维普资讯 http://www.cqvip.com

第14卷第3期 地学工程进展 Vol.14 No.3
1997年9月 ADVANCE IN EARTH SCIENCE ENGINEERING Sep.,1997

1990—1996年标度的矿物与微量元素温压计

吴春明 黄志全
(中国科学院地质研究所,北京 100029)

摘 要 九十年代是地质温压计研究的繁盛时期,各国地质学家们通过实验和理论研究,标度了几十个温压计,本文对这些温压计作一简单介绍。

关键词 九十年代;标度;地质温压计

九十年代的地质温压计研究比以往任何时期都活跃,既有对以往温压计的修正,还有新的温压计的标度,但是国内还未引起足够的注意。有些研究报告和学位论文完全置新的温压计于不顾,使用七十年代的成果。有鉴于此,笔者检索了1990年以来岩石学、矿物学、地球化学方面英文期刊共23种,从中摘录出已标度的温压计,供读者参考。

1 石榴石-角闪石Fe-Mg交换温压计

1.1 Kohn & Spear(1990)石榴石-角闪石压力计

Kohn & Spear(1990)根据天然岩石样品37组实验数据,得出了两个压力计。这两个压力计误差为±0.5Kbar,所给出的压力值相互一致。压力计表达为[1]:

$$P_{Mg}(bar)=[79,507+T(K)(29.14+8.3144\ln K_{eqMg})]/10.988 \quad (r=0.975)$$

$$P_{Fe}(bar)=[35,327+T(K)(56.09+8.3144\ln K_{eqFe})]/11.906 \quad (r=0.968)$$

以上各式中,$K_{eqMg}=(a_{gros})^2(a_{prp})(a_{Tsch})^3(a_q)^6/[(an)^6(a_{Tr})^3]$

$$K_{eqFe}=(a_{gros})^2(a_{alm})(a_{Fech})^3(a_q)^6/[(an)^6(a_{Fe-Act})^3]$$

矿物活度模型为:

石榴石:$a_{prp}=\{X_{prp}\exp[(13,800-6.28T)(X^2_{gros}+X_{alm}X_{gros}+X_{gros}X_{sps})/(RT)]\}^3$,

$a_{gros}=\{X_{gros}\exp[(13,800-6.28T)(X^2_{prp}+X_{alm}X_{prp}+X_{prp}X_{sps})/(RT)]\}^3$,

$a_{alm}=\{X_{alm}\exp[(13,800-6.28T)(-X_{prp}X_{gros})/(RT)]\}^3$,

$X_{prp}=Mg/(Mg+Fe+Mn+Ca)$,$X_{alm}=Fe/(Mg+Fe+Mn+Ca)$,

$X_{sps}=Mn/(Mg+Fe+Mn+Ca)$,$X_{gros}=Ca/(Mg+Fe+Mn+Ca)$;

斜长石:$a_{an}=X_{an}\exp[(610.34/T)-0.3837]$,

$X_{an}=Ca/(Ca+Na+K)$;

角闪石:$a_{Tsch}=(256/27)(X_{T1Al})(X_{T1Si})^3[Mg/(Fe+Mg)]$,$a_{Tr}=(X_{T1Si})^4[Mg/(Fe+Mg)]^2$,

收稿日期:1997-05-29

作者简介:吴春明,男,1967年生,博士研究生,构造地质学专业。

维普资讯 http://www.cqvip.com

$a_{Fe-Ts}=(256/27)(X_{T1Al})(X_{T1Si})^3[Fe/(Fe+Mg)]$，$a_{Fe-Act}=(X_{T1Si})^4[Fe/(Fe+Mg)]^2$，

$T1Si=Si-4.0$，$T1Al=8.0-Si$，$X_{T1Si}=T1Si/4.0$，$X_{T1Al}=T1A1/4.0$

适用范围为2.5～13Kbar、500～800℃

1.2 Perchuk等(1990)角闪石-石榴石温度计

Perchuk等(1990)根据大量的实验，得出角闪石-石榴石温度计为[2]：

$$T(℃)=3,366-1,444[Na]^{Hb}-323[Al]^{Hb}+188[Ca]^{Hb}+[Ca]^{grt}(728[Ca]^{grt}-148)/\ln K_D+2.417-1.393[Na]^{Hb}-0.266[Al]^{Hb}+0.051[Ca]^{Hb}$$

其中，$[Na]^{Hb}$是角闪石M4位Na离子数，$[Ca]^{Hb}$是角闪石中Ca离子数，$[Al]^{Hb}=\Sigma Al-[Na]^{Hb}$；$[Ca]^{grt}$是石榴石中Ca离子数。角闪石以23个氧为基、含15个离子；石榴石以12个氧为基、含8个离子。分配系数$K_D=[X_{Mg}/(1-X_{Mg})]^{Hb}*[(1-X_{Mg})/X_{Mg}]^{grt}$，$X_{Mg}^{grt}=Mg/(Mg+Fe+Mn)$，$X_{Mg}^{Hb}=Mg/(Mg+Fe+Mn)$。

实验条件为700－800℃、6－30Kbar。

2 石榴石－单斜辉石Fe-Mg交换温度计

Ganguly等(1996)根据反应 Mg－Grt＋Fe－α＝Fe－Grt＋Mg－α($\ln K'=\ln K(1,T)+1/RT\int_1^P\Delta V*dp$，$\Delta V\approx\Delta V^0$)，得出石榴石－单斜辉石温度计为[3]：

$$\ln K'(Grt-cpx)\approx[4,100+11.07P(Kbar)]/T(℃)-2.40$$

3 石榴石－斜方辉石Fe-Mg交换温压计

3.1 Perchuk等(1990)石榴石-斜方辉石温度计

Perchuk等(1990)根据大量的实验资料，并考虑了Ca的影响，得出石榴石－斜方辉石温度计为[2]：

$$T(\pm 42℃)=4,066-347(X_{Mg}^{opx}-X_{Fe}^{opx})-17,484X_{Al}^{opx}+5,769X_{Ca}^{grt}+23.42P(Kbar)/(1.987\ln K_D)+2.143+0.0929(X_{Mg}^{opx}-X_{Fe}^{opx})-12.8994X_{Al}^{opx}+3.846X_{Ca}^{grt}$$

其中$K_D=(X_{Mg}/X_{Fe})^{opx}/(X_{Fe}/X_{Mg})^{grt}$，$X_{Mg}^{opx}=Mg/(Mg+Fe+0.5Al)$，$X_{Fe}^{opx}=Fe/(Mg+Fe+0.5Al)$，$X_{Al}^{opx}=0.5Al/(Mg+Fe+0.5Al)$，$X_{Ca}^{grt}=Ca/(Ca+Mn+Fe+Mn)$。实验条件为700－800℃/6－30Kbar.

3.2 Ganguly等(1996)石榴石-斜方辉石温度计

Ganguly等(1996)根据反应 Mg－Grt＋Fe－α＝Fe－Grt＋Mg－α($\ln K'=\ln K(1,T)+1/RT\int_1^P\Delta V*dp$，$\Delta V\approx\Delta V^0$)，得出石榴石－斜方辉石温度计为[3]：

$$\ln K'(Grt-opx)=[1,981(\pm 166)+11.9P(Kbar)]/T(℃)-0.97$$

3.3 Brey等(1990)斜方辉石-石榴石Al含量压力计

Brey等(1990)在10－60Kbar/900－1,400℃条件下，对天然二辉橄榄岩作了逆转反应实验，得出压力计为[4]：

$$P(Kbar)=[-C_2-(C_2^2+0.004C_3C_1)**0.5]/(2C_3)$$

其中$C_1=-RT(K)\ln Kd-5,510+88.91T-19T**1.2+3(X_{Ca}^{Gt})^2*82,458+X_{Mg}^{M1}X_{Fe}^{M1}(80,942-46.7T)-3X_{Fe}^{Gt}X_{Ca}^{Gt}*17,793-X_{Ca}^{Gt}X_{Cr}^{Gt}*(1.164*10^6-420.4T)-X_{Fe}^{Gt}X_{Cr}^{Gt}*(-1.25*10^6+565T)$

维普资讯 http://www.cqvip.com

$C_2=-0.832-8.78\cdot10^{-5}(T-298)+3(X_{Al}^{grt})^2*3.305-X_{Ca}^{grt}X_{Cr}^{grt}*13.45+X_{Fe}^{grt}X_{Cr}^{grt}*10.5$

$C_3=16.6*10^{-4}$，$Kd=(1-X_{Ca}^{grt})^3(X_{Al}^{grt})^2/[X_{MF}^{M1}(X_{MF}^{M2})^2(X_{Al.TS}^{M1})]$

辉石：(a)$X_{Al}^{M1}=0.5(Al+Na-Cr-Fe^{3+}-2Ti)$；(b)$X_{Al.TS}^{M1}=Al^{M1}$，依契尔马克成分而定。定义 jadeite=Na−Cr−Fe^{3+}−2Ti。若 jadeite<0，则 $X_{Al.TS}^{M1}=(Al-jadeite)/2$；若 jadeite>0，则 $X_{Al.TS}^{M1}=(Al-jadeite)/2$；(c)M1、M2 位上的 Mg、Fe：$X_{Mg}^{M1}=X_{MF}^{M1}X_{MF}$，$X_{Mg}^{M2}=X_{MF}^{M2}X_{MF}$，$X_{Fe}^{M1}=X_{MF}^{M1}*(1-X_{MF})$，$X_{MF}^{M1}=(1-X_{Al}^{M1}-Cr-Fe^{3+}-Ti)$，$X_{MF}^{M2}=(1-Ca-Na-Mn)$，$X_{MF}=Mg/(Mg+Fe)$；

石榴石：$X_{Al}^{grt}=Al/(Al+Cr)$，$X_{Cr}^{grt}=Cr/(Al+Cr)$，$X_{Ca}^{grt}=Ca/(Ca+Mg+Fe+Mn)$，$X_{Fe}^{grt}=Fe/(Ca+Mg+Fe+Mn)$，$X_{Mg}^{grt}=Mg/(Ca+Mg+Fe+Mn)$。

对天然体系误差为±2.2Kbar(1σ)，适用范围 2.8—6.0GPa。

3.4 Carswell(1991)石榴石-斜方辉石 Al 含量压力计

Carswell(1991)得出的 CMAS 体系中石榴石-斜方辉石 Al 含量压力计为[5]：

$P(Kbar)=0.001058[-T(K)(\ln K-0.94)-3,473]$

$K=$(顽辉石中 Al_2O_3wt%)/100.

3.5 Bhattacharya 等(1991)斜方辉石-石榴石温度计

Bhattacharya 等(1991)通过量热和相平衡实验，获得了 Fe-Mg-Ca 石榴石内洽的成分—活度模型，得出斜方辉石-石榴石温度计为[6]：

$T(K)=\{1,611+0.021P(bar)+906X_{Ca}^{grt}+[A]+477(2X_{Mg}^{opx}-1)\}/\{\ln[(X_{Fe}/X_{Mg})^{opx}/(X_{Fe}/X_{Mg})^{grt}]+0.796\}$　　$(T=1,248-1,573K)$

其中$[A]=-1,220X_{Fe}^{grt}X_{Mg}^{grt}-441X_{Ca}^{grt}(X_{Mg}^{grt}X_{Fe}^{grt})-136(X_{Mg}^{grt})^2+746(X_{Fe}^{grt})^2$

4 二辉石温度计

4.1 Brey 等(1990)二辉石 Ca 分配温度计

Brey 等(1990)在 10—60Kbar/900—1,400℃条件下，对天然二辉橄榄岩作了逆转反应实验，得出温度计为[4]：

$T_{BKN}(K)=[23,664+P(Kbar)(24.9+126.3X_{Fe}^{cpx})]/[13.38+(\ln Kd)^2+11.59X_{Fe}^{cpx}]$

其中，$Kd=(1-Ca^*)^{cpx}/(1-Ca^*)^{opx}$，$Ca^*=Ca^{M2}/(1-Na^{M2})$，$X_{Fe}^{opx}=Fe/(Fe+Mg)$。要求全岩 mg≥0.8。标准差±15℃(1σ)。

4.2 Brey 等(1990)二辉石 Na 分配温度计

Brey 等(1990)在 10—60kbar/900—1,400℃条件下，对二辉橄榄岩作了逆转反应实验，得出温度计为[4]：

$T(K)=[35,000+61.5P(Kbar)]/[\ln(D_{Na})^2+19.8]$

$D_{Na}=Na^{opx}/Na^{cpx}$。该温度计计算结果与 T_{BKN}相差±56℃。适用范围 800～1,400℃。

4.3 Slavinskiy(1993)二辉石温压计

Slavinskiy(1993)根据 Akella(1976)和 Boyd(1973)的实验资料，标度出与 T 无关的压力计和与 P 无关的温度计如下[7]：

$P(GPa)=-3.18\log K_{CF}-5.28\log X_A^{(opx)}+3.66X_{Mg}-3.69$

$10^4/T(℃)=3.681\log K_{CF}+0.77\log X_A^{(opx)}-2.26X_{Mg}+6.79$

维普资讯 http://www.cqvip.com

其中,$K_{CF}=(X_C/X_F)^{(Grt)}/(X_C/X_F)^{(opx)}$,$X_{Mg}=[(Mg/F)^{(Grt)}+(Mg/F)^{(opx)}]/2$,A=Al+Cr,C=Ca,F=Mg+Fe+Mn,$X_i^{(r)}=i^{(r)}/(A+C+F)^r$(i=A,C,F,r=grt,opx).适用于上地幔岩石。适用范围为1,000－1,500℃、2.6－4.5Gpa。

5　尖晶石-假蓝宝石 Mg-Fe 交换温度计

Owen 等(1991)对加拿大 Poes 港高级变质岩的尖晶石-假蓝宝石-刚玉-金红石组合作了详尽分析,得出温度计如下[8]:

$T(\pm 100℃)=[800+(228*\ln Kd)]-273$　　(R=0.8100)

其中 $Kd=(X_{Fe}/X_{Mg})^{sp}/(X_{Fe}/X_{Mg})^{sap}$。该温度计对于硅不饱和,假蓝宝石不饱和的麻粒岩也适用。

6　橄榄石-单斜辉石 Fe-Mg 交换温度计

6.1　橄榄石-单斜辉石 Fe-Mg 交换压力计

Kohler & Brey(1990)用实验方法测量了天然二辉橄榄岩中橄榄石－单斜辉石之间平衡的 Ca 含量。据此得出温度计为[9]:

$P(Kbar)=[-T(K)\ln D_{Ca}-11,982+3.61T]/56.2$　　$T(K)\geq(1,275.25+2.827p)$

$P(Kbar)=[-T(K)\ln D_{Ca}-5,792-1.25T]/42.5$　　$T(K)\geq(1,275.25+2.827p)$

其中,$D_{Ca}=Ca^{ol}/Ca^{opx}$,Ca^{ol}=以4个氧为基的橄榄石结构式中 Ca 原子数,Ca^{opx}=以6个氧为基的单斜辉石结构式中 Ca 原子数。压力计再现实验数据的标准差为±1.7Kbar(1σ)。实验范围2～60Kbar/900～1,400℃。

6.2　橄榄石-普通辉石 Mg-Fe 交换温度计

Loucks(1996)根据34个岩浆结晶实验数据,得出温度计如下[10]:

$\ln Kd-78.025=-5,945.96/T(℃)-10.1327\ln T$

其中,$Kd=(Fe/Mg)^{ol}/(Fe^{2+}/Mg)^{aug}$,该温度计精度为±6.1℃,适用于高温(>800℃)、低压(<10Kbar)下形成的中、基性侵入岩和喷出岩。用于较低温的中性－长英质火山岩时,应该慎重。温度计求解需用迭代方法。迭代初值大体为:T=800、Kd=6;T=900、Kd=3.75;T=1,000、Kd=2.6;T=1,100、Kd=1.7;T=1,200、Kd=1.0;T=1,300、Kd=0.71。

7　橄榄石-斜方辉石-石英压力计

Koch－Muller 等(1992)通过实验研究了 MgO－FeO－SiO_2 体系中的富铁斜方辉石、富铁橄榄石、石英的成分和活度－压力之间的关系,得出压力计为[11]:

$P(\pm 0.7Kbar)=-41.224+23.709X_{Fe}^{opx}+18.263X_{Fe}^{ol}+23.709T(℃)$　　$(r^2=0.999)$

当缺少斜方辉石时,可用 $P(Kbar)=-61.237+61.191X_{Fe}^{ol}+0.0145T(℃)$　$(r^2=0.997)$ 估计富铁橄榄石－石英组合的最大压力;而 $P(Kbar)=-32.653+33.737X_{Fe}^{opx}+0.0141T(℃)$ $(r^2=0.999)$可以用来估算仅有富铁斜方辉石存在时的最小压力。

其中,$X_{Fe}^{ol}=Fe/(Fe+Mg+Mn+Ca)$,$X_{Fe}^{opx}=Fe/(Fe+Mg)$。实验条件为800～1000℃、5～15Kbar。适用于含"额外"组分如 Ca,Al,Mn 等重总量不超过4%的天然体系。

8　钠长石-硬玉、钠长石-石英温压关系

Liu 等(1995)通过实验研究了人工合成硬玉－绿辉石质辉石－钠长石－石英的稳定性,得出反应 $NaAlSi_3O_8$(钠长石)=$NaAlSi_2O_6$(硬玉)+SiO_2(石英)的 P－T 关系是[12]:

$P(MPa)=2.25T+330$　　(T<680℃)

维普资讯 http://www.cqvip.com

$P(MPa)=(0.00545T-1.46)*(T-700)+1,890$ $(680<T<790℃)$

$P(MPa)=2.85T-105$ $(T>790℃)$

实验条件 600－900℃/1.67－2.48GPa。

9 尖晶石-堇青石-石榴石温压计

Nichols 等(1992)根据 950－1200℃、11－30Kbar 条件下的 FeO-MgO-Al_2O_3-SiO_2-ZnO (FMASZn)体系中矿物平衡实验结果,得出了10个温压计。其中堇青石结构式为 $(Mg,Fe)_2Al_4Si_5O_{18}$,锌尖晶石结构式为 $ZnAl_2O_4$,铁尖晶石结构式为 $FeAl_2O_4$。石榴石活度参见附录1[13]。尖晶石活度系数为[14]:

$RT\ln\gamma_{hc}=W_{MgFe}(X_{Mg}^2+X_{Mg}X_{Zn})+W_{FeZn}(X_{Zn}^2+X_{Mg}X_{Zn})+W_{MgZn}(-X_{Mg}X_{Zn})$,

$RT\ln\gamma_{spl}=W_{MgFe}(X_{Fe}^2+X_{Fe}X_{Zn})+W_{MgZn}(X_{Zn}^2+X_{Zn}X_{Fe})+W_{FeZn}(-X_{Fe}X_{Zn})$,

$W_{MgFe}=1,960J$, $W_{FeZn}=-3,800J$, $W_{MgZn}=-2,600J$

9.1 *石榴石-铁尖晶石压力计,用于含石英、矽线石的组合,FASZn 次体系*

$P=(1/2,400)*\{-49,360+57.48T-RT\ln[(X_{spl}^{hc})^3/a_{grt}^{alm}]-3RT\ln\gamma_{hc}\}$

9.2 *石榴石-铁尖晶石压力计,用于含石榴石、蓝晶石的组合,FASZn 次体系*

$P=(1/3,460)*\{-70,000+78.88T-RT\ln[(X_{spl}^{hc})^3/a_{grt}^{alm}]-3RT\ln\gamma_{hc}\}$

9.3 *石榴石-尖晶石压力计,用于含石英、矽线石的组合,MASZn 次体系*

$P=(1/2,340)*\{-37,464+46.49T-RT\ln[(X_{spl}^{spl})^3/a_{grt}^{prp}]-3RT\ln\gamma_{spl}\}$

9.4 *石榴石-尖晶石压力计,用于含石榴石、蓝晶石的组合,MASZn 次体系*

$P=(1/3,400)*\{-58,104+67.89T-RT\ln[(X_{spl}^{spl})^3/a_{grt}^{prp}]-3RT\ln\gamma_{spl}\}$

9.5 *尖晶石-石英-镁堇青石压力计,MASZn 次体系*

$P=(1/3,330)*\{12,208+19.5T-RT\ln[a_{cord}^{Mg-cord}/(X_{spl}^{spl})^2]+2RT\ln\gamma_{spl}\}$

9.6 *铁尖晶石-石英-堇青石压力计,FASZn 次体系*

$P=(1/3,500)*\{-17,556+22.63T-RT\ln[a_{cord}^{Fe-cord}/(X_{spl}^{hc})^2]+2RT\ln\gamma_{spl}\}$

9.7 *铁晶石-石英-铁堇青石温度计,FMASZn 次体系*

$T=[29,774+170P-2RT\ln(\gamma_{hc}/\gamma_{spl})]/\{3.13+R\ln[(X_{spl}^{hc})^2a_{cord}^{Mg-cord}]-R\ln[(X_{spl}^{spl})^2a_{cord}^{Fe-cord}]\}$

9.8 *石榴石-铁堇青石温度计,FMAS 次体系*

$T=(113,116+630P)/\{-31.87-R\ln[(a_{grt}^{alm})^2(a_{cord}^{Mg-cord})^3]+R\ln[(a_{grt}^{prp})^2(a_{cord}^{Fe-cord})^3]\}$

9.9 *石榴石-铁堇青石压力计,FAS 次体系*

$P=(1/15,300)*\{-151,416+182.85T-RT\ln[(a_{cord}^{Fe-cord})^3/(a_{grt}^{alm})^2]\}$

9.10 *石榴石-堇青石压力计,MAS 次体系*

$P=(1/14,670)*\{-38,300+151.48T-RT\ln[(a_{cord}^{Mg-cord})^3/(a_{grt}^{alm})^2]\}$

以上压力 P(Kbar)、温度 T(K)

10 斜方辉石-黑云母温度计

Sengupta 等(1990)用 Fonarev & Konilov(1986)的实验资料,考虑了黑云母中八面体位置上。Al、Ti 混合性质、斜方辉石中 Fe-Mg 的非理想混合性质,得出温度计为[15]:

$T(℃)=[4,130+603(X_{Mg}-X_{Fe})^{opx}-4,423X_{Ti}^{bio}-3,595X_{AlVI}^{bio}+0.017P(bar)]/[R\ln Kd+3.27]-273$

其中,$Kd=(X_{Fe}/X_{Mg})^{opx}/(X_{Fe}/X_{Mg})^{bio}$

维普资讯 http://www.cqvip.com

11　斜方辉石-石榴石-斜长石-石英压力计

Bhattachya 等(1991)通过量热和相平衡实验,获得了 Fe－Mg－Ca 石榴石内洽的成分－活度模型,得出压力计为[6]:

$P_{Mg}(bar)=3,944+13.07T(K)+3.5038TlnK(B)$

$P_{Fe}(bar)=-3,602+13.753T(K)+3.352TlnK(C)$

其中,$K(B)=(a^{grt}_{pyr})^2(a^{grt}_{gros})/[(a^{pl}_{an})(a^{opx}_{en})^2]$　　$K(C)=(a^{grt}_{alm})^2(a^{grt}_{gros})/[(a^{pl}_{an})(a^{opx}_{fs})^2]$

$a^{opx}_{en}=X^{opx}_{Mg}\exp[0.477(1-X^{opx}_{Mg})^2]$　　$a^{opx}_{fs}=(1-X^{opx}_{Mg})\exp[0.477(X^{opx}_{Mg})^2]$

$a^{grt}_{pyr}=X^{grt}_{Mg}\exp[0.906(X^{grt}_{Ca})^2+X^{grt}_{Fe}(0.746-1.220X^{grt}_{Mg})+X^{grt}_{Ca}X^{grt}_{Fe}(1.346-0.610X^{grt}_{Mg})]$

$a^{grt}_{alm}=X^{grt}_{Fe}\exp[(0.136+1.220X^{grt}_{Fe})(X^{grt}_{Mg})^2+X^{grt}_{Ca}X^{grt}_{Mg}(-0.465+0.610X^{grt}_{Fe})]$

$a^{grt}_{gros}=X^{grt}_{Ca}\exp\{0.906(X^{grt}_{Mg})^2+X^{grt}_{Fe}X^{grt}_{Mg}[0.465-0.610(X^{grt}_{Fe}-X^{grt}_{Mg})]\}$

$a^{pl}_{an}=0.25X^{pl}_{Ca}(1+X^{pl}_{Ca})\exp[(1-X^{pl}_{Ca})^2(1.009+4.620X^{pl}_{Ca})]\}$

这两个压力计所得结果相同。适用范围 1,248－1,573K。

12　石榴石-黑云母温度计

12.1　Dasgupta 等(1991)石榴石-黑云母 Mg-Fe 交换温度计

Dasgupta 等(1991)得出的温度计为[16]:

$T(K)=4,301.0+3,000.0X^{grt}_{Ca}+1,300.0X^{grt}_{Mn}-495.0(X_{Mg}-X_{Fe})^{grt}-3,595.0X^{bio}_{AlVI}-4,423.0X^{bio}_{Ti}+1,073.0(X_{Mg}-X_{Fe})^{bio}+0.0246P(bar)/(1.85-RlnKd)$

其中,$Kd=(Fe/Mg)^{bio}/(Fe/Mg)^{grt}$

$X^{bio}_{AlVI}=\Sigma Al-[Si+Al^{IV}]$,$(Si+Al^{IV}=3)$　　$X^{bio}_{Ti}=Ti/(Ti+Fe+Mg+Al^{VI})$

$X^{bio}_{Mg}=Mg/(Mg+Fe+Ti+Al^{VI})$　　$X^{bio}_{Fe}=Fe/(Ti+Fe+Mg+Al^{VI})$

$X^{grt}_{Mg}=Mg/(Mg+Fe^{2+}+Ca+Mn)$　　$X^{grt}_{Fe}=Fe^{2+}/(Mg+Fe^{2+}+Ca+Mn)$

$X^{grt}_{Ca}=Ca/(Mg+Fe^{2+}+Ca+Mn)$　　$X^{grt}_{Mn}=Mn/(Mg+Fe^{2+}+Ca+Mn)$

12.2　Bhattacharya 等(1992)石榴石-黑云母 Mg-Fe 交换温度计

Bhattacharya 等(1992)充分考虑了固溶体的非理想性,利用以前矿物相平衡实验资料,得出温度计为[17]:

$T_{HW}(K)=\{20,286+0.0193P(bar)-[2,080(X^{grt}_{Mg})^2-6,350(X^{grt}_{Fe})^2-13,807X^{grt}_{Ca}(1-X^{grt}_{Mn})+8,540X^{grt}_{Fe}X^{grt}_{Mg}(1-X^{grt}_{Mn})+4,215X^{grt}_{Ca}(X^{grt}_{Mg}-X^{grt}_{Fe})]+4,441(2X^{bio}_{Mg}-1)\}/[13.138+8.3143lnKd+6.276X^{grt}_{Ca}(1-X^{grt}_{Mn})]$

$T_{GS}(K)=\{13,538+0.0193P(bar)-[837(X^{grt}_{Mg})^2-10,460(X^{grt}_{Fe})^2-13,807X^{grt}_{Ca}(1-X^{grt}_{Mn})+19,246X^{grt}_{Fe}X^{grt}_{Mg}(1-X^{grt}_{Mn})+5,649X^{grt}_{Ca}(X^{grt}_{Mg}-X^{grt}_{Fe})]+7,972(2X^{bio}_{Mg}-1)\}/[6.778++8.3143lnKd+6.276X^{grt}_{Ca}(1-X^{grt}_{Mn})]$

其中,$Kd=(X_{Fe}/X_{Mg})^{grt}/(X_{Fe}/X_{Mg})^{bio}$,$T_{HW}$是根据 Hackler & Wood(1989)固溶体模型得出的,T_{GS}是根据 Ganguly & Saxena(1984)固溶体模型得出的。适用于角闪岩相至麻粒岩相变质岩和某些过铝质二云母花岗岩,适用温度范围 550－950℃。

12.3　Kullerud(1995)石榴石-黑云母 Ti-Cl 温度计

Kullarud(1995)研究了挪威北部 Flakstadoy 基性杂岩体内苏长岩质麻粒岩中与石榴石-斜长石-角闪石共生的富含 Ba,Cl,Ti 的黑云母,发现黑云母 Ti,Cl 与石榴石-黑云母之间分配

维普资讯 http://www.cqvip.com

系数有关[18]：

$\ln Kd=-1.82+2.60X_{Ti}^{bio}+5.67X_{Cl}^{bio}$

据此可标度石榴石－黑云母温度计。

13 角闪石-斜长石温度计

13.1 Blundy 等(1990)角闪石-斜长石温度计

Blundy 等(1990)根据钙质角闪石-斜长石相平衡实验数据，得出温度计为[19]：

$T(K)=[6.77P(GPa)-48.98+y]/(-0.049-0.008314\ln K)$

其中，$K=[(Si-4)/(8-Si)]X_{ab}^{pl}$，Si 为以 24 个氧为基的角闪石结构式中 Si 的原子数。y 代表与斜长石非理想混合性质有关的 $RT\ln\gamma_{ab}$ 项的参数(如果 $X_{ab}>0.5$，$y=0$；如果 $X_{ab}<0.5$，$y=-8.06+25.5(1-X_{ab})^2$)。适用于含平衡角闪石＋斜长石组合的硅饱和侵入岩及变质岩，要求斜长石 An<92，角闪石中 Si<7.8。该温度计对实验数据的拟合残差为±38℃。适用范围 500－1100℃。

13.2 Holland 等(1994)角闪石-斜长石温度计

Holland 等(1994)充分考虑了钙质角闪石的非理想混合性质，得出温度计为[20]：

13.2.1 浅闪石-透闪石-斜长石温度计[20]

$$T_A(K)=[-76.95+0.79P(Kbar)+Y_{ab}+39.4X_{Na}^{A}+22.4X_{K}^{A}+(41.5-2.89P)X_{Al}^{M2}]/\{-0.0650-R\ln[(27X_{\square}^{A}X_{Si}^{T1}X_{ab}^{pl})/(256X_{Na}^{A}X_{Al}^{T1})]\}$$

若 $X_{ab}>0.5$，$Y_{ab}=0$；若 $X_{ab}\leq 0.5$，$Y_{ab}=12.0(1-X_{ab})^2-3.0$KJ，用于含石英的组合；

13.2.2 浅闪石-镁铁闪石-斜长石温度计[20]

$$T_B(K)=[78.44+Y_{ab-an}-33.6X_{Na}^{M4}-(66.8-2.92P(Kbar)X_{Al}^{M2}+78.5X_{Al}^{T1}+9.4X_{Na}^{A}]/\{-0.0721-R\ln[(27X_{Na}^{M4}X_{Si}^{T1}X_{an}^{pl})/(64X_{Ca}^{M4}X_{Al}^{T1}X_{ab}^{pl})]\}$$

若 $X_{ab}>0.5$，$Y_{ab-an}=3.0$KJ；若 $X_{ab}\leq 0.5$，$Y_{ab-an}=12.0(2X_{ab}-1)+3.0$KJ。用于含或不含石英的组合。

镁铁闪石替代方式为：$cm=Si+Al+Ti+Fe^{3+}+Fe^{2+}+Mg+Mn-13.0$。$X_{Si}^{T1}=(Si-4)/4$，$X_{\square}^{A}=3-Ca-Na-K-cm$，$X_{Al}^{T1}=(8-Si)/4$，$X_{Na}^{A}=Ca+Na+cm-2$，$X_{K}^{A}=K$，$X_{Na}^{M4}=(2-Ca-cm)/2$，$X_{Al}^{M2}=(Al+Si-8)/2$，$X_{Ca}^{M4}=Ca/2$。

以上两温度计中，钙质角闪石 Fe^{3+} 计算方法为：以 23 个氧为基，首先假设 Fe 全为 Fe^{2+}，定义：(A)：$f1=16/\Sigma$，$f2=8/Si$，$f3=15/(\Sigma-Na-K)$，$f4=2/Ca$，$f5=1.00$；(B)：$f6=8/(Si+Al)$，$f7=15/(\Sigma-K)$，$f8=12.9/(\Sigma-Na-K-Ca)$，$f9=36/(46+Al+Si+Ti)$，$f10=1-Fe/46$。如果 A 组任何 f>10，那么 Fe 全为 Fe^{2+}；如果 B 组任何 f>1.00，那么角闪石不符合化学计量规则。此时选取最小的 f_A 值与最大的 f_B 值($f_A>f_B$。若 $f_A\leq f_B$ 即不符合化学计量规则)，求平均值 $fav=(f_A+f_B)/2$，再用 fav 重新计算离子数(假设 Fe 全为 Fe^{2+})，即 $Ci\Rightarrow fav*Ci$，$\Sigma\Rightarrow fav*\Sigma$，$Fe^{3+}=46(1-fav)$，$Fe^{2+}=Fe-Fe^{3+}$。

适用范围：400－1,000℃，1－15Kbar，误差±40℃。

14 石英－白云母－黑云母－斜长石－石榴石压力计

Hoisch(1990)根据含有石英－白云母－黑云母－石榴石－斜长石－矽线石/蓝晶石组合的 43 组矿物相平衡实验数据，通过多元回归计算，在 95%的置信水平上，经验性地标度了 6 个压力计[21]：

维普资讯 http://www.cqvip.com

14.1 $P(bar)=[-31,830.6+79.0281T(℃)-RTlnK_{R1}-26,968.7*(X_{Al}^{bio}-X_{Mg}^{bio})+32,604.5X_{Fe}^{bio}+42,855.4X_{Ti}^{bio})]/(3.8145-2/3*\Delta V_{gros})$要求有石英、石榴石、黑云母、斜长石出现、$K_{R1}=X_{phl}(an)^2/(a_{pyr})^{\frac{1}{3}}(a_{gros})^{\frac{2}{3}}X_{eas}]$;(R=0.999,误差±331bar)

14.2 $P(bar)=[-46,707.2+85.5824T(℃)-RTlnK_{R2}-30,960.2(X_{Al}^{bio}-X_{Fe}^{bio})+24,289.6X_{Mg}^{bio}+37,265.6X_{Ti}^{bio})]/(3.8986-2/3*\Delta V_{gros})$ (R=0.999,误差±283bar)

要求有石英、石榴石、黑云母、斜长石出现,其中 $K_{R2}=X_{min}(an)^2/(a_{alm})^{\frac{1}{3}}(a_{gros})^{\frac{2}{3}}X_{sid}]$。

14.3 $P(bar)=\{-20,681.4+69.8341T(℃)-RTlnK_{R3}-185,443[X_{Mg}^{M}(X_{Mg}^{M}-2)]\}/(4.1740-2/3*\Delta V_{gros})$ (R=0.991,误差±235bar)

其中 $K_{R3}=X_{cel}(an)^2/[(a_{pyr})^3(a_{gros})^{2/3}X_{mus}]$,要求有石榴石－白云母－斜长石－石英出现;

14.4 $P(bar)=\{-21,664.0+33.7500T(℃)-RTlnK_{R4}-172,497[X_{Mg}^{M}(X_{Mg}^{M}-2)]\}/(2.19415-1/3*\Delta V_{gros})$ (R=0.983,误差±208bar)

其中 $K_{R4}=X_{cel}an/[(a_{phl})^{1/3}(a_{gros})^{1/3}(X_{mus})^{2/3}]$,要求有石英－石榴石－黑云母－白云母－斜长石出现;

14.5 $P(bar)=[3,546.01+121.347T(℃)-RTlnK_{R5}]/(6.37161-\Delta V_{gros})$ (R=0.991,误差±269bar)

其中 $K_{R5}=X_{phl}(an)^3/(a_{pyr}a_{gros}a_{mus})$,可用于无石英的组合;

14.6 $P(bar)=[-55,530.4+140.635T(℃)-RTlnK_{R6}]/(6.59940-\Delta V_{gros})$ (R=0.991,误差±204bar)

其中 $K_{R6}=X_{ann}(an)^3/(a_{alm}a_{gros}a_{mus})$,可用于无石英的组合。

以上6个压力计的计算结果应该一致,这直接提供了互相检验的标准。矿物成分－活度模型见附录2[21]。

15 石榴石－绿泥石温度计

Grambling(1990)研究了新墨西哥州 Pecos Baldy 地区含石榴石－绿泥石－石英组合的变质岩,根据20件样品分析数据得出温度计为[22]:

$0=0.05P(bar)-19.02T(K)+4,607\ln Kd+24,156$

其中 $Kd=(Mg/Fe)^{gri}/(Mg/Fe)^{chl}$。误差为±8℃,适用范围350－520℃。

16 氧逸度温压计

16.1 Bryndzia 等(1990)洋下地幔氧逸度温度计

Bryndzia(1990)用 FMQ 温度计研究了大西洋中脊、印度洋中部－西南部洋中脊、北冰洋中脊的54件深海尖晶石二辉橄榄岩样品,结果说明洋下地幔比陆下地幔氧化程度低,其温度计可表达为[23]:

$\log f_{O_2}=FMQ+0.24\pm0.5$

16.2 Ballhaus 等(1991)半经验全氧逸度压力计

(未完待续)