

METODIKA VÝSKUMU

Praktické použitie Fe-Ti oxidového geotermobarometra (zjednodušený výpočet hodnôt X_{Usp} a X_{Ilm})

MILOSLAV ŠULGAN

Geologický ústav SAV, Horná 15, 974 01 Banská Bystrica

Doručené 28. 4. 1986

Практическое применение железо-титанового окислительного геотермобарометра (простой подсчёт данных X_{Usp} и X_{Ilm})

Одной из проблем, с которыми встречаемся при аппликации железо-титанового окислительного барометра, является подсчёт молевой фракции „улвэспинеля“ (X_{Usp}) в магнитном прочном расплаве (Mt_{ss}) и молевой фракции илменита (X_{Ilm}) в илменитовом прочном расплаве (Ilm_{ss}). В работе приведен простой подсчёт обеих величин, которым можно полученные величины X_{Usp} и X_{Ilm} сравнить с теми, что получаются при использовании временно и экономически сложнейшего подсчёта алгоритмов (например по Кормишаэлю, 1967; Андерсону, 1968; Линдсли — Спенсер, 1982; Стормер, 1983). Эти простые подсчёты величин достаточны для начальной ориентировки при изучении железо-титановых окислов.

Practical use of Fe-Ti oxide geothermobarometer by simplified calculation of X_{Usp} and X_{Ilm}

One of problems to be reckoned with using of Fe-Ti oxide geothermobarometer represents the calculation of ulvöspinel molar fraction (X_{Usp}) in magnetite solid solution (Mt_{ss}) and that of ilmenite molar fraction (X_{Ilm}) in ilmenite solid solution (Ilm_{ss}), respectively. A simple procedure to calculate both values is presented by what the obtained data of X_{Usp} and X_{Ilm} may be compared with results gained using time consuming and expensive calculations applying algorithms (e. g. Carmichael, 1969; Anderson, 1968, Lindsley — Spencer, 1982; Stormer Jr., 1983). Such simply calculated values of X_{Usp} and X_{Ilm} are sufficient for purposes of primary orientation in investigating the Fe-Ti oxides.

Na základe experimentálnych prác v systéme železo — titán — kyslík vytvorili Budington a Lindsley (1964) a Fe-Ti oxidový geotermobarometer, ktorý je založený na koexistencii magnetitového a ilmenitového tuhého roztoku. Aplikovateľnosť tohto geotermobarometra v geológii sa ohraničuje na také horniny (magmatické, vulkanické, metamorfova-

né), ktoré tieto dve koexistujúce minerálne fázy obsahujú. Na základe stanovenia mólového zlomku ulvöspinelu (X_{Usp}) v magnetitovom tuhom roztoku (Mt_{ss}) a mólového zlomku ilmenitu (X_{Ilm}) v ilmenitovom tuhom roztoku (Ilm_{ss}) umožňuje tento termometer určiť, v akých podmienkach (pri akej teplote a fugacite kyslíka) sa v danom horninovom

systéme vytvorili tieto dve koexistujúce minerálne fázy. Nemusí sa však jednať len o podmienky, pri ktorých nastala kryštalizácia Fe-Ti oxidov z taveniny. Geotermobarometer nám okalibruje vždy ten úsek v termálnej histórii horniny, v ktorom Fe-Ti oxidy za predpokladu, že nastala rovnováha medzi $T\text{-}fO_2$ a tomu prislúchajúcim chemickým zložením týchto Fe-Ti oxidov, nadobudli dané X_{Usp} a X_{Ilm} . Pre správnu interpretáciu výsledkov Fe-Ti oxidového geotermobarometra musíme nevyhnutne poznať všetky tie procesy exsolúcie a oxidačnej exsolúcie, s prejavmi ktorých sa pri Fe-Ti oxidoch z hornín bežne stretávame. Vďaka poznaniu týchto procesov hodnoty T a fO_2 , ktoré aplikáciou geotermobarometra na prírodné systémy získame, predstavujú spravidla pri použití na vulkanické horniny (rýchlo utuhnuté) skutočne teplotu kryštalizácie Fe-Ti oxidov z taveniny, kým pri aplikácii na plutonické a metamorfované horniny nám okalibrujú procesy, ktoré nastali až počas chladnutia systému, kedy už prebiehali procesy oxidačnej exsolúcie (viď citovanú literatúru).

O zdokonalenie Fe-Ti oxidového geotermobarometra sa zaslúžili Spencer — Lindsley (1981), ktorí vytvorili nový termodynamický model akceptujúci rozpustnosť tuhého magnetitového a ilmenitového roztoku. Vznikla tak novšia verzia Fe-Ti oxidového geotermobarometra. Pozície izopleť ilmenitu a ulvöspinelu v diagrame $T\text{-}fO_2$ sa v novej verzii trochu odlišujú od tých, ktoré udáva Buddington — Lindsley (1964).

Fe-Ti oxidy, ktoré sa vyskytujú v prírodných horninových systémoch, sa odlišujú od systému Fe-Ti-O, ktorý študovali uvedení autori a ktorý je vlastne základom daného geotermobarometra. Prírodné Fe-Ti oxidy sa od syntetických odlišujú obsahom stopových prvkov (Si, Al, V, Cr, Mn, Mg...). V súčasnosti však neexistujú experimentálne údaje, ktoré by objasňovali úlohy stopových prvkov v Fe-Ti oxidoch z hľadiska ich vplyvu na teplotu a fugacitu kyslíka. Napríklad Speidel (1970) uvádza, že prítomnosť MgO v systéme FeO — Fe_2O_3 — TiO_2 spôsobuje posun hodnôt T a fO_2 v koexistujúcich tuhých roztokoch (ilmenitovom a magnetitovom). Nedostatok vhodných experimentálnych údajov o vplyve stopových prvkov na T a fO_2 v prírodných systémoch Fe-Ti oxidov sa nahrádza rôznymi schémami prepočtov chemických analýz uvedených minerálnych fáz, ktorých cieľom je čo najpresnejšie vypočítať hodnoty T a fO_2 .

Buddington — Lindsley (1964) prijali Wo-

nesov prepočet. Carmichael (1967), Anderson (1968), Lindsley — Spencer (1982) vytvorili ďalšie výpočtové algoritmy, pri ktorých sa získaná chemická analýza Fe-Ti oxidu prepočíta na minerálne molekuly, a to v určitej stanovenej postupnosti prvkov, ktorou sa tieto jednotlivé prepočty navzájom odlišujú.

Až model, ktorý vytvoril Stormer Jr. (1983) vychádza z predpokladu jednoduchšej ideálnej substitúcie prvkov (hlavných a stopových) v prírodných Fe-Ti oxidoch. Do úvahy berie vplyv iónovej substitúcie v tuhých roztokoch Fe-Ti oxidov v súlade s modelom rozpustnosti Spencera a Lindsleya (1981).

Lenže aj sám Stormer uvádza, že súčasné poznatky o tejto problematike nám nedovoľujú urobiť závery, ktorá z uvedených schém výpočtu mólového zlomku ulvöspinelu v tuhom roztoku magnetitu a mólového zlomku ilmenitu v tuhom ilmenitovom roztoku je správnejšia. Pritom výsledky získané aplikáciou výpočtových algoritmov od jednotlivých autorov sa dajú vzájomne porovnať (Stormer, Jr., 1983).

Keďže sme prepočty nerobili na počítači, vytvorili sme veľmi jednoduchý prepočet chemického zloženia Fe-Ti oxidov na mólový zlomok ulvöspinelu (X_{Usp}) v magnetitovom tuhom roztoku (Mt_{ss}) a mólový zlomok ilmenitu (X_{Ilm}) v ilmenitovom tuhom roztoku (Ilm_{ss}). Vynesením týchto jednoducho vypočítaných hodnôt X_{Usp} a X_{Ilm} do grafu Spencera a Lindsleya (1981, obr. 4, s. 1197) sme získali údaje T a fO_2 , ktoré úplne postačili na prvú orientáciu v probléme, na zhodnotenie situácie a na určenie ďalšieho postupu práce. Je to veľmi operatívne a efektívne. Ocenili sme to pri štúdiu problematiky Fe-Ti oxidov z granodioritu hodrušsko-štavnického intruzívneho komplexu.

Pri výpočte treba mať na zreteli, že: a) ilmenit predstavuje tuhý roztok (Ilm_{ss}), ktorý tvoria dva koncové členy — ilmenit ($FeTiO_3$) a hematit (Fe_2O_3); b) magnetit tiež predstavuje tuhý roztok magnetitu (Fe_3O_4) a ulvöspinelu (Fe_2TiO_4); c) geotermobarometer môžeme použiť len pre koexistujúce tuhé roztoky magnetitu (Mt_{ss}) a ilmenitu (Ilm_{ss}). Postup pri výpočte:

1. Ilmenit a s ním koexistujúci magnetit zo skúmanej horninovej vzorky obsahujú určité hmotnostné percento oxidu titaničitého (TiO_2). Z neho vyrátame hmotnostné percento titánu pre daný ilmenit a magnetit.

2. Ak obsah Ti v čistom ulvöspinelu je 21,42 % a v čistom ilmenite 31,57 %, mólová

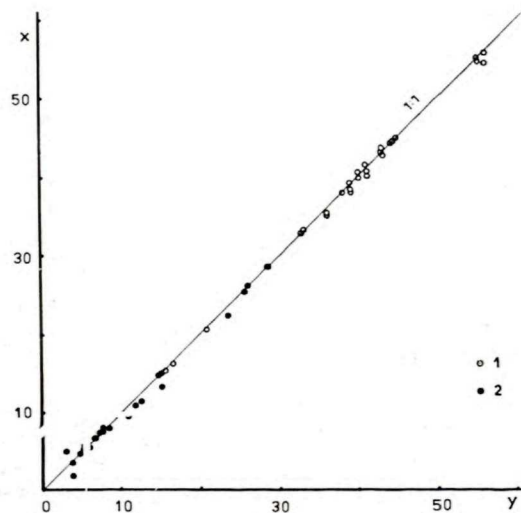
frakcie ulvöspinelu (X_{Usp}) v magnetitovom tuhom roztoku (Mt_{ss}) a mólová frakcia ilmenitu (X_{Ilm}) v ilmenitovom tuhom roztoku (Ilm_{ss}) sa vypočíta jednoduchou trojčlenkou

$$X_{Usp} = \frac{100}{21,42} \cdot \text{obsah Ti [hmot. \%] v } Mt_{ss},$$

$$X_{Ilm} = \frac{100}{31,57} \cdot \text{obsah Ti [hmot. \%] v } Ilm_{ss}.$$

3. Takto vypočítané hodnoty X_{Usp} a X_{Ilm} vynesieme do diagramu T-fO₂ Spencera—Lindsleya [1981], na ktorom odpočítame príslušnú teplotu a fugacitu kyslíka.

Na demonštráciu toho, že hodnoty X_{Usp} , X_{Ilm} , X_{Hem} ($X_{Hem} = 100 - X_{Ilm}$) vypočítané vyššie uvedeným spôsobom sú porovnateľné s údajmi, ktoré uvádza napr. Carmichael [1967], sme zostrojili graf (obr. 1), na ktorom je



Obr. 1. Hodnoty X_{Usp} [1] a X_{Hem} [2] v hmotnostných percentách vypočítaných z chemických analýz Fe-Ti oxidov podľa Carmichaela [1967] a nášho prepočtu. (Os X — prepočet uvedený v práci; os Y — prepočet podľa Carmichaela, 1967); $X_{Hem} = 100 - X_{Ilm}$

Fig. 1. Values of X_{Usp} [1] and X_{Hem} [2] in weight per cents calculated from chemical analyses of Fe-Ti oxides after Carmichael [1967] and using the proposed method (on the ordinate — values after Carmichael's method [1967], on the abscissa — values according to the proposed method. $X_{Hem} = 100 - X_{Ilm}$

veľká podobnosť veličín X_{Usp} a X_{Hem} , ktorých hodnoty sa vypočítali z rovnakých chemických analýz Fe-Ti oxidov (podľa Carmichaela, 1967, s. 40 — 42), ale dvoma rozdielnymi postupmi (vyššie uvedeným a Carmichaelovým).

Záver

Zo vzájomného porovnania hodnôt X_{Usp} , X_{Hem} , ktoré sme vypočítali dvoma rozličnými postupmi, vyplýva, že navrhovaný jednoduchý výpočet môže do určitej miery nahradiť časovo a ekonomicky náročnejšie prepočty Carmichaela [1967], Andersona [1968], Lindsleya — Spencera [1982], Stormera Jr. [1983], a to najmä v prvom štádiu výskumu Fe-Ti oxidov.

Literatúra

- Anderson, A. T. 1968: Oxidation of the la Blache Lake titaniferous magnetite deposit, Quebec. *J. Geol.*, 76, 528 — 547.
- Buddington, A. F. — Lindsley, D. H. 1964: Iron — titanium oxide minerals and synthetic equivalents. *J. Petrology*, 5, 310 — 357.
- Carmichael, I. S. E. 1967: The iron — titanium oxides of silic volcanic rocks and their associated ferromagnesian silicates. *Contr. Mineral. Petrology*, 14, 36 — 64.
- Czamanske, G. K. — Mihálik, P. 1972: Oxidation during magmatic differentiation Finnmarka complex, Oslo area, Norway: Part 1, The opaque oxides. *J. Petrology*, 13, 493 — 509.
- Ghiorso, M. S. — Carmichael, I. S. E. 1981: A FORTRAN IV computer program for evaluating temperatures and oxygen fugacities from the composition of coexisting iron — titanium oxides. *Comput. and Geosci.*, 7, 123 — 129.
- Lindsley, D. H. — Spencer, K. J. 1982: Fe-Ti oxide geothermometry: Reducing analyses of coexisting Ti-magnetite (Mt) and ilmenite (Ilm). *Trans. Amer. geophys. Un.*, 63, 471 p.
- Speidel, D. H. 1970: Effect of magnesium on the iron-titanium oxides. *Amer. J. Sci.*, 268, 341 — 353.
- Spencer, K. J. — Lindsley, D. H. 1981: A solution model for coexisting iron-titanium oxides. *Amer. Mineralogist*, 66, 1189 — 1201.
- Stormer, J. C. Jr. 1983: The effects of recalculation on estimates of temperature and oxygen fugacity from analyses of multicomponent iron-titanium oxides. *Amer. Mineralogist*, 68, 586 — 594.