



Лекция
Методы реконструкции
физико-химических условий

Геологическая часть лекций

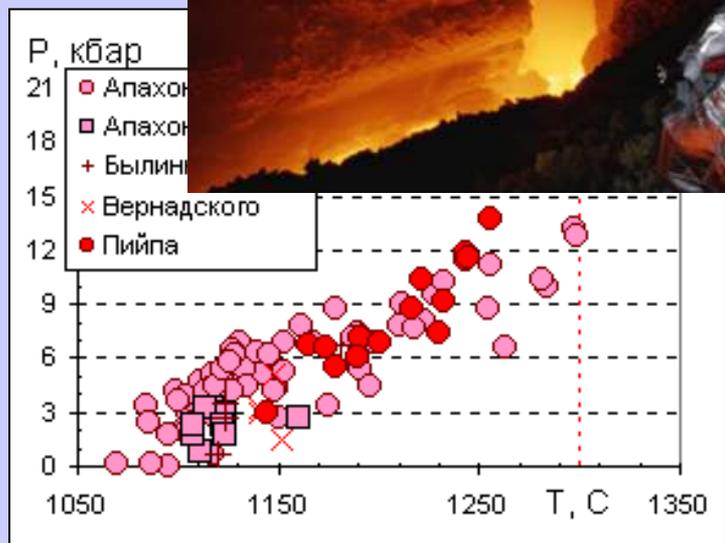
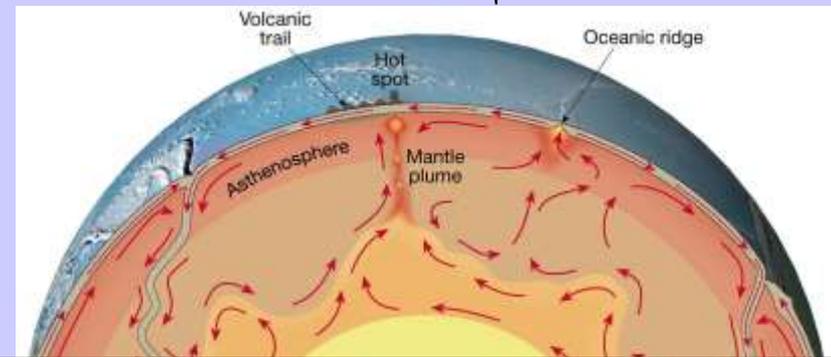
Строение Земли

геодинамика и вулканизм, типы извержений

Типы вулканов и морфология вулканических образований, продукты извержений

Методы мониторинга и прогноза извержений

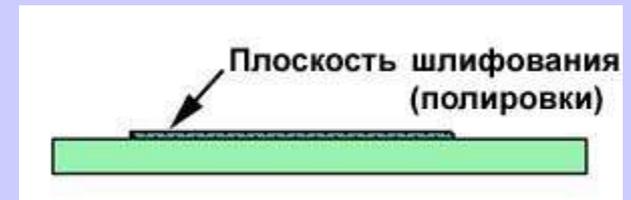
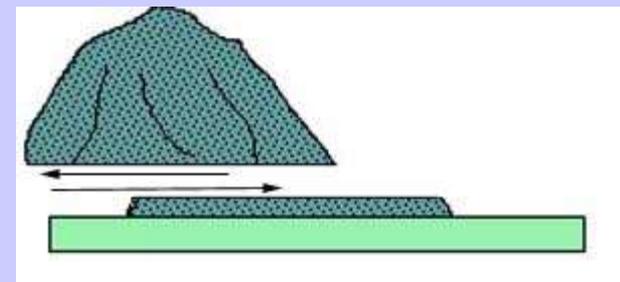
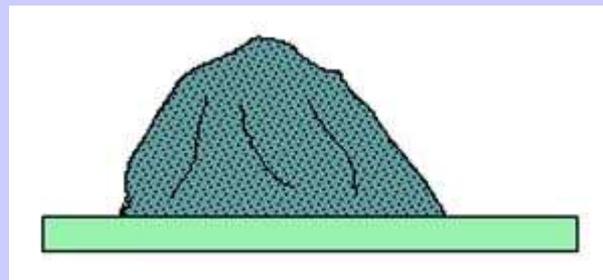
Методы реконструкции физико-химических условий существования магм



Петропавловск-Камчатский

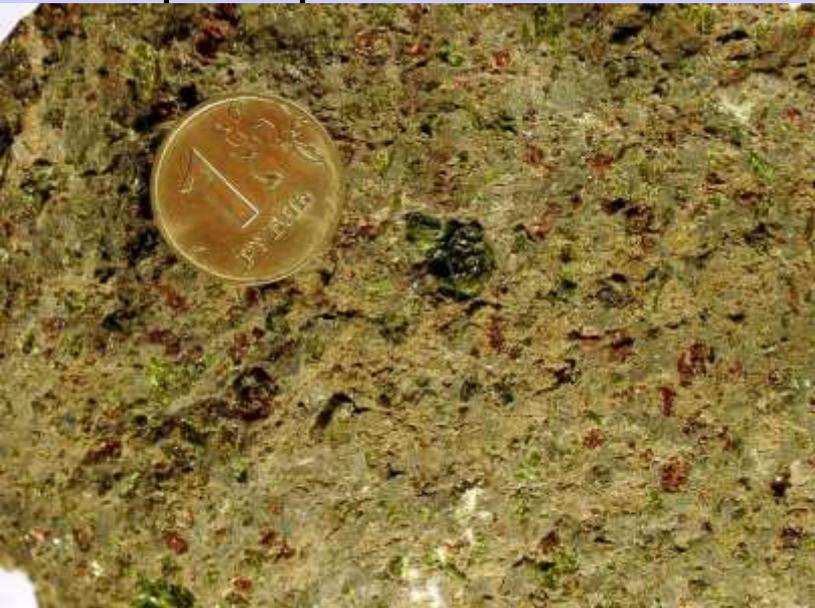


Прозрачно-полированные шлифы

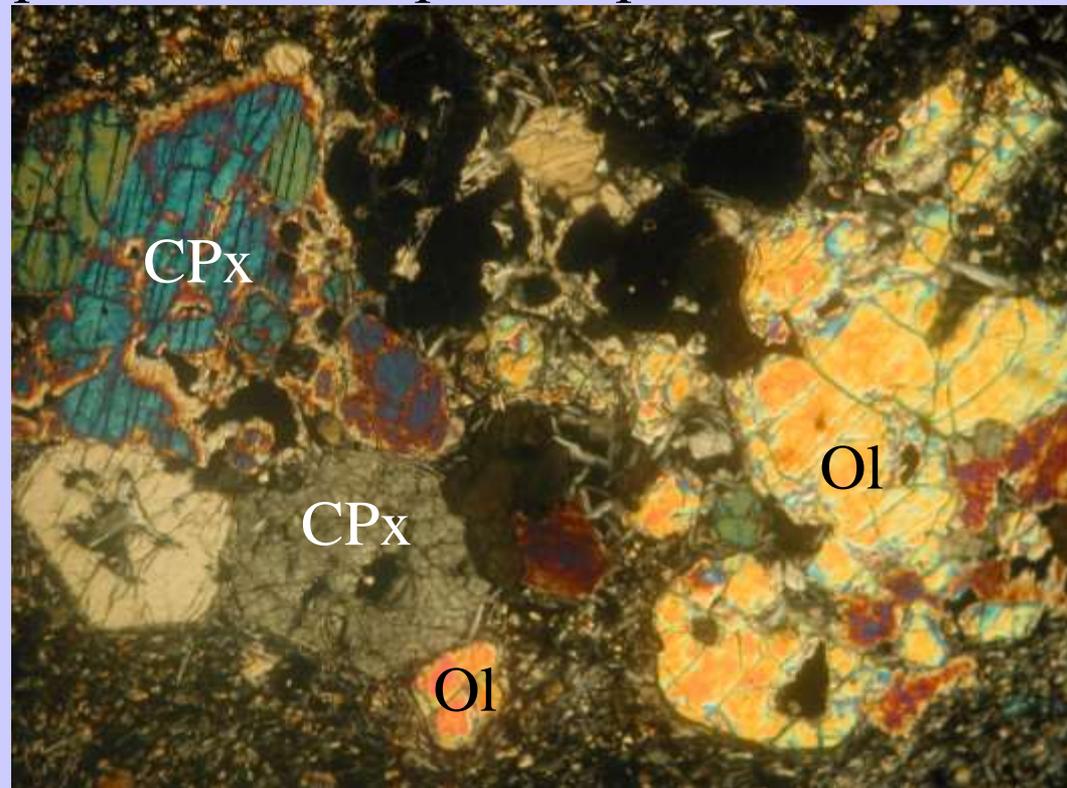


Температура по минеральным равновесиям

Пример: Оливин-Клинопироксеновый термометр

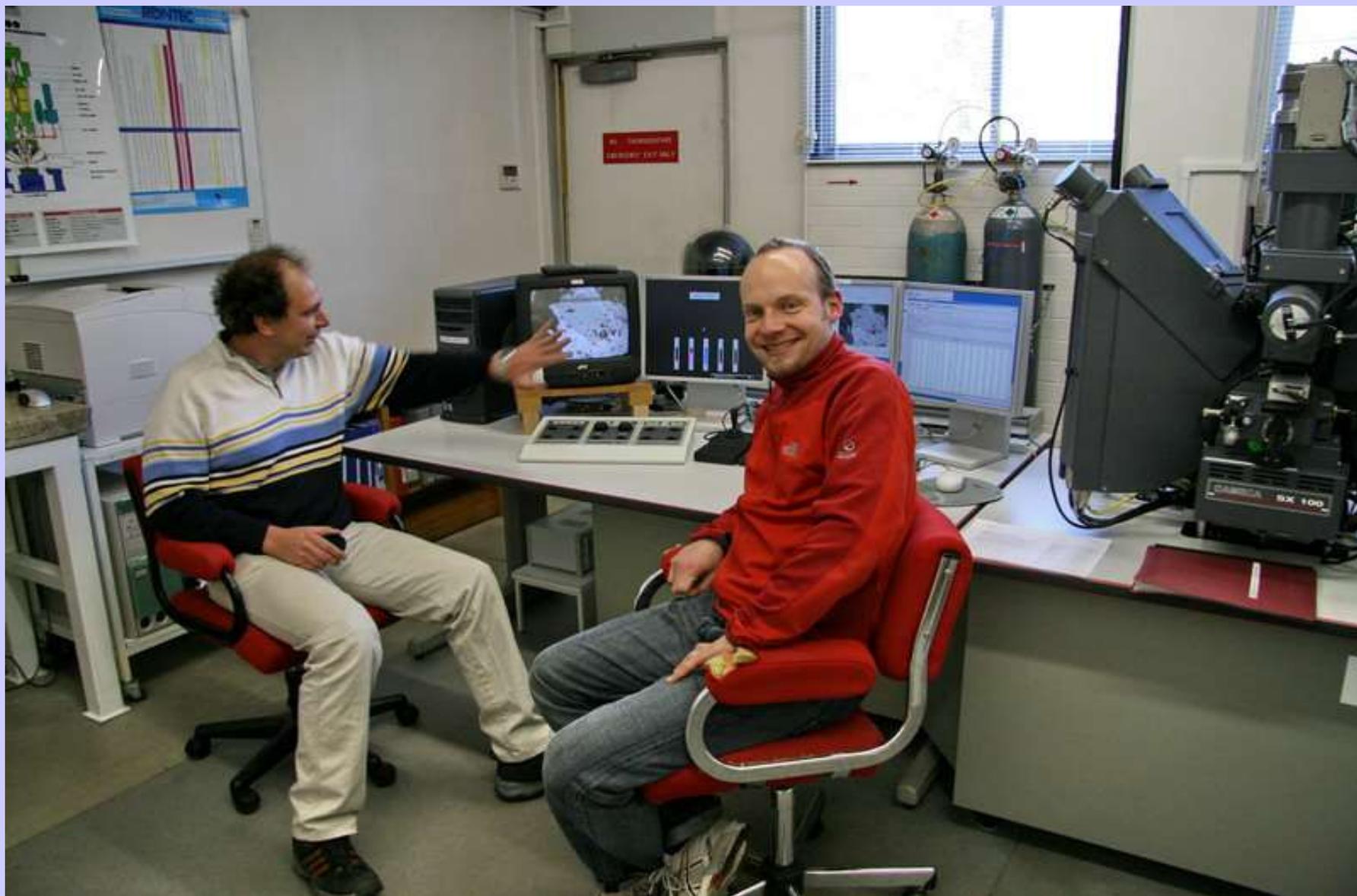


Авачиты, вулкан Авача,
Камчатка.



Портнягин М.В., Плечов П.Ю., Матвеев С.В. и др. (2005) Петрология «авачитов» - высокомагнезиальных базальтов Авачинского вулкана (Камчатка): I. Общая характеристика, состав пород и минералов. Петрология, т.13, № 2, с. 115-138.

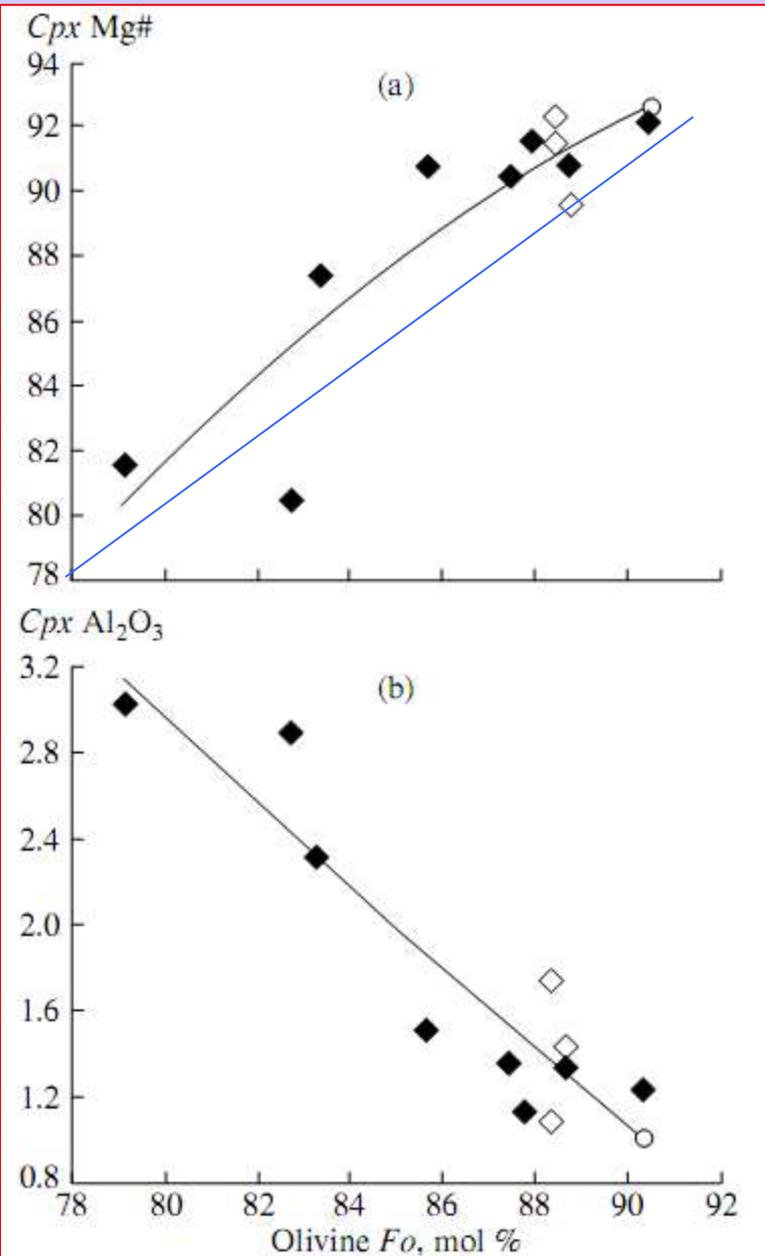
Микросондовый анализ (EPMA)



Сосуществующие оливины и клинопироксены в авачитах

Component	3/1*	cpx4	3/2	cpx2	cpx6b	cpx6a
	Ol**	Cpx	Ol	Cpx	Cpx	Cpx
	Cpx***	Ol	Cpx	Ol	Ol	Ol
	Clinopyrox					
SiO ₂	54.59	53.23	54.57	53.45	53.43	53.78
TiO ₂	0.10	0.11	0.22	0.11	0.16	0.21
Al ₂ O ₃	1.08	1.23	1.73	1.13	1.35	1.51
FeO	2.69	2.82	2.99	2.97	3.23	3.2
MnO	0.07	0.11	0.05	0.07	0.1	0.11
MgO	18.09	18.28	18.00	18.08	17.85	17.56
CaO	22.38	22.79	22.81	22.65	23.05	22.8
Na ₂ O	0.24	0.19	0.24	0.23	0.19	0.22
Cr ₂ O ₃	0.74	0.71	1.06	0.45	0.53	0.37
Total	99.98	99.47	101.67	99.14	99.89	99.76
Mg#, mol %	92.3	92.0	91.5	91.6	90.8	90.7
	Olivine					
SiO ₂	40.07	40.70	40.07	39.67	39.91	39.74
FeO	11.36	9.37	11.36	11.68	10.88	13.67
MnO	0.12	0.15	0.12	0.25	0.2	0.22
MgO	48.45	49.15	48.45	47.05	47.75	45.86
Total	100.32	99.84	100.32	99.09	99.04	99.78
Fo, mol %	88.4	90.3	88.4	87.8	88.7	85.7

$$\text{Mg\#} = 100 * \text{Mg} / (\text{Mg} + \text{Fe}^{2+}), \text{ ат.}\%$$



Условие равновесия системы

Минимум свободной энергии Гиббса

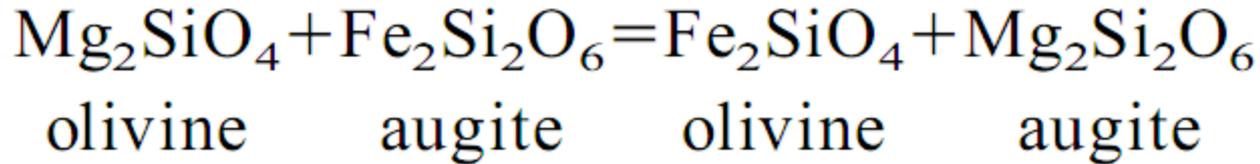
$$G = f(T, p, m_a \dots m_k, \mu_a \dots \mu_k) = \min$$

В дифференциальной форме:

$$dG = -SdT + Vdp + \sum_a^k \mu_a dm_a = 0$$

$$d^2G > 0$$

Обмен Mg и Fe между оливином и клинопироксеном



$$K = \frac{a_{\text{фаялит}} * a_{\text{энстатит}}}{a_{\text{форстерит}} * a_{\text{ферросилит}}} \quad \begin{aligned} a_{\text{форстерит}} &= \gamma_{\text{fo}} * \text{Fo} \\ a_{\text{фаялит}} &= \gamma_{\text{fa}} * (1 - \text{Fo}) \end{aligned}$$

Уравнение смещенного равновесия:

$$RT \ln K = RT \ln K_{\text{D Fe/Mg}}^{\text{Ol/Aug}} + \sum_i RT \ln \gamma_i = -\Delta_r H_T^\circ + T \Delta_r S_T^\circ = -\Delta_r G_T^\circ$$

$$\ln K_{\text{D Fe/Mg}}^{\text{Ol/Aug}} + \frac{\Delta_r C_{\text{p}(T_o)}^\circ}{RT} (T - T_o) - \frac{\Delta_r C_{\text{p}(T_o)}^\circ}{R} \ln \left(\frac{T}{T_o} \right) = -\frac{\Delta_r H_{T_o}^\circ}{R} \left(\frac{1}{T} \right) + \frac{\Delta_r S_{T_o}^\circ}{R}$$

Калибровка по экспериментам, Loucks, 1996

$$\ln K_{D \text{ Fe/Mg}}^{\text{Ol/Aug}} + \frac{\Delta_r C_{p(T_0)}^{\circ}}{RT} (T - T_0) - \frac{\Delta_r C_{p(T_0)}^{\circ}}{R} \ln \left(\frac{T}{T_0} \right) = 0.8240 (10^4 / T \text{ K}) - 5.5105$$

Принимаем $T_0 = 1400 \text{ K}$,

$$\Delta_r C_{p(1400 \text{ K})}^{\circ} = -0.084 \text{ KJ}/(\text{mol} \cdot \text{K})$$

Получаем уравнение оливин-клинопироксенового геотермометра

$$\ln K_{D \text{ Fe/Mg}}^{\text{Ol/Aug}} - 78.025 = \frac{-5945.96}{T} - 10.1327 \ln T$$

Трансцендентное уравнение

Задача:

Рассчитать температуру равновесия, если $K_d (O_l/CP_x) = 1$.

Решение:

А) перегруппируем уравнение:

$$\ln T = (\ln(K_d) - 78.025 - 5945.96/T)/10.1327$$

Б) зададим стартовую температуру $T=1473$ К, подставим ее в правую часть уравнения и посчитаем $\ln T$ левой части $\ln T = 7.33209$, откуда получим $T=1528.6$ К.

В) подставим рассчитанную 1528.6 К в уравнение вместо стартовой в правую часть и снова посчитаем температуру, получим $T=1549$ К

Г) сделаем следующую итерацию, получим $T= 1556.4$ К

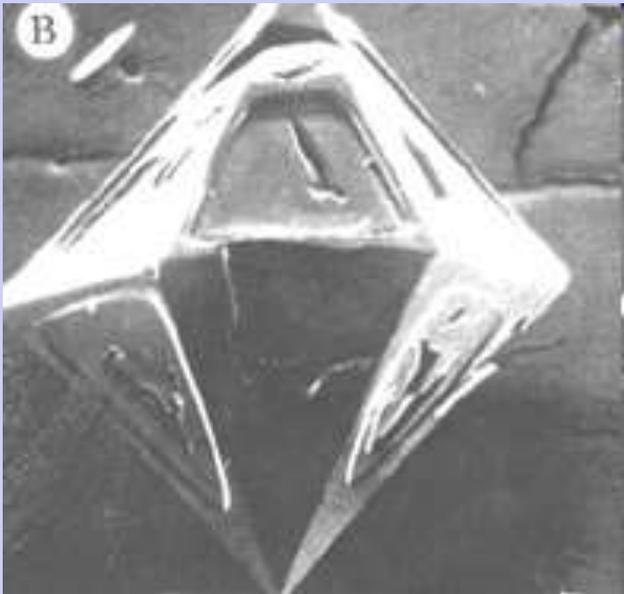
Д) следующую, $T= 1559$

Е) следующую, $T=1560$

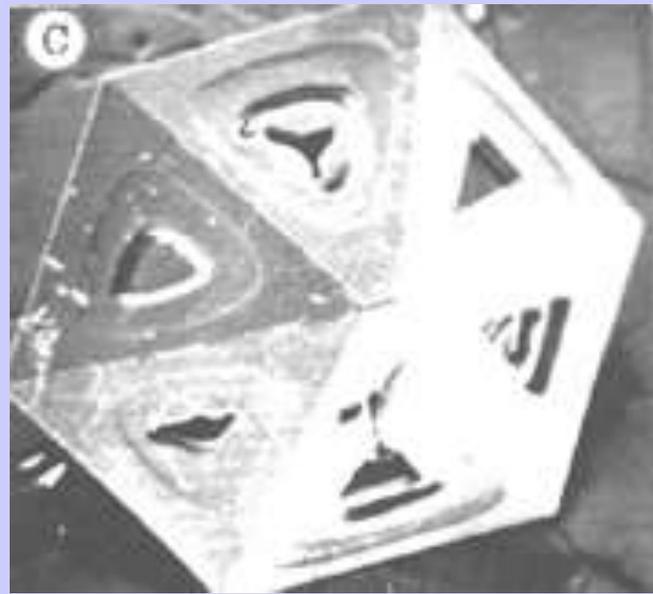
Ж) при следующей итерации мы снова получим 1560 К. Это значит, что итерация сошлась в пределах 1 К, что является удовлетворительной точностью.

З) Переведем полученную величину в градусы Цельсия $T=1560$ К $- 273 = 1287$ °С

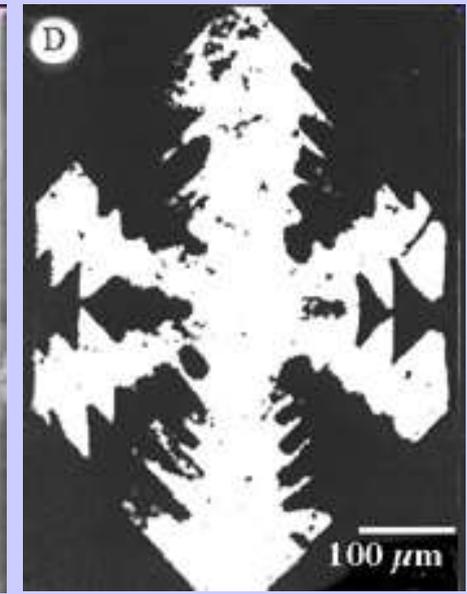
Формы роста кристаллов кварца из расплава с образованием полостей



Кристалл кварца из извержения Новарапты 1912 г. у которого поверхность граней росла медленнее ребер и вершин. Поле зрения -1 мм. Clocchiatti (1975).

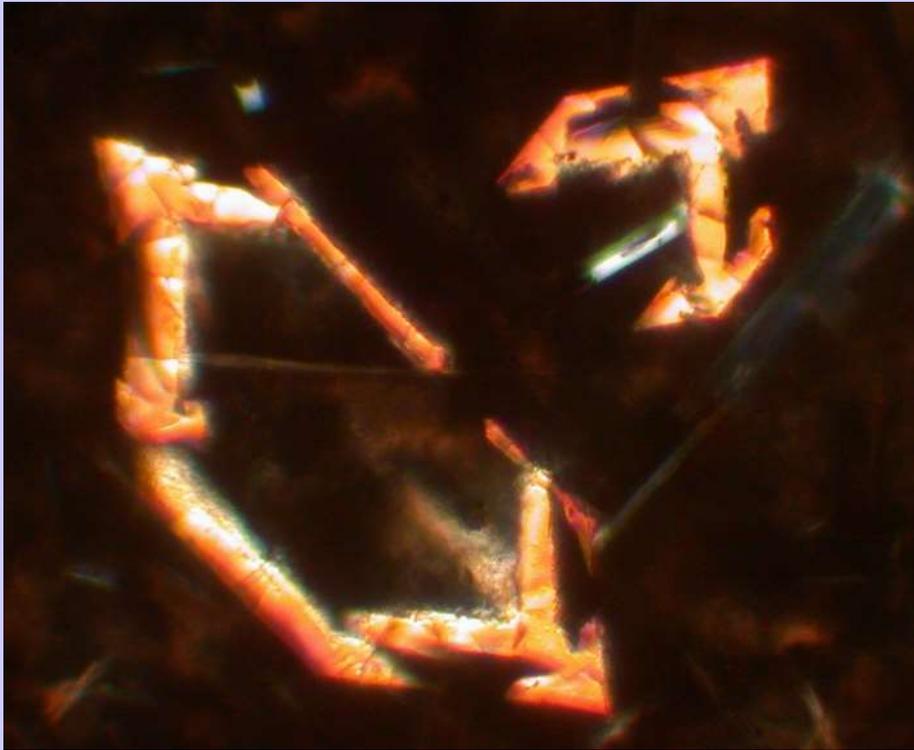


Полускелетный рост кристалла кварца извержения Новарапты 1912 г. Полости могут захватывать РВ. Поле зрения -1 мм. Clocchiatti (1975).



Поперечный срез кристалла кварца из липаритов.

Морфология растущих зерен

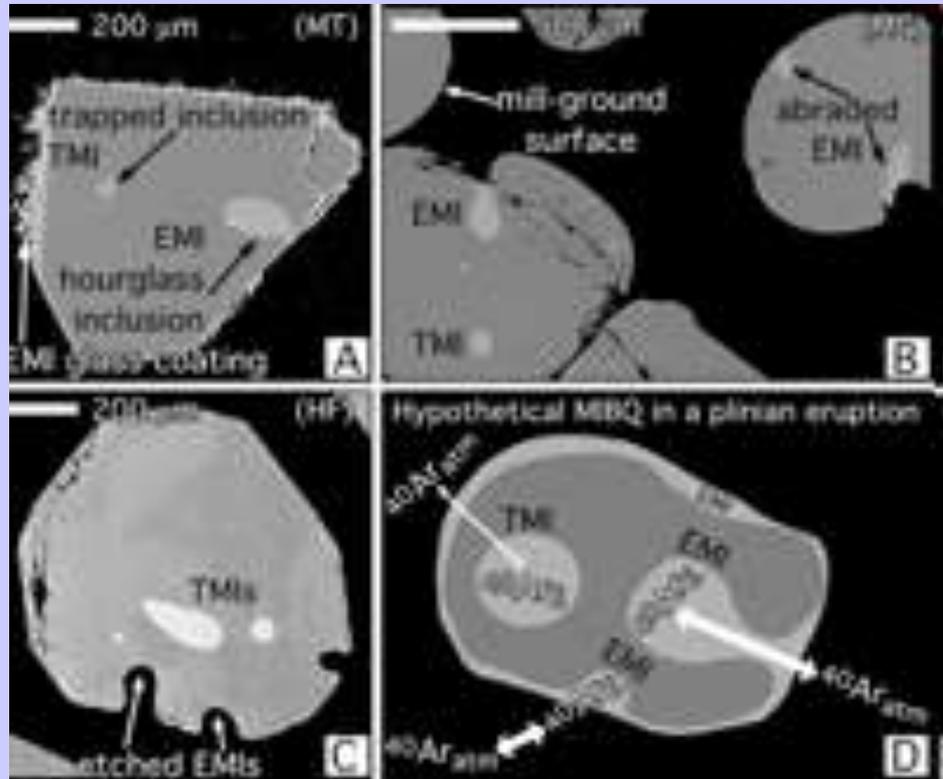


Захват включений при
скелетном росте оливина.
Базальты САХ. Рейс Логачев-
1996



Захват включений при
скелетном росте льда.

Расплавные включения в кварце

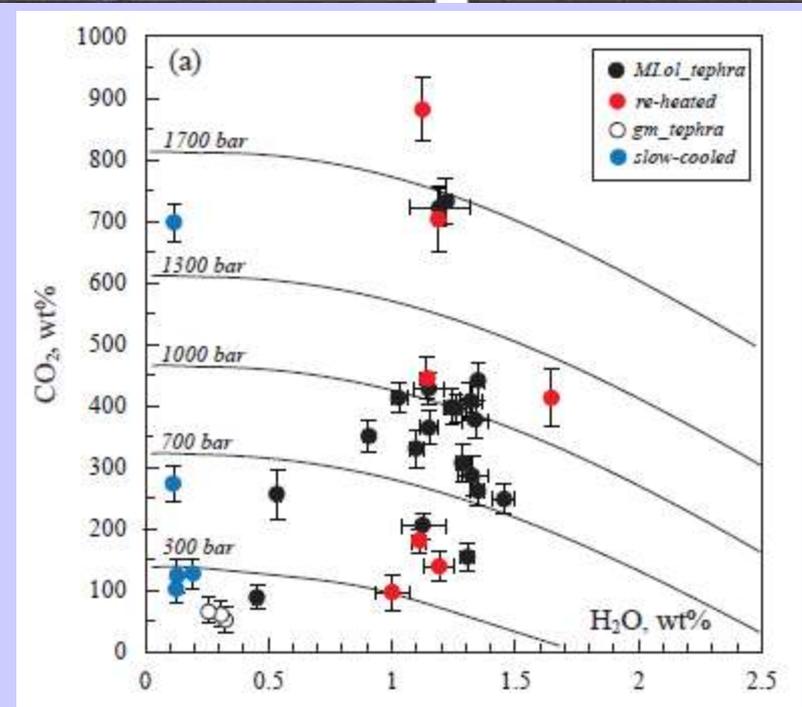
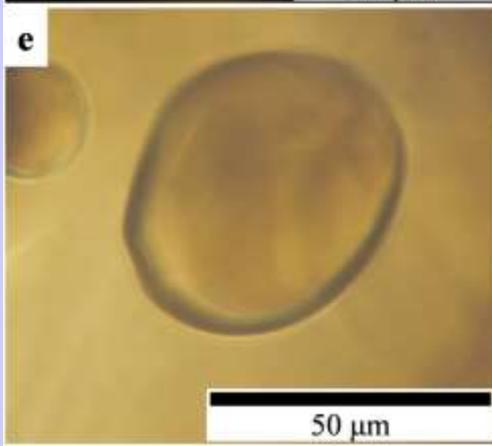
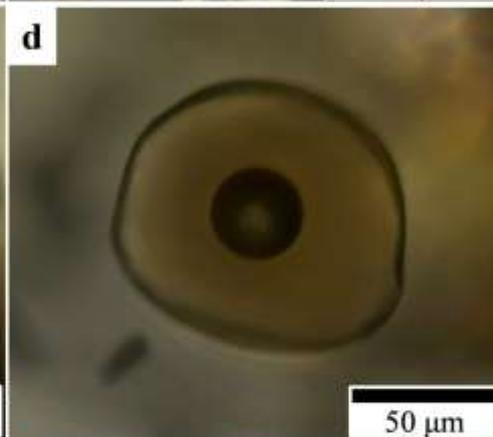
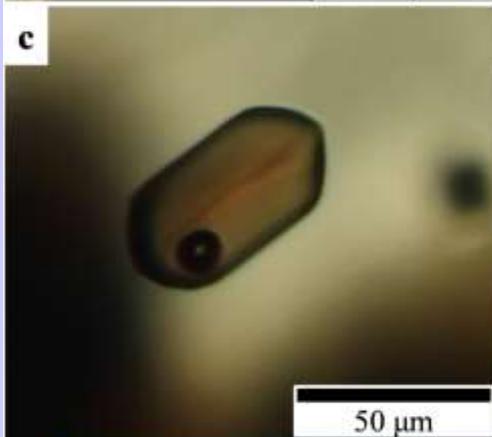
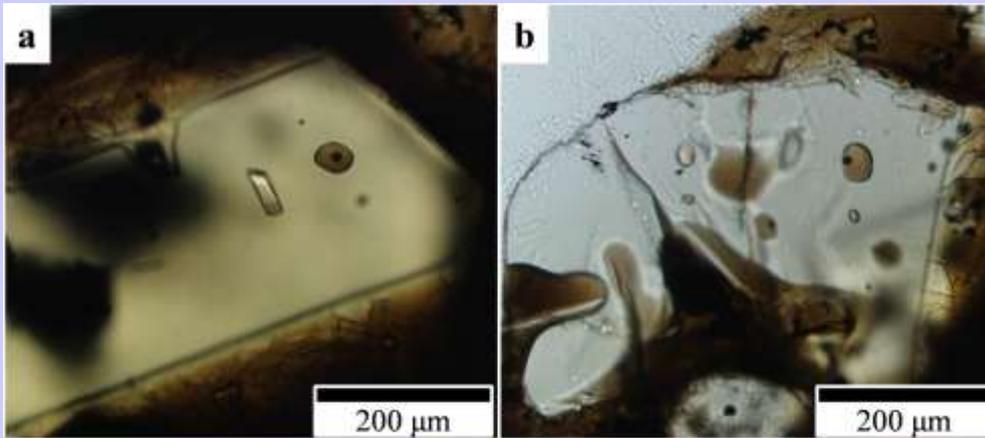


вкрапленники кварца из туфов Бишоп, образовавшихся при формировании кальдеры Лонг Валея (Winick et al., 2001)



стекловатое расплавное включение в кварце из риолитов Кавказа (Мельников и др., 2008)

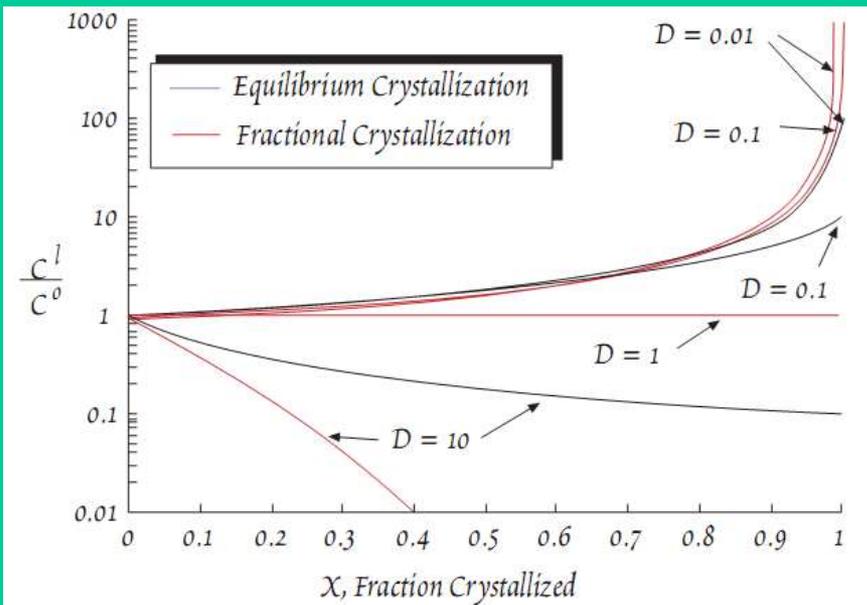
Вулкан Толбачик, 2012-2013 (Plechov et al., 2015)



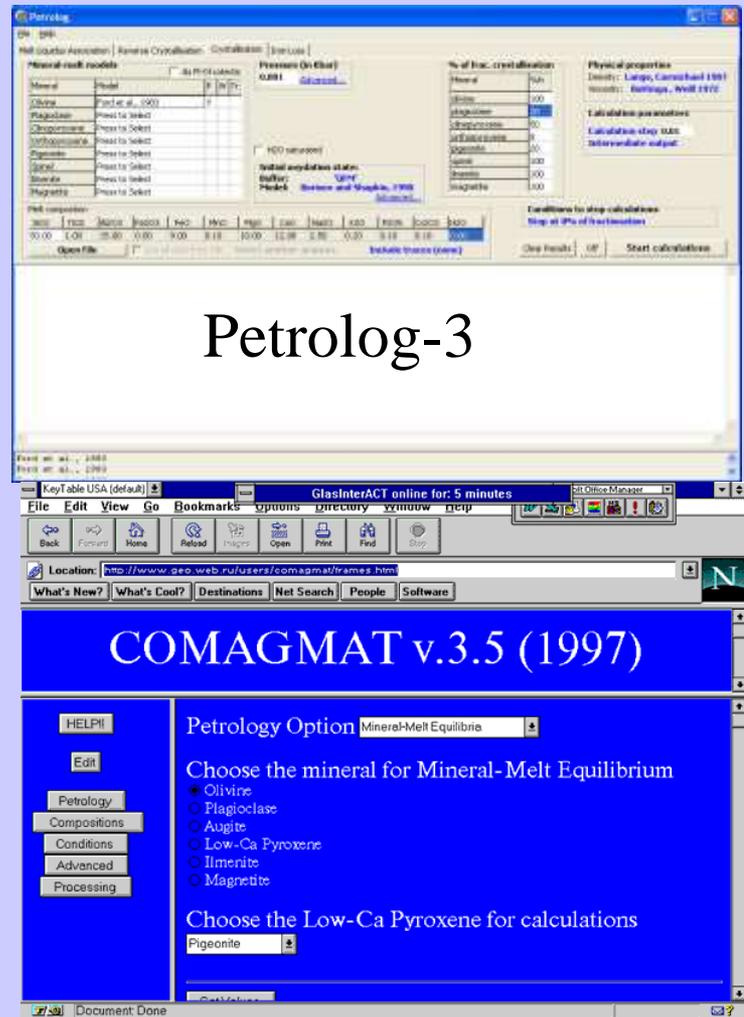
Геохимическое моделирование

$$\frac{C_i^l}{C_i^0} = \frac{1}{DX + (1-X)}$$

$$\frac{C_i^l}{C_i^0} = (1-X)^{D-1}$$



Петрологическое моделирование



MELTS

PerPlex

Определить степень кристаллизации магмы при допущениях:

- 1) кристаллизация проходила в закрытой системе
- 2) лантан имеет полностью некогерентное поведение и содержания La в породе 6 ppm, а в остаточном стекле 10 ppm

Модели минерал-расплав

Petrolog

File Help

Melt Liquidus Association Reverse Crystallisation

Mineral-melt models As

Mineral	Model
Olivine	Ford et al., 1983
Plagioclase	Press to Select
Clinopyroxene	Press to Select
Orthopyroxene	Press to Select
Pigeonite	Press to Select
Spinel	Press to Select
Ilmenite	Press to Select
Magnetite	Press to Select

Melt composition

SiO2	TiO2	Al2O3	Fe2O3	FeO
50.00	1.00	15.00	0.00	9.00

Use all data f

Fo= 87.80(0.00) Kd(Olv-Melt)= 0.30
 T=1248.4 (Olv); Lg(fO2)=-7.8 dNNO=
 Amounts (wt%) of magma components:
 Pressure: 0.001 kbar; Density: 2.6

	SiO2	TiO2	Al2O3	Fe2O3
Cumulate	40.49	0.00	0.00	0.00
Olv	40.49			

Fo= 87.80;
 Amounts (wt%) of cumulate minerals

	SiO2	TiO2	Al2O3	Fe2O3
Magma	50.10	1.01	15.15	0.00
Melt	50.05	1.01	15.14	0.96
Olv	40.42			

Fo= 87.38(0.00) Kd(Olv-Melt)= 0.30
 T=1238.4 (Olv); Lg(fO2)=-7.9 dNNO=

Ford et al., 1983
 Ford et al., 1983

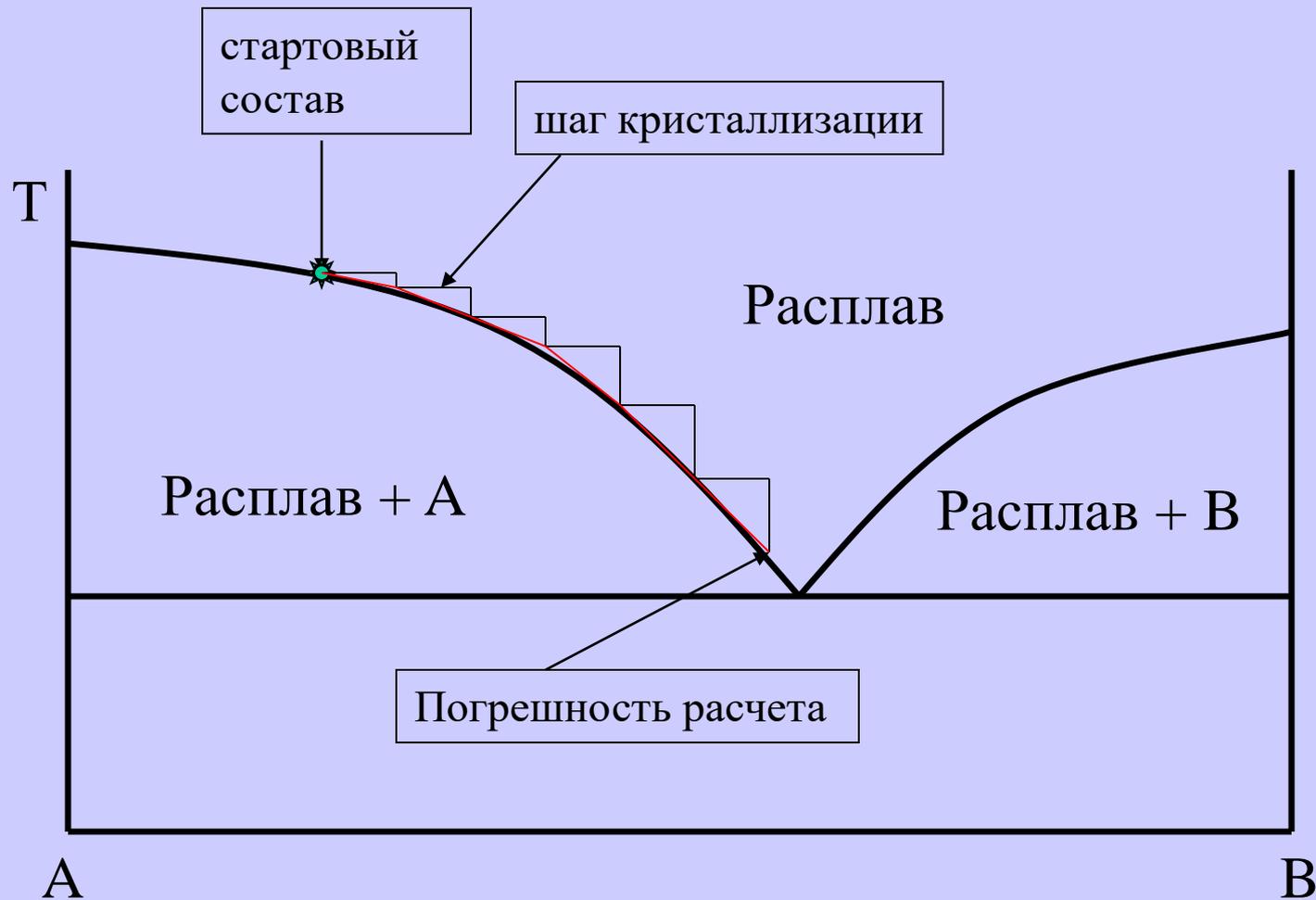
Select models for <Plag...

Select models for calculations:

Ariskin et al., 1993			
Danyushevsky, 2001			
Pletchov&Gerya, 1998	<input checked="" type="checkbox"/>		
Weaver&Langmuir, 1990			
Drake, 1976			
Nielsen, Dungan, 1983			
Nielsen, 1985			
Ariskin, Barmina, 1990			
Langmuir, 1992			

Оливин – 16
Плагиоклаз – 9
Клинопироксен – 8
Ортопироксен – 4
Пижонит – 4
Шпинель – 2
Ильменит – 2
Магнетит – 1

Поиск численного решения

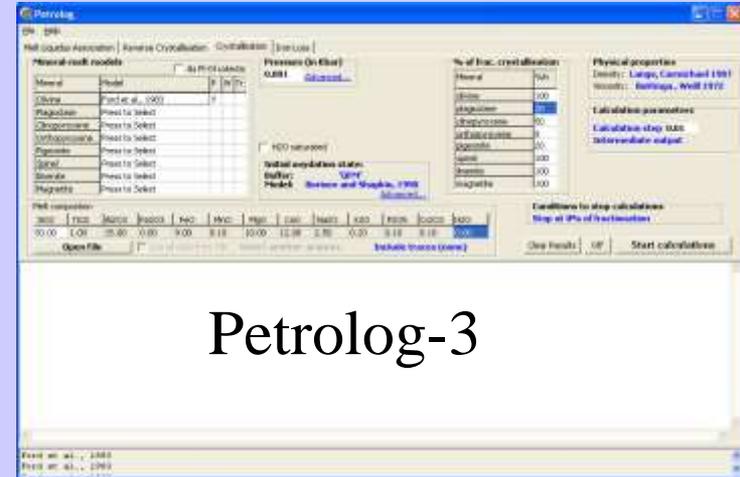


Кристаллизация одного минерала

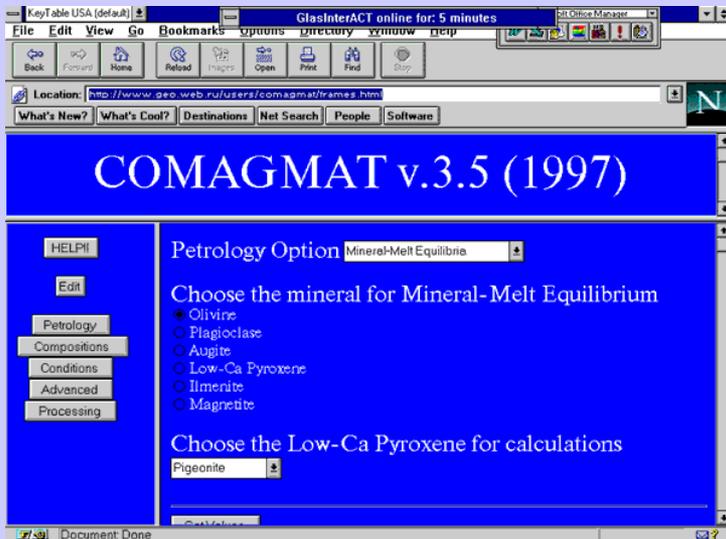
Заданная точность

Petrolog III

- Стартовый состав – 0.01 % вес.
- Шаг кристаллизации < 0.01 % мол.
- Точность по температуре < 10^{-5} °C
- Точность по составу минерала < 10^{-5} мол.%



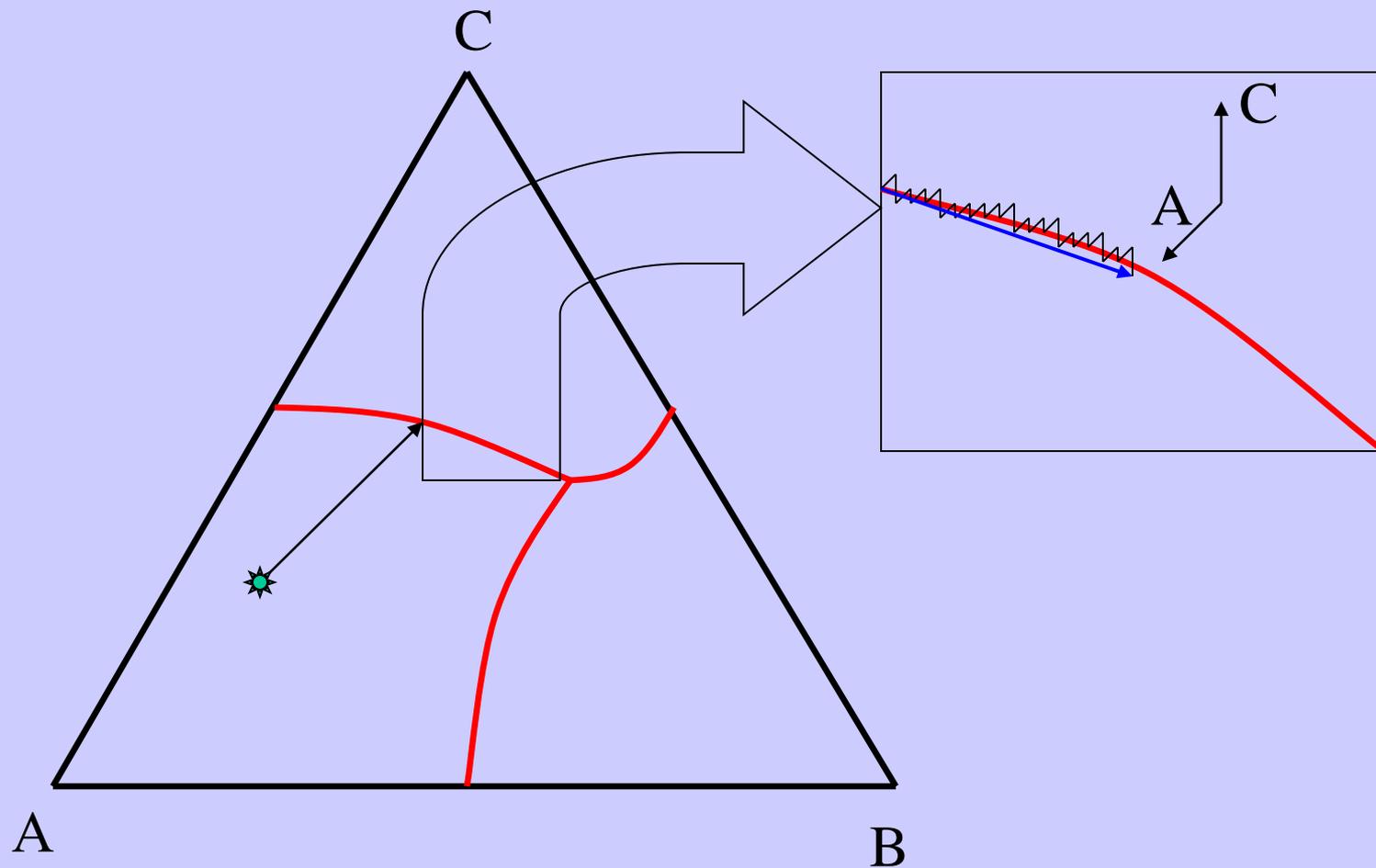
Petrolog-3



Comagmat-3.57w

- Стартовый состав – 0.01 % вес.
- Шаг кристаллизации - 1 % мол.
- Точность по температуре < 0.1 °C
- Точность по составу минерала < 10^{-2} мол.%

Поиск численного решения



Кристаллизация нескольких минералов

Интерфейс программы для поиска ликвидусной ассоциации

Petrolog

File Help

Melt Liquidus Association | Reverse Crystallisation | Crystallisation | Iron Loss

- Olivine
- Plagioclase
- Clinopyroxene
- Orthopyroxene
- Pigeonite
- Spinel
 - Nielsen, 1985
 - Ariskin & Nikolaev, 1996
- Ilmenite
- Magnetite

Pressure (in Kbar)
0.001

Initial oxydation state:
Buffer: 'QFM'
Model: Borisov and Shapkin, 1990

Sample Name
PetrologDefault

Corrections for models

Mineral	P	W
Olivine	c	
Plagioclase		c
Clinopyroxene		
Orthopyroxene	c	
Pigeonite		
Spinel		
Ilmenite		
Magnetite		

Test Model

Melt composition

SiO2	TiO2	Al2O3	Fe2O3	FeO	MnO	MgO	CaO	Na2O	K2O	P2O5	Cr2O3	H2O
50.00	1.00	15.00	0.00	9.00	0.10	10.00	12.00	2.50	0.20	0.10	0.10	0.00

Use all data from file

```

Ford et al., 1983 for olivine T: 1248.50 and 87.80 Fo
Ariskin et al., 1986 for olivine T: 1243.20 and 87.40 Fo
Sobolev&Slutsky, 1984 for olivine T: 1222.20 and 87.45 Fo
Gaetani&Watson, 2001 for olivine T: 1314.80 and 88.93 Fo
Nielsen & Drake, 1979 for clinopyroxene T: 1193.20 and 90.11 Mg#Cpx
Weaver & Langmuir, 1990 for clinopyroxene T: 1207.30 and 89.19 Mg#Cpx
Langmuir et al., 1992 for clinopyroxene T: 1207.30 and 89.22 Mg#Cpx
Nielsen & Drake, 1979 for orthopyroxene T: 1196.50 and 87.93 Mg#Opx
Bolikhovskaya et al., 1996 for orthopyroxene T: 1222.50 and 88.16 Mg#Opx
Ariskin & Nikolaev, 1996 for spinel T: 1275.30 and 52.96 Cr#Spl
    
```

```

Ford et al., 1983
Ford et al., 1983
Ariskin et al., 1986
Sobolev&Slutsky, 1984
Gaetani&Watson, 2001
    
```

Интерфейс программы для моделирования кристаллизации

Petrolog

File Help

Melt Liquidus Association Reverse Crystallisation Crystallisation Iron Loss

Mineral-melt models As Pl-Ol cotectic

Mineral	Model	P	W	Tr
Olivine	Ford et al., 1983	Yc		
Plagioclase	Danyushevsky, 2001	Y	Yc	
Clinopyroxene	Langmuir et al., 1992	Y		
Orthopyroxene	Press to Select			
Pigeonite	Press to Select			
Spinel	Press to Select			
Ilmenite	Press to Select			
Magnetite	Press to Select			

Initial P (in Kbar)
10 $dp/dT = 5$

H2O saturated

Initial oxydation state:
Buffer: 'QFM'

Model: Borisov and Shapkin, 1990

Sample Name
PetrologDefault

% of frac. crystallisation

Mineral	%fr
olivine	100
plagioclase	100
clinopyroxene	100
orthopyroxene	100
pigeonite	100
spinel	100
ilmenite	100
magnetite	100

Physical properties
Density: Lange, Carmichael 1987
Viscosity: Bottinga, Weill 1972

Calculation parameters
Calculation step 0.01
Intermediate output

Conditions to stop calculations
Stop at 2% of fractionation

Melt composition

SiO2	TiO2	Al2O3	Fe2O3	FeO	MnO	MgO	CaO	Na2O	K2O	P2O5	Cr2O3	H2O
50.00	1.00	15.00	0.00	9.00	0.10	10.00	12.00	2.50	0.20	0.10	0.10	0.00

Use all data from file

The starting composition PetrologDefault has been recalculated to 100%

SiO2	TiO2	Al2O3	Fe2O3	FeO	MnO	MgO	CaO	Na2O	K2O	P2O5	Cr2O3	H2O
43.61	0.87	13.08	0.00	7.85	0.09	8.72	10.47	2.18	0.17	0.09	0.09	12.77

H2O content in the starting composition will be adjusted to fit H2O saturation.

	SiO2	TiO2	Al2O3	Fe2O3	FeO	MnO	MgO	CaO	Na2O	K2O	P2O5	Cr2O3	H2O
Magma	50.00	1.00	15.00	0.00	9.00	0.10	10.00	12.00	2.50	0.20	0.10	0.10	14.65
Melt	50.00	1.00	15.00	1.14	7.97	0.10	10.00	12.00	2.50	0.20	0.10	0.10	14.65
Olv	40.35				12.59		47.06						

Fo= 86.95(0.00) Kd(Olv-Melt)= 0.336;
T=1346.3 (Olv); Lg(fO2)=-7.1 dNNO=-1.0; TPlg=260.3 TCpx=1305.4
Amounts (wt%) of magma components: Melt 99.990;
Pressure: 10.000 kbar; Density: 2.666 g/cm3 Viscosity: v=184 poise; ln(v)=5.2

	SiO2	TiO2	Al2O3	Fe2O3	FeO	MnO	MgO	CaO	Na2O	K2O	P2O5	Cr2O3	H2O
Cumulate	40.35	0.00	0.00	0.00	12.59	0.00	47.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Olv	40.35				12.59		47.06						

Fo= 86.95;
Amounts (wt%) of cumulate minerals: Olv 0.010;

Nielsen & Drake, 1979
Bolikhovskaya et al., 1996
Ariskin & Nikolaev, 1996



Petrolog3: Integrated software for modeling crystallization processes

Leonid V. Danyushevsky

CODES and School of Earth Sciences, University of Tasmania, Private Bag 79, Hobart, Tasmania 7001, Australia (l.dan@utas.edu.au)

Pavel Plechov

Petrology Department, Geology Faculty, Moscow State University, Vorob'evy Gory, Moscow, Russia (pavel@web.ru)

[Руководство пользователя программы Петролог3.](#)

[перевод с англ. Н.А.Некрылова, 2013 г.](#)

В1. Обзор возможностей Петролог3.

Петролог3 - программное обеспечение для численного моделирования как кристаллизации (фракционной и равновесной), так и обратной кристаллизации (фракционной) при разном давлении, окислительном состоянии расплава и содержании воды в расплаве. Кроме этого, в Петролог3 возможно моделирование переуравновешивания расплавных включений в оливине после их консервации.

Численное моделирование кристаллизации в Петролог3 основано на принципе [псевдоликвидусных температур](#) [Nathan and Van Kirk, 1978; Nielsen and Dungan, 1983; Ariskin et al., 1986]. Метод основан на независимых моделях равновесий минерал-

кристаллизоваться из данного состава расплава. Минерал с наивысшей рассчитанной температурой это [ликвидусный](#) минерал, который вычитается из расплава, после чего процесс повторяется. Рассчитанные температуры для [неликвидусных](#) температур это [псевдоликвидусные](#) температуры, так как эти минералы на самом деле не присутствуют на ликвидусе.

Петролог3 предлагает [моделенезависимый](#) алгоритм, который может объединить потенциально бесконечное число моделей равновесия минерал-расплав для главных и рассеянных элементов. Кроме этого, в Петролог3 введены модели, описывающие физические параметры расплавов, такие как