

15. Persikov, E.S. Viscosities of model and magmatic melts at the pressures and temperatures of the Earth's crust and upper mantle. *Rus. Geol. Geophys.* 1998. Vol. 39, № 11, P. 1780–1792.
16. Wohletz, K. H. MAGMA: Calculates IUGS Volcanic Rock Classification, Densities, and Viscosities // Los Alamos National Laboratory computer code LA-CC 99-28, Los Alamos New Mexico, 1999.

РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ Q-ГРУПП В РАСПЛАВАХ НА ЛИКВИДУСЕ СИСТЕМЫ Na₂O-SiO₂: РАЗВИТИЕ МОДЕЛИ “STRUCTON”

Шильдт Артём Викторович

Геологический ф-т МГУ, Москва, artem342@yandex.ru

Ранее мы представили ЭВМ-программу STRUCTON, предназначенную для статистического моделирования молекулярно-массовых распределений (ММР) анионов в полимеризованных силикатных расплавах [1,2]. Входная информация для этой модели включает относительные пропорции пяти Q^n -структонов – кремнекислородных SiO_4 с разным числом мостиковых кислородных связей ($0 \leq n \leq 4$, Q^0 отвечает иону SiO_4^{4-}). В результате расчётов по методу Монте-Карло программа формирует ансамбль цепочечных и кольцевых комплексов, отвечающих общей формуле $(Si_iO_{3i+1-j})^{2(i+1-j)-}$, где i – размер аниона, j – число замыканий внутримолекулярных связей. Расчёты с использованием идеальных стохастических распределений Q^n -структонов (приближение “равной реакционной способности” концевых атомов кислорода) для составов от орто- до метасиликатов продемонстрировали разнообразие полимерных частиц. Число разновидностей полимерных частиц увеличивается от трех (SiO_4^{4-} , $Si_2O_7^{6-}$, $Si_3O_{10}^{8-}$) до 153, а средний размер – от 1 до 7.2 [1].

Следующий этап развития этой модели включает учет реакций диспропорционирования Q^n -структонов:

$$Q^{n-1} + Q^{n+1} = 2Q^n, \quad k_n = [Q^n]^2 / \{[Q^{n-1}][Q^{n+1}]\} \quad (1 \leq n \leq 3).$$

Диспропорционирование приводит к повышению концентрации тетраэдров вида Q^1 , Q^2 и Q^3 за счет понижения количества “краевых” форм Q^0 и Q^4 . Поэтому Q^n -распределения, наблюдаемые методами рамановской спектроскопии и ЯМР, никогда не совпадают со стохастическим [3]. Это влияет на реальное ММР полимеризованных анионов в расплаве. Мы разработали подпрограмму, которая использует экспериментальные зависимости k_1 , k_2 и k_3 от температуры и позволяет моделировать распределения Q^n -структонов непосредственно на ликвидусе силикатных систем. Тестовые расчёты для расплавов системы Na₂O-SiO₂ в диапазоне 0-50 мол.% SiO₂ показывают систематическое снижение концентрации тетраэдров Q^0 (относительно идеальной стохастической) и значительное увеличение доли частиц Q^1 и Q^2 .

вблизи стехиометричных составов, отвечающих соединениям $\text{Na}_6\text{Si}_2\text{O}_7$ ($3\text{Na}_2\text{O} \times 2\text{SiO}_2$) и Na_2SiO_3 ($\text{Na}_2\text{O} \times \text{SiO}_2$), соответственно.

Литература:

1. Арискин А.А., Поляков В.Б. (2008) Моделирование молекулярно-массовых распределений и оценка концентрации иона O^{2-} в полимеризованных силикатных расплавах. Геохимия. № 5. С. 467-486.
2. Поляков В.Б., Арискин А.А. (2008) Моделирование состава и пропорций анионов в полимеризованных силикатных расплавах (метод Монте-Карло) // Физика и химия стекла. Т. 34. № 1. С. 66-80.
3. Mysen B., Richet P. Silicate glasses and melts: properties and structure. Amsterdam: Elsevier, 2005. 560 p.

ЗОНАЛЬНОСТЬ ПЛАГИОКЛАЗА КАК ИНДИКАТОР МАГМАТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПОД ВУЛКАНОМ БЕЗЫМЯННЫЙ, КАМЧАТКА

Щербаков Василий Дмитриевич

Геологический ф-т МГУ, Москва, vasiliy7@gmail.com

Вулкан Безымянный (Камчатка) расположен в Центральной Камчатской депрессии и является частью Ключевской группы вулканов. Безымянный один из самых активных андезитовых вулканов мира: с момента катастрофического извержения 30 марта 1956 года произошло около 17 крупных эксплозивных извержений. Продуктами извержения Безымянного являются роговообманковые (до 1958 г) и двупироксеновые андезиты.

Благодаря чувствительности состава плагиоклаза к температуре, давлению и содержанию воды в расплаве, а также очень медленной взаимной диффузии Si и Al в кристаллической решетке, он способен регистрировать и сохранять в своей зональности сложную историю магматических очагов. Зональность плагиоклаза из изученных андезитов была использована для восстановления истории и оценки параметров магматического очага в период 2000-2007 гг.

Среди кристаллов плагиоклаза в андезитах вулкана Безымянный выделяются три генерации: основная генерация имеет размер 0,5-2 мм, крупные вкрапленники (> 3 мм) представлены сростками зерен со сложной зональностью, микровкрапленники имеют размер <0,2-0,3 мм. Зональность плагиоклаза сложена чередованием трех основных элементов, каждый из которых имеет определенную тенденцию изменения состава:

Зоны с осцилляционной зональностью имеют постоянный состав 50-60 мол.% анортита с небольшими частыми вариациями состава плагиоклаза вдоль профиля в пределах 5 мол.% анортита. Формирование осцилляционной зональности является следствием периодического диффузного голодания кристалла при медленном росте из расплава [3].