

PETROLOG III. МОДЕЛИРОВАНИЕ РАВНОВЕСНОЙ И ФРАКЦИОННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Плечов П.Ю. (геол. ф-т МГУ), **Данюшевский Л.В.** (CODES, Hobart, Tasmania)
pavel@web.ru, Факс: (495) 932-88-89, тел. (495) 939-18-41

Разработан новый программный комплекс Petrolog-III, работающий в среде MS Windows. Он предназначен для моделирования прямой и обратной кристаллизации в ультраосновных и основных магматических системах. Кроме этого, в программный комплекс включены возможности моделирования поведения расплавных включений в оливине: оценка эффекта потери железа и моделирование диффузионных профилей в оливинах вокруг расплавных включений. Основой новой программы послужил код программы Petrolog-2 (Danyushevsky, 2001), программы FeO_eq2, версия 3.2 для MSDOS (Danyushevsky, 2005) и Fe-Loss, версия 1.0 для Windows (Danyushevsky, 2002).

В основе моделирования лежит принцип максимума псевдоликвидусных температур [1], позволяющий использовать независимые модели минерал-расплав, описывающие поверхности ликвидуса для каждого минерала отдельно. На каждом шаге кристаллизации кристаллизуется тот минерал, у которого псевдоликвидусная температура максимальна. Кристаллизация минерала и изменение состава расплава понижает его псевдоликвидусную температуру и повышает псевдоликвидусные температуры других минералов. Пропорции кристаллизации определяются соотношением dT/dX псевдоликвидусных поверхностей на перпендикулярах к линиям котектики.

На данный момент Petrolog-III включает в себя 46 моделей минерал-расплав для 8 минералов. Объектно-ориентированная структура программы позволяет добавлять неограниченное количество моделей для любого количества минералов. Для каждой модели возможно введение поправок к псевдоликвидусным температурам, зависящих от давления и от содержания воды в магматической системе.

Моделирование поведения редких и рассеянных элементов основано не только на изменяемых коэффициентах распределения, но и на сложных моделях распределения, например Beattie, 1993 или Kinzler et al., 1990 для Ni в оливине. Появилась возможность моделирования полибарической кристаллизации магмы при подъеме с несколькими промежуточными очагами. Появилась возможность расчета кристаллизации в водонасыщенных условиях и количественной оценки дегазации расплава при кристаллизации.

Уравнения масс-баланса накладывают ограничения на состав и количество кристаллизующихся фаз. Кристаллизация минерала прекращается, если исчерпывается один из компонентов. Существующие модели минерал-расплав построены на отношениях главных компонентов и используют упрощенные составы минералов. Поэтому, конечная точка фракционирования не зависит от выбора модели, а может быть определена нормативным пересчетом.

Petrolog-III позволяет симулировать другие программы по моделированию магматической кристаллизации простым выбором моделей, на которых построены другие программы. Сравнение с программой Comagmat-3.57 в режиме фракционной кристаллизации при наборе моделей Ariskin et al., 1993 показывает тождественность расчетов псевдоликвидусных температур, пропорций кристаллизации и составов остаточных расплавов вплоть до степени фракционирования около 50%. Затем, наблюдаются незначительные расхождения, объясняемые различными алгоритмами в области нестабильных решений.

В Petrolog-III были введены критерии перитектической кристаллизации, основанные на анализе соотношения псевдоликвидусных поверхностей кристаллизующихся минералов. Это позволило моделировать равновесную кристаллизацию, с учетом перитектических реакций между минералами в расплаве. Тестовые расчеты показывают близкую к изотермической перитектическую реакцию $Ol+L1=Orx+L2$.

Степень фракционирования при моделировании прямой кристаллизации может задаваться для каждого минерала в отдельности и означает процент новых кристаллов данного минерала,

который удаляется на каждом шаге из системы. Если минерал на данном шаге не кристаллизуется, то его количество в кумуляте и в магме не изменяется. Степень фракционирования для каждого минерала может изменяться от 0% (равновесная кристаллизация) до 100% (фракционная кристаллизация).

Литература

1. *Nathan H.D., Vankirk C.K.* A model of magmatic crystallization // *J. Petrol.* 1978. 19. PP. 66-94.
2. *Beattie P.* The effect of partial melting of spinel peridotite on uranium series disequilibria: constraints from partitioning studies // *Earth and Planetary Science Letters.* 1993. 177: PP. 379-391.
3. *Kinzler R.J., Grove T.L., Recca S.I.* An Experimental-Study on the Effect of Temperature and Melt Composition on the Partitioning of Nickel between Olivine and Silicate Melt // *Geochimica et Cosmochimica Acta.* 1990. 54(5): PP. 1,255-1,265.

Вестник Отделения наук о Земле РАН - №1(24) 2006

Информационный бюллетень Ежегодного семинара по экспериментальной минералогии, петрологии и геохимии 2004 года (ЕСЭМПГ-2006)

URL: http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/1-2006/informbul-1_2006/term-24.pdf

Опубликовано 1 июля 2006 г

© Вестник Отделения наук о Земле РАН, 1997 (год основания), 2006

При полном или частичном использовании материалов публикаций журнала, ссылка на «Вестник Отделения наук о Земле РАН» обязательна