

РАСЧЁТ МОЛЕКУЛЯРНО-МАССОВЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ Q^n – СТРУКТОНОВ НА ЛИКВИДУСЕ СИЛИКАТНЫХ И АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ СИСТЕМ СЛОЖНОГО СОСТАВА.

А.В. Шильдт, А.А. Аriskин, В.Б. Поляков

Главной целью исследований является построение и тестирование новых алгоритмов моделирования распределения компонентов между оливином и расплавом с учётом термохимических данных для оливина и информации о строении силикатной жидкости. В отличие от предыдущих разработок [1; 2], в данной работе задействована ионная модель строения силикатного расплава в комбинации с экспериментальными данными последних лет по структурно-химическим свойствам расплавов в широком диапазоне содержаний SiO_2 и Al_2O_3 .

Входными параметрами для расчёта молекулярно-массовых распределений (ММР) Q^n – структонов в этих расплавах являются данные о полимеризации оксидных соединений $\text{Me}_{n/2}\text{O}$ в зависимости от температуры, состава расплава и физико-химических свойств катионов-модификаторов. Предыдущие работы [3] были посвящены описанию зависимости степени полимеризации силикатных систем от содержания кремнезёма в расплаве. В данной работе излагается методика оценки этого параметра также для алюмосиликатных систем, с учётом способности Al к полимеризации.

Используя данные 46 экспериментальных определений состава расплава и потенциал ионизации в качестве структурно-химического параметра, автором были получены данные о характере зависимости степени полимеризации расплава от содержания в нём глинозёма Al_2O_3 (рис. 1). Как видно из этого графика, повышение содержания Al_2O_3 в расплаве резко усиливает его полимеризацию даже в области ультраосновных расплавов. Учёт этого фактора позволит распространить ионно-полимерную модель на более широкий диапазон составов природных магм с целью более точной корректировки оливинового геотермометра.

Литература

1. Roeder, P.L. and Emslie, E., Olivine-liquid equilibrium, Contrib. Mineral. Petrol., 1970, vol. 29, pp. 275-289.

2. Арискин А.А., Бармина Г.С. Моделирование фазовых равновесий при кристаллизации базальтовых магм. М.: Наука, 2000. 363 с.

3. A. A. Ariskin, A. V. Shil'dt, and V. B. Polyakov. Simulation of the Molecular Mass Distributions of Si Anions on the Liquidus of the Na₂O-SiO₂ System with Regard for the Disproportionation of Q Structons. ISSN 00167029, Geochemistry International, 2011, Vol. 49, No. 4, pp. 355-374. Pleiades Publishing, Ltd., 2011.

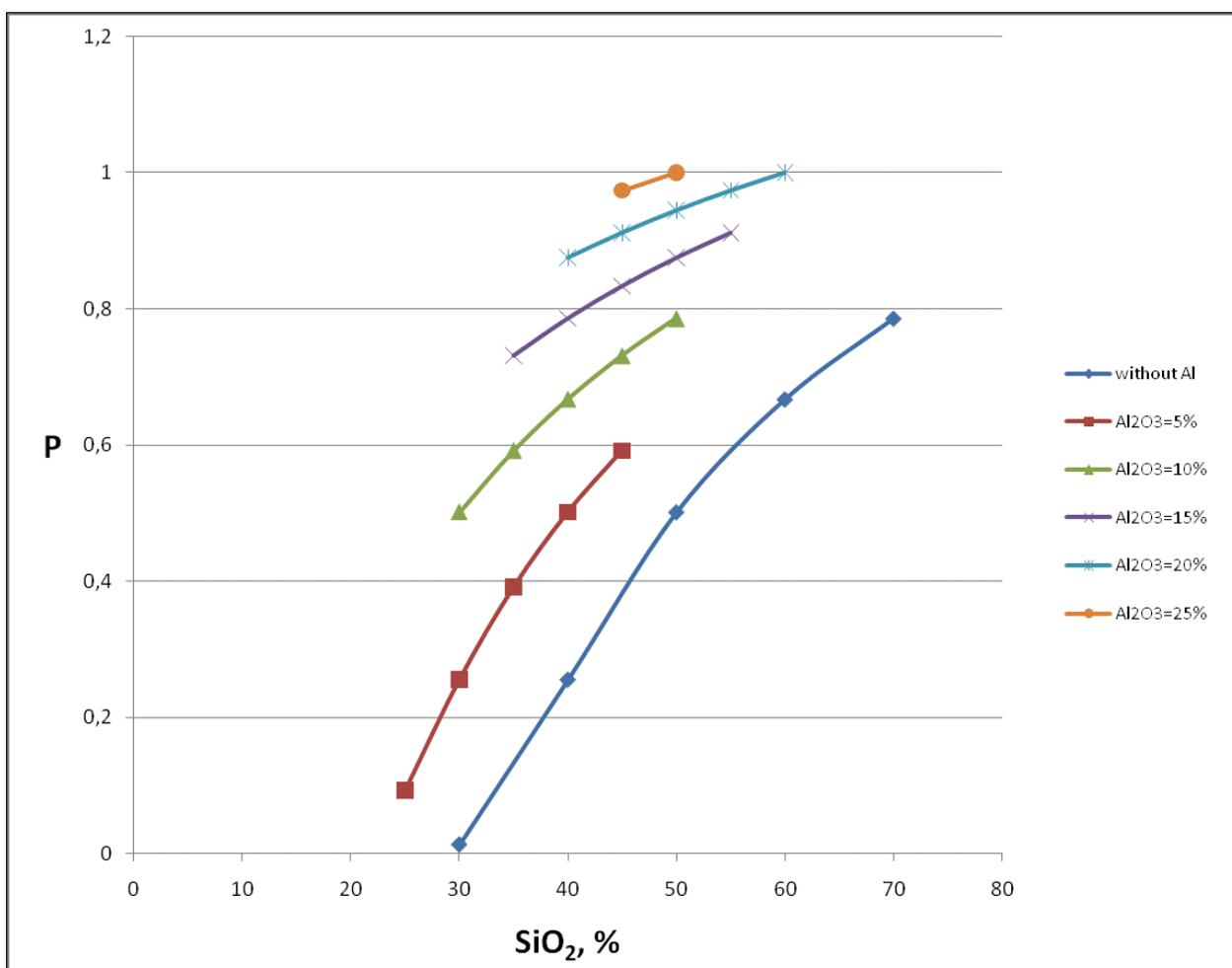


Рис. 1. Зависимость степени полимеризации расплава от состава.