

锆石形态的定量描述及其动力学分析*

汪 相

(南京大学地球科学系, 南京 210093)

摘要 锆石晶体的形态可以分解为 3 个独立的组成部分, 它们分别为由 $\{100\}$ 面和 $\{110\}$ 面构成的柱体形态、由 $\{211\}$ 面和 $\{101\}$ 面构成的锥体形态以及由柱体和锥体构成的延长形态. 为此, 这里提出了锆石的柱面指数、锥面指数和延长指数用于定量描述上述形态特征. 由于这些指数不仅适用于锆石颗粒外部形态的描述, 而且也可用于揭示锆石生长过程的形态演化规律, 故借助于该方法可以有效地运用晶体生长动力学理论进行锆石的形态标型性研究.

关键词 锆石 柱面指数 锥面指数 延长指数

人们早就发现在绝大多数岩浆岩中都存在着锆石晶体, 且经过漫长的地质作用以后它的原生特征仍然被保存了下来, 因而锆石被广泛用于岩石成因和同位素定年的研究. 为了确定锆石的成因属性, 许多地质学家已从锆石特殊的形态着手提出了一系列研究方法, 如锆石长度、宽度及其比值的频率分布曲线法^[1]、单一主轴法^[2]、锆石晶型分类法^[3,4], 以及近年来提出的一些锆石形态的定量描述方法^[5-7].

本文将在前人工作的基础上, 提出一条锆石形态定量研究的新思路. 首先, 我们将着重分析锆石形态的基本要素; 其次, 以系统的方式进行定量标准的规范, 从而建立一种简便、合理、全面的锆石形态的定量研究方法; 最后, 探讨各形态要素的动力学意义, 以揭示该方法的应用前景.

1 锆石的形态要素

锆石属于四方体心格子结构, 其理论上最可能出现的晶面为 $\{100\}$ 、 $\{110\}$ 、 $\{211\}$ 和 $\{101\}$ 4 种单形^[8](图 1(a)). 确实, 天然锆石的形态基本上是由上述 4 种单形任意组合而成的. 它的组合方式可以归纳为: 柱体在 $\{100\}$ 四方柱和 $\{110\}$ 四方柱之间变化, 其中间状态为 $\{100\} + \{110\}$ 的复四方柱聚形; 锥体在 $\{211\}$ 复四方双锥和 $\{101\}$ 四方双锥之间演化, 其中间状态为 $\{211\} + \{101\}$ 的复式双锥聚形. 其中, 由于柱体单形属于开形, 它的长度变化可以从零(即无柱体的双锥形锆石)至理论上的无穷大.

1.1 柱面指数(I_{pr})

锆石的柱体是由两组平行于 c 轴的 $\{100\}$ 面和 $\{110\}$ 面构成的. 因此, 这两个柱面的相对

大小实际上是由它们的宽度(分别以 $W_{|100|}$ 和 $W_{|110|}$ 表示, 图 1(b) 和图 1(c))大小决定的。所以, 只须定量地表明这两个柱面宽度的消长关系就可确定柱体的相对形态。为此, 本文建立锆石形态的第一个要素——柱面指数 (I_{pr}), 并用相应的计算公式定义为:

$$I_{pr} = \frac{W_{|110|}}{W_{|100|} + W_{|110|}}. \quad (1a)$$

据此, 无论柱体的宽度大小如何, 柱体的相对形态都可以通过 I_{pr} 的绝对数值准确地被表示出来。当柱体上 $\{110\}$ 面不发育时(即 $W_{|110|} = 0$), I_{pr} 等于 0; 相反, 当柱体上缺失 $\{100\}$ 面时(即 $W_{|100|} = 0$), I_{pr} 等于 1; 因此, 随着柱体上 $\{110\}$ 面的发育程度的提高(相对于 $\{100\}$ 面), 锆石晶体的 I_{pr} 由 0 至 1 不断地变大(参见图 2(b))。

由于柱面宽度 ($W_{|110|}$ 和 $W_{|100|}$) 和柱体宽度 (W_{pr} 和 W'_{pr}) 成正比关系, 即:

$$W_{pr} = W_{|110|} + 2\cos 45^\circ \times W_{|100|} = W_{|110|} + 1.414 W_{|100|},$$

$$W'_{pr} = W_{|100|} + 2\cos 45^\circ \times W_{|110|} = W_{|100|} + 1.414 W_{|110|}.$$

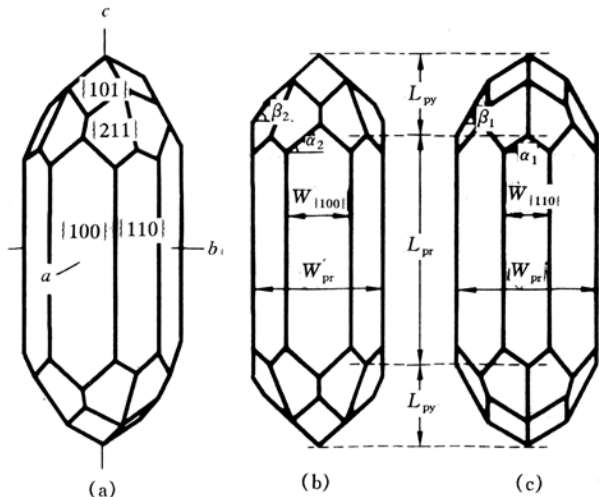


图 1 锆石晶体上 $\{100\}$ 、 $\{110\}$ 、 $\{211\}$ 和 $\{101\}$ 的聚形的立体形态(a)及其在平行 $\{100\}$ 面和平行 $\{110\}$ 面上投影的平面形态(分别为(b)和(c))示意图

$W_{|100|}$ 和 $W_{|110|}$ 分别为 $\{100\}$ 面和 $\{110\}$ 面的宽度; W'_{pr} 和 W_{pr} 分别为面对 $\{100\}$ 面和 $\{110\}$ 面时的柱体宽度; L_{pr} 和 L_{py} 分别为的柱体长度和锥体长度; α_1 , α_2 , β_1 和 β_2 分别为 $[\bar{1}11]$ 和 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 之间、 $[011]$ 和 $[010]$ 之间、 $[\bar{1}\bar{1}3]$ 和 $[110]$ 之间、 $[0\bar{1}2]$ 和 $[010]$ 之间的夹角, 其数值分别为 32.629° , 42.158° , 62.496° 和 61.091° 4 个常数

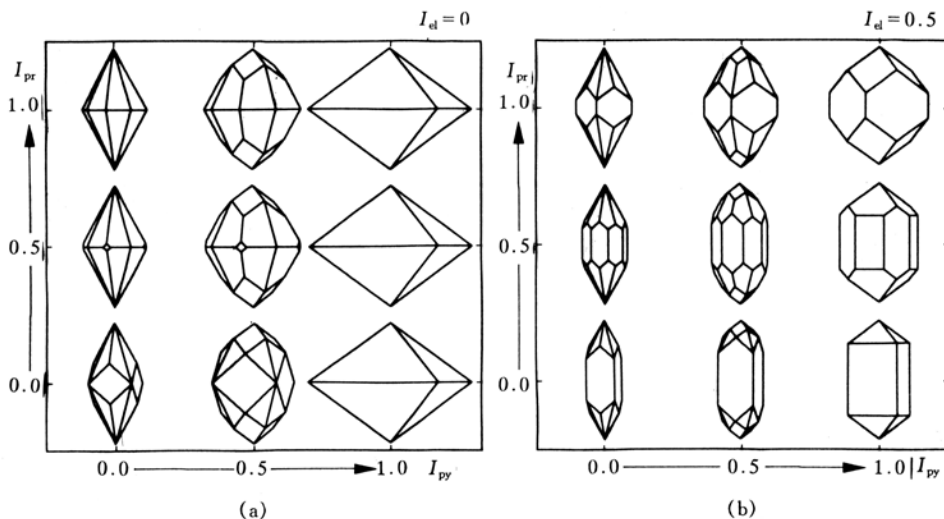


图 2 I_{el} 分别为 0(a) 和 0.5(b) 时, 锆石形态的 I_{pr} - I_{py} 演变示意图

上述公式可以转换为:

$$W_{|110|} = 1.414 W'_{pr} - W_{pr},$$

$$W_{|100|} = 1.414 W_{pr} - W'_{pr}.$$

所以, 锆石的柱面指数也可相等地表达为:

$$I_{pr} = \frac{3.415 W'_{pr} - 2.415 W_{pr}}{W'_{pr} + W_{pr}}. \quad (1b)$$

当柱体太短而导致 $\{100\}$ 面与 $\{110\}$ 面被锥面分隔开来时(如图 2(a)中左上角的晶体), 完整的柱面宽度已无法直观地被测定。然而, 柱体宽度仍然可以直接地被观察和鉴定。在此情况下, 锆石的柱面指数须通过(1b)式加以计算。

由于锆石生长过程中物理化学条件的演化, 在锆石内部从颗粒中心至边缘经常会形成一种同心状的环带构造。在锆石切片上, 通过电子萤光、裂变径迹、化学蚀刻等手段, 这种环带构造的轮廓线会凸现出来。显然, 在垂直 c 轴的定向切面上(图 3(a)), 我们可以自晶体中心向

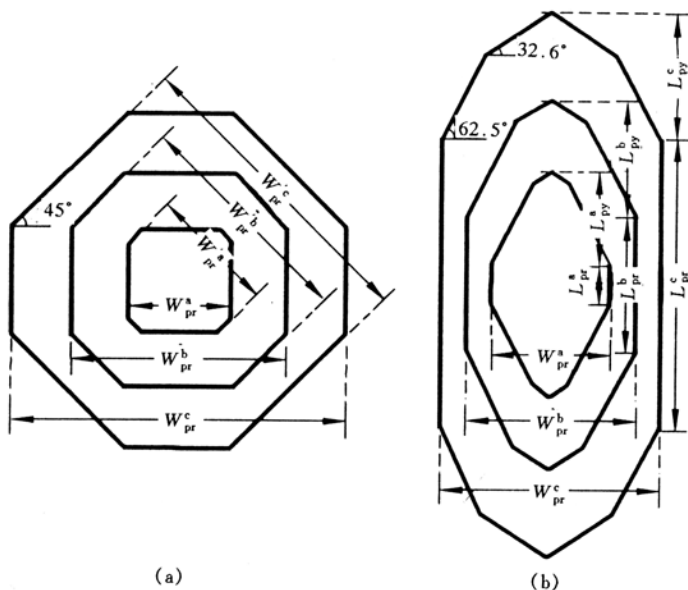


图 3 锆石晶体中垂直 c 轴(a)和平行 $\{110\}$ 面(b)的定向切面上由不同生长层(即 a, b, c 环带层)显示的锆石内部形态演变示意图

图中文字符号的意义同图 1

边缘逐带(如 a, b, c 环带层)测定柱面宽度或柱体宽度, 从而描述出锆石生长过程中柱面指数的变化规律, 进而推断相应结晶环境的演化过程。

1.2 锥面指数(I_{py})

在锆石的锥体上, $\{211\}$ 面和 $\{101\}$ 面之间并不存在一种平行关系(参见图 1)。但是, 我们却可以注意到这两个锥面的相对发育程度与锥体的长度完全成正比关系。客观上, 任何一个锥体的长度(L_{py})——其数值为 $\{110\}$ 面以上至锥顶的实际长度(图 4)——都只能在两个相应确定的极值之间变化: 极大值(M_{py})对应于只有 $\{211\}$ 面时的锥体长度, 而极小值(N_{py})则对应

于只有 $\{101\}$ 面时的锥体长度(图4)。如果锆石的柱体宽度(即等于锥体底面的宽度)被确定下来,相应的锥体长度的两个极值可以被分别预先求得:

$$M_{py} = \tan \beta_1 \times W_{pr}/2 = \tan 62.496^\circ \times W_{pr}/2 = 0.96 W_{pr},$$

$$N_{py} = \tan \alpha_1 \times W_{pr}/2 = \tan 32.629^\circ \times W_{pr}/2 = 0.32 W_{pr}.$$

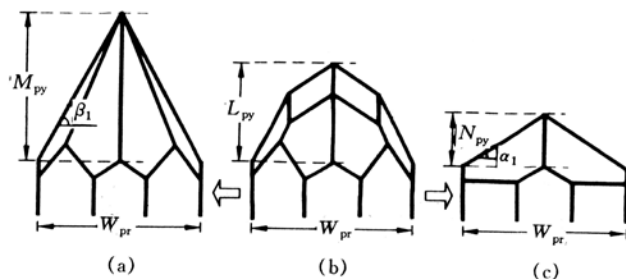


图4 锆石锥体在 $\{110\}$ 面上投影的形态演变示意图(图中文字符号的意义同图1)。

(a)锥体长度为最大值(M_{py})的 $\{211\}$ 锥体, (b)锥体长度为中间值(L_{py})的 $\{211\}$ 与 $\{101\}$ 复合锥体, (c)锥体长度为最小值(N_{py})的 $\{101\}$ 锥体

当我们得到锆石锥体长度的两个相应极值时,锥体上 $\{211\}$ 面相对 $\{101\}$ 面的发育程度就可以通过某一个在上述两个极值范围内变化的锥体长度来表示。为此,本文建立锆石形态的第二个要素——锥面指数(I_{py}),来表示锥体的相对形态。其相应的计算公式为:

$$I_{py} = \frac{M_{py} - L_{py}}{M_{py} - N_{py}} = \frac{0.96 W_{pr} - L_{py}}{0.64 W_{pr}}. \quad (2)$$

显然,当锥体上 $\{101\}$ 面不发育时(即 $L_{py} = M_{py}$), I_{py} 等于 0;相反,当锥体上缺失 $\{211\}$ 面时(即 $L_{py} = N_{py}$), I_{py} 等于 1;因此,随着锥体上 $\{101\}$ 面发育程度的增大(相对于 $\{211\}$ 面),锆石的 I_{py} 由 0 至 1 不断变大(参见图2)。

同样,在平行 $\{110\}$ 面并经过颗粒中心的切面上(参见图3(b)),通过锆石内部的环带构造轮廓线,我们也可以测定相应生长层(如 a, b, c 环带层)的锥体长度和柱体宽度,从而根据公式(2)计算出相应的锥面指数。因此,通过锆石颗粒或锆石群的不同生长阶段的锥面指数的演化趋势,可以揭示出控制锥面发育程度的结晶环境中某些物理化学条件的变化规律,从而确定锆石的成因属性。

1.3 延长指数(I_{el})

锆石上两个柱体单形之间与两个锥体单形之间的相对发育程度分别可以通过锆石的柱面指数和锥面指数被确定下来(见上述),但是,锆石的柱体与锥体之间的相对发育程度仍然是一个尚未标定的形态特征。事实上,锆石柱体的发育程度可以通过柱体长度(L_{pr})(其数值为 $\{110\}$ 面的两个顶点之间的距离,参见图1)和柱体宽度(W_{pr})反映出来,而锆石锥体的发育程度可以通过锥体长度(L_{py})和锥体的底部宽度(即柱体宽度)反映出来。综合言之,锆石的柱体与锥体之间的相对发育程度仅仅受到锆石的柱体长度、柱体宽度及锥体长度三个变量的制约。

由于在一定的柱体宽度条件下,锆石的锥体长度与锆石的锥面指数可以互相转换(见(2)式),因此在上述三个变量中唯有锆石的柱体长度和柱体宽度是两个尚未确定而又与锆石形态密切相关的独立变量。另一方面,由于锆石的锥体长度总在两个相应的极值(即 M_{py} 与 N_{py})之间变化,而后两者完全正比于锆石的柱体宽度(见上述),因此锆石颗粒的总长度变化主要地

受制于锆石柱体(属于开形)的长度变化. 为此, 本文把柱体长度和柱体宽度的比值定义为锆石形态的第三个要素——延长指数(I_{el}), 其计算公式表示如下:

$$I_{el} = \frac{L_{pr}}{W_{pr} + L_{pr}}. \quad (3)$$

由于锆石的柱体长度是一个无限可变的正值, 因此锆石的延长指数亦在 0 与 1 之间的范围内变化. 当锆石柱体不发育时, 即 $L_{pr} = 0$, 它呈现为一种无柱面(如图 2(a)中上侧和右侧的晶体)或柱面发育不完全(如图 2(a)中左下角的晶体, $\{100\}$ 面呈菱形状出现)的(复)四方双锥体, 此时 I_{el} 等于 0; 相反, 当锆石呈现为细针状体时, 即 L_{pr} 相对 W_{pr} 变得很大, I_{el} 趋于为 1. 因此, 锆石的延长指数在实际上反映了锆石的柱体与锥体的相对发育程度.

在平行 $\{110\}$ 面并经过颗粒中心的切面上(参见图 3(b)), 锆石内部的环带构造轮廓线同样地揭示出锆石生长各阶段(如 a, b, c 环带层)的柱体长度和柱体宽度的变化, 从而可以通过公式(3)计算出自中心向边缘的延长指数的变化规律. 作为一个独立的变量, 延长指数的变化规律也可以反映出锆石生长过程中某些特殊的结晶条件的演化规律.

综上所述, 锆石的柱面指数、锥面指数和延长指数分别限定了锆石晶体的柱面($\{100\}$ 与 $\{110\}$)、锥面($\{211\}$ 与 $\{101\}$)、柱体与锥体之间的相对发育程度. 换言之, 任何锆石的习性类型(即晶型)都可以通过上述 3 个形态指数进行定量描述(图 2).

2 锆石形态的动力学分析

锆石的形态要素分析表明, 锆石晶体的形态受制于 3 个不同方面的晶面发育的竞争关系, 即 $\{100\}$ 柱面与 $\{110\}$ 柱面的竞争、 $\{211\}$ 锥面与 $\{101\}$ 锥面的竞争, 以及柱面($\{100\}$ 面或 $\{110\}$ 面)与锥面($\{211\}$ 面或 $\{101\}$ 面)的竞争. 根据晶体生长理论, 晶面的发育程度与它的生长速度成负相关性, 因此晶体上 3 个形态指数的变化实际上是由相邻晶面的生长速度的差异性决定的.

根据面角守恒定律, 锆石晶体上每种单形的两个相对晶面(即 (hkl) 和 $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$)之间的距离($D_{|hkl|}$)可以通过实测的晶体尺寸(如 W_{pr} , W'_{pr} , L_{pr} , L_{py} 等)计算得到:

$$\begin{aligned} D_{|100|} &= W'_{pr} = W_{|100|} + 2\cos 45^\circ W_{|110|} = W_{|100|} + 1.414 W_{|110|}, \\ D_{|110|} &= W_{pr} = W_{|110|} + 2\cos 45^\circ W_{|100|} = W_{|110|} + 1.414 W_{|100|}, \\ D_{|211|} &= \sin \gamma \times (L_{pr} + 2M_{py}) = \sin \gamma \times (L_{pr} + \tan \beta_1 \times W_{pr}) = \\ &\quad \sin 26.286^\circ \times [L_{pr} + \tan 62.496^\circ \times (W_{|110|} + 2\cos 45^\circ W_{|100|})] = \\ &\quad 0.443 L_{pr} + 0.851 W_{|110|} + 1.203 W_{|100|}, \\ D_{|101|} &= \cos \alpha_2 \times (L_{pr} + 2L_{py}) = \cos 42.158^\circ \times (L_{pr} + 2L_{py}) = \\ &\quad 0.741 L_{pr} + 1.482 L_{py}, \end{aligned} \quad (4)$$

其中, α_2 , γ 分别为 $\{101\}$ 面、 $\{211\}$ 面与 c 轴之间的夹角, β_1 为 $[\bar{1}13]$ 晶棱与 $[110]$ 晶棱之间的夹角. 从上述四个公式中, 我们可以分别转换得到以 $D_{|hkl|}$ 为自变量的 $W_{|100|}$, $W_{|110|}$, L_{py} , L_{pr} 和 W_{pr} 等为因变量的方程式, 并代入(1)~(3)式, 从而得到下列一组新的、关于形态指数的方程式:

$$I_{pr} = \frac{3.415 D_{|100|} - 2.415 D_{|110|}}{D_{|100|} + D_{|110|}}, \quad (5)$$

$$I_{py} = \frac{1.761 D_{|211|} - 1.053 D_{|101|}}{D_{|110|}}, \quad (6)$$

$$I_{el} = \frac{D_{|211|} - 0.851 D_{|110|}}{D_{|211|} - 0.408 D_{|110|}}. \quad (7)$$

由于 $D_{|hkl|}$ 是一个垂直于 $\{hkl\}$ 面的距离矢量, 因此它能够表达成以 $\{hkl\}$ 面的平均生长速度 ($V_{|hkl|}$) 为函数的关系式:

$$D_{|hkl|}/2 = V_{|hkl|} \times t \quad (t \text{ 为 } \{hkl\} \text{ 面自中心至边缘的生长时间}).$$

将 $D_{|hkl|}$ 代入(5)~(7)式, 我们就可以得到以晶面生长速度为函数的 3 个形态指数:

$$I_{pr} = \frac{3.415 V_{|100|} - 2.415 V_{|110|}}{V_{|100|} + V_{|110|}}, \quad (8)$$

$$I_{py} = \frac{1.761 V_{|211|} - 1.053 V_{|101|}}{V_{|110|}}, \quad (9)$$

$$I_{el} = \frac{V_{|211|} - 0.851 V_{|110|}}{V_{|211|} - 0.408 V_{|110|}}. \quad (10)$$

在(8)和(10)式中, 我们可以看到 I_{pr} 和 I_{el} 的大小直接地取决于两个相应的相邻晶面的生长速度之差, 它们分别与 $V_{|100|}$ 与 $V_{|110|}$ 之差和 $V_{|211|}$ 与 $V_{|110|}$ 之差成正比关系. 然而, 在公式(9)中, 我们却发现 I_{py} 的大小不仅正比于 $\{211\}$ 面与 $\{101\}$ 面的生长速度之差, 而且反比于 $\{110\}$ 面的生长速度. 事实上, $\{211\}$ 面与相邻的 $\{101\}$ 面和 $\{110\}$ 面(或相同意义的 $\{100\}$ 面)都呈钝角相接, 故在分析锆石的 I_{py} 演化规律时, 必须分别考虑 $\{101\}$ 面和 $\{110\}$ 面的生长速度对 $\{211\}$ 面发育程度的制约作用.

显然, 在同一个晶体切面上(图 3), 我们可以通过测定一组 $D_{|hkl|}^x$ (上标 x 代表不同的 a , b , c 环带层), 来分析 I_y^x (下标 y 代表 pr , py 或 el) 的演化趋势. 当 $D_{|hkl|}^b$ 与 $D_{|hkl|}^a$ 之差值为一定时, 则通过 I_y^b 与 I_y^a 之差值可以表明单位距离内相邻晶面的生长速度的变化程度. 由于晶面的生长速度主要取决于结晶环境的动力学因素(如熔体的过冷度、杂质元素的含量等)的变化^[7,9], 因此具有较大的 I_y^b 与 I_y^a 之差值的晶体反映了其结晶环境的变化较为显著.

由于锆石的 3 个形态指数是彼此独立的, 因此它们的变化很可能分别受到不同的结晶条件的影响. 事实上, 在花岗岩的锆石群中经常可以见到柱面形态变化而锥面形态不变, 或者出现相反的情况^[4,7]. 因此, 综合 3 个指数各自的变化规律, 对于揭示锆石生长过程中岩浆的热力学环境具有潜在的研究价值.

3 结语

基于锆石在岩石学、年代学、沉积学及宝石学等领域的研究中具有一定的重要性, 一个准确的锆石形态研究方法是不可或缺的. 本文经过大量的镜下观察和资料对比, 提出了锆石的柱面指数、锥面指数和延长指数 3 个锆石形态的基本要素, 用于定量地描述任何锆石晶体的相对形态, 以及进行相应的统计分析.

该定量方法不仅适用于锆石的外部形态的描述, 而且也适用于定向切面上反映出来的锆石内部形态的研究, 从而可以揭示出锆石生长的动力学过程. 如果说锆石的体积大小尚涉及到晶体的生长速度和生长时间的话, 那么它的相对形态则纯粹是由锆石结晶时的物理化学条

件所决定的。因此,该定量研究方法的建立将使得锆石成为相关研究领域中的一个更为重要的标型矿物。

参 考 文 献

- 1 Poldervaart A. Zircons in rocks. 2. Igneous rocks. *Am J Sci*, 1956, 254: 521~554
- 2 Larsen L H, Poldervaart A. Measurement and distribution of zircons in some granitic rocks of magmatic origin. *Mineral Mag*, 1957, 31: 544~564
- 3 Pupin J P, Turco G. Une typologie originale du zircon accessoire. *Bull Soc Fr Mineral Cristallogr*, 1972, 47: 31~42
- 4 Pupin J P. Zircon and granite petrology. *Contrib Mineral Petrol*, 1980, 73: 207~220
- 5 Matsuura A, Aoki Y. A new method for quantitative representation of zircon morphology. *N Jb Miner Mh*, 1989, H7: 309~319
- 6 Vavra G. A guide to quantitative morphology of accessory zircon. *Chem Geol*, 1993, 93: 15~28
- 7 Vavra G. Systematics of internal zircon morphology in major Variscan granitoid types. *Contrib Mineral Petrol*, 1994, 117: 331~344
- 8 Hartman P. The morphology of zircon and potassium dihydrogenphosphate in relation to the crystal structure. *Acta Crystallogr*, 1956, 9: 721~729
- 9 Sunagawa I. Morphology of minerals, In: *Morphology of Crystals* (ed. Sunagawa I.). Tokyo: Terra Sci Pub Com, 1987. 63~105