21,667	715,001			+□			

звездочка (*) — соединения, курсивным — остальным нормативным минералам. Символы со звездочками — ре- стандартных форм, косые крестики — возможность наличия в нормах соответствующих минеральных ма, Э — эпипорма. Mg' = Mg + Fe²⁺ + Mn.

процентных содержаний каждого минерала (ψ'_m) от первого до f -го дает величину $\sum_{m=1}^f \psi'_m = 100\%$.

Возможное отклонение $\sum_{m=1}^f \psi'_m$ от $(100-\Pi)\%$ и $\sum_{m=1}^f \psi'_m$ от 100% не должно превышать 2—3%. Это наиболее существенная вторая проверка правильности расчета минерального состава породы. Так, для расчетов, приведенных в табл. 24, 25, отклонения суммарного содержания минеральных компонентов в объемных процентах от 100% составляют соответственно 0,06 и 2,23%. Для расчетов, приведенных в табл. 25 и 26, величина разности $(100-\Pi)$ составила соответственно 92,9 и 98,9%, а рассчитанное суммарное содержание минеральных составляющих в объемных процентах — 95,27 и 103,33%. Искажение химизма или содержания атомов в минералах, связанное с неправильным распределением элементов по минералам или с погрешностью анализа, должно выявляться при сопоставлении значения $\sum_{m=1}^f \psi'_m$ с величиной $(100-\Pi)\%$ или $\sum_{m=1}^f \psi'_m$ с величиной 100% . Получаемое при таком сравнении расхождение указывает на необходимость перегруппировки атомов элементов в формульных единицах рассчитываемых минералов. Такая закономерность обусловлена тем, что в расчете количества атомов элементов в стандартном объеме породы (N'_V и F'_V) учитывается средневзвешенная плотность минералов [83, 87]. После проведения проверки на сходимость величин $\sum_{m=1}^f \psi'_m$ и $\sum_{m=1}^f \psi'_m$ соответственно с величинами $(100-\Pi)\%$ и 100% рассчитываются формулы минеральных составляющих породы.

Затем вычисляется формульно-объемный субмодальный состав породы из расчета на ее стандартный геометрический объем в $10\,000 \text{ \AA}^3$, т. е. формульно-объемный субмодальный состав породы с учетом ее пористости \mathcal{M}'_{Vn} , а также из расчета на стандартный объем массы вещества породы в 1000 \AA^3 , т. е. формульно-объемный субмодальный состав породы без учета ее пористости (\mathcal{M}'_V). Для этого рассчитывается формульно-объемная норма, соответствующая моде, для каждого минерала. Эта норма, соответствующая моде, для каждого минерала представляет собой количество его формульных единиц соответственно в 0,1 стандартного геометрического объема породы в $10\,000 \text{ \AA}^3$, т. е. 1000 \AA^3 (\mathcal{M}'_{Vn}), и в стандартном объеме массы вещества породы в 1000 \AA^3 (\mathcal{M}'_V), т. е. количество формульных единиц каждого минерала в стандартном объеме породы с учетом пористости породы и без учета ее.

Величины \mathcal{M}'_{Vn} и \mathcal{M}'_V (см. табл. 24—26) находятся путем деления общего количества атомов, приходящихся на каждый минерал m , содержащийся соответственно в 0,1 стандартного геометрического объема породы ($0,1 \cdot N'_m$) и в стандартном объеме массы вещества породы (F'_m), на количество атомов, заключенных в рассчитанной формульной единице минерала ($\sum n'_m$) по формулам (43а) и (43б),

$$\mathcal{M}'_{Vn} = 0,1 N'_m : \sum n'_m \quad (43a) \quad (\text{см. табл. 24 и 25})$$

$$\mathcal{M}'_V = F'_m : \sum n'_m \quad (43b) \quad (\text{см. табл. 24, 25, 26})$$

Взаимосвязь между соответствующими величинами, исходящими из стандартного объема массы вещества породы ($F_m^V, \psi_m, \mathfrak{M}_m^V, F_l^V$), и величинами, отвечающими стандартному геометрическому объему породы ($0,1N_m^V, \psi_{m\pi}, \mathfrak{M}_{V\pi}^V, N_l^V$) устанавливается с помощью формул [83, 87]

$$F_m^V = 0,1N_m^V : K_{\pi}, \quad (44a)$$

$$\psi_m = \psi_{m\pi} : K_{\pi}, \quad (44б)$$

$$\mathfrak{M}_m^V = \mathfrak{M}_{V\pi}^V : K_{\pi}, \quad (44в)$$

$$F_l^V = 0,1N_l^V : K_{\pi}. \quad (44г)$$

Преобразования по этим формулам имеет смысл производить лишь в тех случаях, когда величина $K_{\pi} < 0,98$, т. е. когда значение общей пористости породы больше 2%, так как пористость, меньшая 2%, практически может не учитываться [34] (см. табл. 26).

Сравнение результатов расчета формульно-объемного состава обоими способами, как с использованием данных о плотности горной породы (см. табл. 25), так и без этих сведений (см. табл. 24), свидетельствует об отсутствии значимых различий в результатах этих пересчетов (сравнить \mathfrak{M}_f и $\mathfrak{M}_{V\pi}$ в табл. 24 и 25). Однако сравнение объемно-процентного субмодального состава породы, рассчитанного этими двумя способами (см. \mathfrak{M}_f в табл. 24 и 25), с модальным составом этой же породы в объемных процентах (см. ψ_m в табл. 17 и 20, графа 3) свидетельствует о большей достоверности результатов расчетов субмодальных составов на основе использования данных о плотности горных пород (см. табл. 25). Именно этот способ позволяет рассчитывать состав минеральных составляющих и оценивать достоверность результатов силикатных химических анализов, что показано в работах В. А. Рудника [83, 87]. Это предъявляет повышенные требования к точности определения величин как минералогической (δ), так и объемной (d_V) плотностей исследуемых горных пород, определяющей, в свою очередь, точность расчетов субмодальных составов пород и их близость к модальным.

Таким образом, формульно-объемный субмодальный состав гранатового скарна с учетом его пористости $\mathfrak{M}_{V\pi}^V$, наиболее приближающийся к модальному (см. табл. 25), выразится

$$3,52Andr + 0,08Gros + 0,70Di + 0,04Hed + 0,91Q + 0,58Cc + 0,24Hm + 0,008Ap.$$

То же, но в виде формул минеральных компонентов имеет вид

$$3,60(Ca_{0,995}Mn_{0,005})(Fe_{0,98}^{2+}Al_{0,02})_2[Si_{0,999}Ti_{0,001}O_4]_3 +$$

$$0,74Ca(Fe_{0,08}^{2+}Mg_{0,92})[Si_2O_6] + 0,91SiO_2 + 0,58Ca[CO_3] + 0,24Fe_2O_3 + 0,008Ca_3[PO_4]_2.$$

Формульно-объемный субмодальный состав гранатового скарна без учета его пористости (\mathfrak{M}_f^V) выразится (см. табл. 25)

$$3,79An dr + 0,07Gros + 0,76Di + 0,04Hed + 0,98Q + 0,62Cc + 0,24Hm + 0,011Ap.$$

Объемно-процентный субмодальный состав скарна с учетом пористости ($\mathfrak{M}_{f\pi}$) выразится (см. табл. 25)

$$78,83Gr + 8,08Pm + 3,53Cc + 3,41Q + 1,21Hm + 0,21Ap + 4,73П,$$

а его объемно-процентный состав без учета пористости (\mathfrak{M}'_{ψ}) имеет вид (см. табл. 25)

$$84.55Gr + 8.60Pm + 3.67Q + 3.80Cc + 1.30Hm + 0.22Ap.$$

Помимо указанных субмодальных составов может быть рассчитан и формульно-массовый субмодальный состав ($\mathfrak{M}'_P = P'_m$), исходя как из формульно-объемного $\{\{\mathfrak{M}'_{V'}\}$, см. формулу 45а), так и из объемно-процентного $\{\{\mathfrak{M}'_{\psi}\}$, см. формулу (45б) субмодального составов горных пород. Формульно-массовый субмодальный состав представляет собой состав пород, выраженный в виде формульных минеральных компонентов в процентах по массе.

$$\mathfrak{M}'_P = P'_m = 100 (M_m \mathfrak{M}'_{V'}) : \sum_{m=1}^f (M_m \mathfrak{M}'_{V'}) = 100 \left(M_m \frac{F_m^V}{\sum n_m^i} \right) : \sum_{m=1}^f \left(M_m \frac{F_m^V}{\sum n_m^i} \right), \quad (45a)$$

$$\mathfrak{M}'_P = P'_m = 100 \left(\psi_m \frac{M_m}{V_m^m} \right) : \sum_{m=1}^f \left(\psi_m \frac{M_m}{V_m^m} \right), \quad (45b)$$

где M_m — формульная масса минерала m {находится в прил. 5 (графа 12)}; F_m^V — содержание минерала m в объемно-атомных интрамьялах {см. формулу (44а)}; V_m^m — объем формульной единицы минерала m ; см. прил. 5 (графа 16); ψ_m — содержание минерала m в объемных процентах.

Таким образом, формульно-массовый субмодальный состав скарна (в % по массе) без учета пористости (см. табл. 25), исходя из формулы (45а), рассчитывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^f (M_m \mathfrak{M}'_{V'}) &= 3.79 \cdot 500.26Andr + 0.07 \cdot 450.46Gros + 0.76 \cdot 216.59Di + \\ &+ 0.04 \cdot 248.10Hed + 0.98 \cdot 60.09Q + 0.62 \cdot 100.09Cc + 0.24 \cdot 156.69Hm + \\ &+ 0.011 \cdot 509.13Ap = 1896Andr + 32Gros + 165Di + 10Hed + 59Q + 62Cc + 38Hm + 6Ap = 2236; \\ 100 \frac{1896}{2236} Andr + 100 \frac{32}{2236} Gros + 100 \frac{165}{2236} Di + 100 \frac{10}{2236} Hed + 100 \frac{59}{2236} Q + \\ &+ 100 \frac{62}{2236} Cc + 100 \frac{38}{2236} Hm + 100 \frac{6}{2236} Ap = 84.8Andr + 1.4Gros + 7.4Di + 0.4Hed + \\ &+ 2.6Q + 2.8Cc + 1.7Hm + 0.3Ap. \end{aligned}$$

Суммарное содержание минеральных компонентов в процентах по массе составило 101,4%, что находится в пределах допустимого отклонения.

Глава II

РАСЧЕТЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФОРМУЛЬНО-АТОМНОЙ НОРМАТИВНОЙ СИСТЕМЫ

Формульно-атомная нормативная система призвана изображать состав горных пород, исходя из данных об их химическом составе в формульных единицах нормативных минеральных компонентов при условии выражения содержания химических компонентов анализа в атомных процентах. Методика и последовательность (алгоритм) расчета формульно-атомного нормативного состава и примеры пересчета приведены в работе В. А. Рудника [87]. Ниже

даны главнейшие сведения о системе и методы расчета на ее основе субмодальных составов горных пород и количеств атомов в их стандартных объемах.

Для облегчения пересчетов и с целью унификации рассматриваемой системы за ее основу принято выражение состава горной породы в виде базисных соединений, формульный состав которых принят подобным таковому в системе Ниггли, но с добавлением нескольких соединений (см. табл. 27). Сравнение горных пород между собой по химическому составу может осуществляться на основе выражения их состава в виде базисных соединений. Однако следует отметить, что развитие статистических методов сравнения химического состава горных пород, по-видимому, в значительной мере снимает необходимость пересчетов лишь с целью подобных сравнений. Пересчет на базисные соединения нужен для выражения состава горных пород в виде нормативных минеральных компонентов, реализация в виде которых химических составов пород происходит при различных $T - p$ -условиях, а также для сравнения с соответствующими диаграммами экспериментально изученных систем, когда за единицы измерения взято выражение состава горной породы в виде базисных соединений Ниггли.

На основе рассчитанных базисных соединений вычисляется стандартный катанормативный состав горной породы — стандартная катанорма, т. е. состав, выражаемый в виде определенного набора реально существующих минеральных компонентов, образование которых происходит в наиболее глубинных условиях. Состав минеральных компонентов стандартной катанормы приведен в табл. 27. Таким образом, катанормативный состав выражает состав магматических горных пород, а также состав метаморфических и метасоматических горных пород, образование которых происходит в условиях наибольших температур и давлений. Стандартный катанормативный состав горных пород может являться той основой, на которой производится сравнение химического состава различных по генезису и составу горных пород. При этом состав нормативных минералов стандартной катанормы почти полностью соответствует набору нормативных минералов в системе Ниггли — Бурри, что способствует унификации системы пересчетов. Имеются дополнения в части карбонатных нормативных минералов с целью выражения карбонатных метаморфических и метасоматических горных пород, а также карбонатитов и скарнов.

Например, состав высокоглиноземистого кристаллического сланца (см. табл. 17 [87]) выражается

Kp	Ne	Cal	Sp	Hx	Fa	Fo	Q'	Ru	W
0,92	1,87	0,67	1,45	1,45	0,49	1,16	15,57	0,34	0,46.

Отвечающая ему стандартная катанорма имеет вид [87, с. 51].

Or	Ab	An	Cord	FeCord	Hu	Q	Ru+W
0,92	1,87	0,67	3,62	3,62	0,49	0,92	0,34 0,46.

На основе стандартной катанормы рассчитываются возможные варианты катанормативного состава горных пород* (см. табл. 27), а также стандартные

* Один из вариантов катанормы, вычисленный из указанной стандартной катанормы, имеет вид [87, с. 54].

Or	Ab	An	Cord	FeCord	Pyp	Alm	Sill	Q	FeBi	Ru
0,69	1,87	0,67	1,82	1,71	1,2	1,2	5,00	7,71	0,23	0,34.

ультракатанорма, мезонорма и эпинорма. Стандартная ультракатанорма * приводит к сопоставимому минеральному выражению состава пород любых условий $T - p$ -образования (для приведенного примера стандартная ультракатанорма совпадает со стандартной катанормой). Стандартная мезонорма — способ выражения минерального состава горных пород метаморфических и метасоматических, а также автотематоморфизованных магматических горных пород в условиях средних температур и давлений (см. табл. 27). Стандартная эпинорма — способ выражения минерального состава метаморфических и метасоматических горных пород, а также автотематоморфизованных магматических горных пород в условиях малых температур и давлений (см. табл. 27). Стандартная мезонорма позволяет производить сравнение состава горных пород для условий средних температур и давлений, а стандартная эпинорма — для условий малых температур и давлений.

В прил. 7 из работы В. А. Рудника [87] приведен набор реакций перехода минеральных компонентов базисных соединений, ката-, мезо-, эпинормы. Эти реакции используются для перехода от стандартных составов к получению различных вариантов минерального состава в условиях ката-, мезо- и эпинорм. На основе соответствующих уравнений, составленных с учетом экспериментальных и парагенетических исследований минеральных ассоциаций пород, реализующихся в условиях различных фаций температур, давления и щелочности, могут быть рассчитаны возможные варианты реализации химического состава горной породы в виде определенной минеральной ассоциации для каждой из норм.

Введением кристаллохимических параметров в расчет (см. табл. 27) подобно описанному методу расчета субмолекулярного состава может быть осуществлен расчет формульно-объемного нормативного состава, т. е. содержание количеств формульных единиц каждого нормативного минерального компонента из расчета на стандартный объем массы вещества горной породы. Формульно-объемная нормативная система позволяет использовать дополнительную информацию об исследуемой породе и ее минеральных составляющих, а именно значение величины минералогической плотности породы (δ) и плотности минералов (γ_m). Благодаря использованию этих величин появляется возможность из большого количества нормативных составов горной породы устанавливать единственный, в виде которого реализовался этот химический состав в конкретной реальной обстановке формирования исследуемой горной породы. Принципы формульно-атомной системы нормативных пересчетов позволяют дополнить и совершенствовать построение вариантов соответствующих норм на основе дальнейших достижений экспериментальной петрологии, парагенетического анализа, изучения термодинамической направленности реакций минералообразования и полей устойчивости отдельных минералов и минеральных ассоциаций в зависимости от изменения фациальных условий температуры, щелочности — кислотности на фоне фаций глубинности и на основе конкретного химического состава горных пород.

Установление формульно-объемного нормативного состава. Для расчета формульно-объемного нормативного состава горной породы необходимо в формульно-атомный нормативный состав ввести поправочный коэффициент за отклонение вычисленного объема от стандартного (K_v). В этом случае содер-

* Включает в себя минеральные компоненты стандартной катанормы, за исключением ангидрита, тенардита, пирита, флюорита и галита (см. табл. 27).

жание каждого минерального компонента в формульно-объемной норме будет находиться по формулам

$$\mathcal{Q}_V = K_V \mathcal{Q}_m, \quad (46a)$$

$$K_V = 1 : \sum_{m=1}^f V_m^I = 1000 : \sum_{m=1}^f (V_m^M \mathcal{Q}_m), \quad (46b)$$

$$V_m^I = 0,001 \cdot \mathcal{Q}_m V_m^M, \quad (46b)$$

где $m = 1, 2, \dots, f$; \mathcal{Q}_m — количество формульных единиц минерала m в формульно-атомном нормативном составе породы; \mathcal{Q}_V — количество формульных единиц минерала m в формульно-объемном нормативном составе породы; V_m^I — тысячные доли стандартного объема массы вещества породы в 1000 \AA^3 , приходящегося на минерал m в формульно-атомном нормативном составе породы; V_m^M — объем формульной единицы минерала m (в \AA^3); находится по табл. 27.

Величина V_m^I может находиться и по формуле

$$V_m^I = F_m W_{im}^I, \quad (46c)$$

где F_m — количество атомных процентов, приходящихся на минерал m т. е. содержание минерала m в ат. %; W_{im}^I — тысячная доля объема, приходящегося на один атом формульной единицы минерала m (в \AA^3 , табл. 27).

Таким образом, для расчета формульно-объемного нормативного состава необходимо содержания минералов в формульно-атомных нормах (ката-, мезо- и элинорах) умножить на поправочный коэффициент K_V за отклонение вычисленного объема от стандартного. Последний представляет собою частное от деления 1000 на объем, занимаемый минеральными составляющими вычисленного формульно-атомного нормативного состава породы (см. формулу (46b)).

Формульно-объемный катанормативный состав, отвечающий ранее приведенному варианту формульно-атомной катанормы высокоглиноземистого кристаллического сланца, т. е. количество формульных единиц каждого из минеральных компонентов в стандартном объеме массы вещества породы (в 1000 \AA^3) имеет вид

Ru	Or	Ab	An	Cord	FeCord	Pyр	Alm	Sill	Q	FeBi
0.11	0.22	0.59	0.21	0.58	0.54	0.38	0.38	1.58	2.44	0.07.
				1.12		0.76				

Установление объемно-процентного нормативного состава. Для получения объемно-процентного нормативного состава на основе формульно-атомной нормы (\mathcal{Q}_ψ) могут быть использованы формулы (47a), (47b) и (47в)

$$\mathcal{Q}_\psi = 0,1 K_V \mathcal{Q}_m V_m^M, \quad (47a)$$

$$\mathcal{Q}_\psi = 100 \cdot \frac{\mathcal{Q}_m V_m^M}{\sum_{m=1}^f (V_m^M \cdot \mathcal{Q}_m)}, \quad (47b)$$

где $\mathcal{Q}_\psi = \psi_m$ — содержание в породе минерала m в об. %; V_m^M — объем формульной единицы минерала m (в \AA^3 , находится в табл. 27); K_V — поправоч-

ный коэффициент за отклонение вычисленного объема от стандартного; находится по формуле (46б); \mathcal{N}_m — количество формульных единиц минерала m в формульно-атомном нормативном составе породы.

Если был вычислен формульно-объемный нормативный состав, то объемно-процентное содержание нормативных минералов может быть вычислено по формуле {см. формулу (4) в работе В. А. Рудника [87]}

$$\mathcal{N}_\phi = \psi_m = 0.1 \mathcal{N}_V \cdot V_m^M \quad (47в)$$

Объемно-процентный катанормативный состав, отвечающий ранее приведенному катанормативному формульно-атомному составу высокоглиноземистого кристаллического сланца, имеет вид

<i>Or</i>	<i>Ab</i>	<i>An</i>	<i>Cord</i> + <i>FeCord</i>	<i>Pyp</i>	<i>Alm</i>	<i>Sill</i>	<i>Q</i>	<i>FeBt</i>	<i>Ru</i>
3.94	9.84	3.55	43.86	7.30	7.30	12.84	9.29	1.79	0.33.

Суммарное процентное содержание минеральных нормативных компонентов равно 100, что служит контролем правильности вычислений.

Установление формульно-массового нормативного состава. На основе формульно-атомного нормативного состава легко рассчитывается и содержание минеральных составляющих (нормативных минералов) в массовых процентах. Для получения формульно-массового нормативного состава горной породы, т. е. содержания каждого нормативного минерала в процентах по массе ($\mathcal{N}_P = P'_m$), необходимо формульно-атомное количество каждого минерала m (\mathcal{N}_m) умножить на его формульную массу (в граммах), увеличенную в 10^{+26} раз (M_m). Полученные величины для каждого минерала сложить ($M_m \cdot \mathcal{N}_m$). Величина массового процентного содержания каждого минерала m (P'_m) находится по формуле

$$\mathcal{N}_P = P'_m = 100 (M_m \mathcal{N}_m) : \left(\sum_{m=1}^I \mathcal{N}_m M_m \right) \quad (48)$$

Значения формульной массы минеральных компонентов (M_m) приведены в табл. 27. Формульно-массовый катанормативный состав кристаллического сланца, отвечающий ранее приведенному варианту формульно-атомной катанормы, имеет вид

<i>Or</i>	<i>Ab</i>	<i>An</i>	<i>Cord</i>	<i>FeCord</i>	<i>Pyp</i>	<i>Alm</i>	<i>Sill</i>	<i>Q</i>	<i>FeBt</i>	<i>Ru</i>
3.47	8.84	3.36	19.21	20.00	8.74	10.79	14.62	8.36	2.13	0.49.

Суммарное процентное содержание нормативных минералов равно 100, что служит контролем правильности расчетов.

Установление субмодального состава. На основе нормативного формульно-атомного состава имеется два способа установления субмодального состава, т. е. нормативного состава, соответствующего модальному. Первый способ заключается в сравнении нормативных составов с модальным, т. е. установление путем наблюдений. Способ тривиальный и пояснений не требует. Второй способ заключается в установлении субмодального состава на основе информации о плотности горной породы.

В этом, последнем случае после расчета какого-либо из вариантов формульно-атомного нормативного состава горной породы определяется объем

массы вещества ($V_{\Sigma m}^{\mathcal{R}}$), занимаемый рассчитанными нормативными минеральными компонентами по формуле *

$$V_{\Sigma m}^{\mathcal{R}} = \sum_{m=1}^f (V_m^m \mathcal{R}_m), \quad m=1, 2, \dots, f, \quad (49a)$$

где V_m^m — объем формульной единицы минерала m ; находится по табл. 27; \mathcal{R}_m — количество формульных единиц нормативного минерала m в рассчитанном формульно-атомном нормативном составе породы.

В общем случае количество атомов во всех минеральных составляющих нормы должно быть равно 100, так как расчет дается из 100 атомных процентов.

Величина общего процентного содержания всех атомов в норме ($\sum_{i=1}^h F_i$) будет определяться по формуле

$$\sum_{i=1}^h F_i = \sum_{m=1}^f (\mathcal{R}_m \sum n_m^i), \quad (49b)$$

где $i = 1, 2, \dots, h$; $m = 1, 2, \dots, f$; $\sum n_m^i$ — количество атомов элементов в формульной единице минерала m ; определяется по табл. 27.

Исходя из минералогической плотности породы (δ), объем массы вещества породы (V_M), занимаемый $\sum_{i=1}^h F_i$ атомами, будет определяться по формуле

$$V_M = 1.66 \cdot 10^6 \sum_{i=1}^h F_i : \left(\delta \sum_{i=1}^h A_i \right), \quad i=1, 2, \dots, h, \quad (50a)$$

где $\sum_{i=1}^h A_i$ — сумма атомных количеств всех элементов анализа.

Если $\sum_{i=1}^h F_i = 100\%$, то формула для определения объема, занимаемого

$\sum_{i=1}^h F_i = 100$ атомам, будет иметь вид

$$V_M = 1.66 \cdot 10^6 : \left(\delta \sum_{i=1}^h A_i \right). \quad (50b)$$

Соответствие одного из рассчитанных нормативных составов породы ее модальному будет определяться близостью величин $V_{\Sigma m}^{\mathcal{R}}$ и V_M . Установление субмодального состава на базе нормативных составов пород может быть осуществлено и в результате пересчетов, исходя из формульно-объемных нормативных составов. В этом случае установление субмодального состава горной породы производится следующим образом.

* Расчет подобен расчету субмодального состава породы по типу, приведенному в табл. 24.

Определяется количество атомов всех элементов в стандартном объеме массы породы ($\sum F_i^V$), исходя из соответствующего формульно-объемного нормативного состава, по формуле

$$\sum F_i^V = \sum_{m=1}^f F_m^V = K_V \sum_{m=1}^f F_m. \quad (51)$$

Значения соответствующих величин в этой формуле могут быть определены по формулам

$$F_m^V = \mathfrak{R}_V \sum n_m^i, \quad (52a)$$

$$\mathfrak{R}_V = K_V \mathfrak{R}_m, \quad (52b)$$

$$F_m = \mathfrak{R}_m \sum n_m^i, \quad (52b)$$

$$K_V = 1 : \sum_{m=1}^f V_m^I = 1000 : \sum_{m=1}^f (V_m^V \mathfrak{R}_m),$$

где $m = 1, 2, \dots, f$; \mathfrak{S}_m^V — количество атомов элементов, приходящееся на минерал m в стандартном объеме массы вещества породы в 1000 \AA^3 ; F_m — содержание минерала в атомных процентах, т. е. общее содержание элементов в атомных процентах, приходящееся на минерал m в формульно-атомном нормативном составе породы; K_V — поправочный коэффициент за отклонение вычисленного объема породы от стандартного; V_m^I — объем, занимаемый минералом m в частях от стандартного объема массы вещества горной породы в 1000 \AA^3 ; см. формулу (46г); $\sum V_m^I$ — объем, занимаемый всеми минералами «нормы» в частях от стандартного объема массы вещества породы в 1000 \AA^3 ; $\sum n_m^i$ — количество всех атомов элементов в формульной единице минерала m ; находится по табл. 27; \mathfrak{R}_m — формульно-атомная норма минерала m , т. е. количество формульных единиц минерала m в формульно-атомном нормативном составе породы; \mathfrak{R}_V — формульно-объемное нормативное содержание (норма) минерала m , т. е. количество формульных единиц минерала m в составе породы из расчета на объем 1000 \AA^3 массы ее вещества.

Затем определяется общее количество атомов элементов в стандартном объеме массы вещества горной породы в 1000 \AA^3 по одной из формул атомно-объемного метода, в частности по формулам

$$\sum F_i^V = 6.024 \cdot 10^{-26} \sum A_i, \quad (53a)$$

$$\sum F_i^V = 0.1 \cdot \delta \cdot \sum (\mathfrak{R}_i \cdot P_i), \quad (53b)$$

где $i = 1, 2, \dots, h + \rho - 1$; δ — минералогическая плотность породы (определена экспериментально); A_i — атомное количество элемента i в породе; находится с помощью прил. 3 в работе В. А. Рудинка [87] или формул (6a) и (6б); $\sum A_i$ — сумма атомных количеств всех элементов породы; P_i — массовое процентное содержание элемента по результатам анализа; \mathfrak{R}_i — переходный коэффициент для каждого элемента анализа (приведен в прил. 1); $\sum (\mathfrak{R}_i \cdot P_i)$ — сумма произведений \mathfrak{R}_i на P_i для каждого элемента (или оксида) химического анализа породы; $h - 1$ — количество оксидов в анализе; ρ — количество элементов, приведенных в результате анализа в атомной форме.

Сравнение содержания атомов элементов в стандартном объеме массы вещества (1000 Å³) исследуемой породы, рассчитанное по атомно-объемному методу, исходя из нормативного состава горной породы, позволяло установить «норму», соответствующую «моду», т. е. субмодальный состав горной породы.

Модальному составу горной породы будет соответствовать или будет наиболее близок тот из формульно-атомных и формульно-объемных нормативных составов, количество атомов которого в стандартном объеме массы вещества породы будет наиболее близко к количеству атомов, рассчитанному по одной из указанных формул атомно-объемной системы пересчета.

Установление количества атомов элементов в формульно-атомной порме горных пород может быть осуществлено исходя из значений содержаний нормативных минеральных составляющих (количество их формульных единиц) на основе атомно-объемной системы пересчета. Обобщенная формула для расчета количества атомов элемента i , исходя из формульно-атомного нормативного состава, имеет вид

$$F_i^V = 1000 \frac{\sum_{m=1}^f (\mathcal{Q}_m n_m^i)}{\sum_{m=1}^f (V_m^m \mathcal{Q}_m)} , \quad (54)$$

где $\sum_{m=1}^f (\mathcal{Q}_m n_m^i)$ — сумма произведений количеств атомов элемента i , содержащихся в формуле минерала m (n_m^i), на количество этого минерала.

Значения V_m^m и n_m^i находятся по табл. 27, а \mathcal{Q}_m — из рассчитанных норм.

Установление субмодального формульно-атомного состава по результатам их химического анализа, данных о плотности и качественном минеральном составе горных пород может быть осуществлен несколькими путями.

Расчет формульно-атомного субмодального состава (\mathcal{M}_m^i) по данным о содержании элементов i в минеральных составляющих в атомных процентах (F_m). Вначале расчет идет по схеме, изложенной в § 1, главы 1 настоящего раздела, пример которого приведен в табл. 24, до получения данных об атомном процентном содержании каждого из минеральных составляющих (F_m). Формульно-атомное субмодальное содержание каждого минерального компонента определяется по формуле (55а) без учета пористости породы и по формуле (55б) с учетом ее пористости

$$\mathcal{M}_m^i = \frac{F_m}{\sum n_m^i} ; \quad (55a)$$

$$\mathcal{M}_{mn}^i = K_n \frac{F_m}{\sum n_m^i} , \quad (55b)$$

где F_m — атомное процентное содержание каждого минерального компонента m , численно отвечающее атомному процентному содержанию всех элементов i , входящих в этот компонент m (см. табл. 24); $\sum n_m^i$ — количество всех атомов элементов i в формульной единице минерала m (см. в прил. 5, графу 13 или табл. 27, графу 6); K_n — поправочный коэффициент на пористость (см. формулы (19б) и (19г)).

Для данного примера (см. табл. 24) формульно-атомный субмодальный состав скарна без учета его пористости (\mathfrak{M}'_m) имеет вид

$$4.16Gr + 0.86Pm + 1.05Q + 0.67Cc + 0.27Hm + 0.01Ap.$$

Расчет формульно-атомного субмодального состава ($\mathfrak{M}'_m \mathfrak{M}'_{m n}$) по данным о содержании элементов i в стандартном объеме породы ведется по формуле (56а) для случая отсутствия пористости и по формуле (56б) при ее учете

$$\mathfrak{M}'_m = \frac{F_m^V}{K_V \sum n_m^i}, \quad (56a)$$

$$\mathfrak{M}'_{m n} = \frac{0.1N_m^V}{K_V \sum n_m^i}, \quad (56b)$$

где F_m^V и N_m^V — общее количество атомов элемента, приходящееся на минерал m соответственно в стандартном объеме массы вещества породы в 1000 \AA^3 {см. формулы (44а) и (52а)} и в стандартном геометрическом объеме породы в $10 (000 \text{ \AA}^3$ {см. формулу (41) на с. 79}; порядок их расчета изложен на с. 74 настоящей книги, а соответствующие примеры приведены в табл. 25 и 26; $\sum n_m^i$ — общее количество атомов элементов i в формульной единице минерала m ; находится в прил. 5 (графа 13) или в табл. 27 (графа 6); K_V — поправочный коэффициент за отклонения вычисленного объема массы вещества от стандартного; находится по формуле (39).

Для скарна из примера табл. 25 величина коэффициента $K_V = 0,9025$, $1/K_V = 1,108$, а формульно-атомный состав скарна без учета пористости (\mathfrak{M}'_m) имеет вид

$$4.28Gr + 0.88Pm + 1.09Q + 0.69Cc + 0.27Hm + 0.01Ap.$$

Расчет формульно-атомного субмодального состава ($\mathfrak{M}'_m, \mathfrak{M}'_{m n}$) по данным о формульно-объемном субмодальном ($\mathfrak{M}'_V, \mathfrak{M}'_{V n}$) составе породы находится по формулам

$$\mathfrak{M}'_m = \mathfrak{M}'_V : K_V; \quad (57a)$$

$$\mathfrak{M}'_{m n} = \mathfrak{M}'_{V n} : K_V, \quad (57b)$$

где K_V — поправочный коэффициент за отклонение вычисленного объема массы вещества от стандартного; см. формулы (39) и (46б).

Для примера, приведенного в табл. 25, исходя из формульно-объемного субмодального состава скарна, формульно-атомный состав вычисляется умножением содержания каждого из минеральных компонентов, выраженного в формульно-объемных единицах (\mathfrak{M}'_V), на $1/K_V = 1,108$. В результате формульно-атомный субмодальный состав скарна (без учета пористости) выражается

$$4.14Andr + 0.08Gros + 0.84Di + 0.04Hed + 1.09Q + 0.69Cc + 0.27Hm + 0.01Ap.$$

Полученный формульно-атомный субмодальный состав несколько отличается (незначимо) от такового состава, полученного на основе данных табл. 24 по формуле (55а), так как результаты расчета и формульно-объемных составов также несколько различаются между собой (ср. в табл. 24 и 25 значение величины \mathfrak{M}'_V).

Расчет формульно-атомного субмодального состава ($M'_m, M'_{mп}$) по данным его объемно-процентного субмодального состава ($M'_\psi = \psi_m; M'_{\psiп} = \psi_{\psiп}$) осуществляется по формулам

$$M'_m = 0,01 \frac{M'_\psi}{K_v \cdot Q_m} = 0,01 \frac{\psi_m}{K_v \cdot Q_m}; \quad (58)$$

$$M'_{mп} = 0,01 \frac{M'_{\psiп}}{K_v \cdot Q_m} = 0,01 \frac{\psi_{\psiп}}{K_v \cdot Q_m}, \quad (59)$$

где K_v — поправочный коэффициент за отклонение вычисленного объема массы вещества от стандартного; находится по формуле (39); Q_m — коэффициент изообъемности; находится в прил. 5 (графа 21); $\psi_m, \psi_{\psiп}$ — содержание минерала m в объемных процентах соответственно без учета и с учетом пористости (см. табл. 25). Формульно-атомный субмодальный состав скарна (табл. 25) без учета пористости будет иметь вид

$$\begin{aligned} &0,01 \frac{1,108 \cdot 84,55}{0,219} Gr + 0,01 \frac{1,108 \cdot 8,69}{0,109} Pm + 0,01 \frac{1,108 \cdot 3,67}{0,038} Q + 0,01 \frac{1,108 \cdot 3,8}{0,06} Cc + \\ &+ 0,01 \frac{1,108 \cdot 1,3}{0,05} Hm + 0,01 \frac{1,108 \cdot 0,22}{0,26} Ap = 4,28Gr + 0,38Pm + 1,07Q + 0,70Cc + \\ &+ 0,28Hm + 0,01Ap. \end{aligned}$$

Часть четвертая

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АТОМНО-ОБЪЕМНОЙ И НОРМАТИВНОЙ СИСТЕМ ДЛЯ УСТАНОВЛЕНИЯ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ МЕТАСОМАТИЧЕСКОГО МИНЕРАЛО- И ПОРОДООБРАЗОВАНИЯ И СРАВНЕНИЯ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ПОРОД

Атомно-объемная и нормативная системы сравнения химического состава пород позволяют решать проблемы метасоматического и метаморфического минерало- и пороодообразования без привлечения каких-либо дополнительных перерасчетов. Одни из этих проблем могут быть решены и с помощью других методов исследования метасоматических пород, хотя и более сложным путем [6, 33, 42, 61, 62, 80, 81 и др.]; решение же других вопросов какими-либо иными способами затруднительно.

Глава I

УСТАНОВЛЕНИЕ И ВЫРАЖЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ МИГРАЦИИ ВЕЩЕСТВА В ПРОЦЕССЕ МЕТАСОМАТИЧЕСКОГО МИНЕРАЛО- И ПОРОДООБРАЗОВАНИЯ

Атомно-объемная система выражения состава пород позволяет легко переходить к установлению характера и величины привноса — выноса вещества при метасоматических процессах, а также и некоторых других сторон поведения элементов в этих процессах — подвижность и миграционную способность элементов и др.

§ 1. УСТАНОВЛЕНИЕ ХАРАКТЕРА И ВЕЛИЧИНЫ ПРИВНОСА — ВЫНОСА ВЕЩЕСТВА В УСЛОВИЯХ ПОСТОЯННОГО ГЕОЛОГИЧЕСКОГО ОБЪЕМА ПОРОД

Характер и величина привноса — выноса вещества в процессе метасоматического образования пород и руд устанавливаются простым попарным сравнением величин количества атомов каждого элемента в стандартном геологическом объеме исходной породы (N_{i0}^Y) и породы, возникшей за ее счет — конечной (N_{ik}^Y), которые определяются одним из уже разобранных способов. Разницу (ΔN_i^Y) обозначают плюсом при привносе и минусом при выносе (табл. 28, графы 4 и 8)

$$\Delta N_i^Y = N_{ik}^Y - N_{i0}^Y.$$

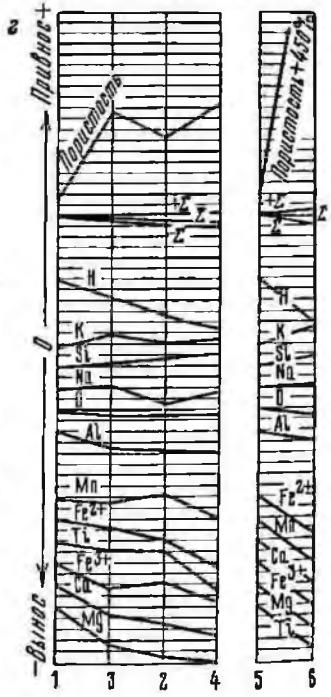
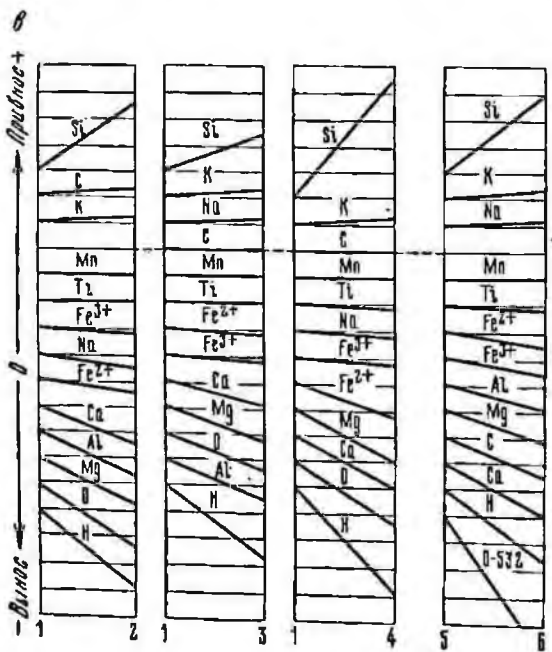
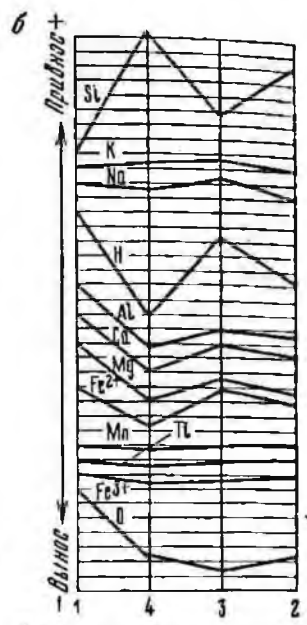
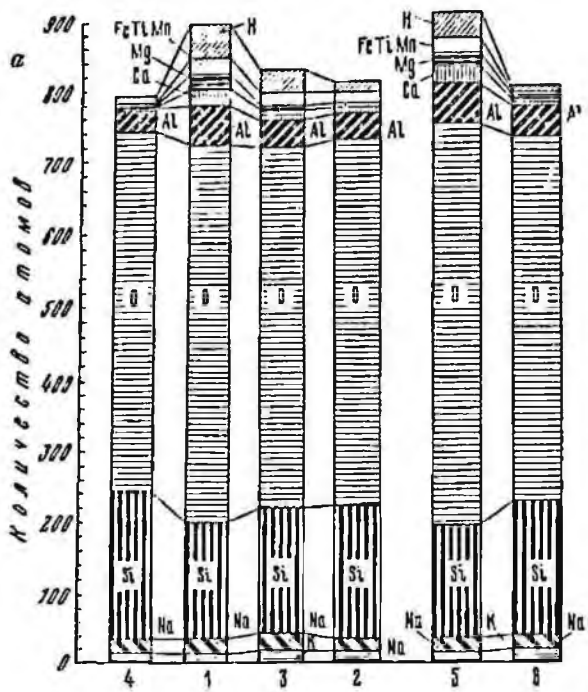
(60а)

Расчет баланса вещества по атомно-объемной системе

Элементы	Баланс вещества при образовании							
	кварц-микронлинового метасоматита (II) за счет габбро-порита (I)				скарна (VIII) за счет мрамора (VII)			
	количество атомов в 10 000 Å³		привнос — вынос на 10 000 Å³		количество атомов в 10 000 Å³		привнос — вынос на 10 000 Å³	
	I	II	абсолют- ные разности	в % к I	VII	VIII	абсолют- ные разности	в % к VII
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Si	152	208	+56	+37	2	132	+130	+6 500
Ti	4,8	0,3	-4,5	-93	0,06	0,16	+0,10	+167
Al	46	37	-9	-20	0,57	1,77	+1,20	+210
Fe ³⁺	13,5	1,2	-12,3	-91	0,1	75,1	+75,0	+75 000
Fe ²⁺	31	2	-29	-94	0,05	0,45	+0,40	+800
Mn	0,75	0,05	-0,7	-93	0,12	0,54	+0,42	+350
Mg	28,5	0,6	-27,9	-98	2,4	7,0	+4,6	+192
Ca	35	1	-34	-97	168	121	-47	-28
Na	15	17	+2	+13	—	—	—	—
K	2	17	+15	+750	—	—	—	—
Li	0,00	0,03	+0,03	Привнос	—	—	—	—
Rb	0,00	0,02	+0,02	»	—	—	—	—
P	0,00	0,07	+0,07	»	0,05	0,27	+0,22	+440
F	0,00	0,6	+0,06	»	—	—	—	—
OH	7	6	-1	-14	—	—	—	—
CO ₂	—	—	—	—	168	6	-162	-96
O	510	497	-12	-3	513	521	+8	+2
+ Σ	—	—	+73,72	+9	—	—	+219,94	+26
- Σ	—	—	-131,4	-16	—	—	-209,00	-25
Σ	846,35	787,87	-57,68	-7	854,35	865,29	+10,04	+1

После этого определяется относительное увеличение или уменьшение количества атомов каждого элемента (ΔN_i^V) в процентах к количеству атомов в исходной породе (N_{i0}^V), подвергшейся переработке ($\Delta N_i^V/N_{i0}^V\%$; см. табл. 28, графы 5 и 9). Как итог подсчитываются в отдельности общий абсолютный ($+\sum \Delta N_i^V$) и относительный ($+\sum \Delta N_i^V/\sum N_{i0}^V$) привнос, общий абсолютный ($-\sum \Delta N_i^V$) и относительный ($-\sum \Delta N_i^V/\sum N_{i0}^V$) вынос п, наконец, общий баланс привноса — выноса вещества. Следует отметить, что величина относительного привноса — выноса вещества. Следует отметить, что величина относительного привноса — выноса количества атомов элементов одновременно показывает п величину относительного привноса — выноса элементов п их окислов п в весовом выражении (в граммах).

На основе атомно-объемного метода могут быть выведены формулы, отражающие характер п величину привноса — выноса атомов элементов в процессе метасоматического формирования горных пород из расчета на стандартный геометрический объем, т. е. с учетом пористости горной породы в 10 000 Å³.



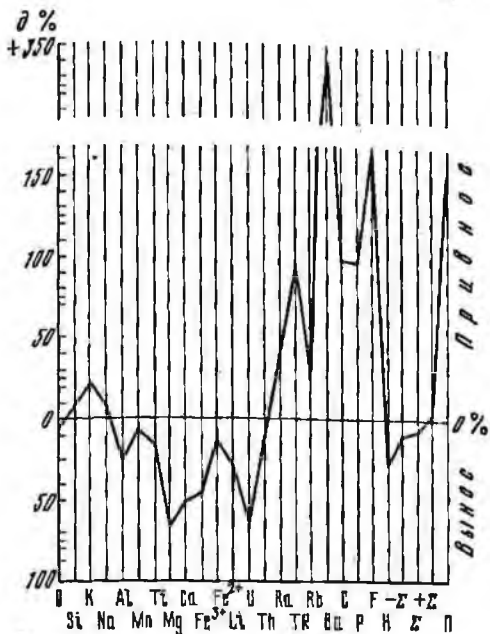


Рис. 5. Диаграммы миграции элементов и изменения пористости в процессе кремне-кали-натриевого метасоматизма (район хр. Дикагды — Тукуруингра, Дальний Восток [34]):

а — на расчете на стандартный геометрический объем в 10 000 Å³; б — вертикальный масштаб: одно деление соответствует 5 атомам; в — вертикальный масштаб: одно деление соответствует 10 атомам; г — вертикальный масштаб: одно деление соответствует 20%; д — при формировании кварц-альбит-микроклиновых метасоматитов (3) за счет диоритовых порфиритов (1).

1 — диоритовый порфирит; 2 — кварцованный и слабо микроклинизированный диоритовый порфирит; 3 — кварц-альбит-микроклиновый метасоматит; 4 — кварц-микроклиновый метасоматит; 5 — биотит-липидовый диафоритовый сланец по амфиболиту; 6 — кварц-альбит-микроклиновый метасоматит

Таблица 29

Расчет миграции вещества по окисно-объемному методу при возникновении гранатового скарна (VIII) за счет мрамора (VII)

Компоненты	% по массе				Содержание окислов в 1000 см ³ в г		Привнос — вынос на 1000 см ³	
	результаты анализа		приведенные к 100%		VII	VIII	абсолютные разности	в процентах к массе окисла в VII
	VII	VIII	VII	VIII				
1	2	3	4	5	6	7	8	9
SiO ₂	0,77	36,07	0,77	36,95	21,9	1315,4	+1293,5	+5906
TiO ₂	0,03	0,06	0,03	0,06	0,8	2,1	+1,3	+162
Al ₂ O ₃	0,17	0,41	0,17	0,42	4,8	14,9	+10,1	+210
Fe ₂ O ₃	0,16	27,30	0,06	27,96	1,7	995,4	+993,7	+5843
FeO	0,02	0,15	0,02	0,15	0,6	5,3	+4,7	+783
MnO	0,05	0,18	0,05	0,18	1,4	6,4	+5,0	+357
MgO	0,56	1,29	0,56	1,32	15,9	47,0	+31,1	+196
CaO	55,20	30,94	55,06	31,68	1563,7	1127,8	-435,9	-28
P ₂ O ₅	0,02	0,09	0,02	0,09	0,6	3,2	+2,6	+433
CO ₂	43,37	1,16	43,26	1,19	1228,6	42,4	-1186,2	-96
+Σ	—	—	—	—	—	—	+2342,0	+82
-Σ	—	—	—	—	—	—	-1622,1	-57
Σ	100,25	97,65	100,00	100,00	2840,0	3559,9	+719,9	+25
δ	2,87	3,83						
d _γ	2,84 (d ₀)	3,56 (d _κ)						
Π	1,1%	7,1%						

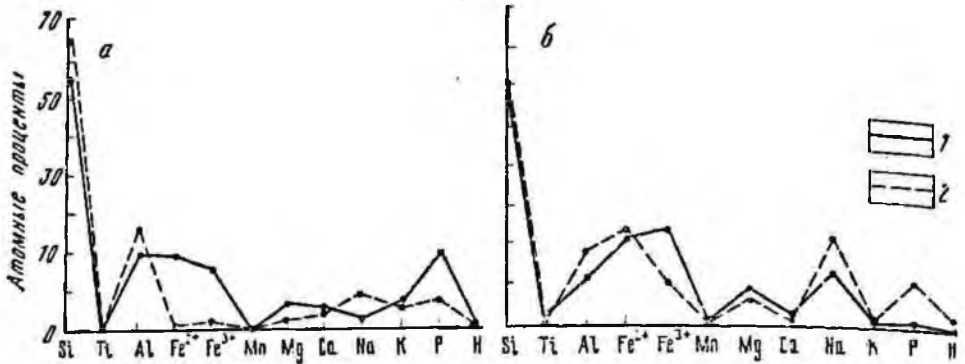


Рис. 6. Миграция вещества при гранитизации пород:

а — метаморфической серии; б — при щелочном метасоматизме пород формации железистых кварцитов Криворожья [56];
 1 — состав исходных пород, 2 — состав метасоматизированной породы

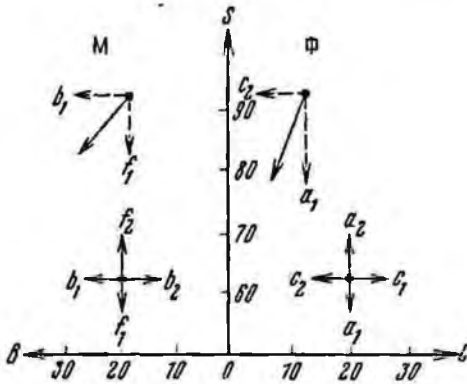
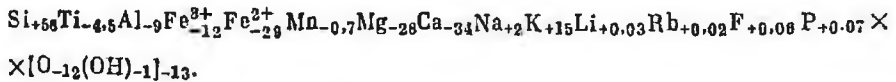


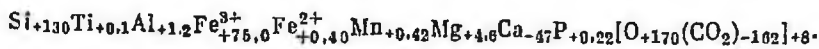
Рис. 7. Натуральная петрохимическая диаграмма в атомно-объемном выражении (согласно форме, предложенной Ю. В. Комаровым [43]). Содержания элементов выражены или в удесятеренном количестве атомов в стандартном объеме массы вещества пород в 1000 \AA^3 ($10 F_i^V$), или в стандартном геометрическом объеме в $10\,000 \text{ \AA}^3$ (N_i^V). М — мафическая часть диаграммы:

$S = \text{Si}$, $B = \text{Ca} + \text{Mg}$; $b_1 = \text{Ca} - \text{Mg}$ при $\text{Ca} > \text{Mg}$;
 $b_2 = \text{Mg} - \text{Ca}$ при $\text{Mg} > \text{Ca}$; $f = \text{Fe}^{2+} + \text{Fe}^{3+}$;
 $f_1 = f$ при $b > f$; $f_2 = f$ при $b < f$; Φ — фельзитическая часть диаграммы; $S = \text{Si}$, $C = \text{Na} + \text{K}$;
 $c_1 = \text{K} - \text{Na}$ при $\text{K} > \text{Na}$; $c_2 = \text{Na} - \text{K}$ при $\text{Na} > \text{K}$;
 $a = \text{Al}$; $a_1 = a - c$ при $a > c$; $a_2 = c - a$ при $c > a$

Так, перемещение вещества при образовании кварц-микроклиновых метасоматитов за счет габбро-норита может быть выражено формулой (см. табл. 28, графу 4)



Баланс вещества при формировании прроксен-гранатового скарна за счет мрамора выражается следующей формулой (см. табл. 28, графу 8):



Точно так же путем сопоставления величин весового содержания в граммах вещества, вычисленного в расчете на геологический объем породы в 1000 см^3 исходной (p_{i0}) и возникшей за счет ее метасоматической породы (p_{i1}), устанавли-

Рис. 8. Диаграмма изменения состава пород в зоне гидротермальной аргиллитизации близ кварцевой жилы [3].

Содержания элементов выражены в количестве атомов в стандартном геометрическом объеме пород в $10\ 000 \text{ \AA}^3$ (N_i^V). 1, 2, 3, 4 — номера проб. Длина и направление каждого вектора в левой части диаграммы отражают величину соотношения между $N_{\text{Fe}^{2+}}^V$ и $N_{\text{Fe}^{3+}}^V$, а точка начала вектора — N_{Si}^V и N_{Mg}^V . Положение точки начала каждого вектора в правой части диаграммы отражает соотношение между N_{Si}^V и N_{Al}^V , длина и направление верхнего вектора — N_{K}^V и N_{Na}^V , а нижнего — N_{Ca}^V и N_{Na}^V . Диаграмма может использоваться и для отображения содержаний величин 10 F.Y. . Пунктиром и точками обозначены тренды состава пород.

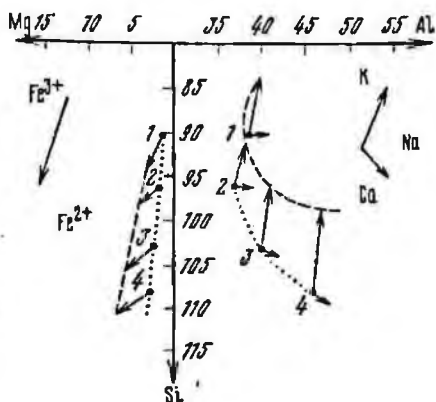


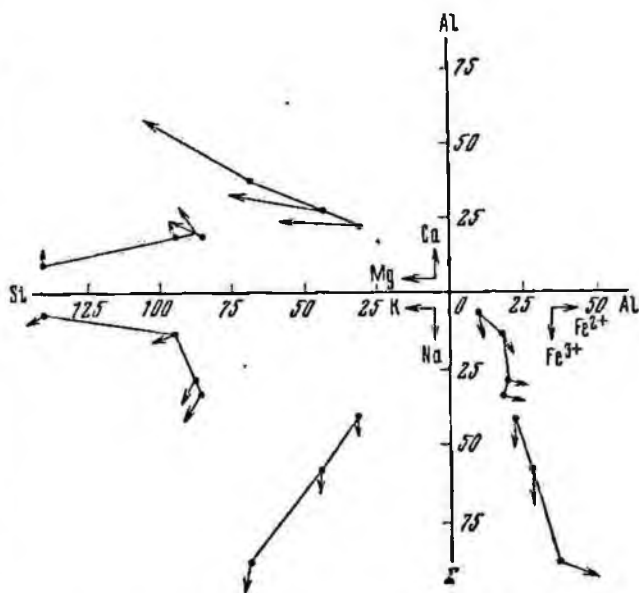
Рис. 9. Диаграмма $\text{Si} - \text{Al} - \sum (\text{Fe}^{2+} + \text{Fe}^{3+} + \text{K} + \text{Na} + \text{Ca} + \text{Mg})$ для гидротермально измененных вторичных кварцитов (преобразованный вариант диаграммы О. И. Егорова [27]).

Содержания элементов выражены в количествах атомов в стандартном геометрическом объеме пород в $10\ 000 \text{ \AA}^3$ (N_i^V) согласно обозначениям на рисунке, где \sum представляет собой $\sum (N_{\text{Fe}^{2+}}^V + N_{\text{Fe}^{3+}}^V + N_{\text{K}}^V + N_{\text{Na}}^V + N_{\text{Ca}}^V + N_{\text{Mg}}^V)$. Вправо по оси абсцисс и вверх по оси ординат откладывается количество атомов алюминия (N_{Al}^V); влево по оси абсцисс — кремния (N_{Si}^V).

К полученной фигуративной точке на плоскости $\text{Al} - \Sigma$ подстраивается вектор железа как сумма вектора двух- и трехвалентного железа, каждый из которых откладывается параллельно одной из координатных осей и по величине равен содержанию соответствующего компонента, выраженному в общем масштабе графика.

Аналогичным образом на плоскости $\text{Si} - \Sigma$ строятся векторы щелочных металлов, а на плоскости $\text{Si} - \text{Al}$ — векторы магния и кальция. В случае отбора образцов по зоне изменения с целью установления движения компонентов фигуративные точки анализов последовательно отобранных образцов соединяются линией, а фигуративная точка конечного продукта изменения породы выделяется размером, чтобы можно было проследить направление, в котором идут изменения.

При нанесении на диаграмму многих зон векторы содержаний Fe, Ca, Mg, Na, K сжимаются, в связи с чем отпадает необходимость в проекции $\text{Si} - \text{Al}$.



вается величина привноса или выноса каждого элемента i как в абсолютном выражении (Δp_i), так и в относительном ($\Delta p_i / p_{i0} \%$).

(606)

$$\Delta p_i = p_{ik} - p_{i0}$$

Примеры и характер записи при подобных расчетах приведены в табл. 29 (графы 8—9). Примеры графического изображения результатов привноса — выноса вещества при метасоматических процессах приведены на рис. 5—9.

§ 2. УСТАНОВЛЕНИЕ ХАРАКТЕРА
И ВЕЛИЧИНЫ ПРИВНОСА — ВЫНОСА ВЕЩЕСТВА
В УСЛОВИЯХ ИЗМЕНЯЮЩЕГОСЯ
ГЕОЛОГИЧЕСКОГО ОБЪЕМА ПОРОД

Атомно-объемная система основана на «правиле равных объемов при метасоматозе» и предусматривает все расчеты баланса вещества этих процессов вестн, исходя из объема $10 (100) \text{ \AA}^3$ породы с учетом ее пористости. Благодаря этому появляется возможность устанавливать величину привноса — выноса вещества при метасоматических процессах не только в условиях постоянного геологического объема, но и в условиях его изменения. В последнем случае изменение геологического объема породы происходит в результате сокращения ее порового пространства, что имеет место при достаточно широко проявленных процессах акцелерного уплотнения и более редкого уплотнения породы под воздействием стресса [11, 17, 44, 46, 62, 80, 81 и др.]. При подобных изменениях геологического объема породы главная задача заключается в установлении исходного объема породы, т. е. ее объема до уплотнения.

В настоящее время может быть предложено два метода учета изменения объема пород и установления величины привноса — выноса вещества в условиях такого изменения.

Расчет баланса вещества
метасоматических процессов при изменении
геологического объема одной из сравниваемых пород
по данным содержания устойчивого компонента

Устойчивый компонент * — это такой компонент, миграция которого в процессе метасоматизма отсутствовала или была крайне незначительна. Установление устойчивого компонента связано с решением вопроса о возможности геохимически вполне инертного поведения компонентов в каждом конкретном случае. И хотя решение этого вопроса представляет собой вполне самостоятельную и достаточно сложную проблему, тем не менее установление первоначального объема по методу устойчивого компонента заслуживает особого внимания, так как в настоящее время является основным способом расчета изменения объемов, кроме которого автору известен лишь метод, примененный А. А. Глаголевым [17], но, к сожалению, имеющий лишь ограниченное применение. Для зон хлоритизации Опотского талькового месторождения И. Ф. Романович [80, 81] устойчивыми компонентами считает TiO_2 и Al_2O_3 .

И. Ф. Романовичем [81] предложена следующая формула пересчета баланса вещества метасоматических процессов при изменении объемов:

$$\Delta p_{iV} = \frac{P_{KV}}{100} \cdot \frac{P_{K1}(100 - P_0) C_0 \delta_0 d'_K - P_{01}(100 - P'_K) C'_K \delta'_K d_0}{(100 - P_0) \cdot C_0 \cdot \delta_0 \cdot d'_K}, \quad (61)$$

где Δp_{iV} — количество привнесенного (или вынесенного) химического компонента в граммах (например, SiO_2 , MgO и т. д.), из расчета на определенный конечный объем метасоматически измененной и уплотненной породы — V'_K ; P_{KV} — конечная масса вещества всего рассматриваемого объема породы V_K или всей зоны метасоматического изменения и уплотнения; P_{K1} — содержание

* Впервые понятие «устойчивый компонент» введено И. Ф. Романовичем [81].

компонента l (окисла или элемента) в массовых процентах в конечной породе (после метасоматизма и уплотнения); P_{0l} — содержание компонента l (окисла или элемента) в массовых процентах в неизменной породе; C'_l — содержание метасоматически измененной и уплотненной породе; C_0 — содержание в массовых процентах устойчивого компонента (окисла или элемента) в неизменной породе; δ'_k, δ_0 — минералогическая плотность соответственно метасоматически измененной и уплотненной и неизменной породы; d'_k, d_0 — объемная плотность соответственно метасоматически измененной и уплотненной и неизменной породы; Π'_k, Π_0 — пористость конечной метасоматически измененной и уплотненной и неизменной породы.

К сожалению, формула И. Ф. Романовича очень громоздка, что, безусловно, затрудняет ее применение. Автором настоящей работы выводится формула для подобной же цели, но значительно упрощенная по сравнению с формулой И. Ф. Романовича [83, 90].

Вывод формул для определения баланса вещества метасоматических процессов при последующем изменении геологического объема одной из сравниваемых пород по данным содержания устойчивого химического компонента (окисла или элемента). Обозначив V'_0 общий объем породы, подвергшейся метасоматическому изменению, но не претерпевшей последующего уплотнения, имеем равенство $V_0 = V'_0$. В этом случае $p_0 = V_0 \cdot d_0$ и $p'_0 = V'_0 \cdot d'_0$, где d_0, d'_0 — объемная плотность, соответствующая неизменной и метасоматически измененной породе; p_0 — вес всего объема V'_0 породы после метасоматического преобразования; V_0 — общий объем неизменной породы.

Если содержание устойчивого компонента выражено в массовых процентах, то эта величина содержания устойчивого компонента в породах с различной минералогической плотностью (δ) будет различной, т. е. при метасоматическом изменении породы, сопровождающемся изменением ее величины (δ), при постоянстве содержания устойчивого компонента, выраженного в граммах на 1 см^3 , процентное содержание (в частности, по массе) его будет изменяться.

Соотношение между содержанием устойчивого компонента в неизменной и метасоматически измененной породе выразится уравнением

$$\frac{\delta_0}{\delta'_0} = \frac{C'_0}{C_0}; \quad C'_0 \delta'_0 = C_0 \delta_0. \quad (62a)$$

Следовательно, $C'_0 \cdot d = C_0 \cdot d_0$, так как $d = \delta - \delta \frac{\Pi}{100}$ (см. формулу (18)), где δ'_0, δ_0 — минералогическая плотность соответственно метасоматически измененной и неизменной породы; C'_0 — содержание устойчивого компонента (в процентах по массе) в метасоматически измененной породе.

Содержание устойчивого компонента в граммах и в объеме в 1 см^3 ($C_0 \times d_0$) как в неизменной, так и в метасоматически переработанной (но не уплотненной) породе — величина постоянная.

Так как изменение содержания устойчивого компонента, выраженного в граммах на объем в 1 см^3 , отражает лишь изменение объема и не зависит от изменения минералогической плотности породы (V_0) и общим объемом метасоматически измененной и уплотненной породы (V'_k)

$$V'_k C'_k d'_k = V_0 C_0 d_0 = V_0 C_0 d_0, \quad (62b)$$

а так как $V'_0 = V_0$, то

$$V'_k C'_k d'_k = V_0 C_0 d_0; \quad V'_k = V_0 \frac{C_0}{C'_k} \cdot \frac{d_0}{d'_k}. \quad (62a)$$

Связь объемной плотности метасоматически измененной породы до уплотнения (d'_0) с объемной плотностью метасоматически измененной породы после уплотнения (d'_k) выразится следующим равенством:

$$\frac{d'_0}{d'_k} = \frac{C_0 d_0}{C'_k d'_k}. \quad (62г)$$

Исходя из зависимости (62г), находится содержание любого компонента t в массовых единицах (P_{0t}) в объеме V_0 неизменной породы

$$P_{0t} = \frac{V_0 d_0 P_{0t}}{100} \quad (63a)$$

и в объеме V'_k метасоматически измененной породы, претерпевшей последующее уплотнение (P_{kt}):

$$P_{kt} = \frac{V'_k d'_k P_{kt}}{100} = \frac{V_0 P_{kt} d_0 C_0}{100 \cdot C'_k}. \quad (63б)$$

Из последних двух уравнений (63a) и (63б) могут быть выведены уравнения, позволяющие определять количество привнесенного (или вынесенного) компонента t (ΔP_{tV}) в расчете на определенный начальный объем неизменной породы (V_0)

$$\Delta P_{tV} = \frac{V_0 d_0}{100} \left(\frac{C_0}{C'_k} P_{kt} - P_{0t} \right) \quad (64a)$$

или, исходя из конечного объема метасоматически измененной и уплотненной породы (V'_k), уравнением

$$\Delta P_{tV} = \frac{V'_k d'_k}{100} \left(P_{kt} - \frac{C'_k}{C_0} P_{0t} \right). \quad (64б)$$

Подобные же формулы могут быть выведены и исходя из зависимости (65)

$$d'_k = d'_0 \frac{C_0}{C'_k}. \quad (65)$$

Для решения вопроса о справедливости предлагаемой И. Ф. Романовичем [81] формулы (61) достаточно сравнить ее с выведенной формулой (64б), предварительно заменив P_{kV} его значением ($P_{kV} = d'_k \cdot V'_k$) и приведя все величины в этих формулах во взаимное соответствие

$$\begin{aligned} \Delta P_{tV} &= \frac{V'_k d'_k}{100} \cdot \frac{P_{kt} (100 - \Pi_0) C_0 \cdot \delta_0 d'_k - P_{0t} (100 - \Pi'_k) C'_k \delta'_k d_0}{(100 - \Pi_0) \cdot C_0 \cdot \delta_0 \cdot d_k} = \\ &= \frac{V'_k \cdot d'_k}{100} \left[P_{kt} - \frac{C'_k}{C_0} \cdot \frac{d_0}{d'_k} P_{0t} \frac{(100 - \Pi'_k)}{(100 - \Pi_0)} \cdot \frac{\delta'_k}{\delta_0} \right] = \frac{V'_k d'_k}{100} \left(P_{kt} - \frac{C'_k}{C_0} P_{0t} \right), \end{aligned}$$

так как $\Pi = (1 - d/\delta) \cdot 100$.

Полнейшее сходство формулы (61) с видоизмененной формулой (64б) позволяет считать обе формулы справедливыми, хотя они и выведены по-разному и имеют различный вид.

Таким образом, исходя из формул (62г) и (63а), а также формулы (64а), можно определить величину привноса — выноса любого элемента i в граммах на геометрический объем в 1000 см^3 ($\Delta r'_i$) следующим образом:

$$\Delta r'_i = - \frac{C_0}{C'_k} r'_{ik} - r_{i0}, \quad (66)$$

где C_0 — содержание устойчивого компонента в массовых процентах (окисла или элемента) в неизменной породе; C'_k — содержание устойчивого компонента в массовых процентах (соответственно окисла или элемента) в метасоматически измененной и уплотненной породе.

Тот факт, что величины C_0 и C'_k могут быть представлены соответственно весовыми процентами как окисла, так и элемента, следует из следующего выражения:

$$\frac{C'_{i0}}{C'_{ik}} = \frac{\frac{C_{00}}{M_0} a_i n_i^0}{\frac{C'_{0k}}{M_0} a_i n_i^0} = \frac{C_{00}}{C'_{0k}}, \quad (67)$$

где C'_{i0} и C'_{ik} — весовое процентное содержание элемента i соответственно в исходной и конечной породах; C_{00} и C'_{0k} — весовое процентное содержание окисла с элементом i , соответственно в исходной и конечной породах; M_0 — формульная масса окисла; a_i — атомная масса элемента i ; n_i^0 — количество атомов элемента i в формуле окисла; r_{i0} и r'_{ik} — содержание элемента i в граммах в объеме породы в 1000 см^3 ; находится по величине объемной плотности веса (d'_k и d_0) и по массовым процентам содержащий окислов с элементом i (P_{00} и P'_{0k}) или самого элемента i (P_{i0} и P'_{ik}).

Определение содержания любого элемента i в метасоматически измененной породе до ее уплотнения (r_{ik}) в геометрическом объеме в 1000 см^3 , равному объему неизменной породы, может быть осуществлено по формуле

$$r_{ik} = r'_{ik} \frac{C_0}{C'_k}. \quad (68)$$

Количество атомов элемента i в метасоматически измененной породе до ее уплотнения (N_{ik}^Y) из расчета на стандартный геометрический объем в $10\,000 \text{ \AA}^3$, которое можно сравнить с содержанием атомов этого же элемента в таком же объеме неизменной породы, что может быть выражено с помощью формулы

$$N_{ik}^Y = N_{ik}^{Y'} \frac{C_0}{C'_k}, \quad (69)$$

где $N_{ik}^{Y'}$ — количество атомов элемента i в стандартном геометрическом объеме (в $10\,000 \text{ \AA}^3$) метасоматически измененной и уплотненной породы; находится по величинам значений ее объемной плотности (d'_k) и процентного массового содержания элемента i или окисла с элементом i с помощью таблиц прил. 1.

Величина привноса — выноса элемента i в количествах атомов из расчета на стандартный геометрический объем ($\Delta N_{ik}^{Y'}$) определяется с помощью формулы

$$\Delta N_{ik}^{Y'} = \frac{C_0}{C'_k} N_{ik}^{Y'} - N_{i0}^Y, \quad (70)$$

где величины N_{i0}^V и $N_{i\kappa}^{V'}$, представляющие количество атомов элемента i в стандартном геометрическом объеме ($10\ 000\ \text{\AA}^3$) исходной неизменной и конечной метасоматически измененной и уплотненной породы, находятся по величинам соответствующей объемной плотности (d'_κ и d_0) и массового процентного содержания элемента i ($P'_{i\kappa}$ и P_{i0}) или окисла с элементом i ($P'_{o\kappa}$ и P_{o0}) с помощью таблиц прил. 1; C_0 и C'_κ — массовое процентное содержание устойчивого компонента (окисла или элемента) в исходной и конечной породах.

Вывод формул для определения баланса вещества метасоматических процессов при последующем изменении геологического объема одной из сравниваемых пород по данным содержания устойчивого минерального компонента. В ряде случаев, особенно при экзогенных процессах, путем петрографических исследований может быть установлено устойчивое поведение какого-либо из минералов (гранат, хромит, шпинель, золото, платина, магнетит и др.). Устойчивый минерал — это такой минерал, объемное содержание которого в процессе метасоматического изменения породы остается постоянным. За устойчивый минерал может быть также принят минерал, частично или полностью подвергнутый псевдоморфному замещению другим минералом (например, хромит, замещаемый магнетитом), но сохранивший первоначальное объемное содержание. Естественно, что установление устойчивого минерала сопряжено с тщательным петрографическим и минералогическим исследованием исходных пород и продуктов их метасоматического изменения и последующего уплотнения. Использование же выводимых ниже формул позволяет устанавливать лишь основную направленность перемещения вещества в процессе метасоматического и, в частности, экзогенного метасоматического образования пород и только в случае проведения представительного опробования.

Так, содержание вещества в метасоматически измененной породе до ее уплотнения может быть определено по формулам

$$P_{i\kappa} = P'_{i\kappa} \frac{L_0}{L'_\kappa}; \quad (71a)$$

$$N_{i\kappa}^V = N_{i\kappa}^{V'} \frac{L_0}{L'_\kappa}, \quad (71b)$$

а величина абсолютного привноса — выноса вещества при метасоматическом изменении исходной породы — по формулам

$$\Delta P'_i = \frac{L_0}{L'_\kappa} P'_{i\kappa} - P_{i0}; \quad (72a)$$

$$\Delta N_{i\kappa}^{V'} = \frac{L_0}{L'_\kappa} N_{i\kappa}^{V'} - N_{i0}^V, \quad (72b)$$

где $P_{i\kappa} = P'_{i\kappa}$ — содержание элемента i в граммах в геометрическом объеме $1000\ \text{см}^3$, а $N_{i\kappa}^V = N_{i0}^{V'}$ — количество атомов элемента i в стандартном геометрическом объеме ($10\ 000\ \text{\AA}^3$) метасоматически измененной породы (конечной) до ее уплотнения; $\Delta P'_i$ — величина привноса — выноса элемента i в граммах из расчета на геометрический объем в $1000\ \text{см}^3$ (до уплотнения) в процессе метасоматического преобразования исходной породы; $\Delta N_{i\kappa}^{V'}$ — величина привноса — выноса атомов элемента i в расчете на стандартный геометрический объем

в $10\,000 \text{ \AA}^3$ (до уплотнения) в процессе метасоматического преобразования исходной породы; P'_{ik} и P_{i0} — содержание элемента i в граммах в геологическом объеме 1000 см^3 соответственно конечной метасоматически измененной и уплотненной породы и исходной неизменной породы; находится по величинам объемной плотности (d'_k и d_0) и массового процентного содержания элемента i (P'_{ik} и P_{i0}) или оксида с элементом i ($P'_{ок}$ и $P_{о0}$) с помощью таблиц прил. 1; L'_k и L_0 — содержание в объемных процентах устойчивого минерала соответственно в конечной метасоматически измененной и уплотненной породе и исходной неизменной породе; N'_{ik} и N_{i0} — количество атомов элемента i в стандартном геометрическом объеме ($10\,000 \text{ \AA}^3$) соответственно конечной метасоматически измененной и уплотненной породы и исходной неизменной породы; находится по данным определений объемной плотности (d'_k и d_0) и массового процентного содержания элемента i (P'_{ik} и P_{i0}) или оксида с элементом i ($P'_{ок}$ и $P_{о0}$).

**Расчет баланса вещества
при изменении геологического объема
одной из сравниваемых пород
по величине линейного уплотнения**

Метод применим, когда сохраняется полосчатость пород, но расстояния между прослоями уменьшаются за счет уплотнения пород. Такой случай описан А. А. Глаголевым [17] для руд, возникших за счет железистых кварцитов Курской магнитной аномалии при выщелачивании из кварцитов кремнезема и одновременного или последующего их уплотнения.

Определение первичного объема пород до их уплотнения (V_0) может производиться по формуле (73а), а определение объемной массы пород после метасоматизма, в том числе и выщелачивания, но до уплотнения (d'_0), — по формуле (73б)

$$V_0 = V'_k K_y; \quad (73a)$$

$$d'_0 = \frac{1}{K_y} d'_k, \quad (73b)$$

где V'_k — конечный объем уплотненной породы; d'_k — объемная масса (вес) измененной и уплотненной породы; K_y — коэффициент усадки,

$$K_y = \frac{l_0}{l_k}, \quad (73b)$$

где l_0 — расстояние между двумя прослоями в неизменной породе; l_k — расстояние между этими же прослоями в метасоматически измененной и уплотненной породе.

Все дальнейшие расчеты привноса — выноса вещества производятся таким же образом, как и при расчетах по данным содержания устойчивого компонента.

УСТАНОВЛЕНИЕ СВЯЗИ МЕЖДУ ПРОДУКТАМИ БИМЕТАСОМАТИЗМА И БАЛАНСОМ ВЕЩЕСТВА ЭТОГО ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ ПОРОД

Среди метасоматических процессов особое место принадлежит контактово-реакционным явлениям и, в частности, процессам биметасоматизма [47]. Процессы биметасоматического минерало- и породообразования описаны для скарнов [15, 28, 29, 32, 44, 46, 125 и др.], флогопит-диопсидовых пород [45, 47], для лазуритовых пород [45, 47], тальковых месторождений [80, 81] и др. Очень часто доказательством биметасоматического генезиса пород считают наличие и них и во вмещающих их образованиях определенной зональности. Но наличие правильной зональности еще не может свидетельствовать о биметасоматическом образовании пород, что, в частности, для скарнов было показано в целом ряде работ. Автором настоящей работы также подчеркивалось [82], что относить скарны к «диффузионно-биметасоматическим» можно лишь при наличии убедительных доказательств в пользу их биметасоматического генезиса и, в частности, при приведении данных привноса и выноса вещества на единицу объема пород и на всю мощность каждой зоны.

Ниже предлагается ряд формул, позволяющих решать вопрос о возможности образования контактовых пород в результате процессов биметасоматоза. При этом в эти формулы вводятся соответствующие коэффициенты, учитывающие возможное изменение (уплотнение) геологического объема пород в результате стресса. На такое изменение объема пород в зоне эндоскарна в результате «метасоматической контракции» указывает Д. С. Коржинский [44], а в тальковых месторождениях — И. Ф. Романович [80, 81]. При этом оба исследователя указывают на инертное поведение в этом процессе алюминия. Биметасоматический генезис зон может считаться доказанным, если все части формул (75а), (75б), (79), (80а), (80б) или (81) будут равны или близки между собой как для каждого любого отдельного элемента, так и для всех привносимых и выносимых элементов; при этом отношение $C_0 : C'_k = 1$ (65), если процессы биметасоматизма происходят в условиях постоянства геологического объема, а величины ширины (l') зоны, определенные по коэффициенту перемещения D_s для каждого элемента {см. (76а) и (76б), (77а) и (77б), (78а) и (78б)} с помощью формул (82а) и (82б), будут также близки как между собой, так и с наблюдаемой шириной зоны. Если геологические данные указывают на уплотнение пород одной из зон за счет сокращения пористости, возникающей в результате выноса элементов за ее пределы в другие зоны, т. е. в результате «метасоматической контракции», то подстановка в формулы (75), (79), (80), (81) соответствующих содержаний устойчивого компонента должна привести к совпадению между собой результатов расчета содержаний элементов каждой части этих равенств или по крайней мере сделать их более близкими между собой, нежели это имело место до введения поправки за счет изменения геологического объема пород в результате уплотнения. То же касается и величины ширины каждой зоны метасоматического изменения и уплотнения — см. формулы (82а) и (82б). Если после введения такой поправки различия в результатах расчета между каждой частью равенств (75), (79), (80) или (82б) станут еще больше, а ширина зоны, устанавливаемая с помощью «коэффициента перемещения» одного из элементов, еще значительно отклонится от ширины зоны, определяемой с помощью «коэффициента перемещения» других элементов, и от наблюдаемой,

то предположение об изменении геологического объема неоправдано, и результаты геологических наблюдений требуют дальнейших уточнений.

И. Ф. Романовичем [81] был предложен ряд формул для расчета баланса вещества в процессе биметасоматического минерало- и породообразования. Но весьма усложненный характер формулы (74) привел к тому, что и все остальные формулы, выведенные И. Ф. Романовичем [81] — см. формулы (10), (11), (12), (13), также очень сложны. Поэтому для определения выноса компонента S^* из одной зоны a , возникающей в породе состава A , обогащенной компонентом S , в смежную с ней зону b , развивающуюся по породе состава B , обедненной этим компонентом S , в процессе биметасоматоза полезно пользоваться вместо принципиально верной формулы (74) И. Ф. Романовича

$$\frac{\bar{P}_{KV}^a}{d_K^a} \cdot \frac{P_{0S}^a (100 - \Pi_K^a) C_K^a \delta_0^a d_0^a - P_{KS}^a (100 - \Pi_0^a) C_0^a \delta_K^a d_K^a}{(100 - \Pi_0^a) C_0^a \delta_0^a} =$$

$$= \frac{P_{KV}^b}{d_K^b} \cdot \frac{P_{KS}^b (100 - \Pi_0^b) C_0^b \delta_0^b d_0^b - P_{0S}^b (100 - \Pi_K^b) C_K^b \delta_K^b d_K^b}{(100 - \Pi_0^b) C_0^b \delta_0^b} \quad (74)$$

более простой формулой

$$V_K^a d_K^a \left(\frac{C_K^a}{C_0^a} P_{0S}^a - P_{KS}^a \right) = V_K^b d_K^b \left(P_{KS}^b - \frac{C_K^b}{C_0^b} P_{0S}^b \right), \quad (75a)**$$

$$V_K^a = V_K^b$$

V_K^a — объем породы в рассматриваемой зоне a метасоматического изменения и уплотнения, развитой по породе состава A (в 1 см^3 , 1 ддм^3 или 1 м^3); V_K^b — то же, для зоны b в породе исходного состава B ; d_K^a и d_K^b — объемная масса метасоматически измененной и уплотненной породы соответственно в зоне a , развитой в породе A , и в зоне b , развитой за счет породы B ; d_0^a и d_0^b — объемная масса неизмененных пород A и B , за счет которых возникли соответственно зоны a и b ; C_0^a и C_0^b — содержание устойчивого компонента (в массовых % оксида или элемента) в неизмененных породах соответственно составов A и B , за счет которых возникли зоны изменения a и b ; C_K^a и C_K^b — содержание устойчивого компонента (в массовых % оксида или элемента) в метасоматически измененной и уплотненной породе соответственно в зоне a и b ; P_{KS}^a и P_{KS}^b — конечное содержание компонента S (в массовых % оксида или элемента) соответственно в зонах a и b ; P_{0S}^a и P_{0S}^b — начальное содержание компонента S (в массовых % оксида или элемента) в неизмененных породах соответственно составов A и B . Если последующего изменения объема не происходит, то $C_0^a d_0^a = C_K^a \cdot d_K^a$ и $C_0^b \times d_0^b = C_K^b \cdot d_K^b$; формула (75a) принимает вид

$$V_K^a \cdot (d_0^a P_{0S}^a - P_{KS}^a d_K^a) = (P_{KS}^b d_K^b - P_{0S}^b d_0^b) V_K^b \quad (75b)$$

* Содержание компонента S в приводимых формулах (74), (75), (76), (77), (79), (81) и (82) представлено в форме оксида или элемента и выражено в граммах (D_S) или в процентах по массе (P_S).

** Все условные обозначения в индексом a относятся к одной зоне a в породе состава A , а с индексом b к смежной с нею зоне b , развитой по породе состава B .

Коэффициент перемещения D_S , выраженный И. Ф. Романовичем [81] в виде формул (11) и (12), в которых D_{-S}^a — коэффициент выноса и D_{+S}^b — коэффициент привноса, исходя из формулы (75а), будет представлен равенствами

$$D_{-S}^a = \left(\frac{C_{\kappa}^a}{C_0^a} P_{0S}^a - P_{\kappa S}^a \right) d_{\kappa}^a, \quad (76a)$$

$$D_{+S}^b = \left(P_{\kappa S}^b - \frac{C_{\kappa}^b}{C_0^b} P_{0S}^b \right) d_{\kappa}^b. \quad (76b)$$

В этих формулах величина D_S выражена в граммах на 1 см³ и представлена в окисной форме, если значение массового процентного содержания компонента S (P_S) представлено в окисной форме, и в элементной форме, если значение массового процентного содержания относится к компоненту S , выраженному в форме элемента (P_i).

Коэффициент перемещения может быть выражен и массой (в граммах) элемента i , исходя из геометрического объема в 1000 см³ с помощью формул

$$Dp_{-i}^a = P_{i0}^a - \frac{C_n^a}{C_{\kappa}^a} P_{i\kappa}^a; \quad (77a)$$

$$Dp_{+i}^b = \frac{C_n^b}{C_{\kappa}^b} P_{i\kappa}^b - P_{i0}^b, \quad (77b)$$

где Dp_{-i}^a — коэффициент выноса элемента i из зоны a в породе состава A ; Dp_{+i}^b — коэффициент привноса элемента i в зону b породы состава B ; $p_{i\kappa}$ и p_{i0} — содержания элемента i в граммах в геометрическом объеме 1000 см³ соответственно конечной метасоматически измененной и уплотненной породы (a и b) и исходной породы (A и B) в зоне a ($p_{i\kappa}^a$ и p_{i0}^a) и в зоне b ($p_{i\kappa}^b$ и p_{i0}^b); находится по данным объемной плотности пород (d_{κ}^a , d_0^a , d_{κ}^b , d_0^b) и массового процентного содержания элемента i или окисла с элементом i в данной породе; см. формулы (23а) и (23б).

Нахождение коэффициента перемещения каждого элемента i в атомной форме (DN_i), исходя из стандартного геометрического объема породы (10 000 Å³), может быть осуществлено с помощью формул

$$DN_{-i}^a = N_{i0}^a - \frac{C_n^a}{C_{\kappa}^a} N_{i\kappa}^a; \quad (78a)$$

$$DN_{+i}^b = \frac{C_n^b}{C_{\kappa}^b} N_{i\kappa}^b - N_{i0}^b, \quad (78b)$$

где DN_{-i}^a — коэффициент выноса элемента i из зоны a в породе состава A , первоначально обогащенной элементом i ; DN_{+i}^b — коэффициент привноса элемента i в зону b породы состава B , первоначально обедненной элементом i ; N_{i0}^a и $N_{i\kappa}^a$ — количество атомов элемента i в стандартном геометрическом объеме (10 000 Å³) соответственно исходной (породы состава A) и возникшей за ее счет метасоматической породы в зоне a , претерпевшей последующее уплотнение; N_{i0}^b и $N_{i\kappa}^b$ — то же, что и N_{i0}^a и $N_{i\kappa}^a$, но для пород соответственно состава B и состава зоны b ; $N_{i\kappa}^a$, N_{i0}^a , N_{i0}^b и $N_{i\kappa}^b$ находятся по данным объемной плотности

$(d_{\kappa}^a, d_0^a, d_0^b, d_{\kappa}^b)$ и содержания в массовых процентах соответствующего элемента i или оксида с элементом i с помощью формулы (21a) и формулы (1) в прил. 1.

Баланс привноса — выноса любого компонента S при образовании биметасоматической зональности в контакте пород состава A , обогащенных компонентом S , и состава B , обедненных этим компонентом S , выразится формулой

$$\begin{aligned} & (V_{\kappa} D_{-S}^1)^{1a} + (V_{\kappa} D_{-S}^2)^{2a} + \dots + (V_{\kappa} D_{-S}^n)^{na} = \\ & = (V_{\kappa} D_{+S}^1)^{1b} + (V_{\kappa} D_{+S}^2)^{2b} + \dots + (V_{\kappa} D_{+S}^n)^{nb}, \end{aligned} \quad (79)$$

$(V_{\kappa} \cdot D_{-S}^1)^{1a}$ — количество вещества S (в граммах), вынесенного из первой зоны (1a) метасоматического изменения и уплотнения пород исходного состава A из расчета на определенный конечный объем этой зоны V_{κ} ; $(V_{\kappa} \cdot D_{-S}^2)^{2a}$ — то же для второй зоны (2a) и т. д., вплоть до зоны na , возникающей за счет пород состава A ; $(V_{\kappa} \cdot D_{+S}^1)^{1b}$, $(V_{\kappa} \cdot D_{+S}^2)^{2b}$ и т. д. — количество привнесенного компонента S соответственно в первую (1b), вторую (2b) и т. д. зоны метасоматического изменения и уплотнения пород состава B из расчета на конечный объем V_{κ} каждой зоны (1b, 2b и т. д.). При этом $V_{\kappa} = \text{const}$ (в cm^3).

При выражении содержания рассматриваемого компонента в граммах в элементной форме ($S = i$) из расчета на геометрический объем в 1 cm^3 формула (79) примет вид

$$Dp_{-i}^{1a} + Dp_{-i}^{2a} + \dots + Dp_{-i}^{na} = Dp_{+i}^{1b} + Dp_{+i}^{2b} + \dots + Dp_{+i}^{nb}. \quad (80a)$$

Баланс привноса — выноса количеств атомов любого компонента i при образовании биметасоматической зональности в контакте пород состава A , первоначально обогащенных элементом i , с породами состава B , первоначально обедненными элементом i , из расчета на стандартный геометрический объем в 1000 \AA^3 пород каждой зоны выразится формулой

$$DN_{-i}^{1a} + DN_{-i}^{2a} + \dots + DN_{-i}^{na} = DN_{+i}^{1b} + DN_{+i}^{2b} + \dots + DN_{+i}^{nb}, \quad (80b)$$

где DN_{-i}^{1a} — количество атомов элемента i , вынесенных из первой зоны (1a) метасоматического изменения и уплотнения пород исходного состава A из расчета на стандартный геометрический объем (10000 \AA^3) этой зоны до уплотнения ее пород; $DN_{-i}^{2a}, \dots, DN_{-i}^{na}$ — то же для второй зоны (2a) и т. д., вплоть до зоны na , возникшей за счет породы исходного состава A ; $DN_{+i}^{1b}, DN_{+i}^{2b}, \dots, DN_{+i}^{nb}$ — количество атомов элемента i , привнесенных в первую (1b), вторую (2b) и т. д., вплоть до зоны nb метасоматического изменения и уплотнения пород состава B из расчета на стандартный геометрический объем (10000 \AA^3) каждой зоны (1b, 2b и т. д.) до уплотнения их пород.

Если изменения геометрического объема пород отсутствуют, то коэффициент $C_0 : C_{\kappa}$ в формулах (76a), (76b), (77a), (77b), (78a), (78b) равен 1.

Можно, приняв длину и глубину каждой зоны за величины постоянные, равные 1 м, вместо величины V_{κ} оперировать значением ширины зоны f_{κ} , тогда $V_{\kappa} = f_{\kappa}$ кубических единиц. Если левая часть уравнения (79) будет соответствовать его правой части для любых компонентов, то биметасоматический характер зоны будет доказан; если же этого соответствия нет, то это указывает на отсутствие процессов биметасоматизма или на смешанный метасоматический характер генезиса зон.

Для доказательства биметасоматического характера зональности можно пользоваться также формулой (82б), получаемой следующим образом:

$$V_k^a D_{-s}^a = V_k^b D_{+s}^b; \quad l^a h^a f^a D_{-s}^a = l^b h^b f^b D_{+s}^b; \quad (81)$$

$$f^b = \frac{l^a h^a f^a D_{-s}^a}{l^b h^b D_{+s}^b} = \frac{l^a h^a f^a D p_{-l}^a}{l^b h^b D p_{+l}^b} = \frac{l^a h^a f^a D N_{-l}^a}{l^b h^b D N_{+l}^b}, \quad (82a)$$

l, h, f — соответственно длина, глубина и ширина (в м) зоны метасоматического изменения и последующего уплотнения (если таковое имело место) для зоны биметасоматического изменения a в породе исходного состава A и зоны b , развитой в породе исходного состава B . Если принять: $l^a = l^b = h^a = h^b = 1$ м, то

$$f^b = f^a \cdot \frac{D_{-s}^a}{D_{+s}^b} = f^a \cdot \frac{D p_{-l}^a}{D p_{+l}^b} = f^a \cdot \frac{D N_{-l}^a}{D N_{+l}^b}. \quad (82б)$$

В этом случае величины f^b , определенные по коэффициенту перемещения различных компонентов, должны быть, с одной стороны, равны или близки между собой, с другой — близки к f^a наблюдаемой. В противном случае предположение о биметасоматическом генезисе зональности не оправдано.

Глава III

УСТАНОВЛЕНИЕ СВЯЗИ МЕЖДУ ХИМИЗМОМ; ПРОЦЕССА МЕТАСОМАТИЗМА И ХАРАКТЕРОМ МЕТАСОМАТИЧЕСКОГО МИНЕРАЛО- И ПОРОДООБРАЗОВАНИЯ И НЕКОТОРЫЕ ПРОБЛЕМЫ ЗАВИСИМОСТИ МИНЕРАЛЬНОГО СОСТАВА ОТ ВНЕШНИХ УСЛОВИЙ

В настоящей главе рассматриваются некоторые аспекты выявления зависимости минерального состава от внешних условий и установления особенностей химизма процесса метасоматизма по характеру метасоматического минерало- и породообразования на основе атомно-объемной системы.

§ 1. ОБЪЕМНЫЕ СООТНОШЕНИЯ ПРИ МЕТАСОМАТИЧЕСКИХ И МЕТАМОРФИЧЕСКИХ РЕАКЦИЯХ ЗАМЕЩЕНИЯ

Существующие методы установления зависимости между характером продуктов метасоматического минералообразования и химизмом самого процесса, разработанные главным образом в трудах школы Д. С. Коржинского [18, 28, 36, 48, 57, 58, 69, 70, 71, 99 и др.], имеют очень большое значение в познании процесса метасоматического минералообразования. Эти исследования основаны на химических предпосылках реакций минералообразования, но, как совершенно справедливо указывает Н. И. Наконник [61], при метаморфизме, в том числе и метасоматизме, химические реакции не отвечают обычным формулам сбалансированных химических равенств, основанных на равенстве масс — эквивалентных количеств вещества, требующих определенного изменения объема.

Следовательно, для выявления особенностей химизма процесса метасоматического минералообразования необходимо учитывать не только химическую направленность реакции, но и геологические факторы, регулирующие особенности этой реакции. Такими факторами являются объемные соотношения при реакциях замещения одного минерала другим, методика установления которых впервые была рассмотрена Ю. В. Каазицыным [33], предложившим «метод молекулярных объемов» для изучения метасоматически измененных пород. К подобным выводам пришли В. Г. Боголепов [6], П. Н. Кобзарь [42], В. Г. Кушев [55, 56], А. С. Павленко [66] и др. Но объемные соотношения при реакциях замещения одного минерала другим и вывод таких реакций замещения с не меньшим, а пожалуй, и с большим успехом могут быть осуществлены на базе атомно- и формульно-объемной систем [90]. Преимущество атомно- и формульно-объемной систем в установлении реакций замещения перед другими методиками заключается в большей простоте и универсальности этих систем, позволяющих выявлять закономерности не только мономинеральных, но и полиминеральных реакций метасоматического и метаморфического преобразования горных пород, а также увязывать эти закономерности с петрохимическими и термодинамическими параметрами как метаморфических и метасоматических, так и магматических систем [83, 87, 90].

При рассмотрении реакций минералообразования употребляются понятия «система реакции» и «подсистема реакции». Под системой реакции понимается геометрический объем, т. е. с учетом пористости, в пределах которого протекает реакция. Под подсистемой реакции понимается объем массы исходного минерального вещества, подвергающегося замещению.

Исходя из положения, что при псевдоморфном замещении [19] суммарный объем конечных продуктов реакции не может быть больше суммарного объема исходных минералов, можно сделать выводы.

1. Данная реакция минералообразования в действительности протекает так, как ее изображает химическая реакция, если объем конечных твердых продуктов меньше или равен суммарному объему исходных продуктов. Но в первом случае в конечном продукте возникает пористость, равная разнице объемов исходных и конечных минералов (см. пример 2), а во втором пористость отсутствует. Такие реакции замещения, приводящие к образованию твердых продуктов замещения только в пределах объема и формы исходного минерала, т. е. непосредственно на месте реакции, которая происходит между веществом исходного минерала и воздействующим реагентом, могут быть выделены под названием *псевдоморфизации* или *псевдоморфного замещения*.

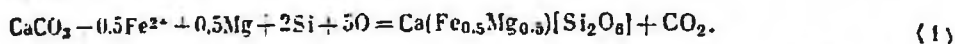
2. При замещении одного минерала другим образуется промежуточный продукт реакции — из освобожденных компонентов (см. пример 3). Суммарный объем конечных продуктов больше, чем исходных, но объем метасоматически развивающихся минералов меньше объема исходных минералов. В этом случае только часть компонентов, освобожденных в процессе метасоматической реакции, отложится в виде минерала, компенсируя разницу объема между исходными и метасоматически образовавшимися минералами, а другая часть будет вынесена. Такой тип реакции может быть назван *реакцией псевдоморфизации* или *псевдоморфного замещения с компенсацией объема в результате перераспределения промежуточного продукта реакции*. Это следует отражать и в записи самой реакции.

3. Объем продукта метасоматического замещения больше, чем объем исходных минералов. В этом случае только часть первообразовавшегося минерала от общего его количества, **возникновения** которого допускается реакцией,

в действительности будет метасоматически замещать исходный минерал, а другая его часть будет вынесена за пределы объема исходных продуктов реакции. Такой тип реакций может быть назван *реакцией замещения с перетолжением*, и этот факт также должен получать отражение в записи характера реакции (см. пример 1).

Методика расчета реакций замещения по предлагаемой формульно-объемной системе показана на следующих трех примерах, отражающих три типа реакций замещения, в которых предусматривается устанавливать объемы исходных и конечных продуктов реакций в количествах стандартных объемов — $V_{\text{стант}}^m = V_c$.

Пример 1. Имеем химическую реакцию образования салита ($Pm = Hed - Di$) за счет кальцита (Cc):



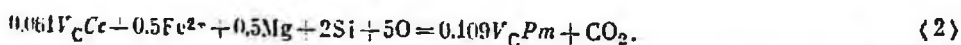
Коэффициент каждого из минералов в химической реакции $\langle 1 \rangle$ (K_m ; K_{m_0} — коэффициент исходного минерала — $K_{Cc} = 1$, K_{m_k} — коэффициент конечного продукта реакции — $K_{Pm} = 1$) умножается на постоянный для этого минерала коэффициент Q_m , который находится по таблицам прил. 5 (графа 21) соответственно составу минерала или расчетным путем — см. формулу (12) в прил. 5.

$$Q_{Cc} = 0,061V_c; \quad Q_{Pm} = \frac{0,5Q_{Hed} + 0,5Q_{Di}}{2} = 0,109V_c.$$

Путем такого перемножения определяется величина объема (в долях от стандартного объема массы вещества $V_c = 1000 \text{ \AA}^3$) каждого минерала (V_m'): участвующего в реакции

$$V_m' = Q_m K_m. \quad (83)$$

В результате реакция $\langle 1 \rangle$ примет вид



Далее устанавливается, какую часть от объема исходного минерала $m_0 (V_{m_0}')$ или суммы минералов $\sum m_0 (\sum V_{m_0}')$ составляет объем конечного продукта реакции одного минерала $m_k (V_{m_k}')$ или суммы нескольких минералов $\sum m_k (\sum V_{m_k}')$

$$V_{m_k}' = \left(\frac{V_{m_k}'}{V_{m_0}'} \right) \cdot V_{m_0}' = \left(\frac{Q_{m_k} K_{m_k}}{Q_{m_0} K_{m_0}} \right) V_{m_0}'; \quad (84a)$$

$$\sum V_{m_k}' = \left(\frac{\sum V_{m_k}'}{\sum V_{m_0}'} \right) \cdot \sum V_{m_0}' = \left[\frac{\sum (Q_{m_k} K_{m_k})}{\sum (Q_{m_0} K_{m_0})} \right] \cdot \sum V_{m_0}'. \quad (84b)$$

Следовательно, объем продукта реакции — салита (V_{Pm}') составляет от объема кальцита (V_{Cc}')

$$\frac{V_{Pm}'}{V_{Cc}'} = \frac{V_{Pm}'}{V_{Cc}'} \cdot V_{Cc}' = \frac{Q_{Pm} K_{Pm}}{Q_{Cc} K_{Cc}} = \frac{0,109V_c}{0,061V_c} \cdot V_{Cc}' = 1,794V_{Cc}'.$$

То, что объем конечного продукта реакции — салита больше объема исходного кальцита, указывает на то, что такая реакция возможна лишь в случае выноса части вещества широксена за пределы объема, занимаемого исходным кальцитом, т. е. за пределы подсистемы реакции. Поэтому запись реакции в том

виде, в каком она дана <1>, не имеет геологического смысла, так как не учитывает кристаллохимических особенностей ее исходных и конечных продуктов.

Для установления реакции минералообразования, отражающей геологическую сущность процесса, необходимо установить величину коэффициента изобъемности конечного продукта реакции (K_{mk}^V) минерала m_k , указывающего, какое количество формульных единиц этого минерала m_k (в данном случае пироксена) может образоваться при изобъемном, т. е. псевдоморфном, метасоматическом замещении исходного минерала (в данном случае кальцита)

$$K_{mk}^V = \frac{K_{mk} \sum V'_{m0}}{V'_{mk}} = \frac{\sum (Q_{m0} K_{m0})}{Q_{mk}}, \quad (85a)$$

где $\sum (V'_{m0}) = \sum (Q_{m0} K_{m0})$ — общий объем исходных минералов породы; если исходные продукты реакции представлены одним минералом, как в рассматриваемом примере, то формула (85a) примет вид

$$K_{mk}^V = \frac{K_{mk} V'_{m0}}{V'_{mk}} = \frac{Q_{m0} K_{m0}}{Q_{mk}}. \quad (85b)$$

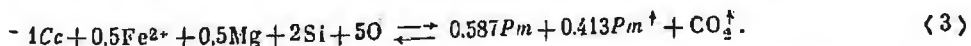
Для рассматриваемой реакции <1> коэффициент изобъемности $K_{Pm}^V = = K_{Pm}^V$ и находится:

$$K_{Pm}^V = \frac{K_{Pm} V'_{Cc}}{V'_{Pm}} = \frac{1 \cdot 0.061 V_C}{0.109 V_C} = 0.587;$$

$$K_{Pm}^V = \frac{Q_{Cc} K_{Cc}}{Q_{Pm}} = \frac{0.061 V_C}{0.109 V_C} = 0.587.$$

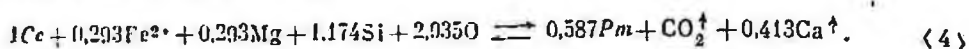
Следовательно, на месте одной формульной единицы кальцита при его метасоматическом замещении сможет возникнуть лишь 0,587 части формульной единицы пироксена, а компоненты, составляющие 0,413 части формульной единицы пироксена, будут вынесены за пределы подсистемы данной реакции, в частности часть пироксена может быть отложена в поровых пустотах исходного карбоната, если таковые имели место.

Поэтому геологически более правильно реакция <1> будет выражена в виде реакции <3>, предусматривающей, что выносимое количество вещества пироксена из подсистемы данной реакции отложится в поровых пустотах в непосредственной близости, т. е. в пределах системы реакционного минералообразования



В правой части реакции <3> помимо пироксена, замещающего кальцит, имеется пироксен, выносимый за пределы подсистемы реакции (Pm^{\dagger}). Для изображения реакции замещения, наиболее строго отвечающей ее геологическому смыслу в условиях отсутствия пористости в системе реакции, необходимо этот «выносимый» пироксен исключить из правой части реакции, одновременно из левой части реакции соответствующее количество Fe^{2+} , Mg и Si и введя в правую часть реакции соответствующее количество выносимых атомов Ca .

В этом случае реакция, наиболее строго отвечающая геологическому существованию ее процесса, примет вид



После проведенного рассмотрения сущности преобразования химической формы записи реакции замещения одного минерала другим $\langle 1 \rangle$ в геолого-химическую форму $\langle 4 \rangle$ можно рекомендовать следующую схему расчета геолого-химической формы записи реакцией мономинерального замещения.

Устанавливается химический характер замещения одного или нескольких исходных минералов (m_0) вновь образовавшимся минералом (m_k) (реакция $\langle 1 \rangle$). Затем для каждого минерала реакции находится коэффициент Q_m с помощью таблиц прил. 5 (графа 21) или расчетным путем по формуле (12) в этом приложении. С помощью формул (83) или (84) устанавливается, справедлива ли химическая форма записи реакции. Если объем конечных продуктов реакции (V_{m_k} или $\sum V_{m_k}$) меньше или равен объему исходных минералов (V_{m_0} или $\sum V_{m_0}$), то химическая форма записи соответствует и геологическому характеру реакции.

Если объем конечных продуктов реакции (V_{m_k} или $\sum V_{m_k}$) больше объема исходных минералов (V_{m_0} или $\sum V_{m_0}$), то химическая форма записи не соответствует геолого-химическому характеру реакции. В этом случае по формуле (85а) или (85б), исходя из коэффициентов для каждого минерала в химической реакции (K_{m_0} и K_{m_k}) и коэффициентов Q_{m_0} и Q_{m_k} , вычисляется коэффициент изобъемности конечного продукта реакции минерала m_k ($K_{m_k}^V$; для Pm — $K_{Pm}^V = 0,587$), указывающий истинное количество формульных единиц этого минерала, которое может возникнуть за счет K_{m_0} формульных единиц исходного минерала m_0 (см. реакции $\langle 1 \rangle$, $\langle 4 \rangle$, в которых $K_{m_0} = K_{Ca}^V = 1$). Затем вычисляются коэффициенты для каждого компонента S, привносимого в процессе данной геолого-химической (K_{+S}^V) реакции по формуле

$$K_{+S}^V = K_{+S} K_{m_k}^V, \quad (86)$$

где K_{+S} — коэффициент перед данным привносимым химическим компонентом S в левой части химической реакции (реакция $\langle 1 \rangle$). В рассматриваемом случае $S = i$, так как все привносимые элементы изображены в атомной форме, т. е. $K_{+S} = K_{+i}$. Так, $K_{+Si}^V = K_{+Si} \cdot K_{Pm}^V = 2\text{Si} \cdot 0,587 = 1,174 \text{ Si}$.

После этого вычисляются коэффициенты для каждого выносимого в процессе данной геолого-химической реакции химического компонента S, помещаемого в правой части реакции (K_{-S}^V) по формулам

$$K_{-S}^V = K_{m_0} n_{m_0}^S - K_{m_k}^V n_{m_k}^S, \quad (87a)$$

$$K_{-S}^V = \sum (K_{m_0} n_{m_0}^S) - \sum (K_{m_k}^V n_{m_k}^S). \quad (87b)$$

Если какой-либо привносимый компонент S (например, H_2O или CO_2 и др.) содержит элемент i , выносимый в процессе реакции, то определение K_{-i}^V производится по формуле

$$K_{-i}^V = K_{m_0} n_{m_0}^i + K_{+S}^V n_S^i - \sum K_{m_k}^V n_{m_k}^i, \quad (88)$$

где $n_{m_0}^S$ и $n_{m_k}^S$ — количество единиц компонента S (окислов или атомов); $n_{m_k}^i$ и $n_{m_0}^i$ — количество атомов элемента i в формульной единице соответственно

исходного минерала m_0 и конечного минерала m_k ; находятся, исходя из формульных единиц минералов, приведенных в химической реакции (см. реакцию $\langle 1 \rangle$); n_i^s — количество атомов элемента i в компоненте S .

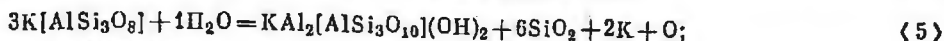
В рассматриваемой реакции выносимые компоненты S представлены CO_2 и Ca .

Так, исходя из реакции $\langle 1 \rangle$ и коэффициента пористости для P_m имеем

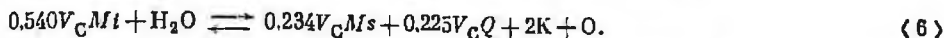
$$K_{\text{CO}_2}^V = K_{\text{Ce}} \cdot 1\text{CO}_2 - K_{P_m}^V \cdot 0(\text{CO}_2) = 1\text{CO}_2;$$

$$K_{\text{Ca}}^V = 1 \cdot 1 - 0,587 \cdot 1 = 0,413\text{Ca}.$$

* *Пример 2.* Имеем реакцию замещения микроклина (Mi) мусковитом (Ms) с образованием кварца (Q) в химической форме записи



$$Q_{Mi} = 0,180V_C; \quad Q_{Ms} = 0,234V_C; \quad Q_Q = 0,0375V_C \text{ (см. прил. 5);}$$



С помощью формулы (84б) устанавливается суммарный объем конечных продуктов реакции $V'_{Ms} + V'_Q$ по отношению к объему исходного микроклина (V'_{Mi})

$$\sum \frac{V'_{Ms+Q}}{V'_{Mi}} = \frac{Q_{Ms}K_{Ms} + Q_Q K_Q}{Q_{Mi}K_{Mi}} = \frac{0,234V_C + 0,225V_C}{0,540V_C} = 0,85V'_{Mi}.$$

Следовательно, химическая форма записи данной реакции справедлива геологически. При этом как мусковит, метасоматически замещающий микроклин, так и SiO_2 , освобождающийся в процессе этого замещения, могут целиком образовывать твердые продукты (минералы) в пределах подсистемы реакции, так как их суммарный объем меньше объема исходного минерала. В конечных продуктах рассматриваемой реакции возникает пористость (Π), величина которой может быть установлена в объемных процентах по формуле

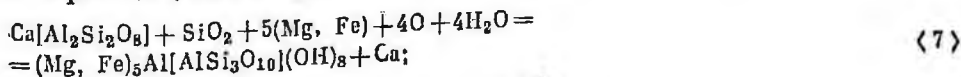
$$\Pi = \frac{\sum V'_{m_0} - \sum V'_{m_k}}{\sum V'_{m_0}} \cdot 100\% = \left(1 - \frac{\sum V'_{m_k}}{\sum V'_{m_0}} \right) \cdot 100\%, \quad (89)$$

где $\sum V'_{m_k}$ и $\sum V'_{m_0}$ — суммарный объем (в V_{const}) соответственно исходных и конечных минеральных продуктов реакции.

Пористость, возникающая в кварц-мусковитовом агрегате, развивающемся за счет микроклина при отложении всего освободившегося из микроклина SiO_2 в виде кварца в пределах подсистемы реакции, будет равна

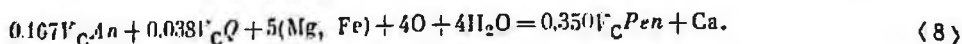
$$\Pi = \frac{0,59V_C - 0,459V_C}{0,540V_C} \cdot 100\% = 15\%.$$

Пример 3. Реакция замещения анортита (An) пеннином (Pen) при условии замещения недостающего SiO_2 из кварца (Q), находящегося в пределах системы реакции, имеет вид



$$Q_{An} = 0,167V_C; \quad Q_Q = 0,038V_C; \quad Q_{Pen} = 0,350V_C.$$

По формуле (83) определяется величина объема каждого минерала в данной реакции



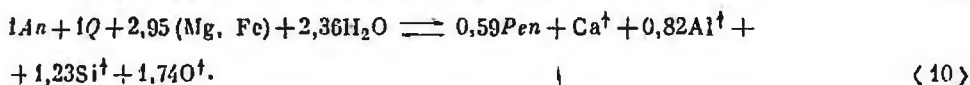
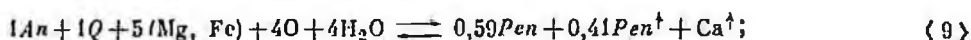
Устанавливается доля объема Pen от объема исходных An и Q по формуле (84б)

$$\sum \frac{V_{Pen}}{An+Q} = \frac{0,350V_C}{0,167V_C + 0,0381V_C} = \frac{0,350V_C}{0,207V_C} = 1,69 (V_{An} + V_Q).$$

Следовательно, реакция в том виде, в каком она записана $\langle 7 \rangle$ и $\langle 8 \rangle$, геологически неосуществима. Определяем коэффициент изобъемности пенниппа по формуле (85а)

$$K_{Pen}^V = \frac{1 \cdot 0,167V_C + 0,0381V_C}{0,350V_C} = 0,59.$$

Реакция $\langle 7 \rangle$ может быть исправлена и записана одним из двух способов



Первая реакция $\langle 9 \rangle$ предусматривает образование за счет одной формульной единицы анортита и одной формульной единицы кварца в результате их метасоматического замещения 0,59 части формульной единицы пенниппа при выносе 0,41 ее части за пределы подсистемы реакции. Этот случай иллюстрирует реакцию в пористой среде или при одновременном выщелачивании, когда освобождающийся пеннипп откладывается в непосредственной близости от подсистемы реакции, но в пределах системы реакционного минералообразования — в поровых пустотах. Вторая реакция $\langle 10 \rangle$ предусматривает образование за счет метасоматического замещения одной формульной единицы анортита и одной формульной единицы кварца какого-то изобъемного количества пенниппа. Эта реакция характеризует процесс в условиях отсутствия какой-либо дополнительной пористости в системе минералообразования и наиболее строго отвечает условиям псевдоморфизации.

Коэффициент при пенниппе $K_{Pen}^V = 0,59$. Коэффициенты перед (Mg, Fe) и H_2O находятся по формуле (86).

Так,

$$K_{(Mg, Fe)}^V = K_{(Mg, Fe)} \cdot K_{Pen}^V = 5 \cdot 0,59 = 2,95;$$

$$K_{H_2O}^V = K_{H_2O} \cdot K_{Pen}^V = 4 \cdot 0,59 = 2,36.$$

Коэффициенты перед выносимыми элементами находятся с помощью формул (87а), (87б) и (88).

Так,

$$K_{-Al}^V = K_{An} n_{An}^{Al} - K_{Pen}^V n_{Pen}^{Al} = 1 \cdot 2 - 0,59 \cdot 2 = 0,82;$$

$$K_{-Si}^V = K_{An} n_{An}^{Si} + K_Q n_Q^{Si} - K_{Pen}^V n_{Pen}^{Si} = 1 \cdot 2 + 1 \cdot 1 - 0,59 \cdot 3 = 1,23;$$

$$K_{-O}^V = K_{An} n_{An}^O + K_Q n_Q^O + K_{H_2O}^V n_{H_2O}^O - K_{Pen}^V n_{Pen}^O = 1 \cdot 8 + 1 \cdot 2 + 2,36 \cdot 1 - 0,59 \cdot 18 = 1,74;$$

$$K_{-Ca}^V = K_{An} n_{An}^{Ca} - K_{Pen}^V n_{Pen}^{Ca} = 1 \cdot 1 - 0,59 \cdot 0 = 1.$$

Можно было бы привести много примеров реакций, различающихся как количеством исходных и (или) конечных твердых продуктов их, так и характером объемного эффекта. Но и рассмотренные примеры дают представление о способе расчета уравнений реакций метасоматического минералообразования с помощью атомно- и формульно-объемных систем.

Во всех указанных случаях используемая величина Q_m находится с помощью таблицы прил. 5 (графа 21) или расчетным путем.

Коэффициент Q_m показывает, какую часть от стандартного объема V_{const}^m будет занимать объем формульной единицы минерала:

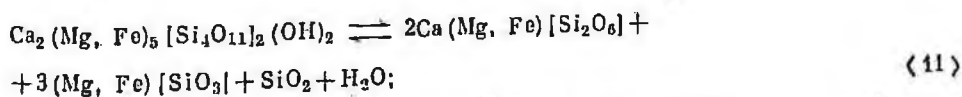
$$Q_m = \frac{\sum n_m^i}{g_m \cdot 1000} \cdot V_{const}^m = 0,001 \cdot \frac{V_m^0}{z_m^0} \cdot V_C \quad (90)$$

где V_m^0 — объем элементарной ячейки минерала m , исходя из параметров элементарной ячейки; находится в прил. 5 (графа 15) или по формулам (1)–(7) этого приложения; z_m^0 — число формульных единиц минерала m в объеме V_m^0 ; находится в прил. 5 (графа 10); $\sum n_m^i$ — число всех атомов элементов в формульной единице минерала m ; находится в прил. 5 (графа 13); $V_C = V_{const}^m$ — стандартный объем массы вещества минерала в 1000 \AA^3 .

Вышерассмотренные реакции касались реакций метасоматического минералообразования, сопровождаемых привнесом — выносом компонентов. Однако атомно- и формульно-объемная системы установления объемных соотношений при реакциях замещения в изложенном виде и лишь с небольшими дополнениями могут быть с успехом применены также для решения ряда вопросов о метаморфическом минералообразовании. В частности, эти системы могут быть использованы для выяснения изообъемного процесса минералообразования, для установления условий, необходимых для развития тех или иных реакций метаморфизма, а также их направленности и обратимости.

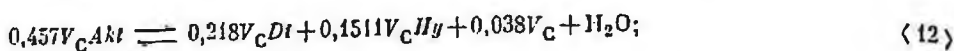
Для примера рассмотрим некоторые реакции минералообразования, приводимые Т. Бартом [4].

1. Так, реакция, иллюстрирующая распад актинолитовых амфиболитов, неустойчивых в наиболее высокотемпературных членах амфиболитовой фации, на гиперстен и диопсид, в условиях гранулитовой фации в химическом выражении выглядит следующим образом:



$$Q_{H_2O} = 0,0527V_C; \quad Q_{\text{Aht}} = 0,457V_C; \quad Q_{\text{Di}} = 0,109V_C; \quad Q_Q = 0,038V_C.$$

Объем каждого минерала m находится путем перемножения коэффициента при минерале в химической реакции (K_m) на Q_m по формуле (83)



$$\sum V'_{\frac{mk}{m_0}} = \frac{V'_{Di} + V'_{Hy} + V'_O}{V'_{Akt}} \cdot V'_{m_0} = \frac{0,407V_C}{0,457V_C} \cdot V'_{Akt} = 0,89V'_{Akt}$$

Следовательно, реакция образования Di и Hy из Akt сопровождается уменьшением объема массы вещества на 0,1 от первоначального объема, т. е. появлением пористости $\Pi_0 = 10\%$. Но так как пористость пород гранулитовой фации метаморфизма не больше 1—2% ($\Pi_K = 2\%$), то естествен вывод об уменьшении геометрического объема пород при этой реакции и вследствие этого о необратимости ее в том виде, в каком она написана <11> при регрессивном метаморфизме даже при наличии H_2O . В связи с этим реакция <11> должна записываться так:



Экспериментальное определение величины пористости продуктов правой части реакции позволяет определить максимальное количество актинолита, которое может возникнуть за счет $Di - Hy - Q$ породы при регрессивном метаморфизме даже в условиях вполне подвижного поведения H_2O , но при инертном поведении остальных компонентов, т. е. при условиях, достаточных для развития реакции метаморфизма [47, 48]. Если же вода не будет иметься в достаточном количестве, то реакция актинолитизации не пойдет вовсе.

При наличии 2%-ной пористости ($\Pi_K = 2\%$) в диоксид-гиперстен-кварцевой породе объем актинолита (V'_{Akt}), который может образоваться в пределах геометрического объема этой породы $V_g = 1000 \cdot [1 - 0,01 \cdot (\Pi_0 - \Pi_K)] \text{ \AA}^3$, определяется по формуле (91), а количество формульных единиц актинолита (K'_{Akt}), которое может возникнуть при регрессивном метаморфизме диоксид-гиперстен-кварцевой породы в условиях вполне подвижного поведения H_2O и инертного поведения других компонентов, установится по формуле (92)

$$V'_{m\Pi} = V'_{mP} \cdot \frac{\Pi_{\Pi K}}{\Pi_{\Pi 0}}; \quad (91)$$

$$K'_{mP} = K_{m\Pi} \cdot \frac{\Pi_{\Pi K}}{\Pi_{\Pi 0}}, \quad (92)$$

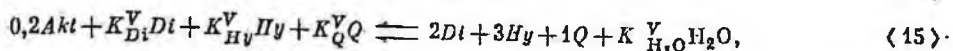
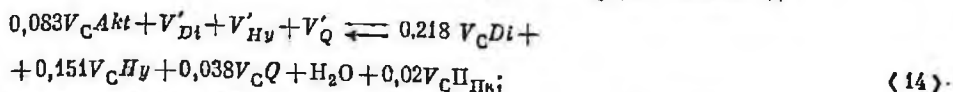
где $V'_{m\Pi}$ и V'_{mP} — объем «регрессивного» минерала m (в данном случае Akt) в частях от стандартного объема массы вещества $V_{const} = 1000 \text{ \AA}^3$ соответственно в реакции прогрессивного метаморфизма (реакции <11> и <13>) и регрессивного метаморфизма; $\Pi_{\Pi 0}$, $\Pi_{\Pi K}$ — пористость реакции продукта прогрессивного метаморфизма (в данном случае диоксид-гиперстен-кварцевой породы, возникающей за счет актинолита) соответственно до условного уплотнения ($\Pi_{\Pi 0}$) и после уплотнения ($\Pi_{\Pi K}$); $K_{m\Pi}$ — коэффициент, показывающий количество формульных единиц минерала m (в данном случае Akt), подвергнувшегося замещению другими минералами (в химической реакции <13>) в прогрессивную стадию метаморфизма; K'_{mP} — коэффициент, показывающий количество формульных единиц этого же минерала (m_P), образующегося в изобъемных условиях рег-

рессивного метаморфизма <15> за счет минералов, являющихся продуктом прогрессивной стадии метаморфизма этого минерала (m_p).

$$V'_{m\Pi} = V'_{Akt(\Pi)} = V'_{Akt(P)} \cdot \frac{\Pi_{\Pi k}}{\Pi_{\Pi 0}} = 0,457V_c \cdot \frac{2}{11} = 0,0831V_c;$$

$$K^V_{mP} = K^V_{Akt(P)} = K_{Akt(\Pi)} \cdot \frac{\Pi_{\Pi k}}{\Pi_{\Pi 0}} = 1 \cdot \frac{2}{11} = 0,2.$$

Следовательно, реакция актинолитизации диопсид-гиперстен-кварцевой породы в условиях регрессивного метаморфизма будет иметь вид



где $0,02V_c \Pi_{\Pi k}$ — объем пористости в диопсид-гиперстен-кварцевой породе; $V_{m,l}$ — величина объема каждого реликтового минерала m в левой регрессивной части реакции <14>, определяется по формуле (93); $K^V_{m,l}$ — коэффициент каждого реликтового минерала m в левой регрессивной части изобъемной реакции <15>, устанавливается по формуле (94); $K^V_{H_2O}$ — количество формульных единиц воды в правой прогрессивной части изобъемной реакции <15>, определяется с помощью выражения (95):

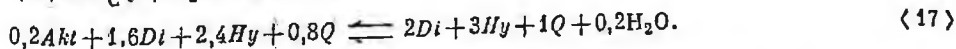
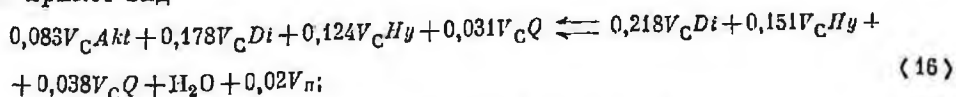
$$V_{m,l} = V'_m \left(1 - \frac{\Pi_{\Pi k}}{\Pi_{\Pi 0}} \right); \quad (93)$$

$$K^V_{m,l} = K_m \frac{V_{m,l}}{V'_m} = K_m \left(1 - \frac{\Pi_{\Pi k}}{\Pi_{\Pi 0}} \right); \quad (94)$$

$$K^V_{H_2O} = K_{H_2O} \frac{K^V_{mP}}{K_{m\Pi}} = K_{H_2O} \cdot \frac{\Pi_{\Pi k}}{\Pi_{\Pi 0}}, \quad (95)$$

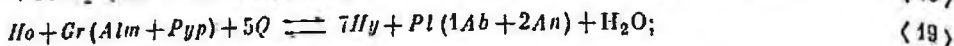
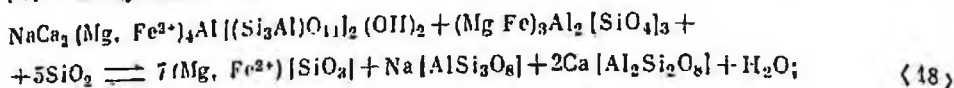
где K_m и K_{H_2O} — коэффициенты перед минералами m и H_2O в правой части химической реакции <13> прогрессивного метаморфизма; V'_m — объем минерала m в правой части реакции прогрессивного метаморфизма <12> в частях от V_c .

После нахождения и подстановки указанных коэффициентов реакция регрессивного метаморфизма <14> и <15> диопсид-гиперстен-кварцевой породы примет вид



Исходная реакция <11> обратима лишь в случае наличия пористости в породе. Отсутствие ее при всех прочих благоприятных условиях (как то наличие необходимого количества H_2O при ее вполне подвижном поведении, наличие необходимого количества H_2O при ее вполне подвижном поведении, понижение температуры и давления) является основной причиной необратимости этой реакции метаморфизма.

2. Реакция перехода минерального парагенезиса амфиболитовой фации ($Ho + Gr + Q$) в гранулитовую ($Hu + Pl$) и обратно записывается Т. Ф. Бартом [4] в следующем виде:



$$Q_{Ho} = 0,456V_C; \quad Q_{Gr} = \frac{Q_{Alm} + Q_{Pyr}}{2} = \frac{0,191 + 0,188}{2} V_C = 0,190V_C; \quad Q_Q = 0,038V_C;$$

$$Q_{Hu} = 0,053V_C; \quad Q_{Pl} = \frac{Q_{Ab} + 2Q_{An}}{3} V_C = \frac{0,174 + 2 \cdot 0,167}{3} V_C = 0,167V_C.$$

Исходя из формулы (84б), устанавливается объем конечных продуктов ($\sum V'_{mk} = V'_{Hu} + V'_{Pl}$) относительно объема исходных минералов ($\sum V'_{m0} = V'_{Ho} + V'_{Gr} + V'_{Q}$)

$$\begin{aligned} \sum \frac{V'_{mk}}{V'_{m0}} &= \frac{7 \cdot 0,053V_C + 1 \cdot 0,167V_C}{1 \cdot 0,456V_C + 1 \cdot 0,190V_C + 5 \cdot 0,038V_C} \sum V'_{m0} = \\ &= \frac{0,538}{0,836} \sum V'_{m0} = 0,64 \sum V'_{m0}. \end{aligned}$$

Следовательно, реакция <18> при прогрессивном метаморфизме приводит к сокращению объема массы минерального вещества на 0,36 части от первоначального объема, т. е. к появлению пористости $\Pi_{П0} = 36\%$. Но так как в гиперстен-плагноклазовых кристаллических сланцах пористость, как правило, не превышает 1%, очень редко 2% ($\Pi_{Пк} \approx 1-2\%$), то единственный вывод — указанная реакция при прогрессивном метаморфизме сопровождается уменьшением геометрического объема. Следовательно, возможность обратимой реакции помимо наличия необходимого количества H_2O и регрессивного характера метаморфизма обусловлена величиной пористости. Приняв пористость протексено-плагноклазовой породы, равной 1% ($\Pi_{Пк} = 1\%$), рассчитаем с помощью формул (92), (94) и (95) коэффициенты перед минералами в левой части рассматриваемой реакции при регрессивном метаморфизме:

$$K_{Ho}^V = K_{Ho} \frac{\Pi_{Пк}}{\Pi_{П0}} = 1 \cdot \frac{1}{36} = 0,027;$$

$$K_{Gr}^V = K_{Gr} \frac{\Pi_{Пк}}{\Pi_{П0}} = 1 \cdot \frac{1}{36} = 0,027;$$

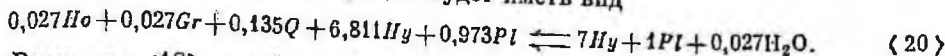
$$K_Q^V = K_Q \frac{\Pi_{Пк}}{\Pi_{П0}} = \frac{5}{36} = 0,135;$$

$$K_{H_2O}^V = K_{H_2O} \frac{\Pi_{Пк}}{\Pi_{П0}} = 0,027;$$

$$K_{Hu}^V = K_{Hu} \left(1 - \frac{\Pi_{Пк}}{\Pi_{П0}}\right) = 7 \cdot (1 - 0,027) = 6,811;$$

$$K_{Pl}^V = K_{Pl} \left(1 - \frac{\Pi_{Пк}}{\Pi_{П0}}\right) = 1 \cdot (1 - 0,027) = 0,973.$$

Реакция регрессивного метаморфизма при переходе минерального парагенезиса гранулитовой фации в амфиболитовый в этом случае наиболее строго отвечающем геологической ситуации будет иметь вид



Реакция <18> в общем случае должна быть записана как необратимая, так как регрессивное преобразование возможно лишь по форме <20>.

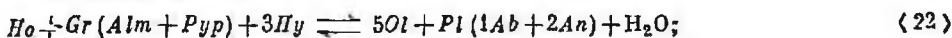
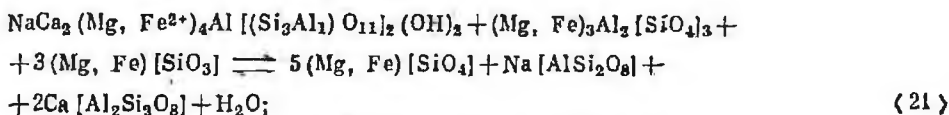
Для того чтобы получить содержание каждого из минералов левой или правой части реакции <19> в объемных %, находится объем каждого из минералов в единицах стандартного объема (V_c) по формуле (83). Сумма найденных объемов минералов ($\sum V'_m$) левой части реакции <19> приравнивается к 100%, а правой — к 99%, так как предполагается 1% пористости ($\Pi = 1$). Тогда объемное процентное содержание каждого минерала (ψ_m) устанавливается по формуле (96а) в случае отсутствия пористости ($\Pi = 0$) или (96б) в случае наличия пористости ($\psi_{m \Pi}$), равной Π

$$\psi_m = 0,01 K_m^V \sum V'_m = 0,01 K_m \sum V'_m; \quad (96a)$$

$$\psi_{m \Pi} = K_m^V \cdot \frac{\sum V'_m}{(100 - \Pi)} = K_m \cdot \frac{\sum V'_m}{(100 - \Pi)}, \quad (96б)$$

где K_m^V и K_m — коэффициенты перед минералом m , показывающие количество формульных единиц минерала m , участвующего в данной реакции {см. формулу (94)}.

3. Реакция перехода одного парагенезиса гранулитовой фации ($Ho + Gr + Hy$) в другой ($Ol + Pl$) при повышении температуры и давления Т. Бартом приведена как обратимая



$$Q_{Ho} = 0,456V_c;$$

$$Q_{Gr} = 0,190V_c;$$

$$Q_{Hy} = 0,053V_c;$$

$$Q_{Ol} = 0,074V_c;$$

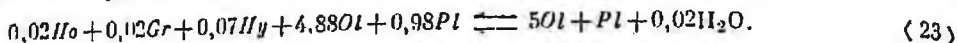
$$Q_{Pl} = 0,156V_c;$$

$$\sum \frac{V'_m}{m} = \frac{5 \cdot 0,074V_c + 1 \cdot 0,156V_c}{1 \cdot 0,456V_c + 1 \cdot 0,190V_c + 3 \cdot 0,053V_c} \sum V'_{m0} =$$

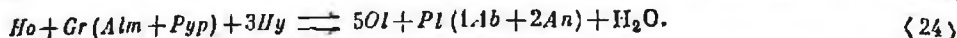
$$\frac{0,536}{0,911} \sum V'_{m0} = 0,59 \sum V'_{m0}.$$

Следовательно, рассматриваемая реакция при прогрессивном метаморфизме идет вправо с уменьшением объема массы вещества вновь образующегося парагенезиса. Полная реализация этой реакции сопровождается сокращением геологического объема породы на 41%, так как пористость в оливин-плагноклазовых кристаллических сланцах, как правило, не превышает 1%. Поэтому

обратный ход реакции при регрессивном метаморфизме выражается в виде <23>; коэффициенты при минералах рассчитаны по формулам (92), (94) и (95) подобно тому, как в двух предыдущих примерах:



В связи с этим и реакция <22> в общем случае должна записываться также в соответствии с геологическими условиями, в которых она протекает,



Рассмотренные примеры, естественно, не охватывают всех случаев метаморфического минералообразования даже из областей амфиболитовой и гранулитовой фаций регионального метаморфизма. Но они дают пример подхода к исследованию процессов метаморфического минералообразования с учетом конкретной геологической обстановки, в которой они происходят, на что, к сожалению, не обращалось внимания, в то время как химическая сторона вопроса получила к настоящему времени значительное освещение.

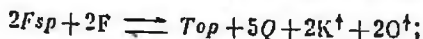
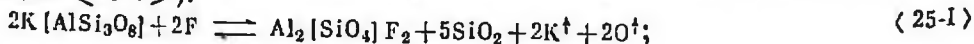
§ 2. РАСЧЕТ РЕАКЦИЙ МЕТАСОМАТИЧЕСКОГО МИНЕРАЛООБРАЗОВАНИЯ ПОРОД ПО ДАННЫМ ОБЪЕМНЫХ СООТНОШЕНИЙ ЧАСТНЫХ РЕАКЦИЙ МЕТАСОМАТИЧЕСКОГО МИНЕРАЛООБРАЗОВАНИЯ

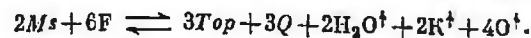
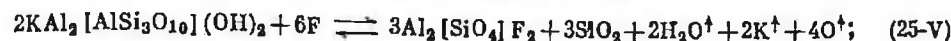
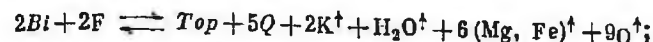
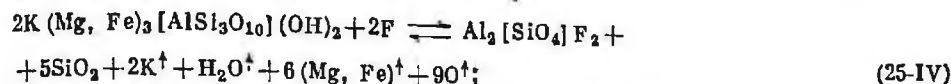
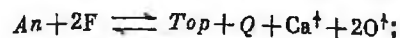
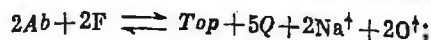
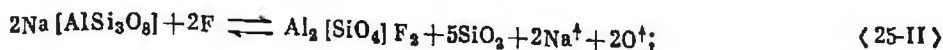
В ряде случаев установление особенностей объемных соотношений частных реакций замещения позволяет выяснять реальный минеральный состав пород с частичным учетом пористости, возникающей в процессе метасоматического минералообразования. Впервые на такую возможность было указано Ю. В. Казыцыным [33], предложившим метод «молекулярных объемов», техника расчета по которому, его достоинства и недостатки рассмотрены в работе Ю. В. Казыцына и В. А. Рудника [34].

Формульно-объемная система установления объемных соотношений отдельных реакций минералообразования, разобранный в предыдущем параграфе, позволяет так же, как и метод «объема молекул», но значительно проще, рассчитывать реальный и примерный химические составы пород и, кроме того, выяснять характер общей реакции метасоматического породообразования.

Рассмотрение порядка и последовательности расчета реального и химического составов породы и общей реакции ее метасоматического образования за счет исходной породы проводится на примере, заимствованном из работы Ю. В. Казыцына [33] для более наглядного сравнения достоинств каждого из методов.

Так же, как и по методу «молекулярных объемов», вначале составляются «химические» реакции замещения вновь образовавшимися минералами минералов исходной породы на основе данных оптических исследований взаимоотношений между минералами. Состав минералов определяется согласно результатам этих исследований с помощью соответствующих справочных руководств [13, 24, 37, 49, 75, 77, 93, 98 и др.]. В данном примере составляются реакции замещения вновь образовавшимися топазом (*Top*) последовательного калиевого полевого шпата (*Fsp*; реакция <25-I>), альбита (*Ab*; реакция <25-II>), анортита (*An*; реакция <25-III>), биотита (*Bi*; реакция <25-IV>) и мусковита (*Ms*; реакция <25-V>).



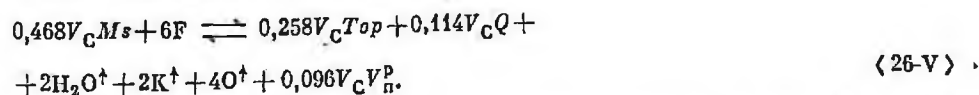
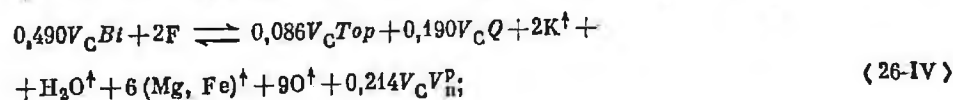
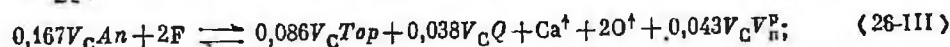
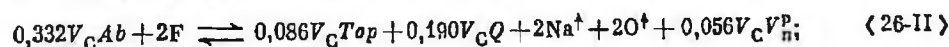
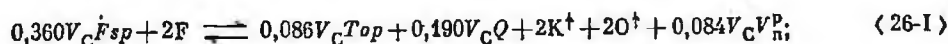


Далее с помощью таблиц прил. 5 находятся коэффициенты Q_m для каждого минерала m (графа 21)

$$Q_{Fsp} = 0,180V_C; \quad Q_{Ab} = 0,166V_C; \quad Q_{An} = 0,167V_C; \quad Q_Q = 0,038V_C; \quad Q_{Bi} = 0,245V_C;$$

$$Q_{Ms} = 0,234V_C; \quad Q_{Top} = 0,086V_C.$$

По формуле (83) определяется объем каждого минерала реакции (V'_m) в долях от стандартного объема (V_C) путем перемножения коэффициента при каждом минерале в соответствующей реакции (K_m) коэффициентом Q_m этого минерала m . После этого реакции в объемном выражении примут вид



Далее по формуле (84а) или (84б) определяется величина объема конечных ($\sum V'_{mк} = V'_{\text{Top}} + V'_Q$) продуктов реакции по отношению к объему исходных минералов:

$$\langle 26\text{-I} \rangle \quad \sum \frac{V'_{mк}}{m_0} = \frac{0,276}{0,360} V'_{Fsp} = 0,77V'_{Fsp};$$

$$\langle 26\text{-II} \rangle \quad \sum \frac{V'_{mк}}{m_0} = \frac{0,276}{0,332} V'_{Ab} = 0,83V'_{Ab};$$

$$\langle 26\text{-III} \rangle \quad \sum \frac{V'_{mк}}{m_0} = \frac{0,124}{0,167} V'_{An} = 0,74V'_{An};$$

$$\langle 26-IV \rangle \quad \sum_{\frac{m_0}{m_k}} V'_{m_k} = \frac{0,276}{0,490} V'_{Bi} = 0,56 V'_{Bi};$$

$$\langle 26-V \rangle \quad \sum_{\frac{m_0}{m_k}} V'_{m_k} = \frac{0,372}{0,468} V'_{Mfs} = 0,79 V'_{Mfs}.$$

По формуле (97) определяется приращение объема пористости реакции ($\Delta V'_n$) в частях от величины стандартного объема $V_C = 1000 \text{ \AA}^3$.

$$\Delta V'_n = \sum V'_{m_0} - \sum V'_{m_k} \quad (97)$$

где $\sum V'_{m_0}$ и $\sum V'_{m_k}$ — суммарный объем в частях от величины стандартного объема соответственно исходных минералов и конечных продуктов реакции.

$$\begin{aligned} \Delta V'_{I} &= +0,084 V_C; \quad \Delta V'_{II} = +0,056 V_C; \quad \Delta V'_{III} = \\ &= +0,043 V_C; \quad \Delta V'_{IV} = +0,214 V_C; \quad \Delta V'_{V} = +0,096 V_C. \end{aligned}$$

Значение $\Delta V'_n$ приписывается к реакциям $\langle 26 (I-V) \rangle$ в правую их часть. Если бы $\Delta V'_n$ имели знак —, т. е. в том случае, когда объем продуктов правой части реакции был бы больше объема исходных минералов, то $\Delta V'_n$ вводился бы в правую часть реакции со знаком —, что было бы равносильно прибавлению приращения объема порового пространства ($\Delta V'_n$) в левой части реакции со знаком +. Затем по величине объемного процентного содержания исходного минерала m_0 каждой реакции в неизменной породе ($\psi_{m_0}^x$), в данном случае в граните X, устанавливается объем каждого минерала m_k правой части рассматриваемой реакции (V'_{m_k}) в пределах стандартного геометрического объема вновь образовавшейся метасоматической породы, в данном случае грейзена — Y, по формуле (98a). По формулам (99), (100) и (101) находятся коэффициенты для каждого исходного (m_0) и конечного (m_k) минералов рассматриваемой реакции в химическом выражении ($K_{m_0}^x$ и $K_{m_k}^y$), а также для каждого приносимого или выносимого в процессе этой реакции компонента S (K_S^z), исходя из определенного содержания исходного минерала реакции m_0 в неизменной породе.

$$V'_{m_k} = \frac{0,01 \cdot \psi_{m_0}^x}{V'_{m_0}} \cdot V'_{m_k}; \quad (98a)$$

$$\Delta V'_n = \frac{0,01 \cdot \psi_{m_0}^x}{V'_{m_0}} \cdot \Delta V'_n; \quad (98b)$$

$$K_{m_0}^x = K_{m_0} \cdot \frac{0,01 \cdot \psi_{m_0}^x}{V'_{m_0}} = 0,01 \cdot \frac{\psi_{m_0}^x}{Q_{m_0}}; \quad (99)$$

$$K_{m_k}^y = \frac{K_{m_k}^y}{K_{m_0}^x} \cdot K_{m_k} = K_{m_k} \cdot \frac{0,01 \cdot \psi_{m_0}^x}{V'_{m_0}} = K_{m_k} \cdot \frac{0,01 \cdot \psi_{m_0}^x}{Q_{m_0} \cdot K_{m_0}^x}; \quad (100)$$

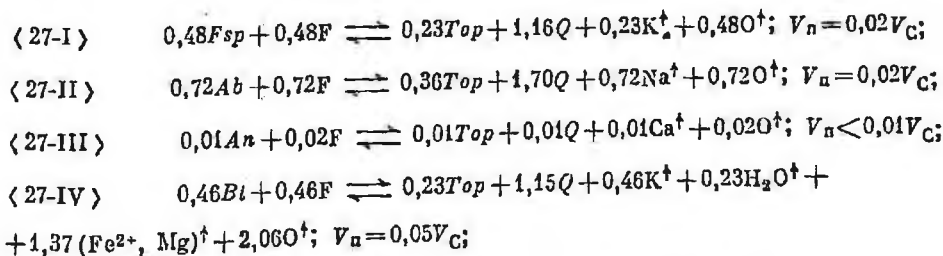
$$K_S^z = K_S \cdot \frac{K_{m_0}^x}{K_{m_0}^x} = K_S \cdot \frac{0,01 \cdot \psi_{m_0}^x}{V'_{m_0}} = K_S \cdot \frac{0,01 \cdot \psi_{m_0}^x}{Q_{m_0} \cdot K_{m_0}^x}; \quad (101)$$

где $V_{m_k}^y$ — объем минерала m_k (например, топаза) конечного продукта данной частной реакции из расчета на стандартный геометрический объем в конечной породе Y , соответствующий $\psi_{m_0}^x$ содержанию минерала m_0 (например, альбита) в исходной породе X ; $V_{m_k}^x$ — объем минерала m_k — конечного продукта данной частной реакции (например, топаза в реакции <26-II>) в частях от стандартного объема, соответствующий объему $V_{m_0}^x$ исходного минерала m_0 (альбита в реакции <26-II>) данной частной реакции; $\psi_{m_0}^x$ — содержание минерала m_0 в объемных процентах в исходной породе X (например, альбита в граните) с учетом ее общей пористости (Π_x); $K_{m_0}^x$ и $K_{m_k}^y$ — коэффициенты, показывающие количество формульных единиц в условиях изообъемных реакций соответственно минерала m_0 (например, альбита) в исходной породе X и минерала m_k (например, топаза) в конечной породе Y из расчета на ее стандартный геометрический объем; K_{m_0} и K_{m_k} — количество формульных единиц соответственно исходного минерала m_0 (альбита) в левой части какой-либо данной химической реакции и вновь образовавшегося минерала m_k в правой части этой же реакции (топаза); K_S^x , K_S — количество компонента S (например, F или H_2O и т. д.), соответственно привнесенного в исходную породу X (или вынесенного из нее) в расчете на $\psi_{m_0}^x$ (или $K_{m_0}^x$) минерала m_0 и привнесенного или вынесенного в процессе данной реакции из расчета на $V_{m_0}^x$ (или K_{m_0}) минерала m_0 .

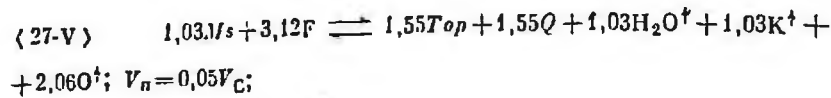
Объемное процентное содержание минералов исходных пород устанавливается обычно путем непосредственного подсчета в шлифах, так как при определении объемного содержания минералов по результатам пересчета химического анализа нет необходимости прибегать к рассматриваемому методу. Пористость, если она превышает 3%, включается в величину общего объемного процентного содержания минералов как самостоятельный компонент. Объемные процентные содержания минералов в исходном граните — породе X — имеют следующие значения:

$$\begin{aligned} \psi_{Fsp}^x &= 8,4\%; \psi_{Ab}^x = 12,0\%; \psi_{An}^x = 0,2\%; \psi_{Bt}^x = 11,2\%; \psi_{Ms}^x = 24,2\%; \psi_Q^x = \\ &= 44,0\%; \psi_n^x = 0,1\%. \end{aligned} \quad (\text{см. табл. 31})$$

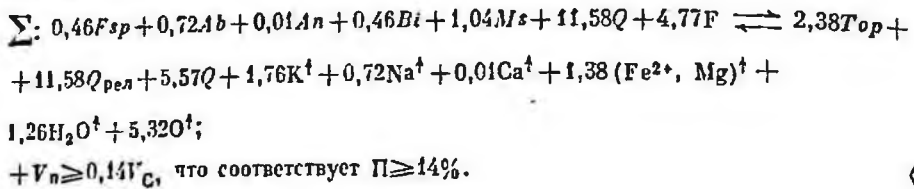
Определив коэффициенты $K_{m_0}^x$, $K_{m_k}^y$ и K_S^x и подставив их в соответствующие реакции в химическом выражении, а также определив $K_{Q_{rel}}^x$ для кварца гранитов (Q_{rel}), не участвовавшего в реакциях метасоматического преобразования, по формуле (99), получим*:



* Практически приходится рассчитывать только K_{m_0} , т. е. коэффициент K только для F_{sp} , Ab , An , Bt , Ms и Q_{rel} ; остальные компоненты находятся путем простых пропорций, что хорошо видно из формул (98) — (101).



$$11,58Q_{\text{рел}}; 11,58Q_{\text{вкл}}$$



$\langle 28 \rangle$

Таким образом, получена реакция метасоматического минералообразования при возникновении кварц-топазового грейзена за счет гранита. Коэффициенты как в частных, так и в общей реакциях показывают: для минералов — количество формульных единиц минералов, участвующих в реакциях, для химических компонентов — количество химических компонентов (соединений, например H_2O и др.) и элементов, участвующих в реакциях. Стрелками показаны компоненты, выносимые в процессе реакции. Реакция рассчитана, исходя из стандартного геометрического объема в 1000 \AA^3 . Процесс грейзенизации сопровождается увеличением пористости на 14%; эта величина в то же время соответствует и общей пористости грейзена, так как пористость гранита была меньше 0,1% и на расчете содержания исходных минералов гранита не сказалась. Величина пористости в процентном выражении (Π) определяется, исходя из величины объема порового пространства (V'_n) по формуле

$$\Pi = 100 \cdot V'_n \%. \quad (102)$$

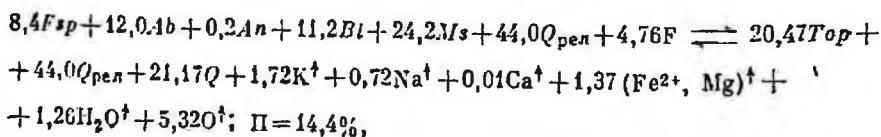
Исходя из полученной общей реакции, может быть легко определено и количество атомов каждого элемента i из расчета на стандартный геометрический объем породы, т. е. с учетом ее пористости, путем умножения коэффициента перед каждым минералом m (K_m^V) на количество атомов элемента i в формульной единице этого минерала m (n_m^\dagger).

Может быть установлена общая реакция и при выражении минералов как в частях от стандартного объема (V'_m) — см. реакции $\langle 26 (I-V) \rangle$, так и в объемных процентах ($\psi_{m,n}$), исходя из формулы (98a) и реакций $\langle 26 (I-V) \rangle$.

Технически проще выражение содержания минеральных компонентов (в объемных %) в общей реакции $\langle 28 \rangle$ проводить путем умножения коэффициента при каждом минерале K_m^V в общей реакции на коэффициент Q_m , находящийся в таблицах прил. 5 для каждого минерала (графа 21), и на 100 по формуле

$$\psi_{m,n} = 100 K_m^V Q_m. \quad (103)$$

Общая реакция образования грейзена за счет гранита при выражении содержания минералов в объемных процентах, а привносимых и выносимых компонентов в количествах атомов или окислов примет вид



$\langle 29 \rangle$

где Π — пористость в конечном продукте реакции (в объемных %), равная в данном частном случае приращению пористости в процессе реакции.

Достоинства рассмотренного метода очевидны. Но имеется и большой недостаток, подобный недостатку метода «молекулярных объемов», — метод применим лишь к относительно простым по составу метасоматическим породам. Поэтому для расчета реакций метасоматического минералообразования при возникновении сложных полиминеральных пород различного состава и пористости следует пользоваться методикой, изложенной в § 3 настоящей главы.

По характеру объемного эффекта реакции метасоматического минералообразования, составу промежуточных продуктов реакции и их поведению полезно проводить деление метасоматитов на следующие пять типов [33]:

1. Метасоматиты извне компенсированные — метасоматиты, состоящие из одного вновь образующегося минерала m_k , развивающегося за счет минералов исходных пород (m_0^1, m_0^2 и т. д.) с образованием пористости. Эта пористость заполняется «освобожденным» минералом $m_{осв}^1$, выделяющимся как промежуточный продукт реакции в процессе метасоматического образования минерала m_k^1 за счет минералов m_0 исходной породы. Минерал $m_{осв}^1$ тождествен одному из минералов исходной породы — m_0^1 (например, кварц в рассмотренном примере).

2. Метасоматиты самокомпенсированные — метасоматиты, состоящие из нескольких вновь образовавшихся минералов (m_k^1, m_k^2, m_k^3 и т. д.), развивающихся за счет минералов исходных пород (m_0^1, m_0^2 и т. д.) с различным объемным эффектом (одни с увеличением «физического» объема массы минерального вещества, другие с уменьшением). Возникающая пористость полностью заполняется «освобожденными» минералами, выделившимися как промежуточный продукт реакции ($m_{осв}^1, m_{осв}^2$ и т. д.), и вновь образовавшимися минералами, развивавшимися с увеличением объема массы вещества, т. е. путем «замещения с переглоблением» (m_k^1, m_k^2 и т. д.).

3. Метасоматиты некомпенсированные — метасоматиты, в которых пористость, возникшая в процессе метасоматического минералообразования, не заполняется ни метасоматически вновь образовавшимися минералами (m_k^1, m_k^2 и т. д.), так как замещение ими исходных минералов идет с уменьшением «физического» объема массы вещества, ни «освобожденными» минералами — промежуточными продуктами реакции ($m_{осв}^1, m_{осв}^2$ и т. д.), так как таковые отсутствуют.

4. Метасоматиты с подвижными освобожденными компонентами — метасоматиты, состоящие из нескольких вновь образовавшихся минералов (m_k^1, m_k^2 и т. д.). Эти метасоматиты имеют значительную пористость, образующуюся как в результате уменьшения «физического» объема массы вещества метасоматических новообразований (m_k^1, m_k^2 и т. д.) по сравнению с замещенными ими исходными минералами (m_0^1, m_0^2 и т. д.), так и в результате выноса одного или нескольких «освобожденных» минералов ($m_{осв}^1, m_{осв}^2$ и т. д.), являющихся промежуточными продуктами реакции.

5. Метасоматиты, не поддающиеся математическому учету, — метасоматиты, состоящие из нескольких метасоматически образовавшихся минералов (m_k^1, m_k^2 и т. д.), возникновение которых за счет исходных минералов (m_0^1, m_0^2 и т. д.) сопровождалось различными объемными эффектами, и минералов (m_n^1, m_n^2 и т. д.), не связанных общими компонентами с исходной породой. В этих метасоматитах наряду с выносом химических компонентов в результате реакции метасоматического минералообразования происходит также и выщелачивание ряда химических компонентов исходных пород.

Но, к сожалению, последний тип метасоматитов является очень широко распространенным геологическим образованием. Поэтому возможность установления особенностей реакции метасоматического минералообразования при возникновении таких сложных пород является насущной проблемой. В связи с этим ниже рассматривается метод, позволяющий устанавливать характер реакций метасоматического минералообразования при возникновении метасоматитов любого состава и пористости за счет пород также самого различного минерального состава и различной величины пористости.

§ 3. РАСЧЕТ РЕАКЦИЙ МЕТАСОМАТИЧЕСКОГО МИНЕРАЛООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ВОЗНИКНОВЕНИИ ПОЛИМИНЕРАЛЬНЫХ ПОРОД РАЗЛИЧНОГО СОСТАВА И ПОРИСТОСТИ

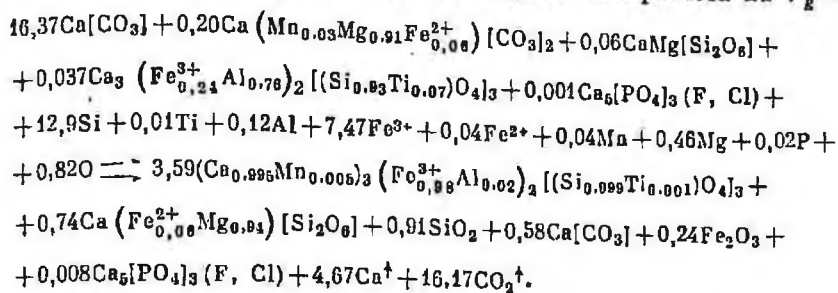
Реакции реального метасоматического минералообразования при возникновении сложных по составу метасоматических пород различной пористости за счет исходных пород самого разнообразного состава и генезиса обычно устанавливаются с большим трудом. Чаще существующие методы вообще не позволяют устанавливать математически и геологически обоснованно реакций указанных реальных метасоматических процессов. С помощью же атомно-формульно-объемной системы установление общего характера таких реакций, даже в случае очень сложного состава пород, не представляет особой трудности. Значение такой возможности весьма существенно, так как она раскрывает новые перспективы дальнейшего развития парагенетического и энергетического анализа метасоматических минеральных образований*.

Расчет реакций метасоматического породообразования основан на установлении субмодального формульно-объемного состава исходных пород и метасоматических новообразований с учетом их пористости, подробно рассмотренного выше, и на вычислении величины происходящего при этом привноса — выноса вещества из расчета на стандартный геометрический объем по атомно-объемной системе.

Вначале выписывается формульно-объемный состав исходной породы с учетом ее пористости (в рассматриваемом примере мрамора, см. табл. 26). Затем выписываются количества атомов элементов, привносимых в процессе образования скарна за счет мрамора (см. реакцию < 30 >; табл. 28, графа 8). Запись привносимых элементов в общем случае ведется в атомной форме для отличия их от твердых продуктов реакции. Летучие вещества (CO_2 , H_2O , HF , HCl и др.) могут записываться в виде простых соединений. Когда установлены конкретные формы перемещения вещества, то привносимые, а также и выносимые элементы объединяются в формулы легколетучих комплексных соединений, фторидов, хлоридов, различных гидратов и др., заключенных в круглые скобки для их отличия от твердых продуктов реакции. Таким образом, устанавливается левая часть реакции метасоматического образования пород. В правой части реакции выписывается формульно-объемный субмодальный состав метасоматически образовавшейся породы с учетом ее пористости в рассматриваемом примере скарна (см. табл. 25 и 27) и количество атомов элементов, вынесенных в процессе ее возникновения (см. реакцию < 30 >; табл. 28, графу 8; табл. 13).

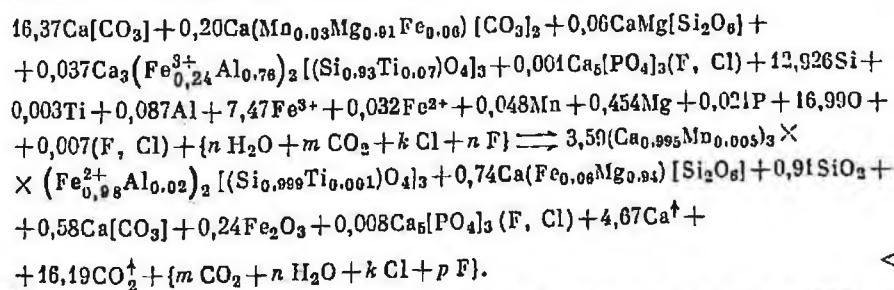
* Большое значение рассматриваемый метод имеет для проверки правильности составления частных реакций породообразования, что особенно важно при парагенетическом анализе пород.

Так, реакция образования пироксен-гранатового скарна за счёт мрамора (см. табл. 26 и 27) выразится следующим образом на расчете на $V_g = 1000 \text{ \AA}^3$:



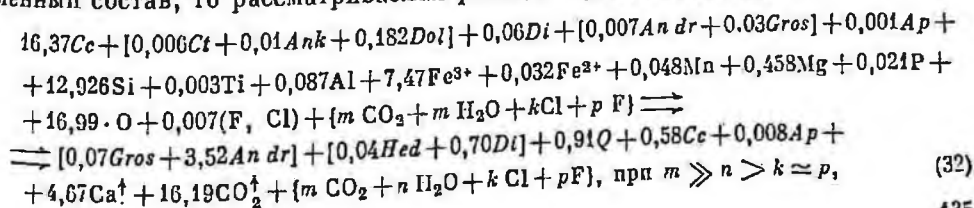
<30>

Затем проверяется соответствие количеств атомов элементов в правой и левой частях реакции и устраняются имеющие место расхождения, возникшие при их округлении. После этого в число привнесенных и (или) вынесенных элементов приписываются элементы, которые не определялись химическими анализами, но наличие которых несомненно, исходя из минерального состава. Так, в нашем случае несомненен привнос Cl и (или) F, что фиксируется образованием апатита. Далее, так как общеизвестна форма миграции углерода в виде CO_2 , то выносимый углерод связывается с соответствующим количеством кислорода, которое для сохранения знака реакции прибавляется в левую часть реакции. Так как привнос — вынос элементов мог происходить только в условиях наличия растворов (поровых и инфильтрующихся), то в правую и левую части реакции добавлены $n \cdot \text{H}_2\text{O} = n (\text{OH}^- + \text{H}^+)$; $k \cdot \text{Cl}$; $p\text{F}$ и $m \cdot \text{CO}_2$ ($m \gg n > k \approx p$). Можно было бы записать и все привносимые и выносимые элементы в виде каких-либо легколетучих соединений, но так как конкретные данные для приведенной реакции отсутствуют, то в рассматриваемом примере привносимые и выносимые компоненты записаны в наиболее общей форме (в виде атомов), указывающей лишь конечные результаты необходимого и обязательного баланса вещества для протекания данной реакции.



<31>

Если записать твердые продукты этой реакции в виде минеральных индексов — нормативных минералов, вкладывая в каждый из них вполне определенный состав, то рассматриваемая реакция будет иметь вид



(32)

Записанная таким образом реакция может быть еще более детализирована, в частности привносимые и выносимые компоненты могут объединяться в формулы, отвечающие различным легколетучим и хорошо растворимым комплексным соединениям, фторидам, хлоридам, различным гидратам и др., исходя из теоретических и экспериментальных данных. Могут быть также отражены и особенности режима кислотности — щелочности, в которых протекала реакция, путем введения в обе части ее уравнения сильных щелочей или кислот с преобладавшим тех или других.

Глава IV

О ВОЗМОЖНОСТИ УСТАНОВЛЕНИЯ ГЛАВНЕЙШИХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ РЕАЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ МЕТАСОМАТИЧЕСКОГО И МЕТАМОРФИЧЕСКОГО ПОРОДОБРАЗОВАНИЯ

Атомно- и формульно-объемные системы в совокупности с формульно-атомной нормативной системой позволяют устанавливать главные термодинамические условия реальных процессов метасоматического и метаморфического породообразования. В частности, на базе этих систем могут быть установлены оптимальные значения интервала температур (T), давлений (p), констант равновесия (K_p) и других параметров соответствующих реакций, определяющих возможность самопроизвольного хода их в определенном направлении и установления равновесия.

Методы термодинамических расчетов подробно разобраны в работах А. Г. Булаха [9], Р. Керна и А. Вайсброта; В. А. Николаева и В. В. Дольво-Добровольского [63] на примере отдельных частных реакций минералообразования. Способы геолого-петрологической интерпретации термодинамических параметров реакций минералообразования достаточно полно отражены как в указанных работах, так и в особенности в монографиях М. Н. Годлевского [18], И. К. Карпова и др. [35, 36], Д. С. Коржинского [48], А. А. Маркушева [57, 58], Л. Л. Перчука [69, 70, 71] и др.

Но все эти методы в равной степени могут быть применимы и для случаев метасоматического и метаморфического образования полиминеральных горных пород. Такая возможность для метасоматических пород обусловлена созданием метода расчета реакций метасоматического минералообразования при формировании горных пород различной пористости и состава за счет исходных пород любого состава и генезиса*. В таких реакциях объем твердых продуктов правой части (новообразований) равен или меньше общего объема твердых минеральных составляющих левой части реакций — исходных минеральных компонентов. Для метаморфического минералообразования возможность расчета термодинамических параметров процессов, приближающихся к реальным, обусловлена расчетом субмодальных составов по данным вычислений формульно-нормативных составов [87].

С целью унификации расчетов и их облегчения целесообразно введение понятия об удельных термодинамических параметрах, т. е. приведенных к объ-

* Характерно лишь для реакций, конечные продукты которых представляют собой одно-временные минеральные образования.

Таблица 30

Термодинамические функции как мера химического средства веществ.
По А. Г. Булаху [9]

Функции	Условия использования как меры химического средства		Условия, при которых		
	только для закрытых систем	дополнительно для открытых систем	необратимый (самопроизвольный) процесс энергетически выгоден	наблюдается равновесие	необратимый (самопроизвольный) процесс энергетически не выгоден
Энтропия (S)	$dU = 0$	$\sum_1^i dn_i \mu_i = 0$	$dS > 0$	$dS = 0$	$dS < 0$
Внутренняя энергия (U)	$dV = 0$ *	$\sum_1^i dn_i \mu_i = 0$	$dU < 0$	$dU = 0$	$dU > 0$
	$dS = 0$	$\sum_1^i dn_i \mu_i = 0$	$dH < 0$	$dH = 0$	$dH > 0$
Энтальпия (H)	$dV = 0$	$\sum_1^i dn_i \mu_i = 0$	$dF < 0$	$dF = 0$	$dF > 0$
	$dS = 0$	$\sum_1^i dn_i \mu_i = 0$	$dZ < 0$	$dZ = 0$	$dZ > 0$
Изохронный потенциал (F)	$dV = 0$	$\sum_1^i dn_i \mu_i = 0$			
	$dT = 0$	$\sum_1^i dn_i \mu_i = 0$			
Изобарный потенциал (Z)	$dT = 0$	$\sum_1^i dn_i \mu_i = 0$			
	$dp = 0$	$\sum_1^i dn_i \mu_i = 0$			

* Эти условия сводят закрытую систему к изолированной.

ему формульных единиц веществ, а не к их молярным объемам, как это по традиции приводится в руководствах [9, 37, 63 и др.], монографиях [36, 48, 57, 58, 71 и др.] и справочниках [35, 64 и др.]. Приведение термодинамических параметров веществ к объемам их формульных единиц позволяет более наглядно и строго выражать главнейшие физико-химические закономерности минерало- и породообразования и увязывать их с результатами петрохимических пересчетов на базе атомно-объемной, формульно-объемной и формульно-атомной систем [34, 83, 87].

В связи с тем, что наиболее последовательно и полно методы термодинамики в минералогии в общедоступной форме изложены в руководстве А. Г. Булаха [9], в настоящей работе в качестве примера расчета термодинамических параметров использованы некоторые реакции из указанного руководства. Это позволяет проводить сопоставление предлагаемых систем расчета термодинамических параметров с общепринятыми.

В табл. 30 сведены данные о термодинамических функциях, иллюстрирующие возможность их использования для анализа природных процессов минералообразования. Как видно из этой таблицы, любая из термодинамических функций S , H , V , F , Z может служить мерой способности веществ вступать в реакцию между собой с образованием других веществ.

При этом наиболее удобным для использования при анализе природных процессов минерало- и породообразования является изобарный потенциал (Z).

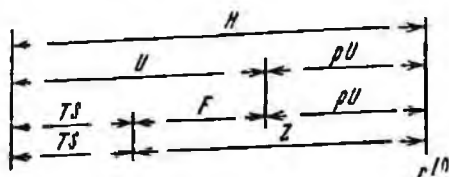


Рис. 10. Соотношение величин различных термодинамических функций между собой [9]

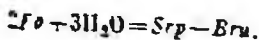
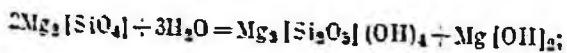
логии подчиненное значение, давая тепловой эффект реакции минералообразования мерой химического сродства веществ [9].

1) $T = 0^\circ \text{K}$; 2) $\Delta S = 0$ [9].
 Такие малоприспособны для анализа процессов минерало- и породообразования и величина ΔF , поскольку ее использование требует равенства объема всех исходных (жидких, газообразных и твердых) веществ и объема всех конечных (жидких, газообразных, твердых) продуктов реакции [9, 90]. В связи с указанным использование величины ΔF , как и ΔU , возможно лишь в некоторых частных случаях. Применение ΔU затруднено также и из-за необходимости соблюдения условия $\Delta S = 0$ (см. табл. 30). Использование величины ΔS реакций также невозможно, так как она применима лишь к изолированным системам, не известным в геологии [9]. Таким образом, изобарный потенциал (Z) является наилучшим показателем для анализа энергетической выгодности природных процессов, хотя он и определяет характер изменения лишь части общей энергии системы (рис. 10).

Методика расчета изобарного потенциала и определение полей устойчивости минералов для процессов метаморфизма достаточно подробно изложены в работе А. Г. Булаха [9], а также и в других, приведенных выше работах. Поэтому ниже рассмотрен лишь анализ процессов метасоматического минерало- и породообразования на основе формульно-объемной системы выражения реакций.

§ 1. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МЕТАСОМАТИЧЕСКОГО МИНЕРАЛООБРАЗОВАНИЯ

Можно было бы проиллюстрировать методику термодинамического анализа метасоматического минералообразования на примере реакций $\langle 1 \rangle - \langle 4 \rangle$ или $\langle 7 \rangle - \langle 10 \rangle$, в которых объем конечных твердых продуктов реакций больше суммарного объема исходных минеральных продуктов. Но для возможности сопоставления с общепринятой методикой термодинамического анализа целесообразно воспользоваться одним из примеров, приводимым А. Г. Булахом, — реакцией формирования брусита (Bru) и серпентина (Srp) за счет форстерита (Fe) в присутствии воды [9, с. 61, пример 1].



Величина ΔZ применима для анализа энергетической выгодности необратимых (самопроизвольных) процессов, идущих при постоянных давлении и температуре, в том числе и в условиях открытых геологических систем, если условно рассматривать их как закрытые системы с переменным объемом [9, с. 39—41]. По сравнению с изобарным потенциалом расчет изменения энтальпии системы (ΔH) имеет в геологии возможность определять лишь полный потенциал изменения. Величина ΔH может служить мерой химического сродства веществ лишь в двух случаях:

Однако эту реакцию следует рассматривать как метасоматическую, суммарный объем минеральных новообразований которой больше исходного объема форстерита (см. прил. 5 и 6):

$$V_{Fo}^M \approx 73 \text{ \AA}^3;$$

$$V_{Bru}^M \approx 41 \text{ \AA}^3;$$

$$V_{Srp}^M \approx 178 \text{ \AA}^3 \text{ (в прил. 5 ему отвечает антигорит — ортоантигорит, см. также табл. 27).}$$

Для приведения реакции <33> в геологически приемлемую форму для каждого из минеральных компонентов находится в прил. 5 коэффициент Q_m (№ п/п 26, 73, 458, графа 21):

$$Q_{Srp} = 1/2 Q_{oAnt} = 0,178;$$

$$Q_{Bru} \approx 0,041;$$

$$Q_{Fo} \approx 0,072.$$

Затем устанавливается величина объема каждого из минералов в долях от стандартного объема (V'_m) по формуле (83)

$$V'_{Srp} = 1 \cdot 0,178 = 0,178;$$

$$V'_{Bru} = 1 \cdot 0,041 = 0,041;$$

$$V'_{Fo} = 2 \cdot 0,072 = 0,144.$$

Далее по формуле (84б) устанавливается, какую часть от объема исходного Fo составляет объем $Srp + Bru$

$$\sum V'_{mk} = \frac{(V'_{Srp} + V'_{Bru})}{V'_{Fo}} \sum V'_{mo} = \frac{0,178 + 0,041}{0,144} V'_{Fo} = \frac{0,219}{0,144} V'_{Fo} \approx 1,52 V'_{Fo}.$$

Следовательно, реализация указанной реакции <33> в природных условиях может иметь место лишь в случае выноса части вещества Srp или Bru или же обоих этих минералов за подсистему реакции, а в случае отсутствия в системе реакции (в форстеритовой породе) пористости — и за пределы системы реакции. Поэтому запись реакции в том виде, в каком она дана (<33>), не имеет геологического смысла.

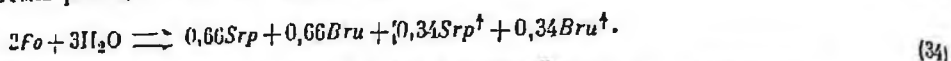
Для установления формы реакции, отражающей геологическую сущность процесса, рассчитывается по формуле (85б) коэффициент изобъемности ($K_{\Sigma m n}^V$), указывающий, какое количество формульных единиц конечных продуктов реакции ($Bru + Srp$) может образоваться за счет исходного Fo

$$K_{\Sigma m n}^V = \frac{(1+1) V'_{Fo}}{(V'_{Srp} + V'_{Bru})} = \frac{2 \cdot 0,144}{0,219} = \frac{0,288}{0,219} = 1,315 \approx 1,32.$$

Следовательно, на месте двух формульных единиц Fo может образоваться лишь 1,32 формульных единиц ($Bru + Srp$)*. Поскольку соотношение Bru

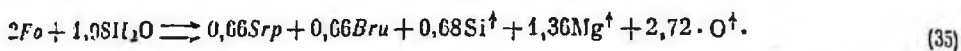
* Указанные округления не влияют на результаты расчета, поскольку находятся за пределами точности определения как кристаллохимических, так и термодинамических параметров компонентов реакций.

к *Srp* в реакции <33> 1 : 1, то реакция <33> может быть записана в виде реакции <34>, если выносимое количество *Bru*[†] и *Srp*[†] из подсистемы реакции откладывается в поровых пустотах в непосредственной близости, т. е. в пределах системы реакционного минералообразования



Однако в мономинеральной форстеритовой породе пористостью практически можно пренебречь [102]. Поэтому для изображения реакции замещения <34>, наиболее строго отвечающей ее геологическому смыслу в условиях отсутствия в системе реакции пористости, необходимо «выносимые» *Srp* и *Bru* исключить из правой части реакции, одновременно исключив из левой ее части соответствующее количество H₂O и введя в правую часть реакции соответствующее количество Mg и Si: см. формулы (86), (87а), (87б) и (88).

В этом случае реакция, наиболее строго отвечающая геологическому существу ее процесса, примет вид



Однако в такой сбалансированной по объему реакции вынос Mg и Si в элементной форме мало вероятен, а вернее, невозможен. Следовательно, должны быть подобраны возможные формы миграции Mg и Si в водных растворах, для чего в первом приближении могут быть использованы данные прил. 7 и 8: для Mg — MgOH; для Si — H₃SiO₄⁻ или H₂SiO₄²⁻.

После подстановки указанных веществ вместо Mg, Si и O в реакцию <35> и сбалансирования недостающими H₂O и (OH)⁻ рассматриваемая реакция примет вид



Соотношения между дополнительным количеством H₂O и (OH)⁻ определялись, исходя из необходимых для сбалансирования левой и правой частей реакции количеств атомов H и O, в результате чего имеем:

$$H = 1,36 + 2 \cdot 0,68 = 2,72;$$

$$O = (1,36 + 4 \cdot 0,68) - 2,21 = 1,36.$$

Приняв H₂O = *y*, а OH⁻ = *x*, имеем систему уравнений:

$$y + x = 1,77;$$

$$2y + x = 2,72,$$

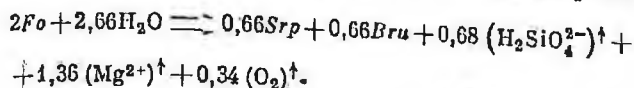
откуда *y* = 1,36, а *x* = 0.

В целом реакция метасоматического преобразования *Fo* в *Srp* + *Bru* в конечном итоге может быть записана в следующей форме:



Естественно, это один из возможных вариантов реакции разложения *Fo* под воздействием H₂O в слабо щелочных условиях. Однако подобная запись реакции ближе соответствует реальным условиям метасоматического преобразования форстеритовых пород, нежели реакция <33>.

Однако при таком выражении реакции не удается подобрать необходимых значений S_{298}^V и $C_{p, 298}^V$ для $MgOH^+$ (см. прил. 7) из-за их отсутствия. Поэтому вынуждены заведомо еще более схематизировать реакцию <37>, выразив выносимое количество магния через Mg^{2+} . Тогда реакция примет вид



<38>

В таком выражении реакция проходит в окислительных условиях.

Получив новое выражение реакции метасоматического преобразования Fo в $Srp + Bru$ (<38> вместо <33>), определим поля устойчивости минералов в координатах $p - T$ по величине ΔZ по методике, изложенной в работе А. Г. Булаха [9], заменяя соответствующие параметры на удельные величины (приведенные к объему формульных единиц веществ согласно прил. 6—11), и сравним полученные результаты с приведенными в указанном руководстве [9].

Приращение удельного изобарного потенциала системы при протекании в ней реакции при температуре T (в °К) и давлении p (в кгс/см²) определяется по формуле

$$(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{p, T} = (\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{298} - \Delta Z_{\text{реак}}^T + \Delta Z_{\text{реак}}^p \quad (104)$$

1. $\Delta (Z_{\text{реак}}^V)_{298}$ — изменение удельного изобарного потенциала системы при протекании в ней реакции в стандартных условиях ($T = 298,15^\circ \text{ К}$ [25° С] и $p = 1 \text{ кгс/см}^2$) — определяется по формуле (105)

$$(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{298} = \left\{ \sum_1^j (K_j^V \Delta Z_{298}^V, j) \right\}_k - \left\{ \sum_1^r (K_r^V \Delta Z_{298}^V, r) \right\}_0, \quad (105)$$

где $\Delta Z_{298}^V, j; \Delta Z_{298}^V, r$ — стандартный удельный изобарный потенциал индивидуальных веществ реакции в стандартных условиях соответственно конечных продуктов реакции (от 1 до j) и исходных (от 1 до r); устанавливается в прил. 6 (графа 5), 7 (графа 3) и 8; K_j^V, K_r^V — коэффициенты индивидуальных веществ в равнообъемных реакциях, указывающие количество их формульных единиц соответственно конечных продуктов (от 1 до j) и исходных (от 1 до r);

$$\left\{ \sum_1^j (K_j^V \Delta Z_{298}^V, j) \right\}_k, \left\{ \sum_1^r (K_r^V \Delta Z_{298}^V, r) \right\}_0 —$$

сумма произведений удельного стандартного изобарного потенциала индивидуального вещества на количество его формульных единиц соответственно конечных веществ (от 1 до j) и исходных продуктов (от 1 до r) реакции.

В прил. 6 (графа 5) находим ΔZ в (ккал/ф. ед.) · 10⁻²³:

$$\Delta Z_{298}^V, Fo = -81,8;$$

$$\Delta Z_{298}^V, Srp = -160,5;$$

$$\Delta Z_{298}^V, Bru = -33,2;$$

$$\Delta Z_{298}^V, H_2O \text{ (жид)} = -9,4.$$

В прил. 7 (графа 3) находим ΔZ в (ккал/ф. ед.) $\cdot 10^{-23}$:

$$\Delta Z_{298, Mg^{2+}}^V = -18,1;$$

$$\Delta Z_{298, H_2SiO_4^2-}^V = -47,1;$$

$$\Delta Z_{298, O_2}^V = +0,6.$$

Далее вместо указанной единицы измерения записывается «удельно-изобарно-потенциальная единица» — сокращенно — уд.-пзб.-п. ед.:

$$\begin{aligned} (\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{298} &= \{(-0,66 \cdot 160,5) + (-0,66 \cdot 33,2) + (-1,36 \cdot 18,1) + \\ &+ (-0,68 \cdot 47,1) + (0,34 \cdot 0,6)\}_K - \{(-2 \cdot 81,8) + (-2,66 \cdot 9,4)\}_0 \approx \{-105,9 - 21,9 - \\ &- 24,6 - 32,0 + 0,2\}_K - \{-163,6 - 25,0\}_0 = -184,2 + 188,6 = \\ &= +4,4 \text{ уд.-пзб.-п. ед.} = +4,4 \cdot 10^{-23} \text{ ккал.} \end{aligned}$$

Таким образом, в стандартных условиях реакция $\langle 38 \rangle$ не осуществима, в то время как эта же реакция, записанная в форме $\langle 33 \rangle$, может осуществляться самопроизвольно слева направо, так как ее $(\Delta Z)_{\text{реак}} = -11,3$ ккал [9, с. 73, реакция 1], что соответствует $-1,9$ уд.-пзб.-п. ед. $= -1,9 \cdot 10^{-23}$ ккал.

II. $\Delta Z_{\text{реак}}^T$ — величина приращения удельного изобарного потенциала реакции за счет изменения температуры; находится по следующим формулам (106) *.

$$\Delta Z_{\text{реак}}^T = 0,001 \{ (\Delta S_{\text{реак}}^V)_{298} (T - 298) + \Delta a A_Z + \Delta b B_Z + \Delta c C_Z \}; \quad (106a)$$

$$\Delta Z_{\text{реак}}^T = 0,001 \{ (\Delta S_{\text{реак}}^V)_{298} (T - 298) + \Delta \bar{C}_p A_Z \}; \quad (106b)$$

$$\Delta Z_{\text{реак}}^T = 0,001 \{ (\Delta S_{\text{реак}}^V)_{298} (T - 298) + \Delta C_{p, 298}^V A_Z \}, \quad (106в)$$

где $(\Delta S_{\text{реак}}^V)_{298}$ — удельный энтропийный эффект химической реакции, протекающей в стандартных условиях ($T = 298,15^\circ \text{K}$ [25°C] и $p = 1 \text{ кгс/см}^2$); устанавливается согласно формуле

$$(\Delta S_{\text{реак}}^V)_{298} = \left\{ \sum_1^j (K_j^V S_{298, j}^V) \right\}_K - \left\{ \sum_1^r (K_r^V S_{298, r}^V) \right\}_0, \quad (107)$$

где $S_{298, j}^V, S_{298, r}^V$ — удельная стандартная энтропия вещества в реакции соответственно конечных веществ (от 1 до j) и исходных продуктов реакции (от 1 до r) в стандартных условиях; размерность (кал/ф. ед.) $\cdot 10^{-23}$ = удельно-энтропийная единица (уд.-э. ед.); устанавливается в прил. 6 (графа 6) и 7 (графа 4).

$$\left\{ \sum_1^j (K_j^V S_{298, j}^V) \right\}_K, \quad \left\{ \sum_1^r (K_r^V S_{298, r}^V) \right\}_0 -$$

сумма произведений удельной стандартной энтропии индивидуального вещества на количество его формульных единиц соответственно конечных веществ (от 1 до j) и исходных продуктов (от 1 до r) реакции.

* Наиболее достоверны результаты расчетов по формуле (106a), наименее — по (106в).

В прил. 6 (графа 6) находим S в (кал./ф. ед.) $\cdot 10^{-23}$:

$$S_{298, Fe}^V = +3,8;$$

$$S_{298, SrP}^V = +8,9;$$

$$S_{298, Bru}^V = +2,5;$$

$$S_{298, H_2O}^V (\text{жид.}) = +2,8.$$

В прил. 7 (графа 4) находим S в (кал./ф. ед.) $\cdot 10^{-23}$:

$$S_{298, H_2SiO_4}^V = -0,5;$$

$$S_{298, O_2}^V = +4,4;$$

$$S_{298, Mg^{2+}}^V = -4,7.$$

$$\begin{aligned} (\Delta S_{\text{реак}}^V)_{298} &= \{(0,66 \cdot 8,9) + (0,66 \cdot 2,5) + (-0,68 \cdot 0,5) + (-1,36 \cdot 4,7) + (0,34 \cdot 4,4)\}_k - \\ &- \{(2 \cdot 3,8) + (2,66 \cdot 2,8)\}_0 \approx \{5,9 + 1,6 - 0,3 - 6,4 + 1,5\}_k - \{7,6 + 7,5\}_0 = \\ &= +2,3 - 15,1 = -12,8 \text{ уд.-э. ед.} \end{aligned}$$

Это значение ΔS не противоречит рассчитанному и для реакции в форме <33>, для которой оно составляет $-26,8$ кал/град-моль, что соответствует $-4,5$ уд.-э. ед. [9, с. 61].

Значения коэффициентов Δa , Δb , Δc отвечают разностям между суммами коэффициентов a , b , c , каждый из которых помножен на количество формульных единиц начальных и конечных продуктов реакции. Коэффициенты a , b , c находятся в прил. 6 (графы 7—9) и подставляются в формулы:

$$\Delta a = \left\{ \sum_1^j (K_j^V a_j) \right\}_k - \left\{ \sum_1^r (K_r^V a_r) \right\}_0; \quad (108a)$$

$$\Delta b = \left\{ \sum_1^j (K_j^V b_j) \right\}_k - \left\{ \sum_1^r (K_r^V b_r) \right\}_0; \quad (108б)$$

$$\Delta c = \left\{ \sum_1^j (K_j^V c_j) \right\}_k - \left\{ \sum_1^r (K_r^V c_r) \right\}_0. \quad (108в)$$

Величины коэффициентов A_Z , B_Z и C_Z , подставляемых в формулу (106а), находятся в прил. 11 (графы 3—5). Так, для 300°C эти коэффициенты составляют $A_Z = 99,6$; $B_Z = 37,8$; $C_Z = 74,2$.

a_j , b_j , c_j и a_r , b_r , c_r — коэффициенты a , b , c соответственно конечных продуктов реакции от 1 до j (в данном примере SrP , Bru , $H_2SiO_4^-$, Mg^{2+} , O_2) и начальных от 1 до r (в данном примере Fe и H_2O); находятся в прил. 6 (для a — графа 7, b — графа 8, c — графа 9); по ним рассчитывается величина C_p^V *;

* Рассчитывается по формуле $C_p^V = 0,16602 \cdot C_p \cdot 10^{-23}$ кал/(ф. ед. град) (109а), где $C_p = (a + bT - cT^{-2})$ кал/(моль-град) (109б) [63, с. 306].

K_j^V, K_r^V — коэффициенты реакции соответственно конечных (от 1 до j) и начальных (от 1 до r) веществ реакции; указывают количество формульных единиц каждого из вещества, участвующих в реакции.

Однако произвести расчет $\Delta Z_{\text{реак}}^T$ реакции <38> по формуле (106а) не представляется возможным из-за отсутствия для Mg^{2+} и $\text{H}_2\text{SiO}_4^{2-}$ данных для a, b, c .

Для расчетов по формуле (106б) используются величины $\Delta \bar{C}_p^V$ и A_Z .

$\Delta \bar{C}_p^V$ — это приращение средней удельной теплоемкости вещества, отвечающее определяемому интервалу температур. Величина \bar{C}_p^V устанавливается в прил. 6 для определенных интервалов $T^\circ\text{K}$ при стандартном давлении в 1 кгс/см² (графа 10), а A_Z , приведена в прил. 11 (графа 3) для различных интервалов температур.

$$\Delta \bar{C}_p^V = \left\{ \sum_1^j (\bar{C}_{p,j}^V K_j^V) \right\}_k - \left\{ \sum_1^r (\bar{C}_{p,r}^V K_r^V) \right\}_0. \quad (110а)$$

Произвести расчет $\Delta Z_{\text{реак}}^T$ реакции <38> по формуле (106б) также не представляется возможным из-за отсутствия всех необходимых справочных значений для расчета $\Delta \bar{C}_p^V$ и, следовательно, $\Delta \bar{C}_p^V$.

Для $\Delta Z_{\text{реак}}^T$ реакции <38> по формуле (106в) необходимо знание $\Delta C_{p,298}^V$ — приращения удельной стандартной теплоемкости реакции и величины коэффициента A_Z . Последний находится в прил. 11 (графа 3) для определяемого интервала температур.

Величина $\Delta C_{p,298}^V$ устанавливается как разность между суммами удельных стандартных теплоемкостей конечных продуктов реакции (от 1 до j) и исходных веществ (от 1 до r) по формуле

$$\Delta C_{p,298}^V = \left\{ \sum_1^j (C_{p,298}^V K_j^V) \right\}_k - \left\{ \sum_1^r (C_{p,298}^V K_r^V) \right\}_0. \quad (110б)$$

Величина $C_{p,298}^V$ для каждого из веществ находится в прил. 6 (гр. 7—9) п 7, а в случае отсутствия в нем, то по значениям величины $C_{p,298}^0$, приводимой в различных справочных работах [35, 69 и др.],

$$C_{p,298}^V = 0,16602 C_{p,298}^0 \cdot 10^{-23}. \quad (111)$$

Для рассматриваемой реакции <38> величины удельных стандартных теплоемкостей составляют согласно $C_{p,298}^V$ [63]*:

$$C_{\text{Fe}}^V = 0,16602 \cdot 28,2 = 4,7 \quad (\text{в прил. 6 } C_{\text{Fe}}^V = 5,9 + 1,1 \cdot 298 \cdot 10^{-3} - 1,4 \cdot 298^{-2} \cdot 10^5 = 4,65)$$

$$C_{\text{Sr}}^V = 0,16602 \cdot 65,4 = 10,9 \quad (\text{в прил. 6 } C_{\text{Sr}}^V = 9,6 + 1,1 \cdot 298 \cdot 10^{-3} - 1,7 \cdot 298^{-2} \cdot 10^5 = 10,96)$$

$$C_{\text{Br}}^V = 0,16602 \cdot 18,4 = 3,1 \quad (\text{в прил. 6 } C_{\text{Br}}^V = 2,2 + 2,6 \cdot 298 \cdot 10^{-3} = 3,0)$$

$$C_{\text{H}_2\text{O}}^V = 3 \quad (\text{см. прил. 7, графа 5});$$

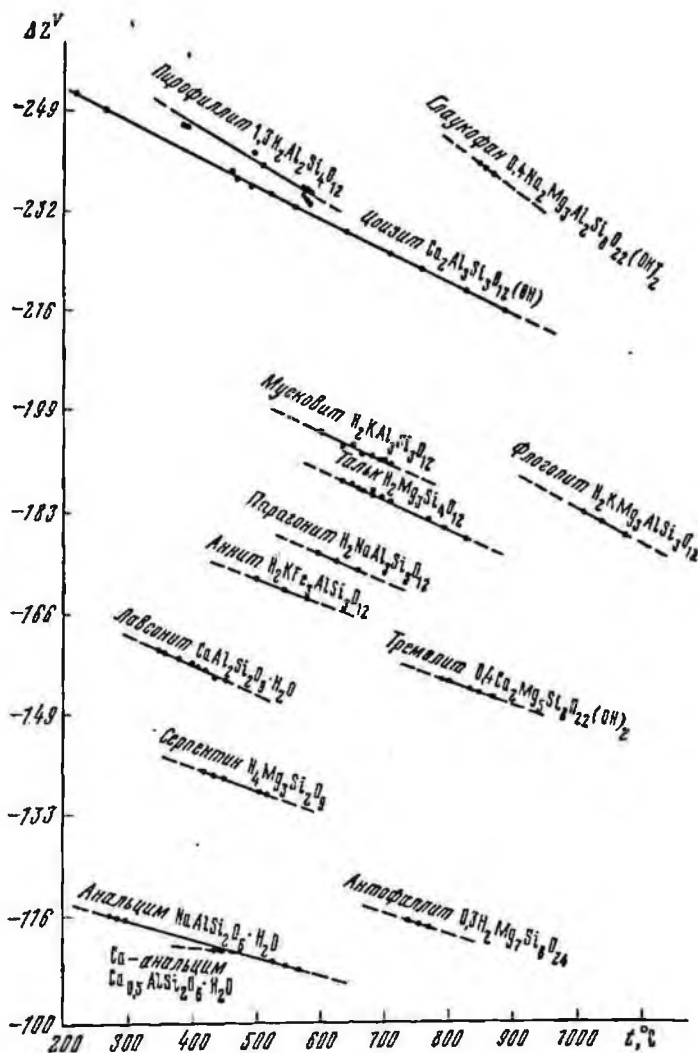
$$C_{\text{H}_2\text{SiO}_4}^V = -11,1 \quad \text{»} \quad \text{»} \quad 7 \quad \text{»} \quad 5$$

$$C_{\text{Mg}^{2+}}^V = -1,5 \quad \text{»} \quad \text{»} \quad 7 \quad \text{»} \quad 5$$

$$C_{\text{O}_2}^V = 5,5 \quad \text{»} \quad \text{»} \quad 7 \quad \text{»} \quad 5$$

* Коэффициент 10^{-23} не записывается, ибо он для всех рассматриваемых величин теплоемкости и энтальпии — величина постоянная. Нужно лишь помнить, что размерность энтальпии и изобарного потенциала в 1000 раз больше размерности энтальпийных и теплоемкостных величин.

Рис. 11. Ориентировочные зависимости величины удельного поверхностного потенциала (ΔZ_T^V , в [ккал/ф. ед.] $\cdot 10^{-23}$) минералов и веществ от температуры (при допущении постоянства ΔS) [58]



Величина $\Delta C_{p, 298}^V$ для реакции <38> составит:

$$\Delta C_{p, 298}^V = \{0,66 \cdot 10,9 + 0,66 \cdot 3,1 - 0,68 \cdot 11,1 - 1,36 \cdot 1,5 + 0,34 \cdot 5,5\} \text{к} - \\ - \{2 \cdot 4,7 + 2,66 \cdot 3\} \text{о} \approx 7,2 + 2,1 - 7,6 - 2,0 + 1,9 - 9,4 - 8,0 = -15,8 \cdot 10^{-23} \text{ кал/град.}$$

Для температуры 300°C ($T = 573,15^\circ\text{K}$) величина $\Delta Z_{\text{реак}}^T$ реакции <38> составит {см. формулу (106в)} *

$$\Delta Z_{\text{реак}}^T = 0,001 \{ -12,8 \cdot (573 - 298) - (15,8 \cdot 99,6) \} = \\ = 0,001 \cdot (-3520 - 1573,7) \approx -5,1 \text{ уд. наб.-п. ед.}$$

* Для 300°C величина коэффициента $A_Z = 99,6$ (см. прил. 11, графа 3), а ($T - 298^\circ$) = $= 275^\circ\text{K}$ (см. прил. 11, графа 2).

Отсюда величина $(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_T$ определяется по формуле

$$(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_T = (\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{298} - \Delta Z_{\text{реак}}^T \quad (112)$$

где $\Delta Z_{\text{реак}}^T$ определяется по одной из формул (106а), (106б) или (106в).
Для реакции <38> для 300° С будем иметь

$$(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{298} = +4,4 + 5,1 = +9,5 \text{ уд.-изб.-п. ед.}$$

Для реакции <33> в работе [9] (с. 74, пример 3, реакция 1) величина $(\Delta Z_{\text{реак}})_T$ составила -1,3 ккал, что соответствует -0,2 (уд.-изб.-п. ед) $\times \text{Å}^3 = -0,2 \cdot 10^{-23}$ ккал.

Следовательно, если реакция, записанная в форме <33> в условиях $t = 300^\circ \text{С}$ и $p = 1 \text{ кгс/см}^2$, принципиально осуществима, то в форме, наиболее отвечающей геологическому существу ее, т. е. реакции <38>, серпентинизация форстерита самопроизвольно не осуществима.

Величина $(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_T$ может быть оценена приближенно на основе диаграмм рис. 11 и 12, где значения ΔZ_T индивидуальных веществ рассчитаны, исходя из предположения постоянства величины ΔS [58], и переведены автором в удельно-пзобарно-потенциальные единицы

Величина $(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_T$ может быть определена и на основе данных о приращении величин удельной стандартной энтропии $\{(\Delta S_{\text{реак}}^V)_{298}\}$ и энтальпии $\{(\Delta H_{\text{реак}}^V)_{298}\}$ реакции, согласно формуле

$$(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_T = (\Delta H_{\text{реак}}^V)_{298} - T (\Delta S_{\text{реак}}^V)_{298} - T \Delta C_p^V \left(\ln \frac{T}{298} + \frac{298}{T} - 1 \right), \quad (113)$$

где $\Delta C_p^V > (\Delta H_{\text{реак}}^V)_{298}$, $(\Delta S_{\text{реак}}^V)_{298}$ находятся как разность между суммами соответственно удельных теплоемкостей, стандартных энтальпий и энтропий конечных и исходных продуктов реакции. Находятся указанные величины в прил. 6 и 7.

III. $\Delta Z_{\text{реак}}^p$ — величина приращения удельного изобарного потенциала реакции за счет изменения давления; находится по формуле

$$\Delta Z_{\text{реак}}^p = \Delta K_G^V (\Delta Z_G^V)_p + \Delta V_{\text{конд}} (p_k - p_0) \Phi, \quad (114)$$

где ΔK_G^V — приращение числа формульных единиц газообразного вещества G в реакции; Φ — коэффициент перевода в ккал *; $(\Delta Z_G^V)_p$ — приращение удельного изобарного потенциала формульной единицы газовой фазы G.

Для идеальных газов $(\Delta Z_G^V)_p$ определяется по формуле (115а), для реальных газов берется в специальных таблицах, согласно значениям T и p (10, 35, 71, 107 и др.), для некоторых из них (H_2O , CO_2 , CO , H_2) — может быть «снята» с графиков в работах [63, 71] **.

$$(\Delta Z_G^V)_p = \Delta K_G^V RT \ln \frac{p_k}{p_0} = 0,76 \Delta K_G^V T \lg \frac{p_k}{p_0}, \quad (115a)$$

* $\Phi = 2,4217 \cdot 10^{-29}$ (ккал·см³)/(кгс·Å³) = $2,4217 \cdot 10^{-29}$ ккал/(атм·Å³) = $2,4217 \cdot 10^{-6}$ уд.-пзб.-п. ед./атм.

** Подробную библиографию см. в работе Л. Г. Булаха [9]. Следует помнить $(\Delta Z_G^V)_p = 0,166 (\Delta Z_G)_p \cdot 10^{-23}$.

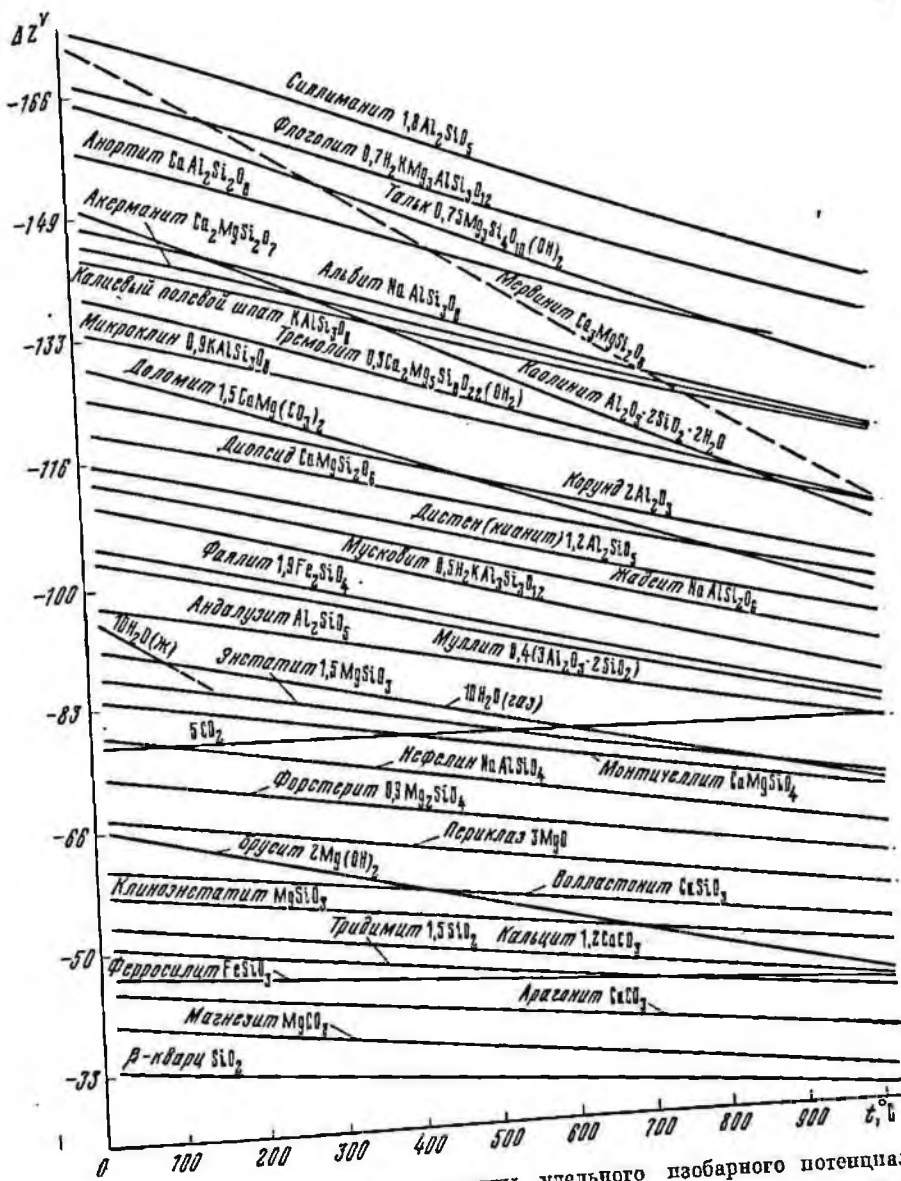


Рис. 12. Схема зависимости величины удельного изобарного потенциала (ΔZ_T , в [ккал/ф. ед.] · 10^{-23}) образования водных минералов от температуры [58]

где $\Delta K_G^V = \left(\sum_i K_V^i - \sum_j K_V^j \right)_G$ — сумма изменения числа формульных единиц газообразных веществ в реакции; R — универсальная газовая постоянная (1,9872 ккал/град·моль = 0,3298 (ккал/град·ф. ед.) · 10^{-23} ; см. прил. 16; P_K, P_0 — давление на газовую фазу соответственно конечное и начальное (в кгс/см²); T — температура конечная, °К.

Для реальных газов в случае, если отсутствуют значения $(\Delta Z_G^V)_p$, можно пользоваться величинами объемов формульных единиц, соответствующими определенным значениям T и p и снимаемым с графиков в работе Л. Л. Перчука [71], которые умножаются на величину $0,166 \cdot 10^{-23}$ приращення числа формульных единиц каждой газовой фазы K_G^V и на приращение давления. Величины формульных объемов H_2O , CO_2 и CH_4 могут находиться согласно заданным значениям T и p соответственно в прил. 12, 13, 14. В этом случае подобные вещества могут условно включаться в число фаз по формуле

$$\Delta Z_{\text{реак}}^p = \Delta V \Phi (p_k - p_0) = \left\{ \sum_1^j (K_j^V V_j^M)_k - \sum_1^r (K_r^V V_r^M)_0 \right\} \Phi (p_k - p_0), \quad (115б)$$

где V_j^M , V_r^M — объемы формульных единиц фаз (в \AA^3) соответственно конечных продуктов реакции (от 1 до j) и этих же исходных веществ (от 1 до r); находится в прил. 5 (графа 16), 6 (графа 3), 9 (графы 2 и 4); K_j^V , K_r^V — коэффициенты в реакции, показывающие число участвующих в ней формульных единиц соответственно конечных продуктов реакции (от 1 до j) и исходных веществ (от 1 до r); $K_j^V \cdot V_j^M$, $K_r^V \cdot V_r^M$ — общий объем, занимаемый веществом, участвующим в реакции, соответственно конечными продуктами реакции (от 1 до j) и этими же исходными веществами (от 1 до r). Условно принимается, что объем минеральных составляющих и растворенных фаз не зависит от температуры и давления, хотя соответствующие поправки могут быть и введены, но будут находиться за пределами суммарной точности вычислений.

Для реакции <38> $\Delta Z_{\text{реак}}^p$ при $p = 1500$ кгс/см² и $t = 300^\circ \text{C}$ составляет

$$\Delta Z_{\text{реак}}^p = \Delta K_{H_2O}^V (\Delta Z_{H_2O}^V)_p + [V_{Sr_p} + V_{Br_u} - V_{Fo}] (1500 - 1) \Phi; \\ (\Delta Z_{H_2O}^V)_p = \Delta V_{H_2O} (p_k - p_0) \Phi = \Delta K_{H_2O}^V V_{H_2O}^M (p_k - p_0) \Phi, \quad (115в)$$

где $V_{H_2O}^M$ находится в прил. 12 на пересечении значений $p = 1500$ кгс/см² (1,5 кбар) и $t = 300^\circ \text{C}$.

$$(\Delta Z_{H_2O}^V)_p = (0 - 2,66) \cdot 34,85 \cdot 1499 \Phi \approx -138\,959 \text{ атм } \text{\AA}^3 \cdot 2,4217 \cdot 10^{-29} \text{ (ккал/атм } \text{\AA}^3) = \\ = -0,336 \cdot 10^{-23} \text{ ккал} \approx -0,34 \text{ уд.-изб.-п. ед.}$$

Для расчета полного приращения $\Delta Z_{\text{реак}}^p$ необходимо знание приращения конденсированных фаз, объемы формульных единиц которых заимствуются из прил. 6 (графа 3):

$$V_{Sr_p} = K_{Sr_p}^V V_{Sr_p}^M = 0,66 \cdot 178 \approx 117,4 \text{ } \text{\AA}^3; \\ V_{Br_u} = K_{Br_u}^V V_{Br_u}^M = 0,60 \cdot 40,8 \approx 26,9 \text{ } \text{\AA}^3; \\ V_{Fo} = K_{Fo}^V V_{Fo}^M = 2 \cdot 72,7 \approx 145,4 \text{ } \text{\AA}^3; \\ V_{H_2O} = K_{H_2O}^V (V_{H_2O}^M)_{T,p} = 2,66 \cdot 34,85 \approx 92,7 \text{ } \text{\AA}^3.$$

$\Delta Z_{\text{реак}}^p$, рассчитанное по формуле (114),

где $(\Delta Z_G^V)_p = (\Delta Z_{H_2O}^V)_p$, определяется, исходя из значений $(-Z_T)$ воды в табл. 8 из работы И. К. Карпова и др. [36] {см. уравнение (115г)} или

$(Z_{p_k} - Z_{p_0})$ воды в табл. 42 из работы П. К. Карпова и др. [35] (см. уравнение (115д)):

$$\begin{aligned} (\Delta Z_{H_2O}^V)_p &= 0,16602 \{ (-Z_T) - (\Delta Z_{298}^0) + (\Delta_T^*) \}_{H_2O} = \\ &= 0,16602 \{ +165 - 150,8 - 17,0 \} \approx 0,16602 (-2,1) \approx -0,34 \text{ уд.-пзб.-п. ед.;} \end{aligned} \quad (115г)$$

$$\begin{aligned} (\Delta Z_{H_2O}^V)_p &= 0,16602 \{ (Z_{p_k} - Z_{p_0}) - (\Delta Z_{298}^0) \}_{H_2O} = 0,16602 (+14,9 - 17,9)_{H_2O} = \\ &= 1,6602 \cdot (-2,08) = -0,34 \text{ уд.-пзб.-п. ед.} \end{aligned} \quad (115д)$$

Исходя из данных уравнений (115в), (115г) и (115д), определяется общее приращение изобарного потенциала за счет изменения давления по уравнению

$$\begin{aligned} \Delta Z_{\text{реак}}^p \langle \text{зв} \rangle &= -0,34 + \{ (V_{Brn} + V_{SrP})_k - (V_{Fo})_0 \} \cdot 1499 \cdot \phi = -0,34 + \\ &+ (26,9 + 117,4 - 145,4) \cdot 1499 \cdot 2,4217 \cdot 10^{-6} = -0,346 \approx -0,35 \text{ уд.-пзб.-п. ед.} \end{aligned} \quad (115е)$$

Если расчет вести по уравнению (115б), то к определенно значения $\Delta Z_{\text{реак}}^p$ можно подойти путем подстановки полученного значения $(\Delta Z_{H_2O}^V)_p$ (см. прил. 12) по величине ΔV_{H_2O} и Δp^* в соответствии с уравнением *

$$\begin{aligned} \Delta Z_{\text{реак}}^p \langle \text{зв} \rangle &= \{ -2,66 \cdot 34,85 + (117,4 + 26,9 - 145,4) \} \cdot 1499 \cdot \phi = \\ &= (-142 \cdot 107 \text{ кгс} \cdot \text{А}^3/\text{см}^2) \cdot 2,4217 \cdot 10^{-6} \approx -0,34 \text{ уд.-пзб.-п. ед.} \end{aligned} \quad (115ж)$$

Для реакции $\langle 33 \rangle$, которая приведена в работе А. Г. Булаха [9, с. 75, пример 5], величина $\Delta Z_{\text{реак}}^p = -0,4$ ккал, что соответствует $-0,07$ уд.-пзб.-п. ед.

Таким образом, при наличии жидкой или газовой фазы в процессе метасоматического минерало- и породообразования приращение величины $\Delta Z_{\text{реак}}^p$ реакции $\langle 38 \rangle$, проходящей в условиях постоянства геологического объема, практически целиком определяется значением $(\Delta Z_G^V)_p$ или $(\Delta Z_{ж}^V)_p$, особенно при высоких T , и почти не реагирует на изменение $(\Delta Z_m^V)_p$ твердых фаз.

IV. Полное приращение изобарного потенциала реакции $\langle 38 \rangle$ при $t = 300^\circ \text{C}$ и $p = 1500 \text{ кгс/см}^2$ будет иметь вид (см. формулы (104), (112) и (115в))

$$\begin{aligned} (\Delta Z_{\text{реак}}^V \langle \text{зв} \rangle)_{T, p} &= (\Delta Z_{\text{реак}}^V \langle \text{зв} \rangle)_{298} - \Delta Z_{\text{реак}}^T \langle \text{зв} \rangle + \Delta Z_{\text{реак}}^p \langle \text{зв} \rangle = \\ &= +4,4 + 5,1 - 0,34 = +9,16 \text{ уд.-пзб.-п. ед.} \end{aligned}$$

Следовательно, реакция $\langle 38 \rangle$ в условиях $t = 300^\circ \text{C}$ и $p = 1500 \text{ кгс/см}^2$ самопроизвольно протекать не может, в то время как процесс серпентинизации форстерита, выраженный по форме $\langle 33 \rangle$, т. е. без учета геологических условий процесса метасоматизма, может совершаться самопроизвольно, что следует из значения величины $(\Delta Z_{\text{реак}})_{T, p}$, приведенной в работе А. Г. Булаха [9, с. 76, пример 9, реакция 1] и равной $-1,9$ ккал, что отвечает $(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{T, p} = -0,3 \text{ ккал} \cdot 10^{-23}$, т. е. $-0,3$ уд.-пзб.-п. ед.

V. Определение полей устойчивости минералов в координатах $p - T$ по величине $(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{p, T}$.

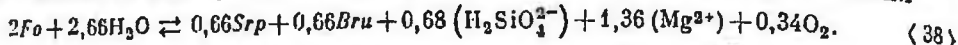
Методика построения диаграмм в координатах $p - T$ и определение на них полей устойчивости сосуществующих минералов разобрана в работах

* Принимается, что объем твердых фаз не меняется с изменением величины p и T .

А. Г. Булаха и А. А. Маркушева [9, 58 и др.] и сводится к установлению линии равновесия между начальными и конечными продуктами реакции по точкам равновесных температур и давлений согласно уравнению (116) *

$$-\{(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{298} - \Delta Z_{\text{реак}}^T\} = \Delta Z_{\text{реак}}^p \quad (116)$$

Сначала вычисляется значение $\Delta Z_{\text{реак}}^T$ для ряда произвольных значений T , затем подсчитывается величина $-\{(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{298} - \Delta Z_{\text{реак}}^T\} = \Delta Z_{\text{реак}}^p$. По значению $\Delta Z_{\text{реак}}^p$ устанавливается значение p , которое компенсирует изменение ΔZ системы за счет изменения температуры и приводит реакцию к условиям равновесия



Величина $(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{298} = +4,4$ (рассчитана на с. 142), а $\Delta Z_{\text{реак}}^T = -5,1$ для 300°C (рассчитана на с. 145).

Величина $\Delta Z_{\text{реак}}^T = 0,001 \{-12,8 (T - 298) - (15,8 \cdot A_Z)\}$, будучи рассчитанной по формуле (106в), где $(T - 298) = (t - 25)^\circ \text{C}$, а A_Z — отвечает величине t и находится в прил. 11.

Отсюда определяется значение $\Delta Z_{\text{реак}}^p$

$$\Delta Z_{\text{реак}}^p = -\{(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{298} - \Delta Z_{\text{реак}}^T\} = -\{4,4 - [0,0128 (t - 25) - 0,0158A_Z]\} = -\{4,4 + 0,0128 (t - 25) + 0,0158A_Z\} \text{ уд.-лаб.-п. ед.} \quad (117)$$

Согласно формуле (114), а также расчетам на с. 148 при допущении $p = p_0 = p_{\text{H}_2\text{O}} \neq p_m$ и $(p_k - p_0) = p'_k$, так как $p_0 = 1 \text{ кгс/см}^2$, имеем **:

$$\Delta Z_{\text{реак}}^p = 2,4217 \cdot 10^{-6} \{ \Delta K_{\text{H}_2\text{O}}^V (V_{\text{H}_2\text{O}}^M)_T, p_{\text{H}_2\text{O}}^p + \Delta V_m p'_m \}; \quad (118a)$$

$$\Delta Z_{\text{реак}}^p \langle \text{зз} \rangle = 2,4217 \cdot 10^{-6} \{ -2,66 (V_{\text{H}_2\text{O}}^M)_T, p_{\text{H}_2\text{O}}^p + (-1,7) p'_m \}, \quad (118b)$$

где p'_m и $p'_{\text{H}_2\text{O}}$ — давление соответственно на твердую фазу и газовой фазы, в данном случае воды. Исходя из выражения (117), будет иметь место уравнение

$$-\{4,4 + 0,0128t + 0,0158A_Z\} = 2,4217 \cdot 10^{-6} \{ -2,66 (V_{\text{H}_2\text{O}}^M)_T, p_{\text{H}_2\text{O}}^p - 1,7p'_m \}; \quad (119a)$$

$$p'_m = 242902 (4,4 + 0,0128t + 0,0158A_Z) - 1,56 (V_{\text{H}_2\text{O}}^M)_T, p_{\text{H}_2\text{O}}^p = 995898 + 3109t + 3838A_Z - 1,56 (V_{\text{H}_2\text{O}}^M)_T, p_{\text{H}_2\text{O}}^p. \quad (119b)$$

Для установления равновесных взаимоотношений между $p_{\text{H}_2\text{O}}$ и p'_m могут быть использованы данные прил. 12, в котором дана зависимость формульных объемов H_2O от t и p . В прил. 13 и 14 приведены подобные зависимости соответственно для CO_2 и CH_4 .

Для реакции <33> взаимоотношения между $p'_{\text{H}_2\text{O}}$ и p'_m выразятся соответственно уравнениями

$$\Delta Z_{\text{реак}}^p \langle \text{зз} \rangle = 2,4217 \cdot 10^{-6} \{ -3 (V_{\text{H}_2\text{O}}^M)_T, p_{\text{H}_2\text{O}}^p + 72p'_m \}; \quad (120a)$$

$$\Delta Z_{\text{реак}}^p \langle \text{зз} \rangle = -\{ -1,9 - 0,001 [-4,6 (t - 25) - 4,4A_Z] \} = 2,015 - 0,0046t - 0,0044A_Z; \quad (120b)$$

$$p'_m = 5735 \cdot (2,015 - 0,0046t - 0,0044A_Z) + 0,042 (V_{\text{H}_2\text{O}}^M)_T, p_{\text{H}_2\text{O}}^p = 11556 - 26,381t - 25,234A_Z + 0,042 (V_{\text{H}_2\text{O}}^M)_T, p_{\text{H}_2\text{O}}^p. \quad (120b)$$

* Подробно см. в работе А. Г. Булаха [9, с. 84—87].

** Переведение значения $[(\text{кгс/см}^2) A^3]$ в ккал производится согласно прил. 16: $(\text{кгс/см}^2) A^3 = 2,4217 \cdot 10^{-29}$. Но поскольку 1 уд.-лаб.-п. ед. имеет «опускаемый» множитель (10^{-23}) , постольку и в равестве остается лишь множитель (10^{-6}) .

Т а б л и ц а 31

Равновесные значения давлений флюидной фазы воды (p'_{H_2O}) и на твердую фазу (p'_m) в реакции серпентинизации и бруситизации форстерита по типу <33> (см. формулу (120в))

$t, ^\circ C$	$p'_{H_2O}, \text{бар}$	$p'_m, \text{бар}$	$t, ^\circ C$	$p'_{H_2O}, \text{бар}$	$p'_m, \text{бар}$	
100	1	10 827	400	4 000	2 199	
	100	8 811		6 000	4 379	
	2 000	11 129		8 000	6 428	
	4 000	13 314		10 000	8 387	
	6 000	15 351		20 000	17 303	
	8 000	17 297				
	10 000	19 171				
200	20 000	27 785	500	1	-3 761	
	1	7 490		100	-4 118	
	100	5 326		2 000	-4 609	
	2 000	7 779		4 000	-2 205	
	4 000	10 054		6 000	-9	
	6 000	12 152		7 000	1 035	
	8 000	14 133		9 000	3 053	
300	10 000	16 007	600	10 000	4 018	
	20 000	24 798		20 000	13 738	
	1	4 442		700	1	-8 380
	100	1 304			100	-8 619
	2 000	3 962			2 000	-1 983
	4 000	6 313			4 000	-6 858
	6 000	8 460			6 000	-4 667
8 000	10 482	8 000	-2 608			
10 000	12 406	10 000	-629			
400	20 000	21 247	700	20 000	8 388	
	1	528		1	-13 286	
	50	263		100	-13 454	
	100	-45		2 000	-13 905	
	1 000	-1 554		4 000	-11 723	
	2 000	-202		6 000	-9 560	
	3 000	1 033		8 000	-7 503	
		10 000	-5 527			
		20 000	3 528			

Подстановкой в уравнения (119б) и (120в) произвольных значений t и p'_{H_2O} и отвечающих им величин A_Z из прил. 11, а $(V'_{H_2O})_{T, p}$ — из прил. 12, находят равновесные значения p'_m и p'_{H_2O} при заданных величинах t .

Если же не раскрывать содержания величины приращения пзобарного потенциала реакций <38> {см. формулу (117)} и <33> {см. формулу (120б)}, то взаимосвязь между давлением на твердую фазу в случае установления равновесия выразится следующим образом*:

$$\text{для реакции } \langle 33 \rangle \quad p'_m = 5735 (\Delta_Z^p \text{ реак } \langle 33 \rangle) + 0,042 (V'_{H_2O})_{T, p} p'_{H_2O}; \quad (121a)$$

$$p'_m = 952 (\Delta_Z^v \text{ реак } \langle 33 \rangle) + 1,26 (V''_{H_2O})_{T, p} p'_{H_2O}; \quad (121б)$$

* Следует иметь в виду, что $(\Delta_Z^p \text{ реак } \cdot 10^{-23} = 0,16602 (\Delta_Z^p \text{ реак})$ в ккал, а $(V'_{H_2O}) \cdot 10^{-24} = 1,6602 (V''_{H_2O}) = 1,6602 \cdot 18,01 (V''_{H_2O})$ в см³/г. (V''_{H_2O}) — мольный объем воды в см³/моль

Таблица 32

Равновесные значения давлений флюидной фазы воды (p'_{H_2O}) и на твердую фазу в реакции серпентинизации и бруситизации форстерита по типу <38> (см. формулу ((1196)))

$t, ^\circ C$	p'_{H_2O} , бар	p'_m , млн. бар	$t, ^\circ C$	p'_{H_2O} , бар	p'_m , млн. бар	
100	1	~1,26	400	6 000	~2,62	
	100	~1,34		8 000	~2,54	
	2 000	~1,25		10 000	~2,47	
	4 000	~1,17		20 000	~2,14	
		6 000	~1,09	500	1	~3,2
		8 000	~1,02		100	~3,4
		10 000	~0,95		2 000	~3,28
		20 000	~0,63		4 000	~3,33
200	1	~1,70	6 000		~3,25	
	100	~1,78	8 000		~3,17	
	2 000	~1,69	10 000	~3,10		
	4 000	~1,60	20 000	~2,74		
		6 000	~1,52	600	1	~4,07
		8 000	~1,45		100	~4,08
		10 000	~1,38		2 000	~4,10
		20 000	~1,06		4 000	~4,01
300	1	~2,19	6 000	~3,93		
	100	~2,30	8 000	~3,85		
	2 000	~2,21	10 000	~3,78		
	4 000	~2,12	20 000	~3,44		
		6 000	~2,04	700	1	~4,79
		8 000	~1,96		100	~4,80
		10 000	~1,89		2 000	~4,81
		20 000	~1,56		4 000	~4,73
400	1	~2,76	6 000	~4,65		
	100	~2,78	8 000	~4,58		
	2 000	~2,79	10 000	~4,50		
	4 000	~2,70	20 000	~4,17		

для реакции <38>

$$p'_m = 242\,902 (\Delta Z_{\text{реак}}^p \langle \text{зв} \rangle) - 1,56 (V_{H_2O}^M)_{T, p} p'_{H_2O}; \quad (122a)$$

$$p'_m = 40\,326 (\Delta Z_{\text{реак}}^z \langle \text{зв} \rangle) - 0,052 (V_{H_2O}^V)_{T, p} p'_{H_2O}; \quad (122b)$$

где $\Delta Z_{\text{реак}}^z$ — приращение изобарного потенциала в ккал/моль за счет изменения давления: $\Delta Z_{\text{реак}}^z \langle \text{зв} \rangle = +12,14 - 0,027t - 0,0265A_z$; $\Delta Z_{\text{реак}}^z \langle \text{зв} \rangle = +24,7 + 0,077t + 0,095A_z$; $(V_{H_2O}^V)_{T, p}$ — удельный объем воды, г/см³ [10]; находится по приложениям работы А. Г. Булаха и К. Г. Булаха [10].

В табл. 31 и 32 приведены рассчитанные равновесные значения флюидного давления воды (p'_{H_2O}) и давления на твердую фазу (p'_m) соответственно в реакциях <33> и <38>, а на рис. 13 нанесены эти соотношения для разных температур. Из этих данных следует, что реакция <33> развивается в целом в условиях $p'_m > p'_{H_2O}$ при 5000°С, однако при $t = 400^\circ\text{C}$ и $p'_{H_2O} = 111 \div 2040$ атм она может развиваться и при $p'_m < p'_{H_2O}$.

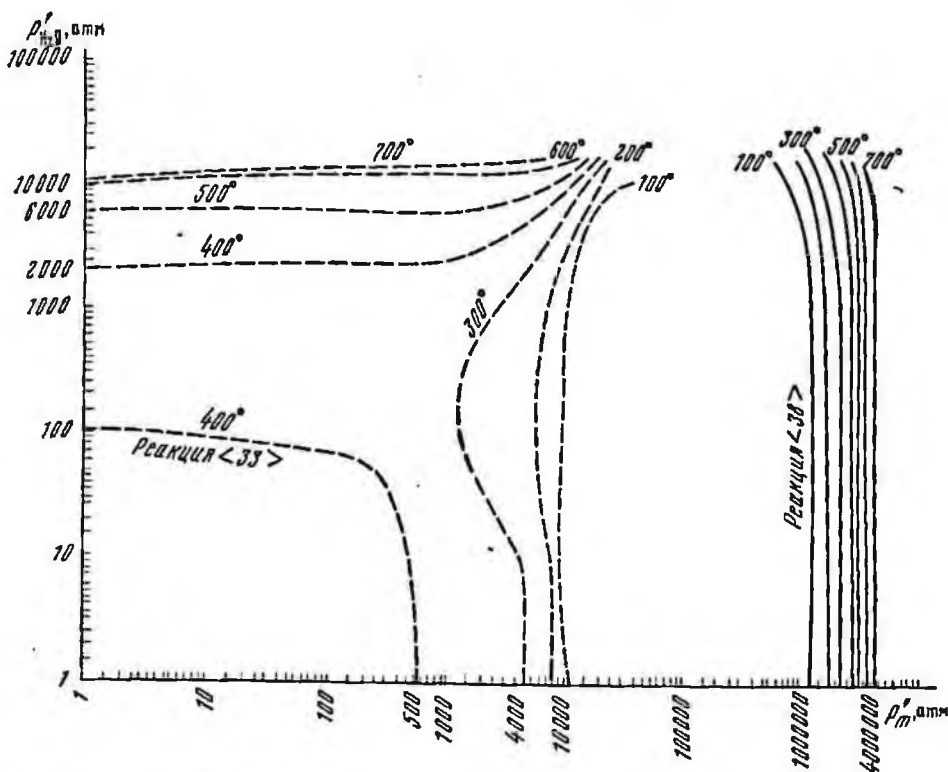


Рис. 13. Равновесные соотношения давления водного флюида (p'_{H_2O}) и давления на твердую фазу (p'_m) в реакциях серпентинизации и бруситизации форстерита <33> (см. табл. 31) и <38> (см. табл. 32) при разных температурах (масштаб логарифмический)

В то же время реакция по типу <38> в природных условиях вообще не может быть реализована. Но поскольку величина p'_m в этой реакции связана с отрицательным приращением объема твердой фазы $\Delta V_m \approx -1,7$ (-1% от объема исходного состава твердых фаз) совершенно условно, то геологически более правильно рассматривать вариант реакции при $\Delta V_m = 0$ и при допущении $p'_m = p'_{H_2O}$. В этом случае полное приращение изобарного потенциала реакции <38> будет устанавливаться по формуле (123а), а равновесное отношение $p'_{H_2O} = p'_m$ с величиной t — по уравнению (123б) при условии $\Delta V_m = 0$.

$$(\Delta Z_{\text{реак } \langle 38 \rangle}^V)_{T, p} = (\Delta Z_{\text{реак } \langle 38 \rangle}^V)_{T, p} - 2,66 \cdot 2,4217 \cdot 10^{-6} (V_{H_2O}^M)_{T, p} \quad (123)$$

$$(V_{H_2O}^M)_{T, p} = 155238 (\Delta Z_{\text{реак } \langle 38 \rangle}^V)_{T, p}$$

где

$$(\Delta Z_{\text{реак } \langle 38 \rangle}^V)_{T, p} = +4,1 + 0,0128t + 0,0158A_Z, \quad \text{а } p = p'_{H_2O} = p'_m.$$

Согласно выражению (123) вычисляются произведения $(V_{H_2O}^M)_{T, p, P}$ для различных t , значения которых сведены в табл. 33 (графа 2). По величине этих произведений согласно изотермам на рис. 14 «снимаются» значения давлений водного флюида, отвечающие соответствующим величинам $V_{H_2O}^M$ и t . Полученные

Таблица 33

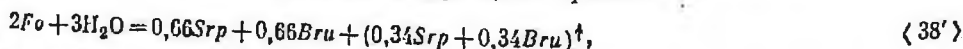
Соотношения между t , $p(V_{H_2O}^M)_{T,p}$ и $p(p = p_{H_2O} = p_m)$ в реакциях серпентинизации и бруситизации форстерита по типу <38> и <38'> (см. рис. 15)

$t, ^\circ C$	Реакция <38>		Реакция <38'>		
	$p(V_{H_2O}^M)_{T,p}$ равновесное	величина p (атм), обеспечивающая реакцию	$p(V_{H_2O}^M)_{T,p}$ равновесное	величина p (атм), обеспечивающая реакцию	
100	856 603	> 40 000	-208 805	Реакция осуществима при любых значениях $p \geq 600$	
150	991 350	> 40 000	-168 339		
200	1 138 981	> 50 000	-124 375		
250	1 202 977	> 60 000	-79 558		
300	1 476 779	> 70 000	-27 116		
350	1 661 512	> 70 000	+25 639		
400	1 856 026	\approx 100 000	+80 797		\approx 2000 ($n < 100$)
450	2 059 698	\approx 100 000	+138 218		\approx 4 000
500	2 271 908	\approx 100 000	+197 726		\approx 6 000
550	2 492 036	\approx 100 000	+259 202		\approx 80 000
600	2 719 459	> 100 000	+322 500		\approx 11 000
650	2 954 179	> 100 000	+387 558		\approx 14 000
700	3 195 264	> 100 000	+454 225		\approx 15 000

Примечание. Реакции могут иметь место при условии, если для реак. <38> $p(V_{H_2O}^M)_{T,p} \geq 155\,238 (4,1 + 0,0128t + 0,00118A_2)$, для реак. <38'> $p(V_{H_2O}^M)_{T,p} \geq 137\,644 \times (0,0046t + 0,0044A_2 - 2,0125)$, а для любой реакции $p(V_G^M)_{T,p} \geq -(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{T,p}$.

таким образом значения p , приведенные в табл. 33 (графа 3), превышают 40 тыс. атм, что геологически совершенно нереально. Следовательно, может быть сделан вывод, что форма записи реакции <38> не отвечает действительности. Но так как термодинамические параметры, отвечающие другим возможным формам выноса химических компонентов в реакции серпентинизации и бруситизации форстерита в условиях допущения постоянства геологического объема, отсутствуют, то можно подойти к выражению подобного типа реакций через минеральные соединения, которые укладывались бы в пористости, если бы она имела место в системе реакции метасоматического минералообразования, но в рассматриваемом случае выносятся за пределы системы реакции (хотя могут и откладываться в различных трещинках).

В рассматриваемом случае реакция серпентинизации и бруситизации форстерита может быть выражена следующим образом:



где знак \dagger указывает на вынос химических компонентов, за и над которыми он стоит.

Выражение реакции серпентинизации и бруситизации форстерита по форме <38'>, хотя и условно, но тем не менее оправдано с тех позиций, что, когда в системе образуются полости и трещинки, они заполняются серпентином и

* Реакция <38>, как и любая другая, осуществима лишь при условии $p(V_G^M)_{T,p} \geq -(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{T,p}$.

бруситом, которые, таким образом, могут выделяться вблизи участков серпентинизации и бруситизации, что и имеет нередко в действительности место [58, 110].

$$(\Delta Z_{\text{реак}}^V \langle \text{зв}' \rangle)_{T, p} = (\Delta Z_{\text{реак}}^V \langle \text{зв}' \rangle)_T - 2,4217 \cdot 10^{-6} [3 (V_{\text{H}_2\text{O}}^M)_{T, p} P], \quad (124a)$$

где

$$(\Delta Z_{\text{реак}}^V \langle \text{зв}' \rangle)_T = (\Delta Z_{\text{реак}}^V \langle \text{зв}' \rangle)_T = -1,9 - 0,001 (-4,6 [t - 25] - 4,4 A_Z) = -2,015 + 0,0046t + 0,0044 A_Z; \Delta V_m = 0; p = p_{\text{H}_2\text{O}} = p_m.$$

Запись реакции с учетом правила постоянства объемов при метасоматизме [34] в форме $\langle 38' \rangle$ удобна и тем, что может связывать закономерности увеличения пористости в процессе метасоматического преобразования породы с независимыми параметрами системы p и t .

Для случая $\Delta V_m = 0$, который для рассматриваемого типа реакций может считаться типичным, выражение (124a) может быть преобразовано следующим образом:

$$p (V_{\text{H}_2\text{O}}^M)_{T, p} = 137\,644 (\Delta Z_{\text{реак}}^V \langle \text{зв}' \rangle)_T = 137\,644 (0,0046t + 0,0044 A_Z - 2,015), \quad (124b)$$

где A_Z находится в прил. 11 согласно значению $t^\circ \text{C} = T - 298^\circ \text{K}$.

Таблица 34

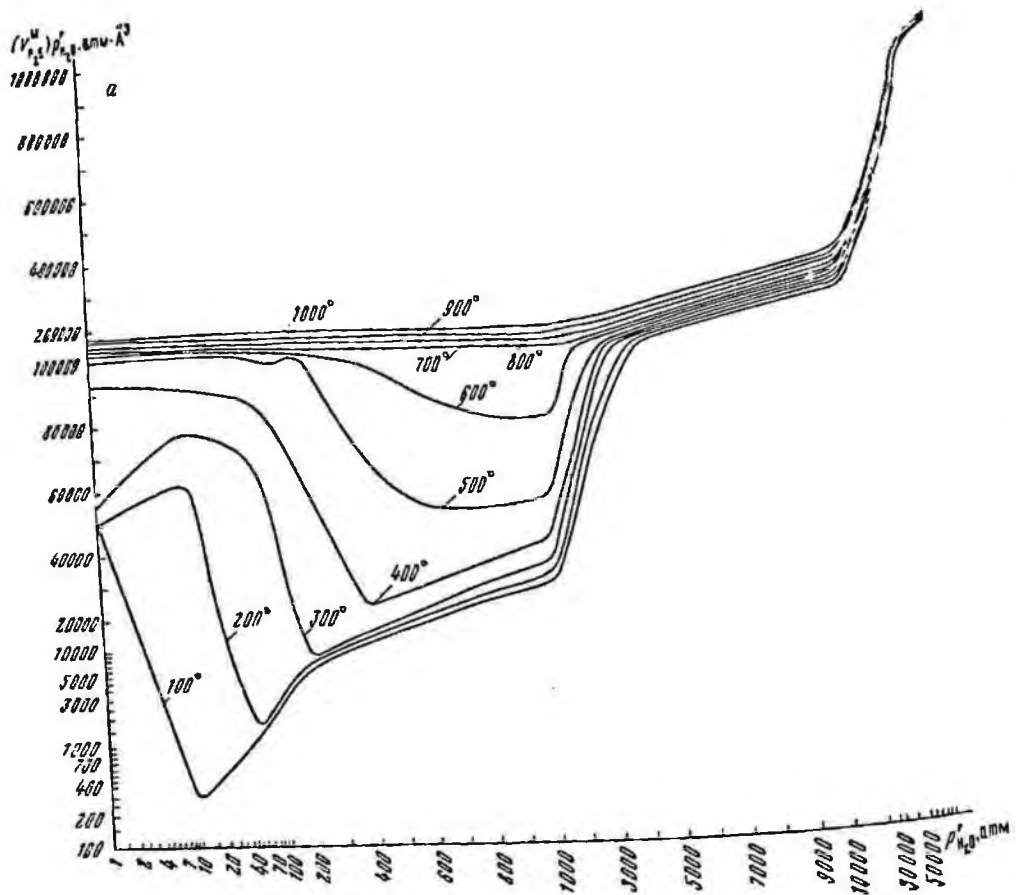
Приращение полного изобарного потенциала в реакции серпентинизации и бруситизации форстерита по типу $\langle 38' \rangle$ при

$$p = p_{\text{H}_2\text{O}} = p_m \text{ (см. формулу (124a)) } - \Delta Z_{T, p}^V = -2,015 + 0,0046t + 0,0044 A_Z - 2,4217 \cdot 3 \cdot 10^{-6} \times V_{\text{H}_2\text{O}}^M \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}$$

$t, ^\circ\text{C}$	$p_{\text{H}_2\text{O}}, \text{бар}$	$\Delta Z_{T, p}^V$	$t, ^\circ\text{C}$	$p_{\text{H}_2\text{O}}, \text{бар}$	$\Delta Z_{T, p}^V$	$t, ^\circ\text{C}$	$p_{\text{H}_2\text{O}}, \text{бар}$	$\Delta Z_{T, p}^V$
0	1	-2,014	345	400	+0,012	500	1	+0,668
	50	-2,011		1 000	-0,136		50	+0,697
	400	-2,012		10 000	-1,820		1000	+1,028
100	1 000	-2,012	350	1	-0,422	600	1	+1,472
	50	-1,528		100	-0,104			
	400	-1,604		200	-0,048			
300	1 000	-1,732	360	400	+0,056			
	10 000	-3,310		1 000	-0,091			
	50	-0,686		1	-0,362			
330	400	-0,310	400	50	-0,298			
	1 000	-0,458		400	+0,126			
	10 000	-2,126		1 000	-0,026			
340	50	-0,490	425	1	-0,087			
	400	-0,090		50	-0,038			
	1 000	-0,226		400	+0,420			
345	10 000	-1,916	450	1 000	+0,274			
	1	-0,492		2 000	+0,274			
	50	-0,968		3 000	-0,170			
	400	-0,016		4 000	-0,370			
	1 000	-0,164		1	+0,103			
	1	-0,464		10	-0,108			
	300	-0,072		50	+0,144			
	375	-0,016		1	+0,288			
	387	+0,003		50	+0,324			

Равновесные соотношения t и p в реакции <38'>, согласно уравнению (1246), представлены в табл. 33 (графа 4) и отражены на рис. 15. Следовательно, процесс серпентинизации и бруситизации форстерита проходит в условиях равенства давлений флюидной фазы воды и на твердую фазу в широком диапазоне давлений ниже температуры 345°C (табл. 34). Выше этой температуры и при дальнейшем ее повышении процесс сопровождается резким возрастанием давления. В табл. 34 приведены результаты расчета приращения изобарного потенциала реакции при одновременном изменении температуры и давления системы.

Таким образом, может быть сделан вывод о том, что реакция серпентинизации и бруситизации форстерита, отражающая один из процессов, связанных с серпентинизацией ультрабазитов [110], теоретически может протекать при постоянстве геологического объема в очень широких условиях температур и давлений флюидной фазы воды (при $p_{H_2O} = p_m$; см. табл. 33, графа 5; рис. 15, и давлений флюидной фазы воды (при $p = p_{H_2O} = p_m$) от 1 до 600 атм (см. табл. 33 и 34; рис. 15, реакция <38'>), так как именно эти условия хорошо согласуются с результатами наблюдений о развитии



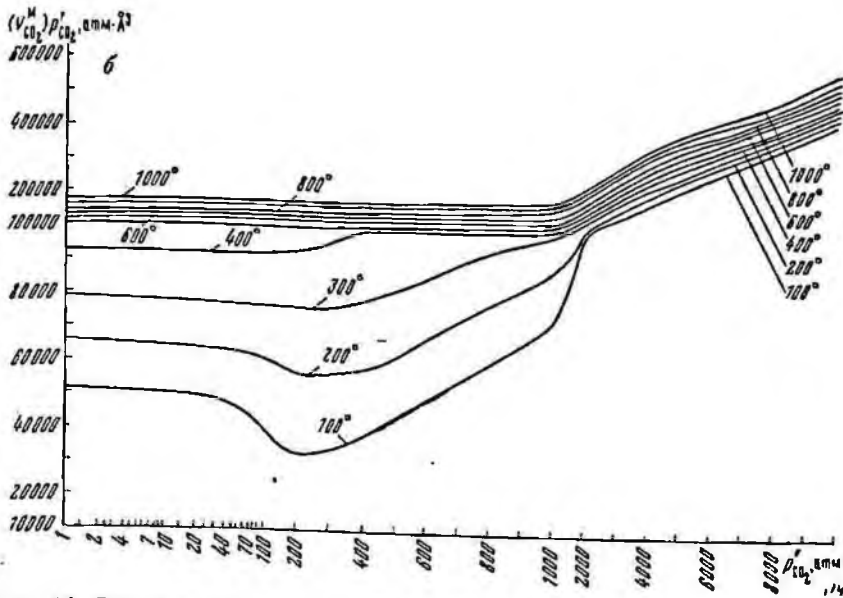


Рис. 14. Равновесные соотношения давления газа (p_G) и величины произведения этого давления на формульный объем газа ($p_G \cdot V_G^M$; атм·л³) при разных температурах (t , °C):
 а — для H₂O, б — для CO₂ (масштаб смешанный)

процессов серпентинизации в условиях малых глубин — до сотен метров [4, 110].

Полученные данные термодинамического моделирования процесса метасоматического преобразования форстерита в серпентин и брусит наиболее близко отвечают наблюдаемым закономерностям глубин формирования рассматриваемых новообразований за счет ультрабазитов [58, 110] и, таким образом, являются дополнительным свидетельством в пользу положения о равенстве геологических объемов при метасоматических процессах серпентинизации ультраосновных пород. Эти данные свидетельствуют и в пользу определяющей роли геологических допущений и ограничений в термодинамическом моделировании метасоматических процессов, ибо последние, как это явствует из рассмотренных примеров (реакции <33>, <38>, <38'>; см. рис. 15), могут приводить к диаметрально противоположным заключениям об условиях развития метасоматических процессов.

Разобранные примеры показывают и роль выбора форм компонентов, приносимых и выносимых в процессе и в результате реакции метасоматического минералообразования, на результаты термодинамического моделирования условий развития подобных реакций, которые весьма существенно различаются между собой (см. табл. 33 и рис. 15, ср. реакции <38> и <38'>).

Рассмотренные примеры показывают также и методологию термодинамического моделирования условий метасоматического минералообразования с целью приближения исходных предпосылок, в особенности таких, как постоянство геологического объема при метасоматизме [34, 61, 62], а также допущений, в частности о формах переноса веществ, участвующих в реакциях метасоматического преобразования минералов и горных пород, а следова-

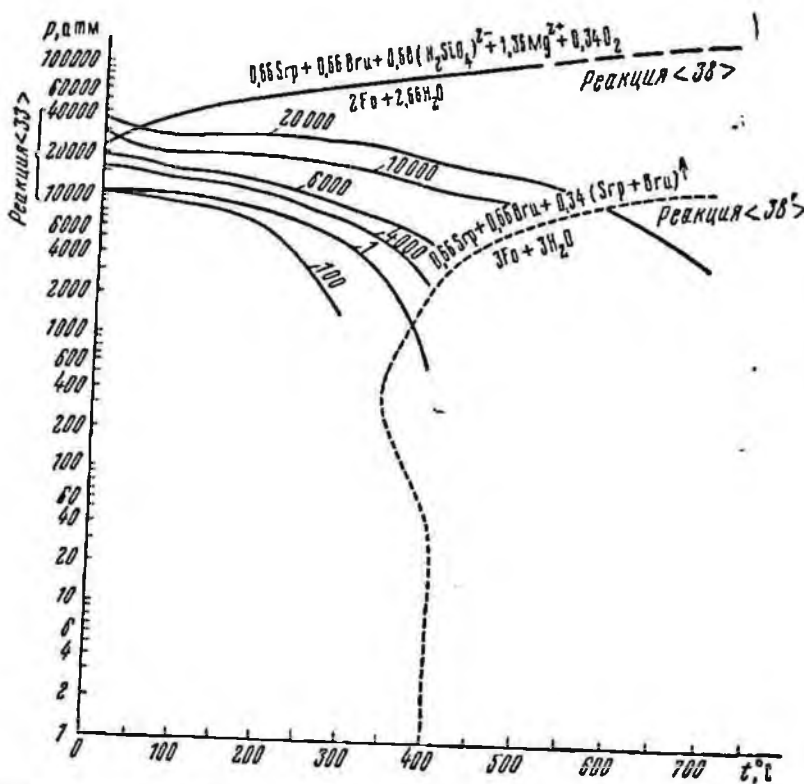


Рис. 15. Равновесные соотношения между t и p в реакциях серпентинизации и бруситизации форстерита в условиях:

- 1) постоянства геологического объема при метасоматизме и $p = p_{H_2O} = p_m$ в реакциях по типу $<38>$ и $<38'>$; 2) отсутствия постоянства геологического объема при метасоматизме и $p_m \neq p_{H_2O}$ в реакциях по типу $<33>$ при p_{H_2O} , равном 100, 1, 4000, 6000, 10 000 и 20 000 атм, $p_m = p$ (см. табл. 31, 33 и 34)

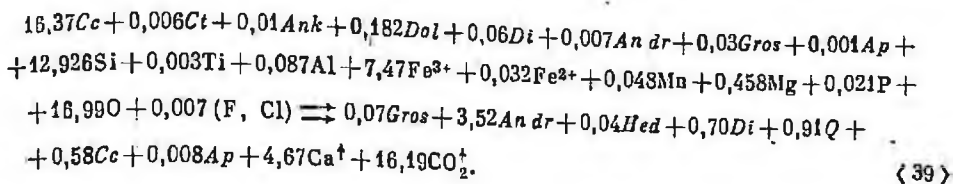
тельно, и результатов подобного моделирования к реальным геологическим условиям развития метасоматических процессов минерало- и породообразования.

§ 2. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МЕТАСОМАТИЧЕСКОГО ПОРОДОБРАЗОВАНИЯ

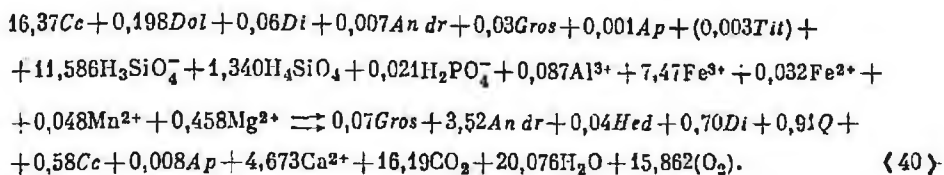
На основе изложенной в предыдущем параграфе методики определения изобарного потенциала реакций может быть оценена справедливость составления частных реакций метасоматического минералообразования путем установления условий сосуществования минеральных составляющих суммарной реакции минералообразования, каковой является реакция $<27>$ (см. часть четвертую, главу III, § 2).

Наибольший интерес представляет возможность установления тех пределов температур (T), давлений (p), констант равновесия (K_r) и других условий существования минеральных парагенезисов, при которых возможен самопроизвольный необратимый ход реакций метасоматического породообразования. Такая возможность обусловлена созданием метода расчета реакций метасоматического минералообразования при возникновении полуминеральных пород

различной пористости и состава за счет исходных пород также любого вещественного состава и генезиса (см. часть четвертую, главу III, § 3).
 Так, реакция скарнообразования <39> за счет мрамора (см. табл. 24—27) может быть записана следующим образом:



С целью расчета свободной энергии реакции преобразуем ее в такой вид, при котором для всех минеральных и химических компонентов могут быть найдены необходимые термодинамические параметры, а проведенные преобразования не скажутся на точности вычислений и не исказят геологический смысл реакции: в доломит включаем кунцит и анкерит, привносимый титан условно выражаем в виде сфена (*Tit*), апатит предполагаем гидроксилсодержащим, уравниваем заряды



Выписываем из соответствующих прил. 6—9 необходимые для расчетов термодинамические параметры, а в случае их отсутствия заимствуем из указанной выше справочной литературы, пересчитывая согласно вышеприведенным формулам, и для удобства сводим в табл. 35.

По формуле (104) определяем величину приращения удельного изобарного потенциала реакции $(\Delta Z_{реак}^V)_{p, T}$. Для этого вначале рассчитывается по формуле (105) величина $(\Delta Z_{реак}^V)_{298}$

$$(\Delta Z_{реак}^V \langle 40 \rangle)_{298} = \{(-44,8 \cdot 0,58) + (-120,2 \cdot 0,70) + (-106,2 \cdot 0,04) + (-214,4 \cdot 3,52) + \\ + (-247,4 \cdot 0,07) + (-518,6 \cdot 0,008) + (-34,0 \cdot 0,91) + (-15,7 \cdot 16,19) + (-9,4 \cdot 20,076) + \\ + (0,6 \cdot 15,862) + (-21,9 \cdot 4,673)\}_k - \{(-44,8 \cdot 16,37) + (-86,1 \cdot 0,198) + (-120,2 \cdot 0,06) + \\ + (-214,4 \cdot 0,007) + (-247,4 \cdot 0,03) + (-518,6 \cdot 0,001) + (-97,6 \cdot 0,003) + (-49,8 \cdot 11,586) + \\ + (-52,0 \cdot 1,340) + (-44,9 \cdot 0,021) + (-19,5 \cdot 0,087) + (-0,7 \cdot 7,47) + (-3,7 \cdot 0,032) + \\ + (-9,1 \cdot 0,048) + (-18,1 \cdot 0,458)\}_o = -30,719 \text{ уд.-пэб.-п. ед.} = -30,72 \cdot 10^{-23} \text{ ккал.}$$

Затем рассчитывается величина приращения удельного изобарного потенциала реакции за счет изменения температуры от 298 до T (°K), т. е. $(T - 298) = t - 25$, где t — температура в °C по одной из формул — (106а), (106б) или (106в). В связи с тем, что в самом расчете состава, основанном на результатах химического анализа горных пород и определения их минералогической плотности, заложены определенные погрешности, не говоря уже об условности

Параметры и коэффициенты, необходимые для расчета энергетического эффекта реакции <40>

Компонент	K_0^V	K_H^V	ΔZ_{298}^V	\bar{C}_p^V	V_{cp298}	a	$b \cdot 10^4$	$c \cdot 10^4$	S_{298}^V	$V_{m,0}^M$	ΔV_m
$Ca: CaCO_3$	16,37	0,58	-44,8	3,2	3,3*	4,2	0,9	-1	+3,7	61	-963,2
$Dol: CaMg[CO_3]_2$	0,198	—	-86,1	—	6,3*	7,7	2,4	-1,9	+6,2	407	-21,2
$Di: CaMg[Si_2O_6]$	0,06	0,70	-120,2	—	6,9*	8,8	1,3	-2,6	+5,7	110	+70,4
$He: CaFe[Si_2O_6]$	—	0,04	-106,2	—	10,0*	8,7	1,7	-2,0	+6,3	413	+4,5
$Andr: Ca_3Fe_2[Si_3O_{12}]$	0,007	3,52	-214,4	—	14,5*	17,4	2,9	-3,3	+13,0	219	3769,3
$Gros: Ca_2Al_2[Si_2O_{12}]$	0,03	0,07	-247,4	—	5,5*	3,6	18,8	-3,37	+12,8	208	+8,3
$Ap: Ca_2[PO_4]_2(OH)$	0,001	0,008	-518,6	—	14,6*	19,0	3,3	-4,2	+19,0	265	+1,9
$Tit: CaTiSiO_6$	0,003	—	-97,6	—	5,5*	7,0	0,9	-1,6	+5,1	92	-0,3
$Q: SiO_2-\alpha$	—	0,91	-84,0	—	1,9*	1,9	1,4	-0,4	+1,6	38	+34,0
$H_3SiO_4^-$	11,586	—	-49,8	—	-2,9	—	—	-7,0	+4,5	—	—
H_4SiO_4	1,340	—	-52,0	—	-8,5	—	—	28,6	+7,1	—	—
$H_2PO_4^-$	0,021	—	-44,9	—	-1,7	—	—	5,8	+3,6	—	—
CO_2 (газ)	—	16,19	-15,7	1,5	2,4*	1,8	0,3	-0,3	+4,8	($V_{CO_2}^M$), T, P	—
H_2O (жид.)	—	20,076	-9,4	3,0	+3,0	+3,0	—	—	+2,8	($V_{H_2O}^M$), T, P	—
O_2 (раствор. в H_2O)	—	15,862	+0,6	—	+5,5	—	—	—	+4,4	—	—
Al^{3+}	0,087	—	-19,5	—	+1,5	—	—	—	-11,9	—	—
Fe^{2+}	7,47	—	-0,7	—	+1,0	—	—	—	-11,1	—	—
Fe^{3+}	0,032	—	-3,7	—	+1,3	—	—	—	-4,2	—	—
Mn^{2+}	0,048	—	-9,1	—	+0,5	—	—	—	-2,7	—	—
Mg^{2+}	0,453	—	-18,1	—	-1,5	—	—	—	-4,7	—	—
Ca^{2+}	—	4,673	-21,9	—	-1	—	—	—	-2,2	—	—

Примечание. Значения S_{298}^V , обозначенные звездочкой, рассчитаны по данным a, b, c для $T=298^\circ K$ по формуле $S_{p,298}^V = a + c \cdot 10^4 + b \cdot 804$

выражения привносимых и выносимых компонентов, нет смысла проводить расчеты по более точным формулам (106а) и (106б). Поэтому будем иметь

$$\Delta Z_{\text{реак}}^T \langle 40 \rangle = 0,001 \{ (\Delta S_{\text{реак}}^V \langle 40 \rangle)_{298} (T - 298) + (\Delta C_p^V)_{298} A_Z \}. \quad (106в)$$

Согласно формуле (107) рассчитывается приращение удельной стандартной энтропии реакции:

$$\begin{aligned} (\Delta S_{\text{реак}}^V \langle 40 \rangle)_{298} = & -\{(3,7 \cdot 16,37) + (6,2 \cdot 0,198) + (5,7 \cdot 0,06) + (13,0 \cdot 0,007) + \\ & + (12,8 \cdot 0,03) + (19,0 \cdot 0,001) + (5,1 \cdot 0,003) + (4,5 \cdot 11,586) + (7,1 \cdot 1,340) + (3,6 \cdot 0,021) + \\ & + (-11,9 \cdot 0,087) + (-11,1 \cdot 7,47) + (-4,2 \cdot 0,032) + (-2,7 \cdot 0,048) + (-4,7 \cdot 0,458)\}_0 + \\ & + \{(3,7 \cdot 0,58) + (5,7 \cdot 0,70) + (6,3 \cdot 0,04) + (13,0 \cdot 3,52) + (12,8 \cdot 0,07) + (19,0 \cdot 0,008) + \\ & + (1,6 \cdot 0,91) + (4,8 \cdot 16,19) + (2,8 \cdot 20,076) + (4,4 \cdot 15,862) + (-2,2 \cdot 4,673)\}_K = \\ = & (-38,0056 + 248,0892) \approx +210,1 \text{ уд.-э. ед.} = +210,1 \cdot 10^{-23} \text{ кал.} \end{aligned}$$

Затем по формуле (110б) рассчитывается приращение удельной стандартной теплоемкости веществ реакции:

$$\begin{aligned} (\Delta C_{\text{реак}}^V \langle 40 \rangle)_{p, 298} = & \{(3,3 \cdot 0,58) + (6,9 \cdot 0,70) + (10,0 \cdot 0,04) + (14,5 \cdot 3,52) + \\ & + (5,5 \cdot 0,07) + (14,6 \cdot 0,008) + (1,9 \cdot 0,91) + (2,4 \cdot 16,19) + (3,0 \cdot 20,076) + (5,5 \cdot 15,862) + \\ & + (-1 \cdot 4,673)\}_K - \{(3,3 \cdot 16,37) + (6,3 \cdot 0,198) + (6,9 \cdot 0,06) + (14,5 \cdot 0,007) + \\ & + (5,5 \cdot 0,03) + (14,6 \cdot 0,031) + (5,5 \cdot 0,003) + (-2,9 \cdot 11,586) + (8,5 \cdot 1,340) + \\ & + (-1,7 \cdot 0,021) + (1,5 \cdot 0,087) + (1 \cdot 7,47) + (1,3 \cdot 0,032) + (0,5 \cdot 0,048) + (-1,5 \cdot 0,458)\}_0 \approx \\ \approx & +242,1 - 40,8 \approx +201,3 \text{ условных удельно-теплоемкостных единиц} = \\ = & +201,3 \cdot 10^{-23} \text{ кал/град.} \end{aligned}$$

$$\Delta Z_{\text{реак}}^T \langle 40 \rangle = 0,001 \{ 210,1 (t - 25) + 201,3 A_Z \} \text{ уд.-изб.-п. ед.,}$$

где A_Z находится в прил. 11 (графа 3) согласно значению t ($^{\circ}\text{C}$) = $T - 298$ ($^{\circ}\text{K}$).

Далее, согласно формуле (118а), рассчитывается приращение удельного изобарного потенциала реакции за счет приращения давления от p_0 до p_A в удельно-изобарно-потенциальных единицах (уд.-изб.-п. ед.)

$$\begin{aligned} \Delta p_{\text{реак}}^A \langle 40 \rangle = & 2,4217 \cdot 10^{-6} \{ \Delta K_G^V (V_G^M)_{T, p} p'_G + \Delta F_m p'_m \} = \\ = & 2,4217 \cdot 10^{-6} \{ [16,19 (V_{\text{CO}_2}^M)_{T, p} + 20,076 (V_{\text{H}_2\text{O}}^M)_{T, p}] p'_G + \\ & + (70,4 + 4,5 + 769,3 + 8,3 + 1,9 + 34,6 - 963,2 - 21,2 - 0,3) p'_m \}. \quad (125) \end{aligned}$$

Далее, согласно формуле (116), устанавливаются равновесные значения между p'_G и p'_m при допущении одинакового давления газовой фазы, в данном случае при $p'_{\text{H}_2\text{O}} = p'_{\text{CO}_2}$, что достигается подстановкой в левую часть формулы (126б) этих значений. Формула (126б) выводится через выражение (126а), исходя из уравнения (125), и имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \Delta p_{\text{реак}}^A \langle 40 \rangle = & -\{ (\Delta Z_{\text{реак}}^V \langle 40 \rangle)_{298} - [\Delta Z_{\text{реак}}^T \langle 40 \rangle] \} = \\ = & -\{ -30,719 - 0,001 (210,1t - 5252,5 + 201,3 A_Z) \} = \\ = & +25,467 + 0,2101t + 0,2013 A_Z; \quad (126а) \end{aligned}$$

$$p'_m = [0,169 (V_{\text{CO}_2}^M)_{T, p} + 0,210 (V_{\text{H}_2\text{O}}^M)_{T, p}] \cdot p'_G - 109890 - 907t - 869 A_Z. \quad (126б)$$

Подстановкой произвольных значений температуры и давления в Уравнение (126б) и отвечающих им значений формульных объемов CO_2 и H_2O , «снятых» соответственно с таблиц прил. 12 и 13, устанавливаются равновесные значения давлений на твердую фазу, давлений газовой фазы и температуры реакции.

Полный побарный эффект реакции скариобразования выразится

$$(\Delta Z_{\text{реак}}^V \langle 40 \rangle)_{T, p} = -30,72 - 0,001 [210,1(t-25) + 201,3A_Z] +$$

$$+ 2,4217 \cdot 10^{-6} [16,19 (\Gamma_{\text{CO}_2}^M)_{T, p} + 20,076 (\Gamma_{\text{H}_2\text{O}}^M)_{T, p}] p_G' - 95,7 p_m', \text{ уд.-пзб.-п. ед.}$$

Таким образом, подстановкой в формулу (127) различных значений температур и давлений при соответствующих им величинах формульных объемов, «снятых» с таблиц прил. 12 и 13, устанавливается возможность протекания рассматриваемого процесса скариобразования при различных $p - T$ -условиях. В табл. 36 приведены результаты расчета приращения полного побарного потенциала реакции $\langle 40 \rangle$, которые указывают на возможность ее самопроизвольного развития при различных значениях температуры и одинаковых величинах давления флюидной фазы воды и углекислоты и на твердую фазу. В табл. 37 приведены равновесные значения давлений флюидной фазы и на твердую фазу, из которых явствует невозможность установления равновесия, поскольку отрицательного значения давления на твердую фазу не может быть. Но поскольку в формуле (127) приращение величины p_m' имеет отрицательное значение, а для достижения равновесия требуется, согласно данным табл. 37, при всех значениях температуры и p_G' отрицательная величина p_m' , то может

Таблица 36

Примеры вычисления термодинамической вероятности самопроизвольного развития процесса скариобразования по реакции $\langle 40 \rangle$ при разных t и p (см. формулу (127))

$t, ^\circ\text{C}$	$p_G', \text{ атм}$	$p_m', \text{ атм}$	A_Z	$(\Gamma_{\text{CO}_2}^M)_{T, p} (\text{л}^3)$	$(\Gamma_{\text{H}_2\text{O}}^M)_{T, p} (\text{л}^3)$	$(\Delta Z_{\text{реак}})_{T, p}$ уд.-пзб.-п. ед.
100	1000	1000	8,73	74,34	29,960	$-48,23 + 4,37 - 0,23 = -43,89$
	2000	1000		64,69	28,943	$-48,23 + 7,89 - 0,23 = -40,8$
400	1000	2000	173,19	74,34	29,960	$-48,23 + 4,37 - 0,46 = -43,91$
	1000	1000		125,0	43,176	$-144,32 + 7 - 0,23 = -137,6$
600	2000	1000	363,20	88,45	37,674	$-144,32 + 10,6 - 0,23 = -134$
	1000	2000		125,0	43,176	$-144,32 + 7 - 0,46 = -137,8$
800	1000	1000	363,20	157,90	79,893	$-224,6 + 10,1 - 0,23 = -214,7$
	3000	3000		89,91	43,086	$-224,6 + 16,86 - 0,7 = -208,4$
1000	1000	3000	363,20	157,90	79,893	$-224,6 + 10,1 - 0,7 = -215,2$
	3000	1000		89,91	43,086	$-224,6 + 16,86 - 0,23 = -208$
25	1	1	1	40 617	30	$-30,9 + 1,6 - 0,0002 = -29,3$
100	1	1	8,73	51 389	50 680	$-48,23 + 4,48 - 0,0002 = -43,75$

Примечание. Величины $(\Gamma_{\text{CO}_2}^M)_{T, p}$ и $(\Gamma_{\text{H}_2\text{O}}^M)_{T, p}$ «снимаются» соответственно для CO_2 в прил. 11, для H_2O — в прил. 12. A_Z находится в прил. 11.

* Следует иметь в виду, что $(\Gamma_{\text{H}_2\text{O}}^M) \cdot 10^{24} \text{ л}^3 = 1,6602 (\Gamma_{\text{H}_2\text{O}}^M) \text{ см}^3/\text{моль} = 1,6602 \times 18,01 (\Gamma_{\text{H}_2\text{O}}^M) \text{ см}^3/\text{г}$, а $(\Gamma_{\text{CO}_2}^M) \cdot 10^{24} \text{ л}^3 = 1,6602 (\Gamma_{\text{CO}_2}^M) \text{ см}^3/\text{моль} = 1,6602 \cdot 44,01 (\Gamma_{\text{CO}_2}^M) \text{ см}^3/\text{г}$. При этом $(\Delta Z_{\text{реак}}^V)_{T, p}$ уд.-пзб.-п. ед. = $6,0234 \cdot 10^{-23} (\Delta Z_{\text{реак}})_{T, p}$ ккал

быть сделан вывод, что приращение изобарного потенциала реакции $\langle 40 \rangle$ при всех t , p'_G и p'_m будет иметь отрицательное значение, т. е. реакция будет развиваться самопроизвольно.

Но так как отрицательного значения давления не может быть, то допущение о неодинаковом давлении флюидной фазы (p'_G) и давления на твердую фазу (p'_m) флюидной фазы и давления на твердую фазу, т. е. $p'_m = p'_G$. Расчет полного приращения изобарного потенциала реакции $\langle 40 \rangle$ при подобном допущении свидетельствует о самопроизвольном ходе реакции скарнообразования при всех температурах и давлениях (табл. 38), что противоречит геологическим условиям развития рассматриваемого метасоматического процесса [28, 29, 78 и др.]. А это, в свою очередь, свидетельствует о неправомерности принятых исходных положений о возможной форме химических компонентов, привносимых и выносимых вариантов выражения состава химических компонентов, участвующих в реакции, в основу которых должны быть положены данные о составе газовой-жидкой включений в минералах, физико-химических экспериментов и анализа синтетических систем, близких к природным [28, 29, 31, 32, 67, 78 и др.]. Эти данные свидетельствуют о возможности переноса химических компонентов в виде хлоридов и фторидов, а также углекислотных соединений. Следовательно, моделирование термодинамического природного скарнообразования может проводиться лишь при выражении выносимых алюминия, магния, железа, марганца и привносимого кальция в виде хлоридов, фторидов и углекислотных соединений, а кремния — в виде кремневых кислот или фторидов.

Таблица 37

Равновесные соотношения давления флюидной фазы (p'_G) и давления на твердую фазу (p'_m) в процессе скарнообразования по реакции $\langle 40 \rangle$ { см. формулу (126б) }

$t, ^\circ\text{C}$	p'_G	p'_m	$t, ^\circ\text{C}$	p'_G	p'_m
100	100	-207 417,8	600	100	-964 833,6
	600	-206 898,9		600	-965 127,6
	1000	-206 252,3		1000	-964 972,4
200	100	-327 934,4	700	100	-1 153 091,1
	600	-327 452,3		600	-1 153 066,7
	1000	-326 819,4		1000	-1 152 903,4
300	100	-467 005,6	800	100	-1 350 171,6
	600	-466 441,9		600	-1 349 925,3
	1000	-465 817,2		1000	-1 349 734,1
400	100	-619 768,5	900	100	-1 555 299,98
	600	-618 809,2		600	-1 527 936,5
	1000	-619 979,3		1000	-1 554 837,6
500	100	-786 627,7	1000	100	-1 767 925,3
	600	-787 320,3		600	-1 767 605,3
	1000	-786 930,7		1000	-1 767 372,3

Полное приращение изобарного потенциала в реакции скарнообразования $<40>$
 при условии $p'_G = p_m = p$ { см. формулу (127) }

$t, ^\circ\text{C}$	p	$\Delta z_{T, p}^V$	$t, ^\circ\text{C}$	p	$\Delta z_{T, p}^V$
100	1	-6 109 729,4	600	1	-28 460 257,8
	100	-6 112 460,5		100	-28 461 048,8
	1 000	-6 115 458,8		1 000	-28 467 334,8
	10 000	-6 154 636,7		10 000	-28 505 547,6
200	1	-9 658 478,7	700	1	-34 003 515,6
	100	-9 661 317,9		100	-34 004 285,8
	1 000	-9 665 399,9		1 000	-34 010 047,9
	10 000	-9 703 595,1		10 000	-34 048 749,5
300	1	-13 750 754,3	800	1	-39 806 418,7
	100	-13 754 464,9		100	-39 807 327,8
	1 000	-13 758 041,1		1 000	-39 812 531,05
	10 000	-13 803 041,5		10 000	-39 851 492,25
400	1	-18 290 134	900	1	-21 885 588,09
	100	-18 291 287,8		100	-21 885 621,9
	1 000	-18 297 656,0		1 000	-21 891 382,6
	10 000	-18 335 290,6		10 000	-21 930 704,2
500	1	-23 209 795,5	1000	1	-52 111 313,9
	100	-23 210 713,8		100	-52 120 997,8
	1 000	-23 217 297,6		1 000	-52 116 872,2
	10 000	-23 255 019,2		10 000	-52 156 369,8

Однако оно затруднено из-за отсутствия для многих из указанных соединений данных об изобарном потенциале и в еще большем количестве энтропии и теплоемкости. Тем не менее успехи экспериментальной физико-химии, очевидно, в самое ближайшее время восполнят имеющийся пробел в отношении термодинамических параметров важнейших химических соединений, в том числе и комплексов. Общая же методология термодинамического моделирования природных метасоматических процессов породообразования на основе данных о минеральном составе исходных и замещающих их метасоматических пород и о балансе вещества при подобных процессах, устанавливаемых с помощью атомно-объемной и нормативно-объемной петрохимических систем, справедлива для различных метасоматических систем и достаточно полно иллюстрируется разобранным примером.

Таким образом, рассмотренные примеры термодинамического моделирования метасоматического минерало- и породообразования свидетельствуют об определяющей роли допущений и ограничений геологического характера и затем физико-химического, связанного с оптимальным выбором формы переноса химических компонентов в процессе метасоматического петрогенеза. Эти примеры дают общее представление о методологии подхода к исследованию условий метасоматического минерало- и породообразования, которые могут быть углублены и детализированы далее уже на основе достаточно полно разработанных методов физико-химической петрологии [9, 10, 18, 25, 28, 35—37, 47, 57, 58, 63, 64, 69—71].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрены различные способы выражения химического состава горных пород — в виде количества атомов элементов в стандартном геометрическом объеме и объеме массы вещества горных пород (атомно-объемная система), в виде числа формульных единиц минералов в стандартном геометрическом объеме и объеме массы вещества горной породы (формульно-объемная система), а также в виде числа формульных единиц нормативных минеральных компонентов из расчета на 100 атомов элементов горной породы (формульно-атомная система). Даны практические приемы расчетов по указанным системам и способы перехода от одного варианта выражения состава горных пород к другому.

Предложены различные варианты использования изложенных систем пересчета для решения разнообразных геологических задач и, в частности, для установления и выражения закономерностей миграции вещества в процессе метасоматического породообразования как в условиях постоянства геологического объема, так и его изменения.

Предложены методы выявления биметасоматических явлений, а также объемных соотношений реакций метасоматического минерало- и породообразования. Разобраны способы расчета реакций метасоматического минералообразования при формировании полиминеральных пород. Показано значение выявления и установления объемных соотношений в метасоматических реакциях для термодинамического моделирования природных процессов метасоматического минерало- и породообразования. Использование термодинамического анализа в сочетании с атомно- и формульно-объемными нормативными системами пересчета химического состава исходных пород и развитых по ним метасоматических новообразований позволяет приблизиться к моделированию физико-химических условий реальных процессов метасоматического петрогенеза.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абрамов Н. И. Очередные проблемы петрохимии. — «Советская геология», 1957, № 1, с. 14—23.
2. Абрамов Н. И., Гурин В. В. Фацально-формационный анализ магматических комплексов (петрохимические исследования). Л., «Недра», 1972, 240 с.
3. Абрамов Н. И. Атомно-объемный метод петрохимического пересчета и один из способов графического изображения его результатов. — В кн.: Вопросы петрохимии. Л., 1969, с. 94—97.
4. Барн Т. Ф. Теоретическая петрология. М., Изд-во иностр. лит., 1956, 414 с.
5. Барт А. А. Геохимия литосферы. М., «Недра», 1972, 296 с.
6. Бачалов В. Г. Пересчет химических анализов горных пород при изучении метасоматических процессов. — «Изв. АН СССР. Сер. геол.». 1962, № 1, с. 99—108.
7. Бачалов В. Г., Сажин В. А. Применение математических методов в сравнительной петрохимическом изучении объектов. М., ОНТИ ВИАМС, 1972, 27 с. (Экспресс-информ., сер. 2. Мат. методы исслед. в геол. Вып. 5, информ. 5).
8. Брайс К. В. Роль диффузии при замещении минералов и распада твердых растворов. — В кн.: Минералы СССР. М., 1963, с. 79—95 (Тр. Минерал. музея АН СССР, вып. 14).
9. Брайс А. Г. Методы термодинамики в минералогии. Л., «Недра», 1974, 184 с.
10. Брайс А. Г., Брайс К. Г. Физико-химические свойства минералов и главнейших соединений — магнетитов гидротермальных и флюидных систем минералообразования. Л., «Недра», 1973.
11. Бачалов В. Г. Зональность и генезис измененных пород и оруденения в Центрально-Камчатской рудной зоне. — Тр. Лабор. вулканологии, 1961, вып. 19, с. 145—164.
12. Бачалов В. Г. Генезис метаморфических пород. М., «Мир», 1969, 247 с.
13. Бачалов В. Г., Валова Г. Оптическая минералогия. М., Изд-во иностр. лит., 1953, 362 с.
14. Бачалов В. Г. Проблемы математической геологии. — «Геология и геофизика», 1965, № 7, с. 3—16.
15. Бачалов В. Г. Скарны Пятигорья. — В кн.: Метасоматизм и другие вопросы физико-химической петрологии. М., 1963, с. 265—288.
16. Борнхейм В. Петрохимия. Под ред. В. А. Рудника. Л., ОНТИ ВСЕГЕИ, 1969, 479 с.
17. Бачалов В. Г. Происхождение гипотенного оруденения в железистых кварцитах Куньинской магнетитовой аномалии. — «Изв. АН СССР. Сер. геол.», 1957, № 8, с. 31—39.
18. Бачалов В. Г. Методика составления физико-химических диаграмм. М., «Недра», 1965, 89 с.
19. Гурин В. В., Жабов А. Г. Онтотипия минералов. М., «Недра», 1975, 340 с.
20. Гурин В. В. Геохимические критерии различия магматических пород и ортометасоматитов. — «Изв. Восточн. минерал. о-ва». 1970, вып. 2, ч. 99, с. 247—258.
21. Гурин В. В. Проблемы оценки геохимических данных при изучении магматических пород. — Тр. ВСЕГЕИ, 1971, т. 158, с. 202—219.
22. Гурин В. В. О применении к 100% суммы химического анализа при кристаллохимическом пересчете. — «Геология и геофизика», 1964, № 2, с. 157—160.
23. Гурин В. В. Использование петрохимии для восстановления условий при магматизации. — В кн.: Вопросы петрохимии. Л., 1969, с. 20—22.
24. Дун Л. А., Дун Р. А., Зунда Лж. Породообразующие минералы. М., «Мир», 1966, т. I, 322 с.; т. II, 47 с.; 1966, т. III, 318 с.; т. IV, 482 с.; т. V, 408 с.).
25. Дун Л. А., Сабалов В. С., Хвостов В. В. Фашии регионального метаморфизма умеренных широт. М., «Недра», 1972, 288 с.
26. Дун Л. А. Изменения температуры и глубины Земли. Л.—М., ОНТИ ВСЕГЕИ, 1966, 301 с.
27. Дун Л. А. Метод пересчета и графического изображения химических составов метасоматических комплексов. — В кн.: Вопросы петрохимии. Л., 1969, с. 166—169.
28. Жабов А. Г. Геохимические признаки магматической и послемагматической стадий при формировании скандинавских метасоматитов. — В кн.: Магматизм и связь с ним проблемы оруденения. М., 1960, с. 57—60.
29. Жабов А. Г. Скарны южной Камчатки. — В кн.: Генезис эндогенных рудных месторождений. М., «Недра», 1968.
30. Жабов А. Г., Бачалов В. Г. Физика в петрохимии измененных горных пород. Изд. 2-е. М.—Л., Наука АН СССР, 1964, 400 с.

31. Зарайский Г. П., Жариков В. А., Стояновская Ф. М. Экспериментальное изучение биметасоматического скарнообразования. — В кн.: Очерки флюидно-химической петрологии. М., «Наука», 1974, с. 29—74.
32. Зарайский Г. П., Жариков В. А., Стояновская Ф. М. Экспериментальное исследование влияния раствора на скарновую биметасоматическую зональность. — В кн.: Метасоматизм и рудообразование. Л., 1976, с. 191—192.
33. Казыцын Ю. В. Метод молекулярных объемов и его применение при изучении пламенных пород. — «Зап. Всесоюз. минерал. о-ва», 1958, вып. 2, ч. 87, с. 181—196.
34. Казыцын Ю. В., Рудник В. А. Руководство к расчету баланса вещества и внутренней энергии при формировании метасоматических пород. М., «Недра», 1968, 363 с.
35. Карпов И. К., Кашин С. А., Пажура В. Д. Константы веществ для термодинамических расчетов в геохимии и петрологии. М., «Наука», 1968, 143 с.
36. Карпов И. К., Киселева А. И., Летников Ф. А. Химическая термодинамика в петрологии и геохимии (справочник). Иркутск, Изд-во СО АН СССР, 1974, 385 с.
37. Карпов И. К., Киселева А. И., Дорогокупец П. Н. Термодинамика природных мультисистем с окисляющими условиями. Новосибирск, «Наука», 1976, 132 с.
38. Кенежинская К. Б. Статистический анализ хлоритов и их парагенетические типы. М., «Наука», 1965, 135 с.
39. Киселева П. А. Термодинамические свойства природного упорядоченного и спитетического неупорядоченного сапфиринов. — «Геохимия», 1976, № 2, с. 189—201.
40. Киселева П. А., Топор Н. Д., Андреев Э. Д. Термодинамические свойства минералов группы эпидота. — «Геохимия», 1974, № 4, с. 543—553.
41. Клишова А. П. и др. Экспериментальное определение констант устойчивости гидроксофторидных комплексов четырехвалентного олова. — «Геохимия», 1975, № 4, с. 556—585.
42. Кобзарь П. Н. Изучение взаимозависимостей состава, строения и свойств твердых неорганических веществ (методические рекомендации). Алма-Ата, ОНТИ КазНИМС, 1974, 74 с.
43. Комаров Ю. В. Натуральные петрохимические диаграммы. — В кн.: Вопросы петрохимии. Л., 1969, с. 80—83.
44. Коржинский Д. С. Контактные реакционно-метасоматические месторождения. — «Докл. АН СССР, нов. сер.», 1941, т. 33, № 2, с. 143—145.
45. Коржинский Д. С. Биметасоматические флогопитовые и лазуритовые месторождения архея Прибайкалья. — «Тр. Ин-та геол. наук АН СССР. Петрограф. сер.», № 10, 1947, вып. 29, с. 161—162.
46. Коржинский Д. С. Петрология Турьинских скарновых месторождений медп. — «Тр. Ин-та геол. наук АН СССР. Сер. рудн. м-ний», № 10, 1948, вып. 68, 146 с.
47. Коржинский Д. С. Очерк метасоматических процессов. — В кн.: Основы проблемы в учении о магматогенных рудных месторождениях. М., 1953, с. 332—452.
48. Коржинский Д. С. Флюидно-химические основы анализа парагенезисов минералов. М., Изд-во АН СССР, 1957, 184 с.
49. Костюк Е. А. Статистический анализ и парагенетические типы амфиболов метаморфических пород. М., «Наука», 1970, 312 с.
50. Кравцов В. А. Шкала атомных весов S^{32} и новые таблицы атомных элементов и масс нуклидов. — «Успехи физических наук», 1962, т. 78, вып. 1, с. 65—92.
51. Кравцова Е. И. Система $Ab-Og-Qu(H_2O)$ при P_{H_2O} от 0 до 10 кбар. Система $Ab-An-Og(H_2O)$ и $Ab-An-Og-Qu(H_2O)$ при P_{H_2O} от 0 до 10 кбар. — «Изв. АН СССР. Сер. геол.», 1974, № 2, с. 5—17 и № 3, с. 5—24.
52. Кузнецов Е. А. О способах пересчета и изображения химического состава магматических горных пород. — «Вестн. МГУ», 1947, № 3, с. 37—41.
53. Кутюлин В. А. Статистическое изучение химизма базальтов. М., «Наука», 1969, 142 с.
54. Куршакова Л. Д. Расчеты свободной энергии образования датолита по экспериментальным данным. — «Геохимия», 1975, № 7, с. 1029—1034.
55. Кушев В. Г. Парагенетический анализ и некоторые вопросы зональности натровых трещинных метасоматитов Приазовья. — В кн.: Проблемы метасоматизма. Л., 1969, с. 307—311.
56. Кушев В. Г. Полуколичественная оценка привноса и выноса вещества при образовании щелочных метасоматитов. — В кн.: Вопросы петрохимии. Л., 1969, с. 182—184.
57. Маракушев А. А. Проблемы минеральных фаций метаморфических и метасоматических горных пород. М., «Наука», 1965, 327 с.
58. Маракушев А. А. Термодинамика метаморфической гидратации минералов. М., «Наука», 1968, 200 с.

59. Методическое руководство по определению физических свойств горных пород и полезных ископаемых. Под ред. Н. Б. Дортман и М. Л. Озерской. М., Гостеолтехиздат, 1962, 430 с.

60. Матеев В. И. Рентгенометрический определитель минералов. Т. 1. М., Гостеолтехиздат, 1957, 867 с.

61. Павлов П. В. О метасоматическом минералообразовании и законе равных объемов. — Зап. Всесоюз. минерал. о-ва. Сер. Э, 1949, вып. 4, ч. 78, с. 270—272.

62. Павлов П. В. Определение количественного изменения вещества при гидротермальном метаморфизме. — Зап. Всесоюз. минерал. о-ва. 1958, вып. 4, ч. 87, с. 401—417.

63. Пашаева В. А., Давыдов-Давыдовский В. В. Основы теории процессов магматизма и метаморфизма. М., Гостеолтехиздат, 1961, 338 с.

64. Парков В. Б., Ржевский Б. П., Хитяковский П. Т. Справочник термодинамических величин для геологов. М., Атомиздат, 1971, 231 с.

65. Руднов Б. Ф. Строения неорганических веществ. М.—Л., Гостехиздат, 1950, 948 с.

66. Шаляева Л. С. Солидные щелочные метасоматозы. М., Изд-во АН СССР, 1963, 293 с.

67. Шаляева Л. С., Харин П. П., Киселев Л. А. Плотность — щелочность в системе SiO_2 — $NaCl$ —силикат — в киле. Метасоматозы и рудообразования. Л., ВСЕГЕИ, 1970, с. 195—196.

68. Шаляева Л. С. Оценка изменения объема пород при определении перемещенных веществ в породах выветривания. — В кн.: Вопросы петрологии. Л., 1969, с. 133—135.

69. Шварц Л. Я. Рационалы породообразующих минералов. М., «Наука», 1970, 391 с.

70. Шварц Л. Я. Свойства гетосиликати минералов. Л., «Наука», 1971, 424 с.

71. Шварц Л. Я. Термодинамический режим «ступенчатого» петросинтеза. М., «Наука», 1972, 318 с.

72. Термодинамика халькогенидов. Бутали-Елачурской вулканической провинции. Под ред. Л. П. Зинкева. М., «Наука», 1966, 277 с.

73. Шаляева Л. С. Кристаллохимическая классификация минеральных вод и расс. «Апатиты», 1964, 347 с.

74. Шаляева Л. С. Геохимическая реконструкция первичного состава метасоматических пород в породах выветривания. Автореф. Докл. АН СССР, 1970, 13 с.

75. Шаляева Л. С. Рентгенометрический анализ. М., «Наука», 1971, 434 с. Автор Е. Л. Давыдов.

76. Шаляева Л. С., Шаляев Л. П., Шаляев Л. А., Шаляев Л. А. Экспериментальное определение коэффициента расширения SiO_2 в гидротермальных условиях при температуре 200—300 °С. — Доклады АН СССР, 1973, № 7, ч. 235—241.

77. Шаляева Л. С. Расчеты изменения объема при метасоматозе. М., «Наука», 1971, 277 с.

78. Шаляева Л. С. Расчеты изменения объема при метасоматозе. М., «Наука», 1971, 277 с.

79. Шаляева Л. С. Расчеты изменения объема при метасоматозе. М., «Наука», 1971, 277 с.

80. Шаляева Л. С. Расчеты изменения объема при метасоматозе. М., «Наука», 1971, 277 с.

81. Шаляева Л. С. Расчеты изменения объема при метасоматозе. М., «Наука», 1971, 277 с.

82. Шаляева Л. С. Расчеты изменения объема при метасоматозе. М., «Наука», 1971, 277 с.

83. Шаляева Л. С. Расчеты изменения объема при метасоматозе. М., «Наука», 1971, 277 с.

84. Шаляева Л. С. Расчеты изменения объема при метасоматозе. М., «Наука», 1971, 277 с.

85. Шаляева Л. С. Расчеты изменения объема при метасоматозе. М., «Наука», 1971, 277 с.

86. Шаляева Л. С. Расчеты изменения объема при метасоматозе. М., «Наука», 1971, 277 с.

87. Шаляева Л. С. Расчеты изменения объема при метасоматозе. М., «Наука», 1971, 277 с.

88. Шаляева Л. С. Расчеты изменения объема при метасоматозе. М., «Наука», 1971, 277 с.

89. Шаляева Л. С. Расчеты изменения объема при метасоматозе. М., «Наука», 1971, 277 с.

90. Рудник В. А. Теория и практика методов флюидно-химического анализа метасоматического образования горных пород и руд. Л., ВСЕГЕИ, 1964, 34 с. (Автореф. на соиск. канд. дис.).
91. Салье М. Е., Дук В. Л., Бугрова В. Д. Некоторые вопросы геологии, внутреннего строения и петрологии флогопитовых месторождений Алдана. — В кн.: Ультраметаморфизм и метасоматоз докембрийских формаций СССР. М.—Л., 1966, с. 25—62.
92. Сарманов О. В., Вистелиус А. Б. О корреляции между процентными величинами. — Докл. АН СССР, 1959, т. 126, № 1, с. 22—25.
93. Соболев И. В. Парагенетические типы гранатов. М., «Наука», 1964, 218 с.
94. Справочник хлупка. Изд. 2-е. Т. I. М.—Л., Госхимиздат, 1963, 1071 с.
95. Тернер Ф., Ферхуген Дж. Петрология изверженных и метаморфических пород. М., Изд-во востр. лит., 1961, 592 с.
96. Тугаринов И. А., Ганеев И. Г., Ходаковский И. Л. Термодинамические свойства македошита (α -PbTiO₃) и условия его образования в гидротермальных жилах. — «Геохимия», 1975, № 7, с. 1021—1028.
97. Тугаринов И. А., Ганеев И. Г., Ходаковский И. Л. Экспериментальное определение констант гидролиза ионов свинца в водных растворах при температурах до 300° С. — «Геохимия», 1975, № 9, с. 1345—1354.
98. Ушакова Е. Н. Биотиты метаморфических пород. М., «Наука», 1971, 346 с. (Тр. Ин-та геологии и геофизики, вып. 87).
99. Фашии метаморфизма. М., «Недра», 1970, 432 с. Авт.: И. Л. Добрецов, В. В. Ревдатов, В. С. Соболев и др.
100. Фашии регионального метаморфизма высоких давлений. М., «Недра», 1974, 328 с. Авт.: И. Л. Добрецов, В. С. Соболев, И. В. Соболев, В. В. Хлестов.
101. Ферштатер Г. Б., Бородин Н. С. Петрология магматических гранитоидов (на примере Урала). М., «Наука», 1975, 286 с.
102. Физические свойства горных пород и полезных ископаемых СССР. М., Госгеолтехиздат, 1964. Авт.: Н. Б. Дортман, В. Н. Васильева, А. К. Вейнберг и др.
103. Фролова Т. М., Бурикова И. А. Петрохимические критерии сходства и различия субвулканических и эффузивных фашии коматитических серий. — В кн.: Вопросы петрохимии. Л., 1969, с. 96—98.
104. Хитров В. Г., Кортман Р. В. Результаты межлабораторной оценки качества определенных породообразующих элементов. М., ВИЭМС, сер. X, 1971, 37 с. Результаты межлабораторной оценки качества определенных микроэлементов в горных породах. М., ВИЭМС, сер. X, 1974, 47 с.
105. Ходаковский И. Л. Исследования в области термодинамики водных растворов при высоких температурах и давлениях. Автореф. дис. на соиск. уч. степени доктора хим. наук. М., 1975, 53 с.
106. Ходаковский И. Л., Попова М. Я., Озерова И. А. О роли сульфидных комплексов в переносе ртути гидротермальными процессами. — «Геохимия», 1975, № 3, с. 360—370.
107. Циклис Д. С., Куликова А. И. Определение емкости кислорода при давлениях до 10 000 атм и температурах до 400° С. — «Журнал физическая химия», 1965, т. 39, № 7, с.
108. Четвериков С. Д. Руководство к петрохимическим пересчетам. М., Госгеолтехиздат, 1956, 246 с.
109. Шабинин Л. И. Формация магнезильных скарнов. М., «Наука», 1973, 213 с.
110. Штейнберг Д. С., Чапушкин И. С. Серпентинизация ультрабазитов. М., «Наука», 1977, 312 с.
111. Штруц Х. Минералогические таблицы. М., Госгортехиздат, 1962, 532 с.
112. Юфа Б. Я. Радиометрические методы анализа естественных радиоактивных элементов. Планирование радиометрических анализов. Оценка качества анализов. — В кн.: Радиометрические методы анализа естественных радиоактивных элементов. М., «Недра», 1968, 460 с.
113. A quantitative chemico-mineralogical classification and nomenclature of igneous rocks. — «J. Geol.», Chicago, 1902, vol. X, No VI, p. 555—690. Aut.: Cross W., J. Iddings, L. Pirsson, H. Washington.
114. Barth T. F. Principles of classification and norm calculations of metamorphic rocks. — «J. Geol.», Chicago, 1959, vol. 67, № 2, p. 135—152.
115. Barth T. F. A final proposal for calculating the mesonorm of metamorphic rocks. — «J. Geol.», Chicago, 1962, vol. 70, № 4, p. 497—498.
116. Barton P. B., Toulmin P. Some mechanisms for cooling hydrothermal fluids. — «U. S. Geol. Surv. Prof. Papers», 1961, № 424-D, p. 348—352.
117. Burri C. Bemerkungen zur Anwendung der Niggli — Werte. Schweiz. Min. Petr. Mitt., Bd. 36, s. 29—48.

51. *Memorandum*
 in connection with the
 1962-1963
 (a) *Report of the*
 (b) *Report of the*
 (c) *Report of the*
 (d) *Report of the*
 (e) *Report of the*
 (f) *Report of the*
 (g) *Report of the*
 (h) *Report of the*
 (i) *Report of the*
 (j) *Report of the*
 (k) *Report of the*
 (l) *Report of the*
 (m) *Report of the*
 (n) *Report of the*
 (o) *Report of the*
 (p) *Report of the*
 (q) *Report of the*
 (r) *Report of the*
 (s) *Report of the*
 (t) *Report of the*
 (u) *Report of the*
 (v) *Report of the*
 (w) *Report of the*
 (x) *Report of the*
 (y) *Report of the*
 (z) *Report of the*

VERY TRULY YOURS

Расчетанные значения коэффициента

Элемент	\mathcal{R}_i	Элемент	\mathcal{R}_i	Оксид	\mathcal{R}_o	Оксид	\mathcal{R}_o
Al	2,233	Ni	1,026	Al ₂ O ₃	1,182	Ni ₂ O ₃	0,728
Ag	0,558	P	1,945	B ₂ O ₃	1,730	P ₂ O ₅	0,849
As	0,804	Pb	0,291	BaO	0,393	Rb ₂ O	0,644
Au	0,306	Pt	0,309	BeO	2,409	SO ₂	0,752
B	5,572	Ra	0,266	CO ₂	1,369	Sb ₂ O ₃	0,413
Ba	0,439	Rb	0,706	CaO	1,074	SiO ₂	1,002
Be	6,684	S	1,878	CuO	0,757	SnO	0,447
Bi	0,288	Sb	0,495	Cu ₂ O	0,842	SnO ₂	0,400
C	5,016	Si	2,145	Co ₂ O ₃	0,726	SrO	0,581
Ca	1,503	Sn	0,508	Cr ₂ O ₃	0,793	ThO ₂	0,228
Ce	0,430	Sr	0,688	Fe ₂ O ₃	0,754	TiO ₂	0,754
Co	1,022	Ta	0,333	FeO	0,838	UO ₂	0,223
Cr	1,159	Th	0,260	H ₂ O	6,688	UO ₃	0,211
Cl	1,699	Ti	1,258	K ₂ O	1,279	U ₂ O ₈	0,199
Cu	0,948	U	0,253	Li ₂ O	4,032		
F	3,171	V	1,183	MgO	1,494		
Fe	1,079	W	0,328	MnO	0,849		
H	59,765	Y	0,678	MnO ₂	0,418		
K	1,541	Zn	0,922	MoO ₃	1,944		
La	0,434	Zr	0,660				
Li	8,682						
Mn	1,096						
Mg	2,478						
Mo	0,628						
Na	2,620						

Примечание. Количество атомов элемента i в геометрическом объеме породы, т. е. с учетом ее пористости, будет находиться по формулам:

$$N_i^V = P_i d_V \mathcal{R}_i; \tag{1a}$$

$$N_i^V = P_i^o d_V \mathcal{R}_o. \tag{1b}$$

Величина питрампильного содержания элемента i может быть определена с помощью формул:

$$F_i^V = 0,1 P_i \delta \mathcal{R}_i; \tag{2a}$$

$$F_i^V = 0,1 P_i^o \delta \mathcal{R}_o, \tag{2b}$$

где N_i^V — количество атомов элемента i в геометрическом объеме породы в $10\ 000 \text{ \AA}^3$; F_i^V — питрампильное содержание элемента i в стандартном объеме массы вещества породы в 1000 \AA^3 ; P_i и P_i^o — процентное содержание (по массе) соответственно элемента i и оксида с элементом i ; d_V — объемная плотность (вес) породы; δ — минералогическая плотность с элементом i ; \mathcal{R}_i и \mathcal{R}_o — переходные коэффициенты соответственно для случая выражения содержания вещества в элементной и окисной форме:

$$\mathcal{R}_i = 60,24 : a_i; \tag{3a}$$

$$\mathcal{R}_o = 60,24 \frac{n_i^o}{M_i^o}. \tag{3b}$$

118. *Burri C.* Petrochemische Berechnungsmethoden auf Äquivalenter Grundlage (Methoden von Paul Niggli). Lehrbücher und Monographien aus dem Gebiete der exakten Wissenschaften. 1956. Min. — Geotechn. Reihe, Bd. 7, 334 s.
119. *Chayes F.* Numerical correlation and petrographic variation. — «J. Geol., Chicago», 1962, vol. 70, № 4, p. 440—452.
120. *Chayes F.* On pyroxene molecules in the CIPW norm. — «Geol. Mag.», 1963, vol. 100, № 1, p. 7—10.
121. *Chayes F.* Descriptive and genetic significance of normativens. — «Ann. Rept. Direct. Geophys. Lab. Carnegie Inst.», Washington, D. C., s. a., 1963—1964, p. 190—193.
122. *Chayes F., Metais D.* On the relation between suites of CIPW and Barth-Niggli norms. — «Ann. Rept. Direct. Geophys. Lab. Carnegie Inst.» Washington, D. C., s. a., 1963—1964, p. 193—195.
123. *Chayes F., Metais D.* Some relations between salic molecules in the norm and the Niggli kata norm. — «Ann. Rept. Direct. Geophys. Lab. Carnegie Inst.», Washington, D. C., s. a., 1962—1963, p. 152—155.
124. *Ebert H.* Molekular-Normen. — «Geologies», № 6—7, s. 821—835.
125. *Magnusson N. H.* The evolution of the lower archean rocks in central Sweden and their iron, manganese and sulphide ores. Quart. I. «J. Geol. Soc.», London, 1936, vol. 42, pt. 3, № 367, p. 332—359.
126. *Mertino S.* Polymorphism in sapphirine. — «Contr. Min. Petr.», 1973, vol. 41, № 1, p. 23—29.
127. *Moore P. B.* The crystal structure of sapphirine. — «Amer. Mineralogist», Washington, 1969, vol. 54, № 1—2, p. 31—49.
128. *Niggli P.* Über Molekulanormen zur Gesteinsberechnung. — «Schweiz Min. Petr. Mitt.», 1936, Bd. 16, Hft. 2, s. 295—317.
129. *Quantitative classification of igneous rocks.* — In: Based on chemical and mineral characters, with a systematic nomenclature. Chicago, 1903, 286 p. Aut.: Cross W., J. Iddigs, L. Pirsson, H. Washington.
130. *Pfeiffer L.* Modale und normative Mineralbestände als Grundlagen einer quantitativ-mineralogischen Gesteinssystematik. Bergakademie, 1962, № 10, s. 695—700.

Расчитанные значения коэффициента

Элемент	\mathcal{K}_i	Элемент	\mathcal{K}_i	Окисел	\mathcal{K}_o	Окисел	\mathcal{K}_o
Al	2,233	Ni	1,026	Al ₂ O ₃	1,182	Ni ₂ O ₃	0,728
Ag	0,558	P	1,945	B ₂ O ₃	1,730	P ₂ O ₅	0,849
As	0,804	Pb	0,291	BaO	0,393	Rb ₂ O	0,644
Au	0,306	Pt	0,309	BeO	2,409	SO ₃	0,752
B	5,572	Ra	0,266	CO ₂	1,369	Sb ₂ O ₃	0,413
Ba	0,439	Rb	0,706	CaO	1,074	SiO ₂	1,002
Be	6,684	S	1,878	CuO	0,757	SnO	0,447
Bi	0,288	Sb	0,495	Cu ₂ O	0,842	SnO ₂	0,400
C	5,016	Si	2,145	Co ₂ O ₃	0,726	SrO	0,581
Ca	1,503	Sn	0,508	Cr ₂ O ₃	0,793	ThO ₂	0,228
Ce	0,430	Sr	0,688	Fe ₂ O ₃	0,754	TiO ₂	0,754
Co	1,022	Ta	0,333	FeO	0,838	UO ₂	0,223
Cr	1,159	Th	0,200	H ₂ O	6,688	UO ₃	0,211
Cl	1,699	Ti	1,258	K ₂ O	1,279	U ₂ O ₆	0,193
Cu	0,948	U	0,253	Li ₂ O	4,032		
F	3,171	V	1,183	MgO	1,494		
Fe	1,079	W	0,328	MnO	0,849		
H	59,765	Y	0,678	MoO ₃	0,418		
K	1,541	Zn	0,922	Na ₂ O	1,944		
La	0,434	Zr	0,660				
Li	8,682						
Mn	1,096						
Mg	2,478						
Mo	0,628						
Na	2,620						

Примечание. Количество атомов элемента i в геометрическом объеме породы, т. е. с учетом ее пористости, будет находиться по формулам:

$$N_i^V = P_i d_V \mathcal{K}_i; \tag{1a}$$

$$N_i^V = P_i^o d_V \mathcal{K}_o. \tag{1b}$$

Величина интрамального содержания элемента i может быть определена с помощью формул:

$$F_i^V = 0,1 P_i \delta \mathcal{K}_i; \tag{2a}$$

$$F_i^V = 0,1 P_i^o \delta \mathcal{K}_o. \tag{2b}$$

где N_i^V — количество атомов элемента i в геометрическом объеме породы в $10\ 000 \text{ \AA}^3$; F_i^V — интрамальное содержание элемента i в стандартном объеме массы вещества породы в 1000 \AA^3 ; P_i и P_i^o — процентное содержание (по массе) соответственно элемента i и окисла с элементом i ; d_V — объемная плотность (вес) породы; δ — минералогическая плотность (удельный вес) породы; \mathcal{K}_i и \mathcal{K}_o — переходные коэффициенты соответственно для случая выражения содержания вещества в элементной и окисной форме:

$$\mathcal{K}_i = 60,24 : a_i; \tag{3a}$$

$$\mathcal{K}_o = 60,24 \frac{n_i^o}{M_i^o}. \tag{3b}$$

Атомные массы (всего) химических элементов

Элемент	Символ	Атомная масса	Элемент	Символ	Атомная масса
Водород	H	1,00797 ± ± 0,00001р	Нобий	Nb	92,906
Гелий	He	4,0026	Молибден	Mo	95,94
Литий	Li	6,939	Технеций	Tc	[99]
Бериллий	Be	9,0122	Рутений	Ru	101,07
Бор	B	10,811 ± ± 0,003р	Родий	Rh	102,905
Углерод	C	12,01115 ± ± 0,00005р	Палладий	Pd	106,4
Азот	N	14,0067	Серебро	Ag	107,870 ± ± 0,003
Кислород	O	15,9994 ± ± 0,0001р	Кадмий	Cd	112,40
Фтор	F	18,9984	Индий	In	114,82
Неон	Ne	20,183	Олово	Sn	118,69
Натрий	Na	22,9898	Сурьма	Sb	121,75
Магний	Mg	24,312	Теллур	Te	127,60
Алюминий	Al	26,9815	Иод	I	126,9044
Кремний	Si	28,086 ± ± 0,001р	Ксенон	Xe	131,30
Фосфор	P	30,9738	Цезий	Cs	132,905
Сера	S	32,064 ± ± 0,003р	Барий	Ba	137,34
Хлор	Cl	35,453 ± ± 0,001	Лантан	La	138,91
Аргон	Ar	39,948	Церий	Ce	140,12
Калий	K	39,102	Прозеродим	Pr	140,907
Кальций	Ca	40,08	Неодим	Nd	144,24
Скандий	Sc	44,956	Прометий	Pm	[147]
Титан	Ti	47,90	Самарий	Sm	150,35
Ванадий	V	50,942	Европий	Eu	151,96
Хром	Cr	51,996 ± ± 0,001	Гадолиний	Gd	157,25
Марганец	Mn	54,9381	Тербий	Tb	158,924
Железо	Fe	55,847 ± ± 0,003	Гольмий	Ho	164,930
Кобальт	Co	58,9332	Диспрозий	Dy	162,50
Никель	Ni	58,71	Эрбий	Er	167,26
Медь	Cu	63,54	Тулий	Tu	168,934
Цинк	Zn	65,37	Иттербий	Yb	173,04
Галлий	Ga	69,72	Лютеций	Lu	174,97
Германий	Ge	72,59	Гафний	Hf	178,49
Мышьяк	As	74,9216	Тантал	Ta	180,948
Селен	Se	78,96	Вольфрам	W	183,85
Бром	Br	79,909 ± ± 0,002	Рений	Re	186,2
Криптон	Kr	83,80	Осмий	Os	190,2
Рубидий	Rb	85,47	Иридий	Ir	192,2
Стронций	Sr	87,62	Платина	Pt	195,09
Иттрий	Y	88,905	Золото	Au	196,967
Цирконий	Zr	91,22	Ртуть	Hg	200,59
Торий	Th	232,038	Таллий	Tl	204,37
Протактиний	Pa	[231]	Свинец	Pb	207,19
			Висмут	Bi	208,980
			Полоний	Po	[210]
			Астатин	At	[210]
			Эманаций	Em	[222]
			Франций	Fc	[223]
			Радий	Ra	[226,05]
			Активный	Ac	[227]
			Берклий	Bk	[243]

Элемент	Символ	Атомная масса	Элемент	Символ	Атомная масса
Уран	U	238,03	Калифорний	Cf	[244—253]
Нептуний	Np	[237]	Эйнштейний	Es	(249—254)
Плутоний	Pu	[239]	Фермий	Fm	(248—254)
Америций	Am	[241]	Менделевий	Md	(255)
Кюрий	Cm	[242]	Нобелий	No	
			Лоуренсий	Lw	

Примечания. 1. Атомные массы приводятся по шкале $C^{12}=12$ [50]. 2. Индексом «р» обозначены пределы возможных отклонений атомных масс, вызванных естественными колебаниями в изотопном составе элементов. В остальных случаях атомные массы установлены с точностью до $\pm 0,5$ последней значащей цифры. 3. В квадратных скобках приведены массовые числа наиболее устойчивых изотопов элементов (по данным [94]), в круглых — крайние значения массовых чисел изотопов.

Приложение 3

Таблицы для определения количества атомов элементов минерала в 0,1 стандартного объема породы (в 1000 Å³) на основе объемного процентного содержания минерала

Таблицы служат для проверки и вычисления ориентировочного состава пород и руд в объемно-атомных процентах (F_i^V), т. е. для нахождения количества атомов элементов исходя из их объемного процентного содержания.

Таблицы составлены для 80 минералов на основе данных, приведенных в прил. 4.

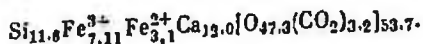
Приемы работы с таблицами иллюстрируются следующим примером.

Имеем пироксен-гранатовый скарн, состав которого выражен в объемных процентах (Φ_m): андрадит — 50%, геденбергит — 20%, магнетит — 10%, кальцит — 20%.

Перемножаем величины количества атомов каждого элемента в стандартном объеме минерала m (N_m^i) и объемного содержания этого минерала m в долях от единицы и вычисляем количество атомов каждого элемента i , приходящееся на данный минерал в стандартном объеме массы вещества породы. После этого суммированием определяем величину F_i^V или F_i^A элемента i или $0,1N_i^V$ при условии, что $K_n = 0$.

Элемент	Андрадит	Геденбергит	Магнетит	Кальцит	Σ
O	55·0,5 = 27,5	55·0,2 = 11	54·0,1 = 5,4	49·0,2 = 9,8	53,7
Si	14·0,5 = 7,0	18·0,8 = 3,6	—	—	11,6
Fe ³⁺	9·0,5 = 4,5	—	26·0,1 = 2,6	—	7,1
Fe ²⁺	—	9·0,2 = 1,8	13·0,1 = 1,3	—	3,1
Ca	14·0,5 = 7,0	9·0,2 = 1,8	—	16·0,2 = 3,2	12,0
C	—	—	—	16·0,2 = 3,2	3,2
Σ					101,7

Таким образом, состав скарна в объемно-атомных интрамиталях (F_a^V) может быть выражен формулой



Если при расчете содержания минералов учитывалась и пористость, то в таком случае получается количество атомов каждого элемента в 0,1 стандартного геометрического (геологического) объема породы ($0,1N_a^V$), т. е. с учетом пористости.

Приложение 4

Таблицы для определения общего количества атомов анионов в стандартном объеме массы вещества породы по данным содержания минеральных составляющих в объемных процентах

Таблицы приложения служат для нахождения общего количества атомов анионов ($\sum F_a^V$) в стандартном объеме массы вещества породы в 1000 \AA^3 по данным величин объемного процентного содержания минералов (ψ_m). В приложении приведены данные для 160 минералов в алфавитном порядке. Общее количество атомов анионов в каждом из минералов ($\sum F_m^a = 0,1 \sum N_m^a$) является величиной достаточно стабильной. Поэтому погрешности в расчете величины $\sum F_a^V$ с помощью указанных таблиц невелики и практически могут не приниматься во внимание.

$$\sum F_a^V = \sum F_1^a + \sum F_2^a + \dots + \sum F_k^a \quad (1)$$

Приемы работы с таблицами иллюстрируются следующим примером. Имеем пироксен-гранатовый скарн, состав которого выражен в объемных процентах (берем случай, когда пористость меньше 3% и поэтому не учитывается): андрадит — 55,10%, геденбергит — 25,20%, магнетит — 10,40%, кальцит — 0,30%.

Количество атомов анионов в объеме 1000 \AA^3 массы вещества породы, связанное с андрадитом, находится следующим образом:

Для 50% →	28 атомов (графа 8)
Для 5% → $28 \cdot 0,1 =$	2,8 атома (графа 8)
Для 0,1% → $28 \cdot 0,01 = 0,28 \approx 0,3$	0,3 атома (графа 8)

Для 11,10% — 30,86 ≈ 31 атом.

Точно так же находится количество атомов анионов, связанное и с другими минералами:

Для 25,20% геденбергита	— 13,9 ≈ 14 атомов
Для 10,40% магнетита	— 5,6 ≈ 6 »
Для 0,30% кальцита	— 0,15 »

Таким образом, $\sum F_a^V = 31 + 14 + 6 = 51$ атом.

Для нахождения величины $\sum N_a^V$ необходимо учитывать пористость, подсчитывая ее как отдельный минерал.

№ п/п	Минерал	№ O ₂	№ O ₄	Кол-чество атомов элементов в объеме 1000 Å ³ минерала (0,1·N _m ³)							Прочие элементы	№	
				O	Si	Al	Fe ³⁺	Fe ²⁺	Ca	Mg			Na, K
1	Альбит (№ O)	4	697	46	17	6	2	7	Na-6	4	B-4	Mn-2	75
2	Актинит	2	566	56	14	7	5	4	5	4			96
3	Активолит	2	919	52	17		16						87
4	Альмандин	8	1516	63	16	11	18		5				106
5	Андезин (№ 30)	4	668	48	16	8	14			Na-4			78
6	Андредит	8	1748	55	14		6						92
7	Анортит (№ 100)	8	1350	47	12	12	9		18				77
8	Антигорит	9	2920	55	12				18				109
9	Антигорит	4	1350	53	12				18				107
10	Антимонит	4	484	46					19		S-25 F(Cl)-4 S-25	Sb-16 P-11 As-16 B-19 Ba-12 F-4 Cu-30	41
11	Апатит	2	522	46									80
12	Ауршникмент	4	484										41
13	Ашарит	8	414	58					19				115
14	Барит	4	343	47					4				71
15	Биохит	2	489	45	12	4	6		0	K-4			85
16	Борнит	8	1320	45			6		6				60
17	Брусит	1	40	50									75
18	Варвикит	2	262	61			11		25		B-15		106
19	Везувиан	4	2906	50	12	5	1		11		F-3		89
20	Волластонит	6	990	48	15		1		14				76
21	Галенит	4	211	46			15		15				38
22	Галит	4	179	55	18		9		9		S-19 Cl-170	Pb-19	91
23	Геденбергит	4	435	60									100
24	Германит	3	450	60	30		15		12				105
25	Герцинит	8	535	60	4		40		9				108
26	Гидроталькиит	3	1500	40	7								66
27	Гиперит	4	545	4	7								94
28	Гиперстез	16	838	57	19		9		9		F-44	C-2	

№ п/п	Минерал	№ з	№ п/п	Количество атомов элементов и объем 1000 Å³ минерала ($n_i \cdot N_m^i$)										Прочие элементы	$\sum_{i=1}^n N_m^i$	
				O	Si	Al	Fe ²⁺	Fe ³⁺	Ca	Mg	Na, K	H				
29	Гроссулар	8	1004	58	14	10			14							06
30	Гюбнерит	2	138	58									W-11	Mn-14		86
31	Дашбургит	4	541	59	15				7					B-15		00
32	Датолит	4	350	57	11				11					B-11		101
33	Диопсид	4	435	55	18				9	9						01
34	Доломит	1	110	54					9	9				C-18		30
35	Кальцит	2	122	40					16					C-10		81
36	Каолинит	2	650	28	6	6										02
37	Касситерит	2	71	56										Sn-28		84
38	Калиевые полевые шпаты (адуляр, ортоклаз, микроклин)	4	734	44	16	5						K-5				70
		4	703	46	17	5						K-5				
39	Кварц	3	112	54	27											81
40	Кинноварь	3	143										S-21	Hg-21		42
41	Киппогумит	2	655	52	12					27			3	F-3		97
42	Клиноцоизит	2	463	56	13	13			9				4			95
43	Корунд	8	506	47		32										79
44	Котонит	2	205	59						10					B-20	89
45	Криолит	2	239			8						Na-25		F-50		83
46	Лабрадор	8	1348	48	15	9			3			Na-3				78
47	Людвигит	4	347	58			12	12		12					B-12	106
48	Магнезит	2	90	67						22					C-22	111
49	Магнетит	8	587	54			20	13								03
50	Маршалит	2	1120	43	16	5						Na-7		Cl-2		79

51	Марказит	2	81					24						S-49		73
52	Мейонит	2	1120	49	11	11			7					S-1	C-1	80
53	Молпбденит	2	106											S-38	Mo-19	57
54	Моптчеллит	4	340	47	12				12							71
55	Мусковит	4	932	52	13	13						K-4				90
56	Олигоклаз (№ 10)	4	668	48	17	7			1			Na-5				78
57	Пирит	4	158				25							S-51		76
58	Пироп	8	1533	63	16	10			16							105
59	Роговая обманка	2	942	51	15	2	.1	4	4	4		Na-2			Ti-32	87
60	Рутил	2	62	64										F-60		96
61	Селлант	2	67							30				269	Cl-260	90
62	Сильвин	4	247													538
63	Сингалит	4	323	50	12					12					B-12	86
64	Снаполит	2	1120	46	13	8			4			Na-4		Cl-1	C-0,5	76.5
65	Спессартит	8	1558	62	15	10								S-0,5	Mn-15	102
66	Сфалерит	4	157											S-25	Zn-25	50
67	Сфен	4	157											F-5	Ti-11	87
68	Тальк	4	367	49	11				11							94
69	Тремолит	4	895	54	18				4	11						91
70	Тремолит	2	880	54	18										Cr-9	92
71	Уваровит	8	1752	55	14				14						W-15	91
72	Ферберит	2	132	61	15									F-4		85
73	Флогопит	2	494	45	12	4				12		K-4		F-49		74
74	Флюорит	4	162						25							97
75	Форстерит	4	293	55	14					28				S-28	Cu-14	56
76	Форстерит	4	283					14						F-6		101
77	Халькопирит	2	358	50	11					28						96
78	Хондродит	4	920	57	13	13			9							77
79	Цоизит	4	312	51					13							106
80	Шеелит	8	529	61	30					15						04
80	Эпидот	2	465	56	13	6	6			9						04

№ п.п.	Минерал	d _m	Содержание минералов в об. % (Ψ _m)								
			10	20	30	40	50	60	70	80	90
1	Аксинит	2	5,6	11	17	23	28	34	39	45	51
2	Актинолит	2	5,2	10	16	21	26	31	36	42	47
3	Алунит	3	4,1	8	12	16	20	24	28	32	37
4	Альбит	4	4,8	10	14	19	24	29	34	39	43
5	Альмадин	8	6,3	13	19	25	32	38	44	50	57
6	Амблгонит	2	6,2	12	19	25	31	37	44	50	56
7	Андезин	4	4,8	10	14	19	24	29	34	39	43
8	Андрадит	8	5,5	11	16	22	28	33	38	44	49
9	Анкерит	1	5,5	11	17	22	28	33	39	44	50
	То же	2	11,2	22	34	45	56	67	78	89	101
10	Аяуртит	8	4,8	10	14	19	24	29	33	38	43
11	Автигорит	9	5,5	11	16	22	28	33	38	44	49
12	Аптимонит	4	2,5	5	8	10	12	15	18	20	22
13	Апатит	2	3,6	7	11	14	18	22	25	29	32
	То же	2	3,3	7	10	13	17	20	23	27	30
14	Ашарит	8	5,8	12	17	23	29	35	41	46	52
15	Бабоштонит	2	5,1	10	15	21	26	31	36	41	46
16	Барит	4	4,7	9	14	19	24	28	33	38	42
17	Бацит	2	3,5	7	11	14	18	21	25	28	32
18	Беккеит (лессингит)	2	3,2	6	10	13	16	19	22	25	29
19	Бенитолит	2	3,5	7	10	14	17	21	24	28	31
20	Бенстоунит	3	3,3	7	10	13	16	20	23	26	30
21	Берилл	2	3,8	8	11	15	19	23	27	30	34
22	Бисит	2	4,9	10	15	20	24	29	34	39	44
23	Битованит	8	4,8	10	14	19	24	29	33	38	43
24	Борнит	8	2,4	5	7	10	12	14	17	19	22
25	Бриголит	2	3,3	7	10	13	16	20	23	26	29
26	Брусит	1	3,5	7	10	14	17	21	24	28	31
27	Бустамит	24	4,8	10	14	19	24	29	34	39	43
28	Ванадинит	2	2,6	5	8	10	13	16	18	21	23
29	Варвикит	2	6,1	12	18	24	31	37	43	49	55
30	Везувинит	4	5,2	10	16	21	26	31	36	42	47
31	Вейдит	2	3,1	6	9	12	15	18	21	24	28
32	Волластонит	6	4,5	9	14	18	23	27	32	36	41
33	Вюртцит	2	1,8	4	5	7	9	11	12	14	16
34	Галенит	4	1,9	4	6	8	10	12	13	15	17
35	Гваршинит	4	4,6	9	14	18	23	28	32	37	41
36	Геденбергит	4	5,5	11	16	22	28	33	38	44	49
37	Гейнллит	2	1,3	3	4	5	7	8	9	11	12
38	α-гематит*	2	6,0	12	18	24	30	36	42	48	54
	α-гематит**	6	4,2	8	13	17	21	25	30	34	38
39	Гидроксиланатит	2	3,5	7	19	14	17	21	24	28	31
40	Гиперстен	16	5,7	11	17	23	28	34	40	46	51
41	Глазерит	1	2,8	6	8	11	14	17	20	22	25
42	Гроссуляр	8	5,8	12	17	23	29	35	41	46	52
43	Гюбнерит	2	5,8	12	17	23	29	35	41	46	52
44	Давидит	1	0,4	0,9	1,3	1,7	2,2	2,6	3,1	3,5	3,9
45	Давбургит	4	5,9	12	18	24	30	35	41	47	53
46	Датолит	4	5,7	11	17	23	28	34	40	46	51

* Минералы, для которых величины $\sum N_m^a$ рассчитанные по формулам ромбоэдрической решетки, отмечены одной звездочкой, а по формулам гексагональной сингонии — двумя звездочками.

№ п/п	Минерал	z _m ⁰	Содержание минералов в об. % (Ψ _m)								
			10	20	30	40	50	60	70	80	90
47	Диопсид	4	5,5	11	16	22	28	33	39	44	50
48	Доломит	2	11,2	22	34	45	56	67	79	90	101
	То же	1	5,6	11	17	22	28	33	39	44	50
49	Дравит	3	4,1	8	12	17	21	25	29	33	37
50	Дэвиит	1	3,0	6	9	12	15	18	21	24	27
51	Етманит	1	5,3	11	16	21	26	32	37	42	47
52	Ильменит *	2	5,7	11	17	23	28	34	40	46	51
	Ильменит **	2	1,3	3	4	5	7	8	9	11	12
53	Калиевые полевые шпаты	4	4,6	9	14	18	23	28	32	37	42
54	Каллофиллит	54	2,8	6	8	11	14	17	20	22	25
55	Кальсилит	2	2,8	6	8	11	14	17	20	22	25
56	Кальцит	2 п 4	4,9	10	15	20	25	29	34	39	44
57	Канкринит	1	3,0	6	9	12	15	18	21	24	27
	То же	1	2,6	5	8	10	13	16	18	21	23
58	Каолинит	1	5,6	11	16	22	27	33	38	44	49
59	Карбонат-апатит	2	2,4	5	7	10	12	15	17	20	22
60	Касситерит	2	5,6	11	17	22	28	34	39	45	50
61	Катаклизит	2	3,0	6	9	12	15	18	21	24	27
62	α-кварц	3	3,8	8	11	15	19	23	26	30	34
	β-кварц	3	3,6	7	11	14	18	22	25	29	32
63	Кипарит	4	6,9	14	21	28	35	42	48	55	62
64	Киповарь	3	1,5	3	5	6	8	9	11	12	14
	То же	3	2,1	4	6	8	11	13	15	17	19
65	Ковеллин	6	2,1	4	6	9	11	13	15	17	19
66	α-корунд *	2	7,1	14	21	28	35	42	49	56	64
	α-корунд **	2	1,7	3	5	7	8	10	12	13	15
	β-корунд *	8	7,1	14	21	28	35	43	50	57	64
67	Кутнагорит	1	5,4	11	16	22	27	33	38	43	49
	То же	3	3,8	8	12	15	19	23	27	31	34
68	Лабрадор	8	4,8	10	14	19	24	29	34	38	43
69	Лампрофиллит	4	4,8	10	14	19	24	29	34	38	43
70	Левнит	9	3,3	7	10	13	16	20	23	26	29
71	Лешдолоит	3	7,0	14	21	28	35	42	49	56	63
72	Лонгбанит	6	4,0	8	12	16	20	24	28	32	36
73	Людвигит	4	5,8	12	17	23	29	35	41	46	52
74	Магнезит	2	6,5	13	19	26	32	39	45	52	58
	То же	4	6,6	13	20	27	33	40	46	53	60
75	Магнетит	8	5,4	10	16	22	27	32	38	43	49
76	Маршалит	2	4,5	9	14	18	22	27	32	36	41
77	Маухерит	2	1,9	4	6	8	10	11	13	15	17
78	Мезомикроклин	4	4,4	9	13	18	22	27	31	36	40
79	Мейовит	2	4,9	10	15	20	24	29	34	39	44
80	Мелонит	1	2,1	4	6	8	11	13	15	17	19
81	Микроклин	4	4,4	9	13	18	22	27	31	35	40
82	Миларит	2	3,3	7	10	13	16	20	23	26	30
83	Миллерит	9	2,5	5	8	11	13	16	19	21	24
84	Молибденит	2	2,7	5	8	11	13	16	19	21	24
85	Мусковит	4	5,2	10	15	21	26	31	36	42	47
86	Натрияроант	3	4,1	8	12	16	20	24	28	32	37
87	Нефелин	2	3,1	6	9	12	16	19	22	25	28

* Минералы, для которых величины $\sum N_m^a$, рассчитанные по формулам ромбоэдрической решетки, отмечены одной звездочкой, а по формулам гексагональной сингонии — двумя звездочками.

№ п п	Минерал	2 ₀ m	Содержание минералов в об. % (V _m)								
			10	20	30	40	50	60	70	80	90
88	Никелин	2	2.5	5	7	10	12	15	17	20	22
89	Олигоклаз	4	4.7	9	14	19	24	28	33	38	43
90	Осунит	2	3.4	7	10	14	17	20	24	27	31
91	Отавит	2 п 4	5.2	10	16	21	26	31	36	42	47
92	Пастозит	2	4.7	9	14	19	23	28	33	38	42
93	Пираргирит	2	2.6	6	8	10	13	16	18	21	23
	То же	6	1.4	3	4	6	7	8	10	11	12
94	Пирит	4	5.1	10	15	20	25	30	36	41	46
95	Пироксмангит	14	5.2	10	16	21	26	31	37	42	47
96	Пироморфит	2	2.9	6	9	12	15	17	20	23	26
97	Пиросмакит	1	3.1	6	9	12	15	18	22	25	28
98	Пиррофанит	2	1.3	3	4	5	6	8	9	10	12
99	Пиррохромит	1	3.1	6	9	12	16	19	22	25	28
100	Пирротин	2	2.4	5	7	10	12	15	17	19	22
101	Плюмбюрозит	3	3.9	8	12	16	20	24	27	31	35
102	Прустит	2	2.8	6	8	11	14	17	19	22	25
	То же	6	1.5	3	4	6	7	9	10	12	13
103	Роговая обманка	2	5.1	10	15	20	26	31	36	41	46
104	Розонит	10	5.1	10	15	21	26	31	36	41	46
105	Розохроизит	2	5.8	12	17	23	29	35	41	46	52
	То же	4	6.0	12	18	24	30	36	42	48	54
106	Рот-бушнит	4	4.7	9	14	19	23	28	33	38	42
107	Сидерит	4	6.0	12	18	24	30	36	42	48	54
	То же	2	6.0	12	18	24	30	36	42	48	54
108	Синтеонит	2 п 4	6.6	13	20	26	33	39	46	52	59
109	Спессартин	8	6.2	12	19	25	31	37	43	50	56
110	Струвезит	1	3.9	8	12	16	21	24	28	31	35
111	Сфалерит	4	2.5	5	8	10	13	15	18	20	23
112	Тальк	4	5.4	10	16	22	27	32	38	43	49
113	Теллуриопсемуит	1	1.8	4	5	7	9	11	12	14	16
114	Тетрадимит	1	1.8	4	6	7	9	11	13	15	17
115	Тремолит	2	5.4	10	16	22	27	32	38	43	49
116	β-тридимит	4	3.1	6	9	12	16	19	22	25	28
117	Трикальцит	2	0.3	0.6	1.0	1.3	1.6	1.9	2.2	2.6	2.9
118	Турмалин	3	4.3	9	13	17	21	26	30	34	38
119	Успензит	5	11.4	23	34	45	57	68	79	91	102
120	Ферберит	2	6.1	12	18	24	31	37	43	49	55
121	Флогопит	2	4.9	10	15	20	24	29	34	39	44
122	Флюобарит	2	3.9	8	12	16	20	23	27	31	35
123	Флюорит	4	4.9	10	15	20	24	29	34	39	44
124	Форстерит	4	5.5	11	16	22	28	33	39	44	50
125	Фриделит	3	3.1	6	9	12	16	19	22	25	28
126	Фторопатит	2	3.5	7	11	14	18	21	25	28	32
127	Хабазит	6	3.1	6	9	12	16	19	22	25	28
128	γ-халькозин	2	1.6	3	5	6	8	10	11	13	14
129	Халькопирит	4	2.8	6	8	11	14	17	20	23	26
130	Хлоридатит	2	3.4	7	10	14	17	20	24	27	31
131	Хлоритонд	4	12.1	24	36	48	60	73	85	97	109
132	Хондрадит	2	5.6	11	17	22	28	34	39	45	50
133	Цинцит	4	5.7	11	17	23	28	34	40	46	51
134	Шеезит	4	5.1	10	15	20	26	31	36	41	46
135	Шерл	3	4.1	8	12	17	21	25	29	33	37
136	Шнифель	8	6.0	12	18	24	30	36	42	48	54
137	Шэллерит	2	3.1	6	9	12	16	19	22	25	28

№ п/п	Минерал	z_m^0	Содержание минералов в об. % (V_m)								
			10	20	30	40	50	60	70	80	90
138	Эвдианит	12	3,0	6	9	12	15	18	21	24	27
139	Эльбаит	3	4,3	9	13	17	22	26	30	35	39
140	Эпигматит	6	2,6	5	8	11	13	16	18	21	24
141	Эпидот	2	5,6	11	17	22	28	34	39	45	50
142	Ярозит	3	3,9	8	12	15	19	23	27	31	35

Приложение 5

Кристаллохимические параметры главнейших минеральных составляющих горных пород и руд

Таблицы приложения служат для облегчения различных расчетов по атомно-объемной, формульно-объемной и атомно-нормативной петрохимическим системам, а также ре- и примеры пересчетов приведены в тексте.

В основе расчета кристаллохимических параметров, приведенных в приложении, положены данные об объеме элементарной ячейки минералов, которая вычислена, исходя из ее параметров по следующим формулам:

$$V_m^0 = abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \gamma - \cos^2 \beta + 2 \cos \alpha \cos \gamma \cos \beta} = 2abc \sqrt{\sin S \sin (S - \alpha) \sin (S - \beta) \sin (S - \gamma)},$$

$$\text{где } S = \frac{\alpha + \beta + \gamma}{2} \text{ (для триклинной сингонии);} \quad (1)$$

$$V_m^0 = abc \sin \beta \text{ (для моноклинной сингонии);} \quad (2)$$

$$V_m^0 = abc \text{ (для ромбической сингонии);} \quad (3)$$

$$V_m^0 = a^3 \sqrt{(1 - 3 \cos^2 \alpha) + 2 \cos^3 \alpha} = a^3 (1 - \cos \alpha) \sqrt{1 + 2 \cos \alpha} \text{ (для тригональной сингонии);} \quad (4)$$

$$V_m^0 = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \cdot c \text{ (для гексагональной сингонии);} \quad (5)$$

$$V_m^0 = a^2 c \text{ (для тетрагональной сингонии);} \quad (6)$$

$$V_m^0 = a^3 \text{ (для кубической сингонии),} \quad (7)$$

где a , b , c — параметры элементарной ячейки по соответствующим кристаллографическим осям в куб. ангстремах; α , β , γ — углы между кристаллографическими осями.

$$\gamma_m^I = 1,6602 \frac{z_m^0 M_m}{V_m^0}; \quad (8)$$

$$V_m^x = \frac{V_m^0}{z_m^0}; \quad (9)$$

$$q_m = 10 \frac{z_m^0 \sum n_m^I}{V_m^0}; \quad (10)$$

$$\frac{1}{q_m} = 0,1 \frac{V_m^0}{z_m^0 \sum n_m^I}; \quad (11)$$

$$Q_m = 0,01 \frac{\sum n_m^I}{q_m} = 0,001 \frac{V_m^0}{z_m^0}; \quad (12)$$

$$W_{(m)}^I = \frac{Q_m}{\sum n_m^I} = \frac{0,01}{q_m} = 0,001 \frac{V_m^0}{z_m^0 \sum n_m^I}. \quad (13)$$

№	Минерал и его синоним	Формула минерала
1	Аврит <i>Av</i> (<i>Avg</i>)	(Ca, Mg, Fe ²⁺ ; Fe ³⁺ , Ti, Al) ₂ [(Si, Al) ₂ O ₆]
2	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Cu ₂ [CO ₃] ₂ (OH) ₂
3	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	2PbS · Cu ₂ S · Bi ₂ S ₃
4	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Ca ₂ [MgSi ₂ O ₇]
5	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	NaFe ²⁺ [Si ₂ O ₆]
6	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	(Ca, Mn, Fe ²⁺) ₂ Al ₂ [BO ₃][Si ₂ O ₇](OH)
7	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Ca ₂ (Mg, Fe ²⁺) ₂ [Si ₂ O ₇](OH, F) ₂
8	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	α-Mns
9	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Mn ₂ [SiO ₄](OH) ₂
10	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	β-C
11	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	KAl ₂ [SO ₄] ₂ (OH) ₆
12	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	(7/8 — 1)Na[AlSi ₂ O ₆] + (1/8 — 0)[Ca[Al ₂ Si ₂ O ₆]]
13	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Fe ²⁺ Al ₂ [SiO ₄]
14	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	LiAl[PO ₄](F, OH)
15	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Mg ₂ Al ₂ Fe ²⁺ [Al ₂ Si ₂ O ₇](OH) ₂
16	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Ca ₂ (Be, Al)[Si ₂ (Si, Al)O ₇] · H ₂ O
17	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Na[AlSi ₂ O ₆] · 11/2 H ₂ O
18	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	TiO ₂
19	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Ca[SO ₄]
20	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Al ₂ O ₃ (SiO ₂)
21	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	(1/2 — 2/3)Na[AlSi ₂ O ₆] + (1/2 — 1/3)Ca[Al ₂ Si ₂ O ₆]
22	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Ca ₂ (Fe ²⁺ , Ti) ₂ [SiO ₄] ₂
23	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	CaFe ²⁺ [CO ₃] ₂ ; Ca(Mg, Fe, Mn)[CO ₃] ₂
24	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Ca(Mg, Fe ²⁺ , Mn)[CO ₃] ₂
25	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Ca[Al ₂ Si ₂ O ₆]
26	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Mg ₆ [Si ₄ O ₁₀](OH) ₈
27	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Mg ₆ [Si ₄ O ₁₀](OH) ₈
28	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Sb ₂ S ₃
29	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	(Mg, Fe ²⁺) ₇ [Si ₆ O ₂₂](OH, F) ₂
30	Аврит (см. № 131, 471, 481) <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Ca ₂ [PO ₄](OH, F, Cl)
31	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	KPCa ₂ [Si ₆ O ₂₀] · 8H ₂ O
32	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Ca[CO ₃]
33	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	α-Ag ₂ S
34	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	β-Ag ₂ S
35	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Mn ₂ MnAl ₂ [V, As]O ₄ (SiO ₄) ₆ (OH) ₂ · H ₂ O
36	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	FeAsS
37	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Na ₂ Mg[SO ₄] ₂ · 4H ₂ O
38	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	Al ₂ [PO ₄](OH) ₂
39	Аврит <i>Av</i> (<i>Av</i>)	As ₂ S ₃

* Содержание атомов рассчитано, исходя из данных о фторе.

Параметры элементарной ячейки

	Параметры элементарной ячейки							Число формульных единиц	Рентгеновская плотность ρ _x	Формульная масса (вес.) M _f (· 10 ³)
	a	b	c	α	β	γ	Z			
1	≈ 9,8	≈ 9,0	≈ 5,25		≈ 105°			4	1,24	83,66
2	4,97	5,84	10,29		92° 24'			2	3,83	344,64
3	11,32	11,66	4,01					2	7,22	1151,80
4	7,84	8,79	5,01		107° 20'			2	2,94	272,64
5	9,66	9,16	5,26		81° 36'			4	3,60	231,01
6	7,15	8,96	8,96		≈ 104° 50'			2	3,40	580,56
7	≈ 9,85	≈ 18,1	≈ 5,3					2	3,25	891,25
8	5,22		10,46		109° 08'			4	4,06	87
9	8,3	4,86	17,38					2	3,34	400,79
10	3,5688	6,97	7,156		116° 34'			8	3,52	12,01
11	6,97	12,789	5,04		87° 30'			2	2,82	414,16
12	8,138	7,12	14,01		97° 49'			3	2,63	263,24
13	11,526	9,19	9,8		68° 07'			4	4,32	497,78
14	5,19	5,31	14,01		90°			8	3,04	146,89
15	5,31	9,19	9,8					2	2,83	582,57
16	13,8		9,51					12	3,03	283,80
17	13,71	6,996	6,238					16	2,27	220,16
18	3,78	6,991	5,57					4	3,90	79,90
19	6,991	7,92	7,107					4	2,96	136,14
20	7,78	12,879	14,1690		93° 24'			4	3,14	162,05
21	8,176		14,530		116° 10'			4	2,66	268,90
22	12,048		7,46		91° 24'			8	3,80	500,26
23	6,19		3,84					2	3,30	215,95
24	6,06		5,27		102° 31'			1	2,66	3,13
25	6,032		5,27		46° 58'			1	3,13	205,13
26	6,070		5,27		47° 00'			2	6,23	205,13
27	8,177		14,530		93° 10'			2	2,76	278,21
28	5,32		7,46		115° 51'			8	2,58	554,28
29	5,30		9,20		91° 24'			1	2,53	554,28
30	11,22		11,30					4	4,63	339,68
31	18,5		17,7					4	3,44	893,25
32	18,5		17,7					4	3,44	893,25
33	9,33—9,61		6,76—6,88					2	3,32—3,07	509,13
34	9,00		15,84					2	3,32—3,07	907,26
35	4,95		5,73		124°			2	2,35	100,09
36	9,49		8,30					8	2,95	247,80
37	4,89		18,60					2	7,04	247,80
38	8,74		5,75		68° 13'			2	3,67	1049,02
39	5,75		6,42					4	6,23	162,83
	9,51		5,65					4	6,30	162,83
	11,06		8,17		100° 39'			2	2,27	334,47
	13,13		7,98		112° 27'			4	2,70	199,96
	11,49		9,59		90° 27'			4	3,49	246,02

	Минерал и его символ	Формула минерала
40	Арфведсонит <i>Арф</i> (<i>Arf</i>)	$\text{Na}_{2,5}\text{Ca}_{0,5}(\text{Fe}^{2+}, \text{Mg}, \text{Fe}^{3+}, \text{Al})_5[\text{Si}_{7,5}\text{Al}_{0,5}\text{O}_{22}](\text{OH}, \text{F})_2$
41	Афониллит <i>Афа</i> (<i>Afw</i>)	$\text{Ca}_3[\text{SiO}_3(\text{OH})]_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
42	Ашарит <i>Аш</i> (<i>Ash</i>)	$\text{Mg}_2[\text{B}_2\text{O}_5] \cdot \text{H}_2\text{O}$
43	Баббиттонит <i>Баб</i> (<i>Bab</i>)	$(\text{Ca}, \text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+})_5[\text{Si}_5\text{O}_{15}]$
44	Банальсит <i>Бан</i> (<i>Ban</i>)	$\text{BaNa}_2[\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_8]_2$
45	Баотит <i>Баот</i> (<i>Baot</i>)	$\text{Ba}_4(\text{Ti}, \text{Nb})_8[\text{Si}_4\text{O}_{12}]\text{O}_{16}\text{Cl}$
46	Барилит <i>Бра</i> (<i>Brl</i>)	$\text{BaBe}_2[\text{Si}_2\text{O}_7]$
47	Барит <i>Ба</i> (<i>Ba</i>)	$\text{Ba}[\text{SO}_4]$
48	Баркевикит <i>Барк</i> (<i>Bk</i>)	$\text{Ca}_2(\text{Na}, \text{K})(\text{Fe}^{2+}, \text{Mg}, \text{Fe}^{3+}, \text{Mn})_5[\text{Si}_{6,5}\text{Al}_{1,5}\text{O}_{22}](\text{OH})_2$
49	Баруалит <i>Бра</i> (<i>Brs</i>)	$(\text{Na}, \text{K})_{0,8}(\text{Ca}, \text{Na})_{2,0}(\text{Mg}_{2,6}\text{Fe}^{2+}_{1,2}\text{Fe}^{3+}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{Ti}_{0,2})_5 \times$ $\times [\text{Si}_{6,5}\text{Al}_{1,5}\text{O}_{22}](\text{OH} \cdot \text{O})_2$
50	Башнит (скандиевый берилл) <i>Баш</i> (<i>Sc Ber</i>)	$(\text{Be}, \text{Sc})_3\text{Al}_2[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$
51	Беккезит (лессингит) <i>Бек</i> (<i>Bec</i>)	$(\text{Ca}, \text{Ce}, \text{La}, \text{Nb})_5[\text{SiO}_4]_3(\text{O}, \text{OH}, \text{F})$
52	Бемит <i>Бем</i> (<i>Bom</i>)	$\gamma\text{-AlO}(\text{OH})$
53	Бентонит <i>Бен</i> (<i>Ben</i>)	$\text{BaTi}[\text{Si}_2\text{O}_6]$
54	Берилл <i>Бер</i> (<i>Ber</i>)	$\text{Be}_3\text{Al}_2[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$
55	Бериллоседалит <i>Берсд</i> (<i>Bersd</i>)	$\text{Na}_8[\text{BeAlSi}_3\text{O}_{12}]_2\text{Cl}_2$
56	Бертрайдит <i>Брт</i> (<i>Brt</i>)	$\text{Be}_4[\text{Si}_2\text{O}_7](\text{OH})_2$
57	Бертьеит <i>Брми</i> (<i>Brtm</i>)	$(\text{Fe}^{3+}, \text{Fe}^{2+}, \text{Al}, \text{Mg})_6[\text{Al}_{1,5}\text{Si}_{2,6}\text{O}_{10}](\text{OH})_8$
58	Биксбит <i>Лкб</i> (<i>Bkb</i>)	$(\text{Mn}, \text{Fe})_2\text{O}_7$
59	Бикитант <i>Бкм</i> (<i>Bkt</i>)	$\text{Li}[\text{AlSi}_2\text{O}_6]\text{H}_2\text{O}$
60	Бисит <i>Би</i> (<i>Bi</i>)	$(\text{Na}, \text{K})_2(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+})_{n-4}(\text{Fe}^{3+}, \text{Al}, \text{Ti})_{0-2}[\text{Si}_{6-5} \times$ $\times \text{Al}_{2-3}\text{O}_{20}]\text{O}_{0-2}(\text{OH}, \text{F})_{4-2}$
61	Бисмуто tantalит <i>Бсмт</i> (<i>Bstm</i>)	$\text{Bi}(\text{Ta}, \text{Nb})\text{O}_4$
62	Битит <i>Бит</i> (<i>Btt</i>)	$\text{CaLiAl}_2[\text{AlBeSi}_2\text{O}_{10}](\text{OH})_2$
63	Битованит <i>Бит</i> (<i>But</i>)	$(1/8 - 1/3)\text{Na}[\text{AlSi}_3\text{O}_8] \{ + (7/8 - 2/3)\text{Ca}[\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_6] \}$
64	Борацит-β <i>Брц-β</i> (<i>Brc-β</i>)	$\beta\text{-Mg}_3[\text{B}_7\text{O}_{13}]\text{Cl}$
65	Борацит-α <i>Брц-α</i> (<i>Brc-α</i>)	$\alpha\text{-Mg}_3[\text{B}_7\text{B}_4\text{O}_{12}](\text{O})\text{Cl}$
66	Борнит-α (около 200° C) <i>Бу-α</i> (<i>Bu-α</i>)	$\text{Cu}_6[\text{FeS}_4]$
67	Борнит-β (> 228° C) <i>Бу-β</i> (<i>Bu-β</i>)	$\text{Cu}_5[\text{FeS}_4]$
68	Браунит <i>Бра</i> (<i>Br</i>)	$3(\text{Mn}^{2+}, \text{Fe}^{2+})_2\text{O}_3 \cdot \text{Mn}^{3+}[\text{SiO}_3]$
69	Бредигит <i>Брд</i> (<i>Brd</i>)	$\gamma\text{-Ca}_2[\text{SiO}_4]$
70	Бритолит <i>Брт</i> (<i>Brt</i>)	$(\text{Na}, \text{Ce}, \text{Ca})_5[\text{SiO}_4, \text{PO}_4]_3\text{F}$
71	Бронзит <i>Бра</i> (<i>Brc</i>)	$(\text{Mg}, \text{Fe})_2[\text{Si}_2\text{O}_6]$
72	Брукит <i>Брк</i> (<i>Brk</i>)	TiO_2
73	Брусит <i>Бру</i> (<i>Bru</i>)	$\text{Mg}(\text{OH})_2$
74	Бульжержит <i>Буа</i> (<i>Bu</i>)	$\text{Pb}_5[\text{Sb}_4\text{S}_{11}]$
75	Бурнонит <i>Бурн</i> (<i>Burt</i>)	$\text{CuPb}[\text{SbS}_3]$
76	Бустамит <i>Буст</i> (<i>Bust</i>)	$(\text{Mn}, \text{Ca}, \text{Fe}^{2+})[\text{SiO}_3]$
77	Вивеллит <i>Ваа</i> (<i>War</i>)	$\text{Al}_3[\text{PO}_4]_2(\text{OH})_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$
78	Вагнерит <i>Вар</i> (<i>Wag</i>)	$\text{Mg}_2[\text{PO}_4]\text{F}$
79	Вайрацит <i>Вам</i> (<i>Wat</i>)	$\text{Ca}[\text{AlSi}_2\text{O}_6]_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
80	Валлерит <i>Вам</i> (<i>Vll</i>)	$\text{Cu}_7\text{Fe}_4\text{S}_7$
81	Ванадинит <i>Ван</i> (<i>Van</i>)	$\text{Pb}_5[\text{VO}_4]_3\text{Cl}$
82	Варвикит <i>Врв</i> (<i>Wrv</i>)	$(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+})_3\text{Ti}[\text{O} \text{BO}_3]_2$
83	Вазсит <i>Вем</i> (<i>Vst</i>)	NiS_2

Параметры элементарной ячейки						Число формульных единиц Z	Рентгеновская плотность ρ_x , г/см ³	Формулярная масса (без H), М
a	b	c	α	β	γ			
$\approx 9,9$	$\approx 18,0$	$\approx 5,3$				2	3,24	893,43
$\approx 9,9$	$\approx 18,0$	$\approx 5,3$		$\approx 104^\circ$		2	3,24	893,43
16,27	5,63	13,23		$\approx 104^\circ$		4	2,64	342,46
10,34	12,45	3,21		$134^\circ 48'$		4	2,69	167,26
7,56	12,45	6,74	$86^\circ 12'$	$93^\circ 51'$	$112^\circ 22'$	2	3,60	633,42
8,52	9,99	16,76				4	3,07	659,58
19,68		5,88				4	4,98	1708,37
4,64	11,63	9,81				4	4,06	323,53
8,878	5,450	7,152				4	4,48	233,40
$\approx 9,9$	18,34	5,34		$\approx 106^\circ$		2	3,42	958,95
9,80	18,04	5,33		$104^\circ 39'$		1	2,81	1544,28
9,80	18,04	5,33		$104^\circ 39'$		1	2,81	1544,28
9,50		9,18				2	2,74	591,42
9,7		7,1				2	4,40	761,26
9,7		7,1				2	4,40	761,26
3,69	12,24	2,86				4	3,08	59,99
6,61		9,73				2	3,73	413,51
9,188		9,189				2	2,63	537,53
8,72						1	2,34	935,48
15,22	8,69	4,54				4	2,63	238,21
5,41	9,33	7,06		$104^\circ 30'$		1	3,04	651,11
9,37						16	5,13	158,79
8,63	4,95	7,64		$114^\circ 34'$		2	2,28	204,11
5,3	9,2	10,2		100°		1	2,87	847,98
5,3	9,2	10,2		100°		1	2,87	847,98
5,3	9,2	10,2		100°		1	2,87	847,98
4,97	5,57	11,78				4	3,36	409,91
4,98	8,67	18,74		$\sim 90^\circ$		4	1,91	387,14
8,171	12,869	14,181	$93^\circ 22'$	$115^\circ 58'$	$90^\circ 31'$	8	2,72	274,55
12,10						8	2,94	302,07
8,54	8,54	12,07				4	2,96	302,07
21,94	21,94	10,97				32	4,68	464,95
10,93						8	4,73	464,95
13,44		18,93				16	3,97	511,38
8,75	18,41	10,93				16	3,37	172,25
9,63		7,03				2	3,75	639,24
18,20	8,86	5,20				8	3,68	232,33
5,446	9,184	5,145				8	4,12	79,90
3,14		4,76				1	2,38	58,33
21,56	23,51	8,09		$100^\circ 48'$		8	3,72	1875,65
8,16	8,7	7,8				4	5,86	498,67
15,46	7,18	13,84	$89^\circ 34'$	$94^\circ 53'$	$102^\circ 47'$	24	3,37	126,37
9,62	17,34	6,99				4	2,35	411,89
11,92	12,53	9,65		$108^\circ 07'$		16	3,15	162,60
13,69	13,68	13,56		$90^\circ 30'$		8	2,27	434,39
6,14	9,83	11,42				2	3,08	638,45
10,33		7,35				2	2,92	1416,23
9,20	3,01	9,45				2	4,03	317,76
5,67						4	4,47	122,84

№ п/п	Минерал и его символ	Формула минерала
84	Везувит <i>Bez</i> (<i>Ver</i>)	$\text{Ca}_{10}(\text{Mg, Fe})_2\text{Al}_4[\text{Si}_2\text{O}_7]_2[\text{SiO}_4]_5(\text{OH, F})_4$
85	Вейдит <i>Wed</i> (<i>Wad</i>)	$\text{K}_2\text{Zr}[\text{Si}_3\text{O}_9]$
86	Вермикулит <i>Ver</i> (<i>Ver</i>)	$(\text{Mg, Ca})_{0.7}(\text{Mg, Fe}^{2+}, \text{Al})_{8.0}[(\text{Al, Si})_{8.0}\text{O}_{20}](\text{OH})_4 \times 8\text{H}_2\text{O}$
87	Вермикулит магnezиальный <i>Mg Ver</i> (<i>Mg Ver</i>)	$(\text{Mg}_{2.76}\text{Fe}_{0.48}\text{Al}_{0.16})\text{Mg}_{0.32}[\text{Al}_{1.28}\text{Si}_{2.36}\text{O}_{10}](\text{OH})_2 \times 4\text{H}_2\text{O}$
88	Велерит <i>Wolm</i> (<i>Wolt</i>)	$\text{NaCa}_2(\text{Zr, Nb})\text{O}[\text{Si}_2\text{O}_7](\text{F, OH})$
89	Визент (фосфат — гидропальцит) <i>Vz</i> (<i>Vs</i>)	$\text{NaCa}_5[\text{Al}_{10}\text{Si}_3\text{P}_5\text{O}_{30}](\text{OH})_{18} \cdot 8\text{H}_2\text{O}$
90	Виридит <i>Vir</i> (<i>Vir</i>)	$(\text{Al, Mn, Fe}^{3+})_2[\text{O} \text{SiO}_4]$
91	Висмут <i>Vi</i> (<i>Wi</i>)	Bi
92	Висмутит <i>Wm</i> (<i>Bst</i>)	Bi_2S_3
93	Витерит <i>Vit</i> (<i>Wit</i>)	$\text{Ba}[\text{CO}_3]$
94	Виттихенит <i>Vzm</i> (<i>Wcht</i>)	Cu_3BiS_3
95	Вишневит <i>Vsh</i> (<i>Wis</i>)	$(\text{Na, Ca, K})_{8-7}[\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}](\text{SO}_4, \text{CO}_3, \text{Cl})_{1.0-1.5} \times 1-5\text{H}_2\text{O}$
96	Волконскит <i>Wolk</i> (<i>Wolk</i>)	$(\text{Na, K})_5\text{Ca}[\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}](\text{Cl})_1 \cdot 1\text{H}_2\text{O}$ $(\text{Na, K})\text{Ca}_4[\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}](\text{SO}_4)_{1.5} \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ $(\text{Cr}_{0.35}\text{Fe}_{0.58}\text{Al}_{0.40}\text{Mg}_{0.32})(\text{Mg}_{0.17}\text{Ca}_{0.10}) \times 2$ $\times [\text{Al}_{0.18}\text{Si}_{3.82}\text{O}_{10}](\text{OH})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_4$
97	Волластонит-α <i>Wol</i> (<i>Wo</i>)	$\text{Ca}[\text{SiO}_3]$
98	Вольфенит <i>Wlf</i> (<i>Wlf</i>)	$(\text{Fe}^{3+}, \text{Mn})_2[\text{PO}_4](\text{OH})$
99	Вольфрамит <i>Wlf</i> (<i>Wf</i>)	$(\text{Mn, Fe})[\text{WO}_4]$
100	Вульфенит <i>Wuf</i> (<i>Wuf</i>)	$\text{Pb}[\text{MoO}_4]$
101	Вюртцит <i>Wz</i> (<i>Wz</i>)	$\beta\text{-ZnS} [> 1020^\circ \text{C}]$
102	Гадоллит <i>Gd</i> (<i>Gd</i>)	$\text{Y}_2\text{FeBe}_2[\text{O} \text{SiO}_4]_2$
103	Галаксит <i>Glm</i> (<i>Glt</i>)	MnAl_2O_4
104	Галешит <i>Gal</i> (<i>Ga</i>)	PbS
105	Галит <i>Gal</i> (<i>Ha</i>)	NaCl
106	Галлуазит <i>Gal</i> (<i>Als</i>)	$\text{Al}_4[\text{Si}_4\text{O}_{10} (\text{OH})_8] \cdot (\text{H}_2\text{O})_4$
107	Гапит <i>Gn</i> (<i>Gn</i>)	ZnAl_2O_4
108	Ганофиллит <i>Gnt</i> (<i>Gnt</i>)	$(\text{Na, K})(\text{Mn, Al, Mg, Ca})_3[(\text{Si, Al})\text{Si}_3\text{O}_{10}](\text{OH})_2(\text{OH, H}_2\text{O})_3$
109	Гардистонит <i>Gdm</i> (<i>Hdt</i>)	$\text{Ca}_2\text{Zn}[\text{Si}_2\text{O}_7]$
110	Гармотом <i>Grm</i> (<i>Hrm</i>)	$\text{Ba}[\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
111	Гаусмавит <i>Gauc</i> (<i>Haus</i>)	$\text{Mn}^{4+}\text{Mn}^{2+}\text{O}_4$
112	Гаюит <i>Gau</i> (<i>Hau</i>)	$(\text{Na, Ca})_{8-4}[\text{AlSiO}_4]_6(\text{SO}_4)_{2-1}$
113	Гваринит <i>Gvn</i> (<i>Gvn</i>)	$\text{NaCa}_2(\text{ZrO})[\text{Si}_2\text{O}_7]\text{F}$
114	Геденбергит <i>Ged</i> (<i>Hed</i>)	$\text{CaFe}^{2+}[\text{Si}_2\text{O}_6]$
115	Гейклит <i>Geik</i> (<i>Geik</i>)	MgTiO_3
116	Гейландит <i>Geil</i> (<i>Heul</i>)	$\text{Ca}[\text{Al}_7\text{Si}_7\text{O}_{31}] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
117	Гелешит <i>Gel</i> (<i>Ge</i>)	$\text{Ca}_2\text{Al}[\text{AlSiO}_7]$
118	Гельвинит <i>Glv</i> (<i>Hlv</i>)	$(\text{Mn, Fe}^{2+}, \text{Zn})_8[\text{BeSiO}_4]_6\text{S}_2$
119	Геммит-α <i>Gem</i> (<i>Hm</i>)	$\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$
120	Гемшморфит <i>Gmf</i> (<i>Hmph</i>)	$\text{Zn}_4[\text{Si}_2\text{O}_7](\text{OH})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$
121	Гентгельвинит <i>Ggl</i> (<i>Ghlv</i>)	$\text{Zn}_8[\text{BeSiO}_4]_6\text{S}_2$

Параметры элементарной ячейки						Число формульных единиц Z_0	Рентгеновая плотность γ г/см ³	Формулярная масса (весе) M_0 ($\Gamma \cdot 10^{-3}$)
a	b	c	α	β	γ			
15,6		~ 11,80				4	3,37	1457,66
15,6		~ 11,80				4	3,37	1457,66
6,88		10,16				2	2,86	358,58
~ 5,3	~ 9,2	28,9			97°	2	2,35	989,09
5,33	9,13	28,9			97°	4	2,24	473,21
10,82	10,28	7,27			108° 57'	4	3,45	397,38
13,65						2	2,17	1662,33
7,808	5,920	5,567				4	5,16	199,93
6,57					87° 34'	8	9,81	208,980
4,745					57° 14'	2	9,81	208,980
11,15	11,29	3,98				4	6,81	514,15
5,26	8,84	6,56				4	4,30	197,35
7,66	10,31	6,69				4	6,23	495,792
12,58—		5,11—5,20				1		1040,94
-12,76								
12,58		5,11				1	2,22	936,18
12,76		5,20				1	2,52	1112,89
5,16	8,94	14,40			90°	2	2,34	467,60
7,94	7,32	7,07	90° 03'	95° 17'	102° 28'	6	2,90	116,17
12,12	13,16	9,73		108° 18'		16	4,02	222,76
4,79	5,74	4,99		90° 26'		2	7,34	303,24
5,42		12,10				4	6,86	367,13
3,85		6,29				2	4,01	97,43
9,89	7,55	4,66			90° 33'	2	4,46	467,85
8,28						8	4,04	172,90
5,94						4	7,58	239,25
5,6404 ±						4	2,16	58,44
± 0,0001								
5,15	8,9	10,1			100° 12'	1	2,14	588,27
8,08						3	4,62	183,33
5,6	13,5	12,5			93° 21'	4	3,39	481,57
5,6	13,5	12,5			93° 21'	4	3,39	481,57
7,85		5,00				2	3,38	313,70
9,82	14,13	8,68			124° 50'	2	2,43	723,82
5,75		9,42				4	4,88	228,81
9,12						1	2,29	1047,71
9,12						1	2,29	1047,71
10,93	10,31	7,33	90° 29'	108° 50'	90° 08'	4	3,38	397,54
9,85	9,02	5,26		104° 20'		4	3,64	248,10
5,09		14,09				2	1,26	120,21
17,71	17,84	7,46		116° 20'		4	2,22	706,64
7,69		5,08				2	3,03	274,21
8,21						1	3,42	1140,46
8,62						1	2,96	1140,46
5,427			55° 18'			2	5,26	159,69
10,72	8,40	5,12				2	3,47	481,68
8,12						1	3,70	1193,68

№	Минерал и его символ	Формула минерала
123	Герсдорфит <i>Grs</i> (<i>Grs</i>)	$NiAsS$
124	Гершпит <i>Grs</i> (<i>Grs</i>)	$Fe^{2+}Al_2O_4$
125	Гессит <i>Ges</i> (<i>Ges</i>)	Ag_2Te
126	Гетерит <i>Gth</i> (<i>Gth</i>)	$ZnMn_2O_4$
127	Гетит-α <i>Gth</i> (<i>Gth</i>)	$α-Fe_3O_4$
128	Гидрофан <i>Ghd</i> (<i>Ghd</i>)	$(K, Ba)[Al(AlSi)Si_2O_8]$
129	Гибсит <i>Gib</i> (<i>Gib</i>)	$Al(OH)_3$
130	Гибсит (гидрооксидный) <i>Gibsh</i> (<i>Gibsh</i>)	$Ca_2Al_2[SiO_4]_2(OH)_4$
131	Гидроксилапатит <i>Gan</i> (<i>Gan</i>)	$Ca_5[PO_4]_3(OH)$
132	Гидромусковит <i>Gms</i> (<i>Gms</i>)	$(K, H_2O)Al_2[AlSi_3O_{10}](H_2O, OH)_2$
133	Гидропарагонит <i>Gpr</i> (<i>Gpr</i>)	$(Na, H_2O)Al_2[AlSi_3O_{10}](H_2O, OH)_2$
134	Гиперит <i>Gip</i> (<i>Gip</i>)	$(Fe, Mg)[SiO_3]$
135	Гипс <i>Gp</i> (<i>Gp</i>)	$Ca[SO_4] \cdot 2H_2O$
136	Глаукофан <i>Gls</i> (<i>Gls</i>)	$K_2Na[SO_4]_2$
137	Глаукозит <i>Gln</i> (<i>Gln</i>)	$(K, Na, Ca)_{1-2-2.0}(Fe^{3+}, Al, Fe^{2+}, Mg)_{1.0}[Si_{7-7.5}Al_{1.0-1.0} \times O_{2.0}](OH)_4 \cdot nH_2O$
138	Глаукофан <i>Gls</i> (<i>Gls</i>)	$Na_2Mg_2Al_2[Si_8O_{22}](OH)_2$
139	Глаукохроит <i>Gkht</i> (<i>Gkht</i>)	$CaMn[SiO_4]$
140	Гюблит <i>Gub</i> (<i>Gub</i>)	$Ca_2FeB_2[SiO_4]F_2O_2$
141	Гюблит <i>Gub</i> (<i>Gub</i>)	$(Mn, Mg, Fe^{3+})_6[Si_3O_{10}](O, OH)_6(OH)_2$
142	Гюблит <i>Gub</i> (<i>Gub</i>)	$(Fe, Mg)_2[SiO_4]$
143	Грамматит <i>Gram</i> (<i>Gram</i>)	$Ca_2(Mg, Fe)_5[Si_8O_{22}](OH)_2$
144	Гравит <i>Gra</i> (<i>Gra</i>)	$α-MnOOH$
145	Графит-2H <i>Grf</i> (<i>C</i>)	$α-C$
146	Графит-3H <i>Grf</i> (<i>C</i>)	$α-C$
147	Гриналит <i>Gri</i> (<i>Gri</i>)	$Fe^{2+}_5Fe^{3+}_5[Si_4O_{10}](OH)_8$
148	Гроссулар <i>Gros</i> (<i>Gros</i>)	$Ca_2Al_2[SiO_4]_3$
149	Грюнит <i>Gru</i> (<i>Gru</i>)	$(Fe^{2+}, Mg)_7[Si_8O_{22}](OH)_2$
150	Гудмурит <i>Gud</i> (<i>Gud</i>)	$FeSbS$
151	Гумит <i>Gum</i> (<i>Gum</i>)	$Mg_7[SiO_4]_3(OH, F)_2$
152	Гюблит <i>Gub</i> (<i>Gub</i>)	$Mn[WO_4]$
153	Гюблит <i>Gub</i> (<i>Gub</i>)	$(K, H_2O)(Al_{1.5}Mg_{0.5})[AlSi_3O_{10}](H_2O, OH)_2$
154	Давидит <i>Dvd</i> (<i>Dvd</i>)	$(Fe^{2+}, Fe^{3+}, U, Ce, La)_2(Ti, Fe^{3+}, Cr, V)_5O_{12}$
155	Давалит <i>Dnl</i> (<i>Dnl</i>)	$Fe_8[BeSiO_4]_6S_2$
156	Данбурит <i>Dnb</i> (<i>Dnb</i>)	$Ca[B_2Si_2O_8]$
157	Датолит <i>Dat</i> (<i>Dat</i>)	$CaB[SiO_4](OH)$
158	Дарфит <i>Darf</i> (<i>Darf</i>)	$(Fe^{2+}, Al)_2(Al_{1.2-1.5}Si_{2.8-2.5}O_{10})Fe_2(OH)_8$
159	Десмин (стильбит) <i>Des</i> (<i>Des</i>)	$Ca[Al_2Si_7O_{18}] \cdot 7H_2O$
160	Джексонит <i>Jnt</i> (<i>Jnt</i>)	$Pb_4FeSb_5S_{14}$
161	Джиллеспит <i>Jls</i> (<i>Jls</i>)	$BaFe[Si_4O_{10}]$
162	Диабазит <i>Dbt</i> (<i>Dbt</i>)	$(Mg, Fe^{2+})_3(Mg, Fe^{2+}, Al)_3[(Al_{0.5-0.9}Si_{3.5-3.1})O_{10}] \times (OH)_8$
163	Диспор <i>Dsp</i> (<i>Dsp</i>)	$α-AlO(OH)$

Параметры элементарной ячейки						Число формульных единиц Z_0	Рентгеновская плотность ρ_x	Формульная масса (вес) M_f ($\cdot 10^{-3}$)
a	b	c	α	β	γ			
9,00	31,90	8,50		62°		6	6,88	1480,13
5,71						4	5,91	165,69
8,135						8	4,29	173,81
8,09	4,48	8,96		123° 20'		4	8,40	343,34
5,75		9,17				4	5,24	239,25
4,65	10,02	3,04				4	4,17	88,85
≈ 8,54	≈ 12,98	≈ 7,15		115° 35'		4	5,38	579,68
8,64	5,07	9,72		94° 34'		8	2,44	78,01
12,02						8	3,26	426,41
12,16						8	3,15	426,41
9,41		6,87				8	3,17	502,33
~ 5,2	~ 9,0	~ 20,0		90°		4	2,77	388,79
~ 5,2	~ 9,0	~ 20,0		96°		4	2,77	388,79
5,2	9,0	18,99		90°		4	2,84	380,73
5,2	9,0	18,99		90°		4	2,84	380,73
18,24	8,88	5,21				4	2,84	380,73
5,68	15,18	6,29		113° 50'		16	3,66	116,16
5,66		7,30				4	2,30	172,18
5,25	9,09	10,03		≈ 100°		1	2,73	332,42
						1	3,32	942,44
≈ 9,7	≈ 17,7	≈ 5,3		≈ 104°		2	2,95	783,58
6,50	4,92	11,14				4	3,49	187,10
9,67	7,67	4,74		90° 22'		4	7,15	373,80
5,47	9,46	28,8		90°		4(?)	3,07	689,46
6,07	4,79	10,34				4	3,80	172,24
9,83	18,05	5,264		104° 28'		4	3,27	891,26
4,58	10,76	2,89				4	4,10	87,95
2,46		6,708				4	2,27	12,01
2,46		10,06				6	2,27	12,01
5,555	9,61	7,20		90°		1	3,09	715,57
11,851						8	3,59	450,46
≈ 9,6	≈ 18,3	≈ 5,3		≈ 101° 50'		2	3,25	891,26
10,04	5,93	6,68		90°		8	7,00	209,66
20,86	4,74	10,23				4	3,17	482,45
20,90	4,75	10,25				4	3,15	482,45
4,85	5,77	4,98		90° 53'		2	7,21	302,79
5,21	9,02	20,12		96°		4	2,74	387,45
5,21	9,02	20,12		96°		4	2,74	387,45
10,37		20,87				9	5,40	701,86
8,20						1	3,36	1117,49
8,77	8,03	7,74				4	3,00	245,87
4,84	7,60	9,62		90° 09'		4	3,00	159,98
5,41	9,38	28,2				4	3,24	698,70
13,63	18,17	11,31		129° 10'		4	2,16	704,76
13,63	18,17	11,62		92° 00'		8	2,15	704,76
15,68	19,01	4,03		91° 48'		2	2,57	1942,25
7,51		16,07				4	3,41	465,53
5,35	9,27	28,24		96° 50'		4	3,03	635,01
4,40	9,42	2,84				4	3,38	59,99

№ п/п	Минерал и его символ	Формула минерала
164	Дизавалит <i>Дз (Ds)</i>	(Ca, Ce, Y, Na...)(Ti, Nb, Fe)O ₃
165	Дитажит <i>Дик (Dic)</i>	Al ₄ [Si ₄ O ₁₀](OH) ₈
166	Диопсид <i>Ди (Di)</i>	CaMg[Si ₂ O ₆]
167	Дискразит <i>Дск (Dsk)</i>	Ag ₃ Sb
168	Дистен (кварцит) <i>Дист (Dist)</i>	Al ₂ O ₃ [SiO ₄]
169	Доломит <i>Дол (Dol)</i>	CaMg[CO ₃] ₂
170	Дравит <i>Дра (Drv)</i>	NaMg ₃ Al ₆ [B ₃ Si ₆ O ₂₇](OH, F) ₄
171	Дюмортьерит <i>Дюмт (Dumt)</i>	(Al, Fe) ₇ [(SiO ₄) ₃ (BO ₃)O ₃]
172	Дэшиш <i>Деш (Dvn)</i>	(Na, K) ₈ Ca ₂ [AlSiO ₄] ₆ (SO ₄) ₂
173	Етшапит <i>Ет (Yet)</i>	(Mn, Zn) ₁₈ Sb ₂ [(SiO ₄) ₄ O ₁₃]
174	Жадеит <i>Жад (Jd)</i>	NaAl[Si ₂ O ₆]
175	Жедрит <i>Жед (Ged)</i>	(Mg, Fe ²⁺) ₆₋₅ (Al) ₁₋₂ [Si ₆ (Si, Al) ₂ O ₂₂](OH, F) ₂
176	Золото <i>Ап (Au)</i>	Au
177	Зуннит <i>Зун (Zun)</i>	Al ₁₂ [(AlO ₄)(Si ₅ O ₁₆)](OH, F) ₁₆ Cl
178	Иллит <i>Илл (Ill)</i>	K _{1-1.5} Al ₄ [Si _{7-6.5} Al _{1-1.5} O ₂₀](OH) ₄
179	Ильваит <i>Ила (Ilv)</i>	CaFe ²⁺ Fe ³⁺ [Si ₂ O ₆](OH)
180	Ильменит <i>Илм (Ilm)</i>	FeTiO ₃
181	Иордавит <i>Иор (Ior)</i>	Pb ₄ As ₂ S ₇
182	Иохавсенит <i>Иох (Joh)</i>	Ca(Mn, Fe ²⁺)[Si ₂ O ₆]
183	Иодерит <i>Иод (Yod)</i>	(Al, Mg, Fe) ₂ [SiO ₄](O, OH)
184	Казолит <i>Каз (Kas)</i>	Pb ₂ [UO ₂ [SiO ₄] ₂ ·2H ₂ O
185	Калаверит <i>Кла (Clv)</i>	(Au, Ag) ₂ Te ₂
186	Каллофилиит <i>Кфл (Kp)</i>	K[AlSiO ₄]
187	Кальдерит <i>Клд (Cld)</i>	Mn ₃ Fe ²⁺ [SiO ₄] ₃
188	Кальсилит <i>Ксл (Ksl)</i>	K[AlSiO ₄]
189	Кальцит <i>Кал (Ce)</i>	Ca[CO ₃]
190	Канкринит <i>Кан (Canc)</i>	(Na ₂ , Ca) ₄ [AlSiO ₄] ₆ (CO ₃)·(H ₂ O) ₆₋₃
191	Каолинит <i>Каол (Kaol)</i>	Al ₄ [Si ₄ O ₁₀](OH) ₈
192	Карбонат-апатит <i>Кант (Carp)</i>	Ca ₅ [PO ₃ , CO ₃ , OH] ₃ (F, OH)
193	Карнитин <i>Кар (Kar)</i>	(Na, K)Ca ₂₋₃ Mg ₆ Fe ²⁺ ₂ (Al, Fe, Ti) ₂ [Al ₃₋₄ Si ₁₃₋₁₂ O ₄₄](OH) ₄
194	Карнитит <i>Крит (Crit)</i>	K ₂ [(UO ₂) ₂ IV ₂ O ₈]·3H ₂ O
195	Карфолит <i>Крф (Ktrph)</i>	MnAl ₂ [Si ₂ O ₆](OH) ₄
196	Касситерит <i>Кас (Cas)</i>	SnO ₂
197	Каташлеит <i>Китн (Ktr)</i>	Na ₂ Zr[Si ₃ O ₉]·2H ₂ O
198	Каттерит <i>Ктр (Ctr)</i>	CoS ₂
199	Кварц-α <i>Кв-α (Q)</i>	α-SiO ₂
200	Кварц-β <i>Кв-β (Q-β)</i>	β-SiO ₂
201	Керситит <i>Кер (Ker)</i>	Ca ₂ (Na, K)(Mg, Fe ²⁺ , Fe ³⁺) ₄ Ti[Si ₆ Al ₂ O ₂₂](O, OH, F) ₂
202	Кишинит (дистен) <i>Ки (Ki)</i>	Al ₂ [O SiO ₄]

Параметры элементарной ячейки

Параметры элементарной ячейки						Число формульных единиц Z	Рентгеновская плотность ρ , г/см ³	Формульная масса (вес) M ₀ (Г·10 ⁴)
a	b	c	α	β	γ			
7,6						1	1,20	317,68
5,15	8,95	14,42		96,8°		2	2,60	516,33
9,73	8,91	5,25		105° 50'		4	3,28	216,56
2,99	5,23	4,82				1	9,81	445,36
7,10	7,74	5,57	90° 05,5'	101° 2'	105° 44,5'	4	3,73	162,05
6,015			47° 07'			2	5,73	184,41
6,19			102° 50'			2	2,83	184,41
6,01			47° 30'			1	2,84	184,41
15,942		7,224				3	3,05	972,78
15,942		7,224				3	3,05	972,78
11,79	20,21	4,70				4	3,99	672,97
12,83		5,36				1	2,55	1172,97
9,05	11,58	5,53	103° 49'	101° 45'	87° 12'	1	5,37	1782,31
9,50	8,61	5,24		107° 28'		4	3,28	202,13
18,6	18,1	5,32				4	3,24	872,50
18,6	18,1	5,32				4	3,24	872,50
4,0783						4	19,28	196,97
14,01						4	2,83	1170,70
14,01						4	2,83	1170,70
5,2	9,00	9,95		90°		1	2,74	768,14
8,84	5,87	13,10				4	3,99	408,80
5,534			54° 51'			2	4,78	151,75
8,89	31,65	8,40		62° 13'		7	6,69	1203,05
9,83	9,04	5,27		105°		4	3,64	247,64
8,10	5,78	7,28		106°		4	3,65	180,02
13,31	7,02	6,72		104° 42'		4	12,84	1174,64
7,19	4,41	5,08		90° 08'		2	8,40	407,62
27,06		8,61				54	2,60	158,17
11,82						8	4,45	552,77
5,18		8,69				2	2,60	158,17
6,37			46° 05'			2	2,72	100,09
6,42			101° 55'			4	2,72	100,09
12,63		5,11				1	2,31	982,57
12,63		5,11				1	2,31	982,57
12,78		5,19				1	2,22	982,57
12,78		5,19				1	2,22	982,57
5,13	8,90	21,5		~ 90°	90°	2	1,75	516,33
5,15	8,95	7,39	91,8°	104,8°		1	2,60	516,33
9,34		6,88				2	2,49	390,40
9,86	17,99	5,30		105° 35'		1	3,04	1660,69
9,86	17,99	5,30		105° 35'		1	3,04	1660,69
10,47	8,41	6,91		103° 40'		2	5,07	902,20
13,86	20,13	5,12				8	3,06	329,10
4,73		3,18				2	7,03	150,69
7,40		10,07				2	2,79	401,49
5,52						4	4,86	123,06
4,9130		5,4045				3	2,65	60,086
4,999		5,457				3	2,53	60,086
R 9,9	18,21	5,4		~ 106°		2	3,37	949,60
7,10	7,74	5,57	90° 05'	101° 02'	105° 44'	4	3,73	162,05

№	Минерал и его символ	Формула минерала
203	Кинорит <i>Kin</i> (Kln)	$Ca_2Zr_2[Al_2SiO_{12}]$
204	Кинорит <i>Kin</i> (Cln)	HgS
205	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca(Fe, Mg)[SiO_3]$
206	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Mg_9[SiO_3]_4(OH, F)_2$
207	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Mg_2(Mg, Al)_3[(AlSi_3)O_{10}] \cdot (OH)_8$
208	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Al_3[Si_2O_7][SiO_3]O(OH)$
209	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Mg[SiO_3]$
210	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2(Mg_{1.5}Al_{1.5})[Si_{2.5}Al_{5.5}O_{20}](OH)_4$
211	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$(Mn, Fe)_2[SiO_3]$
212	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$CaAsS$
213	Киноритовитовит <i>Kin</i> (Ktr)	$(Co, Fe, Ni)_9S_8$
214	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	CuS
215	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Pb_2Bi_2S_3$
216	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$(Fe^{2+}, Mn)(Nb, Ta)_2O_6$
217	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$(Mg, Fe^{2+})_2Al_2[AlSi_2O_8]$
218	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$(Mg, Fe, Al)_4(Al, B)_6[SiO_3]_4(O, OH)_{5-6}$
219	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Cu_2[PO_3](OH)_2$
220	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$\alpha-Al_2O_3$
221	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$\beta-Al_2O_3$
222	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$\gamma-Al_2O_3$
223	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Mg_2(Mg, Fe, Al)_2[Al_{1.5-2}Si_{2.5-2}O_{10}](OH)_8$
224	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$U[Si_2H_2O_4]^*$
225	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	SiO_2
226	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$\alpha-Na_2AlF_6$
227	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	SiO_2
228	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	SiO_2
229	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$F_2^{2+}Fe_2^{2+}[(Fe_{2.5}^{2+}Si_{2.5})O_{10}](OH)_8$
230	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Mg_{1.5}Al_{1.5}[Si_{2.5}Al_{5.5}O_{20}](OH)_4$
231	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	YPO_4
232	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7 \cdot OH_2$
233	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
234	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Li_2Ca[AlSi_3O_{10}](OH)_2$
235	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Mg_2Fe_2[Si_2O_7](OH)_2$
236	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7 \cdot OH_2$
237	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
238	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
239	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
240	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
241	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
242	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
243	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
244	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
245	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
246	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
247	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
248	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
249	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
250	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
251	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
252	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
253	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
254	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
255	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
256	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
257	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
258	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
259	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
260	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
261	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
262	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
263	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
264	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
265	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
266	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
267	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
268	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
269	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$
270	Киноритовит <i>Kin</i> (Ktr)	$Ca_2Si_2O_7$

Параметры элементарной ячейки						Число формульных единиц Z	Рентгеновская плотность γ_m	Формульная масса (вос) M_m (г. 10 ⁻³)
a	b	c	α	β	γ			
12,46		9,497				8	3,96	576,73
4,146		11,13				3	8,20	232,65
6,42	4,86	10,27				4	3,20	172,25
13,68	4,75	10,27		100° 50'		2	3,16	623,16
13,68	4,75	10,27		100° 50'		2	3,16	623,16
5,2	9,2	28,6		96° 50'		4	2,72	557,18
5,3	9,3	28,6		96° 50'		4	2,64	557,18
8,87	5,59	10,15		115° 27'		2	3,32	454,370
8,88	5,61	10,17		115° 27'		2	3,30	454,370
9,62	8,83	5,19		108° 21'		4	3,19	100,40
5,21	9,02	19,24x		95°		2	3,08	836,41
		Xsin 95°						
4,82—4,85	10,49—10,60	6,09—6,22				4	4,38	202,87
						4	4,21	202,87
5,61						4	6,24	165,92
9,969		16,26				4	5,21	776,98
3,76		4,05				8	4,78	95,60
19,04	23,81	4,05				8	7,18	992,66
5,74	14,27	5,09				4	6,77	425,24
≈17,1	≈9,7	≈9,4				4	2,63	616,52
13,68	15,95	6,68				4	3,26	715,35
13,68	15,95	6,68				4	3,26	715,35
10,88	14,08	7,12				8	4,10	336,62
4,760		12,98				2	1,33	101,96
5,130			55° 17'			2	3,98	101,96
6,99			85° 43'			8	4,00	101,96
5,34	9,27	14,36		97° 22'		2	2,76	586,55
6,94		6,31				4	6,95	318,09
6,94		6,31				4	6,95	318,09
7,23	12,52	7,23		120°		16	2,32	60,086
5,47	5,62	7,82		90° 11'		2	2,90	209,94
4,97		6,93				4	2,33	60,086
7,13						8	2,20	60,086
5,48	9,52	21,25		90°		3	3,59	799,01
5,21	9,00	9,81		100° 05'		1	3,07	836,41
5,25	9,04	9,97		100° 05'		1	2,98	836,41
6,89		6,04				4	4,26	183,88
16,56	7,34	7,04		≈90°		2	2,62	715,001
6,46	11,12	6,23				4	4,03	271,43
5,14	8,95	28,36		~90°		4	2,14	420,12
9,51	18,19	5,33		101° 55'		2	3,28	891,26
4,25						2	6,19	143,08
9,7	17,8	5,25		106°		2	2,98	780,89
6,12			46° 38'			1	3,23	215,04
8,16	12,86	14,20	93° 34'	116° 06'	89° 47'	8	2,70	271,55
7,16	7,26	7,24		120° 40'		2	3,26	318,01
9,08						1	2,39	1075,74
9,08						1	2,39	1075,74
19,09	7,06	5,36				2	3,73	810,92
19,09	7,06	5,36				2	3,73	810,92

№ п/п	Минерал и его символ	Формула минерала
243	Ларунит <i>Лрн</i> (<i>Lrn</i> , <i>Cs</i>)	$\beta\text{-Ca}_2[\text{SiO}_4]$
244	Левин <i>Лен</i> (<i>Lvn</i>)	$\text{Ca}[\text{Al}_2\text{Si}_4\text{O}_{12}] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
245	Лейкофан <i>Лфн</i> (<i>Lph</i>)	$(\text{Ca}, \text{Na}, \text{H})_2\text{Be}[\text{Si}_2\text{O}_6(\text{OH}, \text{F})]$
246	Лейцит- α <i>Лц</i> (<i>Lc</i>)	$\alpha\text{-K}[\text{AlSi}_2\text{O}_6]$
247	Лейцит- β ($> 605^\circ \text{C}$) <i>Лц-β</i> (<i>Lc-β</i>)	$\beta\text{-K}[\text{AlSi}_2\text{O}_6]$
248	Леллингит <i>Лелл</i> (<i>Lol</i>)	FeAs_2
249	Лепидокрокит <i>Ллкр</i> (<i>Ldk</i>)	$\gamma\text{-FeOOH}$
250	Лепидолит <i>Ллд</i> (<i>Lep</i>)	$\text{K}_2(\text{Li}, \text{Al})_{5-8}[\text{Si}_{6-7}\text{Al}_{2-1}\text{O}_{20}](\text{OH}, \text{F})_4$
251	Лизардит (серпентин) <i>Лзд</i> (<i>Lzd</i>)	$\text{Mg}_3[\text{Si}_2\text{O}_5](\text{OH})_4$
252	Ловачит <i>Лом</i> (<i>Lvt</i>)	$(\text{Na}, \text{Ca}, \text{Mn})_2\text{Zr}[(\text{F}, \text{OH}, \text{O}_2) \text{Si}_2\text{O}_7]$
253	Ловозерит <i>Лоз</i> (<i>Lvr</i>)	$\text{Na}_2\text{Zr}[\text{Si}_6\text{O}_{12}(\text{OH})_6] \cdot 1/2\text{NaOH}$
254	Ломбардит <i>Ллмд</i> (<i>Lmd</i>)	$(\text{Fe}, \text{Ca})_2(\text{Fe}, \text{Mg}, \text{Mn})(\text{Al}, \text{Fe}^{3+})_2[\text{SiO}_4]_3(\text{OH})$
255	Ломонтит <i>Лом</i> (<i>Lom</i>)	$\text{Ca}[\text{Al}, \text{Si}_2\text{O}_6]_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$
256	Лонгбанит <i>Ллгб</i> (<i>Lngt</i>)	$\text{Mn}^{2+}\text{Mn}^{4+}[\text{SiO}_4 \text{O}_9]$
257	Лопарит <i>Лоп</i> (<i>Lop</i>)	$(\text{Ce}, \text{Na}, \text{Ca})(\text{Nb}, \text{Ti})\text{O}_7$
258	Лосовит <i>Лос</i> (<i>Lvs</i>)	$\text{CaAl}_2[\text{Si}_2\text{O}_7 (\text{OH})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$
259	Лусит <i>Лус</i> (<i>Lush</i>)	NaNbO_3
260	Людвигит <i>Люд</i> (<i>Lud</i>)	$(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+})_2\text{Fe}^{3+}[\text{BO}_2]_2\text{O}_2$
261	Люсацит <i>Лск</i> (<i>Lsk</i>)	$(\text{Fe}^{2+}, \text{Mg}, \text{Co})_2(\text{Al}, \text{Fe}^{3+})_9\text{O}_8[\text{SiO}_4]_4(\text{O}, \text{OH})_2$
262	Магнетит <i>Мгм</i> (<i>Mgm</i>)	$\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$
263	Магнезиоферрит <i>Мфм</i> (<i>Mft</i>)	$\text{MgFe}_2^+\text{O}_4$
264	Магнезиохромит <i>Мхрм</i> (<i>Mcm</i>)	MgCr_2O_4
265	Магнезит <i>Мгс</i> (<i>Mgs</i>)	$\text{Mg}[\text{CO}_3]$
266	Магнетит <i>Мт</i> (<i>Mt</i>)	$\text{Fe}^{2+}\text{Fe}_3^+\text{O}_4$
267	Малахит <i>Млх</i> (<i>Ml</i>)	$\text{Cu}_2[\text{CO}_3](\text{OH})_2$
268	Маявдонит <i>Мнд</i> (<i>Mnd</i>)	$\text{LiAl}_4[(\text{AlBSi}_2)\text{O}_{10}](\text{OH})_8$
269	Манганит <i>Мн</i> (<i>Mnt</i>)	$\gamma\text{-MnOOH}$
270	Манганопит <i>Мнз</i> (<i>Mnz</i>)	MnO
271	Маргарит <i>Марг</i> (<i>Marg</i>)	$\text{Ca}_2\text{Al}_4[\text{Si}_4\text{Al}_4\text{O}_{20}](\text{OH})_4$
272	Маршалит <i>Ма</i> (<i>Ma</i>)	$\text{Na}_8[\text{AlSi}_3\text{O}_8]_6(\text{Cl}_2, \text{SO}_4, \text{CO}_3)$
273	Марказит <i>Мрк</i> (<i>Mrk</i>)	FeS_2
274	Маухерит <i>Мхм</i> (<i>Mcht</i>)	Ni_4As_3
275	Медь <i>Сu</i> (<i>Cu</i>)	Cu
276	Мезолит <i>Мез</i> (<i>Mes</i>)	$\text{Na}_4\text{Ca}_2[\text{Al}_3\text{Si}_3\text{O}_{10}]_3 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$
277	Мезомикроклин <i>Мми</i> (<i>Mmi</i>)	$\text{K}[(\text{Al}, \text{Si})_2\text{Si}_4\text{O}_8]$

Параметры элементарной ячейки						Число формул на единицу $\times 10^3$	Рефлексионал плотность γ_m	Формульная масса (вес) M_f (г. 10 ⁰⁰)
a	b	c	α	β	γ			
5,48	6,76	9,28				4	3,34	172,24
13,28		23,0			94° 33'	9	2,15	506,48
7,39	7,39	9,98				4	2,70	221,91
7,39	7,39	9,98				4	2,70	221,91
7,39		9,98				4	2,70	221,91
13,04		13,85				4	2,70	221,91
13,43						16	2,46	218,26
5,25	5,92	2,85				16	2,39	218,26
3,87	12,53	3,06				2	7,71	205,69
5,3	9,2	10,2		100°		4	3,98	88,85
5,3	9,2	10,2		100°		1	2,67	786,53
9,2	5,3	20,0		98°		2	2,70	786,53
9,2	5,3	20,0		98°		2	2,70	786,53
5,3		30,0				3	5,37	786,53
5,3		30,0				3	5,37	786,53
≈ 5,3	≈ 9,2	≈ 7,3		≈ 93°		2	2,59	277,14
10,95	10,01	7,19		или 90°		2	2,59	277,14
10,48	10,20	7,33		110° 18'		4	3,59	400,07
18,24	5,61	16,13		92° 30'		2	2,63	619,76
14,90	13,17	7,55		115° 30'		6	5,12	765,54
11,56		11,11		111° 30'		4	1,40	291,30
7,6						6	4,69	604,65
8,90—8,75	5,84—5,75	13,33—				8	5,63	186,13
		13,09				4	3,01	314,24
5,51	15,52	5,58				4	3,17	314,24
9,14	3,05	12,45				8	4,87	163,89
7,88	16,65	5,66				4	4,34	226,82
7,88	16,65	5,66				2	4,31	962,84
8,31						2	4,31	962,84
8,383						12	3,61	103,85
8,334						8	4,51	200,006
5,675						8	4,41	192,30
5,85			48° 10'			2	3,01	84,32
8,396			103° 20'			4	3,10	84,32
9,48	12,03	3,21				8	5,20	231,54
5,23	8,92	14,11		98,5°		4	4,06	221,11
8,88	5,25	5,71		97° 45'		2	2,55	504,89
4,44				90°		8	4,39	87,95
5,13	8,92	19,50		90°		4	5,33	70,94
≈ 12,11—	≈ 7,56—			95°		2	2,97	796,39
12,23;	7,68;					1	2,54	1695,02
≈ 12,11—	≈ 7,56—					1	2,45	1695,02
12,23	7,68					1	2,54	1695,02
3,39	4,45	5,42				2	4,86	119,97
3,43		21,87				2	7,97	534,53
3,6153						4	8,93	63,54
56,7	6,55	18,48		90°		8	2,25	1164,93
8,58	12,96	7,21	89° 42'	115° 58'	90° 52'	4	2,56	278,34

№	Минерал и его сплав	Формула минерала
278	Мейсонит <i>Me (Me)</i>	$\text{Ca}_8[\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_8]_8(\text{Cl}_2, \text{SO}_4, \text{CO}_3)_2$
279	Мелавит (титаносодержащий андрадит) <i>Млн (Mln)</i>	$\text{Ca}_2\text{NaTiFe}^{3+}[\text{SiO}_4]_2$
280	Мелилит <i>Мел (Mel)</i>	$(\text{Ca}, \text{Na})_2(\text{Al}, \text{Mg})[(\text{Si}, \text{Al})_2\text{O}_7]$
281	Мелилит <i>Мел (Mel)</i>	$(\text{Ca}, \text{Na}, \text{K})_2[(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+}, \text{Al}, \text{Si})_3\text{O}_7]$
282	Мелипофан <i>Млф (Miph)</i>	$(\text{Ca}, \text{Na})_2(\text{Be}, \text{Al})[\text{Si}_2\text{O}_6\text{F}]$
283	Мелонит <i>Млм (Mli)</i>	NiTe_2
284	Метаторбернит <i>Мтб (Mtb)</i>	$\text{Cu}[\text{UO}_2 \text{PO}_4]_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$
285	Микроклин <i>Ми (Mi)</i>	$\text{K}[\text{AlSi}_3\text{O}_8]$
286	Микролит <i>Мрл (Mrl)</i>	$(\text{Ca}, \text{Na})_2(\text{Ta}, \text{Nb}, \text{Ti})_2\text{O}_6(\text{OH}, \text{F}, \text{O})$
287	Миларит <i>Млд (Mld)</i>	$\text{KCa}_2\text{AlBe}_2[\text{Si}_{12}\text{O}_{30}] \cdot \frac{1}{2}\text{H}_2\text{O}$
288	Миллерит <i>Мил (Mil)</i>	$\beta\text{-NiS}$
289	Молибденит <i>Мо (Mo)</i>	MoS_2
290	Монацит <i>Мон (Mon)</i>	$(\text{Ce}, \text{La}, \text{Th})[\text{PO}_4]$
291	Монтмеллиит <i>Ммт (Mont)</i>	$\text{CaMg}[\text{SiO}_4]$
292	Монтмориллонит <i>Мм (Mmnt)</i>	$\text{Na}_{0.33}(\text{Al}_{1.67}\text{Mg}_{0.33})[\text{Si}_4\text{O}_{10}](\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_4$
293	Муллит <i>Мул (Mul)</i>	$\text{Al}_4\text{Al}_4[\text{O}_3(\text{Si}_3\text{AlO}_{18}) (\text{O}_{0.5}, \text{OH}, \text{F})]$
294	Мусковит <i>Му (Ms)</i>	$\text{K}_2\text{Al}_4[\text{Si}_6\text{Al}_2\text{O}_{20}](\text{OH}, \text{F})_4$
295	Мышьяк <i>As (As)</i>	As
296	Нагнайт <i>Нгт (Ngt)</i>	$\text{Pb}_5\text{Au}(\text{TeSb})_4\text{S}_{5-8}$
297	Накрит <i>Нкт (Nkt)</i>	$\text{Al}_3[\text{Si}_4\text{O}_{10}](\text{OH})_8$
298	Натролит <i>Нат (Nat)</i>	$\text{Na}_2[\text{Al}_2\text{Si}_5\text{O}_{10}] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
299	Натролярозит <i>Няр (Njar)</i>	$\text{NaFe}_3^{2+}[\text{SO}_4]_2(\text{OH})_6$
300	Науяказит <i>Нук (Nuk)</i>	$\text{Na}_4\text{Fe}^{2+}\text{Al}_4\text{H}_4\text{Si}_8\text{O}_{27}$ или $\text{Na}_4\text{Fe}^{2+}\text{Al}_4[\text{Si}_8\text{O}_{23}] \times (\text{O}, \text{OH})_4$
301	Нептунит <i>Нел (Nep)</i>	$\text{Na}_2\text{FeTi}[\text{Si}_4\text{O}_{12}]$
302	Нефелин <i>Не (Nef)</i>	$\text{KNa}_3[\text{AlSiO}_4]_4$
303	Никелит <i>Ник (Nik)</i>	NiAs
304	Нозеван <i>Ноз (Nos)</i>	$\text{Na}_6[\text{AlSiO}_4]_6(\text{SO}_4)$
305	Нонтропит <i>Нон (Non)</i>	$\text{Na}_{0.33}\text{Fe}_2^{3+}[\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67}\text{O}_{10}(\text{OH})_2](\text{H}_2\text{O})_3$
306	Норбернит <i>Норб (Norb)</i>	$\text{Mg}_3[\text{SiO}_4] \cdot (\text{OH}, \text{F})_2$
307	Оверманит <i>Ок (Ok)</i>	$\text{Ca}_2\text{Mg}[\text{Si}_2\text{O}_7]$
308	Оливин <i>Ол (Ol)</i>	$(\text{Mg}, \text{Fe})_2[\text{SiO}_4]$
309	Олигоклаз <i>Олг (Oli)</i>	$(\frac{2}{3} - \frac{7}{8})\text{Na}[\text{AlSi}_3\text{O}_8] + (\frac{1}{3} - \frac{1}{8})\text{Ca}[\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_7]$
310	Омфацит <i>Омф (Omph)</i>	$(\text{Ca}, \text{Na})(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+}, \text{Al})[\text{Si}_2\text{O}_6]$
311	Ортит <i>Орт (Ort)</i>	$(\text{Ca}, \text{Mn}, \text{Ce}, \text{La}, \text{Y}, \text{Th})_2(\text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+}, \text{Ti})(\text{Al}, \text{Fe}^{3+})_2 \times (\text{O} \text{OH} \text{Si}_2\text{O}_7) [\text{SiO}_4]$
312	Ортоклаз (адуляр) <i>Ор (Or)</i>	$\text{K}[\text{AlSi}_3\text{O}_8]$
313	Ортоферросиликат <i>Офе (Ofs)</i>	$\text{Fe}^{2+}[\text{SiO}_3]$
314	Осуэнилит <i>Осу.л (Osum)</i>	$(\text{K}, \text{Na}, \text{Ca})(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+})_2(\text{Al}, \text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+})_3 [(\text{Si}, \text{Al})_{12} \times \text{O}_{30}] \cdot \text{H}_2\text{O}$

Продолжение прилож. 5

Параметры элементарной ячейки						Число формульных единиц Z	Рентгеновская плотность ρ_m	Формульная масса (вес) M_m ($\cdot 10^{-3}$)
a	b	c	α	β	γ			
$\approx 12,11$	$\approx 7,56$					1	2,85	1900,77
12,23;	7,68;					1	2,75	1900,77
$\approx 12,11$	$\approx 7,56$					1	2,85	1900,77
12,23	7,68					1	2,75	1900,77
12,05						8	3,67	483,15
12,16						8	3,57	483,15
7,74		5,02				2	2,82	253,78
$\approx 7,8$		$\approx 5,0$				2	3,22	294,76
10,60		9,90				8	3,01	252,24
3,84		5,26				1	7,76	313,91
6,98		17,41				1	1,84	937,67
8,57	12,98	7,22	$90^\circ 41'$	$115^\circ 59'$	$87^\circ 30'$	4	2,56	278,34
10,41						8	4,60	390,91
10,45		13,88				2	2,51	990,31
9,62		3,16				9	5,37	90,77
3,16		12,32				2	4,99	160,07
$\approx 6,78$	$\approx 7,0$	$\approx 6,45$		$\sim 104^\circ$		4	5,93	265,33
4,815	11,08	6,37		$\sim 90^\circ$		4	3,06	156,48
5,17	8,94	15,2				2	2,08	439,09
7,50	7,65	5,75				1	3,25	645,76
7,50	7,65	5,75				1	3,25	645,76
5,19	9,04	20,08		$95^\circ 30'$		2	3,03	854,58
5,19	9,04	20,08		$95^\circ 30'$		2	3,03	854,58
4,15			$54^\circ 07'$			2	5,71	74,92
5,61			$85^\circ 38'$			8	5,68	74,92
12,5		30,25				10	8,57	2438,73
12,5		30,25				10	8,57	2438,73
5,15	8,96	43,0		90°		6	2,59	516,33
5,15	8,91	15,70		$113^\circ 42'$		2	2,60	516,33
18,35	18,70	6,61				8	2,23	380,23
7,19		16,33				3	3,30	484,71
15,09	8,00	19,5		90°		4	2,58	916,44
16,57	12,66	10,06		$115^\circ 38'$		8	3,17	454,07
10,01		8,41				2	2,66	584,34
3,58		5,11				2	7,82	133,63
8,98						1	1,73	994,35
9,15						1	1,64	994,35
5,24	9,08	15,8		$\approx 90^\circ$		2	2,20	497,34
8,72	4,70	10,20				4	3,19	201,03
8,72	4,70	10,20				4	3,19	201,03
7,84		5,01				2	2,51	272,56
6,01	4,78	10,30				4	3,87	172,24
8,169	12,836	7,134	$93^\circ 49'$	$116^\circ 27'$	$88^\circ 59'$	4	2,64	265,89
9,66	8,82	5,228		$\sim 106^\circ 33'$		4	3,49	224,45
8,98	5,75	10,23		$115^\circ 00'$		2	4,58	660,96
8,61	13,07	7,26		$116^\circ 03'$		4	2,52	278,34
18,433	9,060	5,258				16	3,99	131,93
10,17		14,34				2	2,80	1081,31

№ п/п	Минерал и его символ	Формула минерала
315	Отавит <i>Отав</i> (<i>Otav</i>)	$\text{Cd}[\text{CO}_3]$
316	Отенит <i>Отен</i> (<i>Auf</i>)	$\text{Ca}[\text{UO}_2 \text{PO}_4]_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$
317	Павдаит <i>Пав</i> (<i>Pan</i>)	$(\text{Ba}, \dots)(\text{Nb}, \text{Ti}, \text{Ta})_2\text{O}_8(\text{H}_2\text{O})$
318	Параволластит <i>Павол</i> (<i>Pwoll</i>)	$\alpha\text{-Ca}_3[\text{Si}_2\text{O}_6]$
319	Парагонит <i>Пар</i> (<i>Pg</i>)	$\text{Na}_2\text{Al}_4[\text{Si}_6\text{Al}_2\text{O}_{20}](\text{OH})_4$
320	Парацельзит <i>Пцз</i> (<i>Pcl</i>)	$\text{Ba}[\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_8]$
321	Паргасит <i>Парз</i> (<i>Par</i>)	$\text{NaCa}_2\text{Mg}_4(\text{Al}, \text{Fe}^{3+})[\text{Si}_6\text{Al}_2\text{O}_{22}](\text{OH}, \text{F})_2$
322	Пектолит <i>Пект</i> (<i>Pekt</i>)	$\text{Ca}_2\text{Na}[\text{Si}_3\text{O}_8\text{OH}]$
323	Пешавит <i>Пит</i> (<i>Pnt</i>)	$\text{Mn}_3(\text{Mn}, \text{Al}, \text{Fe}^{3+})_3[(\text{Al}, \text{Si})\text{Si}_3\text{O}_{10}](\text{OH})_8$
324	Пешинит <i>Пен</i> (<i>Pen</i>)	$(\text{Mg}, \text{Al})_3\text{Mg}_3[(\text{Al}_{0.5-0.9}\text{Si}_{3.5-3.1})\text{O}_{10}](\text{OH})_8$
325	Пенталандит <i>Пн</i> (<i>Pn</i>)	$(\text{Fe}_4\text{Ni}_4)(\text{Fe}, \text{Ni}, \text{Co})\text{S}_8$
326	Периклаз <i>Пер</i> (<i>Pe</i>)	MgO
327	Перовскит <i>Перз</i> (<i>Pf</i>)	$(\text{Ca}, \text{Na}, \text{Fe}^{2+}, \text{Ce})(\text{Ti}, \text{Nb})\text{O}_3$
328	Петалит <i>Пет</i> (<i>Pet</i>)	$\text{Li}[\text{AlSi}_4\text{O}_{10}]$
329	Пижовит <i>Пиж</i> (<i>Pig</i>)	$(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+}, \text{Ca})(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+})[\text{Si}_2\text{O}_6]$
330	Пираргирит <i>Перз</i> (<i>Prg</i>)	Ag_3SbS_3
331	Пирит <i>Пи</i> (<i>Pr</i>)	FeS_2
332	Пироксмангит <i>Пкст</i> (<i>Pxt</i>)	$(\text{Mn}, \text{Fe})[\text{SiO}_3]$
333	Пирроликзит <i>Прл</i> (<i>Prl</i>)	$\beta\text{-MnO}_2$
334	Пироморфит <i>Прм</i> (<i>Prm</i>)	$\text{Pb}_5[\text{PO}_4]_3\text{Cl}$
335	Пирон <i>Пион</i> (<i>Pyp</i>)	$\text{Mg}_3\text{Al}_2[\text{SiO}_4]_3$
336	Пиромалин <i>Пем</i> (<i>Pst</i>)	$(\text{Mn}, \text{Fe})_8(\text{OH}, \text{Cl})_{10} \text{Si}_6\text{O}_{15}$
337	Пирофанит <i>Прф</i> (<i>Ppfrh</i>)	MnTiO_3
338	Пирофаллит <i>Пф</i> (<i>Ppfrh</i>)	$\text{Al}_4(\text{Si}_8\text{O}_{20})(\text{OH})_4$
339	Пирохлор <i>Прз</i> (<i>Prc</i>)	$(\text{Na}, \text{Ca})_2(\text{Nb}, \text{Ta}, \text{Ti})_2\text{O}_6(\text{O}, \text{OH}, \text{F})$
340	Пирохроит <i>Прр</i> (<i>Pchr</i>)	$\text{Mn}(\text{OH})_2$
341	Пирротит <i>Прр</i> (<i>Prr</i>)	$\begin{cases} \text{Fe}_7\text{S}_8 \\ \text{FeS} \end{cases}$
342	Пирсевит <i>Пем</i> (<i>Pst</i>)	$\text{Ag}_{10}\text{As}_2\text{S}_{11}$
343	Платина <i>Пт</i> (<i>Pt</i>)	Pt
344	Пломбьерозит <i>Пяр</i> (<i>Pjar</i>)	$\text{Pb}^{2+} \text{Fe}^{2+} [(\text{SO}_4)_2 (\text{OH})_6]_2$
345	Повеллит <i>Повл</i> (<i>Pvrl</i>)	$\text{Ca}[\text{MoO}_4]$
346	Полтацит <i>Плт</i> (<i>Plt</i>)	MnO_2
347	Полибазит <i>Пбз</i> (<i>Plb</i>)	$\text{Ag}_{10}\text{Sb}_2\text{S}_{11}$
348	Поллуцит <i>Плу</i> (<i>Plc</i>)	$(\text{Cs}, \text{Na})[\text{AlSi}_2\text{O}_6] \cdot (\text{H}_2\text{O})$
349	Пренит <i>Прен</i> (<i>Pren</i>)	$\text{Ca}_2\text{Al}_2[(\text{Si}_3\text{O}_{10}) (\text{OH})_2]$
350	Прустит <i>Прст</i> (<i>Prst</i>)	Ag_3AsS_3
351	Псевдобрукит <i>Пбрк</i> (<i>Pbrk</i>)	$\text{Fe}_2^{3+} \text{TiO}_5$
352	Пумпеллит <i>Пум</i> (<i>Pum</i>)	$\text{Ca}_4(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+}, \text{Mn})(\text{Al}, \text{Fe}^{3+}, \text{Ti})_5[\text{O}(\text{OH})_3 (\text{Si}_2\text{O}_7)_2] \times (\text{SiO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
353	Пьомонит <i>Пм</i> (<i>Pmt</i>)	$\text{Ca}_2(\text{Mn}^{2+}, \text{Fe}^{3+}, \text{Al})_2\text{Al}[\text{Si}_2\text{O}_7] [\text{SiO}_4] \text{O}(\text{OH})$
354	Пэддингит <i>Пэдт</i> (<i>Pdt</i>)	$(\text{Fe}^{2+}, \text{Mg})_2\text{Fe}^{3+}[\text{BO}_3]_2\text{O}_2$

Параметры элементарной ячейки						Число формульных единиц Z_0	Рентгеновская плотность $\gamma_{\text{мг}}$	Формульная масса (вес) $M_{\text{м}}$ ($\cdot 10^{-4}$)
a	b	c	α	β	γ			
6,31			102° 30'			4	4,97	172,41
6,12			47° 24'			2	5,04	172,41
7,00		20,67				2	3,12	950,25
10,56						8	5,25	465,86
15,36	7,29	7,08		95° 24'		4	2,93	348,50
5,13	8,89	18,92		95°		2	2,94	764,42
8,58	9,58	9,08		90°		4	3,34	375,47
≈ 9,9	≈ 18,0	≈ 5,3		≈ 105° 30'		2	3,11	852,30
7,99	7,04	7,02	90° 03'	95° 17'	102° 28'	2	2,88	332,42
5,44	9,4	$c_0 \cdot \sin \beta =$ = 28,6		97° 20'—		4	3,25	710,44
5,2	9,2	28,6		97° 25'		4	2,73	557,51
5,3	9,3	28,6		96° 50'		4	2,65	557,51
10,04				96° 50'		4	5,07	772,57
4,212						4	3,58	40,31
7,59						8	5,56	183,16
7,71						8	5,31	183,16
11,76	5,14	7,62		112° 24'		2	2,39	306,26
9,73	8,95	5,26		108° 33'		4	3,55	232,33
7,01			104° 06'			2	5,86	541,55
11,04		8,72				6	5,86	541,55
5,417						4	5,01	119,97
7,56	17,45	6,67	84°	94,3°	113,7°	14	3,82	131,48
4,39		2,87				2	5,22	86,94
9,97		7,32				2	7,15	1356,32
11,459						8	3,58	403,16
13,44		7,20				2	3,28	1113,96
13,44		7,20				2	3,28	1113,96
5,13		14,33				2	1,53	150,84
5,16	8,90	18,64		99° 55'		2	2,84	720,64
10,34						8	4,70	390,91
10,34						8	4,70	390,91
10,41						8	4,60	390,91
10,41						8	4,60	390,91
3,35		4,69				1	3,24	88,95
6,865	11,9	22,72		90° 05'		64		647,44
3,44		5,69				2	5,01	87,91
26,12	15,09	23,87		90°		16	6,29	2228,47
3,9237						4	21,45	195,09
7,21		33,67				3	3,72	1130,62
5,24		11,46				4	4,22	200,02
4,58		2,95				2	4,67	86,94
26,12	15,09	23,87		90°		16	6,56	2322,12
13,74						16	2,82	275,12
4,61	5,47	18,48				2	2,94	412,40
6,85			103° 27'			2	5,67	494,72
10,77		8,67				6	5,66	494,72
9,81	9,95	3,74				4	4,36	239,59
8,81	5,94	19,14		97,6°		2	3,50	1046,80
8,05	5,70	9,41		115° 42'		2	4,20	492,25
9,37	3,05	12,36				4	4,26	226,82

№ п/п	Минерал и его символ	Формула минерала
355	Рамзаит <i>Рма</i> (<i>Rms</i>)	$\text{Na}_2\text{Ti}_2[\text{Si}_2\text{O}_8 \text{O}_3]$
356	Раммельсбергит <i>Р.мб</i> (<i>Rmb</i>)	NiAs_2
357	Реальгар <i>Ргр</i> (<i>Rl</i>)	As_4S_4
358	Рибекит <i>Риб</i> (<i>Rb</i>)	$\text{Na}_2\text{Fe}_3^{2+}\text{Fe}_2^{3+}[\text{Si}_4\text{O}_{11} (\text{OH}, \text{F})]_2$
359	Рипкит <i>Ркт</i> (<i>Rkt</i>)	$(\text{Na}, \text{Ca}, \text{Ce})_3(\text{Te}, \text{Ce})[(\text{F}, \text{OH}, \text{O})_2 \text{Si}_2\text{O}_7]$
360	Рипидолит <i>Р.ид</i> (<i>Rpld</i>)	$\text{Mg}_3(\text{Mg}, \text{Fe}, \text{Al})_3[(\text{Al}_{1.2-1.5}\text{Si}_{2.8-2.5}\text{O}_{10})(\text{OH})_8]$
361	Рихтерит <i>Рух</i> (<i>Rich</i>)	$\text{Na}_2\text{Ca}(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+}, \text{Mn}, \text{Fe}^{3+}, \text{Al})_5[\text{Si}_4\text{O}_{11} (\text{OH}, \text{F})]_2$
362	Роговая обманка базальтическая <i>Ро</i> (<i>Ro</i>)	$\text{Ca}_2(\text{Na}, \text{K})_{0.5-1.0}(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+})_{3-4}(\text{Fe}^{3+}, \text{Al})_{2-1} \times$ $\times [\text{Si}_6\text{Al}_2\text{O}_{22}](\text{O}, \text{OH}, \text{F})_2$
363	Роговая обманка обыкновенная <i>Ро</i> (<i>Ro</i>)	$(\text{Ca}, \text{Na}, \text{K})_{2-3}(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+}, \text{Al})_5[\text{Si}_6(\text{Si}, \text{Al})_2 \times$ $\times \text{O}_{22}](\text{OH}, \text{F})_2$
364	Родонит <i>Род</i> (<i>Rod</i>)	$(\text{Mn}, \text{Fe}, \text{Ca})[\text{SiO}_3]$
365	Родохрозит <i>Рох</i> (<i>Rdch</i>)	$\text{Mn}[\text{CO}_3]$
366	Розенбушит <i>Рзб</i> (<i>Rsb</i>)	$\text{NaCa}_2(\text{Zr}, \text{Ti})[\text{Si}_2\text{O}_7](\text{F}, \text{O})_2$
367	Рутил <i>Ру</i> (<i>Ru</i>)	TiO_2
368	Савборнит <i>Сиб</i> (<i>Snb</i>)	$\text{Ba}_2[\text{Si}_4\text{O}_{10}]$
369	Савдлит <i>Сав</i> (<i>San</i>)	$\text{K}[\text{AlSi}_3\text{O}_8]$
370	Самаритинит <i>Сам</i> (<i>Smt</i>)	$(\text{Zn}, \text{Fe})[\text{WO}_4]$
371	Сапфирит <i>Саф</i> (<i>Sap</i>)	$(\text{Mg}, \text{Fe})_2(\text{Al}_3\text{O}_8)(\text{SiO}_4)$
372	Саркинит <i>Сар</i> (<i>Sar</i>)	$\text{Mn}_2[\text{AsO}_4 \text{OH}]$
373	Сарколит <i>Ср.</i> (<i>Srl</i>)	$(\text{Ca}, \text{Na})_8[\text{Al}(\text{Al}, \text{Si})\text{Si}_2\text{O}_8]_6\text{O}_2$
374	Саффлорит <i>Сфм</i> (<i>Sfl</i>)	CoAs_2
375	Сванбергит <i>Ссз</i> (<i>Svg</i>)	$\text{SrAl}_3[\text{SO}_4 \text{PO}_4](\text{OH})_6$
376	Селадонит <i>Сел</i> (<i>Sel</i>)	$(\text{K}, \text{Ca}, \text{Na}) <_1(\text{Al}, \text{Fe}^{3+}, \text{Fe}^{2+}, \text{Mg}_2) \times$ $\times [\text{Al}_{0.11}\text{Si}_{3.89}\text{O}_{10}](\text{OH})_2$
377	Сера-α <i>S</i>	$\alpha\text{-S}$
378	Серебро <i>Ag</i>	Ag
379	Сидерит <i>Сид</i> (<i>Sid</i>)	$\text{Fe}[\text{CO}_3]$
380	Сидерофиллит <i>Сдф</i> (<i>Fe Bl</i>)	$\text{KFe}_{2.5}\text{Al}_{0.5}[\text{Al}_{1.5}\text{Si}_{2.5}\text{O}_{10}](\text{OH})_2$
381	Силлманит <i>Сил</i> (<i>Sill</i>)	$\text{Al}_2[\text{O} \text{SiO}_4]$
382	Сильванит <i>Сил</i> (<i>Sylv</i>)	AuAgTe_4
383	Сильвин <i>Сил</i> (<i>Slv</i>)	KCl
384	Спрелант <i>Спр</i> (<i>Srs</i>)	$\text{NaB}[\text{Si}_2\text{O}_6] \cdot \text{H}_2\text{O}$
385	Склодовскит <i>Скл.</i> (<i>Skl</i>)	$\text{MgH}_2[\text{UO}_2 \text{SiO}_4]_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$
386	Сколецит <i>Скол</i> (<i>Skz</i>)	$\text{Ca}[\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$
387	Скюттерудит * <i>Скют</i> (<i>Skut</i>)	$(\text{Ni}, \text{Co})\text{As}_2$
388	Смитсонит <i>Смит</i> (<i>Smit</i>)	$\text{Zn}[\text{CO}_3]$
389	Содалит <i>Сод</i> (<i>Sod</i>)	$\text{Na}_8[\text{AlSiO}_4]_6\text{Cl}_2$
390	Сперрит <i>Спер</i> (<i>Spur</i>)	$\text{Ca}_5[(\text{SiO}_3)_2 \text{CO}_3]$
391	Спессартин <i>Спес</i> (<i>Spes</i>)	$\text{Mn}_3\text{Al}_2[\text{SiO}_4]_3$
392	Сподумен <i>Снд</i> (<i>Spod</i>)	$\text{LiAl}[\text{Si}_2\text{O}_6]$

* Правильнее: $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x[\text{As}_2]_2$.

Параметры элементарной ячейки						Число формул в одной з.п.	Рентгеновая плотность ρ_x	Формульная масса (мес.) $M_{\text{ф}}$ ($\Gamma \cdot 10^{-3}$)
a	b	c	α	β	γ			
14,26	8,57	5,09						
4,78	5,78	3,53				4	3,65	341,95
9,29	13,53	6,57				2	7,10	208,55
$\approx 9,75$	$\approx 18,0$	$\approx 5,3$		106° 33'		4	3,59	427,94
$\approx 9,75$	$\approx 18,0$	$\approx 5,3$		$\sim 103^\circ$		4	3,44	937,91
18,51	5,68	7,47		$\sim 103^\circ$		2	3,44	937,91
5,36	9,28	28,4		91° 13'		4	4,57	539,89
9,82	17,96	5,27		97° 09'		4	2,78	586,99
9,82	17,96	5,27		104° 20'		2	3,38	916,68
$\approx 10,0$	$\approx 18,1$	$\approx 5,35$		104° 20'		2	3,38	916,68
$\approx 10,0$	$\approx 18,1$	$\approx 5,35$		$\sim 106^\circ$		2	3,26	914,99
$\approx 9,9$	$\approx 18,0$	$\approx 5,3$		$\sim 106^\circ$		2	3,26	914,99
				$\approx 105^\circ$		2	3,27	898,97
7,66	12,27	6,68	86° 0'	93° 2'	111° 1'	10	3,59	126,37
5,91			47° 43'			2	3,69	114,95
6,02			102° 50'			4	3,84	114,95
10,14	11,41	7,28	91° 21'	99° 38'	111° 54'	4	3,25	375,88
$\approx 4,59$		$\approx 2,96$				2	4,25	79,90
7,69	4,63	13,53				2	3,77	547,02
8,56	13,03	7,175		115° 59'		4	2,57	278,34
4,72	5,75	4,97		$\approx 90^\circ$		2	7,59	308,46
11,26	14,46	9,95		125° 20'		8	3,78	376,17
12,68	13,54	10,17		108° 44'		16	4,27	265,81
12,45		15,6				2	2,36	1716,40
5,26	5,98	2,94				2	7,50	208,77
6,96		16,8				3	3,26	461,65
6,89			60° 38'			1	3,27	461,65
5,21	9,02	10,27		100° 06'		2	2,95	421,79
10,44	12,84	24,37				128	2,09	32,064
4,0856						4	10,50	107,87
5,77			47° 54'			2	3,97	115,86
6,03			103° 05'			4	3,87	115,86
5,84			47° 45'			2	3,85	115,86
5,31	9,23	10,18		99° 18'		2	3,35	496,91
7,44	7,59	5,75				4	3,31	162,05
14,62	4,49	8,96		145° 26'		2	8,11	815,24
6,29						4	1,99	74,555
7,97	7,05	4,90		93° 57'		2	2,47	203,99
17,28	7,03	6,56		105° 53'		2	3,64	840,64
18,48	18,94	6,54		90° 45'		8	2,28	392,35
8,20						8	6,83	283,59
5,88			103° 30'			4	4,55	125,38
5,63			48° 20'			2	4,56	125,38
8,83						1	2,34	969,23
8,91						1	2,27	969,23
10,49	6,705	14,16		101° 19'		4	3,02	444,58
11,621						8	4,19	495,04
9,50	8,30	5,24		110° 20'		4	3,19	186,08

№ п/п	Минерал и его символ	Формула минерала
393	Ставролит * <i>Ст</i> (<i>Staur</i>)	$(\text{Fe}^{2+}, \text{Mg})_2(\text{Al}, \text{Fe}^{2+})_6[\text{SiO}_4]_3\text{O}_6(\text{O}, \text{OH})_2$
394	Станнин <i>Стн</i> (<i>Stn</i>)	$\text{Cu}_2\text{FeSnS}_4$
395	Стефанит <i>Стф</i> (<i>Stph</i>)	Ag_5SbS_4
396	Стиблоколумбит <i>Скол</i> (<i>Scol</i>)	$\text{Sb}(\text{Nb}, \text{Ta})\text{O}_4$
397	Стибпотавталит <i>Стан</i> (<i>Stan</i>)	$\text{Sb}(\text{Ta}, \text{Nb})\text{O}_4$
398	Стилуалит <i>Стил</i> (<i>Stil</i>)	$(\text{Ce}, \text{La})_3[(\text{B}_3\text{O}_6)_2[\text{Si}_3\text{O}_9]]$
399	Стильпомелан <i>Стпм</i> (<i>Stm</i>)	$(\text{K}, \text{Na}, \text{Ca})_{0-1.4}(\text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+}, \text{Mg}, \text{Al}, \text{Mn})_{5.8-8.2} \times$ $\times [\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2]_2(\text{O}, \text{OH}, \text{H}_2\text{O})_{3.6-8.5}$
400	Строцианит <i>Стим</i> (<i>Stri</i>)	$\text{Sr}[\text{CO}_3]$
401	Суссекит <i>Сус</i> (<i>Sus</i>)	$\text{Mn}_2[\text{B}_2\text{O}_5] \cdot \text{H}_2\text{O}$
402	Сфалерит ** <i>Сфа</i> (<i>Sfl</i>)	ZnS
403	Сф-п(титанит) <i>Сф</i> (<i>Tit</i>)	$\text{CaTi}[\text{SiO}_4](\text{O}, \text{OH}, \text{F})$
404	Сяпхуалинит <i>Сям</i> (<i>Shli</i>)	$\text{Ca}_3\text{Li}_2[\text{BeSiO}_4]_2\text{F}_2$
405	Тальк <i>Та</i> (<i>Tc</i>)	$\text{Mg}_6[\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2]_2$
406	Тавталит <i>Тант</i> (<i>Tan</i>)	$(\text{Fe}, \text{Mn})(\text{Ta}, \text{Nb})_2\text{O}_6$
407	Теллуриит <i>Тел</i> (<i>Tel</i>)	TeO_2
408	Теллурувисмутит <i>Телм</i> (<i>Tibt</i>)	Bi_2Te_3
409	Тенардит (до 197°С) <i>Тенд</i> (<i>Th</i>)	$\alpha\text{-Na}_2[\text{SO}_4]$
410	Тешнацит *** <i>Тен</i> (<i>Ten</i>)	$\text{Cu}_3(\text{AsS}_3)_4$ **
411	Тепорит (мелаконит) <i>Тепр</i> (<i>Tnr</i>)	CuO
412	Тетрадимит <i>Тдм</i> (<i>Tdm</i>)	$\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$
413	Тетраэдрит **** <i>Тэд</i> (<i>Td</i>)	$\text{Cu}_3[\text{SbS}_3)_4]$
414	Тефронит <i>Тефр</i> (<i>Tefhr</i>)	$\text{Mn}_2[\text{SiO}_4]$
415	Тилленит <i>Тилл</i> (<i>Till</i>)	$\text{Ca}_5[(\text{CO}_3)_2 \text{Si}_2\text{O}_7]$
416	Томсонит <i>Том</i> (<i>Thom</i>)	$\text{NaCa}_2[\text{Al}_2(\text{Al}, \text{Si})\text{Si}_2\text{O}_{10}]_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
417	Топаз <i>Топ</i> (<i>Top</i>)	$\text{Al}_2[\text{SiO}_4(\text{OH}, \text{F})_2]$
418	Торбернит <i>Тбн</i> (<i>Tbn</i>)	$\text{Cu}[\text{UO}_2 \text{PO}_4]_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$
419	Тоританит <i>Три</i> (<i>Trn</i>)	$(\text{Th}, \text{U}, \text{Ce})\text{O}_3$
420	Торит <i>Трт</i> (<i>Thr</i>)	$\text{Th}[\text{SiO}_4]$
421	Торогумит ***** <i>Тзм</i> (<i>Tgm</i>)	$(\text{Th}, \text{U})[(\text{Si}, \text{H}_4)\text{O}_4]$
422	Треворит <i>Трв</i> (<i>Trv</i>)	$\text{NiFe}^{2+}\text{O}_4$
423	Тремолит <i>Тр</i> (<i>Trem</i>)	$\text{Ca}_2\text{Mg}_5[\text{Si}_4\text{O}_{11}(\text{OH}, \text{F})]_2$
424	Треггерит <i>Тре</i> (<i>Trg</i>)	$(\text{H}_3\text{O})_2[\text{UO}_2]_2\text{AsO}_4]_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
425	Тридимит <i>Трд</i> (<i>Trd</i>)	SiO_2
426	Тридимит-β <i>Трд-β</i> (<i>Trd-β</i>)	$\beta\text{-SiO}_2$
427	Трипикальсилит <i>Ткса</i> (<i>Tksl</i>)	$\text{BK}, \text{Na}[\text{AlSiO}_4]$
428	Трипмерит <i>Трм</i> (<i>Trm</i>)	$\text{CaMn}_2[\text{BeSiO}_4]_3$
429	Триптит <i>Трт</i> (<i>Trp</i>)	$(\text{Mn}, \text{Fe}^{2+})_2[\text{PO}_4]_4\text{F}$
430	Триплоидит <i>Трпд</i> (<i>Trpd</i>)	$(\text{Mn}, \text{Fe}^{2+})_2[\text{PO}_4]_4\text{OH}$

* Правильнее: $\text{AlFe}_2\text{O}_7(\text{OH}) \cdot 4\text{Al}[\text{O}|\text{SiO}_4]$.
 ** Правильнее: $(\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_x)_2\text{S}$.
 *** Правильнее: $\text{Cu}_1^{10}\text{Cu}_2^{10}\text{S}[\text{AsS}_4]_2$.
 **** Правильнее: $\text{Cu}_1^{10}\text{Cu}_2^{10}\text{S}[\text{SbS}_4]_2$.
 ***** Более строго: $(\text{Th}, \text{U})[\text{SiO}_4]_{1-x}[(\text{OH})_4]_x$.

Параметры элементарной ячейки						Число формульных единиц Z	Рентгеновская плотность ρ_m	Формульный вес (вес) M_m (г. 10 ²³)
a	b	c	α	β	γ			
7,83	16,50	5,55						
7,83	16,50	5,55				2	4,40	950,24
7,95	16,82	5,71				2	4,40	950,24
7,95	16,82	5,71				2	4,13	950,24
5,47		10,74				2	4,13	950,24
7,70	12,32	8,48				2	4,44	429,87
4,93	5,56	10,80				4	6,52	789,35
4,93	5,55	11,80				4	7,24	322,68
6,85		6,64				4	6,64	322,68
5,40	9,42	12,14		$\approx 93^\circ$		1	4,77	775,24
5,40	9,42	12,14		$\approx 93^\circ$		1	2,82	1046,73
5,128	8,421	6,094				1	2,82	1046,73
10,61	12,65	3,30				4	3,73	147,63
$\sim 5,41$						4	3,44	229,51
6,56	8,72	7,44		$119^\circ 43'$		4	4,09	97,43
6,56	8,72	7,44		$119^\circ 43'$		4	3,55	197,40
12,88						4	3,55	197,40
5,28	9,15	18,9		$100^\circ 15'$		8	2,96	475,41
14,2	5,73	5,08				2	2,82	758,59
11,77	5,51	5,60				4	6,83	425,25
10,53			$24^\circ 02'$			8	5,84	159,60
9,77	12,31	5,86				1	7,81	800,76
10,21						8	2,68	142,04
4,65	3,41	5,11		$80^\circ 31'$		8	4,71	377,77
10,33			$24^\circ 10'$			4	6,62	79,54
10,34						1	7,21	705,22
4,86—4,90	10,60—	6,22—6,25				8	5,10	424,59
	10,62					4	4,19	201,96
	10,27	7,63				4	4,12	201,96
15,02	13,09	13,25		$105^\circ 50'$		4	2,87	488,59
13,07						4	2,36	806,58
8,394	8,800	4,650				4	3,52	182,06
8,394	8,800	4,650				4	3,52	182,06
7,06		20,5				2	3,16	973,71
5,540						4	9,19	235,40
5,564						4	9,08	235,40
7,03		6,25				4	6,97	324,12
7,07		6,27				4	6,68	315,09
7,07		6,27				4	6,68	315,09
8,43						8	5,20	234,40
9,84	18,05	5,275		$104^\circ 42'$		2	2,98	814,41
7,16		8,80				1	3,55	964,15
9,90	17,1	16,3				64	2,31	60,086
5,04		8,24				4	2,20	60,086
15,4		8,6				18	2,54	150,11
16,14	7,62	27,92		$90^\circ 09'$		16	3,51	453,25
12,05	6,47	10,05		$105^\circ 42'$		8	3,96	224,76
12,26	13,38	9,90		$108^\circ 04'$		16	3,83	222,77

№ п/п	Минерал и его символ	Формула минерала
431	Турмалин <i>Тур</i> (<i>Tur</i>)	$\text{Na}(\text{Mg, Fe, Mn, Li, Al})_3\text{Al}_6[\text{Si}_6\text{O}_{18} (\text{BO}_3)_3 (\text{OH, F})_4]$
432	Тш-рмакит-ферротшрмакит <i>Черм</i> (<i>Тс</i>)	(См. чермакит-феррочермакит)
433	Тюринцит <i>Тюр</i> (<i>Thur</i>)	$(\text{Mg, Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+})(\text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+} \text{Al})_2[(\text{Al}_{1,2-2} \times \text{Si}_{2,8-2})\text{O}_{10}] (\text{O, OH})_6 (\text{OH})_2$
434	Уваровит <i>Ув</i> (<i>Uv</i>)	$\text{Ca}_3\text{Cr}_2[\text{SiO}_4]_3$
435	Ульвант (ульвошпатель) <i>Увшн</i> (<i>Usp</i>)	$\text{Fe}_2^{2+} \text{TiO}_4$
436	Ульманит <i>Улм</i> (<i>Ulm</i>)	NiSbS
437	Уранцит <i>Урн</i> (<i>Urn</i>) *	$(\text{U, Th})\text{O}_2^*$
438	Ураниткродит <i>Умт</i> (<i>Umt</i>)	$(\text{Ca, Na, U, Ce, Y})_2(\text{Ta, Nb, Ti})_2\text{O}_6(\text{OH, F, O})_2$
439	Уранитрохлор <i>Упрх</i> (<i>Uprc</i>)	$(\text{Na, K, Ce, Y, U, Pb})(\text{Nb, Ti, Ta})_2(\text{O, OH})_7$
440	Ураноторит <i>Утрт</i> (<i>Uthr</i>)	$(\text{Th, U})[\text{SiO}_4]$
441	Уранофан <i>Уфн</i> (<i>Uphn</i>)	$\text{Ca} \text{UO}_2 \text{SiO}_4 _2 (\text{H}_2\text{O})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$
442	Уранофан-β <i>Уфн-β</i> (<i>Uphn-β</i>)	$\text{Ca} \text{UO}_2 \text{SiO}_3 _2 (\text{OH})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$
443	Фасцит <i>Фас</i> (<i>Fas</i>)	$\text{Ca}(\text{Mg, Fe}^{3+}, \text{Al})[(\text{Si, Al})_2\text{O}_6]$
444	Фаязит <i>Фа</i> (<i>Fa</i>)	$\text{Fe}_2[\text{SiO}_4]$
445	Фурбирит <i>Фбр</i> (<i>Fbr</i>)	$\text{Fe} \text{WO}_4 $
446	Фургусонит <i>Фере</i> (<i>Ferg</i>)	$\text{Y}(\text{Nb, Ta})\text{O}_4$
447	Ферриактинолит <i>Fe Акм</i> (<i>Fe Akt</i>)	$\text{Ca}_2\text{Fe}_8^{2+}[\text{Si}_4\text{O}_{11} (\text{OH, F})_2]$
448	Ферригаллуазит <i>Fe Глз</i> (<i>Fe Hls</i>)	$\text{Al}_3\text{Fe}_7^{2+}[\text{Si}_4\text{O}_{10}] (\text{OH})_6 (\text{H}_2\text{O})_4$
449	Ферригастинцит <i>Fe Гсм</i> (<i>Fe Gst</i>)	$\text{NaCa}_2\text{Fe}_7^{2+}(\text{Al, Fe}^{3+})[\text{Si}_6\text{Al}_2\text{O}_{22}] (\text{OH, F})_2]$
450	Ферриметагаллуазит <i>Fe Мгз</i> (<i>Fe Mgs</i>)	$\text{Al}_3\text{Fe}_7^{2+}[\text{Si}_4\text{O}_{10}] (\text{OH})_6]$
451	Ферримусковит <i>Fe Му</i> (<i>Fe Ms</i>)	$\text{KFe}^{3+}\text{Al}[\text{AlSi}_3\text{O}_{10}] (\text{OH, F})_2]$
452	Ферросилит <i>Фса</i> (<i>Fal</i>)	$\text{Fe}^{2+}[\text{SiO}_4]$
453	Филлитцит <i>Фил</i> (<i>Phil</i>)	$\text{KCa}[\text{Al}_3\text{Si}_5\text{O}_{16}] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
454	Флогозит <i>Фл</i> (<i>Phlg</i>)	$\text{K}_2(\text{Mg, Fe}^{2+})_6[\text{AlSi}_3\text{O}_{10}] (\text{OH, F})_2]$
455	Флогозит <i>Фл</i> (<i>Phlg</i>)	$\text{KMg}_3[\text{AlSi}_3\text{O}_{10}] (\text{OH, F})_2]$
456	Флюоборит <i>Флб</i> (<i>Fib</i>)	$\text{Mg}_2[\text{BO}_3](\text{F, OH})_2$
457	Флюорит <i>Флр</i> (<i>Flr</i>)	CaF_2
458	Форстерит <i>Фо</i> (<i>For</i>)	$\text{Mg}_2[\text{SiO}_4]$
459	Фравакшицит <i>Фкл</i> (<i>Fkl</i>)	$(\text{Zn, Fe, Mn})(\text{Fe}^{3+}, \text{Mn})_2\text{O}_4$
460	Фриделит <i>Фрд</i> (<i>Frd</i>)	$(\text{Mn, Fe})_9(\text{OH, Cl})_{10}[\text{Si}_6\text{O}_{15}]$
461	Фторапатит <i>Ф Ап</i> (<i>F Ap</i>)	$\text{Ca}_5[\text{FO}_4]_3\text{F}$
462	Хабазит (шабазит) <i>Хб</i> (<i>Chb</i>)	$(\text{Ca, Na}_2)[\text{Al}_2\text{Si}_4\text{O}_{12}] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
463	Халькозин-β <i>Хз-β</i> (<i>Chz-β</i>)	$\beta\text{-Cu}_2\text{S}$
464	Халькозин куб. (дигенит) <i>Хз</i> (<i>Chz</i>)	$\alpha\text{-Cu}_5\text{S}_5$
465	Халькозин-γ (>103°) <i>Хз-γ</i> (<i>Chz-γ</i>)	$\gamma\text{-Cu}_2\text{S}$
466	Халькопирит <i>Хпр</i> (<i>Cpr</i>)	CuFeS_2
467	Хавит <i>Хав</i> (<i>Hav</i>)	$\text{Mg}_3\text{Ca}[\text{CO}_3]_4$
468	Харкерит <i>Хар</i> (<i>Har</i>)	$\text{Ca}_2(\text{Mg, Al})[(\text{Si, B})\text{O}_3][\text{CO}_3](\text{OH})$

* Правильнее: $(\text{U}_{1-x}\text{Pb}_{1/2x}\text{U}_{1/2x})_{1-y}(\text{Th})_y\text{O}_2$.

Параметры элементарной ячейки

Параметры элементарной ячейки						Число формульных единиц Z	Рентгеновская плотность ρ , г/см ³	Формульная масса (вес) M , г/моль ($\cdot 10^{-3}$)
a	b	c	α	β	γ			
15,84		7,10				3	3,20	991,25
16,03		7,25				3	3,06	991,25
15,84		7,10				3	3,20	991,25
16,03		7,25				3	3,06	991,25
5,39	9,33	14,10						
5,39	9,33	14,10		97° 20'		1	1,60	678,30
12,00				97° 20'		1	1,60	678,30
8,53						8	3,85	500,49
5,92						8	4,78	223,59
5,449						4	6,80	212,52
5,540						4	10,96	267,03
10,40						4	10,43	267,03
10,3						8	6,37	539,89
7,12		6,32				8	5,50	452,75
15,97	7,07	6,68		97° 15'		4	6,78	327,12
6,64	15,55	14,01		91°		2	3,79	853,38
≈ 9,71	≈ 8,86	≈ 5,26		≈ 106°		4	3,93	856,41
4,817	10,477	6,105				4	3,48	226,86
4,71	5,70	4,94		90°		4	4,39	203,76
5,16		10,86				2	7,60	303,70
≈ 9,85	≈ 18,1	≈ 5,3		≈ 104° 50'		4	7,64	334,28
5,16	8,92	10,9		100°		2	3,53	972,09
≈ 9,9	≈ 18,0	≈ 5,3		≈ 105° 30'		1	2,07	617,26
5,16	8,92	≈ 7,6		105° 30'		2	3,57	978,44
						1	2,69	545,20
5,19	9,04	20,08		95° 30'		4	3,04	429,17
18,433	9,060	5,258				16	3,99	131,93
10,02	14,28	8,64		125° 40'		2	2,20	664,65
5,3	9,2	10,3		100°		1	3,13	933,17
5,3	9,2	10,3		100°		1	3,13	933,17
5,33	9,23	10,26		100° 12'		2	2,80	419,28
5,33	9,23	10,26		100° 12'		2	2,80	419,28
9,06		3,06				2	2,84	185,76
9,06		3,06				2	2,84	185,76
5,463						4	3,18	78,08
4,756	10,195	5,981				4	3,22	140,69
8,420						8	5,20	233,50
13,40		21,43				6	3,33	1113,96
13,40		21,43				6	3,33	1113,96
9,35		6,87				2	3,22	504,32
13,78		14,97				6	2,06	509,43
13,78		14,97				6	2,06	509,43
11,92	27,33	13,44				96	5,81	159,72
5,59						1	6,96	732,18
3,90		6,69				2	6,00	159,14
5,25		10,32				4	4,28	183,52
5,66	9,02	8,51				2	2,70	353,06
29,53						24	0,39	249,77
29,53						24	0,39	249,77

№ п/п	Минерал и его символ	Формула минерала
469	Хаттолит <i>Хат</i> (<i>Hut</i>)	$\text{Th}[\text{Si}_2\text{O}_7]$
470	Хлорит <i>Хл</i> (<i>Chl</i>)	$(\text{Mg}, \text{Al}, \text{Fe})_{12}[(\text{Si}, \text{Al})_8 \text{O}_{20}](\text{OH})_{16}$
471	Хлорапатит <i>Cl An</i> (<i>Cl Ap</i>)	$\text{Ca}_2[\text{PO}_4]_2\text{Cl}$
472	Хлоритопид <i>Хрд</i> (<i>Chd</i>)	$(\text{Fe}^{2+}, \text{Mg}, \text{Mn})_2(\text{Al}, \text{Fe}^{3+})\text{Al}_3[\text{O}_2 (\text{SiO}_4)_2](\text{OH})_4$
473	Ходжкинсонит <i>Ход</i> (<i>Hod</i>)	$\text{MnZn}_2[\text{Si}_2\text{O}_7](\text{OH})_2$
474	Холмквистит <i>Хол</i> (<i>Hol</i>)	$\text{Li}_2(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+})_3(\text{Al}, \text{Fe}^{3+})_2[\text{Si}_4\text{O}_{11}](\text{OH}, \text{F})_2$
475	Холдродит <i>Хонд</i> (<i>Cho</i>)	$\text{Mg}_5[\text{Si}_2\text{O}_7]_2(\text{OH}, \text{F})_2$
476	Хризоберилл <i>Хзб</i> (<i>Chsb</i>)	Al_2BeO_4
477	Хризотил <i>Хрус</i> (<i>Chrs</i>) (клинохризотил) (ортохризотил) (парахризотил)	$\text{Mg}_3[\text{Si}_2\text{O}_5](\text{OH})_4$
478	Хромит <i>Хрм</i> (<i>Crn</i>)	$\text{Fe}^{2+}\text{Cr}_2\text{O}_4$
479	Хромклинохлор <i>Хкл</i> (<i>Cr kl</i>)	$\text{Mg}_3(\text{Mg}, \text{Al}, \text{Cr})_3[\text{AlSi}_3\text{O}_{10}](\text{OH})_8$
480	Цельестин <i>Цел</i> (<i>Ceal</i>)	$\text{Sr}[\text{SO}_4]$
481	Цельманн <i>Цлз</i> (<i>Cls</i>)	$\text{Ba}[\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_8]$
482	Церийнит <i>Цри</i> (<i>Crn</i>)	$(\text{Ce}, \text{Th})\text{O}_2$
483	Церуссит <i>Црс</i> (<i>Crz</i>)	$\text{Pb}[\text{CO}_3]$
484	Цинквальцит <i>Цин</i> (<i>Zwd</i>)	$\text{K}_2\text{Fe}_{2-1}^{2+}\text{Li}_{2-3}\text{Al}_2[\text{Si}_{6-7}\text{Al}_{2-1}\text{O}_{20}] \text{F}_{3-2}(\text{OH})_{1-2}$
485	Циркон <i>Цр</i> (<i>Zir</i>)	$\text{Zr}[\text{SiO}_4]$
486	Цомант <i>Цо</i> (<i>Zo</i>)	$\text{Ca}_2\text{Al}_3[\text{Si}_2\text{O}_7 \text{SiO}_4] \text{O}(\text{OH})$
487	Чералит <i>Чрл</i> (<i>Chrl</i>)	$(\text{Ca}, \text{Ce}, \text{La}, \text{Th})[\text{PO}_4]$
488	Чермакит-феррочермакит <i>Черм</i> (<i>Fz</i>)	$\text{Ca}_2(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+})_2(\text{Al}, \text{Fe}^{3+})_2[\text{Si}_8\text{Al}_2\text{O}_{22}](\text{OH}, \text{F})_2$
489	Шамозит <i>Шам</i> (<i>Cham</i>)	$(\text{Fe}^{2+}, \text{Mg})_3(\text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+}, \text{Al}^{3+}, \dots)_3[\text{AlSi}_3\text{O}_{10} (\text{OH})_2] \times$ $\times (\text{O}, \text{OH})_6$
490	Шеелит <i>Ше</i> (<i>Sch</i>)	$\text{Ca}[\text{WO}_4]$
491	Шериданит <i>Шрд</i> (<i>Srd</i>)	$(\text{Mg}, \text{Al})_3\text{Mg}_3[(\text{Al}_{1.2-1.5}\text{Si}_{1.8-2.5})\text{O}_{10}](\text{OH})_8$
492	Шерл <i>Шр</i> (<i>Srl</i>)	$\text{Na}(\text{Fe}, \text{Mn})_3\text{Al}_6[\text{B}_3\text{Si}_6\text{O}_{27}(\text{OH}, \text{F})_4]$
493	Шшвель <i>Шш</i> (<i>Sp</i>)	MgAl_2O_4
494	Шрёклингит <i>Шрк</i> (<i>Srk</i>)	$\text{NaCa}_3[\text{UO}_2 \text{F} \text{SO}_4 (\text{CO}_3)_3] \cdot 10\text{H}_2\text{O}$
495	Штерибергит <i>Штб</i> (<i>Stb</i>)	AgFe_2S_3
496	Штольцит <i>Штл</i> (<i>Stl</i>)	$\beta = \text{Pb}[\text{WO}_4]$
497	Штрюмейерит (<78° C) <i>Шмп</i> (<i>Str</i>)	CuAgS
498	Шэллерит <i>Шлр</i> (<i>Slr</i>)	$(\text{Mn}, \text{Fe})_8[(\text{OH})_{10} (\text{Si}, \text{As})_6\text{O}_{15}]$
499	Эвдиалит <i>Эвд</i> (<i>Eud</i>)	$(\text{Na}, \text{Ca}, \text{Fe})_6\text{Zr}[(\text{Si}_3\text{O}_9)_2(\text{OH}, \text{Cl})]$
500	Эвксепит <i>Эвкс</i> (<i>Eux</i>)	$(\text{Y}, \text{Er}, \text{Ce}, \text{U}, \text{Pb}, \text{Ca})(\text{Nb}, \text{Ta}, \text{Ti})_2(\text{O}, \text{OH})_8$
501	Эгирин <i>Эг</i> (<i>Eg</i>) Эгирин-авгит	$\text{Na}, \text{Fe}^{3+}[\text{Si}_2\text{O}_6]$ $(\text{Na}, \text{Ca})[\text{Fe}^{3+}, \text{Fe}^{2+}, \text{Mg}, \text{Al}]_2[\text{Si}_2\text{O}_6]$

Параметры элементарной ячейки						Число формульных единиц Z	Рентгеновская плотность γ/μ	Формульная масса (вес) M_{μ} ($\Gamma \cdot 10^{-4}$)	
a	b	c	α	β	γ				
6,80	6,96	6,54	96° 53'	104° 55'	90° 2'	4	7,20	324,12	
5,3	9,2	14,3		$\approx 97^\circ$		1	2,98	1240,96	
9,61		6,76				2	3,20	520,77	
9,50	5,48	9,16		101° 49'		4	7,12	496,63	
9,52	5,47	18,19		101° 39'		4	3,55	496,63	
8,17	5,31	11,76		95° 28'		4	4,08	311,78	
18,27	17,69	5,28				4	3,23	829,64	
18,27	17,69	5,28				4	3,23	829,64	
18,56	18,07	5,30				4	3,10	829,64	
18,56	18,07	5,30				4	3,10	829,64	
7,87	4,73	10,27				4	3,10	829,64	
7,87	4,73	10,27		109° 02'		2	3,23	341,74	
5,48	4,43	9,41		109° 02'		2	3,23	341,74	
						4	3,69	126,97	
5,34	9,25	14,65				93° 16'	4	2,55	277,14
5,34	9,2	14,63					4	2,56	277,14
5,3	9,24	14,7			4	2,56	277,14		
8,378					8	5,06	223,84		
5,32	9,21	14,23		97°	2	2,80	583,53		
8,359	5,352	6,866			4	3,97	183,68		
8,65	13,13	14,60		115° 02'	4	1,66	375,47		
5,42					4	9,10	218,08		
5,15	8,47	6,11			4	6,66	287,20		
5,27	9,09	10,07		100°	1	2,97	849,32		
5,27	9,09	10,07		100°	1	2,97	849,32		
6,60		5,98			4	4,67	183,31		
16,2—16,3	5,45—5,63	10,04—			4	3,40	454,37		
		10,21			4	3,22	454,37		
6,74	7,00	6,43		104° 36'	4	5,27	232,76		
$\approx 9,9$	$\approx 18,0$	$\approx 5,3$		$\approx 105^\circ$	2	3,25	893,71		
5,40	9,36	14,03		90°	2	3,12	666,22		
5,25		11,40			4	6,09	287,93		
5,33	9,23	28,5		97° 09'	4	2,59	542,75		
16,032		7,149			3	3,31	1056,02		
16,032		7,149			3	3,31	1056,02		
8,103					8	3,55	142,27		
9,69	16,83	14,26			4	2,54	888,52		
9,60	9,62	14,46	91° 42'	91° 48'	2	2,56	888,52		
6,62	11,66	12,70			8	4,28	315,76		
5,45		12,03			4	8,46	455,04		
4,06	6,66	7,99			4	6,25	203,47		
13,43		14,31			4	3,45	1162,24		
14,34		30,21			12	3,01	811,80		
14,34		30,21			12	3,01	811,80		
					4	7,35	460,46		
					4	7,35	460,46		
14,57	5,52	5,17			4	3,48	224,45		
14,57	5,52	5,17		107,4°	4	3,48	224,45		
9,65	8,79	5,29							

№ п/п	Минерал и его символ	Формула минерала
502	Эддит-ферродедит Эд (Ed)	$\text{NaCa}_2(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+})_5[\text{Si}_7\text{AlO}_{22}] (\text{OH}, \text{F})_2$
503	Эккерманит Эк (Eck)	$\text{Na}_{2,5}\text{Ca}_{0,5}(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+}, \text{Al}, \text{Li})_5 \times$ $\times [\text{Si}_{7,5}\text{Al}_{0,5}\text{O}_{22}] (\text{OH}, \text{F})_2$
504	Эльбант Элб (Elb)	$\text{Na}(\text{Li}, \text{Al})_3\text{Al}_6[\text{B}_3\text{Si}_8\text{O}_{27}(\text{OH}, \text{F})_4]$
505	Эмплектит Эмп (Emp)	CuBiS_2
506	Эпирит Эпз (Eng)	Cu_3AsS_3
507	Эпигнатит Эгт (Egt)	$\text{Na}_4\text{Fe}_{10}\text{Ti}_2[\text{O}_4 (\text{Si}_2\text{O}_6)_8]$
508	Эпстатит Эп (En)	$\text{Mg}[\text{SiO}_3]$
509	Эпидот Эп (Epr)	$\text{Ca}_2\text{Fe}^{3+}\text{Al}_2[\text{Si}_2\text{O}_7][\text{SiO}_4] \text{O} (\text{OH})$
510	Эпистильбит Эпст (Epsl)	$\text{Ca}[\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$
511	Эпсомит Эпсм (Epsm)	$\text{Mg}[\text{SO}_4] \cdot 7\text{H}_2\text{O}$
512	Эфесит Эф (Eph)	$(\text{Na}, \text{Ca})\text{Al}_2[\text{Al}(\text{Al}, \text{Si})\text{Si}_2\text{O}_{10}](\text{OH})_2$
513	Якобит Як (Jk)	$\text{MnFe}^{3+}\text{O}_4$
514	Ярозит Ярз (Jrs)	$\text{KFe}_3^+[\text{SO}_4]_2 (\text{OH})_6$

№ п	Минерал и его символ	Количество атомов в формульной единице		Объем элементарной ячейки V_m^0	Объем формульной единицы V_m^a
		общее $\sum n_m^i$	анионов $\sum n_m^a$		
1	2	13	14	15	16
1	Авигт Ав (Aug)	10	6	447,27	111,82
2	Азурит Аз (Az)	15	8	298,40	149,20
3	Айкитт Айк (Aik)	12	6	529,28	264,64
4	Акерманит Ок (Ak)	12	7	307,94	153,97
5	Акмит Аки (Ac)	10	6	426,36	106,59
6	Аксинит Акс (Acs)	27	16	567,20	283,60
7	Актинолит Акт (Akt)	40	24	913,42	456,71
8	Алабадин Элб (Alb)	2	1	142,24	35,56
9	Аллеганит Алл (All)	19	10	398,63	199,31
10	Алмаз Дм (Dm)	1		45,38	5,67
11	Алузит Ад (Aln)	26	14	731,11	243,70
12	Альбит Аб (Ab)	13	8	663,86	165,96
13	Альмадин Алм (Alm)	20	12	1531,21	191,40

$\sum n_m^0$ — число формульных единиц минерала m , приведенных в графе 4, в объеме его элементарной ячейки V_m^0 ; $\sum F_m^i$ $\sum F_m^a$ — общее количество атомов соответственно всех элементов и всех анионов в стандартном объеме массы вещества минерала m ; $\sum n_m^i$ — общее количество атомов элементов в формульной единице минерала m ; q_m — коэффициент, показывающий отношение общего количества атомов в минерале m к величине стандартного содержания атомов в идеальном минерале; $1/q_m$ — величина относительной плотности упаковки атомов в минерале m ; Q_m — коэффициент изобъемности, показывающий, какую часть величины стандартного объема составляет объем одной формульной единицы минерала m .

Параметры элементарной ячейки						Число формульных единиц Z	Рентгеновская плотность ρ , г/см ³	Формульная масса (вес) M (Г·10 ²³)
a	b	c	α	β	γ			
R 9,9	R 18,0	R 5,3						
R 9,7	R 17,7	R 5,3		R 105°		2	3,33	915,14
9,7	17,7	5,3		R 104°		2	3,23	859,58
15,842		7,009		R 104°		2	3,23	859,58
15,842		7,009				3	3,08	940,72
6,12	14,51	3,89				3	3,08	940,72
6,47	7,44	6,19				4	6,47	336,65
10,41	10,81	8,93	104° 56'	96° 52'	125° 19'	2	4,03	361,73
18,228	8,805	5,185				1	3,84	1723,26
8,88	5,61	10,17				16	3,20	100,40
8,98	5,64	10,30		115° 24'		2	3,51	483,23
8,92	17,73	10,21		115° 24'		2	3,40	483,23
14,84	17,73	10,21		124° 20'		3	2,27	608,64
11,96	12,05	6,88		90° 40'		6	2,26	608,64
5,17	8,81	9,72				4	1,65	246,49
8,51				~ 100°		2	2,97	390,20
7,21		17,03				8	4,97	230,63
						3	3,25	500,82

Количество атомов в объеме 1000 Å ³ минерала		Коэффициенты пересчета				Сингония	Литературные источники*
общее ΣF_m^i	аннонов ΣF_m^a	q_m	$1/q_m$	Q_m	w_{im}^i		
17	18	19	20	21	22	23	24
89,43	53,66	0,894	1,118	0,112	0,01118	Моноклин.	[24]
100,54	53,62	1,005	0,995	0,149	0,00995	Моноклин.	[111]
453,44	226,72	4,534	0,221	0,265	0,0022	Ромбич.	[111]
77,94	45,46	0,779	1,284	0,154	0,01284	Тетраг.	[24]
93,82	56,29	0,938	1,066	0,107	0,01066	Моноклин.	[111]
95,20	56,42	0,952	1,050	0,284	0,0105	Триклин.	[24]
87,58	52,55	0,876	1,142	0,457	0,01142	Моноклин.	[24]
56,24	28,12	0,562	1,778	0,0356	0,0178	Кубич.	[111]
95,33	50,17	0,953	1,049	0,199	0,01049	Моноклин.	[111]
176,29	—	1,763	0,567	0,0057	0,0057	Кубич.	[111]
106,69	57,45	1,067	0,936	0,244	0,0094	Гексаг.	[111]
78,33	48,20	0,783	1,277	0,166	0,01277	Триклин.	[111]
104,49	62,69	1,045	0,957	0,191	0,0096	Кубич.	[24]

* Приведены ссылки на справочники, переведенные на русский язык, однако исходные данные (см. графы 3—10), использованные для расчетов кристаллохимических параметров в графах 11—22, заимствованы из первоисточников. В графу «Сингония» помещены также данные по ромбоэдрической структуре решетки (ромбоэдр).

№ п/п	Минерал и его символ	Количество атомов в формульной единице		Объем элементарной ячейки V_0 μ^3	Объем формульной единицы V_m μ^3
		общее $\sum n_i$	аннонов $\sum n_m^a$		
14	Амблигонит <i>Амб</i> (<i>Amb</i>)	8	5	160,20	80,10
15	Амезит <i>Амез</i> (<i>Amz</i>)	36	18	683,67	341,84
16	Амфиовит <i>Амф</i> (<i>Amf</i>)	15	8	1866,31	155,53
17	Анальцит <i>Анц</i> (<i>Anz</i>)	13	7	2576,99	161,06
18	Апатит <i>Апм</i> (<i>Ap</i>)	3	2	135,88	33,97
19	Авгидрит <i>Анд</i> (<i>Ad</i>)	6	4	305,09	76,27
20	Андалузит <i>Анд</i> (<i>And</i>)	8	5	343,21	85,80
21	Анлезит <i>Пл₁₀</i> (<i>Pl₁₀</i>)	13	8	670,32	167,58
22	Андродит <i>Андр</i> (<i>Andr</i>)	20	12	1748,82	218,60
23	Анкерит <i>Анк</i> (<i>Ank</i>)	10	6	217,21	108,61
		10	6	108,68	108,68
24	Анкерит <i>Анк</i> (<i>Ank</i>)	10	6	107,31	53,65
		10	6	109,35	54,68
25	Анортит <i>Ан</i> (<i>An</i>)	13	8	1338,89	167,36
26	Антигорит (ортоантигорит) <i>оАнт</i> (<i>oAnt</i>)	36	18	712,70	356,35
27	Антигорит (клиноантигорит) <i>кАнт</i> (<i>kAnt</i>)	36	18	363,64	363,64
28	Антимонит <i>Антм</i> (<i>Antm</i>)	5	3	486,86	121,71
29	Автофиллит <i>Антф</i> (<i>Antf</i>)	41	24	1725,66	431,42
		39	24	1725,66	431,42
30	Апатит <i>Ап</i> (<i>Ap</i>)	21	13	509,53—	254,76—
		22	13	550,17	275,08
				509,53—	254,76—
				550,17	275,08
31	Апофиллит <i>Апф</i> (<i>Apf</i>)	58	28	1283,04	641,52
32	Арагонит <i>Араг</i> (<i>Arg</i>)	5	3	225,49	56,37
33	Аргентит- α (акацитит) <i>Ара-α</i> (<i>Arg-α</i>)	3	1	452,53	56,57
34	Аргентит- β <i>Ара-β</i> (<i>Arg-β</i>)	3	1	116,93	58,46
35	Арденит <i>Ард</i> (<i>Arđ</i>)	47	27	949,37	474,69
36	Арсеопприт <i>Асм</i> (<i>Asp</i>)	3	1	173,46	43,37
		3	1	344,96	43,12
37	Астраханит <i>Асмх</i> (<i>Astx</i>)	25	12	488,42	244,21
38	Аугелит <i>Ауг</i> (<i>Aug</i>)	13	7	490,96	122,74
39	Аурипигмент <i>Аур</i> (<i>Aur</i>)	5	3	468,29	117,07
40	Арфведсонит <i>Арф</i> (<i>Arf</i>)	40	24	916,41	458,20
		42	24	916,41	458,20
41	Афвиллит <i>Афл</i> (<i>Afl</i>)	21	10	859,91	214,98
42	Ашарит <i>Аш</i> (<i>Ash</i>)	12	6	413,23	103,31
43	Бабинговит <i>Баб</i> (<i>Bab</i>)	25	15	584,76	292,38
44	Бавальсит <i>Бав</i> (<i>Bav</i>)	27	16	1426,52	356,63
45	Бастнит <i>Васт</i> (<i>Bast</i>)	45	29	2277,34	569,33
46	Бериллит <i>Бер</i> (<i>Ber</i>)	12	7	529,33	132,34
47	Барит <i>Ба</i> (<i>Bar</i>)	6	4	346,05	86,51
48	Баркевикит <i>Барк</i> (<i>Bk</i>)	42	24	932,00	466,00
49	Баруанит <i>Бра</i> (<i>Brs</i>)	60	24	911,67	911,67
		62	24	911,67	911,67
50	Башнит (скандиевый берилл) <i>Баш</i> (<i>ScBer</i>)	29	18	717,39	358,70
51	Беккелит (лессингит) <i>Бек</i> (<i>Bec</i>)	21	13	578,45	289,23
		22	13	578,45	289,23
52	Бёмит <i>Бем</i> (<i>Bem</i>)	4	2	129,17	32,29
53	Бентонит <i>Бен</i> (<i>Ben</i>)	14	9	368,11	184,05
54	Берилл <i>Бер</i> (<i>Ber</i>)	29	18	671,70	335,85
55	Бериллосодалит <i>Берсд</i> (<i>Bersd</i>)	46	26	663,05	663,05

Продолжение прилож. 5.

Количество атомов в объеме 1000 Å³ минерала		Коэффициенты пересчета				Симметрия	Литературные источники
общее ΣF_m^I	аннонов ΣF_m^A	q_m	$1/q_m$	Q_m	W_{1m}^I		
99,87	62,42	1,000	1,001	0,080	0,01001	Триклин.	[111]
105,31	52,66	1,053	0,950	0,342	0,00950	Моноклин.	[24]
96,44	51,44	0,964	1,037	0,156	0,0104	Тетраг.	[111]
80,71	43,46	0,807	1,239	0,1611	0,0124	Кубич.	[111]
88,31	58,87	0,883	1,132	0,034	0,0113	Тетраг.	[24]
78,66	52,44	0,787	1,271	0,078	0,0127	Ромбич.	[111]
93,24	58,27	0,932	1,072	0,085	0,0107	Ромбич.	[24]
77,57	47,74	0,776	1,288	0,168	0,01288	Триклин.	[111]
91,49	54,89	0,915	1,093	0,219	0,0109	Кубич.	[24]
92,08	55,24	0,921	1,086	0,109	0,01086	Ромбо- эдр.	[111]
92,01	55,21	0,920	1,087	0,109	0,01087		
186,38	111,83	1,864	0,536	0,054	0,00536	Ромбо- эдр.	[24]
182,90	109,74	1,829	0,547	0,055	0,00547	Триклин.	[111]
77,68	47,80	0,777	1,287	0,167	0,01287	Ромбич.	[111]
101,02	50,52	1,010	0,990	0,356	0,0099	Моноклин.	[111]
99,00	49,50	0,990	1,010	0,364	0,01010	Ромбич.	[111]
41,08	24,65	0,411	2,434	0,122	0,0243	Ромбич.	[111]
95,04	55,63	0,950	1,052	0,431	0,0105	Ромбич.	[24]
90,40	55,63	0,904	1,106	0,431	0,0111		
82,43—	51,03—	0,824—	1,213—	0,255—	0,01213—	Гексаг.	[24]
76,34	47,26	0,763	1,310	0,275	0,01310		
86,35—	51,03—	0,864—	1,157—	0,255—	0,01157—		
79,97	47,26	0,800	1,250	0,275	0,01250		
90,41	43,65	0,904	1,106	0,642	0,0111	Тетраг.	[24]
88,70	53,22	0,887	1,127	0,056	0,0113	Ромбич.	[111]
53,03	17,68	0,530	1,886	0,057	0,01886	Моноклин.	[111]
51,31	17,10	0,513	1,949	0,0585	0,0195	Кубич.	[111]
99,01	56,88	0,990	1,010	0,475	0,0101	Ромбич.	[77]
69,18	23,06	0,692	1,446	0,043	0,01446	Монокл.	[77]
69,57	23,19	0,696	1,437	0,043	0,0144	Ромбич.	[111]
102,37	49,14	1,024	0,977	0,244	0,00977	Моноклин.	[111]
105,91	57,03	1,059	0,944	0,123	0,00944	Моноклин.	[111]
42,71	25,62	0,427	2,341	0,117	0,02341	Моноклин.	[111]
87,30	52,38	0,873	1,146	0,458	0,01146	Моно- клин.	[24]
91,66	52,38	0,917	1,091	0,458	0,01091		
97,68	46,52	0,977	1,024	0,215	0,01024	Моноклин.	[111]
116,16	58,08	1,162	0,861	0,103	0,00861	Ромбич.	[111]
85,51	51,30	0,855	1,169	0,292	0,01169	Триклин.	[111]
75,71	44,86	0,757	1,321	0,357	0,0132	Ромбич.	[111]
79,04	50,94	0,790	1,265	0,569	0,0126	Тетраг.	[111]
90,67	52,89	0,907	1,103	0,132	0,0110	Ромбич.	[111]
69,35	46,24	0,694	1,442	0,086	0,0144	Ромбич.	[24]
90,13	51,50	0,901	1,110	0,466	0,01110	Моноклин.	[111]
65,81	26,32	0,658	1,519	0,912	0,01519	Моно- клин.	[111]
68,01	26,32	0,680	1,470	0,912	0,01470		
80,85	50,18	0,808	1,238	0,359	0,0124	Гексаг.	[111]
72,60	44,95	0,726	1,377	0,289	0,0138	Гексаг.	[111]
76,07	44,95	0,761	1,314	0,289	0,0131		
123,86	61,93	1,239	0,807	0,032	0,0081	Ромбич.	[24]
76,07	48,91	0,761	1,314	0,184	0,0131	Гексаг.	[24]
86,35	53,59	0,864	1,157	0,336	0,01157	Гексаг.	[24]
69,38	39,21	0,694	1,441	0,663	0,0144	Кубич.	[111]

№ п/п	Минерал и его символ	Количество атомов в формульной единице		Объем элементарной ячейки V_0 μ^3	Объем формульной единицы V_m μ^3
		общее Σn_m^i	аннонов Σn_m^a		
56	Берtrandит <i>Brm</i> (<i>Brt</i>)	17	9	600,47	150,12
57	Бертьерия <i>Brmi</i> (<i>Brtn</i>)	36	18	355,35	355,35
58	Биксбит <i>Bkb</i> (<i>Bkb</i>)	5	3	822,66	51,42
59	Биксбит <i>Bkm</i> (<i>Bkt</i>)	13	7	296,82	148,41
60	Блотит <i>Bl</i> (<i>Bl</i>)	42	24	489,80	489,80
		40	24	489,80	489,80
		44	24	489,80	489,80
		6	4	326,11	81,53
61	Бисмутотанталит <i>Bsm</i> (<i>Bstn</i>)	22	12	809,13	202,28
62	Битнит <i>Btm</i> (<i>Btt</i>)	13	8	1338,89	167,36
63	Битовлит <i>Bum</i> (<i>Byt</i>)	24	14	1771,56	221,44
64	Борацит-β <i>Brc-β</i> (<i>Brc-β</i>)	24	14	880,28	220,07
65	Борацит-α <i>Brc-α</i> (<i>Brc-α</i>)	10	4	5280,56	165,02
66	Борнит-α (около 200° С) <i>Bo-α</i> (<i>Bo-α</i>)	10	4	1305,75	163,22
67	Борнит-β (> 228° С) <i>Bo-β</i> (<i>Bo-β</i>)	20	12	3419,39	213,72
68	Браунит <i>Br</i> (<i>Br</i>)	7	4	1358,24	84,89
69	Среднит <i>Brδ</i> (<i>Brδ</i>)	21	13	564,51	282,26
70	Бритолит <i>Brm</i> (<i>Brt</i>)	10	6	838,51	104,81
71	Броазит <i>Brz</i> (<i>Brz</i>)	3	2	257,33	32,17
72	Брукит <i>Brk</i> (<i>Brk</i>)	5	2	40,64	40,64
73	Брусит <i>Bru</i> (<i>Bru</i>)	20	11	4027,99	503,50
74	Булакиерит <i>Bul</i> (<i>Bu</i>)	6	3	553,74	138,43
75	Бурюнит <i>Burn</i> (<i>Bat</i>)	5	3	1492,66	62,19
76	Бустамит <i>Bust</i> (<i>Bust</i>)	34	16	1166,01	291,50
77	Вавеллит <i>Was</i> (<i>Wav</i>)	8	5	1369,85	85,62
78	Вагнерит <i>Wag</i> (<i>Wag</i>)	25	14	2539,41	317,43
79	Вайрацит <i>Wam</i> (<i>Wat</i>)	14	7	689,27	344,63
80	Валлерит <i>Wam</i> (<i>Vlt</i>)	21	13	679,21	339,61
81	Ванадинит <i>Van</i> (<i>Van</i>)	14	8	261,69	130,84
82	Варвикит <i>Wra</i> (<i>Wrw</i>)	3	2	182,28	45,57
83	Ваасит <i>Vem</i> (<i>Vst</i>)	63	38	2871,65	717,91
84	Везувия <i>Bez</i> (<i>Vez</i>)	67	38	2871,65	717,91
85	Вейдит <i>Wed</i> (<i>Wed</i>)	15	9	416,42	208,21
86	Вермикулит <i>Ver</i> (<i>Ver</i>)	61	32	1398,66	699,33
87	Вермикулит магнезальный <i>MgVer</i> (<i>MgVer</i>)	33	16	1403,52	350,88
88	Вёлерит <i>Woll</i> (<i>Woll</i>)	15	9	764,81	191,20
89	Визит (фосфатгидроавальцит) <i>Vz</i> (<i>Vs</i>)	114	56	2543,30	1271,65
90	Виридин <i>Vur</i> (<i>Vir</i>)	8	5	257,32	64,33
91	Висмут <i>W</i> (<i>Wt</i>)	1		282,85	35,36
		1		70,73	35,36
92	Висмутин <i>Wsm</i> (<i>Bst</i>)	5	3	501,02	125,25
93	Витерит <i>Wum</i> (<i>Wit</i>)	5	3	305,03	76,26
94	Виттихенит <i>Wzm</i> (<i>Wcht</i>)	7	3	528,34	132,08
95	Вишневит 1 <i>Wis</i> (<i>Wis</i>)	46	26	700,32	700,32
		2		733,20	733,20
96	Волноскоит <i>Wolk</i> (<i>Wolk</i>)	63,5	35	733,20	733,20
97	Воллюстит-α <i>Wol</i> (<i>Wo</i>)	~ 32	16	664,28	332,14
98	Вольфенит <i>Wlf</i> (<i>Wlf</i>)	5	3	399,43	66,57
99	Вольфрамит <i>Wlf</i> (<i>Wt</i>)	9	5	1473,44	92,09
100	Вульфенит <i>Wuf</i> (<i>Wuf</i>)	6	4	137,19	68,60
101	Вюрцит <i>Wz</i> (<i>Wz</i>)	6	4	355,45	88,86
102	Гадолинит <i>Gd</i> (<i>Gd</i>)	2	1	80,73	40,37
103	Галаксит <i>Glm</i> (<i>Glt</i>)	17	10	347,93	173,97
		7	4	567,66	70,96

Количество атомов в объеме 1000 Å ³ минерала		Коэффициенты пересчета				Связиония	Литературные источники*
общее ΣF_m^1	анионов ΣF_m^2	q_m	$1/q_m$	Q_m	w_{im}^1		
113,24	59,95	1,132	0,883				
101,31	50,65	1,013	0,987	0,150	0,0088	Ромбич.	[111]
97,25	58,35	0,972	1,028	0,355	0,00987	Моноклин.	[111]
87,59	47,17	0,876	1,142	0,0514	0,0103	Кубич.	[77]
85,75	49,00	0,858	1,166	0,148	0,01142	Моноклин.	[111]
81,67	49,00	0,817	1,224	0,490	0,01166		[24]
89,83	49,00	0,898	1,113	0,490	0,01224		[24]
73,59	49,06	0,736	1,359	0,490	0,01113	Моноклин.	[24]
108,76	59,32	1,088	0,919	0,082	0,01359		[111]
77,68	47,80	0,777	1,287	0,202	0,00919	Ромбич.	[111]
108,38	63,22	1,084	0,823	0,167	0,01287	Моноклин.	[111]
109,06	63,61	1,091	0,917	0,2214	0,0082	Триклин.	[111]
60,60	24,24	0,606	1,650	0,220	0,0092	Кубич.	[111]
61,27	24,51	0,613	1,631	0,165	0,0165	Ромбич.	[111]
93,58	56,15	0,936	1,068	0,163	0,0163	Ромбич.	[77]
82,46	47,12	0,825	1,213	0,214	0,0107	Кубич.	[77]
74,40	46,05	0,744	1,344	0,085	0,0121	Тетраг.	[77]
95,41	57,24	0,954	1,048	0,282	0,01344	Ромбич.	[111]
93,26	62,18	0,933	1,072	0,105	0,0105	Гексаг.	[111]
123,04	49,22	1,230	0,813	0,032	0,0107	Ромбич.	[111]
39,72	21,85	0,397	2,517	0,0406	0,00813	Гексаг.	[24]
43,34	21,67	0,433	2,307	0,504	0,02517	Моноклин.	[111]
80,39	48,24	0,804	1,244	0,138	0,0231	Ромбич.	[77]
116,64	54,89	1,166	0,857	0,062	0,01244	Триклин.	[24]
93,44	58,40	0,934	1,070	0,291	0,0086	Ромбич.	[111]
78,76	44,10	0,788	1,269	0,086	0,01070	Моноклин.	[111]
40,62	20,31	0,406	2,462	0,317	0,01269	Моноклин.	[111]
61,69	38,28	0,617	1,621	0,345	0,0246	Ромбич.	[111]
107,00	61,14	1,070	0,935	0,340	0,01621	Гексаг.	[111]
65,83	43,89	0,658	1,519	0,131	0,00935	Ромбич.	[111]
87,75	52,93	0,878	1,140	0,0456	0,0152	Кубич.	[77]
93,33	52,93	0,933	1,072	0,718	0,0114		[24]
72,04	43,22	0,720	1,388	0,718	0,0107	Тетраг.	
87,23	45,76	0,872	1,146	0,208	0,01388	Гексаг.	[111]
94,05	45,60	0,941	1,063	0,699	0,01146	Моноклин.	[24]
78,45	47,07	0,784	1,275	0,351	0,01063	Моноклин.	[73], [111]
89,65	44,03	0,896	1,115	0,191	0,01275	Моноклин.	[111]
124,44	77,72	1,244	0,804	1,2716	0,0112	Кубич.	[111]
28,28		0,283	3,536	0,643	0,00804	Ромбич.	[111]
28,28		0,283	3,536	0,035	0,03536	Ромбоздр.	[111]
39,92	23,95	0,399	2,505	0,035	0,03536		[111]
65,57	39,34	0,656	1,525	0,125	0,0251	Ромбич.	[111]
53,00	22,71	0,530	1,887	0,076	0,0152	Ромбич.	[24]
65,68	37,13	0,675	1,522	0,132	0,0189	Ромбич.	[77]
86,61	47,74	0,866	1,143	0,700	0,01522		[24]
96,34	48,17	0,963	1,038	0,733	0,01143	Гексаг.	[24]
75,11	45,06	0,751	1,331	0,332	0,01038	Моноклин.	[73], [111]
97,73	54,29	0,977	1,023	0,067	0,01331	Триклин.	[24]
87,47	58,31	0,875	1,143	0,092	0,01023	Моноклин.	[111]
67,52	45,01	0,675	1,481	0,069	0,01143	Моноклин.	[111]
49,55	24,77	0,496	2,016	0,089	0,0148	Тетраг.	[111]
97,72	57,48	0,977	1,024	0,0404	0,0202	Гексаг.	[111]
98,65	56,37	0,986	1,014	0,174	0,01024	Моноклин.	[111]
				0,0710	0,0101	Кубич.	[24]

№ п.п.	Минерал и его символ	Количество атомов в формульной единице		Объем элементарной ячейки Å^3	Объем формульной единицы Å^3
		общее $\sum n_i$	аннонов $\sum n_a$		
104	Галевит <i>Gal</i> (Ca)	2	1	209,58	52,40
105	Галит <i>Hal</i> (Na)	2	1	179,44	44,86
106	Галлувант <i>Gal</i> (Hls)	46	22	455,62	455,62
107	Ганит <i>Gn</i> (Gn)	7	4	527,51	65,94
108	Гавофллит <i>Gnt</i> (Gnt)	26	14	943,38	235,84
		28	14	943,38	235,84
109	Гардиеновит <i>Gdm</i> (Hdt)	12	7	308,11	154,06
110	Гармотом <i>Grm</i> (Hrm)	43	22	988,60	494,30
111	Гаусматит <i>Gaus</i> (Haus)	7	4	311,45	77,86
112	Гаюин <i>Gau</i> (Hau)	45	28	758,55	758,55
		54	32	758,55	758,55
113	Гваршинт <i>Gvn</i> (Gvn)	15	9	781,74	195,44
114	Геденбергит <i>Ged</i> (Hed)	10	6	452,79	113,20
115	Гейкилит <i>Geik</i> (Geik)	5	3	316,09	158,04
116	Гейландит <i>Geil</i> (Heul)	46	24	2112,37	528,09
117	Гелевит <i>Gel</i> (Ge)	12	7	300,41	150,21
118	Гельвин <i>Gel</i> (Hlv)	46	26	553,39	553,39
		46	26	640,50	640,50
119	Гематит- α <i>Gem</i> (Hm)	5	3	100,68	50,34
120	Гемиморфит <i>Gmf</i> (Hmph)	20	10	461,05	230,52
121	Гентгельвин <i>Geil</i> (Ghlv)	46	26	535,39	535,39
122	Геокронит <i>Gkt</i> (Gkt)	15	9	2154,70	359,12
123	Герсдорфит <i>Gdfm</i> (Gsd)	3	1	186,17	46,54
124	Герцинит <i>Grz</i> (Hrz)	7	4	538,36	67,29
125	Гессит <i>Ges</i> (Hest)	3	1	271,32	67,83
126	Гетеролит <i>Gta</i> (Htl)	7	4	303,18	75,80
127	Гетат- α <i>Gem</i> (Ht)	8	4	141,64	35,41
128	Гпалофан <i>Gpa</i> (Hpal)	13	8	714,87	178,72
129	Гиббсит <i>Gib</i> (Gibs)	7	3	424,43	53,05
130	Гибшит (гидрогроссуляр) <i>Gibsh</i> (Hibs)	23	12	1736,65	217,08
		23	12	1798,04	224,76
131	Гидроксил-анатит <i>Gan</i> (Har)	22	13	526,73	263,37
132	Гидромусковит <i>Gmu</i> (Hms)	21	12	930,87	232,72
		25	13	930,87	232,72
133	Гидропарагошит <i>Gpar</i> (Hprg)	21	12	888,73	222,18
		25	13	888,73	222,18
134	Гиперстен <i>Gip</i> (Hy)	5	3	843,87	52,74
135	Гипс <i>Gp</i> (Gp)	12	6	496,09	124,02
136	Глазерит <i>Glz</i> (Gls)	13	8	202,50	202,50
137	Глаукоцит <i>Glz</i> (Cln)	45 (?)	25 (?)	471,38	471,38
138	Глаукофан <i>Glph</i> (Ctph)	41	24	882,93	441,46
139	Глаукохронит <i>Glkt</i> (Clkt)	7	4	356,26	89,06
140	Гомилит <i>Gmt</i> (Hmt)	17	10	346,97	86,74
141	Гопьерит <i>Grt</i> (Grt)	36	18	1490,29	372,57
142	Гортонолит <i>Gtat</i> (Htl)	7	4	300,64	75,16
143	Грамматит <i>Gram</i> (Gram)	41	24	904,30	452,15
144	Грауцит <i>Grau</i> (Crou)	4	2	142,42	35,61
145	Графит-2H <i>Gr</i> (C)	1		35,15	8,79
146	Графит-3R <i>Gr</i> (C)	1		52,71	8,788
147	Грипалит <i>Grip</i> (Gren)	35,5	18	384,36	384,36
148	Гроссуляр <i>Gros</i> (Gros)	20	12	1664,43	208,05
149	Грюнерит <i>Grun</i> (Grun)	41	24	911,32	455,66
150	Гудмундит <i>Gud</i> (Gud)	3	2	397,71	49,71

Количество атомов в объеме 1000Å ³ минерала		Коэффициенты пересчета				Сингония	Литературные источники *
общее ΣF_m^i	анионов ΣF_m^a	q_m	$1/q_m$	Q_m	W_{1m}^j		
38,17	19,08	0,382	2,620	0,0524	0,0262	Кубич.	[24]
44,58	22,29	0,446	2,242	0,0449	0,02242	Кубич.	[111]
100,96	48,29	1,010	0,990	0,456	0,00990	Моноклин.	[111]
106,16	60,66	1,062	0,942	0,0659	0,00942	Кубич.	[24]
110,24	59,36	1,102	0,907	0,236	0,00907	Моноклин.	[73], [111]
118,72	59,36	1,187	0,842	0,236	0,00842		
77,90	45,44	0,779	1,284	0,154	0,0128	Тетраг.	[111]
86,99	44,51	0,870	1,150	0,494	0,01150	Моноклин.	[111]
89,90	51,37	0,899	1,112	0,078	0,0111	Тетраг.	[73]
59,32	36,91	0,593	1,686	0,7586	0,0169	Кубич.	[111]
71,19	42,19	0,712	1,405	0,7586	0,0141		
76,75	46,05	0,768	1,303	0,185	0,01303	Триклин.	[111]
88,34	53,00	0,883	1,132	0,113	0,01132	Моноклин.	[24]
31,64	18,98	0,316	3,164	0,158	0,03164	Гексаг.	[73]
87,11	45,45	0,871	1,148	0,528	0,01148	Моноклин.	[111]
79,89	46,60	0,799	1,252	0,150	0,0125	Тетраг.	[24]
83,12	40,98	0,831	1,203	0,5534	0,01203	Кубич.	[111]
71,82	40,59	0,718	1,392	0,6405	0,01392		
99,33	59,60	0,993	1,007	0,050	0,01007	Ромбоэдр.	[24]
86,76	43,38	0,868	1,153	0,231	0,0115	Ромбич.	[111]
85,92	48,56	0,859	1,164	0,535	0,01164	Кубич.	[111]
41,77	25,06	0,418	2,394	0,359	0,02394	Моноклин.	[73]
64,46	21,49	0,645	1,551	0,0465	0,0155	Кубич.	[111]
104,02	59,44	1,040	0,961	0,0673	0,00961	Кубич.	[24]
44,23	14,74	0,442	2,261	0,068	0,02261	Моноклин.	[111]
92,35	52,77	0,924	1,084	0,076	0,0108	Тетраг.	[111]
225,92	112,96	2,259	0,443	0,035	0,0044	Ромбич.	[111]
72,74	44,76	0,727	1,375	0,179	0,01375	Моноклин.	[111]
131,94	56,55	1,319	0,758	0,053	0,00758	Моноклин.	[24]
105,95	55,28	1,060	0,944	0,217	0,0094	Кубич.	[111]
102,33	53,39	1,023	0,977	0,225	0,0098		
83,53	49,36	0,835	1,197	0,263	0,01197	Гексаг.	[24]
90,24	51,56	0,902	1,108	0,233	0,01108	Моноклин.	[111]
107,43	55,86	1,074	0,931	0,233	0,00931		
94,52	54,01	0,945	1,058	0,222	0,01058	Моноклин.	[111]
112,52	58,51	1,125	0,889	0,222	0,00889		
94,80	56,88	0,948	1,055	0,0525	0,0106	Ромбич.	[111]
96,76	48,38	0,968	1,034	0,124	0,01034	Моноклин.	[24]
64,20	39,50	0,642	1,558	0,202	0,01558	Гексаг.	[111]
95,46	53,04	0,955	1,048	0,471	0,01048	Моноклин.	[24]
92,87	54,36	0,929	1,077	0,441	0,01077	Моноклин.	[24]
78,59	44,91	0,786	1,272	0,089	0,0127	Ромбич.	[111]
195,98	115,28	1,960	0,510	0,087	0,00510	Моноклин.	[111]
96,62	48,31	0,966	1,035	0,373	0,01035	Моноклин.	[111]
93,14	53,22	0,931	1,074	0,075	0,0107	Ромбич.	[111]
90,68	53,08	0,907	1,102	0,452	0,01102	Моноклин.	[13]
112,34	55,17	1,123	0,890	0,036	0,0089	Ромбич.	[111]
113,80		1,138	0,878	0,0088	0,00878	Гексаг.	[111]
113,82		1,138	0,878	0,00879	0,00878	Гексаг.	[111]
184,72	93,66	1,847	0,541	0,384	0,00541	Моноклин.	[24], [73]
96,13	57,68	0,961	1,040	0,208	0,0104	Кубич.	[24]
89,98	52,67	0,900	1,111	0,456	0,01111	Моноклин.	[24]
60,35	40,23	0,604	1,656	0,050	0,01656	Моноклин.	[77]

№ п/п	Минерал и его символ	Количество атомов в формульной единице		Объем элементарной ячейки V_m	Объем формульной единицы V_m
		общее Σn_m^i	явновое Σn_m^a		
151	Гумит <i>Гум</i> (<i>Gum</i>)	24—26	14	1011,51	252,88
152	Гюблерит <i>Гюб</i> (<i>Hüb</i>)	24—26	14	1017,57	254,39
153	Гюбельлит <i>Гюб</i> (<i>Gmb</i>)	6	4	139,35	69,67
		21	12	940,34	235,09
154	Даводит <i>Дад</i> (<i>Dvd</i>)	25	13	940,34	235,09
155	Даналит <i>Дан</i> (<i>Dnl</i>)	19	12	1943,56	215,95
156	Данбурит <i>Дан</i> (<i>Dnb</i>)	46	26	551,37	551,37
157	Датолит <i>Дат</i> (<i>Dat</i>)	13	8	545,07	136,27
158	Дафнит <i>Даф</i> (<i>Daph</i>)	9	5	353,86	88,40
159	Десмин(стильбит) <i>Дес</i> (<i>Des</i>)	36	18	1431,03	357,76
		49	25	2171,65	542,91
		49	25	4361,06	545,13
160	Джемсовит <i>Джм</i> (<i>Jm</i>)	24	19	1200,66	600,33
161	Джиллеспит <i>Джлт</i> (<i>Glj</i>)	16	10	906,35	226,59
162	Дибантит <i>Дбит</i> (<i>Dbit</i>)	36	18	1390,60	347,65
163	Диспор <i>Дсп</i> (<i>Dsp</i>)	4	2	117,71	29,43
164	Дозаналит <i>Дз</i> (<i>Ds</i>)	5	3	438,98	438,98
165	Диксит <i>Дик</i> (<i>Dc</i>)	34	18	659,98	329,99
166	Дипопсид <i>Ди</i> (<i>Di</i>)	10	6	437,85	109,46
167	Дискразит <i>Дск</i> (<i>Dsk</i>)	4	1	75,37	75,37
168	Дистей(клянит) <i>Дист</i> (<i>Dist</i>)	8	5	288,71	72,18
169	Доломит <i>Дол</i> (<i>Dol</i>)	10	6	106,84	53,42
		10	6	216,09	108,04
		10	6	107,98	107,98
170	Дривит <i>Дрв</i> (<i>Drv</i>)	50	31	1589,74	529,92
		54	31	1589,74	529,92
171	Дюмортиерит <i>Дюмт</i> (<i>Dumt</i>)	29	18	1119,90	279,97
172	Дэвиит <i>Дэв</i> (<i>Dvn</i>)	54	32	763,98	763,98
173	Етманит <i>Ет</i> (<i>Yel</i>)	51	29	550,98	550,98
174	Жадеит <i>Жад</i> (<i>Jd</i>)	10	6	408,92	102,23
175	Жедрит <i>Жед</i> (<i>Ged</i>)	41	24	1791,03	447,76
		39	24	1791,03	447,76
176	Золото <i>Ау</i> (<i>Au</i>)	1		67,83	16,96
177	Зуниит <i>Зун</i> (<i>Zun</i>)	57	39	2749,88	687,47
		75	39	2749,88	687,47
178	Иллит <i>Илл</i> (<i>Ill</i>)	40	24	465,66	465,66
179	Ильваит <i>Иль</i> (<i>Ilv</i>)	16	9	679,77	169,94
180	Ильменит <i>Ильм</i> (<i>Ilm</i>)	5	3	105,47	52,74
181	Иорданит <i>Иор</i> (<i>Jor</i>)	13	7	2091,02	298,72
182	Иохансенит <i>Иох</i> (<i>Joh</i>)	10	6	452,35	113,09
183	Иодерит <i>Иод</i> (<i>Yod</i>)	8	5	327,63	81,91
184	Казалит <i>Каз</i> (<i>Kaz</i>)	24	10	607,34	151,83
185	Калаверит <i>Кал</i> (<i>Clv</i>)	3	1	161,08	80,54
186	Калиофилит <i>Кфл</i> (<i>Kp</i>)	7	4	5459,80	101,11
187	Кальдерит <i>Кад</i> (<i>Cld</i>)	20	12	1651,40	206,42
188	Кальселит <i>Ксл</i> (<i>Ksl</i>)	7	4	201,91	100,95
189	Кальцит <i>Кал</i> (<i>Cc</i>)	5	3	122,36	61,18
		5	3	244,60	61,15
190	Кавкринит <i>Кан</i> (<i>Can</i>)	44	27	705,82	705,82
		53	30	705,82	705,82
		44	27	733,99	733,99
		53	30	733,99	733,99

Количество атомов в объеме 1000А ³ минерала		Коэффициенты пересчета				Сингония	Литературные источники*
общее ΣF_m^I	вианов ΣF_m^A	q_m	$1/q_m$	Q_m	w_{im}^I		
94,91	55,03	0,949	1,054	0,253	0,0105	Ромбич.	[24], [111]
94,34	55,03	0,943	1,060	0,254	0,0106		[24], [111]
86,12	57,41	0,861	1,161	0,070	0,01161	Моноклин.	[111]
89,33	51,04	0,893	1,119	0,235	0,01119		[111]
106,34	55,30	1,063	0,940	0,235	0,00940	Моноклин.	[111]
87,08	55,57	0,880	1,136	0,216	0,01136		Гексаг.
83,43	47,16	0,834	1,199	0,5514	0,0120	Кубич.	[111]
95,40	58,71	0,954	1,048	0,130	0,0105	Ромбич.	[111]
101,73	56,52	1,017	0,983	0,088	0,00983	Моноклин.	[24]
100,63	50,31	1,006	0,994	0,358	0,0099	Ромбич.	[111]
90,25	46,05	0,902	1,108	0,543	0,01108	Моноклин.	[111]
89,89	45,86	0,899	1,112	0,545	0,01112		[111]
39,98	31,65	0,400	2,501	0,600	0,02501	Моноклин.	[77]
70,61	44,13	0,706	1,416	0,227	0,0142	Тетраг.	[111]
103,55	51,78	1,036	0,966	0,348	0,00966	Моноклин.	[111]
135,92	67,96	1,359	0,736	0,029	0,0074	Ромбич.	[24]
11,39	6,83	0,114	8,772	0,438	0,08772	Кубич.	[111]
103,03	54,55	1,030	0,971	0,330	0,00971	Моноклин.	[24]
91,36	54,81	0,914	1,095	0,109	0,01095	Моноклин.	[24]
53,07	13,27	0,531	1,884	0,075	0,0188	Ромбич.	[111]
110,84	69,27	1,108	0,902	0,072	0,00902	Триклин.	[24]
187,20	112,32	1,872	0,534	0,053	0,00534	Ромбоздр.	[24]
92,55	55,53	0,926	1,080	0,108	0,01080		[111]
92,61	55,56	0,926	1,080	0,108	0,01080	Гексаг.	[111]
94,35	58,50	0,943	1,071	0,530	0,01071		[24]
101,89	58,50	1,019	0,981	0,530	0,00981	Ромбич.	[111]
103,58	64,29	1,036	0,966	0,280	0,0097	Гексаг.	[111]
70,678	41,88	0,707	1,414	0,764	0,01414	Триклин.	[111]
92,56	52,63	0,926	1,080	0,551	0,0108	Моноклин.	[24]
97,82	58,69	0,978	1,022	0,102	0,01022	Ромбич.	[24]
91,57	53,60	0,916	1,092	0,448	0,0109		[111]
87,10	53,60	0,871	1,148	0,448	0,0115	Кубич.	[111]
58,97		0,590	1,696	0,0170	0,0170		[111]
82,91	56,73	0,829	1,206	0,688	0,0121	Кубич.	[111]
109,10	56,73	1,091	0,917	0,688	0,0092		[111]
85,90	51,54	0,859	1,164	0,466	0,01164	Моноклин.	[24]
94,15	52,96	0,942	1,062	0,170	0,0106	Ромбич.	[111]
94,81	56,89	0,948	1,055	0,053	0,01055	Ромбоздр.	[24]
43,52	23,43	0,435	2,298	0,299	0,02298	Моноклин.	[77]
88,43	53,06	0,884	1,131	0,113	0,01131	Моноклин.	[24]
97,67	61,04	0,977	1,024	0,082	0,01024	Моноклин.	[111]
153,06	65,86	1,581	0,632	0,152	0,00632	Моноклин.	[111]
37,25	12,42	0,372	2,685	0,081	0,02685	Моноклин.	[111]
69,24	39,56	0,692	1,445	0,1011	0,01445	Гексаг.	[111]
96,89	58,13	0,969	1,032	0,206	0,01032	Кубич.	[111]
69,33	39,62	0,693	1,443	0,101	0,01443	Гексаг.	[111]
81,73	49,04	0,817	1,224	0,061	0,01224	Ромбоздр.	[24], [111]
81,77	49,06	0,818	1,223	0,061	0,01223		[111]
82,33	38,24	0,623	1,605	0,706	0,01605	Гексаг.	[111]
75,09	42,50	0,751	1,332	0,706	0,01332		[111]
59,94	36,79	0,599	1,669	0,734	0,01669	Гексаг.	[111]
72,21	40,86	0,722	1,385	0,734	0,01385		[111]

№ п/п	Минерал и его символ	Количество атомов в формульной единице		Объем элементарной ячейки $V_{\text{м}}$	Объем формульной единицы $V_{\text{м}}$
		общее $\Sigma n_{\text{м}}$	анкионов $\Sigma n_{\text{м}}$		
191	Каолинит <i>Каол</i> (Kaol)	34	18	981,62	490,81
		34	18	329,14	329,14
192	Карбонатанатит <i>Кант</i> (Cant)	17	9	519,69	259,82
193	Киршиппин <i>Кар</i> (Kar)	82	48	905,56	905,56
		84	48	905,56	905,56
194	Карнитит <i>Крнт</i> (Cnit)	42	15	591,22	295,61
195	Карфонит <i>Крф</i> (Krfh)	19	10	1428,49	178,56
196	Касситерит <i>Кас</i> (Cas)	3	2	71,15	35,57
197	Катаплектит <i>Кмп</i> (Ktp)	21	11	477,54	238,77
198	Каттьерит <i>Ктп</i> (Citr)	3	2	168,20	42,05
199	Кварц- α <i>Кв</i>	3	2	112,96	37,65
200	Кварц- β <i>Кв-β</i> (Q- β)	3	2	118,08	39,36
201	Керсутит <i>Кер</i> (Ker)	41	24	935,79	467,90
202	Киванит (дистен) <i>Ки</i> (Ki)	8	5	288,72	72,18
203	Кимцит <i>Ким</i> (Kim)	20	12	1934,43	241,80
204	Киповарь <i>Кип</i> (Ci)	2	1	141,36	47,11
205	Кирштейнит <i>Кип</i> (Ktr)	7	4	347,27	86,82
206	Клингоумит «Гум» (kGu)	31	18	655,45	327,73
		33	18	655,45	327,73
207	Клинхоплог <i>кХлр</i> (Kl)	36	18	1358,50	339,63
		36	18	1399,68	349,92
208	Клиноцолазит <i>кЦз</i> (kZo)	22	13	454,43	227,22
		22	13	457,47	228,74
209	Клиноэстатит «Эн» (kEn)	5	3	418,44	52,31
210	Клиттонит <i>Клт</i> (Clit)	44	24	900,73	450,36
211	Кнебельит <i>Кнб</i> (Knb)	7	4	307,92	76,98
		7	4	319,77	79,94
212	Кобальтин <i>Коб</i> (Cob)	3	1	176,56	44,14
213	Кобальтпенталандит <i>Кпп</i> (Kpn)	17	8	990,73	247,68
214	Ковеллин <i>Ков</i> (Kov)	2	1	199,05	33,17
215	Козалит <i>Коз</i> (Cos)	9	5	1836,04	229,50
216	Колумбит <i>Колм</i> (Col)	9	6	416,92	104,23
217	Кордиерит <i>Корд</i> (Cord)	29	18	1559,18	389,79
218	Корперушин <i>Крп</i> (Krp)	35	21	1457,55	364,39
		42	22	1457,55	364,39
219	Корсетит <i>Крп</i> (Crt)	14	7	1090,72	136,34
220	Корунд- α <i>Кор</i> (Co)	5	3	254,65	127,33
221	Корунд- α <i>Кор</i> (Co)	5	3	85,00	42,50
222	Корунд- β <i>Кор-β</i> (Co- β)	5	3	338,81	42,35
223	Корундофиллит <i>Крф</i> (Krfh)	36	18	705,02	352,51
224	Кюффицит <i>Кюф</i> (Cuf)	6	4	303,91	75,98
		9	4	303,91	75,98
225	Кюэнт (кюэнт) <i>Ксм</i> (Cst)	3	2	566,78	35,42
226	Криолит- α <i>Крил</i>	10	6	240,40	120,20
227	Кристобалит- α <i>Крб</i>	3	2	171,18	42,79
228	Кристобалит- β <i>Крб-β</i> (Crb- β)	3	2	362,47	45,31
229	Кронстедтит (кросштедтит) <i>Крмд</i> (Crt δ)	36	18	1108,60	369,53
230	Ксавтофиллит <i>Ксф</i> (Xth)	44	24	452,89	452,89
		44	24	465,87	465,87
231	Ксенотим <i>Кс</i> (Xen)	6	4	286,73	71,68
232	Ксенолит <i>Ксм</i> (Xon)	33	19	855,71	427,85
233	Кубанит <i>Куб</i> (Cb)	6	3	447,53	111,88

Количество атомов в объеме 1000\AA^3 минерала		Коэффициенты пересчета				Спигония	Литературные источники
общее ΣF_m^1	аннонов ΣF_m^a	q_m	$1/q_m$	Q_m	$W_{\text{гм}}$		
69,27	36,67	0,693	1,443	0,491	0,01443	Моноклин.	[111]
103,30	54,69	1,033	0,968	0,329	0,00968	Триклин.	[24]
65,43	34,64	0,654	1,529	0,260	0,01529	Гексаг.	[24]
90,55	53,01	0,906	1,104	0,906	0,01104	Моноклин.	[111]
92,76	53,01	0,928	1,078	0,906	0,01078		[111]
142,08	50,74	1,421	0,704	0,296	0,00704	Моноклин.	[111]
106,41	56,00	1,064	0,940	0,179	0,0094	Ромбич.	[111]
84,33	56,22	0,843	1,186	0,036	0,0119	Тетраг.	[24]
87,95	46,07	0,880	1,136	0,239	0,01136	Гексаг.	[111]
71,34	47,56	0,713	1,402	0,0421	0,0140	Кубич.	[77]
79,67	53,11	0,797	1,254	0,0377	0,01254	Гексаг.	[111]
76,22	50,81	0,762	1,312	0,0394	0,01312	Гексаг.	[111]
87,63	51,29	0,876	1,141	0,468	0,01141	Моноклин.	[24]
110,83	69,27	1,108	0,902	0,072	0,00902	Триклин.	[24]
82,71	49,63	0,827	1,209	0,242	0,0121	Кубич.	[111]
42,44	21,22	0,424	2,358	0,0471	0,02358	Гексаг.	[111]
80,63	46,07	0,806	1,240	0,087	0,0124	Ромбич.	[111]
94,59	54,92	0,948	1,057	0,328	0,01057	Моноклин.	[24]
100,69	54,92	1,007	0,993	0,328	0,00993	Моноклин.	[24]
108,00	53,00	1,060	0,943	0,340	0,00943	Моноклин.	[111]
102,88	51,44	1,029	0,972	0,350	0,00972		[111]
96,82	57,21	0,968	1,033	0,227	0,01033	Моноклин.	[24]
96,18	56,83	0,962	1,040	0,229	0,01040		[24]
95,59	57,36	0,956	1,046	0,0525	0,01046	Моноклин.	[111]
97,70	53,29	0,977	1,024	0,450	0,01024	Моноклин.	[24]
90,93	51,96	0,909	1,100	0,077	0,0110	Ромбич.	[24]
87,56	50,04	0,876	1,142	0,080	0,0114		[24]
67,97	22,66	0,680	1,471	0,0441	0,0147	Кубич.	[111]
63,64	32,30	0,686	1,457	0,2477	0,0146	Кубич.	[111]
60,28	30,14	0,603	1,658	0,0332	0,01658	Гексаг.	[77]
39,21	21,79	0,392	2,550	0,230	0,0255	Ромбич.	[77]
86,35	57,56	0,864	1,158	0,104	0,0116	Ромбич.	[111]
74,40	46,18	0,744	1,344	0,390	0,0134	Ромбич.	[24]
96,05	57,63	0,961	1,041	0,364	0,01041	Ромбич.	[111]
115,26	60,38	1,152	0,868	0,364	0,00868		[111]
102,68	51,34	1,027	0,974	0,136	0,0097	Ромбич.	[111]
39,26	23,56	0,393	2,544	0,127	0,02544	Гексаг.	[24]
117,64	70,59	1,176	0,850	0,042	0,00850	Ромбоздр.	[24]
118,06	70,84	1,181	0,847	0,042	0,00847	Ромбоздр.	[111]
102,12	51,06	1,021	0,979	0,352	0,00979	Моноклин.	[111]
78,97	52,64	0,790	1,266	0,076	0,0127	Тетраг.	[111]
118,46	52,64	1,185	0,844	0,076	0,0084		[111]
84,69	56,46	0,847	1,181	0,035	0,01181	Моноклин.	[111]
83,20	49,92	0,832	1,202	0,120	0,01202	Моноклин.	[111]
70,10	46,74	0,701	1,426	0,043	0,0143	Тетраг.	[111]
66,21	44,14	0,662	1,510	0,0453	0,0151	Кубич.	[111]
97,42	48,71	0,974	1,027	0,370	0,01027	Моноклин.	[24]
97,15	52,99	0,972	1,029	0,453	0,01029	Моноклин.	[24]
94,45	51,52	0,944	1,059	0,466	0,01059		[24]
83,70	55,80	0,837	1,195	0,072	0,0120	Тетраг.	[111]
77,13	44,41	0,771	1,297	0,428	0,01297	Моноклин.	[111]
53,63	26,81	0,536	1,865	0,112	0,0186	Ромбич.	[111]

№ п/п	Минерал в его символ	Количество атомов в формульной единице		Объем анион-тарной ячейки $V_{\text{ан}}$	Объем формул-ной единицы $V_{\text{м}}$
		общее $\Sigma n_{\text{м}}$	анионов $\Sigma n_{\text{м}}$		
234	Кукент <i>Kyk</i> (<i>Cook</i>)	35	18	1304,64	326,16
235	Куммингтонит <i>Kym</i> (<i>Kum</i>)	40	24	902,10	451,05
236	Куприт <i>Kyp</i> (<i>Cup</i>)	3	1	76,77	38,38
237	Купферрит <i>Kkf</i> (<i>Kpf</i>)	41	24	871,38	435,69
238	Кутвагарит <i>Kng</i> (<i>Kng</i>)	10	6	110,65	110,65
239	Лабрадор <i>Lb</i> , <i>Plbo</i> (<i>Lb</i> , <i>Plbo</i>)	13	8	1335,11	166,89
240	Лазулит <i>Laz</i> (<i>Laz</i>)	16	10	323,73	161,87
241	Лазурит <i>Laz</i> (<i>Laz</i>)	46	26	748,61	748,61
		54	32	748,61	748,61
242	Лампрофилаит <i>Lam</i> (<i>Lam</i>)	30	18	722,40	361,20
		32	18	722,40	361,20
243	Ларнит <i>Lrn</i> (<i>Lrn</i> , <i>Cx</i>)	7	4	342,69	85,67
244	Левин <i>Lvn</i> (<i>Lvn</i>)	37	18	3512,28	390,03
245	Лейкофан <i>Lfn</i> (<i>Lph</i>)	12	7	545,03	136,26
		13	7	545,03	136,26
		12	7	545,03	136,26
		13	7	545,03	136,26
246	Лейцит- α <i>Lc</i> (<i>Lc</i>)	10	6	2355,08	147,19
247	Лейцит- β <i>Lc</i> - β (<i>Lc</i> - β)	10	6	2422,30	151,39
248	Леллингит <i>Lela</i> (<i>Lob</i>)	3	2	88,58	44,29
249	Лепидокрокит <i>Ldk</i> (<i>dk</i>)	4	2	148,38	37,10
250	Лепидомит <i>Lpd</i> (<i>Lep</i>)	39	24	489,80	489,80
		44	24	489,80	489,80
		39	24	965,71	482,85
		44	24	965,71	482,85
		39	24	729,69	243,23
		44	24	729,69	243,23
251	Лизардит (серпентин) <i>Lzd</i> (<i>Lzd</i>)	18	9	355,45	177,72
				355,95	177,98
252	Ловезит <i>Lvt</i> (<i>Lvt</i>)	15	8	739,14	184,79
253	Ловозерит <i>Lvr</i> (<i>Lur</i>)	34,5	18,5	782,80	391,40
254	Ломбардит <i>Lmd</i> (<i>Lmd</i>)	22	13	1489,74	248,29
255	Ломонит <i>Lom</i> (<i>Lom</i>)	31	16	1378,47	344,62
256	Лонгванит <i>Lngm</i> (<i>Lngt</i>)	20	12	1285,56	214,26
257	Лопарит <i>Lop</i> (<i>Lop</i>)	5	3	438,98	54,87
258	Лосопит <i>Lvs</i> (<i>Lvs</i>)	19	10	692,84	173,21
		19	10	658,59	164,65
259	Лушит <i>Lush</i> (<i>Lush</i>)	5	3	447,17	55,89
260	Людвигит <i>Lud</i> (<i>Lud</i>)	9	5	347,07	86,77
261	Люсацит <i>Lsk</i> (<i>Lsk</i>)	39	24	742,60	371,30
		41	24	742,60	371,30
262	Маггемит <i>Mgm</i> (<i>Mgm</i>)	5	3	573,86	47,82
263	Магнесиоферрит <i>Mfm</i> (<i>Mft</i>)	7	4	589,11	73,64
264	Магнесиохромит <i>Mxrm</i> (<i>Mcm</i>)	7	4	578,84	72,36
265	Магнетит <i>Mgs</i> (<i>Mgs</i>)	5	3	92,99	46,49
		5	3	180,84	45,21
266	Магнетит <i>Mm</i> (<i>Mt</i>)	7	4	591,86	73,98
267	Малахит <i>Mlx</i> (<i>Ml</i>)	10	5	362,06	90,52
268	Мавандонит <i>Mnd</i> (<i>Mnd</i>)	35	18	658,25	329,12
269	Манганит <i>Mni</i> (<i>Mnt</i>)	4	2	266,20	33,28
270	Манганозит <i>Mns</i> (<i>Mns</i>)	2	1	87,53	21,88
271	Маргарит <i>Marg</i> (<i>Marg</i>)	42	24	888,92	444,46

Количество атомов в объеме 1000 Å ³ минерала		Коэффициенты пересчета				Синония	Литературные источники*
общее ΣF_m^1	аннионов ΣF_m^a	q_m	$1/q_m$	Q_m	W_{im}^1		
107,31	55,19	1,073	0,932	0,326	0,00932	Моноклин.	[111]
88,68	53,21	0,887	1,127	0,451	0,01127	Моноклин.	[111]
78,16	26,05	0,782	1,279	0,0384	0,0128	Кубич.	[77]
94,10	55,08	0,941	1,063	0,436	0,01063	Моноклин.	[13]
90,38	54,23	0,904	1,106	0,111	0,01106	Ромбоэдр.	[111]
77,90	47,94	0,779	1,284	0,167	0,01284	Триглон.	[111]
98,85	61,78	0,989	1,011	0,162	0,01011	Моноклин.	[111]
61,45	34,73	0,614	1,628	0,7486	0,0163	Кубич.	[111]
72,13	42,75	0,721	1,386	0,7486	0,0139		[111]
83,06	49,83	0,831	1,204	0,361	0,0120	Ромбич.	[111]
88,59	49,83	0,886	1,129	0,361	0,0113		[111]
81,71	46,69	0,817	1,224	0,086	0,01224	Моноклин.	[111]
94,81	46,11	0,948	1,054	0,390	0,01054	Гексаг.	[111]
88,07	51,37	0,881	1,135	0,136	0,0114	Ромбич.	[111]
95,41	51,37	0,954	1,048	0,136	0,0105	Ромбич.	[111]
88,07	51,37	0,881	1,135	0,136	0,0114	Тетраг.	[111]
95,41	51,37	0,954	1,048	0,136	0,0105		[111]
67,94	40,76	0,679	1,472	0,147	0,0147	Тетраг.	[111]
66,05	39,63	0,661	1,514	0,1514	0,01514	Кубич.	[111]
67,74	45,16	0,667	1,476	0,044	0,0148	Ромбич.	[77]
107,83	53,91	1,078	0,927	0,037	0,0093	Ромбич.	[24]
79,62	49,00	0,796	1,256	0,490	0,01256	Моноклин.	[24]
89,83	49,00	0,898	1,113	0,490	0,01113		[24]
80,77	49,70	0,808	1,238	0,483	0,01238	Моноклин.	[24]
91,12	49,70	0,911	1,097	0,483	0,01097		[24]
160,34	98,67	1,603	0,624	0,243	0,00624	Гексаг.	[24]
180,89	98,67	1,809	0,553	0,243	0,00553		[24]
101,29	50,65	1,013	0,987	0,178	0,00987	Моноклин.	[24]
101,14	50,57	1,011	0,989	0,178	0,00989		[24]
81,18	43,29	0,812	1,232	0,185	0,01232	Моноклин.	[111]
88,14	47,27	0,881	1,134	0,391	0,01134	Моноклин.	[111]
88,61	52,36	0,886	1,129	0,248	0,01129	Моноклин.	[111]
89,95	46,43	0,900	1,112	0,345	0,01112	Моноклин.	[111]
93,34	56,01	0,933	1,072	0,214	0,01072	Гексаг.	[111]
91,12	54,67	0,911	1,097	0,055	0,0110	Кубич.	[73], [111]
109,69	57,73	1,097	0,912	0,173	0,0091	Ромбич.	[24]
115,40	60,74	1,154	0,866	0,165	0,0087		[24]
89,45	53,67	0,894	1,119	0,0559	0,01119	Ромбич.	[111]
103,73	57,62	1,037	0,964	0,087	0,0096	Ромбич.	[111]
105,04	64,64	1,050	0,952	0,371	0,0095	Ромбич.	[111]
110,42	64,64	1,104	0,906	0,371	0,0091		[111]
104,56	62,73	1,046	0,956	0,0478	0,0096	Кубич.	[77]
95,06	54,32	0,951	1,052	0,0736	0,0105	Кубич.	[24]
96,74	55,28	0,967	1,034	0,0724	0,0103	Кубич.	[24]
107,54	64,52	1,075	0,930	0,046	0,00930	Ромбоэдр.	[24], [111]
110,60	66,36	1,106	0,904	0,045	0,00904		[24], [111]
94,62	54,07	0,946	1,057	0,0740	0,0106	Кубич.	[24]
110,48	55,24	1,105	0,905	0,091	0,00905	Моноклин.	[111]
106,34	54,69	1,063	0,941	0,329	0,00941	Моноклин.	[111]
120,21	60,11	1,202	0,832	0,033	0,00832	Моноклин.	[111]
91,40	45,70	0,914	1,094	0,022	0,0109	Кубич.	[111]
94,50	54,00	0,945	1,058	0,444	0,01058	Моноклин.	[24]

№ п/п	Минерал и его символ	Количество атомов в формульной единице		Объем элементарной ячейки V_0 Å^3	Объем формульной единицы $V_{\text{ф.е.}}$
		общее $\sum n_i^{\text{общ}}$	анионов $\sum n_a^{\text{ан}}$		
272	Маршалит <i>Ma</i> (<i>Ma</i>)	82	50	1108,69	1108,69
		82	50	1148,72	1148,72
		85	52	1108,69	1108,69
		85	52	1148,72	1148,72
273	Марказит <i>Mrk</i> (<i>Mrk</i>)	3	2	81,91	40,96
274	Маухерит <i>Mzm</i> (<i>Mcht</i>)	7	3	222,79	111,39
275	Медь <i>Cu</i> (<i>Cu</i>)	1		47,25	11,81
276	Мезолит <i>Mes</i> (<i>Mes</i>)	73	38	6863,19	857,90
277	Мезомитроклин <i>Mmi</i> (<i>Mmi</i>)	13	8	720,71	180,18
278	Мейовит <i>Me</i> (<i>Me</i>)	84	52	1108,69	1108,69
		84	52	1148,72	1148,72
		90	56	1108,69	1108,69
		90	56	1148,72	1148,72
279	Мелавит (титаносодерж. андрадит) <i>Min</i> (<i>Min</i>)	20	12	1749,69	218,71
		20	12	1798,04	224,76
280	Меллит <i>Mel</i> (<i>Mel</i>)	12	7	300,74	150,37
281	Меллит <i>Mel</i> (<i>Mel</i>)	12	7	304,20	152,10
282	Мелшофан <i>Mlf</i> (<i>Mlfh</i>)	12	7	1112,36	139,04
283	Мелопит <i>Mlm</i> (<i>Mlt</i>)	3	2	67,16	67,16
284	Метаторбершит <i>Mtb</i> (<i>Mtb</i>)	41	20	848,22	848,22
285	Микроклин <i>Mic</i> (<i>Mic</i>)	13	8	721,25	180,31
286	Микролит <i>Mrl</i> (<i>Mrl</i>)	11	7	1128,11	141,01
287	Миларит <i>Mld</i> (<i>Mld</i>)	49,5	30,5	1312,46	656,23
288	Миллерит <i>Mil</i> (<i>Mil</i>)	2	1	253,22	28,14
289	Молібденит <i>Mo</i> (<i>Mo</i>)	3	2	106,52	53,26
290	Монацит <i>Mon</i> (<i>Mon</i>)	6	4	297,02	74,26
291	Монтчеллит <i>Mum</i> (<i>Mont</i>)	7	4	339,84	84,96
292	Монтмориллонит <i>Mm</i> (<i>Mmnt</i>)	~ 32	16	702,54	351,27
293	Муилит <i>Mul</i> (<i>Mul</i>)	31,5	19,5	329,91	329,91
		33	20	329,91	329,91
294	Мусковит <i>Mu</i> (<i>Mu</i>)	42	24	937,77	468,88
		38	24	937,77	468,88
295	Мышьяк <i>As</i> (<i>As</i>)	1		43,60	21,80
		1		175,10	21,80
296	Нагнайт <i>Ngm</i> (<i>Ngm</i>)	19	5	4726,56	472,66
		22	8	4726,56	472,66
297	Накрит <i>Nkm</i> (<i>Nkt</i>)	34	18	1984,19	330,70
		34	18	659,69	329,84
298	Натролит <i>Nat</i> (<i>Nat</i>)	23	12	2268,19	283,52
299	Натроярозит <i>Nar</i> (<i>Njar</i>)	26	14	730,98	243,66
300	Науиказит <i>Nuk</i> (<i>Nuk</i>)	48	27	2354,04	588,51
301	Нептунит <i>Ne</i> (<i>Nep</i>)	20	12	1902,65	237,83
302	Нефелин <i>Ne</i> (<i>Ne</i>)	28	16	729,67	364,84
303	Никелит <i>Nik</i> (<i>Nik</i>)	2	1	56,72	28,36
304	Нозеан <i>Nos</i> (<i>Nos</i>)	49	28	724,15	724,15
		49	28	766,06	766,06
305	Нотронит <i>Non</i> (<i>Non</i>)	~ 32	16	751,75	375,88
306	Норбернит <i>Norb</i> (<i>Norb</i>)	10	6	418,04	104,51
		12	6	418,04	104,51
307	Октерманит <i>Ok</i> (<i>Ok</i>)	12	7	307,94	153,97
308	Оливин <i>Ol</i> (<i>Ol</i>)	7	4	295,90	73,97
309	Олигоклаз <i>Olg</i> (<i>Olg</i>)	13	8	668,21	167,05

Количество атомов в объеме 1000Å ³ минерала		Коэффициенты пересчета				Сингония	Литературные источники *
общее ΣF_m^i	аннонов ΣF_m^a	q_m	$1/q_m$	Q_m	W_m^i		
73,96	45,10	0,740	1,352	1,109	0,0135	Тетраг.	[111]
71,38	43,53	0,714	1,401	1,149	0,0140		[111]
76,67	46,90	0,767	1,304	1,409	0,0130		[111]
74,00	45,27	0,740	1,351	1,149	0,0135	Ромбич.	[111]
73,25	48,83	0,732	1,365	0,041	0,0136		[111]
62,84	26,93	0,628	1,592	0,111	0,01592		[111]
84,65		0,846	1,181	0,0118	0,00118	Гексаг.	[111]
85,09	44,29	0,851	1,175	0,858	0,01175	Кубич.	[111]
72,15	44,40	0,722	1,386	0,180	0,01175	Моноклин.	[111]
75,76	46,90	0,758	1,320	1,109	0,0132	Триклин.	[111]
73,12	45,27	0,731	1,368	1,149	0,0137	Тетраг.	[111]
81,18	50,51	0,812	1,232	1,109	0,0123		[111]
78,35	48,75	0,784	1,276	1,149	0,0128		[111]
91,44	54,87	0,914	1,094	0,219	0,0109	Кубич.	[111]
88,99	53,39	0,890	1,124	0,225	0,0112		[111]
79,80	46,55	0,798	1,253	0,150	0,0125		Тетраг.
78,90	46,02	0,789	1,268	0,152	0,0127	Тетраг.	[24]
86,30	50,34	0,863	1,159	0,139	0,0116	Тетраг.	[111]
44,67	29,77	0,447	2,237	0,0672	0,02237	Гексаг.	[111]
47,16	23,58	0,472	2,119	0,848	0,02119	Тетраг.	[111]
72,10	44,36	0,721	1,387	0,180	0,01387	Триклин.	[111]
78,01	49,64	0,780	1,282	0,141	0,0128	Кубич.	[111]
75,43	46,48	0,754	1,326	0,856	0,01326	Гексаг.	[111]
71,09	35,54	0,711	1,408	0,0281	0,01406	Гексаг.	[111]
56,32	37,55	0,563	1,776	0,0533	0,01776	Гексаг.	[111]
80,80	53,87	0,808	1,238	0,074	0,01238	Моноклин.	[24]
82,39	47,68	0,824	1,214	0,085	0,0121	Ромбич.	[24]
91,10	45,55	0,911	1,098	0,351	0,01098	Моноклин.	[111]
95,48	59,11	0,955	1,047	0,330	0,0105	Ромбич.	[111]
100,03	60,62	1,000	1,000	0,330	0,0100		[111]
89,57	51,18	0,896	1,116	0,469	0,01116		Моноклин.
81,04	51,18	0,810	1,234	0,469	0,01234	Моноклин.	[111]
45,87		0,459	2,180	0,022	0,02180		[111]
45,69		0,457	2,189	0,022	0,02189		Ромбоэдр.
40,20	10,58	0,402	2,488	0,473	0,0249	Тетраг.	[77]
46,54	16,92	0,465	2,148	0,473	0,0215		[77]
102,81	54,43	1,028	0,973	0,331	0,00973		Моноклин.
103,08	54,57	1,031	0,970	0,330	0,00970	[24], [111]	
81,12	42,32	0,811	1,233	0,284	0,0123	Ромбич.	
106,70	57,45	1,067	0,9372	0,244	0,00937	Гексаг.	[24], [111]
81,56	45,88	0,816	1,225	0,588	0,01225	Моноклин.	[24], [111]
84,09	50,46	0,841	1,189	0,238	0,01189	Моноклин.	[24], [111]
76,74	43,86	0,767	1,304	0,365	0,01304	Гексаг.	[24], [111]
70,52	35,26	0,705	1,418	0,028	0,01418	Гексаг.	[24], [111]
67,66	38,67	0,677	1,478	0,724	0,0148	Кубич.	[24], [111]
63,96	36,55	0,640	1,563	0,766	0,0156		[24], [111]
85,13	42,57	0,851	1,175	0,376	0,01175		Моноклин.
95,68	57,41	0,957	1,045	0,104	0,0104	Ромбич.	[24]
114,82	57,41	1,148	0,871	0,104	0,0087		[24]
77,94	45,46	0,779	1,283	0,154	0,0128		Тетраг.
94,63	54,07	0,946	1,057	0,074	0,0106	Ромбич.	[111]
77,82	47,89	0,778	1,285	0,167	0,01285	Триклин.	[111]

№ п/п	Минерал и его символ	Количество атомов в формульной единице		Объем атомной ячейки V_0	Объем формульной единицы V_m
		общее $\sum n_m^i$	аннонов $\sum n_m^a$		
310	Омфацинт <i>Омф</i> (<i>Omph</i>)	10	6	426,99	106,75
311	Орпит <i>Орт</i> (<i>Ort</i>)	22	13	478,74	239,37
312	Ортоклаз (адуляр) <i>Ор</i> (<i>Or</i>)	13	8	733,98	183,50
313	Ортоферросилицит <i>Офс</i> (<i>Ofs</i>)	5	3	878,10	54,88
314	Осумптит <i>Осум</i> (<i>Osum</i>)	51	31	1284,27	642,13
315	Отавит <i>Отав</i> (<i>Otao</i>)	5	3	230,15	57,54
		5	3	113,63	56,82
316	Отенит <i>Отен</i> (<i>Aut</i>)	47	22	1012,83	506,42
317	Павдаит <i>Пав</i> (<i>Pan</i>)	12	7	1177,58	147,20
318	Параволастонит <i>Пвоа</i> (<i>Pwoa</i>)	15	9	789,26	197,32
319	Парагонит <i>Пар</i> (<i>Pg</i>)	42	24	862,76	431,38
320	Парацельзит <i>Пцз</i> (<i>Pcl</i>)	13	8	746,34	186,59
321	Паргасит <i>Парг</i> (<i>Par</i>)	41	24	910,11	455,06
322	Пектолит <i>Пект</i> (<i>Pekt</i>)	16	9	383,84	191,92
323	Пешаптит <i>Пшт</i> (<i>Pnt</i>)	36	18	1450,53	362,63
324	Пешпин <i>Пеш</i> (<i>Pen</i>)	36	18	1358,50	339,63
		36	18	1399,68	349,92
325	Пентландит <i>Пн</i> (<i>Pln</i>)	17	8	1012,05	253,01
326	Периклаз <i>Пер</i> (<i>Pe</i>)	2	1	74,72	18,68
327	Перовскит <i>Прс</i> (<i>Pf</i>)	5	3	437,24	54,66
		5	3	458,31	57,29
328	Петалит <i>Пет</i> (<i>Pet</i>)	16	10	425,85	212,92
329	Пижокит <i>Пиж</i> (<i>Pig</i>)	10	6	434,26	108,56
330	Пираргирит <i>Прг</i> (<i>Prg</i>)	7	4	306,76	153,38
		7	3	920,28	153,38
331	Пирит <i>Пи</i> (<i>Pr</i>)	3	2	158,96	39,74
332	Пироксмангит <i>Пкст</i> (<i>Pxt</i>)	5	3	800,77	57,20
333	Пирролизит <i>Прл</i> (<i>Prl</i>)	3	2	55,31	27,66
334	Пироморфит <i>Прм</i> (<i>Prm</i>)	21	13	630,11	315,06
335	Пироп <i>Пип</i> (<i>Pyp</i>)	20	12	1504,67	188,08
336	Пиросмакит <i>Пст</i> (<i>Pst</i>)	39	25	1126,29	563,15
		49	25	1126,29	563,15
337	Профавит <i>Прф</i> (<i>Prfh</i>)	5	3	326,55	163,27
338	Пирофаллит <i>Пф</i> (<i>Prfh</i>)	40	24	843,23	421,62
339	Пирохлор <i>Прх</i> (<i>Prc</i>)	11	7	1105,51	138,19
		12	7	1105,51	138,19
		11	7	1128,11	141,01
		12	7	1128,11	141,01
340	Прохроит <i>Прр</i> (<i>Pchr</i>)	5	2	45,57	45,57
341	Пирротит <i>Прр</i> (<i>Prr</i>)	15	8	1856,07	29,00
		2	1	58,30	29,15
342	Пирсенит <i>Пст</i> (<i>Pst</i>)	29	11	9408,38	588,02
343	Платина <i>Пт</i> (<i>Pl</i>)	1		60,41	15,10
344	Плюмбозинит <i>Плз</i> (<i>Pjar</i>)	51	28	1515,58	505,19
345	Повелит <i>Пвл</i> (<i>Pwl</i>)	6	4	314,66	78,67
346	Полначит <i>Плт</i> (<i>Plt</i>)	3	2	61,88	30,94
347	Полнбазит <i>Пбз</i> (<i>Plb</i>)	29	11	9408,38	588,02
348	Поллуцит <i>Плц</i> (<i>Plc</i>)	13	7	2593,94	162,12
349	Пренит <i>Прен</i> (<i>Preu</i>)	21	12	466,00	233,00
350	Прустит <i>Прст</i> (<i>Prst</i>)	7	4	289,73	144,86
		7	3	870,79	145,13
351	Псевдобрукит <i>Пбрк</i> (<i>Pbrk</i>)	8	5	365,06	91,26

Количество атомов в объеме 1000 Å ³ минерала		Коэффициенты пересчета				Сигнония	Литературные источники
общее ΣF_m^i	аннионов ΣF_m^a	q_m	$1/q_m$	Q_m	w_m^i		
93,68	56,21	0,937	1,067				
91,91	54,31	0,919	1,088	0,107	0,01067	Моноклин.	[111]
70,84	43,60	0,708	1,412	0,239	0,01088	Моноклин.	[24]
91,11	54,66	0,911	1,098	0,184	0,01412	Моноклин.	[80]
79,42	48,27	0,794	1,258	0,055	0,0110	Ромбич.	[24]
86,90	52,14	0,869	1,151	0,642	0,01258	Гексаг.	[111]
88,00	52,80	0,880	1,136	0,058	0,01151		[111]
92,81	43,44	0,928	1,078	0,057	0,01136	Ромбоэдр.	[111]
81,52	47,56	0,815	1,227	0,506	0,01078	Тетраг.	[111]
76,02	45,60	0,760	1,316	0,147	0,01227	Кубич.	[111]
97,36	55,64	0,974	1,027	0,197	0,01316	Моноклин.	[111]
69,67	42,88	0,697	1,435	0,431	0,01027	Моноклин.	[24]
90,10	52,74	0,901	1,110	0,187	0,01435	Моноклин.	[111]
83,37	46,89	0,834	1,199	0,455	0,01110	Моноклин.	[24]
99,27	49,64	0,993	1,007	0,192	0,01199	Триклин.	[24]
106,00	53,00	1,060	0,943	0,363	0,01007	Моноклин.	[73], [111]
102,88	51,44	1,029	0,972	0,340	0,00943		[111]
87,19	31,62	0,672	1,488	0,350	0,00972	Моноклин.	[111]
107,06	53,53	1,071	0,934	0,2530	0,0149	Кубич.	[111]
91,48	54,89	0,915	1,093	0,019	0,0093	Кубич.	[24]
87,28	52,37	0,873	1,146	0,055	0,0109	Кубич.	[24]
75,14	46,96	0,751	1,331	0,057	0,01146	То же	[24]
92,11	55,27	0,921	1,086	0,213	0,01331	Моноклин.	[111]
45,64	26,08	0,456	2,191	0,109	0,01086	Моноклин.	[24]
45,64	19,56	0,456	2,191	0,153	0,02191	Ромбоэдр.	[111]
75,49	50,33	0,755	1,325	0,153	0,02191	Гексаг.	[77]
87,42	52,45	0,874	1,143	0,0397	0,0132	Кубич.	[24]
108,48	72,32	1,085	0,922	0,057	0,01143	Триклин.	[24]
66,66	41,26	0,666	1,502	0,028	0,0092	Тетраг.	[111]
106,34	63,80	1,063	0,940	0,028	0,0092	Гексаг.	[111]
69,25	44,39	0,692	1,445	0,315	0,01502	Кубич.	[24]
87,01	44,39	0,870	1,149	0,188	0,0094	Кубич.	[111]
30,62	18,37	0,306	3,268	0,563	0,01149	Гексаг.	[77]
94,87	56,92	0,949	1,054	0,163	0,03268	Моноклин.	[24]
79,60	50,66	0,796	1,256	0,422	0,01054		[111]
86,84	50,66	0,868	1,152	0,138	0,0126		[111]
78,01	49,64	0,780	1,282	0,138	0,0115	Кубич.	[111]
85,10	49,64	0,851	1,175	0,141	0,0128		[111]
109,70	43,87	1,097	0,912	0,141	0,0118		[111]
517,22	275,85	5,172	0,193	0,0456	0,00912	Гексаг.	[111]
68,60	34,30	0,686	1,457	0,029	0,00193	Моноклин.	[24]
49,32	18,71	0,493	2,028	0,029	0,01457	Гексаг.	[24]
66,22		0,662	1,510	0,588	0,02028	Моноклин.	[77]
100,95	55,42	1,010	0,990	0,0151	0,0151	Кубич.	[111]
76,27	50,85	0,763	1,311	0,0590	0,00990	Гексаг.	[111]
96,96	64,64	0,970	1,031	0,079	0,0131	Тетраг.	[111]
49,32	18,71	0,493	2,028	0,031	0,0103	Тетраг.	[77]
80,19	43,18	0,802	1,247	0,588	0,02028	Моноклин.	[77]
90,13	51,50	0,901	1,110	0,125	0,0125	Кубич.	[111]
48,32	27,61	0,483	2,069	0,233	0,02069	Ромбич.	[24]
48,23	20,66	0,482	2,074	0,145	0,02074	Ромбоэдр.	[111]
87,66	54,79	0,877	1,141	0,145	0,02074	Гексаг.	[77]
				0,091	0,0114	Ромбич.	[111]

№ п/п	Наименование	Количество атомов в формульной единице		числовая поправка	Объем формульной единицы
		общее Σn_m	ангионов Σn_m		
352	Душоданит Дув (Pum)	51	28	992,82	496,41
353	Палеонит Дв (Pmt)	22	13	389,06	194,53
354	Палеонит Дам (Pdt)	9	5	353,23	88,31
355	Рамсит Рва (Rms)	15	5	622,04	155,51
356	Рамсит Рва (Rms)	3	2	97,53	48,76
357	Рамсит Рва (Rms)	8	4	906,31	453,16
358	Рамсит Рва (Rms)	41	24	906,31	453,16
359	Рамсит Рва (Rms)	39	9	785,19	392,59
360	Рамсит Рва (Rms)	15	9	1401,65	700,82
361	Рамсит Рва (Rms)	36	18	900,52	450,26
362	Рамсит Рва (Rms)	40	24	930,84	465,42
363	Рамсит Рва (Rms)	42	24	930,84	465,42
364	Рамсит Рва (Rms)	41	24	912,27	456,14
365	Рамсит Рва (Rms)	41	24	584,00	292,00
366	Рамсит Рва (Rms)	5	3	103,44	51,72
367	Рамсит Рва (Rms)	5	3	198,77	99,39
368	Рамсит Рва (Rms)	5	3	757,06	378,53
369	Рамсит Рва (Rms)	15	9	62,36	31,18
370	Рамсит Рва (Rms)	3	2	481,73	240,87
371	Рамсит Рва (Rms)	16	10	719,37	359,69
372	Рамсит Рва (Rms)	13	8	134,89	67,44
373	Рамсит Рва (Rms)	6	4	1321,64	660,82
374	Рамсит Рва (Rms)	9	5	1653,56	826,78
375	Рамсит Рва (Rms)	82	50	2418,04	1209,02
376	Рамсит Рва (Rms)	3	2	92,48	46,24
377	Рамсит Рва (Rms)	26	14	704,77	352,39
378	Рамсит Рва (Rms)	26	14	234,60	117,30
379	Рамсит Рва (Rms)	21	12	475,30	237,65
380	Рамсит Рва (Rms)	1	1	3206,79	1603,39
381	Рамсит Рва (Rms)	1	1	68,20	34,10
382	Рамсит Рва (Rms)	5	3	96,86	48,43
383	Рамсит Рва (Rms)	5	3	198,92	99,46
384	Рамсит Рва (Rms)	5	3	99,92	49,96
385	Рамсит Рва (Rms)	8	5	492,40	246,20
386	Рамсит Рва (Rms)	22	12	324,70	162,35
387	Рамсит Рва (Rms)	6	4	333,67	166,84
388	Рамсит Рва (Rms)	2	1	248,86	124,43
389	Рамсит Рва (Rms)	13	7	274,67	137,33
390	Рамсит Рва (Rms)	34	17	766,46	383,23
391	Рамсит Рва (Rms)	25	13	551,37	275,68
392	Рамсит Рва (Rms)	4	3	183,09	91,54
393	Рамсит Рва (Rms)	5	3	91,30	45,65
394	Рамсит Рва (Rms)	46	26	688,46	344,23
395	Рамсит Рва (Rms)	46	26	707,35	353,67
396	Рамсит Рва (Rms)	19	11	976,53	488,26
397	Рамсит Рва (Rms)	20	12	1569,39	784,69
398	Рамсит Рва (Rms)	10	6	387,43	193,71
399	Рамсит Рва (Rms)	39	24	717,03	358,52
400	Рамсит Рва (Rms)	41	24	717,03	358,52

№ п/п	Наименование	Количество атомов в объеме 1000 Å ³		Коэффициенты парасчета				Сигнолы	Литературные источники
		общее Σn_m	ангионов Σn_m	q_m	$1/q_m$	Q_m	W_m		
401	Рамсит Рва (Rms)	102,74	56,40	1,027	0,973	0,496	0,00973	Молоканин, [24]	
402	Рамсит Рва (Rms)	113,02	66,83	1,134	0,884	0,194	0,00884	Молоканин, [24]	
403	Рамсит Рва (Rms)	101,92	56,62	1,019	0,981	0,088	0,00981	Ромбур, [111]	
404	Рамсит Рва (Rms)	96,46	57,87	0,964	1,037	0,158	0,01037	Ромбур, [111]	
405	Рамсит Рва (Rms)	61,52	41,01	0,615	1,625	0,049	0,01625	Ромбур, [111]	
406	Рамсит Рва (Rms)	40,42	20,21	0,404	2,474	0,024	0,02474	Молоканин, [111]	
407	Рамсит Рва (Rms)	90,48	52,96	0,905	1,105	0,453	0,01105	Молоканин, [111]	
408	Рамсит Рва (Rms)	86,06	52,96	0,861	1,162	0,453	0,01162	Молоканин, [111]	
409	Рамсит Рва (Rms)	76,41	45,85	0,764	1,309	0,196	0,01309	Молоканин, [111]	
410	Рамсит Рва (Rms)	102,74	51,37	1,027	0,973	0,450	0,00973	Молоканин, [111]	
411	Рамсит Рва (Rms)	88,84	53,30	0,888	1,126	0,450	0,01126	Молоканин, [111]	
412	Рамсит Рва (Rms)	93,28	51,57	0,933	1,072	0,450	0,01072	Молоканин, [111]	
413	Рамсит Рва (Rms)	85,94	51,57	0,859	1,168	0,456	0,01168	Молоканин, [111]	
414	Рамсит Рва (Rms)	89,88	52,62	0,899	1,112	0,456	0,01112	Молоканин, [111]	
415	Рамсит Рва (Rms)	90,24	51,57	0,902	1,108	0,456	0,01108	Молоканин, [111]	
416	Рамсит Рва (Rms)	85,62	51,36	0,856	1,168	0,456	0,01168	Молоканин, [111]	
417	Рамсит Рва (Rms)	96,67	58,00	0,967	1,034	0,452	0,01034	Ромбур, [111]	
418	Рамсит Рва (Rms)	100,62	60,37	1,006	0,994	0,450	0,00994	Ромбур, [111]	
419	Рамсит Рва (Rms)	78,22	46,93	0,782	1,278	0,192	0,01278	Трунцун, [111]	
420	Рамсит Рва (Rms)	96,21	64,14	0,962	1,039	0,451	0,01039	Тетар, [111]	
421	Рамсит Рва (Rms)	66,43	44,52	0,664	1,506	0,241	0,01506	Ромбур, [111]	
422	Рамсит Рва (Rms)	72,29	44,48	0,723	1,383	0,180	0,01383	Молоканин, [111]	
423	Рамсит Рва (Rms)	88,96	59,31	0,890	1,124	0,457	0,01124	Молоканин, [111]	
424	Рамсит Рва (Rms)	102,90	60,53	1,029	0,972	0,455	0,00972	Молоканин, [111]	
425	Рамсит Рва (Rms)	87,08	48,38	0,871	1,148	0,455	0,01148	Молоканин, [111]	
426	Рамсит Рва (Rms)	67,82	41,36	0,678	1,474	0,209	0,01474	Тетар, [111]	
427	Рамсит Рва (Rms)	110,67	63,25	1,107	0,903	0,455	0,00903	Ромбур, [111]	
428	Рамсит Рва (Rms)	110,83	59,67	1,108	0,902	0,455	0,00902	Ромбур, [111]	
429	Рамсит Рва (Rms)	88,37	50,50	0,884	1,131	0,455	0,01131	Молоканин, [111]	
430	Рамсит Рва (Rms)	39,18	25,52	0,392	2,552	0,126	0,02552	Ромбур, [111]	
431	Рамсит Рва (Rms)	58,65	48,43	0,586	1,706	0,171	0,0171	Ромбур, [111]	
432	Рамсит Рва (Rms)	103,24	61,94	1,032	0,969	0,448	0,00969	Ромбур, [111]	
433	Рамсит Рва (Rms)	100,54	60,33	1,005	0,994	0,450	0,00994	Ромбур, [111]	
434	Рамсит Рва (Rms)	100,08	60,04	1,001	0,999	0,450	0,00999	Ромбур, [111]	
435	Рамсит Рва (Rms)	89,16	48,74	0,894	1,119	0,451	0,01119	Молоканин, [111]	
436	Рамсит Рва (Rms)	88,55	61,60	0,886	1,115	0,451	0,01115	Молоканин, [111]	
437	Рамсит Рва (Rms)	35,96	23,98	0,360	2,778	0,167	0,02778	Молоканин, [111]	
438	Рамсит Рва (Rms)	32,15	18,08	0,322	3,111	0,137	0,03111	Молоканин, [111]	
439	Рамсит Рва (Rms)	94,66	50,97	0,947	1,056	0,456	0,01056	Молоканин, [111]	
440	Рамсит Рва (Rms)	88,72	44,36	0,887	1,127	0,456	0,01127	Молоканин, [111]	
441	Рамсит Рва (Rms)	87,38	45,44	0,874	1,144	0,456	0,01144	Молоканин, [111]	
442	Рамсит Рва (Rms)	58,04	43,53	0,580	1,724	0,286	0,01724	Молоканин, [111]	
443	Рамсит Рва (Rms)	109,24	65,54	1,092	0,915	0,446	0,00915	Молоканин, [111]	
444	Рамсит Рва (Rms)	109,53	65,72	1,095	0,913	0,446	0,00913	Молоканин, [111]	
445	Рамсит Рва (Rms)	66,82	37,76	0,668	1,497	0,244	0,01497	Молоканин, [111]	
446	Рамсит Рва (Rms)	65,03	36,76	0,650	1,538	0,244	0,01538	Молоканин, [111]	
447	Рамсит Рва (Rms)	77,83	45,06	0,778	1,285	0,244	0,01285	Молоканин, [111]	
448	Рамсит Рва (Rms)	101,95	61,17	1,020	0,981	0,446	0,00981	Молоканин, [111]	
449	Рамсит Рва (Rms)	108,24	61,95	1,082	0,969	0,446	0,00969	Молоканин, [111]	
450	Рамсит Рва (Rms)	108,78	66,94	1,088	0,919	0,446	0,00919	Молоканин, [111]	
451	Рамсит Рва (Rms)	114,36	66,94	1,144	0,874	0,358	0,00874	Ромбур, [124]	

№ п.п.	Минерал и его синон.	Количество атомов в формульной единице		Объем элементарной ячейки $V_{\text{м}}$	Объем формульной единицы $V_{\text{м}}$
		общее $\Sigma n_{\text{м}}$	аннионов $\Sigma n_{\text{м}}$		
		30	4	763,54	381,77
		41	4	763,54	381,77
394	Стаптин <i>Stn</i> (<i>Stn</i>)	8	4	321,36	160,68
395	Стефанит <i>Stph</i> (<i>Stph</i>)	10	4	804,45	201,11
396	Стибноколумбит <i>Stcol</i> (<i>Stcol</i>)	6	4	296,04	74,01
397	Стибиотанталит <i>Sttan</i> (<i>Sttan</i>)	6	4	322,87	80,72
398	Стиллуэит <i>Stil</i> (<i>Stil</i>)	24	15	269,78	269,78
399	Стильпномольван <i>Stmm</i> (<i>Stm</i>)	45,5	27,6	616,69	616,69
		71,1	32,5	616,69	616,69
400	Стромшилит <i>Stum</i> (<i>Stal</i>)	5	3	263,16	65,79
401	Сульфидит <i>Suf</i> (<i>Suf</i>)	12	6	442,91	110,73
402	Сфалерит <i>Sfl</i> (<i>Sfl</i>)	2	1	158,34	39,58
403	Сфен (титанит) <i>Sf</i> (<i>Tit</i>)	8	5	369,62	92,41
		9	5	369,62	92,41
404	Снихуалинит <i>Sxsm</i> (<i>Shl</i>)	25	14	2136,72	267,09
405	Талек <i>Ta</i> (<i>Ta</i>)	42	24	898,52	449,26
406	Танталит <i>Tant</i> (<i>Tan</i>)	9	6	413,34	103,33
407	Теллурид <i>Tel</i> (<i>Tel</i>)	3	2	363,18	45,40
408	Теллуриовисмутит <i>Tlom</i> (<i>Tlbt</i>)	5	3	170,17	170,17
409	Тенардит <i>Tend</i> (<i>Th</i>)	7	4	704,77	88,10
410	Теннит <i>Ten</i> (<i>Ten</i>)	6	3	1064,33	133,04
411	Тенорит (молибденит) <i>Tenr</i> (<i>Tnr</i>)	2	1	79,76	19,94
412	Тетрадимит <i>Tdm</i> (<i>Tdm</i>)	5	3	162,37	162,37
413	Тетраэдрит <i>Ted</i> (<i>Td</i>)	6	3	1105,51	138,19
414	Тефрит <i>Tefr</i> (<i>Tephr</i>)	7	4	320,43	80,11
		7	4	325,24	81,31
415	Тиллит <i>Till</i> (<i>Till</i>)	22	13	1132,24	283,06
416	Томсонит <i>Tam</i> (<i>Thom</i>)	51	26	2266,89	566,72
417	Топаз <i>Top</i> (<i>Top</i>)	9	6	343,48	85,87
		11	6	343,48	85,87
418	Торбернит <i>Tbn</i> (<i>Tbn</i>)	47	22	1021,79	510,90
419	Ториацит <i>Trn</i> (<i>Trn</i>)	3	2	170,03	42,51
		3	2	172,25	43,06
420	Турит <i>Trm</i> (<i>Thr</i>)	6	4	308,88	77,22
421	Торогумит <i>Tgm</i> (<i>Tgm</i>)	6	4	313,41	78,35
		9	4	313,41	78,35
422	Треверит <i>Trv</i> (<i>Trv</i>)	7	4	599,08	74,88
423	Тремолит <i>Tr</i> (<i>Trem</i>)	41	24	906,26	453,13
424	Треггерит <i>Trg</i> (<i>Trg</i>)	42	20	451,14	451,14
425	Тридимит <i>Trd</i> (<i>Trd</i>)	3	2	2759,43	43,12
426	Тридимит-β <i>Trd-β</i> (<i>Trd-β</i>)	3	2	181,24	45,31
427	Триксальспит <i>Tksl</i> (<i>Tksl</i>)	7	4	1766,27	98,12
428	Тримерит <i>Trm</i> (<i>Trm</i>)	21	8	3433,78	214,61
429	Трипит <i>Trp</i> (<i>Trp</i>)	8	5	754,30	94,29
430	Триплоцит <i>Trpd</i> (<i>Trpd</i>)	9	5	1543,92	96,49
431	Турмалин <i>Tur</i> (<i>Tur</i>)	50	31	1542,53	514,17
		50	31	1613,13	537,71
		54	31	1542,53	514,17
		54	31	1613,13	537,71
432	Тшеракит-ферротшеракит <i>Черм</i> (<i>Ts</i>)				(См. чермакит)
433	Тюрингит <i>Tur</i> (<i>Thur</i>)	30	18	703,27	703,27
		36	18	703,27	703,27

Количество атомов в объеме 1000 Å ³ минерала		Коэффициенты пересчета				Сингония	Литературные источники *
общее ΣF_m^i	всплохов ΣF_m^a	q_m	$1/q_m$	Q_m	W_{lm}		
102,16	62,86	1,022	0,979	0,382	0,0098	} Ромбич.	[24]
107,40	62,86	1,074	0,931	0,382	0,0093		[24]
49,79	24,89	0,498	2,008	0,161	0,0201	} Тетраг.	[111]
49,72	19,89	0,497	2,011	0,201	0,0210		[77]
81,08	54,05	0,811	1,234	0,074	0,01234	Ромбич.	[111]
74,33	49,56	0,743	1,345	0,081	0,0134	Ромбич.	[111]
88,97	55,60	0,890	1,123	0,270	0,01123	Гексаг.	[111]
73,78	44,75	0,738	1,355	0,617	0,01355	} Моноклин.	[24]
115,29	52,70	1,153	0,867	0,617	0,00867		[24]
76,00	45,60	0,760	1,316	0,066	0,0132	Ромбич.	[24]
108,37	54,19	1,084	0,923	0,411	0,00923	Ромбич.	[111]
50,52	25,26	0,505	1,979	0,0396	0,0198	} Кубич.	[24]
86,58	54,11	0,866	1,155	0,092	0,01155		[24]
97,40	54,11	0,974	1,027	0,092	0,01027	} Моноклин.	[24]
93,60	52,42	0,936	1,068	0,267	0,0107		[24]
93,49	53,42	0,935	1,070	0,449	0,01070	Кубич.	[111]
87,10	58,06	0,871	1,148	0,103	0,0115	Моноклин.	[24]
66,08	44,06	0,661	1,513	0,045	0,0151	Ромбич.	[77]
29,38	17,63	0,294	3,403	0,170	0,0151	Ромбич.	[111]
79,46	45,40	0,795	1,258	0,088	0,03403	Ромбоэдр.	[111]
45,10	22,55	0,451	2,217	0,1330	0,0126	Ромбич.	[111]
100,30	50,15	1,003	0,997	0,020	0,0222	Кубич.	[111]
30,79	18,48	0,308	3,247	0,162	0,00997	Моноклин.	[77]
43,42	21,71	0,434	2,303	0,1382	0,03247	Ромбоэдр.	[111]
87,38	49,93	0,874	1,144	0,080	0,0230	Кубич.	[111]
86,09	49,19	0,861	1,162	0,081	0,0114	} Ромбич.	[24]
77,72	45,92	0,777	1,287	0,283	0,0116		[24]
89,99	45,88	0,900	1,111	0,567	0,01287	Моноклин.	[111]
104,81	69,87	1,048	0,954	0,086	0,01111	Ромбич.	[111]
128,10	69,87	1,281	0,781	0,086	0,0095	} Ромбич.	[24]
92,00	43,06	0,920	1,087	0,511	0,0078		[24]
70,58	47,05	0,706	1,417	0,042	0,01087	Тетраг.	[111]
69,67	46,44	0,697	1,435	0,043	0,0142	} Кубич.	[111]
77,69	51,80	0,777	1,287	0,077	0,0144		[111]
76,58	51,05	0,766	1,306	0,078	0,0129	Тетраг.	[111]
114,87	51,05	1,149	0,871	0,078	0,0131	} Тетраг.	[111]
93,48	53,42	0,935	1,070	0,0749	0,0087		[111]
90,48	52,96	0,905	1,105	0,453	0,0107	Кубич.	[24]
93,10	44,33	0,931	1,074	0,451	0,01105	Моноклин.	[111]
69,58	46,39	0,696	1,437	0,043	0,0107	Тетраг.	[111]
66,21	44,14	0,662	1,511	0,045	0,0144	Ромбич.	[111]
71,34	40,76	0,713	1,403	0,098	0,01511	Гексаг.	[111]
97,85	37,28	0,978	1,022	0,215	0,01403	Гексаг.	[111]
84,85	53,03	0,848	1,179	0,094	0,01022	Моноклин.	[111]
93,27	51,82	0,933	1,072	0,096	0,01179	Моноклин.	[111]
97,24	60,28	0,972	1,029	0,514	0,1072	Моноклин.	[111]
92,98	57,65	0,930	1,075	0,538	0,00972	} Гексаг.	[24]
105,02	60,28	1,050	0,952	0,514	0,00930		[24]
100,42	57,65	1,004	0,996	0,538	0,01050	} Гексаг.	[24]
					0,01004		[24]
Ферроскармакт						} Моноклин.	[111]
42,66	25,59	0,427	2,342	0,703	0,02342		[111]
51,19	25,59	0,512	1,953	0,703	0,01953		[111]

№ п/п	Минерал и его символ	Количество атомов в формульной единице		Объем элементарной ячейки V_0	Объем формульной единицы V_m
		общее Σn_m	анкионов Σa_m		
434	Уваровит $Ув (Uv)$	20	12	1728,00	216,00
435	Ульвант (ульванителль) $Ушн (Usp)$	7	4	620,65	77,58
436	Ульманит $У.м (Ulm)$	3	2	207,47	51,87
437	Уравнит $Урн (Urn)$	3	2	161,79	40,45
		3	2	170,03	42,51
438	Урааникродит $У.мт (Umt)$	11	7	1124,86	140,61
439	Ураанипрохлор $У.прх (Uprc)$	10	7	1092,73	136,59
440	Уравиторт $У.орт (Uthr)$	6	4	320,39	80,10
441	Урапофан $У.фн (U'phn)$	34	17	748,19	374,10
442	Урапофан-β $У.фн-β (U'phn-β)$	34	17	1446,34	361,59
443	Фасцит $Фас (Fas)$	10	6	434,99	108,75
444	Фаялит $Фа (Fa)$	7	4	308,11	77,03
445	Ферберит $Фбр (Fbr)$	6	4	132,62	66,31
446	Фёргусонит $Ферз (Ferg)$	6	4	290,48	72,62
447	Ферриактинолит $FeAkt (FeAkt)$	40	24	913,42	456,71
448	Ферригаллуазит $FeGal (FeHls)$	46	22	494,07	494,07
449	Ферригастингенит $FeGcm (FeGst)$	41	24	910,11	455,06
450	Ферриметагаллуазит $FeMgal (FeMgst)$	34	18	337,08	337,08
451	Ферримусковит $FeMy (FeMs)$	20	12	937,77	234,44
452	Ферросилит $Фс (Fsl)$	5	3	878,10	54,88
453	Филлипсит $Фил (Phil)$	44	22	1004,37	502,18
454	Флогопит $Фл (Phlg)$	40	24	494,60	494,60
		44	24	494,60	494,60
455	Флогопит $Фл (Phlg)$	20	12	496,77	248,39
		22	12	496,77	248,39
456	Флюоборит $Флб (Flb)$	10	6	217,49	108,74
		13	6	217,49	108,74
457	Флюорит $Флр (Flr)$	3	2	163,04	40,76
458	Форстерит $Фо (Fo)$	7	4	290,00	72,50
459	Фраваклинит $Фк.л (Fkl)$	7	4	596,95	74,62
460	Фриделит $Фрд (Frd)$	39	25	3332,34	555,39
		49	25	3332,34	555,39
461	Фторпатит $Ф.п (FAP)$	21	13	520,05	260,02
462	Хабазит (шабазит) $Хб (Chb)$	37	18	2461,42	410,24
		38	18	2461,42	410,24
463	Халькозин-β $Хз-β (Chs-β)$	3	1	4378,40	45,61
464	Халькозин куб. $Хз (Chs)$	14	5	174,68	174,68
465	Хальковин-г $Хз-г (Chs-g)$	3	1	88,11	44,05
466	Халькоцитрит $Хцр (Cpr)$	4	2	284,44	71,11
467	Хавтит $Хан (Hun)$	20	12	434,46	217,23
368	Харкерит $Хар (Har)$	12	7	25 750,78	1072,95
		13	7	25 750,78	1072,95
469	Хаттовит $Хат (Hut)$	6	4	299,09	74,77
470	Хлорит $Хл (Chl)$	72	36	692,07	692,07
471	Хлоридатит $ClAn (ClAp)$	21	13	540,58	270,29
472	Хлоритомд $Хрδ (Chd)$	26	14	463,24	115,81
		26	14	927,72	231,93
473	Ходжкинсонит $Ход (Hod)$	12	6	507,86	126,96
474	Холмивестит $Хол (Hol)$	40	24	-1706,48	426,62
		42	24	1706,48	426,62
		40	24	1777,51	444,38
		42	24	1777,51	444,38
475	Ховдродит $Хонд (Cho)$	17	10	351,40	180,70

Количество атомов в объеме 1000 Å ³ минерала		Коэффициенты пересчета				Сингония	Литературные источники*
общее ΣF_m^i	анионов ΣF_m^a	q_m	$1/q_m$	Q_m	W_m^i		
92,59	55,55	0,926	1,080	0,216	0,0108	Кубич.	[24]
90,23	51,55	0,902	1,108	0,0770	0,0111		Кубич.
57,84	38,56	0,578	1,729	0,0519	0,0173	Кубич.	[111]
74,14	49,44	0,742	1,348	0,040	0,0135		Кубич.
70,58	47,05	0,706	1,417	0,042	0,0142	Кубич.	[111]
78,23	49,78	0,782	1,279	0,141	0,01279		Кубич.
73,21	51,25	0,732	1,366	0,137	0,0137	Кубич.	[111]
74,81	49,94	0,748	1,335	0,080	0,0134		Тетраг.
90,88	45,44	0,909	1,100	0,374	0,01100	Моноклин.	[111]
94,03	47,02	0,940	1,063	0,362	0,01063		Моноклин.
91,96	55,17	0,920	1,087	0,109	0,01087	Моноклин.	[24]
90,68	51,93	0,907	1,100	0,077	0,0110		Ромбич.
90,48	60,32	0,905	1,105	0,066	0,01105	Моноклин.	[111]
82,62	55,08	0,826	1,210	0,073	0,0121		Тетраг.
87,58	52,55	0,876	1,142	0,457	0,01142	Моноклин.	[24]
93,10	44,53	0,931	1,074	0,494	0,01074		Моноклин.
90,10	52,74	0,901	1,110	0,455	0,01110	Моноклин.	[24]
100,86	53,40	1,009	0,991	0,337	0,00991		Моноклин.
85,31	51,19	0,853	1,172	0,234	0,01172	Моноклин.	[111]
91,11	54,67	0,911	1,098	0,0549	0,01098		Ромбич.
87,62	43,81	0,876	1,142	0,502	0,01142	Моноклин.	[111]
80,87	48,52	0,809	1,236	0,495	0,01236		Моноклин.
88,96	48,52	0,890	1,124	0,495	0,01124	Моноклин.	[24]
80,52	48,31	0,805	1,242	0,248	0,01242		Моноклин.
88,57	48,31	0,886	1,129	0,248	0,01129	Моноклин.	[111]
91,95	55,18	0,920	1,087	0,109	0,01087		Гексаг.
119,54	55,18	1,195	0,839	0,109	0,00839	Кубич.	[111]
73,60	49,07	0,736	1,359	0,0408	0,0136		Ромбич.
96,55	55,17	0,966	1,036	0,072	0,0104	Кубич.	[24]
93,81	53,61	0,938	1,066	0,0746	0,0107		Гексаг.
70,22	45,01	0,702	1,425	0,555	0,01425	Гексаг.	[111]
88,23	45,01	0,882	1,134	0,555	0,01134		Гексаг.
80,76	50,00	0,808	1,237	0,260	0,00808	Гексаг.	[24]
90,20	43,87	0,902	1,108	0,410	0,00902		Гексагон.
92,63	43,87	0,926	1,079	0,410	0,00926	Ромбич.	[77], [111]
65,78	21,93	0,658	1,520	0,046	0,0152		Кубич.
80,14	28,62	0,801	1,248	0,175	0,01248	Гексаг.	[111]
68,09	22,69	0,681	1,468	0,044	0,01468		Тетраг.
56,25	28,12	0,562	1,778	0,071	0,0178	Ромбич.	[24]
92,07	55,24	0,921	1,086	0,217	0,0109		Кубич.
11,18	6,52	0,112	8,941	1,073	0,0894	Кубич.	[111]
12,12	6,52	0,121	8,253	1,073	0,0825		Моноклин.
80,24	53,49	0,802	1,240	0,075	0,01240	Моноклин.	[24]
104,04	52,02	1,040	0,961	0,692	0,00961		Гексаг.
77,69	48,09	0,777	1,287	0,270	0,01287	Триклин.	[24]
224,50	120,89	2,245	0,445	0,116	0,00445		Моноклин.
112,10	60,36	1,121	0,892	0,232	0,00892	Моноклин.	[111]
94,51	47,26	0,945	1,058	0,127	0,01058		Ромбич.
93,76	56,26	0,938	1,066	0,427	0,0107	Ромбич.	[24]
98,45	56,26	0,984	1,016	0,427	0,0102		Ромбич.
90,01	54,01	0,900	1,111	0,444	0,0111	Моноклин.	[24]
94,51	54,01	0,945	1,058	0,444	0,0106		Моноклин.
94,08	55,34	0,941	1,063	0,181	0,01063		[24]

№ п/п	Минерал и его символ	Количество атомов в формульной единице		Объем элементарной ячейки V_m	Объем формулы под единицу V_m
		общее $\sum n_m$	аннонов $\sum n_a$		
		19	10	351,40	180,70
476	Хризоберилл <i>Xab (Chsb)</i>	7	4	228,44	57,11
477	Хризотил (ортохризотил) <i>Xpuz (Chrs)</i>	18	9	722,46	180,62
	(парахризотил)	18	9	718,74	179,69
	(парахризотил)	18	9	719,89	179,97
478	Хромит <i>Xрж (Ст)</i>	7	4	588,06	73,51
479	Хромклинохлор <i>Xкл (CrKl)</i>	36	18	692,03	346,02
480	Целестин <i>Цел (Ссэл)</i>	6	4	307,17	76,79
481	Цельзпан <i>Цлз (Слз)</i>	13	8	1502,42	375,61
482	Церпанит <i>Црпн (Српн)</i>	3	2	159,22	39,81
483	Церуссит <i>Црс (Срс)</i>	5	3	266,52	66,63
484	Цинвальдит <i>Цин (Zwd)</i>	42	24	475,07	475,07
		41	24	475,07	475,07
485	Циркон <i>Цр (Zir)</i>	6	4	260,49	65,12
486	Цоизит <i>Цо (Zo)</i>	22	13	886,43	221,61
		22	13	936,96	234,24
487	Черашит <i>Чрл (Chrl)</i>	6	4	293,57	73,39
488	Чермакит-феррочермакит <i>Черл (Ts)</i>	41	24	912,28	456,14
489	Шамизит <i>Шам (Стам)</i>	36	18	709,13	354,56
490	Шеелит <i>Ше (Sch)</i>	6	4	314,21	78,55
491	Шериданит <i>Шрд (Srd)</i>	36	18	1391,18	347,80
492	Шерл <i>Шр (Srl)</i>	50	31	1591,05	530,35
		54	31	1591,05	530,35
493	Шпидель <i>Шп (Sp)</i>	7	4	532,03	66,50
494	Шрэнкверит <i>Шрк (Srk)</i>	55	26	2325,56	581,39
		55	26	1153,41	576,71
495	Штервербергит <i>Штб (Stb)</i>	6	3	980,30	122,54
496	Штольцит <i>Штл (Stl)</i>	6	4	357,32	89,33
497	Штрюмeyerит <i>Штпр (Str)</i>	3	1	216,05	54,01
498	Шаллерит <i>Шал (Slr)</i>	49	25	2235,16	558,79
499	Эвдалит <i>Эвд (Eud)</i>	32	19	5379,15	448,26
		33	19	5379,15	448,26
500	Эвксенит <i>Экс (Eux)</i>	9	6	415,80	103,95
		15	6	415,80	103,95
501	Эгирин <i>Эг (Eg)</i>	10	6	428,18	107,05
	(эгирин-авгит)				
502	Эденит-ферроэденит <i>Эд (Ed)</i>	41	24	912,28	456,14
503	Экermanит <i>Эк (Eck)</i>	40	24	882,93	441,46
		42	24	882,93	441,46
504	Эльбит <i>Элб (Elb)</i>	50	31	1523,14	507,71
		54	31	1523,14	507,71
505	Эмплектит <i>Эмп (Emp)</i>	4	2	345,44	86,36
506	Эваргит <i>Энг (En)</i>	8	4	297,97	148,98
407	Эвигитатит <i>Эгт (Egt)</i>	68	40	745,14	745,14
508	Эистатит <i>Эн (En)</i>	5	3	832,18	52,01
509	Эиподит <i>Эп (Eр)</i>	22	13	457,66	228,83
		22	13	471,24	235,62
510	Эпистильбит <i>Эпст (Eрst)</i>	40	21	1333,39	444,46
		40	21	2686,20	447,70
511	Эпсомит <i>Эпсм (Eрsm)</i>	27	11	991,53	247,88
512	Эфесит <i>Эф (Eрh)</i>	21	12	436,00	218,00
513	Якобсит <i>Як (Jk)</i>	7	4	616,30	77,04
514	Ярозит <i>Ярз (Jrs)</i>	26	14	766,56	255,52

Количество атомов в объеме 1000 Å ³ минерала		Коэффициенты пересчета				Спигония	Литературные источники
общее ΣF_m^i	аннонов ΣF_m^a	q_m	$1/q_m$	Q_m	W_{jm}^i		
105,14	55,34	1,051	0,951	0,181	0,00951	Моноклин. Ромбич.	[24]
122,57	70,04	1,226	0,816	0,057	0,0082		[111]
99,66	49,83	0,997	1,003	0,181	0,01003	Моноклин.	[111]
100,17	50,09	1,002	0,998	0,180	0,0100	Ромбич.	[111]
100,02	50,01	1,000	1,000	0,180	0,0100	Ромбич.	[111]
95,23	54,42	0,952	1,050	0,0735	0,0105	Кубич.	[24]
104,04	52,02	1,040	0,961	0,346	0,00961	Моноклин.	[111]
78,13	52,09	0,781	1,280	0,077	0,0128	Ромбич.	[24]
34,61	21,30	0,346	2,889	0,376	0,02889	Моноклин.	[111]
75,37	50,24	0,754	1,327	0,040	0,0133	Кубич.	[111]
75,04	45,02	0,750	1,333	0,067	0,0133	Ромбич.	[111]
88,41	50,52	0,884	1,131	0,475	0,01131	Моноклин.	[24]
86,30	50,52	0,863	1,159	0,475	0,01159		[24]
92,13	61,42	0,921	1,085	0,065	0,01085	Тетраг.	[24]
90,27	58,66	0,993	1,007	0,222	0,0101	Ромбич.	[24]
93,92	55,50	0,939	1,065	0,234	0,0106		[24]
81,75	54,50	0,818	1,223	0,073	0,01223	Моноклин.	[111]
89,88	52,62	0,899	1,112	0,456	0,0112	Моноклин.	[24]
101,53	50,77	1,015	0,985	0,354	0,00985	Моноклин.	[111]
76,38	50,92	0,764	1,309	0,079	0,0131	Тетраг.	[111]
103,51	51,75	1,035	0,966	0,348	0,00966	Моноклин.	[111]
94,27	58,44	0,943	1,060	0,530	0,01060	Гексаг.	[24]
101,82	58,44	1,018	0,982	0,530	0,00982		[24]
105,26	60,15	1,053	0,950	0,0665	0,0095	Кубич.	[24]
94,60	44,72	0,946	1,057	0,581	0,01057	Ромбич.	[111]
95,37	45,08	0,954	1,048	0,577	0,01048	Трилин.	[111]
48,96	24,48	0,490	2,042	0,122	0,0204	Ромбич.	[111]
67,17	44,78	0,672	1,489	0,089	0,0149	Тетраг.	[111]
55,54	18,51	0,555	1,802	0,054	0,01802	Ромбич.	[111]
87,69	44,74	0,877	1,140	0,559	0,01140	Гексаг.	[111]
71,38	42,39	0,714	1,400	0,448	0,01400	Гексаг.	[111]
73,62	42,39	0,736	1,358	0,448	0,01358		Гексаг.
86,58	57,72	0,866	1,154	0,104	0,01154	Ромбич.	[111]
144,30	57,72	1,443	0,693	0,104	0,00693	Ромбич.	[111]
93,42	56,05	0,934	1,070	0,107	0,01070	Моноклин.	[24]
89,88	52,62	0,899	1,112	0,456	0,01112	Моноклин.	[24]
90,61	54,36	0,906	1,104	0,442	0,01104	Моноклин.	[24]
95,14	54,36	0,951	1,051	0,442	0,01051		[24]
98,48	61,06	0,984	1,016	0,508	0,01016	Гексаг.	[24]
106,36	61,06	1,064	0,939	0,508	0,00939		[24]
46,32	23,16	0,463	2,159	0,086	0,0216	Ромбич.	[77]
53,70	26,85	0,537	1,862	0,149	0,0186	Ромбич.	[111]
91,26	53,68	0,913	1,096	0,745	0,01096	Трилин.	[111]
96,13	57,68	0,961	1,040	0,052	0,0104	Ромбич.	[24]
96,14	56,81	0,961	1,040	0,229	0,01040	Моноклин.	[24]
93,37	55,17	0,934	1,071	0,236	0,01071		[24]
90,00	47,25	0,900	1,111	0,444	0,01111	Моноклин.	[111]
89,34	46,91	0,893	1,119	0,448	0,01119		[111]
108,92	44,38	1,089	0,918	0,248	0,0092	Ромбич.	[111]
96,33	55,05	0,963	1,038	0,218	0,01038	Моноклин.	[111]
90,87	51,92	0,909	1,101	0,0770	0,01101	Кубич.	[24]
101,75	54,79	1,018	0,982	0,256	0,00982	Гексаг.	[111]

Наименование	Формула	$\nu_m^m \cdot \lambda^0$	$\frac{\Delta H_{298}^V}{\text{ф. ед.}} \times 10^{-42}$	$\frac{\Delta Z_{298}^V}{\text{ф. ед.}} \times 10^{-22}$	$\frac{S_{298}^V}{\text{ф. ед.}} \times 10^{-22}$	$C_p^V = a + bT + cT^{-2}$			C_p^V
						a	b · 10 ⁴	c · 10 ⁻⁶	
						[кал/(ф. ед. · градус) · 10 ⁻²²]			
Адуляр	K[AlSi ₃ O ₈]	180	156,8	-148,1	9,3	10,6	2,1	-2,8	—
Акавит	α-Ag ₂ S	57	1,3	-1,6	5,7	2,2	2,8	—	—
Акерманит	Ca ₂ Mg[Si ₂ O ₇]	154	153,5	-145,6	8,3	10,0	1,9	-1,9	—
Алабадин	MnS	36	8,5	-8,7	3,1	1,9	0,3	—	1,982
Алаомозит	Pb[SiO ₃]	72	45,0	-41,7	4,5	4,3	2,7	-1,2	—
Алит	Ca ₃ SiO ₅	118	110,4	-110,4	6,7	8,28	1,4	-1,7	—
Алмаз	C	6	-0,1	-0,1	0,1	0,4	0,5	-0,2	0,24
Алузит	KAl ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆	244	-205,1	-184,9	12,6	19,2	9,8	+5,6	298-1200
Альбит низкотемпературный	Na[AlSi ₃ O ₈]	166	-155,5	-146,6	8,3	10,2	2,3	-2,5	—
Альбит высокотемпературный	Na[AlSi ₃ O ₈]	167	-155,0	-146,4	9,1	11,6	1,7	-3,3	8,128
Альмадин	Fe ₂ Al ₂ [Si ₂ O ₁₂]	191	-210,4	-197,2	12,4	18,5	2,0	-5,71	298-1200
Амезит	Mg ₂ Al ₄ Si ₂ O ₁₀ (OH) ₈	342	-359,8	-334,2	19,3	20,3	12,0	-4,1	—
Апальцит	Na[AlSi ₂ O ₆] · H ₂ O	161	-130,9	-122,2	9,3	5,4	10,3	—	—
Апатит	TiO ₂	34	-37,2	-35,0	2,0	3,0	0,1	-0,7	2,195
Ангидрит	CaSO ₄	76	-57,0	-52,5	4,2	2,8	3,9	—	298-1300
Англезит	PbSO ₄	80	-36,3	-32,5	5,9	1,8	5,1	+0,7	3,951
Андалузит	Al ₂ SiO ₅	86	-102,7	-96,8	3,7	6,8	1,0	-2,0	273-1373
Андезин № 40	(Na, Ca)[(Al, Si) ₂ Si ₂ O ₈]	168	—	—	—	10,6	2,2	-2,4	4,134
Андрадит	Ca ₂ Fe[Si ₂ O ₁₂]	219	-227,9	-214,4	13,0	17,4	2,9	-3,3	293-372
Авпит	KFe ₃ AlSi ₃ O ₁₀ (OH) ₂	250	-206,7	-192,4	15,4	6,4	18,4	—	4,871

Авортит	Ca[Al ₂ Si ₂ O ₈]	167	-167,4	-158,4	8,0	10,7	2,3	-2,8	—
Антимонит	Sb ₂ S ₃	122	-6,9	-6,9	7,2	4,0	2,2	—	—
Антофиллит	Mg ₇ [Si ₈ O ₂₂](OH) ₂	431	-481,1	-452,2	20,8	33,0	5,7	-8,7	3,224
Арагонит	CaCO ₃	56	-47,9	-44,8	3,5	3,3	1,7	-0,5	—
Аргентит	β-Ag ₂ S	57	—	—	—	3,2	0,6	—	—
Афвиллит	Ca ₃ [Si ₂ O ₇] · 3H ₂ O	215	-189,7	-174,8	12,4	13,5	7,5	-2,4	2,228
Бадделит	α-ZrO ₂	35	-43,5	-41,3	2,0	2,8	0,3	-0,6	298-1478
Барит	BaSO ₄	86	-58,5	-54,0	5,2	5,6	—	-1,4	4,038
Бемит	Al ₂ O ₃ · H ₂ O	65	-78,0	-72,1	3,8	4,8	1,4	—	273-1323
Бисмит	Bi ₂ O ₃	83	-22,8	-19,6	6,5	3,9	1,8	—	—
Бредигит	α-Ca ₂ [SiO ₄]	85	—	—	—	5,3	1,8	-0,9	—
Бромаргирит	AgBr	48	-4,0	-3,9	4,3	1,3	2,6	—	—
Бромеллит	BeO	14	-23,8	-22,6	0,6	1,4	0,7	-0,5	3,056
Брусит	Mg(OH) ₂	40,8	-36,8	-33,2	2,5	2,2	2,6	—	292-323
Бунзенит	α-NiO	18	-9,5	-8,4	1,5	0,8	6,2	+0,6	—
Бунзенит	γ-NiO	196	-118,4	-107,9	9,1	2,2	0,3	—	—
Вайрокуит	Ca[Al ₂ Si ₄ O ₁₂] · 2H ₂ O	319	-263,4	-245,9	15,8	9,5	19,1	—	—
Валентинит	Sb ₂ O ₃	83	-28,1	-24,9	4,9	3,2	2,8	—	—
Виллемит	Zn ₂ [SiO ₄]	87	-64,9	-60,4	5,2	6,5	0,5	-1,3	1,826
Виллемит	NaF	25	-22,7	-21,5	2,0	1,7	0,0	-0,05	273-1265
Висмут самородный	Bi	35	0	0	2,3	0,7	0,9	—	3,387
Витерит	α-BaCO ₃	76	-49,4	-46,2	4,4	3,6	1,8	-0,6	273-1083
Вода (жидк.)	H ₂ O	30	-11,3	-9,4	2,8	3,0	—	—	2,988
Вода (газ)	H ₂ O	40 617	-9,0	-9,1	7,5	1,2	0,4	—	273-373
Водластонит	Ca[SiO ₃]	60	-64,7	-61,3	3,3	4,4	0,6	-1,1	1,332
Вюртцит	ZnS	40	-7,7	-7,0	2,7	1,9	0,2	-0,1	273-2000
Вюстит	FeO	20	-10,6	-9,8	2,3	1,9	0,3	-0,1	3,383

Название	Формула	$\gamma_{\text{м}}^{\text{м}}, \text{л}^3$	$\frac{\Delta H_{298}^{\text{V}}}{\text{ф. ед.}} \times 10^{-22}$	$\frac{\Delta ZV_{298}^{\text{V}}}{\text{ф. ед.}} \times 10^{-22}$	$\frac{S_{298}^{\text{V}}}{\text{ф. ед.}} \times 10^{-22}$	$C_p^{\text{V}} = a + bT + cT^{-2}$			C_p^{V}
						a	$b \cdot 10^4$	$c \cdot 10^{-4}$	
						[кал/(ф. ед) · градус] · 10 ⁻²²			
Газ	CO	40 617	-4,4	-5,4	7,8	1,1	0,2	—	$\frac{1.156}{200-2500}$
»	CO ₂	40 617	-15,6	-15,7	8,5	1,8	0,3	-0,3	$\frac{1.473}{298-2500}$
»	O ₂	40 617	0	0	8,1	1,2	0,2	-0,1	$\frac{1.165}{273-2000}$
»	S ₂	40 617	-5,1	-3,1	9,0	1,4	0,0	+0,1	$\frac{1.202}{273-2000}$
»	SO ₂	40 617	-11,8	-11,9	9,9	1,8	0,3	-0,3	$\frac{1.579}{289-1800}$
»	SO ₃	40 617	-15,7	-14,7	10,2	2,3	1,0	-0,5	$\frac{2.609}{273-900}$
»	Cl ₂	40 617	0	0	8,8	1,5	0	-0,1	$\frac{1.346}{273-1500}$
»	F ₂	40 617	0	0	8,0	1,4	0,1	+0,1	$\frac{1.248}{273-2000}$
»	H ₂	40 617	0	0	5,2	1,1	0,1	+0,02	$\frac{1.144}{273-3500}$
»	H ₂ O	40 617	-9,6	-9,1	7,5	1,2	0,4	—	$\frac{1.332}{273-2000}$
»	H ₂ S	40 617	-0,8	-1,3	8,2	1,3	0,5	-0,1	$\frac{1.348}{273-1300}$
Галенит	PbS	52	-3,9	-3,8	3,6	1,8	0,6	—	$\frac{1.964}{273-873}$
Галит	NaCl	45	-16,3	-15,2	2,9	1,8	0,6	—	$\frac{2.025}{273-1073}$
Гаусманит	$\alpha\text{-Mn}_2\text{O}_4$	78	-55,0	-50,8	5,9	5,7	1,8	-0,4	—
Геденбергит	CaFe[Si ₂ O ₆]	113	-112,9	-106,2	6,3	8,7	1,7	-2,0	—

Гейккит	MgTiO ₃	51	-62,4	-58,9	3,0	4,7	0,6	-1,1	$\frac{3.641}{298-1800}$
Гейландит	Ca[Al ₂ Si ₇ O ₁₈] · 6H ₂ O	528	-419,6	-387,1	28,6	12,5	41,2	—	—
Геленит	Ca ₂ Al ₂ SiO ₇	150	-158,0	-150,0	7,9	10,6	1,3	-2,5	—
Гематит	$\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$	50	-32,7	-29,4	3,5	3,9	3,1	-0,6	$\frac{4.150}{298-1100}$
»	$\beta\text{-Fe}_2\text{O}_3$	—	-32,7	-29,4	3,5	6,0	—	—	—
»	$\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$	—	-32,7	-29,4	3,5	5,3	0,3	—	—
Герценбергит	$\alpha\text{-SnS}$	48	-4,2	-4,1	3,0	1,4	1,2	+0,1	—
Герцинит	FeAl ₂ O ₄	67	-78,6	-76,0	4,2	6,1	0,9	-1,3	—
Гибсит	Al ₂ O ₃ · 3H ₂ O	106	-101,5	-90,6	5,6	2,9	15,1	—	—
Гидроксиплатит	Ca ₂ (PO ₄) ₂ (OH)	263	-533,8	-518,6	15,5	19,0	3,3	-4,2	—
Гидрофиллит	CaCl ₂	84	-31,5	-29,8	4,5	2,9	0,5	-0,1	—
Гипсбраунит	Ca ₂ [SiO ₄] · 1,17H ₂ O	119	-105,8	-98,4	6,4	6,8	3,7	-1,2	—
Гипс	CaSO ₄ · 2H ₂ O	124	-80,6	-71,4	7,7	3,6	12,6	—	$\frac{7.381}{298-2300}$
Гидролит	Ca ₂ Si ₂ O ₇ · 2,5H ₂ O	233	-195,2	-180,2	10,6	13,2	6,0	-2,9	—
Глаукофан	Na ₂ Mg ₃ Al ₂ [Si ₆ O ₂₂](OH) ₂	442	-479,0	-449,9	21,4	27,4	10,8	-6,0	—
Глет	PbO	40	-8,7	-7,5	2,6	1,8	0,7	—	0,343
Графит	C	9	0	0	0,2	0,7	0,2	-0,3	—
Гринокит	CdS	50	-5,9	-5,8	2,8	2,1	0,1	—	—
Гроссуляр	Ca ₃ Al ₂ [Si ₃ O ₁₂]	208	-261,0	-247,4	12,8	3,6	18,8	—	—
Датолит*	CaB[SiO ₄](OH)(?)	88(?)	—	-91,6	—	—	—	—	—
Диаспор	Al ₂ O ₃ · H ₂ O	59	-78,8	-72,6	2,8	4,5	1,8	+1,6	—
Диопсид	CaMg[Si ₂ O ₆]	110	-127,1	-120,2	5,7	8,8	1,3	-2,6	—
Дистен	Al ₂ SiO ₆	72	-102,7	-96,8	3,3	6,8	1,2	-2,1	$\frac{4.831}{298-1700}$
Доломит	CaMg(CO ₃) ₂	108	-92,6	-86,1	6,2	7,7	2,4	-1,9	—
Жадент	NaAl[Si ₂ O ₆]	1002	-119,4	-112,3	5,3	6,2	4,7	—	$\frac{6.365}{298-1700}$
Жидкость (вода)	H ₂ O	30	-11,3	-9,4	2,8	3,0	—	—	2,988
Золото самородное	Au	17	0	0	1,9	0,9	0,2	—	$\frac{273-373}{3.948}$
Ильменит	FeTiO ₃	53	-49,1	-46,0	4,2	4,6	0,7	-0,8	$\frac{298-1640}{3.948}$

Название	Формула	$V_{\text{мол}}^{\text{н}}$, Å ³	$\Delta H_{298}^{\text{н}}$ ккал/ф. ед. × 10 ⁻³	$\Delta Z_{298}^{\text{н}}$ ккал/ф. ед. × 10 ⁻³	$S_{298}^{\text{н}}$ ккал/ф. ед. × 10 ⁻³	$C_{\mu}^V = a + bT + cT^{-2}$			\bar{C}_{μ}^V
						a	b · 10 ⁴	c · 10 ⁻⁴	
						(кал/(ф. ед) · градус) · 10 ⁻⁴			
Кальсилит	K [AlSiO ₄]	100	-82,8	-78,2	5,3	4,0	2,4	—	—
Кальцит	CaCO ₃	61	-47,9	-44,8	3,7	4,2	0,9	-1,0	$\frac{3.219}{298-1200}$
Каолинит	Al ₂ [Si ₂ O ₇](OH) ₄	245	-242,6	-223,8	12,0	18,3	5,6	-5,5	—
Карелинит	V ₂ O ₅	50	-48,4	-45,2	3,9	4,9	0,8	-0,9	—
Кариепит	α-Na [AlSiO ₄]	98	—	—	4,8	4,9	2,9	-1,0	—
Каршнит	β-Na [AlSiO ₄]	—	—	—	—	7,2	0,2	—	—
Касситерит	SnO ₂	36	-23,0	-20,6	2,1	2,9	0,4	-0,9	$\frac{2.087}{273-1373}$
Кварц	α-SiO ₂	38	-36,1	-34,0	1,6	1,9	1,4	-0,4	—
Кварц	β-SiO ₂	39	-36,2	-34,0	1,5	2,4	0,3	—	$\frac{1.763}{298-848}$
Кераргирит	AgCl	43	-5,0	-4,3	3,8	2,5	0,2	-0,4	—
Киповарь	HgS	47	-2,3	-2,0	3,3	1,8	0,6	—	—
Клиноферросилит	FeSiO ₃	55	-47,5	-44,4	3,7	4,3	0,9	-1,2	—
Клиноэнстатит	MgSiO ₃	52	-61,5	-58,0	2,7	4,1	0,8	-1,0	$\frac{3.257}{298-1600}$
Копеллин	CuS	33	-1,9	-1,9	2,6	1,8	0,4	—	$\frac{1.898}{273-1273}$
Кордиерит	Mg ₂ Al ₄ Si ₈ O ₁₈	371	-364,1	-343,8	16,2	23,9	4,3	-6,4	—
Корунд	Al ₂ O ₃	43	-66,3	-62,5	2,0	4,6	0,5	-1,4	$\frac{3.134}{273-1973}$
Котуннит	PbCl ₂	78	-14,3	-12,5	5,4	2,7	1,3	—	—
Кремний (твердый)	Si	20	0	0	0,7	0,9	0,2	-0,2	—
Криолит	Na ₃ AlF ₆	118	-131,2	-124,6	9,5	10,8	2,2	-3,4	$\frac{9.662}{273-838}$
Ксонотлит	Ca ₆ [Si ₆ O ₁₇](OH) ₂	436	-401,4	-378,6	20,1	22,0	10,8	-3,1	—

Куприт	Cu ₂ O	39	-6,7	-5,8	3,7	2,5	0,9	—	$\frac{2.773}{298-1200}$
Лавсонит (лосонит)	Ca [Al ₂ Si ₂ O ₈] · 2H ₂ O	168	-192,6	-178,6	9,4	13,3	5,8	-4,8	—
Ларнит	β-Ca ₂ [SiO ₄]	86	-91,6	-87,0	5,1	5,8	1,6	-1,0	—
Лейцит	K [AlSi ₂ O ₆]	147	-119,7	-113,1	7,3	8,6	1,3	-2,1	—
Леопардит	Ca ₂ [Al ₂ Si ₂ O ₂₄] · 7H ₂ O	671	-563,7	-522,0	36,6	17,2	51,2	—	—
Ломонит	Ca [Al ₂ Si ₄ O ₁₂] · 4H ₂ O	341	-287,2	-265,4	19,6	14,0	14,5	—	—
Лорепсит	FeCl ₂	66	-13,6	-12,0	4,7	3,1	0,3	-0,2	—
Магнезитоферрит	α-Mg ₂ Fe ₂ O ₄	74	-56,7	-52,3	4,9	3,5	7,4	—	—
Магнезитоферрит	β-Mg ₂ Fe ₂ O ₄	—	—	—	—	7,5	—	—	—
Магнезитоферрит	γ-Mg ₂ Fe ₂ O ₄	—	—	—	—	3,2	2,7	7,6	—
Магнезит	MgCO ₃	46	-44,2	-40,9	2,6	3,1	2,3	-0,7	$\frac{2.997}{298-1100}$
Магнетит	α-FeFe ₂ O ₄	74	-44,4	-40,4	6,0	3,8	8,0	—	$\frac{5.691}{298-1100}$
Магнетит	β-FeFe ₂ O ₄	—	-44,4	-40,4	6,0	8,0	—	—	—
Македонит **	α-PbTiO ₃	—	-282,8	—	31,0	22,51	11,70	—	—
Манганозит	MnO	22	-15,3	-14,4	2,4	1,8	0,3	-0,1	—
Масспект	PbO	39	-8,6	-7,5	2,7	1,5	1,1	—	—
Медь самородная	Cu	12	0	0	1,3	0,9	0,2	—	—
Мерверит	Ca ₂ Mg [Si ₂ O ₆]	173	-180,6	-171,6	10,0	12,1	2,0	-2,4	—
Микроклин	KAl [Si ₃ O ₈]	180	-157,0	-148,1	8,7	10,6	2,1	-2,8	—
Миллерит	NiS	28	-3,4	-3,4	2,6	1,5	1,1	—	—
Миниум	Pb ₃ O ₄	128	-28,5	-23,8	8,4	5,2	2,9	—	—
Молибденит	MoS ₂	53	-12,2	-11,8	2,5	1,9	2,2	—	—
Молибдит	MoO ₃	51	-29,6	-26,5	3,1	3,1	2,2	—	—
Молибдит	FeCl ₃	96	-15,9	-13,2	5,6	4,9	-1,0	—	—
Монтгопит	CaO	26	-10,2	-9,0	2,2	1,6	0,3	—	—
Мовтичелит	CaMg [SiO ₃]	85	-89,6	-84,9	4,3	5,7	1,5	-1,1	—
Монтмориллонит	Na _{0,33} [Al _{2,33} Si _{3,67} O ₁₀] × (OH) ₂	—	-236,9	-212,1	10,4	14,1	5,7	-3,3	—
Монтмориллонит	K _{0,33} [Al _{2,33} Si _{3,67} O ₁₀] × (OH) ₂ · H ₂ O	290	-241,6	-224,4	11,8	8,1	17,3	—	—
Монтрондит	HgO	32	-3,6	-2,3	2,8	2,0	0,3	-0,6	—
Муллит	3Al ₂ O ₃ · 2SiO ₂	223	-270,0	-255,6	10,7	18,5	2,2	-5,5	—
Мусковит	KAl ₃ Si ₃ O ₁₀ (OH) ₂	234	-237,4	-222,2	11,5	16,2	4,4	-4,2	—

Название	Формула	$\gamma_{m}^m, \text{Å}^3$	ΔH_{298}° ккал ф. ед. \times $\times 10^{-22}$	ΔZV_{298}° ккал ф. ед. \times $\times 10^{-22}$	S_{298}° ккал ф. ед. \times $\times 10^{-22}$	$C_p^V = a + bT + cT^{-2}$			C_p^V
						a	$b \cdot 10^4$	$c \cdot 10^{-4}$	
						[ккал/(ф. ед)·градус] 10^{-22}			
Мышьяк самородный	As	22	0	0	1,4	0,9	0,4	—	—
Несконт	CaSi ₂ O ₃ ·2H ₂ O	153	-124,5	-113,9	6,8	7,4	3,1	-1,7	—
Нефелин	Na[AlSi ₃ O ₈]	91	-82,3	-77,9	4,9	6,1	1,2	-1,8	4,712
Нитробарит	Ba(NO ₃) ₂	134	-39,4	-31,0	8,5	5,0	5,9	-0,7	—
Ольдгамит	CaS	46	-19,0	-18,8	2,2	1,7	0,6	—	—
Ортоферросаялит	FeSiO ₃	55	-47,3	-44,2	3,7	3,4	1,9	—	—
Отавит	CdCO ₃	58	-29,9	-26,8	3,0	1,9	4,7	—	—
Парагонит	Na[AlSi ₃ O ₈](OH) ₂	219	-235,8	-220,7	10,9	15,0	4,4	-3,4	—
Паргасит	NaCa ₂ Mg ₄ Al ₃ Si ₆ O ₂₂ (OH) ₂	452	-502,4	-473,2	23,3	33,8	5,7	—	—
Периклаз	MgO	19	-23,9	-22,6	1,1	1,7	0,3	-0,2	1,484
									273—2073
Перовскит	α -CaTiO ₃	56	-65,9	-62,5	3,7	5,1	0,2	-1,1	3,875
									298—1530
Пикрохромит	MgCr ₂ O ₄	72	—	—	4,2	0,8	0,5	-1,8	—
Пирит	FeS ₂	40	-6,8	-6,4	2,1	3,0	0,2	-0,5	2,457
									273—773
Пирролюзит	MnO ₂	28	-20,7	-18,5	2,1	2,8	0,4	-0,6	—
Пироп	Mg ₃ Al ₂ [Si ₃ O ₁₂]	188	-251,0	-237,2	10,8	20,5	1,5	-11,0	—
Пирофиллит	Al ₂ [Si ₄ O ₁₆](OH) ₂	210	-223,5	-208,8	9,9	12,6	6,2	-2,9	—
Платина самородная	Pt	15	0	0	1,6	1,0	0,2	+0,02	—
Пломбьерит	Ca ₃ Si ₄ O ₁₇ ·10,5H ₂ O	—	-483,2	-439,4	32,1	30,2	—	—	—
Портландит	Ca(OH) ₂	55	-39,1	-35,6	3,3	3,2	1,8	—	—
Процит	Ca ₂ [Al ₂ Si ₃ O ₁₀](OH) ₂	236	-245,2	-230,3	11,5	13,5	6,2	-2,9	—
Псевдобрукит	Fe ₂ TiO ₅	91	—	—	6,2	7,6	0,9	-1,2	—

10 Завис 793	Пумпеллит	Ca ₂ MgAl ₂ Si ₆ O ₂₂ (OH) ₂ × × 2H ₂ O	489	-505,0	-530,3	30,1	34,8	15,6	-7,3	—
	Ранклинит	Ca ₃ [Si ₂ O ₇]	162	-157,0	-149,1	8,4	5,7	8,8	—	—
	Риверсайдит	Ca ₅ Si ₈ O ₁₇ ·3H ₂ O	444	-394,2	-367,6	20,4	23,8	12,4	-3,5	—
										3,427
	Родонит	Mn[SiO ₃]	58	-52,4	-49,2	4,1	4,4	0,6	-1,0	298—1500
										3,234
	Родохрозит	MnCO ₃	52	-35,3	-32,4	4,0	3,7	1,5	-0,8	298—660
										2,185
	Рутил	TiO ₂	31	-37,4	-35,2	2,0	3,0	0,0	-0,7	298—1300
	Самборнит	Ba[Si ₂ O ₆]	122	-102,2	-96,7	6,0	6,9	0,5	-1,1	—
	Сапидин	KAlSi ₃ O ₈	181	-156,7	-148,0	9,4	10,6	2,1	-2,8	—
	Сапфирин	Mg ₂ Al ₄ Si ₁₀	165	-209,4	-197,7	9,1	15,8	1,6	-6,0	—
	Сапфирин природный моноклиный ***	Mg _{1,78} Al _{2,25} × × [Al _{2,73} Si _{0,76} O ₁₀]	—	-220,3	-208,1	7,6	15,3	1,6	-4,6	—
	Сапфирин синтетический триклинный ***	Mg ₂ Al ₄ Si ₁₀	—	-218,3	-206,3	8,2	—	—	—	—
	Селитра	NaNO ₃	62	-18,5	-14,5	4,6	4,6	1,0	—	—
	Сера ромбическая	S	26	0	0	1,3	0,6	1,0	—	—
	Сера моноклиная	S	27	—	—	—	—	—	—	—
	Серебро самородное	Ag	17	0	0	1,7	0,8	0,3	+0,1	—
	Серпентин	Mg ₃ [Si ₂ O ₆](OH) ₄	178	-173,5	-160,5	8,9	9,6	11,0	-1,7	—
									3,259	
Сидерит	FeCO ₃	49	-29,5	-26,7	4,2	1,9	4,4	—	298—885	
									4,806	
Силдманит	Al ₂ SiO ₅	83	-102,5	-96,7	3,8	6,5	1,3	-1,8	298—1600	
									2,044	
Спильвин	KCl	62	-17,3	-16,2	3,3	1,6	0,9	+0,14	273—1043	
									3,181	
Смитсонит	ZnCO ₃	46	-32,2	-29,0	3,3	1,5	5,5	—	298—573	
Сперрит	Ca ₃ [Si ₂ O ₆](CO ₃)	245	-234,0	-221,0	10,7	13,1	7,7	—	—	

Название	Формула	V _м , Å ³	ΔH_{298}^V ккал ф. ед. × × 10 ⁻²²	ΔZ_{298}^V ммол ф. ед. × × 10 ⁻²²	S_{298}^V ммол ф. ед. × × 10 ⁻²²	C _p ^V = a + bT + cT ⁻²			C _p ^V
						a	b · 10 ⁴	c · 10 ⁻⁴	
						(ккал/(ф. ед) · градус) · 10 ⁻²²			
Ставролит	Fe ₂ Al ₁₀ Si ₁₂ O ₂₂ (OH)	370	-478,5	-444,1	23,4	29,0	8,5	-0,1	—
Стекло	SiO ₂	45	-35,8	-33,8	1,9	2,2	0,6	-0,6	1,760 298-1520
Стронцианит	SrCO ₃	66	-48,0	-45,7	3,9	3,9	1,0	-0,8	1,786 298-800
Сфалерит	ZnS	40	-8,3	-8,1	2,3	2,0	0,2	-0,2	1,826 273-1173
Сфеи	CaTiSiO ₆	92	-103,3	-97,6	5,1	7,0	0,9	-1,6	—
Тальк	Mg ₃ [Si ₃ O ₁₀](OH) ₂	226	-235,0	-219,9	10,3	16,8	3,3	-4,9	—
Тенардит	α-Na ₂ SO ₄	88	-55,0	-50,4	5,9	2,5	9,8	—	5,047 298-518
Тепорит	CuO	20	-6,2	-5,1	1,7	1,5	0,8	—	1,760 298-1250
Тейфронит	Mn ₂ [SiO ₄]	80	-68,6	-64,8	6,5	6,2	1,0	-1,1	—
Тиллит	Ca ₃ [Si ₂ O ₇](CO ₃) ₂	287	-252,8	-2380,0	14,9	20,0	3,4	-4,9	—
Тоберморит	Ca ₂ Si ₁₀ O ₁₇ · 5,5H ₂ O	504	-424,3	-392,0	24,3	18,4	31,4	—	—
Торпанит	ThO ₂	44	-48,7	-46,4	2,6	2,6	0,5	-0,3	—
Тремолит	Ca ₂ Mg ₅ [Si ₈ O ₂₂](OH) ₂	453	-490,1	-461,3	21,8	14,2	32,1	—	—
Ульвит	Fe ₂ TiO ₄	78	—	—	6,7	5,5	2,5	-0,6	—
Уранинит	UO ₂	41	-43,0	-40,9	3,1	3,2	0,3	-0,7	—
Фаялит	Fe ₂ SiO ₄	77	-58,7	-54,7	5,8	6,1	1,6	-1,1	5,271 298-1400
Фепакиит	Be[SiO ₄]	61	-85,7	-81,1	2,6	4,1	0,9	-2,3	3,792 —
Феррикордиерит	Fe ₂ Al ₄ Si ₅ O ₁₈	385	-335,3	-315,9	18,6	24,5	4,4	-0,2	—

16*

Феррипаргасит	NaCa ₂ Fe ₄ Al ₃ Si ₁₀ O ₂₂	464	-445,9	-418,2	27,4	33,1	7,8	—	—
Ферритремолит	Ca ₂ Fe ₅ [Si ₈ O ₂₂](OH) ₂	469	-417,0	390,5	26,6	29,1	10,5	-8,0	—
Флогопит	KMg ₃ [AlSi ₃ O ₁₀](OH) ₂	248	-2,5	-233,0	12,7	15,5	4,9	-5,5	2,660 273-1450
Флюорит	α-CaF ₂	41	-48,2	-46,1	2,7	2,4	1,2	+0,1	4,678 298-1800
Форстерит	Mg ₂ [SiO ₄]	72,7	-86,5	-81,8	3,8	5,9	1,1	-1,4	—
Фошагит	Ca ₄ [Si ₃ O ₁₀] · 1,5H ₂ O	268	-239,0	-223,7	10,7	14,6	0,7	-2,2	—
Фторфлогопит	KMg ₃ [AlSi ₃ O ₁₀]F ₂	243	-253,1	-238,9	12,4	16,8	2,9	-3,6	—
Хальковин	Cu ₂ S	46	-3,2	-3,4	4,8	1,6	5,2	—	3,028 273-376
Хлорит	Mg ₃ Al ₂ Si ₃ O ₁₁ (OH) ₃	346	-353,2	-327,6	19,2	19,3	11,6	—	—
Хлоритоид	FeAl ₂ SiO ₅ (OH) ₂	116	-126,6	-117,7	7,9	8,5	3,2	-1,7	—
Хлормagnesит	MgCl ₂	68	-25,5	-23,5	3,6	3,1	0,2	-0,3	—
Хромит	FeCr ₂ O ₄	74	-58,0	-54,0	5,8	6,5	0,9	-1,3	5,303 298-1800
Целестин	Sr[SO ₄]	77	-57,6	-53,1	4,7	3,6	2,2	—	4,350 293-369
Цернаит	CeO ₂	40	-43,2	-40,8	2,5	2,5	0,4	—	—
Церуссит	PbCO ₃	67	-27,9	-25,0	5,2	2,1	4,7	—	3,470 286-390
Цинкит	ZnO	24	-13,8	-12,0	1,7	1,9	0,2	-0,4	1,59 273-1573
Цинковит	ZnSO ₄	69	-38,8	-34,4	4,4	2,8	3,5	—	—
Цитрон	ZrSiO ₄	65	-80,4	-75,8	3,4	5,2	0,6	-1,3	3,906 298-1800
Цонзит	Ca ₂ [Al ₂ Si ₃ O ₁₂](OH)	227	-271,9	-256,5	12,6	18,7	2,6	-5,7	—
Цонзит ****	Ca ₂ [Al ₂ Si ₃ O ₁₂](OH)	227	-272,4	-256,7	11,6	19,7	1,5	-5,2	—
Чермакит	CaAl ₂ SiO ₆	105	-130,4	-123,5	5,7	5,1	5,6	—	—
Шиппель	MgAl ₂ O ₄	66	-91,6	-86,6	3,2	6,1	1,1	-1,6	—
Эпидот ****	Ca ₂ Fe ³⁺ [Al ₂ Si ₃ O ₁₂](OH)	231	-256,7	-241,2	12,3	18,9	2,4	-4,8	—
Эсколаит	Cr ₂ O ₃	48	-45,3	-42,0	3,2	4,7	0,3	-0,6	—

Примечания: Все данные рассчитаны по работе И. К. Карпова и др. [35], кроме отмеченных звездочками, которые приведены по данным следующих работ для: * датолаита — [34] при P_{H₂O} = 1000 кгс/см², ** микседонита — [36]; *** санфирин природного моноклинного и синтетического триклинного — [30]; **** цонзита и эпидота — [40] при T = 298-1100° К. C_p^V — рассчитаны по значениям, приведенным в работе В. А. Нишоллея и В. В. Дольво-Добровольского. C_p^V = a + 0,00167 + $\frac{c \cdot 10^4}{T^2}$.

Приложение 7

Термодинамические параметры неорганических веществ в водном растворе,
приведенные к объему их формульных единиц
(при 298,15° К и $p=1$ кгс/см²)

Ион, молекула, комплексный ион	ΔH_f^{298}	ΔZ_f^{298}	S_{298}^V	C_p^{298}	β ,
	ккал. ф. ед. $\cdot 10^{-22}$	ккал. ф. ед. $\cdot 10^{-22}$	кал. ф. ед. $\cdot 10^{-22}$	кал. ф. ед. $\cdot 10^{-22}$	
Серебро					
Ag ⁺	4,2	3,1	2,9	1,0	3,3
Ag ²⁺	10,7	10,7	-3,5	—	—
AgOH ⁰	—	3,6	—	—	—
Ag(OH) ₂ ⁻	—	-10,3	—	—	—
AgCl	-2,9	-2,9	6,1	—	—
AgCl ₂ ⁻	-9,7	-8,6	9,2	—	—
AgF ⁰	-9,5	-8,1	1,0	—	—
AgHS ⁰	—	0,3	—	—	—
Ag(HS) ₂ ⁻	—	-0,2	—	—	—
AgSO ₄ ⁻	-31,6	-26,7	5,4	—	—
Ag ₂ S ₂ O ₃ ⁻	—	-19,3	—	—	—
Ag(S ₂ O ₃) ₂ ²⁻	-50,7	-40,8	2,9	—	—
Алюминий					
Al ³⁺	-21,1	-19,5	-11,9	1,5 (6) *	5,1
Al(OH) ²⁺	-30,4	-27,8	-6,2	—	—
Al(OH) ₂ ⁺	—	-36,0	—	—	—
Al(OH) ₃ ⁰	—	-44,1	—	—	—
Al(OH) ₄ ⁻	-59,1	-51,8	5,7	—	—
AlF ²⁺	-34,2	-32,2	-6,6	—	—
AlF ₂ ⁺	-47,2	-44,6	-2,3	—	—
AlF ₃ ⁰	-60,5	-56,6	+0,3	—	—
AlF ₄ ⁻	-73,7	-68,3	1,6	—	—
AlF ₅ ²⁻	-87,0	-79,7	1,9	—	—
AlF ₆ ³⁻	-100,5	-90,9	0,8	—	—
AlSO ₄ ⁺	-56,8	-49,7	-7,6	—	—
Al(SO ₄) ₂ ⁻	-92,7	-79,7	-5,1	—	—
Мышьяк					
AsO ⁺	—	-6,2	—	—	—
H ₃ AsO ₃	-29,7	-25,6	7,7	8,1	27,2
H ₂ AsO ₃ ⁻	-28,6	-23,5	4,4	-2,0	-6,7

Пов. молекула, комплексный ион	ΔH_f^V 298°	ΔZ_f^V 298°	S^V 298°	C_p^V 298°	$b,$
	$\frac{\text{ккал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	$\frac{\text{ккал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	$\frac{\text{кал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	$\frac{\text{кал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	$\frac{\text{кал} \cdot 10^{-22}}{\text{ф. ед.} \cdot \text{градус.}}$
HAsO_3^{2-}	-27,3	-20,8	-0,6	-11,0	-37,0
AsO_3^{3-}	-26,3	-17,8	-7,4	-18,9	-63,3
H_3AsO_4	-36,0	-30,5	7,3	8,4	28,2
H_2AsO_4^-	-36,3	-30,0	4,6	-2,2	-7,3
HAsO_4^{2-}	36,1	-28,5	-0,2	-11,3	-37,9
AsO_4^{3-}	-35,4	-25,9	-6,5	-19,4	-65,1

Золото

Au^+	8,8	7,1	5,1	0,1	0,4
AuCl_2^-	-6,9	-6,0	10,2	—	—
AuCl_4^-	-12,9	-9,3	10,2	—	—
AuCl_3OH^-	—	-12,1	—	—	—
$\text{AuCl}_2(\text{OH})_2^-$	—	-14,7	—	—	—
$\text{AuCl}(\text{OH})_3^-$	—	-17,1	—	—	—
$\text{Au}(\text{OH})_4^-$	—	-19,3	—	—	—
$\text{Au}(\text{OH})_5^{2-}$	—	-25,7	—	—	—
$\text{Au}(\text{OH})_3^0$	—	-12,6	—	—	—

Бор

$\text{B}(\text{OH})_3^0$	-42,5	-38,4	6,5	-(4) *	—
$\text{B}(\text{OH})_4^-$	-53,3	-45,8	4,2	—	—
$\text{B}(\text{OH})_5^{2-}$	—	-52,4	—	—	—
$\text{B}(\text{OH})_6^{3-}$	—	-58,8	—	—	—
BF_4^-	-62,4	-59,2	8,0	—	—
$\text{BF}_3(\text{OH})^-$	-60,5	-56,2	4,3	—	—
$\text{BF}_2(\text{OH})_2^-$	—	-52,9	—	—	—

Барий

Ba^{2+}	-20,8	-21,7	0,3	-1,4	-4,6
$\text{Ba}(\text{OH})^+$	-29,7	-28,5	2,2	—	—
BaSO_4	—	-51,8	—	—	—

Ион, молекула, комплексный ион	$\Delta H_f^{IV} 298^\circ$	$\Delta Z_f^{IV} 298^\circ$	S_{298}^{IV}	$C_p^{IV} 298^\circ$	$b,$ кал. $\cdot 10^{-3}$ ф. ед. \cdot градус.
	ккал. ф. ед. $\cdot 10^{-23}$	ккал. ф. ед. $\cdot 10^{-23}$	кал. ф. ед. $\cdot 10^{-23}$	кал. ф. ед. $\cdot 10^{-23}$	

Бериллий

Be^{2+}	-16,0	-15,1	-7,8	3,9 (-1,7 ÷ +1,7) *	13,1
BeOH^+ *	-24,9*	-23,1*	-2,3 ÷ -0,7*		
$\text{Be}(\text{OH})_2^0$ *	(-44,1)*	-38,1 (-37,9)*	(2,1)*		
$\text{Be}(\text{OH})_3^{2-}$	—	-44,3	—	—	—
$\text{Be}(\text{OH})_2^0$	-34,2 *	-30,1 *	2,4*	—	—
$\text{Be}(\text{OH})_3^{2+}$	—	-71,6	—	—	—
BeF^+	-29,3	-27,6	-3,9	—	—
BeF_2^0	-42,3	-39,6	-0,6	—	—
BeF_3^-	—	-51,3	—	—	—
BeF_4^{2-}	—	-63,0	—	—	—

Висмут

Bi^{3+}	3,2	3,7	-7,0	-1,7	-5,8
BiO^+	—	-5,8	—	—	—
$\text{Bi}(\text{OH})_2^+$	—	-5,4	—	—	—
$\text{Bi}(\text{OH})_4^-$	—	-29,0	—	—	—
BiCl_2^{2+}	-2,8	-2,3	0,05	—	—
BiCl_2^+	—	-7,9	—	—	—
BiCl_3^0	—	-13,4	—	—	—
BiCl_4^-	—	-19,0	—	—	—

Углерод

CO	-4,8	-4,8	4,2	5,7	18,9
H_2CO_3	-27,8	-24,7	7,4	8,3	27,9
CO_2	-16,4	-15,3	4,8	5,2	17,6
HCO_3^-	-27,5	-23,3	3,6	-1,5	-4,9
CO_3^{2-}	-26,9	-21,0	-2,3	-9,9 (-12 ÷ -8) *	-33,2
CH_4	-3,5	-1,4	3,3		
$\text{C}_2\text{H}_4^{2-}$	-32,1	-26,5	3,2	6,1	20,4
				—	—

Кальций

Ca^{2+}	-21,5	-21,9	-2,2	0,05 (-1,8 ÷ -0,8) *	0,1
CaOH^+	-30,3	-28,5	-0,6		
CaSO_4^0	-57,5	-52,0	0,8		
CaCO_3^0	—	-43,6	—	—	—

Ион, молекула, комплексный ион	ΔH_f^{IV}	ΔZ_f^{IV}	S_f^{IV}	C_p^{IV}	b_f
	$\frac{\text{ккал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	$\frac{\text{ккал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	$\frac{\text{ккал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	$\frac{\text{ккал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	$\frac{\text{ккал} \cdot 10^{-22}}{\text{ф. ед.} \cdot \text{градус}}$
Хлор					
Cl ⁻	-6,6	-5,2	2,2		
Cl ₂ ⁰	-0,9	0,3	4,8	-5,4	-18,1
ClO ⁻	-4,3	-1,5	1,7	-	-
ClO ₂ ⁻	-2,6	0,7	4,0	-0,2	-0,5
ClO ₃ ⁻	-4,1	-0,3	6,5	-1,8	-5,9
ClO ₄ ⁻	-5,1	-0,3	7,3	-3,3	-10,9
HClO ⁰	-4,8	-3,2	5,8	-4,1	-13,6
HClO ₂ ⁰	-2,1	1,1	7,5	9,4	31,5
				8,3	27,9
Кобальт					
Co ²⁺	-2,3	-2,2	-4,3	1,5 (-2,6 ÷ -1,3) *	4,9
Co(OH) ₂ ⁰	-	-16,8	-	-	-
Co(OH) ₃ ⁻	-	-23,3	-	-	-
CoCl ⁺	-8,9	-7,4	-1,9	-	-
CoSO ₃ ⁰	-38,3	-32,3	-1,5	-	-
CoS ₂ O ₃ ⁰	-	-23,1	-	-	-
Co(HS) ⁺	-	-3,0	-	-	-
Co(HS) ₂ ⁰	-	-3,3	-	-	-
CO ²⁺	1,0	3,1	-12,6	2,0	6,6
Медь					
Cu ⁺	2,9	2,0	1,7	2,4	8,0
Cu ²⁺	2,6	2,6	-3,8	0,9 (-2,5 ÷ -0,5) *	1,5
Cu(OH) ⁺	-	-5,2	-	-	-
Cu(OH) ₃ ⁻	-	-19,5	-	-	-
Cu(OH) ₄ ²⁻	-	-26,0	-	-	-
CuF ⁺	-10,4	-8,8	-2,5	-	-
CuCl ₂ ⁻	-	-9,7	-	-	-
CuCl ⁺	-	-2,8	-	-	-
CuCO ₃ ⁰	-	-19,9	-	-	-
Cu(CO ₃) ₂ ²⁻	-	-41,6	-	-	-
CuSO ₄ ⁰	-33,3	-27,4	-0,7	-	-
Cu(HS) ₃ ⁻	-	-1,8	-	-	-
Фтор					
F ⁻	-13,2	-11,1	-0,6	-4,2	-14,0
HF	-12,7	-11,8	3,6	1,6 (0,6) *	5,2
HF ₂ ⁻	-26,2	-23,1	2,7	-	-

Ион, молекула, комплексный ион	$\Delta H_f^{IV} / 298^\circ$	$\Delta ZV / 298^\circ$	S_{298}^{IV}	$C_p^{IV} / 298^\circ$	δ ,
	ккал. ф. ед. · 10 ⁻²²	ккал. ф. ед. · 10 ⁻²²	кал. ф. ед. · 10 ⁻²²	кал. ф. ед. · 10 ⁻²²	кал. · 10 ⁻²² ф. ед. · градус.

Железо

Fe ²⁺	-3,7	-3,7	-4,2	1,3	4,4
Fe ³⁺	-2,0	-0,7	-11,1	1,0	3,3
Fe(OH) ⁺	-13,0	-11,5	0,2	—	—
Fe(OH) ₂ ⁰	—	-18,2	—	—	—
Fe(OH) ₃ ⁻	—	-24,7	—	—	—
Fe(OH) ₄ ²⁻	—	-30,8	—	—	—
Fe(HS) ₂ ⁰	—	-4,7	—	—	—
Fe(HS) ₃ ⁻	—	-4,7	—	—	—
Fe(OH) ²⁺	-11,6	-9,6	-4,1	—	—
Fe(OH) ₂ ⁺	—	-18,0	—	—	—
Fe(OH) ₃ ⁰	—	-26,9	—	—	—
Fe(OH) ₄ ⁻	—	-33,5	—	—	—
FeF ²⁺	-14,7	-13,2	-5,1	—	—
FeCl ²⁺	-7,7	-6,3	-4,6	—	—
FeCl ₂ ⁺	—	-11,5	—	—	—
FeCl ₃ ⁰	—	-16,5	—	—	—
FeSO ₄ ⁰	-39,7	-33,7	-1,5	—	—
FeSO ₄ ⁺	-37,1	-31,2	-3,8	—	—
FeHPO ₄ ⁺	-53,9	-46,4	-6,3	—	—
FeO ₄ ²⁻	-19,0	—	—	—	—

Водород

H ⁺	0	0	0	0	0
H ₂	-0,2	0,7	2,3	6,9	23,2
H ₂ O (ж)	-11,3	-9,4	2,8	3,0	—

Ртуть

Hg ₂ ²⁺	6,8	6,1	3,4	—	—
Hg ²⁺	6,8	6,5	-1,3	—	—
HgOH ⁺	-3,4	-2,1	2,8	—	—
Hg(OH) ₂ ⁰	-14,1	-10,9	5,6	—	—
HgOH ₃ ⁻	—	-20,1	—	—	—
HgCl ⁺	-0,7	-0,2	3,0	—	—

Продолжение прилож. 7

Ион, молекула, комплексный ион	ΔH_f^{298}	ΔZ_f^{298}	S_{298}	C_{p298}	b
	$\frac{\text{ккал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	$\frac{\text{ккал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	$\frac{\text{ккал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	$\frac{\text{ккал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	$\frac{\text{ккал} \cdot 10^{-22}}{\text{ф. ед.} \cdot \text{градус}}$
HgCl_2^0	-8,6	-6,9	6,1	—	—
HgCl_3^-	-15,4	-12,3	8,3	—	—
$\text{Hg}(\text{HS})_2^0$	—	-1,1	—	—	—
HgS_2^{2-}	(0,7) **	1,7	(1,7) **	—	—
HgS_2O_3^0	—	-20,5	—	—	—
$\text{Hg}(\text{S}_2\text{O}_3)_2^{2-}$	—	-47,9	—	—	—

Калий

K^+	-10,0	-11,2	4,0	0,9 (0,4) *	2,9
KSO_4^-	-45,9	-40,9	5,8	—	—

Магний

Mg^{2+}	-18,3	-18,1	-4,7	1,5 (-1 ÷ 0) *	5,1
MgOH^+	—	-24,9	—	—	—
MgF^+	-30,8	-29,6	-1,3	—	—
MgCO_3^0	—	-39,8	—	—	—
MgSO_4^0	54,3	-48,1	-2,1	—	—

Марганец

Mn^{2+}	-8,7	-9,1	-2,7	0,5 (-4,5 ÷ -1,2) *	1,7
MnOH^+	-17,7	-16,1	0,1	—	—
$\text{Mn}(\text{OH})_3^-$	—	-29,6	—	—	—
Mn^{3+}	4,0	-3,4	-8,5	-0,8	-2,6
MnO_4^{2-}	—	-19,6	—	—	—
MnO_4^-	-21,2	-17,5	7,8	-4,3 (-5,5 - 2,2) *	-14,6
MnSO_4^0	-44,7	-39,1	0,1	—	—

Молибден

MoO_4^{2-}	-39,6	-33,3	1,3	-12,3	-36,2
HMoO_4^-	—	-34,4	—	—	—
H_2MoO_4	—	-34,8	—	—	—
MoO_2^{2+}	-18,3	-16,3	-2,7	—	—
$\text{MoO}_2(\text{OH})^+$	—	-25,3	—	—	—

Ион, молекула, комплексный ион	$\Delta H_f^V_{298}$	$\Delta Z_f^V_{298}$	S_{298}^V	$C_{p,298}^V$	δ , кал. $\cdot 10^{-24}$ ф. ед. \cdot градус.
	кал. $\cdot 10^{-24}$ ф. ед.	кал. $\cdot 10^{-24}$ ф. ед.	кал. $\cdot 10^{-22}$ ф. ед.	кал. $\cdot 10^{-22}$ ф. ед.	

Натрий

Na^+	-0,5	-10,4	2,3	1,8	6,2
---------------	------	-------	-----	-----	-----

Ниобий

NbO_3^-	-40,5	-37,4	6,0	-3,1	-10,2
HNbO_3	-41,2	-39,1	9,1	7,3	24,4
NbO_2^+	—	-29,6	—	—	—

Никель

Ni^{2+}	-2,1	-1,8	-5,1	0,2 (-1,1 \div -2,8) *	0,8
Ni(OH)^+	—	-8,7	—	—	—
Ni(OH)_2^0	—	-16,6	—	—	—
Ni(OH)_3^-	—	-23,4	—	—	—
NiSO_4^0	-38,1	-31,8	-2,4	—	—
NiS_2O_3	—	-22,7	—	—	—

Кислород

O_2	-0,5	0,6	4,4	5,5	18,4
OH^-	-9,1	-6,2	-0,4	-5,9	-19,8

Фосфор

H_3PO_4	-51,1	-45,3	6,3	9,1 (3,5) *	30,5
H_2PO_4^-	-51,4	-44,9	3,6	-1,7 (-1,7 \div 0) *	-5,8
HPO_4^{2-}	-51,3	-43,2	-1,3	-10,5	-35,4
PO_4^{3-}	-50,7	-40,4	-8,7	-13,3	-44,5
H_3PO_3	-38,3	—	—	—	—
H_2PO_3^-	-38,5	—	—	—	—
HPO_3^{2-}	-38,5	—	—	—	—

Ион, молекула, комплексный ион	ΔH_f^{298}	ΔZ_f^{298}	S_{298}^V	C_p^{298}	δ
	ккал ф. ед. $\cdot 10^{-3}$	ккал ф. ед. $\cdot 10^{-3}$	ккал ф. ед. $\cdot 10^{-3}$	ккал ф. ед. $\cdot 10^{-3}$	ккал $\cdot 10^{-3}$ ф. ед. \cdot градус.

Свинец

Pb ²⁺	-0,1	-1,0	0,4	-2,1 (-2 ÷ 3) *	-7,0
Pb(OH) ⁺	(-9,8) *	-9,0	(3,7) *	—	—
Pb(OH) ₂ ⁰	(-19,0) *	-15,9	(5,6) *	—	—
Pb(OH) ₃ ⁻	(-28,3) *	-22,8	(6,8) *	—	—
Pb(OH) ₄ ^{2+***}	-40,8	—	10,7	—	—
Pb(OH) ₄ ^{4+***}	-41,8	—	9,7	—	—
PbF ⁺	—	-12,4	—	—	—
PbF ₂ ⁰	—	-23,7	—	—	—
PbF ₃ ⁻	—	-35,1	—	—	—
PbCl ⁺	—	-6,5	—	—	—
PbCl ₂ ⁰	—	-11,9	—	—	—
Pb(CO ₃) ₂ ²⁻	—	-44,7	—	—	—
PbSO ₄ ⁰	—	-31,1	—	—	—
Pb(HS) ₂ ⁰	—	-3,5	—	—	—
Pb(HS) ₃ ⁻	—	-3,3	—	—	—

Сера

H ₂ S	-1,6	-1,1	4,8	5,2	17,6
HS ⁻	-0,7	0,5	2,5	-5,6	-18,8
S ²⁻	1,3	3,4	-0,6	-15,9	-53,3
S ₂ ²⁻	1,2	3,2	1,1	-17,0	-57,1
S ₃ ²⁻	1,0	2,9	2,6	-18,0	-60,4
S ₄ ²⁻	0,9	2,7	4,1	—	—
S ₅ ²⁻	0,8	2,6	3,8	—	—
HSO ₄ ⁻	-35,3	-30,0	4,9	-2,8 (-0,3 ÷ 1,3) *	-9,5
SO ₄ ²⁻	-36,1	-29,5	0,7	-11,9	-39,8
H ₂ SO ₃	-24,2	-21,4	9,2	7,1	23,9
HSO ₃ ⁻	-24,9	-21,0	5,5	-2,8	-9,3
SO ₃ ²⁻	-25,2	-19,3	-1,2	-10,6	-35,7
SO ₂	-12,8	-11,9	6,4	4,2	13,9
H ₂ S ₂ O ₃	-24,0	-20,9	9,6	6,9	23,1
HS ₂ O ₃ ⁻	-24,8	-20,7	6,5	-3,4	-11,3
S ₂ O ₃ ²⁻	-25,9	-20,4	1,5	-11,9	-40,0

Поя. молекула, комплексный ион	ΔH^V_{298}	ΔZ^V_{298}	S^V_{298}	$C^V_{p, 298}$	$\delta,$ $\frac{\text{кал} \cdot 10^{-22}}{\text{ф. ед.} \cdot \text{градус}}$
	$\frac{\text{ккал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	$\frac{\text{ккал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	$\frac{\text{кал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	$\frac{\text{кал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-22}$	

Сурьма

SbCl ⁻	—	-18,9	—	—	—
Sb(OH) ₂ ⁺ *****	-18,9	-16,4	2,5	—	—
Sb(OH) ₃ ⁰ *	-20,7	-25,6	7,6	—	—
Sb(OH) ₄ ⁻ *	-39,2	-32,3	7,8	—	—
H ₂ SbO ₄	-36,0	—	—	—	—
Sb(OH) ₃ F ⁰ *	-32,8	-28,9	6,1	—	—

Кремний

H ₂ SiO ₄	-58,0	-52,0	7,1	8,5	28,6
H ₂ SiO ₄ ⁻	-56,6	-49,8	4,5	-2,9	-7,0
H ₂ SiO ₄ ²⁻	-55,4	-47,1	-0,5	-11,1	-37,4
SiO ₄ ⁴⁻	-53,7	-40,8	-16,0	—	—
SiF ₆ ²⁻	-95,1	-87,6	5,0	—	—
SiF ₄ ⁰	—	-64,0	—	—	—

Олово

Sn ²⁺	-1,0	-1,1	-2,8	0,4	1,3
Sn(OH) ⁺	—	-10,0	—	—	—
Sn(OH) ₂ ⁰	—	-18,4	—	—	—
Sn(OH) ₄ ⁰ *	-45,2	-37,8	4,6	—	—
Sn(OH) ₅ ⁰ *	-54,1	-44,5	5,6	—	—
Sn(OH) ₂ ⁻	—	-25,7	—	—	—
Sn(OH) ₃ F ⁰ *****	-45,4	-40,7	10,3	—	—
Sn(OH) ₄ F ⁻ *****	-60,8	-49,3	-0,5	—	—
Sn(OH) ₅ ⁺ *****	-44,7	-38,7	8,8	—	—
свежеосажденный SnF ⁺	—	-13,3	—	—	—
SnCl ⁺	—	-6,6	—	—	—
SnCl ₂ ⁰	—	-12,0	—	—	—
SnCl ₃ ⁻	—	-17,2	—	—	—
SnSO ₄ ²⁻	—	-31,0	—	—	—

Стронций

Sr ²⁺	-22,1	-22,7	-1,1	-0,8 (-2,0 ÷ -1,3)	-2,8
Sr(OH) ⁺	-31,0	-29,1	-0,2		—

Тантал

TaO ₃ ⁻	-45,7	-42,6	6,0	-3,1	-10,2
HTaO ₃	-46,9	-44,7	9,1	7,3	24,2
TaO ₂ ⁺	—	-35,6	—	—	—

Продолжение прилож. 7

Ион, молекула, комплексный ион	$\Delta H_f^{\text{V}}_{298}$	$\Delta Z_f^{\text{V}}_{298}$	S^{V}_{298}	$C^{\text{V}}_{p 298}$	δ
	ккал ф. ед. $\cdot 10^{-3}$	ккал ф. ед. $\cdot 10^{-3}$	кал ф. ед. $\cdot 10^{-3}$	кал ф. ед. $\cdot 10^{-3}$	кал $\cdot 10^{-3}$ ф. ед. \cdot градус.

Уран

UO_2^{2+}	-40,6	-38,2	-3,4	1,6 (-1,7 ÷ 1,7)	5,2
UO_2OH^+	-49,9	-46,4	2,4		
$\text{UO}_2(\text{OH})_2^0$	-60,1	-54,2	3,5 (2,0) *	—	—
$\text{UO}_2(\text{OH})_3^-$	—	-61,0	—	—	—
$\text{UO}_2(\text{OH})_4^{2-}$	—	-67,2	—	—	—
$[(\text{UO}_2)_2(\text{OH})]_2^{2+}$	-102,2	-93,8	0,3	—	—
UO_2F^+	-54,3	-50,4	-1,5	—	—
UO_2F_2^0	—	-62,5	—	—	—
UO_2F_3^-	—	-74,2	—	—	—
$\text{UO}_2\text{F}_4^{2-}$	—	-85,6	—	—	—
UO_2Cl^+	—	-43,4	—	—	—
$\text{UO}_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$	(-94,9) *	-84,1	(1,9) *	—	—
		(-83,5) *			
$\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$	(-122,5) *	-106,1	(0,2) *	—	—
$\text{UO}_2\text{CO}_3(\text{K}) *$	-67,2 *	-61,9 *	4,3 *	—	—
UO_2CO_3^0 (p. p.) *	-67,1 *	-60,9 *	2,0 *	—	—
UO_2SO_4^0	-75,9	-68,3	2,1	—	—
$\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2^{2-}$	-111,8	-98,1	4,5	—	—
UO_2^+	—	-38,4	—	—	—
U^{4+}	-23,5	-21,8	-13,7	-2,2	-7,3
$\text{U}(\text{OH})_3^{3+}$	-32,8	-31,2	-4,6	—	—
UF_3^{3+}	—	-36,2	—	—	—
UF_2^{2+}	—	-48,5	—	—	—
UF_3^+	—	-60,6	—	—	—
UF_4^0	—	-72,7	—	—	—
UF_5^-	—	-84,7	—	—	—
UF_6^{2-}	—	-95,8	—	—	—
UCl_3^{3+}	—	-26,8	—	—	—
U^{3+}	-19,5	-19,4	-6,1	-2,3	-7,8

Ванадий

V^{2+}	-9,0	-8,6	-5,4	2,1	7,1
V^{3+}	-10,4	-9,6	-9,5	-0,1	-0,3
VO^{2+}	-19,4	-17,7	-5,6	2,3	7,6
VO_2^+	-25,8	-23,3	-1,7	4,6	15,4
$\text{V}(\text{OH})_3^+$	—	-35,3	—	—	—
$\text{V}(\text{OH})_2^{2+}$	—	-18,3	—	—	—

Пов. молекула, комплексный ион	ΔH_f^V 298°	ΔZ_f^V 298°	S_{298}^V	C_p^V 298°	b, кал·10 ⁻³³ ф. ед. · градус
	кал. ф. ед. · 10 ⁻³³	кал. ф. ед. · 10 ⁻³³	кал. ф. ед. · 10 ⁻³³	кал. ф. ед. · 10 ⁻³³	
V(OH) ⁺	—	-16,6	—	—	—
V(OH) ₂ ⁺	—	-27,0	—	—	—
H ₃ VO ₄	—	-41,4	—	—	—
H ₃ VO ₄ ⁻	—	-40,4	—	—	—
HVO ₄ ²⁻	—	-38,4	—	—	—
VO ₄ ³⁻	—	-35,8	—	—	—
H ₃ V ₃ O ₇ ⁻	—	-74,1	—	—	—
V ₄ O ₁₂ ⁴⁻	—	-125,6	—	—	—
H ₂ V ₁₀ O ₂₉ ⁴⁻	—	-306,6	—	—	—
H ₂ V ₁₀ O ₂₉ ⁵⁻	—	-305,8	—	—	—
VOF ⁺	—	-20,6	—	—	—
VOF ₂ ⁰	—	-41,2	—	—	—
VOF ₃ ⁻	—	-52,7	—	—	—
VOSO ₄ ⁰	—	-47,8	—	—	—
Вольфрам					
H ₂ WO ₄	—	-38,3	—	—	—
HWO ₄ ⁻	—	-37,8	—	—	—
WO ₄ ²⁻	-42,6	-37,0	3,9	-13,9	-46,8
H ₇ (WO ₄) ₆ ⁴⁻	-266,2	-236,0	35,1	—	—
Цинк					
Zn ²⁺	-6,1	-5,8	-4,4	1,5 (-2,7 ÷ -1,7) *	4,9
Zn(OH) ⁺	(-14,5) *	-13,2	(2,5) *	—	—
Zn(OH) ₂ ⁰	(-25,6) *	-21,2	(-1,0) *	—	—
Zn(OH) ₃ ⁻	(-34,1) *	-28,0	(2,0) *	—	—
Zn(OH) ₄ ²⁻	(-43,9) *	-34,6	(0,7) *	—	—
ZnF ⁺	-19,0	-17,2	-2,8	—	—
Zn(HS) ₂ ⁰	—	-8,3	—	—	—
Zn(HS) ₃ ⁻	—	-8,1	—	—	—
Zn(S ₂ O ₃) ⁰	-31,5	-26,7	0,5	—	—
ZnSO ₄ ⁰	-42,1	-35,9	-1,5	—	—

Примечание: Все данные рассчитаны по работе Г. Б. Наумова и др. [64], кроме параметров, отмеченных звездочками, которые приведены исходя из данных работ: * — И. Л. Ходаковского [105]; ** — И. Л. Ходаковского и др. [106]; *** — И. А. Тугаринова и др. [97]; **** — М. Я. Половой и др. [78]; ***** — А. П. Клишовой и др. [41].

Приложение 8

Свободные удельные энергии образования ионов и нейтральных молекул
в водных растворах при повышенных температурах, приведенные к объему
их формульных единиц

$$\left(\Delta Z_{\text{г.}}^{\text{в}} \cdot \frac{\text{ккал}}{\text{ф. ед.}} \cdot 10^{-23} \right)^*$$

Ион, молекула	Температура, °С							
	25	50	100	150	200	250	300	350
Ag ⁺	3,1	3,0	2,8	2,5	2,3	2,0	1,8	1,6
Al ³⁺	-19,5	-19,4	-19,1	-18,9	-18,7	—	—	—
H ₃ AsO ₂ ⁰	-25,6	-25,3	-24,7	-24,1	-23,5	—	—	—
H ₂ AsO ₃ ⁻	-23,5	-23,1	-22,2	-21,3	-20,3	—	—	—
HAsO ₃ ²⁻	-20,8	-20,3	-19,0	-17,7	-16,2	—	—	—
AsO ₃ ³⁻	-17,8	-17,0	-15,4	-13,6	-11,6	—	—	—
H ₃ AsO ₄	-30,5	-30,1	-29,2	-28,3	-27,4	—	—	—
H ₂ AsO ₄ ⁻	-30,0	-29,8	-28,5	-27,3	-26,0	—	—	—
HAsO ₄ ²⁻	-28,5	-27,9	-26,4	-24,8	-23,1	—	—	—
AsO ₄ ³⁻	-25,9	-25,1	-23,3	-21,2	-19,0	—	—	—
Au ⁺	7,1	7,0	6,7	6,4	6,1	—	—	—
Ba ²⁺	-21,7	-21,8	-21,9	-22,1	-22,9	-22,3	-22,4	-22,3
Be ²⁺	-15,1	-15,1	-14,9	-14,9	-14,8	—	—	—
Bi ³⁺	3,6	3,7	3,8	3,8	3,9	—	—	—
Br ⁻	-4,1	-4,1	-3,8	-3,5	-3,2	-2,8	-2,4	-1,9
H ₂ CO ₃	-24,7	-24,5	-24,0	-23,6	-23,2	-22,9	-22,6	-22,4
HCO ₃ ⁻	-23,3	-22,9	-22,2	-21,5	-20,7	-19,9	-19,0	-18,2
CO ₃ ²⁻	-21,0	-20,4	-19,3	-18,1	-16,8	-15,4	-13,9	-12,3
Ca ²⁺	-21,9	-21,9	-22,0	-22,0	-22,0	-22,0	-22,0	-21,9
Cd ²⁺	-3,1	-3,1	-3,1	-3,1	-3,2	—	—	—
Cl ⁻	-5,2	-5,1	-4,8	-4,5	-4,1	-3,7	-3,3	-2,8
Co ²⁺	-2,2	-2,2	-2,2	-2,2	-2,3	—	—	—
CrO ₄ ²⁻	-28,6	-28,1	-26,9	-25,6	-24,2	—	—	—
Cs ⁺	-11,6	-11,7	-11,9	-12,1	-12,3	—	—	—
Cu ⁺	2,0	1,9	1,7	1,6	1,4	—	—	—
Cu ²⁺	2,6	2,6	2,6	2,5	2,5	—	—	—
F ⁻	-11,1	-10,9	-10,5	-10,1	-9,6	-9,0	-8,5	-7,9
Fe ²⁺	-3,7	-3,7	-3,7	-3,7	-3,7	—	—	—
Fe ³⁺	-0,7	-0,6	-0,4	-0,2	-0,0	—	—	—
Hg ²⁺	6,5	6,5	6,5	6,4	6,4	—	—	—
J ⁻	-2,1	-2,1	-2,0	-1,8	-1,5	-1,2	-0,9	-0,5
K ⁺	-11,2	-11,3	-11,5	-11,7	-11,9	—	—	—
Li ⁺	-11,6	-11,7	-11,8	-11,9	-12,0	-12,1	-12,2	-12,3
Mg ²⁺	-18,1	-18,0	-18,0	-18,0	-18,0	—	—	—
Mn ²⁺	-9,1	-9,1	-9,2	-9,3	-9,4	—	—	—
MoO ₄ ²⁻	-33,3	-32,7	-31,5	-30,2	-28,7	—	—	—
NO ₃ ⁻	-4,4	-4,1	-3,4	-2,7	-2,0	—	—	—
NH ₄ ⁺	-3,1	-3,0	-2,6	-2,3	-2,0	—	—	—

* Рассчитаны по данным Г. Б. Наумова и др. [64].

Ион, молекула	Температура, °C							
	25	50	100	150	200	250	300	350
Na ⁺	-10,4	-10,5	-10,6	-10,8	-10,9	-11,1	-11,1	-11,2
Ni ²⁺	-1,8	-1,8	-1,7	-1,7	-1,6	—	—	—
OH ⁻	-6,2	-6,0	-5,5	-4,9	-4,3	-3,6	-2,8	-2,0
H ₂ O [•]	-9,4	-9,2	-8,9	-8,6	-8,3	-8,0	-7,8	-7,5
H ₃ PO ₄	-45,3	-44,9	-43,9	-43,0	-42,2	—	—	—
H ₂ PO ₄ ⁻	-44,9	-44,3	-43,1	-40,3	-40,7	—	—	—
HPO ₄ ²⁻	-43,2	-42,5	-41,0	-39,4	-37,7	—	—	—
PO ₄ ³⁻	-40,4	-39,5	-37,6	-35,5	-33,2	—	—	—
Ph ²⁺	-1,0	-1,0	-1,2	-1,3	-1,4	—	—	—
H ₂ S	-1,1	-1,1	-1,0	-1,0	-1,0	-1,0	-1,0	-1,1
HS ⁻	0,5	0,6	0,8	1,1	1,5	2,0	2,5	3,2
S ²⁻	3,4	3,6	4,1	4,7	5,5	6,5	7,6	8,9
S ₂ ²⁻	3,2	3,3	3,8	4,5	5,4	—	—	—
HSO ₄ ⁻	-30,0	-29,5	-28,6	-27,6	-26,6	-25,5	-24,4	-23,3
SO ₄ ²⁻	-29,5	-29,0	-27,8	-26,4	-24,9	-23,4	-21,8	-20,0
H ₂ Se	0,9	0,9	0,9	0,9	0,8	—	—	—
HSe ⁻	1,7	1,8	2,1	2,4	2,8	—	—	—
Se ²⁻	5,1	5,4	5,9	6,7	7,5	—	—	—
H ₂ SeO ₃	-16,9	-16,7	-16,1	-15,7	-15,2	—	—	—
HSeO ₂ ⁻	-16,3	-16,0	-15,2	-14,4	-13,6	—	—	—
SeO ₂ ²⁻	-14,4	-13,9	-12,8	-11,6	-10,3	—	—	—
HSeO ₄ ⁻	-17,9	-17,5	-16,6	-15,6	-14,6	—	—	—
SeO ₄ ²⁻	-17,5	-17,0	-15,8	-14,4	-13,0	—	—	—
H ₂ SiO ₄	-52,0	-51,5	-50,6	-49,5	-48,5	-47,6	-46,6	—
H ₃ SiO ₄ ⁻	-49,8	-49,2	-47,9	-46,7	-45,3	-43,9	-42,4	—
H ₂ SiO ₄ ²⁻	-47,1	-46,4	-44,8	-43,1	-41,3	-39,3	-37,1	—
Sn ²⁺	-1,1	-1,1	-1,1	-1,1	-1,2	—	—	—
Sr ²⁺	-22,7	-22,7	-22,8	-23,0	-23,0	-23,1	-23,1	-23,1
H ₂ Te	3,6	3,6	3,6	3,7	3,7	—	—	—
HTe ⁻	4,2	4,3	4,6	4,9	5,4	—	—	—
Te ²⁻	6,9	7,2	7,8	8,6	9,4	—	—	—
H ₂ TeO ₃	-18,8	-18,6	-18,1	-17,6	-17,1	—	—	—
HTeO ₃ ⁻	-17,9	-17,6	-16,9	-16,1	-15,2	—	—	—
TeO ₃ ²⁻	-15,5	-15,0	-14,0	-12,8	-11,5	—	—	—
UO ₂ ²⁺	-38,2	-37,9	-37,5	-37,0	-36,6	-36,1	-35,6	-35,1
WO ₄ ²⁻	-37,0	-36,5	-35,4	-34,1	-32,7	—	—	—
V ²⁺	-8,6	-8,6	-8,5	-8,5	-8,5	—	—	—
V ³⁺	-9,6	-9,5	-9,4	-9,2	-9,1	—	—	—
VO ²⁺	-17,7	-17,6	-17,3	-17,1	-16,8	—	—	—
VO ₂ ⁺	-23,3	-23,1	-22,7	-22,3	-22,0	—	—	—
Zn ²⁺	-5,8	-5,8	-5,8	-5,8	-5,8	—	—	—

* Рассчитаны по данным Г. Б. Наумова и др. [64].

Приложение 9

Парциальные объемы формульных единиц ионов (в Å³)
при бесконечном разведении в водном растворе,
рассчитанные на основе данных работы Г. Б. Паумова и др. [64]
(при 25° С и 1 кгс/см²)

Ион	Куб. ангстр.	Электролит	Куб. ангстр.
Ag ⁺	-1,1	AgF	-5,0
Al ³⁺	-67,8	AgNO ₃	45,3
H ₂ AsO ₄ ⁻	56,3	AlCl ₃	20,6
AsO ₄ ³⁻	-25,8	Al(NO ₃) ₃	68,8
Ba ²⁺	-19,8	NaH ₂ AsO ₄	-31,0
Be ²⁺	-15,4	Na ₂ AsO ₄	37,1
BF ₄ ⁻	70,1	BaCl ₂	41,6
Br ⁻	39,5	BeCl ₂	99,2
Ca ²⁺	-28,5	NH ₄ BF ₄	37,6
Cd ²⁺	-32,3	NaBr	28,5
Cl ⁻	28,5	CaCl ₂	60,8
ClO ₃ ⁻	57,8	Cd(NO ₃) ₂	28,5
ClO ₄ ⁻	73,9	HCl	73,6
Co ²⁺	-40,3	KClO ₃	—
HCO ₃	36,6	NaClO ₃	—
CO ₃ ²⁻	-3,7	HClO ₃	—
Cr ³⁺	-63,2	HClO ₄	—
CrO ₄ ²⁻	31,5	NaClO ₄	—
Cu ²⁺	-39,4	NH ₄ ClO ₄	—
Cs ²⁺	34,2	CoCl ₂	17,3
Er ³⁺	-66,6	CoBr ₂	38,1
F ⁻	-3,8	KHCO ₃	—
Fe ²⁺	-41,9	NaHCO ₃	—
Fe ³⁺	-63,8	Na ₂ CO ₃	-10,7
H ⁺	0	K ₂ CO ₃	—
Hg ²⁺	-32	CrCl ₂	22,2
I ⁻	58,1	K ₂ CrO ₄	59,4
		Li ₂ CrO ₄	—
		Na ₂ CrO ₄	—
		CuSO ₄	-17,0
		CsCl	62,7
		CsBr	73,8
		ErCl ₃	18,9
		KF	10,6
		FeBr ₂	36,8
		FeSO ₄	-19,0
		Fe(NO ₃) ₃	79,5
		Fe(NO ₂) ₃	58,4
		—	—
		NaI	56,2

Ион	Куб. ангстр.	Электролит	Куб. ангстр.
		KJ	72,5
		CeJ	92,3
K ⁺	14,4	KCl	42,7
		KBr	53,9
La ³⁺	-63,4	LaCl ₃	22,9
Li	-1,1	LiCl	27,6
		LiBr	38,4
		LiJ	57,0
Mg ²⁺	-33,8	MgCl ₂	23,2
Mn ²⁺	-27,4	MnBr ₂	50,7
MnO ₄ ⁻	68,2	KMnO ₄	82,7
Na ⁺	-1,9	NaCl	26,4
Nd ³⁺	-38,6	NdCl ₃	16,8
Ni ²⁺	-38,6	NiSO ₄	-16,2
NH ₄ ⁺	29,1	NH ₄ Cl	57,6
NO ₂ ⁻	41,9	NaNO ₂	—
		KNO ₂	—
NO ₃ ⁻	46,6	KNO ₃	60,8
OH ⁻	-6,6	NaOH	-8,5
Pb ²⁺	-25,1	Pb(NO ₃) ₂	68
H ₂ PO ₄ ⁻	46,6	NaH ₂ PO ₄	—
		KH ₂ PO ₄	—
HPO ₄ ²⁻	12,3	NaHPO ₄	8,5
Rb ⁺	22,4	RbCl	50,9
		RbBr	61,9
ReO ₄ ⁻	78,1	NaReO ₄	75,0
S ²⁻	-12,6	Na ₂ S	-14,6
SO ₃ ²⁻	14,2	Na ₂ SO ₃	—
		K ₂ SO ₃	—
HSO ₄ ⁻	49,8	NaHSO ₄	43,2
SO ₄ ²⁻	22,4	Na ₂ SO ₄	—
		K ₂ SO ₄	—
HSeO ₄ ⁻	50,2	H ₂ SeO ₄	50,2
SeO ₄ ²⁻	33,4	Na ₂ SeO ₄	—
		K ₂ SeO ₄	—
Sr ²⁺	-28,2	SrCl ₂	28,8
Tl ⁺	20,6	TlF	16,8
Th ⁴⁺	-85,8	Th(NO ₃) ₄	100,2
		ThCl ₄	28,5
WO ₄ ²⁻	41,1	Na ₂ WO ₄	—
		K ₂ WO ₄	—
UO ₃ ²⁺	12,8	UO ₂ Cl ₂	69,3
		UO ₂ (NO ₃) ₂	106,4
Yb ³⁺	-70,6	YbCl ₃	14,9
Zn ²⁺	-34,6	ZnSO ₄	-12,2

Приложение 10

Коэффициенты для вычисления удельных энтропии и энтальпии
при различных температурах

$t, ^\circ\text{C}$	A_s	$B_s, 10^{-3}$	$C_s, 10^4$	A_H	$B_H, 10^{-2}$	$C_H, 10^3$
50	0,0805	0,0250	0,0837	25	7,77	25,95
100	0,2244	0,0750	0,2034	75	25,17	67,41
150	0,3501	0,1250	0,2832	125	45,08	99,07
200	0,4618	0,1750	0,3391	175	67,49	124,05
250	0,5623	0,2250	0,3797	225	92,40	144,24
300	0,6535	0,2750	0,4102	275	119,81	160,92
350	0,7372	0,3250	0,4337	325	149,71	174,92
400	0,8144	0,3750	0,4521	375	182,12	186,84
450	0,8860	0,4250	0,4668	425	217,03	197,11
500	0,9529	0,4750	0,4788	475	254,44	206,05
550	1,0115	0,5250	0,4886	525	294,35	213,91
600	1,0745	0,5750	0,4969	575	336,75	220,87
650	1,1302	0,6250	0,5038	625	381,66	227,07
700	1,1829	0,6750	0,5096	675	429,07	232,63
750	1,2329	0,7250	0,5147	725	478,98	237,65
800	1,2806	0,7750	0,5190	775	531,39	242,29
850	1,3262	0,8250	0,5228	825	586,29	246,36
900	1,3697	0,8750	0,5261	875	643,70	250,15
950	1,4115	0,9250	0,5290	925	703,61	253,63
1000	1,4515	0,9750	0,5316	975	766,02	256,85
1050	1,4900	1,0250	0,5339	1025	830,93	259,81
1100	1,5271	1,0750	0,5359	1075	898,33	262,57
1150	1,5629	1,1250	0,5377	1125	968,24	265,12
1200	1,5974	1,1750	0,5394	1175	1040,65	267,51
1250	1,6308	1,2250	0,5409	1225	1115,56	269,74
1300	1,6631	1,2750	0,5422	1275	1192,97	271,82
1350	1,6944	1,3250	0,5435	1325	1272,87	273,78
1400	1,7247	1,3750	0,5446	1375	1355,28	275,62
1450	1,7542	1,4250	0,5456	1425	1440,19	277,36
1500	1,7828	1,4750	0,5465	1475	1527,60	278,99

Коэффициенты для вычисления удельного изобарного потенциала
при различных температурах

$t, ^\circ\text{C}$	$T-298$	A_2	$B_2, 10^{-4}$	$C_2, 10^3$
50	25	1,02	0,31	1,09
100	75	8,73	2,81	8,48
150	125	23,15	7,81	20,77
200	175	43,50	15,31	38,40
250	225	65,15	25,31	54,43
300	275	99,58	37,81	74,21
350	325	134,38	52,81	95,33
400	375	173,19	70,31	117,49
450	425	215,72	90,31	140,48
500	475	261,71	112,81	164,13
550	525	310,94	137,81	188,32
600	575	363,20	165,31	212,97
650	625	418,33	195,31	237,99
700	675	476,17	227,81	263,33
750	725	536,47	262,81	288,94
800	775	599,32	300,31	314,78
850	825	664,50	340,31	340,83
900	875	731,91	382,81	367,05
950	925	801,44	427,81	393,43
1000	975	873,03	475,31	419,95
1050	1025	946,57	525,31	446,59
1100	1075	1022,01	577,81	473,33
1150	1125	1099,26	632,81	500,18
1200	1175	1178,27	690,31	527,10
1250	1225	1258,99	750,31	554,11
1300	1275	1341,34	812,81	581,19
1350	1325	1425,28	877,81	608,33
1400	1375	1510,75	945,31	635,53
1450	1425	1597,74	1015,31	662,79
1500	1475	1686,17	1087,81	690,09

Приложение 12

Формульные объемы H_2O ($\text{Å}^3/\text{ф. ед.}$; УМ_{H_2O}) при разных температурах
и давлении (все величины меньше приведенных в 1924 раза, множитель 10^{-24} опущен)

Давление, нбар	Температура, °C									
	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
1.10 ⁻³	50 680	54 943	78 876	92 750	106 593	120 437	134 281	148 069	161 849	175 633
1.10 ⁻²	31,186	6159.4	7708.2	9149.4	10761.0	11989.9	13386.2	14776.6	16163.9	17551.3
5.10 ⁻³	31,1199	34,4747	1357.16	1728.52	2050.54	2353.13	2643.76	2931.10	9214.3	3498.3
0,1	31,0541	34,3312	41,7703	790.85	981.02	1147.26	1302.74	1392.14	1598.75	1742.87
0,2	30,8867	33,8591	40,6580	298.40	531.62	542.98	530.59	712.52	789.36	865.31
0,4	30,6415	33,5627	39,109	57,378	168,247	242,011	297,116	344,45	387,50	428,76
0,6	30,3814	33,099	37,973	48,976	88,354	144,357	187,503	222,875	255,077	284,708
0,8	30,1392	32,6927	37,076	45,508	65,451	101,122	135,148	163,882	189,686	213,576
1,0	29,960	32,352	36,299	43,176	56,631	79,893	105,995	129,616	150,726	170,041
1,2	29,961	31,993	35,641	41,561	51,936	68,381	77,680	107,969	125,879	142,414
1,4	29,4874	31,724	35,103	40,335	48,707	61,385	77,172	93,408	108,746	123,128
1,6	29,0867	31,425	34,594	39,289	46,435	56,660	69,488	83,122	96,398	108,985
1,8	29,1106	31,156	34,116	38,426	44,641	53,252	63,926	75,557	87,158	98,311
2,0	28,943	30,917	33,338	37,674	43,205	50,651	59,770	69,816	80,012	89,969
2,2	28,764	30,677	32,980	36,986	42,010	48,558	56,511	65,302	74,361	83,301
2,4	28,614	30,438	32,651	36,418	40,993	46,853	53,880	61,684	69,816	77,890
2,6	28,435	30,229	32,352	35,880	40,096	45,418	51,727	58,724	65,840	73,405
2,8	28,285	30,020	30,857	35,372	39,289	44,162	49,903	56,242	62,910	69,637
3,0	27,329	29,541	29,900	34,923	38,601	43,086	48,318	54,119	60,219	66,438
4,0	27,478	29,003	29,093	33,129	35,910	39,169	42,877	46,913	51,189	55,554
5,0	26,910	28,285	28,435	31,814	34,056	36,627	39,498	42,607	45,896	49,275
6,0	26,402	27,657	27,299	30,737	32,651	34,804	37,166	39,707	42,368	45,119
7,0	25,983	27,119	26,850	29,900	31,544	33,368	35,402	37,525	39,797	42,099
8,0	25,594	26,641	23,950	29,152	30,618	32,232	33,996	35,850	37,794	39,827
9,0	25,236	26,222	22,335	28,525	29,870	31,305	32,860	34,505	36,239	38,003
10,0	24,937	25,774	21,199	27,986	29,182	30,498	31,903	33,368	34,923	36,508
20,0	22,724	23,352	19,605	24,608	26,162	25,983	26,731	27,478	28,285	29,093
30,0		21,857		22,844	23,322	23,860	24,368	24,907	25,445	26,013
40,0		20,780		21,618	22,036	22,455	22,903	23,322	23,770	24,219
50,0				20,661	21,020	21,408	21,797	22,156	22,545	22,933
60,0				19,883	20,212	20,517	20,900	21,229	21,588	21,917
70,0				19,256	19,556	19,854	20,153	20,452	20,780	21,109
80,0				18,957	18,957	19,226	19,495	19,794	20,093	20,392
90,0					18,448	18,687	18,927	19,196	19,465	19,734
100,0					18,030	18,239	18,448	18,658	18,897	19,166

Примечание. Для получения удельных объемов значений из таблицы умножить на $0,0334 \cdot 10^{24}$, а мольных — на $0,6023 \cdot 10^{24}$. Таблицы рассчитаны по данным [10].

Формульные объемы CO_2 (Аз. ф. ед.; $V_{\text{CO}_2}^M$) при разных температурах и давлении (все величины меньше приведенных в 10^{24} раза, множитель 10^{-24} опущен)

Давление, бар	Температура, °C									
	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
1×10^{-3}	51 389	65 278	79 094	92 983	106 799	120 542	134 431	148 173	162 063	175 878
1×10^{-2}	5029.3	6476.7	7887.5	9290.1	10687.2	12083.4	13465.0	14861.2	16242.8	17617.1
5×10^{-2}	905.71	1249.28	1558.49	1856.7	2141.8	2426.9	2719.3	2924.0	3274.9	3545.3
0.1	387.4	598.69	770.47	928.4	1081.9	1228.1	1330.4	1513.2	1652.1	1798.3
0.2	151.32	282.90	381.58	468.57	548.98	626.47	701.76	774.9	848.0	921.1
0.3	110.38	187.87	257.31	317.98	374.27	427.63	479.54	529.97	578.95	628.66
0.4	96.565	146.93	198.83	244.88	288.74	329.68	369.89	407.90	445.91	483.19
0.5	89.18	125.73	165.94	203.22	238.31	271.93	304.83	335.53	365.5	397.66
0.6	84.43	113.3	145.47	176.47	205.41	233.92	260.97	288.01	313.60	338.45
0.7	80.85	104.53	130.12	156.43	182.02	206.14	228.07	250.0	271.93	292.4
0.8	78.29	98.68	119.88	145.47	164.47	185.67	206.14	225.15	243.42	260.97
0.9	76.17	93.57	113.30	133.04	152.05	170.32	188.60	205.41	221.49	237.57
1.0	74.31	89.91	107.46	125.0	141.81	157.90	174.71	189.33	203.95	217.84
1.1	72.808	86.99	102.34	118.42	133.77	148.39	163.01	176.90	190.06	203.22
1.2	71.42	84.80	98.68	113.30	127.19	140.35	153.51	165.94	178.36	190.06
1.3	70.32	82.60	95.76	108.92	121.35	133.77	145.47	157.16	168.13	179.09
1.4	69.22	80.41	92.84	105.26	116.96	127.92	138.59	149.12	160.09	170.32
1.5	69.15	79.68	90.64	100.88	111.84	122.81	133.04	143.28	154.24	184.94
2.0	64.69	68.71	80.41	88.45	96.49	103.80	111.84	119.15	127.19	134.50
2.5	61.84	67.25	75.29	81.87	88.45	95.03	100.88	107.46	113.30	119.15
3.0	59.94	65.79	—	78.22	84.06	89.91	95.03	100.88	105.99	111.11
3.5	58.48	63.60	—	74.56	79.68	84.06	89.18	93.57	97.95	102.34
4.0	56.29	60.67	—	70.91	75.29	80.41	85.53	89.18	94.30	98.68
4.5	55.56	59.94	—	67.98	72.37	76.02	80.41	84.80	88.45	92.84
5.0	54.82	58.48	—	65.79	69.44	73.1	76.75	80.41	83.33	87.72
5.5	53.36	57.02	—	63.60	66.52	70.18	73.1	76.02	79.68	82.60
6.0	52.63	55.56	—	61.40	64.33	67.25	70.18	73.1	76.02	78.95
6.5	51.90	54.82	—	59.94	62.13	65.06	67.25	70.18	72.37	75.29
7.0	51.17	53.728	—	58.48	60.67	62.87	65.06	67.25	69.44	71.64
7.5	50.804	52.997	—	57.02	59.21	61.40	63.231	65.06	67.25	69.44
8.0	50.29	52.266	—	55.92	57.968	59.94	61.77	63.60	65.79	67.617
8.5	49.781	51.609	—	55.264	57.02	58.919	60.67	62.50	64.33	66.155
9.0	49.342	51.17	—	54.752	56.506	58.334	59.94	61.40	63.60	65.06
9.5	48.977	50.804	—	54.240	55.922	57.676	59.21	60.67	62.50	63.962
10.0	48.611	50.51	—	54.094	55.629	57.383	58.772	60.45	61.77	63.231

Примечание. Для получения удельных объемов значения из таблицы умножить на $0,0137 \cdot 10^{24}$, а молярных — на $0,6023 \cdot 10^{24}$.

Приложение 14

Формульные объемы C_2H_4 (л/ф. ед.) при разных температурах и давлениях (все величины меньше приведенных в 10^{24} раза, множитель 10^{-24} опущен)

Давление, кбар	Температура, °C						
	25	50	100	150	200	300	400
$1 \cdot 10^{-2}$	40 778	43 624	50 407	57 190	63 973	77 406	90 972
$1 \cdot 10^{-2}$	4017	4309	5001	5692	6392	7732,6	9091,9
$5 \cdot 10^{-3}$	617,12	819,3	978,9	1127,8	1274,1	1540,1	1811,5
0,1	355,11	388,4	478,8	561,3	638,4	768,7	904,4
0,2	169,71	101,25	239,93	284,6	327,71	396,3	465,5
0,3	125,55	137,79	168,64	198,97	227,96	275,84	324,52
0,4	108,26	115,98	136,99	158,80	180,35	218,39	256,16
0,5	97,36	104,27	119,97	136,46	153,48	187,0	218,39
0,6	90,97	96,29	109,06	122,36	136,19	165,98	194,71
0,7	86,45	90,97	101,88	112,52	123,96	150,02	176,09
0,8	82,73	86,72	95,76	105,34	114,91	138,85	163,32
0,9	80,07	83,26	90,97	99,75	108,26	131,14	153,75
1,0	77,94	80,60	87,51	95,23	102,94	124,49	146,3
1,5	70,49	72,35	77,14	82,19	87,25	104,80	123,96
2,0	65,97	67,03	70,49	74,21	77,94	85,39	92,83
2,5	61,98	63,31	66,5	69,43	72,62	78,74	84,85
3,0	59,85	60,91	63,31	65,97	68,63	73,95	79,0
3,5	58,25	59,05	61,18	63,57	65,70	69,96	74,48
4,0	56,39	57,19	59,05	60,91	63,04	67,03	71,02
4,5	55,06	55,86	57,46	59,32	63,31	64,64	68,36
5,0	54,0	54,53	56,13	57,72	59,32	62,78	65,97
6,0	51,60	52,14	54,0	55,33	56,66	59,32	62,24
7,0	50,54	51,07	52,40	53,47	54,53	56,92	59,05
8,0	48,94	49,48	50,54	51,34	52,40	53,73	56,66

Примечание. Для получения удельных объемов значения из таблицы умножить на $0,0375 \cdot 10^{24}$, а мольных — на $0,6023 \cdot 10^{24}$.

Соотношения между различными физическими единицами измерений
Соотношения между единицами давления

Единицы давления	бар	атм	кгс/см ²	мм. рт. ст.	фунт/дюйм ² (р. в. л)
1 бар (10 ⁶ дин/см ²)	1	0,9869	1,0197	750,07	14,504
1 атм	1,0132	1	1,0332	760,00	14,696
1 кгс/см ²	0,9807	0,9078	1	735,57	14,224
1 мм рт. ст.	0,001333	0,001316	0,001359	1	0,01934
1 фунт/дюйм ² (р. в. л)	0,06895	0,06805	0,07031	51,715	1

Продолжение прилож. 15

Соотношения между единицами энергии или работы

Единицы энергии и работы	дж	кгм	кал
1 Дж	1	0,102	0,2390
1 кгм	9,81	1	2,34
1 кал	4,184	0,427	1
1 ккал	4,184 · 10 ³	427	10 ³
1 см ³ · атм	0,1013	1,03 · 10 ⁻²	2,4217 · 10 ⁻²
1 л · атм	101,3	10 ³	24,21
1 А ³ · атм	0,1013 · 10 ⁻²⁴	1,03 · 10 ⁻⁸	2,4217 · 10 ⁻²⁶

Единицы энергии и работы	ккал	см ³ · атм	л · атм	А ³ (кгс) см ²
1 Дж	2,390 · 10 ⁻⁴	9,869	9,87 · 10 ⁻³	1,638 · 10 ²³
1 кгм	2,34 · 10 ⁻³	96,8	9,68 · 10 ⁻²	1,609 · 10 ²⁵
1 кал	10 ⁻³	41,293	4,13 · 10 ⁻²	6,8549 · 10 ²⁴
1 ккал	1	4,129 · 10 ⁴	41,3	6,8549 · 10 ²⁷
1 см ³ · атм	2,4217 · 10 ⁻⁵	1	10 ⁻³	10 ²⁴
1 л · атм	2,421 · 10 ⁻²	10 ³	1	10 ²⁷
1 А ³ · атм	2,4217 · 10 ⁻²⁹	10 ⁻²⁴	10 ⁻²⁷	1

Численные значения некоторых постоянных величин и коэффициентов

1 ккал/моль = $0,16602 \cdot 10^{-23}$ ккал/ф. ед.

1 ккал/ф. ед. = $6,023 \cdot 10^{+23}$ ккал/моль.

1 удельно-изобарно-потенциальная единица (уд.-пзб.-п. ед.) = $0,16602 \cdot 10^{-23}$ ккал/моль.

1 удельно-энтропийная единица (уд.-э. ед.) = $0,16602 \cdot 10^{-23}$ ккал/моль·град.

1 ккал = $6,8549 \cdot 10^{27}$ кгс/см²·Å³.

V_m^* — объем одного грамм-моля (грамм-молекулярный = мольный = молекулярный объем) вещества, см³/моль: $V_m^* = 0,6023 \cdot 10^{+24} V_m^*$, где V_m^* — объем одной формульной единицы вещества в Å³.

1 ф. ед. — формульная единица.

Объем одной формульной единицы вещества $V_m^* = 1,6602 \cdot V_m \times 10^{-24}$ см³/моль.

Объем одного грамм-моля идеального газа при $t = 0^\circ \text{C}$ и $p = 1$ кгс/см² равен 22,414 л.

1 Å³ — один куб. ангстрем = 10^{-24} см³; 1 анг. = 10^{-8} см.

Число Авогадро $N_0 = 6,023 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹ (химич. шкала) или $6,025 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹ (физич. шкала).

Универсальная газовая постоянная $R = 1,9872$ кал/градус·моль = $82,0567$ см³·Хатм/градус·моль = $8,3144$ Дж/градус·моль = $0,848$ кгм/градус·моль = $0,3298 \cdot 10^{-23}$ кал/градус·(ф. ед.) = $1,3802 \cdot 10^{-23}$ Дж/градус·(ф. ед.) = $0,1408$ кгм/градус·(ф. ед.).

C_p^V (кал/градус·ф. ед.) = $1,6602 \cdot 10^{-24} C_p$ (кал/моль·градус).

Φ — переводной коэффициент от Å³·кгс/см² в ккал и равен $2,4217 \cdot 10^{-28}$ ккал·см²/Å³·кгс. см. подстрочное примечание на с. 146.

ОГЛАВЛЕНИЕ

	С.
Предисловие	3
Условные обозначения	5

Часть первая

О способах сравнения химизма горных пород различного состава и генезиса

Глава I. Массовое процентное содержание при изобъемном сравнении химизма горных пород	13
Глава II. Атомное процентное содержание при изобъемном сравнении химизма горных пород	24
Глава III. Выражение химизма горных пород в объемно-атомных единицах	35

Часть вторая

Атомно-объемная система пересчета

Глава I. Задачи и предпосылки атомно-объемной системы пересчета	41
Глава II. Сущность атомно-объемной системы пересчета	43
Глава III. Практические приемы пересчета по атомно-объемной системе	49
§ 1. Расчеты по результатам химического анализа пород	49
§ 2. Расчеты по результатам определения количественного минерального состава пород	51
§ 3. Расчеты по результатам химического анализа пород и данным об их количественном минеральном составе	58
§ 4. Расчеты по результатам химического анализа пород и данным об их субмодальном составе	66

Часть третья

Формульно-объемная и формульно-атомная нормативные системы пересчета

Глава I. Расчеты с использованием формульно-объемной нормативной системы	74
§ 1. Расчеты количества атомов в стандартном объеме пород по результатам их химического анализа и данным о качественном минеральном составе	74
§ 2. Расчеты субмодальных составов пород по результатам их химического анализа и данным о плотности и качественном минеральном составе	79
Глава II. Расчеты с использованием формульно-атомной нормативной системы	90

Часть четвертая

Использование атомно-объемной и нормативной систем для установления закономерностей метасоматического минерало- и породообразования и сравнения химического состава пород

Глава I. Установление и выражение особенностей миграции вещества в процессе метасоматического минерало- и породообразования	100
§ 1. Установление характера и величины припоса — выноса вещества в условиях постоянного геологического объема пород	100
§ 2. Установление характера и величины припоса — выноса вещества в условиях изменяющегося геологического объема пород	106
Глава II. Установление связи между продуктами биметасоматизма и балансом вещества этого процесса образования пород	112
Глава III. Установление связи между химизмом процесса метасоматизма и характером метасоматического минерало- и породообразования и некоторые проблемы зависимости минерального состава от внешних условий	116
§ 1. Объемные соотношения при метасоматических и метаморфических реакциях замещения	116
§ 2. Расчет реакций метасоматического минералообразования пород по данным объемных соотношений частных реакций метасоматического минералообразования	129
§ 3. Расчет реакций метасоматического минералообразования при возникновении полиминеральных пород различного состава и пористости	134
Глава IV. О возможности установления главнейших термодинамических условий реальных процессов метасоматического породообразования	136
§ 1. Термодинамический анализ метасоматического минералообразования	138
§ 2. Термодинамический анализ метасоматического породообразования	158
Заключе н и е	165
Список литературы	166
Приложение 1. Рассчитанные значения коэффициента	171
Приложение 2. Атомные массы химических элементов	172
Приложение 3. Таблицы для определения количеств атомов элементов минерала в 0,1 стандартного объема породы на основе объемного процентного содержания минерала	173
Приложение 4. Таблицы для определения общего количества атомов анионов в стандартном объеме массы вещества породы по данным содержания минеральных составляющих в объемных процентах	174
Приложение 5. Кристаллохимические параметры главнейших минеральных составляющих горных пород и руд	181
Приложение 6. Термодинамические свойства веществ, приведенные к объему их формульных единиц	234
	267

- Приложение 7. Термодинамические параметры неорганических веществ в водном растворе, приведенные к объему их формульных единиц
- Приложение 8. Свободные удельные энергии образования ионов и нейтральных молекул в водных растворах при повышенных температурах, приведенные к объему их формульных единиц
- Приложение 9. Парциальные объемы формульных единиц ионов (в \AA^3) при бесконечном разведении в водном растворе, рассчитанные на основе данных работы Г. Б. Наумова и др. [64]
- Приложение 10. Коэффициенты для вычисления удельной энтропии и энтальпии при различных температурах
- Приложение 11. Коэффициенты для вычисления удельного изобарного потенциала при различных температурах
- Приложение 12. Формульные объемы H_2O при разных температурах и давлении
- Приложение 13. Формульные объемы CO_2 при разных температурах и давлении . . .
- Приложение 14. Формульные объемы CH_4 при разных температурах и давлении . .
- Приложение 15. Соотношения между различными физическими единицами измерения
- Приложение 16. Численные значения некоторых постоянных величин и коэффициентов

244
255
257
259
260
261
262
263
264
265

III М 660

Вячеслав Александрович Рудин

**ОБЪЕМНО- И НОРМАТИВНО-АТОМНЫЕ
ПЕТРОХИМИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ
ПЕРЕСЧЕТОВ**

Редакторы издательства
А. М. Поспелова, Л. С. Циплина
Переводчик художника **В. Ю. Лисенкова**
Художественный редактор **В. В. Едковиков**
Технический редактор **В. В. Соколова**
Корректор **Е. В. Наумова**

Спано в набор 14.11.77. Подписано в печать 12.10.78.
Т-13193. Формат 70 × 100^{1/16}. Бумага № 2.
Гарнитура обыкновенная. Печать высокая.
Печ. л. 17,0. Усл. п. л. 21,9. Уч.-изд. л. 23,40.
Тираж 880 экз. Заказ 793/7545 — 14.
Цена 1 р. 70 к.

Издательство «Недра», 103633, Москва, К-12,
Третьяковский проезд, 1/19.
Отпечатано на Ленинградской картографической
фабрике объединения «Аэрогеология» с набора
Ленинградской типографии № 6 Союзполиграфпрома
при Государственном комитете СССР
по делам издательства,
полиграфии и книжной торговли.
196006, Ленинград, Московский пр., 81.

УВАЖАЕМЫЙ ТОВАРИЩ!

**Издательство «Недра»
готовит к печати новые книги**

КАЗИЦЫН Ю. В. *Метасоматизм в земной коре*, 19 л. 1 р. 30 к.

В книге рассмотрены основы метасоматизма как геологического явления, определяющего главные особенности дифференциацией вещества земной коры, перераспределения, рассеяния и накопления петрогенных и рудных элементов. Доказано существование поляризованности геохимических и кристаллических параметров метасоматизма в зависимости от его направленности. Показано распространение сопряженных метасоматических систем в геологическом пространстве и времени. Сделаны выводы о значении этих систем для металлогенетического прогноза доисков и оценки гидротермальных месторождений. Приведены закономерности метасоматического псевдоморфизма и химизма среды минералообразования.

Книга рассчитана на геологов, занятых поисками и разведкой рудных месторождений, а также петрологов, минералогов, геохимиков, изучающих проблемы источников рудного вещества.

КАЖДАН А. Б., ГУСЬКОВ О. И., ШИМАНСКИЙ А. А.
Математическое моделирование в геологии и разведке полезных ископаемых. Учеб. пособие для вузов. 12 л. 45 коп.

В книге рассмотрены основы геолого-математического моделирования строения и свойств природных минеральных образований применительно к решению различных геологических задач. Изложены принципы и методы геолого-математического моделирования как одного из методов познания недр Земли. Описаны сущность и условия применения одно-, дву- и многомерных статистических моделей, горно-геометрические методы моделирования и модели типа случайных функций. Приведены примеры использования этих моделей при различных геологических и минералого-петрографических исследованиях в процессе изучения геологии и разведки месторождений полезных ископаемых.

Учебное пособие предназначено для студентов геологических специальностей вузов и соответствует программе курса «Основы геолого-математического моделирования», читаемого в Московском геологоразведочном институте им. С. Орджоникидзе. Книга также будет интересна и полезна всем специалистам, занимающимся проблемами геологии и разведки месторождений полезных ископаемых.

КОПЧЕНОВА Е. В. Минералогический анализ шлихов и рудных концентратов. 20 л. 1 р. 40 к.

Минералогическое изучение шлихов и рудных концентратов, получаемых при отмывке водой природных рыхлых отложений или раздробленных плотных горных пород, широко используется при проведении геологопоисковых и разведочных работ. В книге описана общая схема минералогического анализа шлихов. Рассмотрены подготовка проб и деление их на фракции. Описаны различные физические и химические методы диагностики минералов шлихов. Дана таблица — определитель минералов по их физическим и химическим свойствам. Особое внимание уделено диагностике минералов россыпей.

Книга предназначена в качестве методического и практического руководства для специалистов, занимающихся минералогическим анализом. Она также представляет интерес для геологов и минералогов, проводящих шлиховые пробы.

ЛЯХОВИЧ В. В. Акцессорные минералы горных пород: Учеб. пособие для вузов. 20 л. 90 коп.

В книге дано всестороннее описание акцессорных минералов Горных пород. Охарактеризованы особенности формы, состава и содержания минералов рудных и редких элементов в изверженных, эффузивных и осадочно-метаморфических породах. Изложена методика их выделения. Приведены средние содержания акцессорных минералов в различных типах горных пород по среднему содержанию в них рудных и редких элементов. Показана эффективность и необходимость использования этих данных при решении многих металлогенических и петрологических задач.

Учебное пособие предназначено для студентов геологических специальностей вузов и соответствует программе курса «Петрография изверженных горных пород». Книга также будет полезна петрологам, петрографам и минералагам научно-исследовательских и производственных геологических организаций.

МЕТОДИЧЕСКИЕ основы исследования химического состава горных пород, руд и минералов. Остроумов Г. В., Хитров В. Г., Малышев В. И. и др. 27 л. 1 р. 80 к.

В книге описаны назначение и особенности изучения химического состава минерального сырья при проведении геологоразведочных работ. Поставлены требования к качеству аналитических исследований минерального сырья. Дана характеристика химических, физико-химических и физических методов определения состава горных пород и минералов при содержании определяемых компонентов от 10^{-6} до десятков процентов. Рассмотрены весовые, объемные, фотометрические, люминесцентные и электрохимические методы анализа. Описаны количественный спектральный и рентгеноспектральный анализы, рентгеноструктурный анализ, радиометрический и рентгенорадиометрический методы анализа, а также нейтронный активационный, нейтронно-абсорбционный, фотонейтронный и плазменный анализы. Для каждого вида анализа даны условия применимости, описаны аппаратура и методика работ.

Книга предназначена в качестве методического руководства для научно-технического персонала аналитических лабораторий, занимающихся анализом минерального сырья, а также инженерно-технических работников геологической службы.

МИЛОВСКИЙ А. В. Минералогия и петрография: Учебник для техникумов. 4-е изд., перераб. и доп. 30 л. 1 р. 40 к.

Книга состоит из разделов «Минералогия» и «Петрография». Раздел «Минералогия» включает общую часть, посвященную рассмотрению химического состава, свойств, морфологии, условий образования минералов, и часть, содержащую описание минералов. В разделе «Петрография» изложены основные сведения о магматических, осадочных и метаморфических горных породах. Приведены также основные понятия по кристаллографии и геохимии, знакомящие студентов с этими дисциплинами и способствующие усвоению материала по минералогии и петрографии.

В четвертом издании (3-е изд. — 1973) учтены новейшие данные по характеристике некоторых минералов и горных пород.

Учебник предназначен для учащихся средних геологоразведочных учебных заведений по курсам «Минералогия» и «Петрография».

Интересующие Вас книги Вы можете приобрести в местных книжных магазинах, расширяющих научно-техническую литературу, или заказать через отдел «Книга—почтой» магазинов:

№ 17 — 199178, Ленинград, В. О., Средний проспект, 61;

№ 59 — 127412, Москва, Коровинское шоссе, 20.

ИЗДАТЕЛЬСТВО «НЕДРА»

170 n.

170 n.