

Численное моделирование экстумации горных пород сверхвысоких давлений*

В. П. Жуков¹, А. В. Корсаков²

¹Институт вычислительных технологий СО РАН, Новосибирск, Россия

²Институт геологии и минералогии СО РАН, Новосибирск, Россия

e-mail: zukov@ict.nsc.ru, korsakov@igm.nsc.ru

Предложены термомеханическая модель сферически симметричных систем включение—минерал-хозяин, учитывающая возможность фазовых переходов и эффекты пластичности, а также конечно-разностная схема для ее исследования. Показано, что данная модель правильно описывает распределение остаточных напряжений в метаморфических породах, поднимающихся с глубин более 120 км. Исследование представленной модели имеет важное значение для изучения процессов формирования земной коры.

Ключевые слова: термомеханическая модель, пластичность, система включение—минерал-хозяин, остаточные напряжения, метаморфические породы, конечно-разностная схема.

Введение

В настоящее время для объяснения процессов горообразования необходимо иметь информацию о траекториях движения блоков горных пород в литосфере (см. [1] и литературные ссылки к этой работе). Поскольку давление является известной функцией расстояния от поверхности Земли, то задача о восстановлении траектории блока сводится к задаче о восстановлении его пути на диаграмме давление—температура ($P-T$ -диаграмма). Наибольший интерес представляют блоки пород, образовавшихся при экстремально высоких давлениях, что фиксируется по аномально высокому содержанию (в сотни раз большему, чем в кимберлитовых трубках) алмазов микронных размеров в этих породах [2–8]. С другой стороны, знание закономерностей эволюции $P-T$ -траекторий блоков пород позволяет выявлять области алмазоносных пород. Кроме того, знание траекторий движения блоков горных пород способствует установлению закономерностей возникновения и распространения очагов землетрясений [1].

Для реконструкции $P-T$ -траекторий традиционно применяются измерения остаточных давлений во включениях одних минералов в других, находящихся при комнатных условиях [9–13]. Например, включения коэзита и алмаза в гранате свидетельствуют о том, что максимальные давления при образовании данных пород превышали несколько гигапаскаль [2, 13–16]. При этом использовалась “эластичная модель” [17–20], в которой предполагается, что после образования системы включение—минерал-хозяин дальнейшая ее эволюция описывается уравнениями теории упругости. В данном случае наличие

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 10-05-00616-а).

сдвиговых напряжений препятствует полному превращению коэсита в кварц или алмаза в графит в ходе подъема блока пород из области высоких температур и давлений на поверхность Земли.

В предыдущих исследованиях применялись модели, направленные на поиск аналитического решения, которые громоздки даже в случае простейших систем включение—минерал-хозяин, состоящих из двух минералов [17–20]. Дополнительные сложности привносит попытка учета термодинамической возможности фазового перехода коэсита в кварц или алмаза в графит. В работах [21–23] использована численная модель, позволяющая рассчитывать распределение механических напряжений в системах, состоящих из произвольного количества слоев различных минералов, учитывающая термодинамическую возможность фазового перехода. Существенным недостатком эластичных моделей являются значительные расхождения вычисленных и измеренных методами КР-спектроскопии [12, 13, 21–23] данных по распределению остаточного давления в наиболее часто встречающихся в природе трехслойных системах, например, коэсит—кварц—гранат и алмаз—графит—гранат. Для устранения этого недостатка более правильно было бы использовать модель, учитывающую возможность релаксационных процессов (пластических деформаций), что обсуждалось лишь на качественном уровне [24–26]. Влияние конкретной величины скорости фазового перехода также не исследовалось.

В настоящей работе представлена модель сферически симметричной многослойной системы, учитывающая релаксационные процессы и кинетику фазовых переходов. Предложен и исследован метод численного решения. Полученные результаты хорошо совпадают с измеряемыми величинами остаточного давления в трехслойных системах (коэсит—кварц—гранат и алмаз—графит—гранат) и позволяют реконструировать динамику изменения температуры и давления при эксгумации горных пород с глубин более 90 км.

1. Постановка задачи

Систему минерал-хозяин—включение будем описывать простейшими уравнениями вязкоупругой среды [26], допускающей релаксацию сдвиговых напряжений:

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}, \quad \sigma_{ik} = -P\delta_{ik} + 2\mu s_{ik}, \quad (1)$$

$$P = -K(u_{ll} - 3\epsilon(T)), \quad (2)$$

$$\frac{\partial s_{ik}}{\partial t} = -\frac{s_{ik}}{\tau_r} + \frac{\partial s_{0ik}}{\partial t}, \quad (3)$$

$$s_{0ik} = u_{ik} - u_{ll}\delta_{ik}/3, \quad u_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right), \quad (4)$$

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}. \quad (5)$$

Здесь \mathbf{u} и \mathbf{v} — смещение и скорость среды, K и μ — модули сжатия и сдвига, ρ — плотность среды, P — давление, s_{ik} — тензор деформаций сдвига, τ_r — время релаксации s_{ik} , T — температура в градусах Кельвина, $\epsilon(T)$ — линейное относительное расширение.

Будем рассматривать сферически симметричное тело. В этом случае смещение имеет только r -компоненту, которую обозначим через u , недиагональные компоненты s_{ik} и σ_{ik} равны нулю, $\sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{\theta\theta}$, $s_{rr} = -2s_{\varphi\varphi} = -2s_{\theta\theta}$. Введем также обозначения

$$\sigma_r = \sigma_{rr}, \quad \sigma_t = \sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{\theta\theta}, \quad s = s_{rr}, \quad v = \partial u / \partial t.$$

Будем предполагать, что при изменении температуры T , K и внешнего давления P_{out} , ГПа эволюция системы происходит медленно по сравнению с характерным временем распространения звука в теле и установления постоянной во всем теле температуры. Для геологических процессов это выполняется с большой точностью. При этом характерные времена изменения внешних условий предполагаются сравнимыми со временем релаксации τ_r или большими τ_r . Тогда левой частью уравнения (1) можно пренебречь.

Предположим, что в начальный момент времени система находится в равновесии ($v = 0$) при давлении P_0 , ГПа и температуре T_0 , К. Температура предполагается большой, а τ_r — соответственно малым. Поэтому имеет место релаксация сдвиговых напряжений: $s_{ik} = 0$. В этом случае уравнение (1) для смещения в начальный момент времени $u_0 \equiv u(t = 0)$ имеет вид (K_0 — значение модуля упругости при P_0 , T_0)

$$K_0 \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial(u_0 r^2)}{\partial r} - 3\varepsilon(T_0) \right) = -P_0 \quad (6)$$

и позволяет найти выражение для u_0 , конкретный вид которого для дальнейшего рассуждения не важен. Представим u в виде

$$u = u_0 + \tilde{u}.$$

Ниже знак тильды у \tilde{u} будем опускать.

С учетом вышеизложенного уравнения (1)–(6) и начальные условия к ним будут следующими:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(K \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial(ur^2)}{\partial r} - 3\varepsilon(T) - \frac{P_0}{K_0} \right) + 2\mu s \right) + \frac{6\mu s}{r} = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -\frac{s}{\tau_r} + \frac{\partial s_0}{\partial t}, \quad s_0 = \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r} \right), \quad (8)$$

$$t = 0 : \quad u = 0, \quad s = 0. \quad (9)$$

Для $\varepsilon = \varepsilon(T) - \varepsilon(T_0)$ можно использовать выражение

$$\varepsilon = \left(\frac{\rho_0}{\rho(T)} \right)^{1/3} - \left(\frac{\rho_0}{\rho(T_0)} \right)^{1/3}.$$

Здесь $\rho(T)$ — плотность вещества при температуре T и давлении $P = 0$, $\rho_0 \equiv \rho(T = 0)$. При этом учитывается фазовый переход. Например, если в начальном состоянии был коэсит (ниже везде индекс *coe*), а в конечном — кварц (ниже — *qtz*), то

$$\varepsilon = \left(\frac{\rho_{0\text{coe}}}{\rho_{\text{qtz}}(T)} \right)^{1/3} - \left(\frac{\rho_{0\text{coe}}}{\rho_{\text{coe}}(T_0)} \right)^{1/3}.$$

Нам понадобятся также выражения для P , σ_r и σ_t :

$$P = -K \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 u)}{\partial r} - 3\varepsilon - \frac{P_0}{K_0} \right),$$

$$\sigma_r = -P + 2\mu s = K \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 u)}{\partial r} - 3\varepsilon - \frac{P_0}{K_0} \right) + 2\mu s,$$

$$\sigma_t = -(P + \mu s).$$

Предположим, что рассматриваемое тело состоит из m_0 сферических слоев, расположенных между поверхностями $r = R_{m-1}$ и $r = R_m$ ($0 = R_0 < R_1 \dots < R_{m_0}$), состоящих из различных веществ или разных фаз одного вещества. Коэффициенты K , μ , τ_r могут резко меняться при переходе от одного слоя к другому. На границах разрыва необходимо поставить условия непрерывности u и σ_r :

$$u(r = R_m - 0) = u(r = R_m + 0), \quad \sigma_r(r = R_m - 0) = \sigma_r(r = R_m + 0). \quad (10)$$

На оси системы и на внешней границе имеем условия

$$u(r = 0) = 0, \quad \sigma_r(r = R_{m_0}) = -P_{\text{out}}. \quad (11)$$

Предположим, что в слое с номером m_{tr} могут существовать две фазы одного и того же минерала, разделенные поверхностью $r = r_{tr}$. Для определенности будем говорить о коэсите в слое $(R_{m_{tr}-1} : r_{tr})$ и кварце в слое $(r_{tr} : R_{m_{tr}})$. Возможен фазовый переход коэсита в кварц и наоборот. Соответственно граница раздела фаз r_{tr} может изменяться со скоростью v_{tr} :

$$\frac{dr_{tr}}{dt} = v_{tr}. \quad (12)$$

Будем полагать, что в начальный момент времени кварца не было:

$$t = 0 : r_{tr} = R_{m_{tr}}. \quad (13)$$

Границы между остальными слоями предполагаются неизменными.

Уравнения (7), (8), (12) с начальными (9), (13) и граничными (10), (11) условиями при заданных K , μ , τ_r и v_{tr} позволяют определять смещение, величину деформаций и напряжений в рассматриваемом теле. Остановимся на выборе формул для τ_r и v_{tr} .

2. Оценка времени релаксации

Время релаксации τ_r точно неизвестно и зависит от многих параметров, таких как температура, напряжение сдвига, давление, состав минерала, содержание воды. Причем, например, для граната в зависимости от содержания воды в структуре минерала величина τ_r может меняться на два порядка [27]. В нашем моделировании будем использовать формулу [27]

$$\tau_r = B^{-1} s^{1-n} e^{gT_m/T}, \quad \text{или} \quad \tau_r^{-1} = B s^{n-1} e^{-gT_m/T},$$

где $B \approx e^{39}$, с, $g \approx 41$, $n = 2.7$ и $T_m \approx 1700$ К (τ_r измеряется в секундах).

Значения коэффициентов выбраны из тех соображений, чтобы при деформации порядка 0.01, соответствующей напряжениям порядка 1 ГПа, и типичном для минералов модуле сдвига $\mu \sim 100$ ГПа время τ_r было мало по геологическим меркам при $T > 1200$ К и очень большим при комнатных температурах. Например, для указанных значений параметров τ_r практически бесконечно при комнатных температурах, равно 1.7 млрд лет при $T = 1000$ К, 3 млн лет при $T = 1100$ К и 177 лет при $T = 1300$ К.

3. Оценка скорости фазового перехода

Будем полагать, что коэсит окружен оболочкой кварца, поэтому скорость фазового перехода $v_{tr} = dr_{tr}/dt$ отрицательна при переходе коэсита в кварц и положительна в обратном случае. При выборе формулы для v_{tr} будем исходить из результатов экспериментальной работы [28]. Примем

$$v_{tr \text{ coe} \rightarrow \text{qtz}} = -v_{cq} e^{-\Upsilon/T} \left(1 - \exp\left(\frac{\alpha \delta\Phi}{T \delta V}\right) \right) \quad \text{при} \quad \frac{\delta\Phi}{\delta V} < 0,$$

$$v_{tr \text{ qtz} \rightarrow \text{coe}} = v_{qc} e^{-\Upsilon/T} \left(1 - \exp\left(-\frac{\alpha \delta\Phi}{T \delta V}\right) \right) \quad \text{при} \quad \frac{\delta\Phi}{\delta V} > 0,$$

$$v_{cq} = 0.41 \text{ м/с}, \quad v_{qc} = 0.79 \text{ м/с}, \quad \alpha \approx 4 \cdot 10^4 \text{ К/ГПа}, \quad \Upsilon = 20100 \text{ К}, \quad (14)$$

где v_{tr} вычисляется в м/с, T в К. Выражение $\delta\Phi/\delta V$ представляет собой отношение изменения термодинамического потенциала Φ при переходе сферического слоя коэсита объемом δV в кварц. В нашем случае при изменении r_{tr} на величину δr

$$\delta V = -\frac{4\pi}{3}(r_{tr} + \delta r)^3 + \frac{4\pi}{3}r_{tr}^3 \approx -4\pi r_{tr}^2 \delta r.$$

Варьирование Φ производится в окрестности имеющих в момент времени t значений u , s , T , P_{out} при условиях постоянства T , P_{out} , наличия механического равновесия (7) и отсутствия релаксации ($\tau_r \rightarrow \infty$). Соответственно часть термодинамического потенциала, зависящая от δr , имеет вид¹

$$\begin{aligned} \Phi(r_{tr} + \delta r) = & 4\pi \left(\left(\sum_{m=1}^{m_{tr}-1} + \sum_{m=m_{tr}+1}^{m_0} \right) \int_{R_{m-1}}^{R_m} + \int_{R_{m_{tr}-1}}^{r_{tr}+\delta r} + \int_{r_{tr}+\delta r}^{R_{m_{tr}}} \right) \\ & \left\{ \frac{K_m}{2} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \hat{u})}{\partial r} - 3\varepsilon_m(T) - \frac{P_0}{K_{0m}} \right)^2 + \frac{3}{2} \mu_m \hat{s}^2 \right\} r^2 dr + \\ & + \frac{4\pi}{3} \Psi_{\text{coe}}((r_{tr} + \delta r)^3 - R_{m_{tr}-1}^3) + \frac{4\pi}{3} \Psi_{\text{qtz}}(R_{m_{tr}}^3 - (r_{tr} + \delta r)^3) + \\ & + 4\pi R_{m_0}^2 \hat{u}(r = R_{m_0}), \end{aligned} \quad (15)$$

где \hat{u} и \hat{s} определяются из уравнений

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(K \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \hat{u})}{\partial r} - 3\varepsilon(T) - \frac{P_0}{K_0} \right) + 2\mu \hat{s} \right) + \frac{6\mu \hat{s}}{r} = 0, \quad (16)$$

$$\hat{s} - s = \frac{2}{3} \left(\frac{\partial(\hat{u} - u)}{\partial r} - \frac{(\hat{u} - u)}{r} \right), \quad (17)$$

дополненных граничными условиями непрерывности \hat{u} и

¹Заметим, что в общем виде выражение для свободной энергии (более точно для ее плотности) имеет вид $F = \Psi(T) + \frac{K}{2} (\text{div} \mathbf{u} - 3\varepsilon(T))^2 + \mu s_{ik}^2 = \Psi(T) + \frac{P^2}{2K} + \mu s_{ik}^2$. Здесь Ψ — часть энергии, зависящая только от температуры. В нашем случае $F = \Psi + \frac{K}{2} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial(ur^2)}{\partial r} - \frac{P_0}{K_0} - 3\varepsilon \right)^2 + \frac{3}{2} \mu s^2$.

$$\hat{\sigma}_r = K \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \hat{u})}{\partial r} - 3\varepsilon - \frac{P_0}{K_0} \right) + 2\mu \hat{s}$$

на поверхностях разрыва $r = R_1, \dots, r_{tr} + \delta r, \dots, R_{m_0-1}$, а также условиями $\hat{u}(r = 0) = 0$ и $\hat{\sigma}_r(r = R_{m_0}) = -P_{\text{out}}$.

Функция Ψ в (15) представляет собой часть свободной энергии, зависящую только от температуры.

Выражение (14) отражает следующие основные свойства скорости фазового перехода [28]: а) скорость зависит от температуры как $e^{-\text{const}/T}$; б) при значениях P и T , приближающихся к кривой равновесия фаз на $P-T$ -плоскости, скорость существенно уменьшается, но это происходит только в малой окрестности кривой равновесия, в большей части $P-T$ -плоскости v_{tr} зависит только от T ; в) скорости перехода кварц—коэсит и коэсит—кварц различны.

Значения различных коэффициентов взяты таким образом, чтобы имелось соответствие с работой [28]. В частности, согласно (14) время перехода при давлениях вне окрестности кривой равновесия фаз для наших параметров (размер в мкм, время в млн лет) будет мало лишь при комнатных ($T < 300$ К) температурах. Коэффициент α выбран из тех соображений, что в задаче о переходе коэсита в кварц без сдвиговых напряжений влияние члена с α должно быть существенным только в окрестности обычной кривой равновесия фаз для давления, отличающегося от критического на величину порядка 0.1 ГПа.

В заключении раздела заметим, что формула (14) является модельной. Она зависит от интегральной величины Φ . Строго говоря, скорость перехода связана с локальными характеристиками и зависит не только от локальных напряжений, но и от концентрации, размера и формы зародышей новой фазы, коэффициента диффузии этих зародышей и т. п. Это приводит к неоправданному усложнению модели. Кроме того, значения многих параметров, необходимых для использования подобного подхода, не известны. Как будет показано ниже, конкретное значение скорости перехода для наших целей оказывается не столь существенным. Также отметим, что поскольку вариация Φ в (14) связана со вторым законом термодинамики, который дает необходимое, но не достаточное условие фазового перехода, то в некоторых случаях $\delta\Phi/\delta V$ может иметь соответствующий знак, но переход не произойдет. Для учета подобных ситуаций в нашем моделировании можно использовать энергию активации [29].

4. Калибровка

КР-спектроскопические методы являются весьма эффективными для получения оценок величин давления внутри включений в различных образцах [9, 11, 13, 30]. В работе [31] показано, что при всестороннем сжатии сдвиг частоты раманского рассеяния $d\nu$ связан с прикладываемым давлением P_{out} (в ГПа) зависимостью

$$d\nu = 2.96 \cdot P_{\text{out}}. \quad (18)$$

Если же происходит одностороннее сжатие, то

$$d\nu = 1.294 \cdot P_{\text{out}} - 0.0062 \cdot P_{\text{out}}^2 \approx 1.294 \cdot P_{\text{out}}. \quad (19)$$

Возникает вопрос, каким образом сдвиг частоты $d\nu$ связан с механическими напряжениями внутри тела. В изотропном случае, когда сдвиг частоты не зависит от направления луча и тело поликристаллическое, этот сдвиг может зависеть только от скаляра, построенного из тензоров деформации u_{ik} или напряжения σ_{ik} . Поскольку зависимости (18), (19) при интересующих нас напряжениях порядка нескольких гигапаскаль линейны по внешнему давлению, то и тензоры u_{ik} или σ_{ik} должны входить в выражение для $d\nu$ линейным образом. Единственная возможность построить скаляр, зависящий от тензора линейно в изотропном случае, — свертка, т. е. $d\nu \sim u_{ii}$ или, что то же, $d\nu \sim \sigma_{ii}$.

При всестороннем сжатии $\sigma_{ik} = -P\delta_{ik}$, $u_{ik} = -P(3K)^{-1}\delta_{ik}$. Соответственно $\sigma_{ii} = 3P$, $u_{ii} = -P/K$. Если стержень сжимается только по оси z , то $\sigma_{zz} = -P$, $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = 0$, $u_{zz} = -(3K + \mu)(9K\mu)^{-1}P$, $u_{xx} = u_{yy} = (3K - 2\mu)(18K\mu)^{-1}P$. Соответственно, $\sigma_{ii} = P$, $u_{ii} = -P/(3K)$. Таким образом, в случае сжатия вдоль одного направления величина σ_{ii} в три раза меньше, чем при всестороннем сжатии. Согласно же (18), (19) отличие составляет 2.23 раза. Это различие может быть связано с несоответствием эксперимента сжатию только вдоль одного направления. Отсюда можно предположить, что смещение частоты связано с $\sigma_{ii} = 3P$ как

$$d\nu = \frac{2.96}{3}\sigma_{ii} \approx \sigma_{ii}.$$

Подтверждением такой связи является также то обстоятельство, что при измерениях в сферически симметричных системах включение—минерал-хозяин $d\nu$ постоянно вдоль каждого слоя, в то время как само значение этой величины может меняться от слоя к слою. Кроме того, измерения, основанные на других физических принципах, указывают на анизотропию в состоянии системы включение—минерал-хозяин на расстояниях от включения, сравнимых с его радиусом [13, 32]. Моделирование сферически симметричных систем только в упругом приближении показывает, что в равновесии σ_{ii} не зависит от радиуса вдоль одного слоя, в то время как сдвиговые напряжения, дающие анизотропию в нерамановских измерениях, могут быть велики и зависят от координат в пределах одного слоя.

5. Численное решение

Для построения численного решения сформулированной выше задачи заметим, что при не зависящих от r коэффициентах K , μ , τ_r , ε (при этом зависимость от времени допустима) решение (7)–(9) имеет вид $u = Ar + B/r^2$, $s_0 = -2B/r^2$, $s = -2b/r^2$, где A , B , b — функции времени. Эта задача допускает также решение $u = Ar$, $s_0 = s = 0$ при K , не зависящем от r при произвольных μ и τ_r . Данное решение реализуется в первом (центральном, $r < R_1$) слое рассматриваемого тела в силу граничного условия $u(r=0) = 0$, если только в нем не происходит фазового перехода. Поскольку в этом слое давление постоянно, то нелинейная зависимость K от P в данном случае также не приводит к зависимости K от r .

Как правило, коэффициенты K и μ зависят только от температуры и типа или фазы вещества. Коэффициент τ_r существенно зависит от s и, следовательно, от r . Фазовый переход (изменение границы между фазами) также вносит зависимость коэффициентов от радиуса.

Соответственно для численного решения задачи разобьем расчетную область $0 < r < R_{m_0}$ на j_0 ячеек $r_{j-1} < r < r_j$, $0 = r_0 < r_1 < \dots < r_{j_0} = R_{m_0}$. Разбиение должно быть настолько мелким, что внутри каждой ячейки значения K , μ , τ_r можно было бы считать не зависящими от радиуса. При $j_0 \rightarrow \infty$ решение будет стремиться к решению дифференциальной задачи. Размер ячеек может быть различным. Например, если в центральной части при r , меньшем некоторого радиуса R_* , находится одна и та же фаза, то можно положить $r_1 = R_*$. Как правило, радиус минерала-хозяина R_{m_0} много больше радиуса включения R_{m_0-1} . Сдвиговые напряжения в минерале-хозяине затухают на расстояниях порядка нескольких R_{m_0-1} . Поэтому при $r \gg R_{m_0-1}$ размер ячеек может быть большим.

В силу изложенного внутри каждого слоя $r_{j-1} < r < r_j$ решение имеет следующий вид (индекс j означает величину, взятую в соответствующей ячейке):

$$u = \left(A_j + B_j \frac{r_{j-1}^3}{r^3} \right) r, \quad s = -2b_j \frac{r_{j-1}^3}{r^3}, \quad r \in (r_{j-1}, r_j). \quad (20)$$

Соответственно остальные величины будут иметь вид

$$s_{0j} = -2B_j \frac{r_{j-1}^3}{r^3}, \quad P_j = -3K_j (A_j + A_{0j} - \varepsilon_j), \quad (21)$$

$$\sigma_{rj} = 3K_j (A_j + A_{0j} - \varepsilon_j) - 4\mu_j b_j r_{j-1}^3 / r^3. \quad (22)$$

Здесь

$$A_{0j} = -\frac{P_0}{3K_{0j}}.$$

Коэффициенты b_j находятся из решения задачи (см. (8), (20), (21))

$$\frac{db_j}{dt} = -\frac{b_j}{\tau_{rj}} + \frac{dB_j}{dt}, \quad (23)$$

$$t = 0 : \quad b_j = B_j = 0. \quad (24)$$

Введем конечно-разностную сетку по времени t^n с шагом τ . Аппроксимируем решение задачи (23), (24) формулой

$$b_j^{n+1} = b_j^n e^{-\tau/\tau_{rj}} + (B_j^{n+1} - B_j^n) \frac{1 - e^{-\tau/\tau_{rj}}}{\tau/\tau_{rj}}, \quad B_j^{n=0} = b_j^{n=0} = 0, \quad (25)$$

$$j = 2, \dots, j_0,$$

которая правильно передает предельные случаи $\tau_r \rightarrow 0$ и $\tau_r \rightarrow \infty$. Условие отсутствия особенностей в центре координат, условие на внешней границе области (11) и условия (10) непрерывности u (20) и σ_r (22) при переходе от одной ячейки к другой дают выражения

$$B_1^{n+1} = 0, \quad (26)$$

$$b_1^{n+1} = 0, \quad (27)$$

$$A_j^{n+1} + B_j^{n+1} w_j = A_{j+1}^{n+1} + B_{j+1}^{n+1}, \quad (28)$$

$$3K_j (A_j^{n+1} + A_{0j} - \varepsilon_j) - 4\mu_j b_j^{n+1} w_j =$$

$$= 3K_{j+1}(A_{j+1}^{n+1} + A_{0j+1} - \varepsilon_{j+1}) - 4\mu_{j+1}b_{j+1}^{n+1}, \quad j = 1, \dots, j_0 - 1, \quad (29)$$

$$3K_{j_0}(A_{j_0}^{n+1} + A_{0j_0} - \varepsilon_{j_0}) - 4\mu_{j_0}b_{j_0}^{n+1}w_{j_0} = -P_{\text{out}}^{n+1}, \quad (30)$$

где

$$A_{0j} = -\frac{P_0}{3K_{0j}}, \quad w_j = r_{j-1}^3/r_j^3. \quad (31)$$

В формулах (25)–(30) коэффициенты K , μ и τ_r соответствуют температуре в момент времени t^{n+1} . Система линейных уравнений (25)–(31) позволяет определить все интересующие нас величины при известном r_{tr} в момент времени t^{n+1} . Метод вычисления r_{tr}^{n+1} будет описан ниже.

При численном решении рассматриваемой задачи появляется проблема: без труда можно добиться, чтобы границы ячеек сетки r_j совпадали с границами слоев R_m , однако поскольку r_{tr} изменяется со временем, то r_{tr} может оказаться между границами ячеек r_j и r_{j-1} . В данном случае возникает вопрос о вычислении величин, в том числе входящих в (28), (29), в ячейке, для которой $r_{j-1} < r_{tr} \leq r_j$.

Для решения этой проблемы можно поступить следующим образом. Будем считать, что вещество в ячейке перешло в новую фазу только в том случае, если граница r_{tr} при своем движении пересекла всю ячейку. Иначе говоря, в ячейках с номерами j , для которых $r_{tr} \leq r_{j-1}$, находится кварц, а в ячейках, для которых $r_{tr} > r_{j-1}$, — коэсит.

Величину $\delta\Phi^n/\delta V$ вычислим как

$$\left(\frac{\delta\Phi}{\delta V}\right)_{j-1/2}^n = \frac{\Phi^n(r_{tr} = r_j) - \Phi^n(r_{tr} = r_{j-1})}{(4\pi/3)(r_j^3 - r_{j-1}^3)}, \quad (32)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi^n(r_{tr}) = & \frac{4\pi}{3} \sum_{j=1}^{j_0} \left(\frac{9}{2} K_j (\hat{A}_j + A_{0j} - \varepsilon_j)^2 + 6\mu_j \hat{b}_j^2 w_j \right) (r_j^3 - r_{j-1}^3) + \\ & + \frac{4\pi}{3} ((\Psi_{\text{coe}}(r_{tr}^3 - R_{mtr-1}^3) + \Psi_{\text{qtz}}(R_{mtr}^3 - r_{tr}^3)) + \\ & + 4\pi P_{\text{out}} r_{j_0}^3 (\hat{A}_{j_0} + \hat{B}_{j_0} w_{j_0})). \end{aligned} \quad (33)$$

Здесь \hat{A} , \hat{B} , \hat{b} соотносятся с \hat{u} , \hat{s} так же, как A , B , b с u , s (см. (16), (17), (20)). Для \hat{A} , \hat{B} , \hat{b} применяются те же уравнения (26)–(30), что и для A^{n+1} , B^{n+1} , b^{n+1} , только вместо (25) имеем

$$\hat{b}_j - b_j^n = \hat{B}_j - B_j^n,$$

а также P_{out} и T должны браться в момент времени t^n . Вычислив (32), с помощью (14) находим $v_{trj-1/2}$ и затем r_{tr}^{n+1} .

Заметим, что выражение (33) имеет смысл только при $r_{tr} = r_j$.

Недостаток развитого выше подхода заключается в резком изменении решения (величин давления и сдвига в ячейках) при фазовом переходе вещества во всей ячейке. Для уменьшения таких изменений необходимо брать неоправданно мелкий шаг h . Этот шаг можно увеличить, сократив время расчета с помощью следующего метода.

В данном методе введем концентрацию c_j в ячейке. Величина $c_j = 0$, если ячейка занята коэситом, и $c_j = 1$, если ячейка занята кварцем. Граница перехода сглаживается. В настоящей работе использовалась формула

$$c_j = \frac{1}{2} \left(1 + \text{th} \frac{r_{j-1/2} - r_*}{\delta} \right), \quad (34)$$

$$r_{j-1/2} = (r_j - r_{j-1})/2,$$

$$r_* = R_{m_{tr}-1} - \Delta + (r_{tr} - R_{m_{tr}-1}) \frac{R_{m_{tr}} + 2\Delta - R_{m_{tr}-1}}{R_{m_{tr}} - R_{m_{tr}-1}},$$

обеспечивающая плавный, с шириной порядка δ , переход c_j от 0 до 1. При достаточно большом Δ (в расчетах $\Delta = 3\delta$) при $r_{tr} \rightarrow R_{m_{tr}-1}$ или $r_{tr} \rightarrow R_{m_{tr}}$ все c_j с высокой точностью равны 1 или 0 (рассматриваются случаи, когда имеется только кварц или только коэсит).

Значения K , μ , Ψ и ε в ячейках берутся равными

$$K_j = K_{\text{coe}}(1 - c_j) + K_{\text{qtz}}c_j,$$

$$\mu_j = \mu_{\text{coe}}(1 - c_j) + \mu_{\text{qtz}}c_j, \quad (35)$$

$$\Psi_j = \Psi_{\text{coe}}(1 - c_j) + \Psi_{\text{qtz}}c_j,$$

$$\varepsilon_j = \frac{K_{\text{coe}}\varepsilon_{\text{coe}}(1 - c_j) + K_{\text{qtz}}\varepsilon_{\text{qtz}}c_j}{K_{\text{coe}}(1 - c_j) + K_{\text{qtz}}c_j}. \quad (36)$$

Выражение для термодинамического потенциала примет в этом случае вид

$$\Phi^n(r_{tr}) = \frac{4\pi}{3} \sum_{j=1}^{j_0} \left(\frac{9}{2} K_j (\hat{A}_j + A_{0j} - \varepsilon_j)^2 + 6\mu_j \hat{b}_j^2 w_j + \Psi_j \right) (r_j^3 - r_{j-1}^3) +$$

$$+ 4\pi P_{\text{out}} r_{j_0}^3 (\hat{A}_{j_0} + \hat{B}_{j_0} w_{j_0}). \quad (37)$$

В (37) полагается, что $\Psi_j = 0$ вне слоя ($R_{m_{tr}-1} : R_{m_{tr}}$). Скорость движения границы фаз v_{tr} вычисляется по-прежнему с использованием формулы (32).

Подчеркнем, что выбор выражения (36) для ε_j не случаен. Использование этого выражения обеспечивает практически точное решение задачи о распределении остаточных напряжений в теле с заданным фиксированным r_{tr} и отсутствием релаксации напряжений ($\tau_r \rightarrow \infty$, чисто упругая модель) уже на грубой сетке. При этом r_{tr} может не совпадать с узлами конечно-разностной сетки r_j . Если же в качестве ε_j взять, например, $\varepsilon_j = \varepsilon_{\text{coe}}(1 - c_j) + \varepsilon_{\text{qtz}}c_j$, то при решении задачи об остаточных напряжениях при отсутствии релаксации на графике зависимости давления от радиуса в окрестности r_{tr} имеется пик, т. е. теряется присущая точному решению монотонность. Эта ошибка понижается с уменьшением шага сетки, но предпочтительнее в численное решение подобные несоответствия не вносить.

Заметим, что формула (36) имеет определенный физический смысл. Вклад более жесткого вещества (с большим K) в изменение давления в пространственно ограниченной смеси веществ при изменении температуры более значителен, чем вещества с малым K , при прочих равных условиях.

В расчетах полагалось $\delta = h$ (h — шаг сетки r_j в слое с фазовым переходом) при вычислении коэффициентов K_j , μ_j , ε_j для решения уравнений (25)–(30), но $\delta \rightarrow 0$ при вычислении этих коэффициентов для последующего их использования в формуле (37). Это связано со следующим.

Расчеты показывают, что если для вычисления $\Phi(r_j)$ брать коэффициенты K_j , μ_j , ε_j , вычисленные по (35), (36) с $\delta = h$, то в системе из матрицы граната с включением коэсита при давлении 6 ГПа и температуре 1300 К происходит переход коэсита в кварц

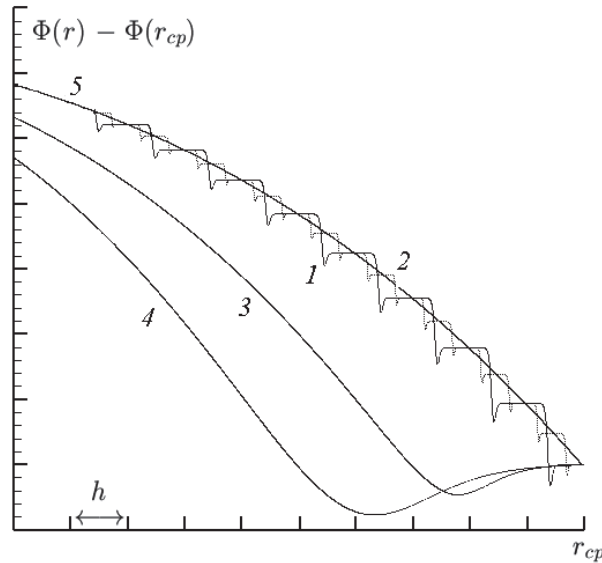


Рис. 1. Типичное распределение $\Phi(r) - \Phi(r_{cp})$ в системе коэсит—гранат в области заведомо стабильного коэсита при разных h и δ ; r_{cp} — радиус границы коэсит—гранат; 1, 2 — $\delta = 0.05h$, 3, 4 — $\delta = h$, 5 — $\delta = 2h$; шаг h для кривых 1, 3 и 5 одинаков и в два раза больше, чем для кривой 2; кривая 4 соответствует очень малому h

в слое шириной $\sim \delta$, в то время как при таких давлении и температуре коэсит заведомо стабилен. При уменьшении h ширина каймы кварца уменьшается, т.е. имеется сходимость численного решения к точному. Но подобных заведомо не физических решений следует избегать. Если же вычисление Φ производить при $\delta \rightarrow 0$, то кварц не появляется, а сглаживание $K_j, \mu_j, \varepsilon_j$ при решении (25)–(30) обеспечивает более плавное решение и более хорошую сходимость.

Рассмотрим этот вопрос более детально. Из рис. 1, на котором приведены типичные распределения $\Phi(r) - \Phi(r_{cp})$ (r_{cp} — радиус границы коэсит—гранат) в системе коэсит—гранат в области заведомо стабильного коэсита при разных h и δ , $\Delta = 2\delta$, видно следующее:

а) при $\delta \geq h$ в окрестности r_{cp} имеется область шириной порядка δ , где производная $\Phi(r)$ отрицательна, что и является причиной возникновения каймы кварца;

б) при $\delta \geq h$ функция $\Phi(r)$ гладкая, ее можно использовать при вычислении производной Φ в точках, не совпадающих с r_j (кроме окрестности r_{cp}). Этого нельзя сказать о случае $\delta = 0.05h$;

в) при $h \rightarrow 0$ при $\delta = h$ значения $\Phi(r)$ в узлах сетки r_j совпадают со значениями $\Phi(r)$ в r_j при $\delta = 0.05h$ и не малых h . Поэтому производная Φ вычисляется по формуле (32) при $\delta = 0$.

Заметим, что зависимость распределения $\Phi(r)$ от h и δ , представленная на рис. 1, может быть объяснена, если принять во внимание разрывность сдвигового напряжения $\sigma_t(r)$ в точках K, μ, ε . Подчеркнем также, что величину c_j нельзя рассматривать как физическую концентрацию кварца в смеси кварца и коэсита. Она служит только для сглаживания и улучшения сходимости численного решения. Зависимость реальных $K, \mu, \varepsilon, \Psi$ от физической концентрации кварца носит строго определенный (и неизвестный) вид, который не совпадает с формулами (35), (36).

6. Вычисление r_{tr}

Значение r_{tr}^{n+1} вычисляется следующим образом. Используя (37), найдем $\Phi(r_{tr} = r_j)$. Затем по формуле (32) вычисляем вариацию Φ и с помощью (14) находим $v_{tr,j+1/2}$ — скорость в центре ячеек $r_{j+1/2}$. При последующем вычислении r_{tr}^{n+1} полагаем, что величина $v_{tr}(r_{tr})$ постоянна и равна $v_{tr,j+1/2}$ при изменении r_{tr} в пределах одной ячейки разностной сетки.

Особенностью данной задачи является то, что скорость $v_{tr}(r_{tr})$ при больших температурах оказывается очень большой, но как функция r_{tr} она может менять знак при некоторых значениях r_{tr} . Поэтому r_{tr} практически совпадает с точками равновесия фаз (т. е. $v_{tr}(r_{tr}) = 0$) или с границами $R_{m_{tr}}$, $R_{m_{tr}-1}$. Это обстоятельство для наших исследований означает, что конкретное значение неизвестной точно величины v_{tr} не играет роли. С другой стороны, при малых температурах v_{tr} может быть и малой. Поэтому алгоритм решения обыкновенного дифференциального уравнения (12) учитывает данную особенность. Этот алгоритм не сложен и останавливаться на нем не будем.

7. Результаты расчетов

На рис. 2–4 показаны результаты численного решения задачи об эволюции включения коэсита радиуса 20 мкм в гранате радиусом 1 мм. В начальный момент времени $t = 0$ система находилась при внешнем давлении $P_0 = 4$ ГПа и температуре $T_0 = 1200$ К. Затем эти параметры менялись линейно со временем до $P_1 = 0.8$ ГПа и $T_1 = 1200$ К при $t_1 = 0.8$ млн лет и до комнатных значений $P_2 = 0.0001$ ГПа и $T_1 = 300$ К при $t_1 = 1.6$ млн лет. Значения различных коэффициентов для кварца, коэсита и граната приведены в Приложении 2.

Эволюция системы следующая. В момент времени $t \simeq 0.6$ млн лет, когда P_{out} достигает значений, немного меньших равновесного (при отсутствии сдвиговых напряжений)

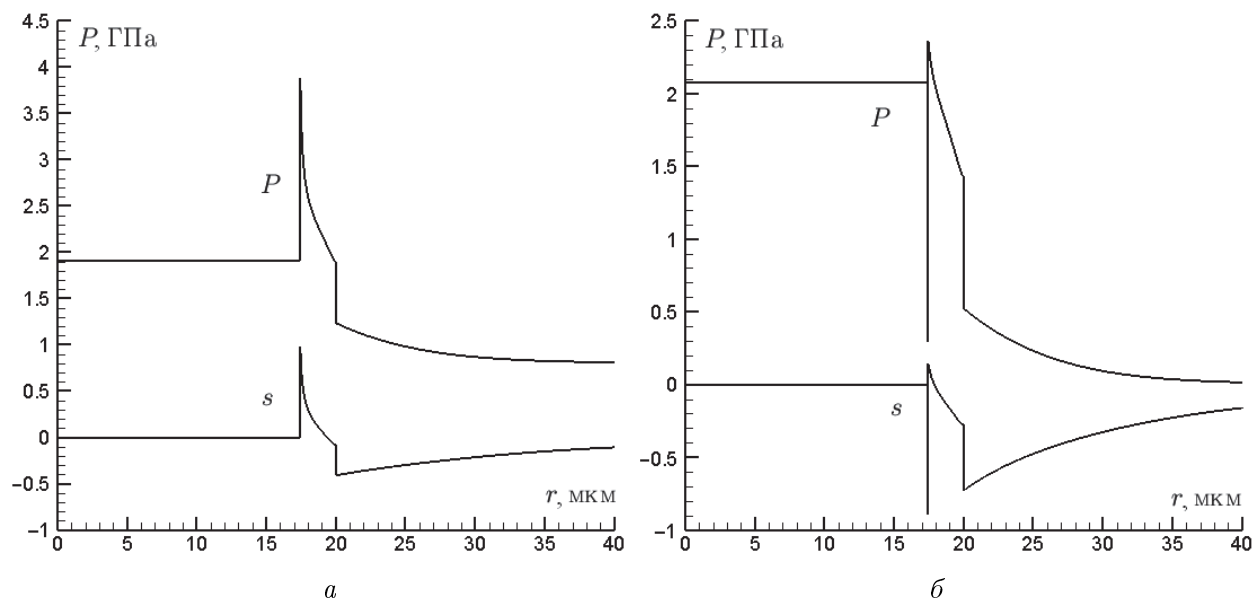


Рис. 2. Распределение давления и сдвигового напряжения при $t = 0.8$ млн лет (а) и $t = 1.6$ млн лет (б)

для данных температуры и давления, начинается образование кварцевой оболочки. Поскольку удельный объем кварца больше объема коэсита, то давление в кварце значительно больше, чем в коэсите (см. рис. 2, а, $t = 0.8$ млн лет). Заметим, что существенную роль в возникновении кварца играет релаксация сдвиговых напряжений, без которых наличие граната не дало бы возможности для фазового перехода при понижении P_{out} . Типичное время релаксации на этом этапе мало и составляет примерно 4000 лет. Ина-

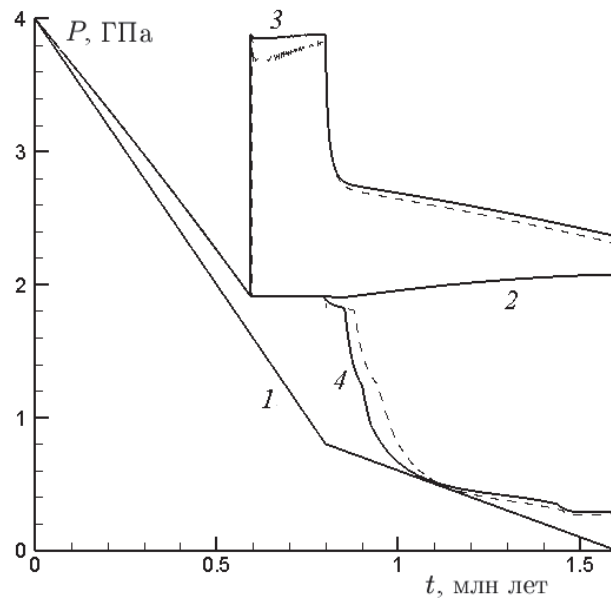


Рис. 3. Эволюция внешнего давления P_{out} (кривая 1), давления в центре системы $P_c = P(r = 0)$ (кривая 2), $P_{\text{max}} = \max_r P(r)$ (кривая 3), минимального давления в области, занятой коэситом и кварцем P_{min} (кривая 4). Штриховыми линиями показаны P_{max} и P_{min} при расчете на грубой сетке

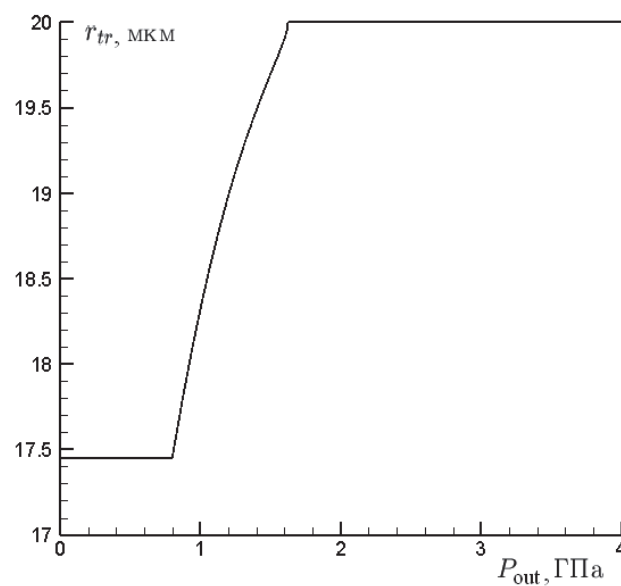


Рис. 4. Зависимость r_{tr} от P_{out}

че говоря, в данном случае происходит практически полная релаксация, что возможно благодаря высокой температуре.

При дальнейшей эволюции системы толщина кварцевой оболочки увеличивается, достигая максимума при $t \approx 0.8$ млн лет (см. рис. 4), однако затем наблюдаются весьма незначительное обратное движение границы коэсит—кварц и превращение кварц в коэсит, сопровождающееся резким понижением давления во вновь образовавшемся коэсите (см. рис. 2, б). Это происходит уже при низкой температуре и соответственно при отсутствии релаксации сдвиговых напряжений. Следует отметить, что при отсутствии релаксации на этапе перехода коэсита в кварц обратный переход кварца в коэсит привел бы к восстановлению распределения давления и соответственно к отсутствию минимума давления на рис. 2, б. Наблюдаемое в расчетах обратное превращение кварца в коэсит при понижении внешнего давления в принципе возможно благодаря наличию сдвиговых напряжений и неравномерной релаксации². Однако более подробное изучение данного процесса (см. ниже) показывает, что в этом случае переход кварца в коэсит является счетным эффектом.

При комнатных условиях ($t = 1.6$ млн лет) среднее давление в кварце меньше давления в коэсите (см. рис. 2, б). Уменьшение давления в кварце по сравнению с давлением при $t = 0.8$ (см. рис. 2, а) происходит не за счет релаксации, а в силу уменьшения температуры и того, что $\varepsilon_{\text{qtz}} > \varepsilon_{\text{coe}}$.

Обсуждение физических результатов, полученных с использованием данной модели, выходит за рамки настоящей работы. Отметим только, что вычисленное по модели конечное распределение давления соответствует измеряемому в реальных геологических образцах, а именно, давление в коэсите составляет величину порядка 2 ГПа, а в кварцевой оболочке оно меньше и равно примерно 1.5 ГПа [9, 12, 13]. Модели без учета релаксации приводят к принципиально неверной картине, согласно которой давление в кварце достигает нескольких гигапаскаль и существенно больше давления в коэсите. Изучение предложенной модели также показывает, что имеющиеся на поверхности Земли образцы проходили путь на PT -плоскости от высоких давлений и температур к низким давлениям и высоким температурам, а затем к комнатным условиям. Одновременное уменьшение давления и температуры исключается.

Рассмотрим вопрос точности получаемого решения. В расчетах, использованных при построениях рис. 2–4, шаг разностной сетки в области фазового перехода h составлял $8 \cdot 10^{-4}$ мкм, $\delta = h$, $\Delta = 3\delta$, $\tau = 2 \cdot 10^{-4}$ млн лет. Дальнейшее уменьшение h и τ не приводит к различимым изменениям графиков, представленных на рисунках. Штрихом на рис. 3 показана эволюция P_{max} и P_{min} , полученная при расчете на более крупной сетке $h = 8 \cdot 10^{-3}$ мкм, $\tau = 10^{-3}$ млн лет. На остальных рисунках использование более грубой сетки не отразилось. Величины P_{max} и P_{min} , соответствующие максимальному давлению в кварце и минимальному давлению во вновь образовавшемся коэсите, являются наиболее чувствительными к h и, даже в большей степени, к τ . Расчет остальных величин возможен на еще более грубых сетках. Заметим, что без использования сглаживания для достижения той же точности требуется существенно меньший шаг сетки.

Как упоминалось выше, эффект обратного превращения кварца в коэсит и появления узкого слоя низкого давления (см. рис. 2, б) является счетным. Действительно, расчет на последовательности сеток (шаг h доходил до 10^{-4} мкм, что соответствует

²Например, при изменении линейно со временем давления и температуры от 4 ГПа и 1050 К до 1 ГПа и 950 К за 0.4 млн лет, а затем до комнатных условий за 0.6 млн лет образуется кайма кварца толщиной ≈ 2.4 мкм при $t \approx 0.4$ млн лет. В дальнейшем кварц полностью переходит в коэсит.

атомным размерам) показывает, что ширина слоя перешедшего обратно в коэсит кварца составляет величину порядка нескольких h и уменьшается пропорционально h . Можно показать, что резкое изменение параметров K , μ , ε в слое толщиной Δr в некоторой системе приводит к скачку напряжений в этом слое. При $\Delta r \rightarrow 0$ величина напряжений в слое стремится к некоторым предельным значениям, а распределение напряжений вне слоя — к распределению напряжений при отсутствии данного слоя. Эта картина реализуется при расчетах на последовательности сеток в рассматриваемом случае. Поскольку нас интересуют такие малочувствительные к шагу сетки величины как давление в коэсите, среднее давление в кварце и ширина кварцевой оболочки, то наличие узкого слоя низкого давления на рис. 2, б можно игнорировать и проводить расчеты на очень крупных сетках.

Заключение

В работе предложена вязкоупругая модель сферически симметричных систем включение—минерал-хозяин, образовавшихся при некоторых давлении и температуре и перемещенных в среду с другим давлением и температурой при наличии фазового перехода. При этом учитываются скорость фазового перехода, время релаксации сдвиговых напряжений и путь системы на PT -плоскости. Предложен и подробно изучен эффективный численный метод, позволяющий следить за эволюцией механических напряжений в рамках этой модели. Проведены расчеты для случая эксгумации на дневную поверхность метаморфических пород сверхвысоких давлений (с глубин > 120 км), в которых системы коэсит—гранат с частичным переходом коэсита в кварц встречаются весьма часто. Результаты расчетов соответствуют данным измерения напряжений в таких системах и позволяют сделать заключения о пути на PT -плоскости, который эти системы проходят при эксгумации.

Приложение 1

Для решения уравнений (25), (28)–(30) уравнения (25), (28), (29) записывались в виде

$$y_{j+1} = \hat{G}y_j + f_j, \quad y_j = (A, B, b)_j^{n+1}. \quad (A.1)$$

Вектор y_j ищем в виде линейной комбинации

$$y_j = A_1 y_j^{(0)} + y_j^{(1)}, \quad (A.2)$$

где $y_j^{(0)}$ — решение (A.1) с граничными условиями $y_1 = (0, 0, 0)$, а $y_j^{(1)}$ — решение (A.1) без правой части ($f_j = 0$) и с граничными условиями $y_1 = (1, 0, 0)$. Значение A_1 находится подстановкой выражения (A.2) с вычисленными $y_j^{(0)}$, $y_j^{(1)}$ в (30) и требованием выполнения равенства (30).

Приложение 2

Использованные в расчетах значения различных величин для коэсита (coe), кварца (qtz) и граната (grt) были следующими [33]: $K_{\text{coe}} = 113.7$, $K_{\text{qtz}} = 37.8$, $K_{\text{grt}} = 150 - 0.02T$, $\mu_{\text{coe}} = 61.6$, $\mu_{\text{qtz}} = 44.3$, $\mu_{\text{grt}} = 90 - 0.01T$.

Линейное расширение граната вычислялось по формуле

$$\varepsilon_{\text{pyr}} = \left\{ (2.14 \cdot 10^{-5} - 0.02 \cdot P_{\text{out}}/K_{\text{pyr}}^2)(T - T_0) + 1.1 \cdot 10^{-8}(T^2 - T_0^2)/2 \right\} / 3.$$

Здесь учтено, что в рассматриваемой задаче давление в гранате практически всегда совпадает с внешним давлением P_{out} . В этих формулах давление и модули упругости и сдвига вычисляются в ГПа, а температура в К.

Функции Ψ и ε для коэсита и кварца вычислялись с помощью соотношений

$$\Psi_{\text{coe,qtz}} = \Psi_{*\text{coe,qtz}} / (10V_{0\text{coe}}).$$

Здесь Ψ_{coe} , Ψ_{qtz} в ГПа, $\Psi_{*\text{coe}}$, $\Psi_{*\text{qtz}}$ в кДж/моль, $V_{0\text{coe}}$, кДж/(моль · кбар) (10 кбар = 1 ГПа) — объем одного моля коэсита при $T = 0$, $P = 0$. В этой формуле и для Ψ_{coe} , и для Ψ_{qtz} используем удельный объем начального вещества, которым в данном случае является коэсит, т. е. $V_{0\text{coe}}$. Далее имеем

$$\Psi_* = H_{0,298} + \int_{298}^T c_p dT - T \int_{298}^T \frac{c_p}{T} dT - TS_{0,298}.$$

Здесь $H_{0,298}$, кДж/моль и $S_{0,298}$, кДж/(моль · К) — удельные энтальпия и энтропия при $P = 0$, $T = 298$ К, $c_p = a + 10^{-5}bT + cT^{-2} + dT^{-1/2}$ кДж/(моль · К) — удельная теплоемкость.

Для коэсита $H_{0,298} = -908.17$, $S_{0,298} = 0.039$, $a = 0.1087$, $b = -0.4387$, $c = 0$, $d = -1.0725$. Для кварца $H_{0,298} = -910.8$, $S_{0,298} = 0.0415$, $a = 0.0979$, $b = -0.335$, $c = -636.2$, $d = -0.774$.

Для молярного объема коэсита и кварца (в кДж/(моль · кбар)) имеем

$$V_{\text{coe}} = 2.064 + 2.2 \cdot 10^{-5}(T - 298),$$

$$V_{\text{qtz}} = 2.269 + 8 \cdot 10^{-5}(T - 298).$$

Плотность ρ (в г/см³), необходимая для вычисления ε , связана с $V(T)$ как $\rho = 6.009/V(T)$.

Список литературы

- [1] ДОБРЕЦОВ Н.Л., КИРДЯШКИН А.Г., КИРДЯШКИН А.А. Глубинная геодинамика. 2-е изд. Дополн. и перераб. Новосибирск: Изд-во СО РАН, филиал ГЕО, 2001. 409 с.
- [2] SOBOLEV N.V., SHATSKY V.S. Diamond inclusions in garnets from metamorphic rocks: A new environment for diamond formation // Nature. 1990. Vol. 343. P. 742–746.
- [3] SHATSKY V.S., SOBOLEV N.V., VAVILOV M.A. Diamond-bearing metamorphic rocks of the Kokchetav massif (Northern Kazakhstan) // Ultrahigh Pressure Metamorphism / Ed. R. Coleman, X. Wang. Cambridge Univ. Press, 1995. P. 427–455.
- [4] MASSONNE H.-J. A new occurrence of microdiamonds in quartzfeldspathic rocks of the Saxonian Erzgebirge, Germany and their metamorphic evolution // Proc. of 7th Internat. Kimberlite Conf. 1999. Vol. 2. P. 533–539.
- [5] KORSAKOV A.V., SHATSKY V.S., SOBOLEV N.V., ZAYACHKOVSKY A.A. Garnet-biotite-clinozoisite gneisses: A new type of diamondiferous metamorphic rocks of the Kokchetav massif // Eur. J. Mineralogy. 2002. Vol.14. P. 915–929.

- [6] KORSAKOV A.V., HERMANN J. Silicate and carbonate melt inclusions associated with diamonds in deeply subducted carbonate rocks // *Earth and Planetary Sci. Lett.* 2006. Vol. 241. P. 104–118.
- [7] PERRAKI M., PROYER A., MPOSKOS E. ET AL. Raman micro-spectroscopy on diamond, graphite and other carbon polymorphs from the ultrahigh-pressure metamorphic kimi complex of the rhodope metamorphic province. NE Greece // *Ibid.* 2006. Vol. 241. P. 672–685.
- [8] PERRAKI M., KORSAKOV A.V., SMITH D.C., MPOSKOS E. Raman spectroscopic and microscopic criteria for the distinction of microdiamonds in ultrahigh-pressure metamorphic rocks from diamond in sample preparation materials // *Amer. Mineralogist.* 2009. Vol. 94. P. 546–556.
- [9] PARKINSON C.D., KATAYAMA I. Present-day ultrahigh-pressure conditions of coesite inclusions in zircon and garnet: Evidence from laser Raman microspectroscopy // *Geology.* 1999. Vol. 27. P. 979–982.
- [10] PARKINSON C.D. Coesite inclusions and prograde compositional zonation of garnet in whiteschist of the HP-UHPM Kokchetav massif, Kazakhstan: A record of progressive UHP metamorphism // *Lithos.* 2000. Vol. 52. P. 215–233.
- [11] SOBOLEV N.V., FURSENKO B.A., GORYAINOV S.V. ET AL. Fossilized high-pressure from the earths deep interior — the coesite-in-diamond barometer // *Proc. of the National Academy of Sciences of the United States of America.* 2000. Vol. 97, No. 22. P. 11875–11879.
- [12] YE K., LIOU J.B., CONG B., MARUYAMA S. Overpressures induced by coesite-quartz transition in zircon // *Amer. Mineralogist.* 2001. Vol. 86. P. 1151–1155.
- [13] KORSAKOV A.V., HUTSEBAUT D., THEUNISSEN K. ET AL. Raman mapping of coesite inclusions in garnet from the Kokchetav Massif (Northern Kazakhstan) // *Spectrochimica Acta. Pt A.* 2007. Vol. 68. P. 1046–1052.
- [14] SMITH D.C. Coesite in clinopyroxene in the Caledonides and its implications for geodynamics // *Nature.* 1984. Vol. 310. P. 641–644.
- [15] CHOPIN C. Coesite and pure pyrope in high-grade blueschists of western alps: a first record and some consequences // *Contributions to Mineralogy and Petrology.* 1984. Vol. 86. P. 107–118.
- [16] KORSAKOV A.V., THEUNISSEN K., SMIRNOVA L.V. Intergranular diamonds derived from partial melting of crustal rocks at ultrahigh-pressure metamorphic conditions // *Terra Nova.* 2004. Vol. 16. P. 146–151.
- [17] GILLET P., INGRIN J., CHOPIN C. Coesite in subducted continental crust: P–T history deduced from an elastic model // *Earth and Planetary Sci. Lett.* 1984. Vol. 70. P. 426–436.
- [18] VAN DER MOLEN I., VAN ROERMUND H.L. The pressure path of solid inclusions in minerals: The retention of coesite inclusions during uplift // *Lithos.* 1986. Vol. 19. P. 317–324.
- [19] NISHIYAMA T. Kinetic modeling of the coesite-quartz transition in an elastic field and its implication for the exhumation of ultrahigh-pressure metamorphic rocks // *The Island Arc.* 1998. Vol. 7. P. 70–81.
- [20] ZHANG Y. Mechanical and phase equilibria in inclusion-host systems // *Earth and Planetary Sci. Lett.* 1998. Vol. 157. P. 209–222.
- [21] KORSAKOV A.V., ZHUKOV V.P., VANDENABEELE P. Raman-based geobarometry of ultrahigh pressure metamorphic rocks: An application, problems and perspective // *Analyt. and Bioanalyt. Chem.* 2010. P. 397:2739–2752.

- [22] KORSÁKOV A.V., DE GUSSEM K., ZHUKOV V.P. ET AL. Aragonite-calcite-dolomite relationships in UHPM polycrystalline carbonate inclusions from the Kokchetav Massif (Northern Kazakhstan) // Eur. J. Mineralogy. 2009. Vol. 21. P. 1301–1311.
- [23] KORSÁKOV A.V., PERRAKI M., ZHUKOV V.P. ET AL. Is quartz a potential indicator of ultrahigh-pressure metamorphism? Laser Raman spectroscopy of quartz inclusions in ultrahigh-pressure garnets // Ibid. 2009. Vol. 21. P. 1313–1323.
- [24] CAYZER N.J., ODAKE S., HARTE B., KAGI H. Plastic deformation of lower mantle diamonds by inclusion phase transformations // Ibid. 2008. Vol. 20. P. 333–339.
- [25] YAMAMOTO J., ANDO J., KAGI H. ET AL. In situ strength measurements on natural upper-mantle minerals // Phys. Chem. Minerals. 2008. Vol. 35. P. 249–257.
- [26] АСТАРИТА Д., МАРУЧЧИ Д. Основы гидромеханики неньютоновских жидкостей. М.: Мир, 1978. 309 с.
- [27] KATAYAMA I., KARATO S.-I. Effects of water and iron content on the rheological contrast between garnet and olivine // Phys. Earth and Planetary Interiors. 2008. Vol. 166. P. 57–66.
- [28] PERRILLAT J.P., DANIEL I., LARDEUX J.M., CARDON H. Kinetics of the coesite—quartz transition: Application to the exhumation of ultrahigh-pressure rocks // J. Petrology. 2003. Vol. 44. P. 773–788.
- [29] ЛЕЩУК А.А., НОВИКОВ Н.В., ЛЕВИТАС В.И. Термомеханическая модель фазового превращения графита в алмаз // Сверхтвердые материалы. 2002. № 1. С. 49–57.
- [30] MARSCHALL H.R., KORSÁKOV A.V., LUVIZOTTO G.L. ET AL. On the occurrence and boron isotopic composition of tourmaline in (ultra)high-pressure metamorphic rocks // J. Geol. Soc. London. 2009. Vol. 166. P. 811–823.
- [31] XU J., MAO H., HEMLEY R.J. The gem anvil cell: High-pressure behaviour of diamond and related materials // J. Phys.: Condensed Matter. 2002. Vol. 14. P. 11549–11552.
- [32] BARRON L.M., MERNAGH T.P., BARRON B.J. Using strain birefringence in diamond to estimate the remnant pressure on an inclusion // Australian J. Earth Sci. 2008. Vol. 55. P. 159–165.
- [33] HOLLAND T., POWELL R. An enlarged and updated internally consistent thermodynamic dataset with uncertainties and correlations: The system $K_2O-Na_2O-CaO-MgO-MnO-FeO-Fe_2O_3-Al_2O_3-TiO_2-SiO_2-C-H_2-O_2$ // J. Metamorphic Geology. 1990. Vol. 8. P. 89–124.

*Поступила в редакцию 19 марта 2010 г.,
с доработки — 11 мая 2010 г.*