

Е.В.Коптев-Дворников,  
Д.А.Бычков, Н.С.Арьяева

Моделирование  
распределения малых  
компонентов при  
кристаллизации авгита

Москва, 2009 г.

# Ранее:

Геотермометры для силикатных минералов вида

$$\ln K = \frac{A + \beta * P}{T + B}$$

$K$  – константа реакции образования минерала какой-либо кристаллической фазы,  $P$  – давление в кбар,

$T$  – абсолютная температура,  
 $A$ ,  $\beta$  и  $B$  – константы.

$T$ -Д смысл  $A \sim \Delta H/R$ ,  $B \sim -\Delta S/R$ ,  $\beta \sim -\Delta V/R$ .

$A$  и  $B$  определяются путём обработки экспериментальных данных методами регрессионного анализа.

Главным препятствием для корректного определения значений коэффициента  $\beta$  при давлении считается малая длительность экспериментов, не гарантирующая равновесного распределения компонентов между твёрдыми фазами и расплавом.

## Сегодня:

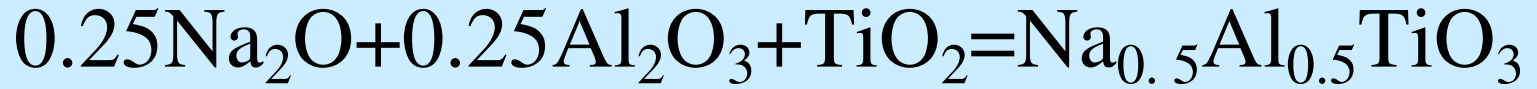
$$\ln K = \frac{A + \beta P}{T} + B + CT + D \lg f_{O_2} + E \ln \left( \frac{Al}{Si} \right) + FR + \sum_{i=1}^n J_i X_i$$

$f_{O_2}$  – летучесть кислорода,  $R = \ln[(Na+K)Al/Si^2]$ ,  $X_i$  – мольная доля  $i$ -ого компонента расплава,  $n$  – количество учитываемых компонентов,  $C, D, E, F, J_i$  – коэффициенты при соответствующих переменных.

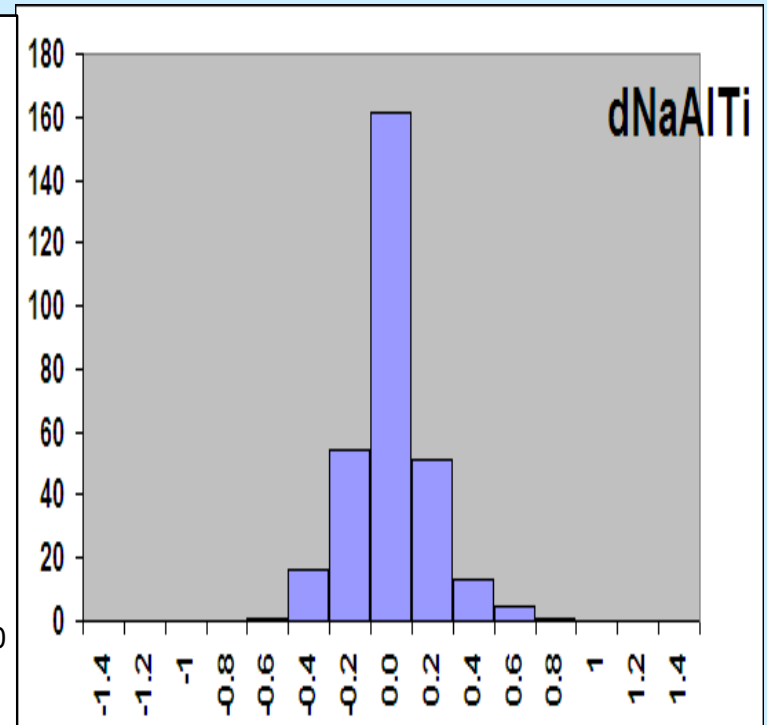
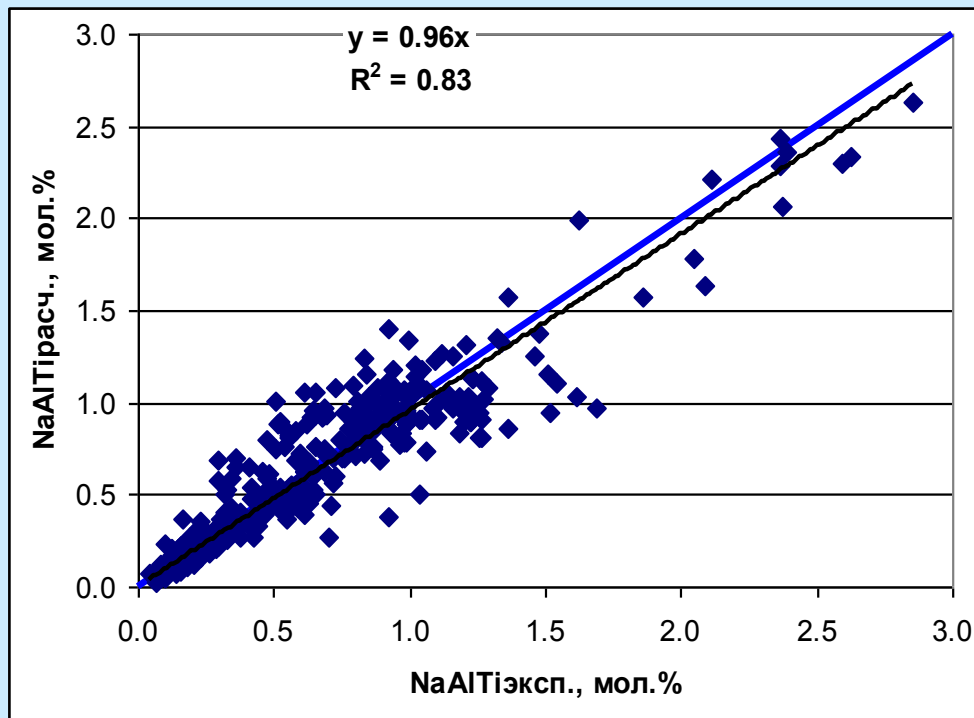
Параметры  $Al/Si$  и  $R$  предложены для уточнения оливиновых и плагиоклазовых геотермометров соответственно.

**Коэффициенты при переменных найдены путём минимизации методом Ньютона суммы квадратов разностей между экспериментальными и расчётными составами твёрдых фаз.**

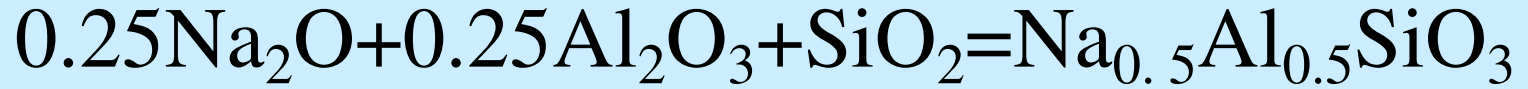
# NaAlTi



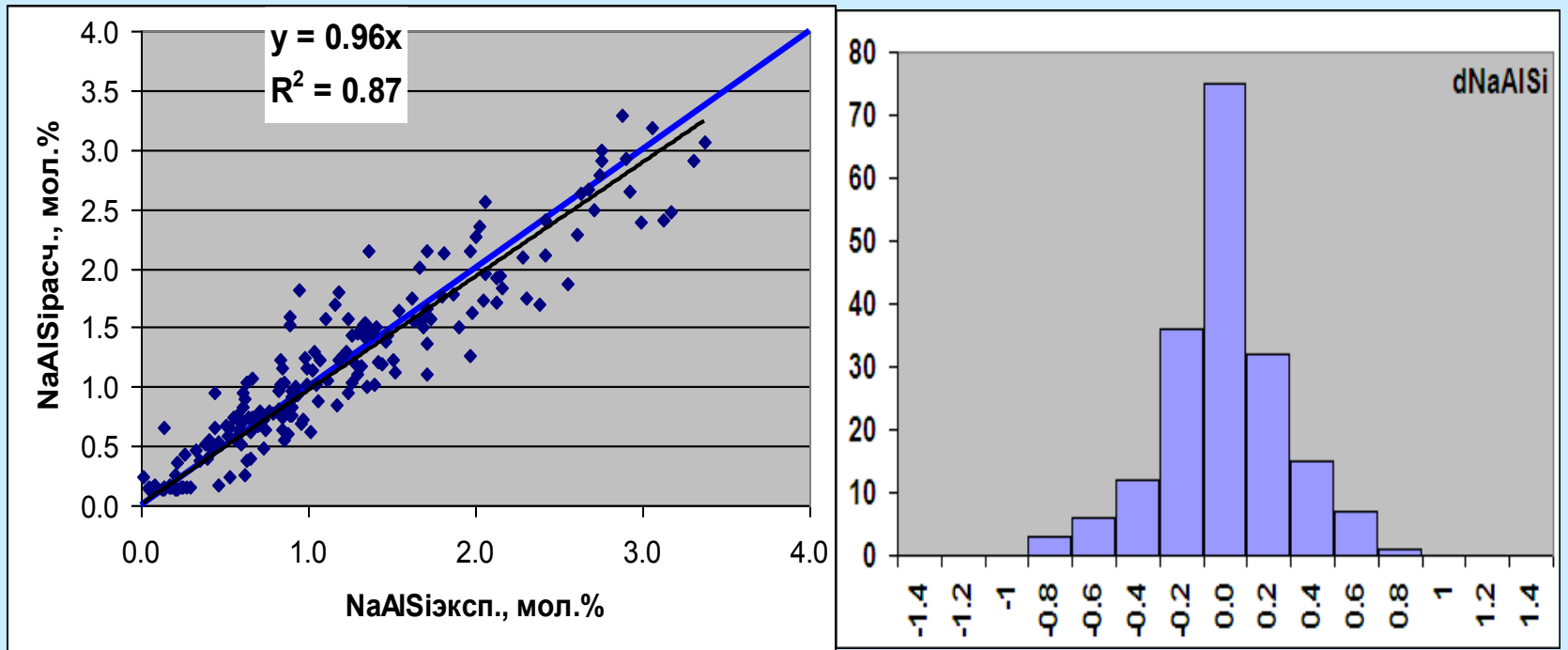
n=302, ср. разн.=0.00%, дов. инт.=±0.02%



# NaAlSi



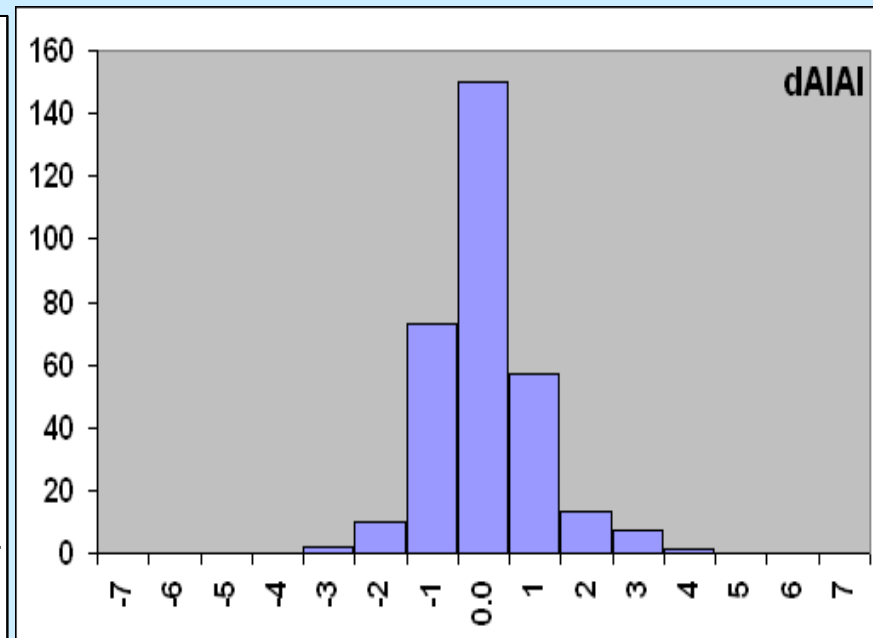
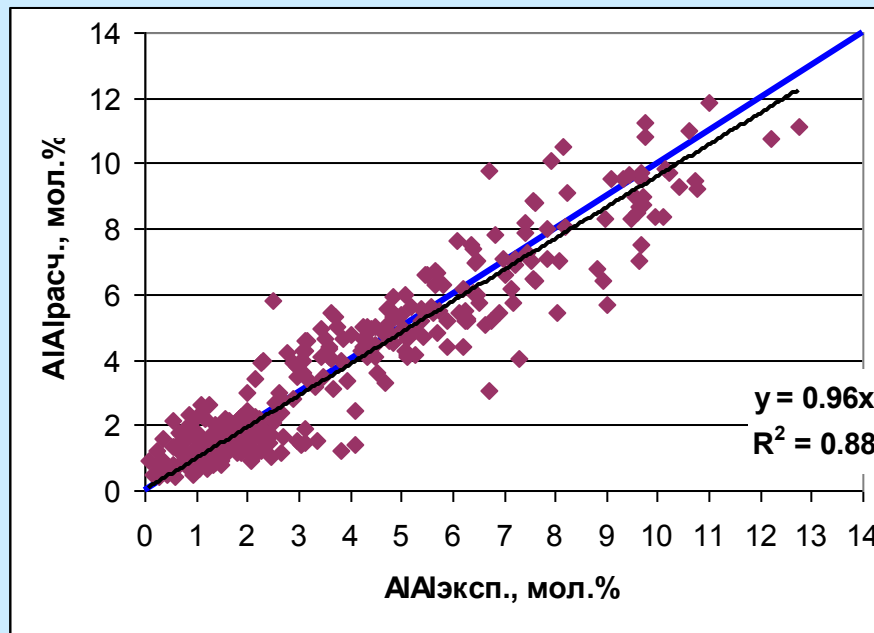
n=187, ср. разн.=0.00%, дов. инт.=±0.03%



# AlAl



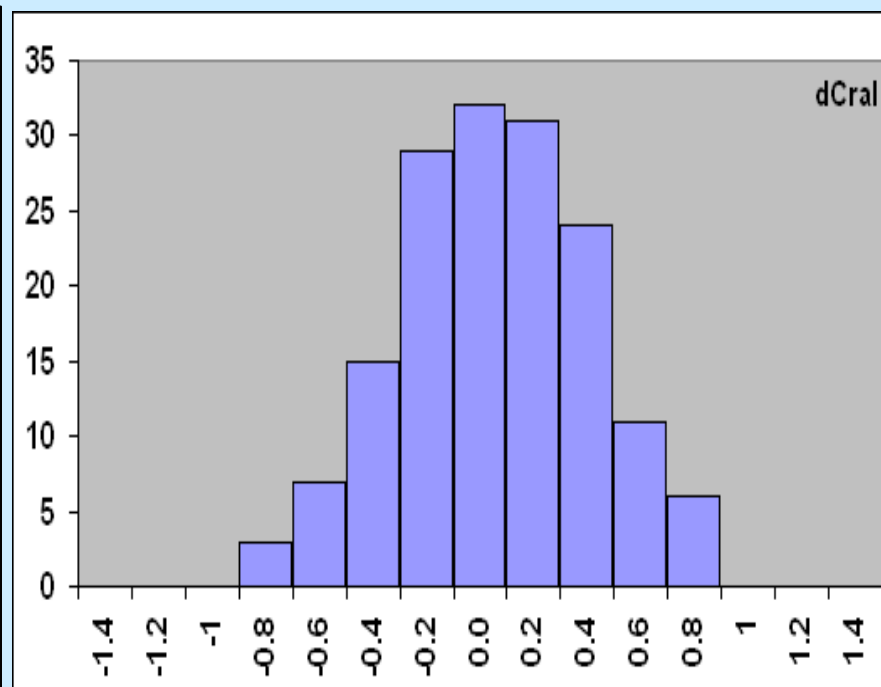
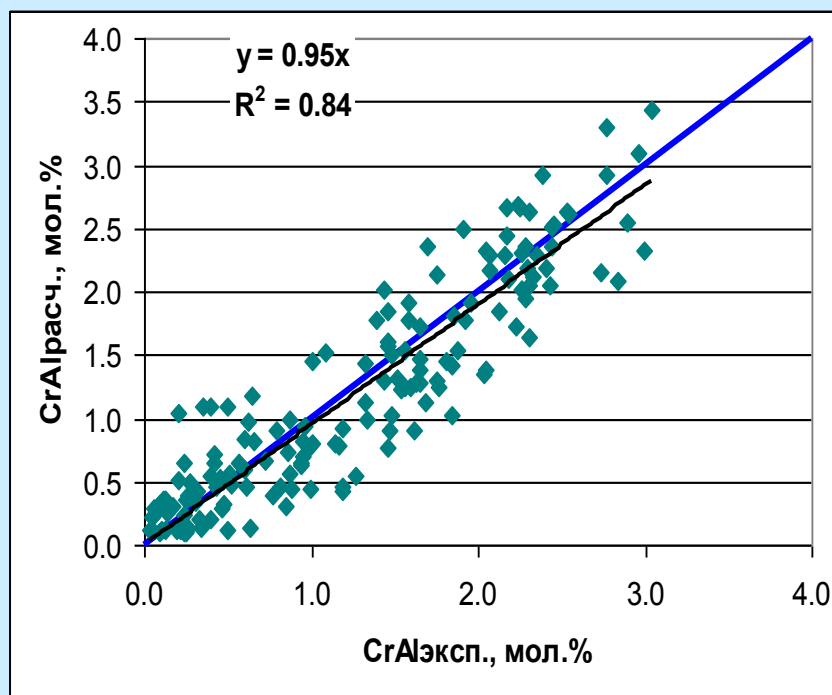
n=313, ср. разн.=0.02%, дов. инт.=±0.12%



# CrAl



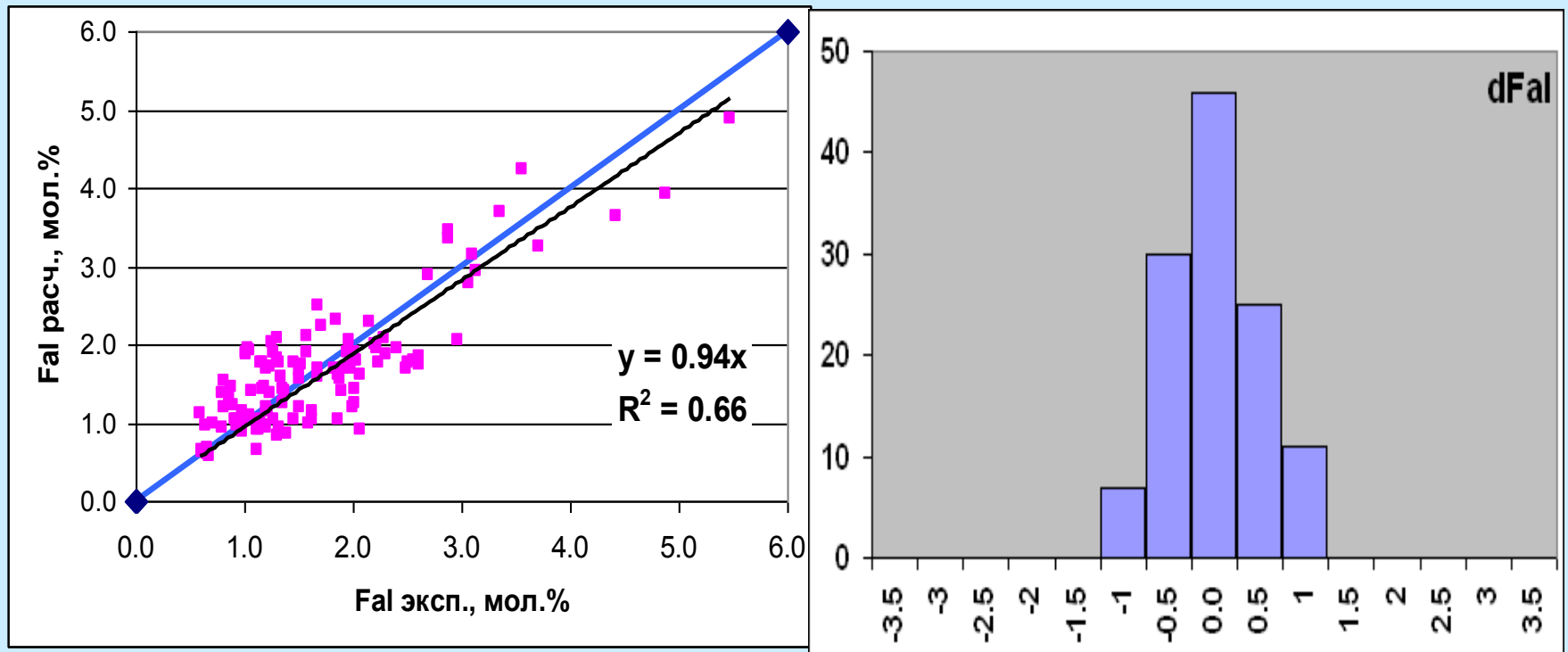
$n=158$ , ср. разн. =  $0.05\%$ , дов. инт. =  $\pm 0.05\%$



# FeAl

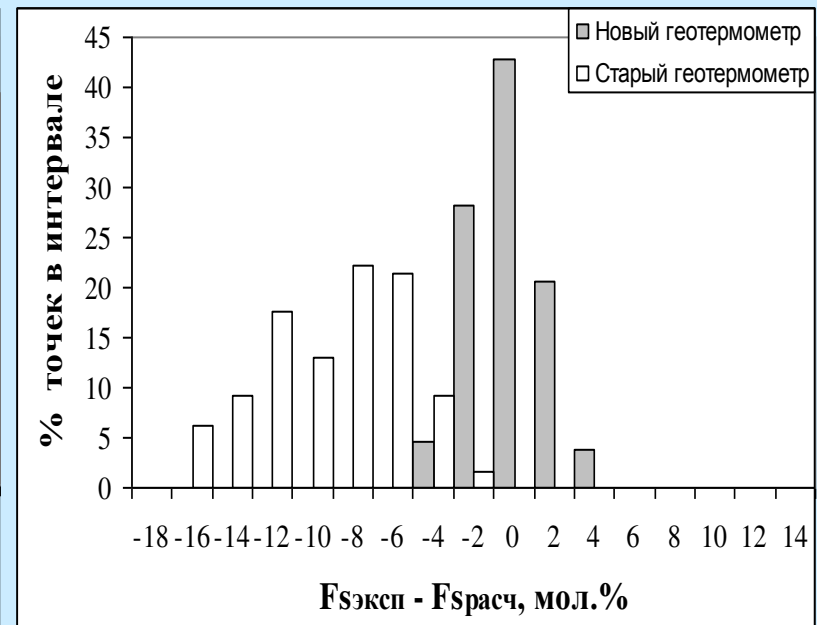
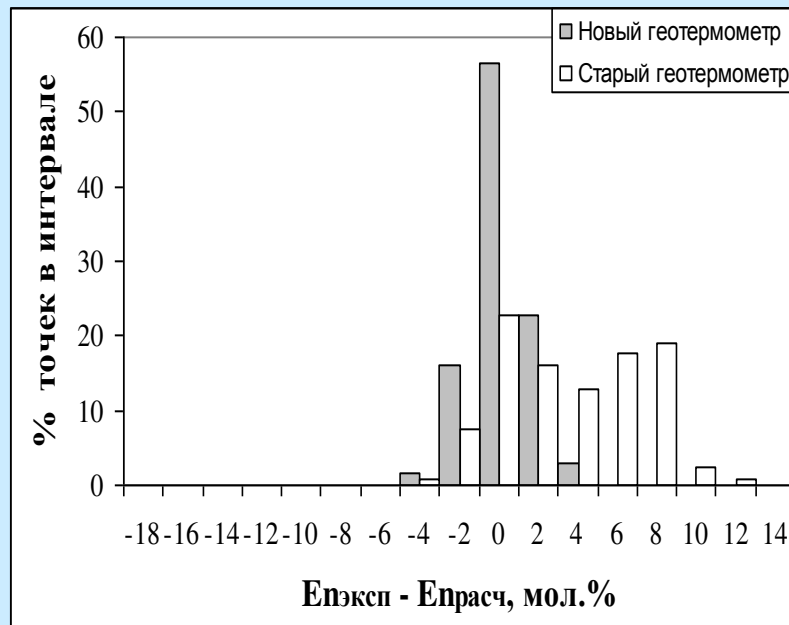


n=119, ср. разн.=0.02%, дов. инт.=±0.06%





# Гистограммы различия экспериментальных и расчётных содержаний энстатитового и ферросилитового миналов в равновесном с расплавом авгите



# Сравнение экспериментальных и расчётных температур кристаллизации авгита

