

流体包裹体 热力学参数 计算软件及算例

刘 斌 朱思林 沈 昆 著



地质出版社

SOFTWARES AND EXAMPLES FOR CALCULATING THE THERMODYNAMIC PARAMETERS OF FLUID INCLUSIONS

Liu Bin Zhu Silin Shen Kun

Geological Publishing House
Beijing , China

ISBN 7-116-03054-9



9 787116 030541 >

ISBN 7-116-03054-9

P · 2111 定价: 35.00 元



国家自然科学基金项目(49273171,49672161)研究成果

流体包裹体热力学参数 计算软件及算例

刘 斌 刘 金 著

地 质 出 版 社

· 北 京 ·

内 容 简 介

本书为《流体包裹体热力学》专著的续篇。作者根据共生矿物结晶时捕获流体介质以及不混溶流体被捕获成不同类型包裹体组合计算热力学参数原理,利用目前通俗流行而且使用方便的 Quick BASIC 语言,编制成流体包裹体热力学参数计算软件。

书中列出了自然界 12 种主要体系流体包裹体热力学参数计算主程序;35 种共生矿物组合和 3 组矿物对中硫、氧同位素分馏热力学参数计算子程序及链接程序;自然界两种沸腾流体、6 种不同成分不混溶液体的包裹体组合判别和热力学参数计算程序;自然界 24 种流体成分包裹体 O_2 、 CO_2 、 H_2O 逸度计算程序。当输入包裹体显微测温 and 矿物成分或同位素分馏数据后,不但可以计算流体本身的各种参数,如含盐度、密度、体积、均一压力等,而且可以计算包裹体被捕获时的热力学参数,如形成温度、压力、主要成分含量等。对于包裹体群,可以判别沸腾流体或不同成分不混溶液体包裹体组合类型,并且计算共存相态的热力学参数;此外,还可以直接计算流体被捕获时的 O_2 、 CO_2 、 H_2O 逸度值。每一个程序都列有计算实例。它比当前国际流行的 Flncon 包裹体计算软件的应用范围更为广泛。

本书的读者对象主要为地球科学各专业的研究人员,对材料科学、冶金科学、环境科学工作者也有一定参考价值。

图书在版编目(CIP)数据

流体包裹体热力学参数计算软件及算例/刘斌等著.-北京:地质出版社,2000.6
ISBN 7-116-03054-9

I. 流… II. 刘… III. 液包体-热力学-参数-计算-应用软件 N.P572

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2000)第 14904 号

地质出版社出版发行

(100083 北京海淀区学院路 29 号)

责任编辑:肖 叶 施 名 郁秀荣

责任校对:黄苏晔

*

北京印刷学院实习工厂印刷 新华书店总店科技发行所经销

开本:787×1092¹/₁₆ 印张:16.5 字数:402000

2000 年 6 月北京第一版·2000 年 6 月北京第一次印刷

印数:1—700 册 定价:35.00 元

ISBN 7-116-03054-9
P·2111

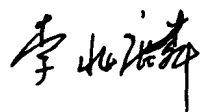
(凡购买地质出版社的图书,如有缺页、倒页、脱页者,本社发行处负责调换)

序

我国研究矿物中流体包裹体的历史已有 30 多年。这方面研究有力地推动了我国地质事业的发展。但长久以来,作为其中新兴学科分支的流体包裹体热力学研究比较薄弱,从而影响到这一学科的整体发展。作者多年来从事流体包裹体热力学的研究,并在不久前出版了《流体包裹体热力学》专著。作为其姐妹篇的《流体包裹体热力学参数计算软件及算例》的出版将有力地促进我国流体包裹体研究工作的发展,对成岩成矿理论研究和在地质各领域中的实际应用均有重大意义。该专著内容新颖独特,电脑软件别具一格,研究实例较多,适合于从事流体包裹体专业人员及其他地质人员使用,对材料、冶金、环境等专业工作者亦有参考价值。

该书作者富有创新精神。书中突出介绍了由作者创建的“利用流体包裹体及其主矿物共生平衡热力学方程计算形成温度和压力”以及“利用不混溶流体包裹体作为地质温度计和压力计”的两种新方法,并以此编制了计算流体包裹体热力学参数的电脑软件,填补了我国这一研究领域的空白,解决了我国该领域研究的急需。该软件使用十分方便,精确度较高,比国外近来流行的 Flincor 软件的应用范围要广; Flincor 软件不能计算的形成温度、压力、氧逸度以及其他流体组分逸度,该软件均能准确地计算出来,从而把我国流体包裹体研究工作提高到了一个新的水平。

流体包裹体热力学是地球科学中一个有丰富内涵和广阔前景的崭新研究领域。该书的出版对我国流体包裹体的研究具有重要意义。它将在探讨地质基础理论和指导生产实践中发挥更大的作用。希望作者能在这一领域中取得更多新的研究成果,为我国及世界作出更大贡献。



中山大学地质系教授,博士生导师

1999 年 8 月 18 日

前 言

天然岩石、矿物及人工合成材料形成时的温度、压力及介质性质等热力学条件是研究人员迫切需要测定和了解的重要数据。它们对阐明地质体成因、探索地质作用规律、指导矿产寻找和能源开发、了解工程地基稳定性、检验人工材料质量及改进其工艺流程等均有较大价值。许多事实表明,岩石和人工合成材料在形成过程中,或多或少均有流体的参与。它们之中的显微孔穴、裂隙等内部缺陷被周围流体介质所充填,其中捕获的微小包裹体是不同形成阶段的原始流体“样品”,它们为研究热力学条件提供了难得而可靠的宝贵信息。

利用现代流体热力学原理,研究这种微小包裹体,从而反过来计算和了解它们形成时的物理化学条件,是一门新兴分支学科——流体包裹体热力学的研究内容。流体包裹体研究历史表明,它的迅速发展与现代流体热力学平衡原理的惊人成就休戚相关。不同流体体系实验相图的获得,流体 p - T - V - x 关系状态方程的应用,不但成功地解释了过去不能解释的许多地质现象,而且为地质学以及人工合成材料科学从定性描述到定量研究,提供了又一种新的计算方法。特别是近年来,以 P. E. Brown 教授(1989、1992)为代表所设计的 Flnclor 和 McFlnclor 计算机软件,能高效、精确地计算自然界主要成分体系中流体包裹体热力学参数,将流体包裹体热力学研究和应用提高到了又一个新的水平。

虽然流体包裹体热力学研究取得了明显的进展,但是,目前尚存在迫切需要解决的问题。首先,近年来国外流行的 Flnclor 计算机软件,只能计算流体包裹体本身的各种参数,而对于包裹体捕获时的热力学参数,如形成温度、压力等,除少数特殊情况外,一般计算不出来。而包裹体捕获时的温度、压力是地质作用研究的重要参数。为了获得捕获时的温度,必须进行均一温度的“压力校正”;然而,在“压力校正”时所必须知道的形成压力往往不易获得。另外,随着人们对于流体在地质作用过程中各方面作用的认识的加深,将在更高层次上深入研究流体在各个领域中的作用,重新认识流体在各种地质作用中的机理与过程。这是一个在 20 世纪 90 年代优先发展的重大开拓性前沿领域,在进入 21 世纪后,也必将掀起流体地质研究的热潮。各领域研究者必将把焦点注视到地质作用所保存下来的惟一古流体样品——流体包裹体上。由于我国没有这方面的计算机软件,不少人仍在利用原始图表求得流体包裹体的各种参数,不但费时麻烦,而且精确度较差,也难以普及推广到非专业包裹体研究人员中去。利用这种手工操作,不可能处理当今高速发展的大量测试数据,更难进行高效的对比研究。因此,编制适合我国国情的计算机软件,不但十分需要,而且十分迫切。

作者突破流体包裹体单个体系,把研究范围扩大到与其相关的其他体系,在统一的热力学场下进行研究,得到两种计算方法:根据矿物结晶过程捕获周围流体介质的情况,提出利用流体包裹体及其主矿物共生平衡热力学方程计算形成温度、压力的方法;根据流体包裹体被捕获时流体介质为非均匀的不混溶状态,提出将不混溶流体包裹体作为地质温度计和压力计的方法。根据这两种计算方法,可以直接计算出捕获时的温度和压力,不需要

进行较为麻烦且不精确的均一温度的“压力校正”。以这两种方法为基础，作者开发了流体包裹体热力学参数 Quick BASIC 计算机软件。与目前国外流行的 Flincor 计算机软件相比，本软件不但具有 Flincor 软件的所有功能，而且比其更进一步，只要根据显微测温数据，就可以计算出形成温度、压力、氧逸度、 CO_2 逸度、 H_2O 逸度、主要流体成分含量等参数。根据我国科技人员计算机水平，采用 Quick BASIC 语言编程，不但吸取了 FORTRAN、PASCAL、C 及 Ada 等语言的优点，而且克服了原来普通 BASIC 软件结构化程度差和运算速度慢的缺点。因此，它是一种功能强、易学习的程序设计语言。它把解释型的方便性和编译的执行速度有机地结合在一起，具有人机对话方式操作的优点。现今，个人电脑中普遍装载有该软件执行系统，使用十分便利。该软件操作简单，即使不是从事流体包裹体研究的专业人员也能方便地使用。

总结上述研究成果，我们撰写了这本专著。本书分为五章：第一章为自然界流体包裹体 12 种主要体系热力学参数计算主程序和子程序的链接程序；第二章为自然界 35 种矿物共生组合以及 3 组矿物对中硫、氧同位素分馏热力学参数计算子程序；使用这些程序，将流体包裹体显微测温数据——均一温度、冷冻温度、子矿物熔化温度、气相或液相充填度代入，同时将共生矿物化学成分（或同位素）含量（质量分数）代入，不但可以计算包裹体流体密度、含盐度、摩尔体积等参数，而且可以获得形成时的温度和压力数据；第三章为自然界两种主要沸腾流体包裹体组合判别和热力学参数计算程序；第四章为自然界 6 种主要类型不同成分不混溶流体包裹体组合判别和热力学参数计算程序；使用这些程序，将一群流体包裹体显微测温数据代入，不但可以判别这一群流体包裹体是否为沸腾流体或不同成分不混溶流体包裹体组合，而且可以计算两种共存流体相态的热力学参数；第五章为自然界 24 种主要流体成分包裹体的 O_2 、 CO_2 、 H_2O 逸度计算程序；根据这些程序，将包裹体流体成分含量（摩尔分数）和温度、压力数值代入，可以计算包裹体形成时的 O_2 逸度、 CO_2 逸度和 H_2O 逸度。

本书是《流体包裹体热力学》专著（地质出版社 1999 年 2 月出版，主要内容是基础理论和方法）的续篇。本书的出版发行可以填补国内这一领域的空白。书中的计算机软件和应用实例，必将充实国内外同类研究的内容。书中如有错误或不妥之处，请来信给予指正，作者将十分感谢！

本书涉及的计算机软件都有相关的磁盘拷贝，如有需要者，请与第一作者联系。

刘 斌

（同济大学地下建筑与工程系，上海市杨浦区四平路 1239 号，邮编：200092）

朱 思 林

（国家地震局地震研究所，武汉市武昌小洪山，邮编：430071）

沈 昆

（山东地质科学实验研究院，济南市历山路 52 号，邮编：250013）

2000 年元月 10 日

目 录

序

前 言

第一章 自然界流体包裹体 12 种主要体系热力学参数计算主程序	1
M ₀₁ :H ₂ O 体系	1
M ₀₂ :CO ₂ 体系	3
M ₀₃ :CH ₄ 体系	5
M ₀₄ :NaCl-H ₂ O(低盐度)体系	7
M ₀₅ :NaCl-H ₂ O(高盐度)体系	9
M ₀₆ :KCl-H ₂ O 体系	11
M ₀₇ :CaCl ₂ -H ₂ O 体系	12
M ₀₈ :CO ₂ -H ₂ O 体系	14
M ₀₉ :CH ₄ -H ₂ O 体系	19
M ₁₀ :H ₂ S-H ₂ O 体系	22
M ₁₁ :CH ₄ -CO ₂ -H ₂ O 体系	25
M ₁₂ :CO ₂ -H ₂ O-NaCl 体系	30
附录:12 种流体包裹体体系计算主程序和链接程序	35
第二章 自然界 35 种矿物共生组合以及 3 组矿物对中硫、氧同位素分馏热力学参数计算子程序	85
S ₀₁ :橄榄石(Ol)	85
S ₀₂ :辉石(Prx)	86
S ₀₃ :方解石(Cc)	87
S ₀₄ :石榴子石-黑云母(Gr-Bi)	88
S ₀₅ :石榴子石-橄榄石(Gr-Ol)	89
S ₀₆ :方解石-白云石(Cc-Dol)	90
S ₀₇ :斜方辉石-黑云母(Opx-Bi)	91
S ₀₈ :黑云母-白云母(Bi-Mus)	92
S ₀₉ :斜长石-石榴子石-石英-Al ₂ SiO ₅ (Pl-Gr-Q-Al ₂ SiO ₅)	93
S ₁₀ :斜方辉石-单斜辉石(Opx-Cpx)	94
S ₁₁ :单斜辉石-石榴子石(1)[玄武质岩石](Cpx-Gr.1)	95
S ₁₂ :单斜辉石-石榴子石(2)[非玄武质岩石](Cpx-Gr.2)	96
S ₁₃ :透长石-高温钠长石(Sand-Pl)	97
S ₁₄ :低温碱性长石-低温斜长石(Af-Pl)	98
S ₁₅ :斜长石斑晶-基质(Pl-M)	99
S ₁₆ :白云母-透长石-石英-Al ₂ SiO ₅ (Mus-Sand-Q-Al ₂ SiO ₅)	100

S ₁₇ : 黑云母-透长石-石英-斜方辉石(Bi-Sand-Q-Opx)	101
S ₁₈ : 橄榄石-石英-闪石(Ol-Q-Am)	101
S ₁₉ : 方解石-石英-硅灰石或方解石-石英-斜长石-石榴子石 (Cc-Q-Wol 或 Cc-Q-Pl-Gr)	102
S ₂₀ : 石英-磁铁矿-橄榄石或石英-磁铁矿-斜方辉石 (Q-Mt-Ol 或 Q-Mt-Opx)	104
S ₂₁ : 磁铁矿-橄榄石-斜方辉石(Mt-Ol-Opx)	105
S ₂₂ : 白云母-斜长石(Mus-Pl)	106
S ₂₃ : 闪锌矿-方铅矿(Sph-Gal)	107
S ₂₄ : 黄铁矿-磁黄铁矿(Py-Pyh)	108
S ₂₅ : 角闪石-斜长石(Am-Pl)	108
S ₂₆ : 角闪石-单斜辉石(1)[非榴辉岩类](Am-Cpx. 1)	109
S ₂₇ : 角闪石-单斜辉石(2)[蓝闪榴辉岩类](Am-Cpx. 2)	110
S ₂₈ : 角闪石-斜方辉石(Am-Opx)	112
S ₂₉ : 白云母-绿泥石(Mus-Ch)	113
S ₃₀ : 绿泥石-碱性角闪石[Ch-Am(Na)]	114
S ₃₁ : 蓝闪石(Gl)	115
S ₃₂ : 多硅白云母(Phg)	116
S ₃₃ : 斜长石-高岭石-石英(Pl-Kao-Q)	117
S ₃₄ : 钾长石-高岭石-石英(Or-Kao-Q)	117
S ₃₅ : 石榴子石-堇青石(Gr-Cord)	118
S ₃₆ : 矿物对硫同位素(S-Isotope)	119
S ₃₇ : 矿物-水氧同位素(O-Isotope)	120
S ₃₈ : 矿物对氧同位素(O-Isotope)	121
附录: 35 种矿物共生组合以及 3 组矿物对中硫、氧同位素分馏热力学参数计算子程序	121
第三章 自然界两种主要沸腾流体包裹体组合判别和热力学参数计算程序	147
B ₀₁ : 水-蒸汽沸腾流体	147
B ₀₂ : 盐水-蒸汽沸腾流体	149
附录: 两种沸腾流体包裹体组合判别和计算程序	151
第四章 自然界 6 种主要类型的不同成分不混溶流体包裹体组合判别和热力学参数 计算程序	168
N ₀₁ : CO ₂ -H ₂ O(A 或 B 组合类型)	168
N ₀₂ : CO ₂ -NaCl 低盐度水溶液(A 或 B 组合类型)	170
N ₀₃ : CO ₂ -NaCl 不同盐度水溶液(C 组合类型)	174
N ₀₄ : CH ₄ -H ₂ O(A 或 B 组合类型)	176
N ₀₅ : CH ₄ -NaCl 低盐度水溶液(A 或 B 组合类型)	178
N ₀₆ : CH ₄ -NaCl 不同盐度水溶液(C 组合类型)	182
附录: 6 种不同成分不混溶包裹体组合判别和计算程序	184

第五章 自然界 24 种主要流体成分包裹体的 O₂、CO₂ 和 H₂O 逸度计算程序 231

 FOCH;O₂ 逸度、CO₂ 逸度和 H₂O 逸度 231

 附录:流体包裹体的 O₂、CO₂、H₂O 逸度计算程序(FOCH) 233

主要参考文献..... 248

英文摘要..... 250

Contents

Preface

Introduction

1 Main Computer Programs for Calculating the Thermodynamic Parameters of Fluid

Inclusions Concerning Twelve Common Fluid Systems in the Nature	1
M ₀₁ :H ₂ O system	1
M ₀₂ :CO ₂ system	3
M ₀₃ :CH ₄ system	5
M ₀₄ :NaCl-H ₂ O (low salinity) system	7
M ₀₅ :NaCl-H ₂ O (high salinity) system	9
M ₀₆ :KCl-H ₂ O system	11
M ₀₇ :CaCl ₂ -H ₂ O system	12
M ₀₈ :CO ₂ -H ₂ O system	14
M ₀₉ :CH ₄ -H ₂ O system	19
M ₁₀ :H ₂ S-H ₂ O system	22
M ₁₁ :CH ₄ -CO ₂ -H ₂ O system	25
M ₁₂ :CO ₂ -H ₂ O-NaCl system	30
Appendix:Main computer programs and linker for fluid inclusions concerning twelve fluid systems	35

2 Computer Subprograms for Calculating Thermodynamic Parameters of Fluid

Inclusions with the Data of Thirty-five Paragenetic Mineral Pairs and the data of Sulfur-and Oxygen-isotopic Fractionation Concerning Three Series of Mineral Pairs in the Nature	85
S ₀₁ :Olivine(Ol)	85
S ₀₂ :Pyroxene(Prx)	86
S ₀₃ :Calcite(Cc)	87
S ₀₄ :Garnet-Biotite(Gr-Bi)	88
S ₀₅ :Garnet-Olivine(Gr-Ol)	89
S ₀₆ :Calcite-Dolomite(Cc-Dol)	90
S ₀₇ :Orthopyroxene-Biotite(Opx-Bi)	91
S ₀₈ :Biotite-Muscovite(Bi-Mus)	92
S ₀₉ :Plagioclase-Garnet-Quartz-Al ₂ SiO ₅ (Pl-Gr-Q-Al ₂ SiO ₅)	93
S ₁₀ :Orthopyroxene-Clinopyroxene(Opx-Cpx)	94
S ₁₁ :Clinopyroxene-Garnet(1)[in basaltic rocks](Cpx-Gr. 1)	95
S ₁₂ :Clinopyroxene-Garnet(1)[in non-basaltic rocks](Cpx-Gr. 2)	96

S ₁₃ : Sanidine-high albite (Sand-Pl)	97
S ₁₄ : Low alkaline feldspar-Low plagioclase (Af-Pl)	98
S ₁₅ : Plagioclase phenocryst-Groundmass (Pl-M)	99
S ₁₆ : Muscovite-Sanidine-Quartz-Al ₂ SiO ₅ (Mus-Sand-Q-Al ₂ SiO ₅)	100
S ₁₇ : Biotite-Sanidine-Quartz-Orthopyroxene (Mus-Sand-Q-Opx)	101
S ₁₈ : Olivine-Quartz-Amphibole (Ol-Q-Am)	101
S ₁₉ : Calcite-Quartz-Wollastonite or Calcite-Quartz-Plagioclase-Garnet (Cc-Q-Wol or Cc-Q-Pl-Gr)	102
S ₂₀ : Quartz-Magnetite-Olivine or Quartz-Magnetite-Orthopyroxene (Q-Mt-Ol or Q-Mt-Opx)	104
S ₂₁ : Magnetite-Olivine-Orthopyroxene (Mt-Ol-Opx)	105
S ₂₂ : Muscovite-Plagioclase (Mus-Pl)	106
S ₂₃ : Sphalerite-Galena (Sph-Gal)	107
S ₂₄ : Pyrite-Pyrrhotite (Py-Pyh)	108
S ₂₅ : Amphibole-Plagioclase (Am-Pl)	108
S ₂₆ : Amphibole-Clinopyroxene (1) [in non-eclogitic rocks] (Am-Cpx. 1)	109
S ₂₇ : Amphibole-Clinopyroxene (2) [in glaucophane-eclogites] (Am-Cpx. 2)	110
S ₂₈ : Amphibole-Orthopyroxene (Am-Opx)	112
S ₂₉ : Muscovite-Chlorite (Mus-Ch)	113
S ₃₀ : Chlorite-Alkaline amphibole [Ch-Am (Na)]	114
S ₃₁ : Glaucophane (Gl)	115
S ₃₂ : Phengite (Phg)	116
S ₃₃ : Plagioclase-Kaolinite-Quartz (Pl-Kao-Q)	117
S ₃₄ : Orthoclase-Kaolinite-Quartz (Or-Kao-Q)	117
S ₃₅ : Garnet-Cordierite (Gr-Cord)	118
S ₃₆ : Sulphur isotopes of mineral pairs (S-Isotope)	119
S ₃₇ : Oxygen isotopes of mineral-water pairs (O-Isotope)	120
S ₃₈ : Oxygen isotopes of mineral pairs (O-Isotope)	121
Appendix 2: Computer subprograms for thirty-five paragenetic mineral pairs, sulfur- and oxygen-isotopic fractionation concerning three series of mineral pairs	121
3 Computer Programs for Determining Two Major Types of Boiling Fluid Inclusion Populations with Different Compositions in the Nature and Calculating Its Thermodynamic Parameters	147
B ₀₁ : Water-steam boiling fluids	147
B ₀₂ : Brine-steam boiling fluids	149
Appendix 3: Computer programs for determining and calculating the two types of boiling fluid inclusion populations	151
4 Computer Programs for Determining the Six Major Types of Immiscible Fluid	

Inclusion Populations with Different Compositions in the Nature and Calculating Its Thermodynamic Parameters	168
N_{01} :CO ₂ -H ₂ O fluids (assemblages of types A and B)	168
N_{02} :CO ₂ -NaCl solutions with low salinity (assemblages of types A and B)	170
N_{03} :CO ₂ -NaCl solutions with different salinity (assemblage of type C)	174
N_{04} :CH ₄ -H ₂ O solutions (assemblages of types A and B)	176
N_{01} :CH ₄ -NaCl solutions with low salinity (assemblages of types A and B)	178
N_{01} :CH ₄ -NaCl solutions with different salinity (assemblage of type C)	182
Appendix 4:Computer programs for determining and calculating the six types of immiscible fluid inclusion populations	184
5 Computer Programs for Calculating Fugacities of O₂,CO₂ and H₂O (f_{O_2}, f_{CO_2} and f_{H_2O}) of Fluid Inclusions Containing (One or More of)	
24 Major Components in the Nature	231
FOCH:O ₂ fugacity,CO ₂ fugacity and H ₂ O fugacity	231
Appendix 5:Computer programs for calculating fugacities of O ₂ ,CO ₂ and H ₂ O of fluid inclusions (FOCH)	233
References	248
Abstract in English	250

第一章 自然界流体包裹体12种主要体系 热力学参数计算主程序

自然界的流体虽然复杂,但是大多数岩石中的流体组成属于 C-O-H-S-NaCl 类体系。这类体系中位于超临界区的各种流体物种可能结合的形式为 H_2O 、 CO_2 、 CH_4 、 H_2S 、 NaCl 类和它们的组合类型。这些流体常常被主矿物捕获而形成流体包裹体。若它们没有变形、破裂和流体泄漏的话,就可以根据其成分类型、显微测温数值求得含盐度、流体密度、流体摩尔体积及均一压力等热力学参数。对于等容体系的包裹体,可以应用不同性质的流体状态方程来描述 p - T - V 相互关系。将它与矿物共生平衡所导出的温压计方程式或范特霍夫(Van't Hoff)等温方程式联立求解,就可以求出它们的形成温度和压力。

本章列出自然界流体包裹体的12种主要体系的热力学参数计算主程序,将包裹体显微测温数据,即均一温度、冷冻温度、子矿物熔化温度、气相或液相体积充填度代入,可以计算出含盐度、流体密度、摩尔体积、均一压力及主要成分含量等热力学参数。利用链结程序连接主矿物子程序(38个),可以计算出主矿物捕获流体包裹体时的形成温度和压力。

$\text{M}_{01}:\text{H}_2\text{O}$ 体系

一、程序功能

本程序用于计算纯水包裹体的流体密度、体积和均一压力,以及超临界单相区(液相或气相)中压力和温度关系的等容式。将主程序与矿物子程序联接,求解联立方程,可获得它们的两个解值,即主矿物捕获流体包裹体时的形成温度和压力。

二、输入数值

(1) 均一温度值 $t_h/^\circ\text{C}$, 数值范围为 $0\sim 374.14$; 如果温度值小于 0°C 或大于 374.14°C (水的临界温度), 则包裹体不是纯水, 不能应用此程序;

(2) 均一方式——均一成液相(l)或气相(g)。

三、输出参数

(1) 流体密度 $D_1/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$ ^①;

(2) 流体摩尔体积 $V_1/(\text{cm}^3\cdot\text{mol}^{-1})$;

(3) 均一压力 p_h/bar ;

(4) 等容式的 p - T 关系(范围:温度 $0\sim 1300^\circ\text{C}$, 压力 $0\sim <10000\text{ bar}$);

① 流体密度的物理量代号应为 ρ_1 , 因程序中全用英文字母编制考虑到与程序中使用的代号一致, 这里也用英文字母来表示, 其它非英文物理量代号也是如此。程序中所用的物理量, 都是英文正体, 平排。本书中有两个或两个以上字母(包括数字)时, 如 D_1 、 V_1 、 p_h 在程序中为 DI、VI、Ph; 不仅物理量如此, 物理量的单位, 程序输出的结果中也为英文字母大写正体平排, 如 g/cm^3 为 G/CM³, mol 为 MOLE, $^\circ\text{C}$ 为 C, 等等; 另外, 有些程序中物理量代号字母可能与标准的物理量代号字母有差别, 如 M_{03} 程序中, t_{ice} 与 t_{hyd} 均为 TM, 等等。请读者注意。

(5) 形成温度 $t/^{\circ}\text{C}$, 形成压力 p/bar 。

四、数学模型

(1) 流体密度 D_1 的计算, 分两种情况(刘斌、沈昆, 1999):

a. 均一成气相时

$$D_1 = [A + B \cdot t_h + C \cdot t_h^2 + D \cdot t_h^3] \times 10^{-3} \text{ ①}$$

式中: D_1 为流体密度 (g/cm^3); t_h 为均一温度 ($^{\circ}\text{C}$); A, B, C, D 为无量纲常数, 不同均一温度范围应用不同的值。

当 t_h 为 $0 \sim 50^{\circ}\text{C}$ 时, 则

$$A = 4.598107 \times 10^{-3}; B = 4.47003 \times 10^{-4}; C = 4.375655 \times 10^{-7}; D = 4.400717 \times 10^{-7}。$$

当 t_h 为 $50 \sim 150^{\circ}\text{C}$ 时, 则

$$A = -0.4630011; B = 2.066747 \times 10^{-2}; C = -2.950253 \times 10^{-4}; D = 1.939714 \times 10^{-6}。$$

当 t_h 为 $150 \sim 250^{\circ}\text{C}$ 时, 则

$$A = -26.9987; B = 0.4790014; C = -2.961614 \times 10^{-3}; D = 7.188054 \times 10^{-6}。$$

当 t_h 为 $250 \sim 350^{\circ}\text{C}$ 时, 则

$$A = -487.3217; B = 6.243959; C = -2.657487 \times 10^{-2}; D = 3.893837 \times 10^{-5}。$$

当 t_h 为 $350 \sim 374^{\circ}\text{C}$ 时, 则

$$A = 4415.683; B = -18.32704; C = -1.355778 \times 10^{-2}; D = 8.765061 \times 10^{-5}。$$

当 t_h 为 374.14°C 时, 不用计算, 直接得流体密度 $D_1 = 0.316957 \text{ g}/\text{cm}^3$ 。

b. 均一成液相时

$$D_1 = A + B \cdot t_h + C \cdot t_h^2 + D \cdot t_h^3$$

式中: D_1 为流体密度 (g/cm^3); t_h 为均一温度 ($^{\circ}\text{C}$); A, B, C, D 为无量纲常数, 不同均一温度范围应用不同的值。

当 t_h 为 $0 \sim 310^{\circ}\text{C}$ 时, 则

$$A = 0.999745; B = -1.29471 \times 10^{-4}; C = -2.72371 \times 10^{-6}; D = 0。$$

当 t_h 为 $310 \sim 374^{\circ}\text{C}$ 时, 则

$$A = -2.980059; B = 1.511172 \times 10^{-2}; C = 1.583009 \times 10^{-5}; D = -8.564481 \times 10^{-8}。$$

当 t_h 为 374.14°C 时, 不用计算, 直接得流体密度 $D_1 = 0.316957 \text{ g}/\text{cm}^3$ 。

(2) 流体摩尔体积 V_1 的计算, 不管均一成气相或液相, 均应用下面公式:

$$V_1 = 18.01534/D_1$$

式中: V_1 为流体摩尔体积 (cm^3/mol); D_1 为流体密度 (g/cm^3)。

(3) 均一压力 p_h 的计算(Walas, 1985):

$$p_h = \{\exp[A_1 + A_2/(T + A_3) + A_4 \cdot T + A_5 \cdot \ln T + A_6 \cdot T^6]\} \times 10^{-5}$$

式中: $t = t_h + 273.15$, t_h 为均一温度 ($^{\circ}\text{C}$); p_h 为均一压力 (bar);

$$A_1 = -0.313974 \times 10^2; A_2 = -0.2046366 \times 10^4; A_3 = -0.7540224 \times 10^2;$$

① 数学模型中的物理方程, 按标准要求应写做数值方程; 但这里多为经验公式, 情况复杂并且单位混乱, 所以请读者把它当作数学方程来处理。至于物理量的代入计算, 请在代入方程前, 按公式下面的公式符号说明, 做适当的换算, 使其单位与文字说明之中一致, 然后将其数值代入方程计算。另外需要说明的是, 经验公式的物理量单位不一定能满足国际单位制的要求[如压力单位在许多已发表文献中均为 bar, 为方便起见, 本书中也采用巴(bar), $1 \text{ bar} = 100 \text{ kPa}$], 这一点也请读者特别注意。

$$A_4 = -0.1205428 \times 10^{-1}; A_5 = 0.9165751 \times 10^{+1}; A_6 = 0.4879195 \times 10^{-17}.$$

(4) 等容式(p - T 关系式)的计算(Duan Zhenhao, 1992):

$$p = Z \cdot R \cdot T / V_1$$

式中: p 为压力(bar); T 为温度(K); $R = 0.08314467 \text{ bar} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$; V_1 为摩尔体积(dm^3/mol); Z 为压缩因子, 其公式如下:

$$Z = 1 + \frac{B}{V_1} + \frac{C}{V_1^2} + \frac{D}{V_1^3} + \frac{E}{V_1^4} + \frac{F}{V_1^5} \cdot \left(\beta + \frac{\gamma}{V_1^2} \right) \cdot \exp\left(-\frac{\gamma}{V_1^2} \right)$$

其中, $B = a_1 + \frac{a_2}{T_1^2} + \frac{a_3}{T_1^3}$; $C = a_4 + \frac{a_5}{T_1^2} + \frac{a_6}{T_1^3}$; $D = a_7 + \frac{a_8}{T_1^2} + \frac{a_9}{T_1^3}$; $E = a_{10} + \frac{a_{11}}{T_1^2} + \frac{a_{12}}{T_1^3}$;

$$F = \frac{\alpha}{T_1^3}; T_1 = \frac{T}{647.25}; V_1 = \frac{V_1}{0.243299369};$$

$$a_1 = 8.6444922 \times 10^{-2}; a_2 = -3.96918955 \times 10^{-1}; a_3 = -5.73334886 \times 10^{-2};$$

$$a_4 = -2.93893 \times 10^{-4}; a_5 = -4.1577551 \times 10^{-3}; a_6 = 1.99496791 \times 10^{-2};$$

$$a_7 = 1.18901426 \times 10^{-4}; a_8 = 1.55212063 \times 10^{-4}; a_9 = -1.06855859 \times 10^{-4};$$

$$a_{10} = -4.93197687 \times 10^{-6}; a_{11} = -2.73739155 \times 10^{-6}; a_{12} = 2.65571238 \times 10^{-6};$$

$$\alpha = 8.96079018 \times 10^{-3}; \beta = 4.02; \gamma = 2.57 \times 10^{-2}.$$

五、程序

见第一章附录中 M_{01} 程序(第35页)。

六、实例

上海某北西向断裂带中构造岩的显微次生裂隙中捕获有不少水成分包裹体。

(1) 输入数据:

a. 均一温度值 $t_h/^\circ\text{C} = 200$; b. 均一成液相(l); c. 均一成气相(g)。

(2) 计算结果:

a. 均一压力 $p_h = 15.66916 \text{ bar}$;

b. 均一成液相(l)时, $D_1 = 0.8649024 \text{ g/cm}^3$, $V_1 = 20.82933 \text{ cm}^3/\text{mol}$;

c. 均一成气相(g)时, $D_1 = 7.841457 \times 10^{-3} \text{ g/cm}^3$, $V_1 = 2297.448 \text{ cm}^3/\text{mol}$;

d. 均一成液相(l)和气相(g)时等容式的温度-压力关系:

$t/^\circ\text{C}$	p/bar		$t/^\circ\text{C}$	p/bar		$t/^\circ\text{C}$	p/bar	
	l	g		l	g		l	g
250	885.6538	18.20647	750	9609.969	36.70176	1250	17674.8	55.10542
350	2593.033	21.90032	850	11256.26	40.38712	1350	19325.12	58.79134
450	4645.475	25.64211	950	12865.30	44.0673	1450	21020.33	62.4835
550	5981.45	29.28436	1050	14459.52	47.74543	1550	22771.07	66.18337
650	7898.484	33.00734	1150	16057.46	51.42408	1650	24586.93	69.89229

$M_{02}:\text{CO}_2$ 体系

一、程序功能

本程序用于计算 CO_2 包裹体的流体密度, 摩尔体积和均一压力, 以及超临界单相区(液

相或气相)中压力和温度关系的等容式。将主程序与矿物子程序连接,求解联立方程,可获得它们的两个解值,即主矿物捕获流体包裹体时的形成温度和压力。

二、输入数值

(1) 均一温度值 $t_h/^\circ\text{C}$, 数值范围为 $-56\sim 31.15$; 如果温度值超过此范围, 包裹体不是纯 CO_2 , 不能应用此程序;

(2) 均一方式——均一成液相(l)或气相(g)。

三、输出参数

(1) 流体密度 $D_1/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$;

(2) 流体体积 $V_1/(\text{cm}^3\cdot\text{mol}^{-1})$;

(3) 均一压力 p_h/bar ;

(4) 等容式的 p - T 关系(范围: 温度 $0\sim 1300^\circ\text{C}$, 压力 $0\sim <10000\text{ bar}$);

(5) 形成温度 $t/^\circ\text{C}$, 形成压力 p/bar 。

四、数学模型

(1) 流体密度 D_1 的计算, 分两种情况(Ely 等, 1989):

a. 均一成气相时

$$D_1 = 44.0098 \cdot p_h / [83.145 \cdot Z \cdot (t_h + 273.15)]$$

式中: D_1 为流体密度(g/cm^3); t_h 为均一温度($^\circ\text{C}$); p_h 为均一压力(bar); Z 为压缩因子, 其公式为:

$$Z = 1 - [2.989233892 \cdot p_h / (t_h + 273.15)] \cdot \{1 + r^{0.35} \cdot \{C_1 + T_r \cdot [C_2 + T_r \cdot (C_3 + C_4 \cdot T_r)]\}\}$$

式中: $T_r = (t_h + 273.15)/304.127$; $r = 1 - T_r$; $C_1 = 20.731591325$; $C_2 = -68.357085154$; $C_3 = 76.954233883$; $C_4 = -30.134090188$; 其他参数相同于 D_1 式。

b. 均一成液相时

$$D_1 = \left(\frac{b_1 \cdot r^{0.35} + b_2 \cdot r^2 + b_3 \cdot r^3}{1 + b_4 \cdot r^{0.65}} + 1 \right) \times 0.466504$$

式中: $r = 1 - (t_h + 273.15)/304.127$ (t_h 为均一温度, $^\circ\text{C}$); $b_1 = 2.0012153952$; $b_2 = -1.6486135031$; $b_3 = 2.2667362275$; $b_4 = -0.46533970867$ (Ely 等, 1989)。

(2) 流体摩尔体积 V_1 的计算, 不管均一成气相或液相, 均应用下面公式:

$$V_1 = 44.0098/D_1$$

式中: V_1 为流体摩尔体积(cm^3/mol); D_1 为流体密度(g/cm^3)。

(3) 均一压力 p_h 的计算(Ely 等, 1989):

$$p_h = \exp[a_1 \cdot r^{1.9} + a_2 + a_3/T_r + a_4 \cdot T_r + a_5 \cdot T_r^2 + a_6 \cdot T_r^3]$$

式中: p_h 为均一压力(bar); $T_r = (t_h + 273.15)/304.127$ (t_h 为均一温度, $^\circ\text{C}$); $r = 1 - T_r$; $a_1 = 22.1121612314$; $a_2 = 20.7511138469$; $a_3 = -13.5919393492$; $a_4 = -13.1646934258$; $a_5 = 24.3661239067$; $a_6 = -14.0599525667$ 。

(4) 等容式(p - T 关系式)的计算(Bottinga, 1981):

$$p = \frac{83.143 \cdot T}{V_1 - b} - \frac{a(T)}{\sqrt{T} \cdot V_1 \cdot (V_1 + b)}$$

式中: p 为压力(bar); T 为温度(K); V_1 为流体摩尔体积(cm^3/mol); 其他参数, 由下式计算: