doi:10.3969/j.issn.2097-0013.2021.02.010

Pb-Sr-Nd-Hf 同位素参数计算及程序设计

路远发,李文霞*

LU Yuan-Fa, LI Wen-Xia*

(长江大学资源与环境学院,武汉 430100)

(College of Resources and Environment, Yangtze University, Wuhan 430100, Hubei, China)

摘要:Pb、Sr、Nd、Hf 同位素都是放射性成因的重稳定同位素,地质过程中不发生同位素分馏,因而其同位素组成只与来源有关而与过程无关。这些同位素组成是成岩(成矿)物质来源及其构造环境判别的重要标志,特别是在研究壳幔分离与壳幔相互作用中起着不可替代的作用。由于这些参数的计算涉及相对复杂的公式推导,许多地质工作者并未系统学习过同位素地球化学理论,在对公式与参数的理解上难免会出现偏差,导致数据处理错误。本文对铅-锶-钕-铪同位素的相关参数以及这些参数的计算公式作一全面的介绍,在此基础上,作者应用 Excel VBA 设计了一套计算机程序。该程序界面友好、使用方便、结果可靠。 关键词:铅同位素;锶同位素;钕同位素;铪同位素;参数计算;计算程序 中图分类号: P736.4+4 文献标识码:A 文章编号:2097-0013(2021)02-0233-13

Lu Y F and Li W X. Calculation and Program Design for Pb-Sr-Nd-Hf Isotopic Parameters. *South China Geology*, 2021, 37(2):233-245.

Abstract: Pb, Sr, Nd and Hf isotopes are heavy stable isotopes of radioactive origin, and occurs no isotopic fractionation in geological process, so their isotopic compositions are only related to the source. Therefore, these isotopic compositions are important indicators of material source and tectonic setting, especially in the study of crust-mantle separation and interaction. Some geologists have not systematically studied the theory of isotopic geochemistry, and the calculation of the parameters of those isotopic compositions involves the relatively complex formula derivation, which inevitably leads to errors in data processing in the understanding of formulas and parameters. This paper introduced the related parameters of Pb, Sr, Nd and Hf isotopes, and the calculation formulas of these parameters. On this basis, a set of computer program is designed by using Excel VBA which is user-friendly, convenient, reliable.

Key word: lead isotopes; strontium isotopes; neodymium isotopes; hafnium isotopes; isotopic parameters; computer program

收稿日期:2021-4-6;修回日期:2021-5-5

作者简介:路远发(1959—),男,教授,研究方向为岩矿地球化学与同位素地球化学,E-mail: lyuanfa@vip.163.com 通讯作者:李文霞(1978—),女,博士,讲师,研究方向为岩石地球化学,E-mail: visalee2013@126.com

1前言

Pb、Sr、Nd、Hf同位素都是重稳定同位素,地质 过程中不发生同位素分馏,因而其同位素组成只与 来源有关而与过程无关。同时,这些稳定同位素也 都是放射性成因同位素,其同位素组成与所处地质 环境地球化学特征(如U/Pb比、Sm/Nd比和Lu/Hf 比等)及地质演化历史有关。由于不同区域、不同构 造环境的岩石/矿物地球化学特征及演化历史不 同,因此这些同位素组成就成了物质来源与构造环 境判别的重要标志,在研究壳幔分离与壳幔相互作 用中起着不可替代的作用,倍受广大地学工作者的 重视,使之成为当前地球科学的热点之一,相关成 果与研究论文不胜枚举。

随着 TIMS、LA-MC-ICP-MS、离子探针技术的 发展与普及,当前同位素分析测试技术已经有了很 大的提高。但是,同位素实验室给出的结果(同位 素比值)所反映的地质信息非常有限,更多的信息 (参数)需要通过数据处理来提取。因此,同位素数 据的精度不仅仅取决于实验室的测试精度,同时也 取决于数据处理是否正确。不正确的处理方法当然 得不到正确的结果,而用这些不准确、甚至错误的 数据来讨论地质作用,就很难保证研究结果的正确 性。然而,当前我国地学期刊中的同位素数据处理 水平参差不齐,存在不少错误,如个别论文中同位 素初始比值比测试值还要高、锶同位素初始比值 (校正值)甚至低于 BABI 值等。当然,这些显而易 见的错误是极少数的,更为普遍的是那些难以识别 的隐性错误(虽与正确的结果有一定的差异,但不 经过验算不易察觉)。究其原因,是目前国内还缺少 一个统一的数据处理软件,各位专家多在按自己的 理解、用自己的方法处理数据。由于同位素数据处 理涉及相对复杂的公式推导,而该学科的成熟与普 及时间并不长,许多科学家并未系统学习讨同位素 地球化学的理论,因而在理解上难免会出现偏差, 导致数据处理错误。为此,本文对铅-锶-钕-铪同 位素的相关参数以及这些参数的计算公式作一个 全面的介绍,在此基础上,给出笔者设计的计算机 程序,希望能给国内学者提供一个统一的数据处理 平台。

2 计算原理

2.1 铅 (Pb) 同位素参数

2.1.1 铅同位素组成与增长方程

自然界中铅有 8 种同位素,其中 4 种是放射性 同位素,4 种是稳定同位素。4 种放射性铅同位素 是 ²¹⁰Pb、²¹¹Pb、²¹²Pb 和 ²¹⁴Pb,它们分别是 ²³⁸U、²³⁵U、 ²³²Th 三个衰变系列的中间产物,即铀系中的 ²¹⁰Pb 和 ²¹⁴Pb,锕系中的 ²¹¹Pb 和钍系中的 ²¹²Pb。除 ²¹⁰Pb 的半衰期较长 (T_{1/2}=22.3a) 外,其他几个放射性同 位素半衰期都很短。这些放射性铅同位素的丰度都 很低,相对于稳定的铅同位素可以忽略不计。

铅的四种稳定同位素是²⁰⁴Pb、²⁰⁶Pb、²⁰⁷Pb、²⁰⁸Pb,其中²⁰⁴Pb是非放射成因同位素,自形成至今, 其同位素丰度保持不变。²⁰⁶Pb、²⁰⁷Pb、²⁰⁸Pb分别是²³⁸U、²³⁵U和²³²Th衰变系列的最终产物,丰度随年龄和U、Th、Pb的含量变化而变化。

$${}^{238}_{92}U \longrightarrow {}^{206}_{82}Pb^* + 8\alpha + 6\beta^- + Q$$
(1)

$${}^{235}_{92}U \longrightarrow {}^{207}_{82}Pb^* + 7 \alpha + 4 \beta^- + Q$$
(2)

$${}^{32}_{90}U \longrightarrow {}^{208}_{82}Pb^* + 6\alpha + 4\beta^- + Q$$
(3)

相应的 ²⁰⁶Pb、²⁰⁷Pb、²⁰⁸Pb 的增长方程为:

$$\binom{^{206}Pb}{^{204}Pb}_{s} = \binom{^{206}Pb}{^{204}Pb}_{i} + \binom{^{238}U}{^{204}Pb}_{s}(e^{\lambda_{238}t} - 1)$$
(4)

$$\binom{207Pb}{204Pb}_{s} = \binom{207Pb}{204Pb}_{i} + \binom{235U}{204Pb}_{s} (e^{\lambda_{235}t} - 1)$$
(5)

$$\frac{\binom{208}{204}Pb}{\binom{204}{204}Pb}_{s} = \binom{208}{\frac{208}{204}Pb}_{i} + \binom{232}{\frac{232}{204}Pb}_{s} (e^{\lambda_{232}t} - 1)$$
(6)

式中下标 S 代表样品的测定值(可以省略), i 代表初始值, λ₂₃₈ 代表²³⁸U 的衰变常数, 余类推, t 代表矿物(岩石)的形成年龄, 下同。

2.1.2 铅同位素主要参数

2.1.2.1 μ 值和 υ 值

定义式为: $\mu = {}^{238}U/{}^{204}Pb, v = {}^{235}U/{}^{204}Pb$

由 (4) 式可知, 在一个 μ 值一定的体系中, 从 地球形成演化到现在铅的同位素组成应为:

$$\frac{^{206}Pb}{^{204}Pb} = a_0 + \mu \left(e^{\lambda_{238} \mathrm{T}} - 1\right)$$
(7)

式中 *a*₀ 为地球形成时的 ²⁰⁶Pb/²⁰⁴Pb 比值,下文 中的 *b*₀ 和 *c*₀ 则分别代表地球形成时的 ²⁰⁷Pb/²⁰⁴Pb 和 ²⁰⁸Pb/²⁰⁴Pb 比值,T 为地球的形成年龄。如果从 t 时刻开始演化到现在,则有:

$$\frac{^{206}Pb}{^{204}Pb} = \left(\frac{^{206}Pb}{^{204}Pb}\right)_{t} + \mu(e^{\lambda_{238}t} - 1)$$
(8)

由于铅同位素研究的是普通铅,即是t时刻的 铅同位素组成,即从地球形成演化到t时刻的铅(并 不是从地球形成演化到现在积累的铅),所以有:

$$\frac{^{206}Pb}{^{204}Pb} = a_0 + \mu(e^{\lambda_{238}T} - 1) - \mu(e^{\lambda_{238}t} - 1)$$
$$= a_0 + \mu(e^{\lambda_{238}T} - e^{\lambda_{238}t})$$
$$\mu = \frac{(^{206}Pb/^{204}Pb)_t - a_0}{e^{\lambda_{238}T} - e^{\lambda_{238}t}}$$
(9)

对于普通铅(不含U的矿物、岩石,或虽含U 但与铅相比可以忽略不记)来说:

$$\mu = \frac{({}^{206}Pb/{}^{204}Pb)_{5} - a_{0}}{e^{\lambda_{238} \mathrm{T}} - e^{\lambda_{238} \mathrm{T}}}$$
(10)

类似公式(9),我们可以得到:

$$\binom{2^{07}Pb}{2^{04}Pb}_{t} = b_{0} + v(e^{\lambda_{235}T}-1) - v(e^{\lambda_{235}t}-1)$$

 $= b_{0} + v(e^{\lambda_{235}T}-e^{\lambda_{235}t})$ (11)
 $v = \frac{\binom{2^{07}Pb}{2^{04}Pb}_{s}-b_{0}}{e^{\lambda_{235}T}-e^{\lambda_{235}t}}$ (12)

因²³⁸U/²³⁵U=137.88,因此υ=μ/137.88,υ不具有 独立性,完全可以用μ来代替,现在已很少使用。

ω 的定义式为:ω=²³²Th/²⁰⁴Pb
类似于公式 (9),我们可以得到

$$\binom{2^{08}Pb}{2^{04}Pb}_{t} = c_{0} + ω(e^{\lambda_{232}T}-1) - ω(e^{\lambda_{232}t}-1)$$

 $= c_{0} + ω(e^{\lambda_{232}T}-e^{\lambda_{232}t})$ (13)
 $\binom{2^{08}Pb}{2^{04}Pb}_{s} - c_{0}$ (14)

$$\omega = \frac{({}^{\lambda C}Pb/{}^{\lambda C}Pb)_{S}{}^{-}c_{0}}{e^{\lambda_{232}}{}^{T}{}-e^{\lambda_{232}}{}^{t}}$$
(14)

2.1.2.3 Th/U 比值

首先,应该知道,同位素比值是摩尔分数比,而 Th/U 比值是质量分数比,因此计算过程中要特别 注意将 U、Th 的摩尔分数转换成质量分数 w(U) 和 w(Th)。

由于U主要由²³⁵U、²³⁸U两个同位素构成,且²³⁸U/²³⁵U=137.88,其原子量为238.03,由此可得:

w(U)=²³⁸U×(138.88/137.88)×238.03×1000 Th虽然有6种天然放射性同位素:²³²Th、²²⁸Th、 ²³⁰Th、²³⁴Th、²²⁷Th和²³¹Th。除²³²Th外,其余5种为
²³⁸U、²³⁵U和²³²Th三个衰变系列的中间产物。由于
这些放射性同位素的丰度值非常低,半衰期又十分短,因此一般将²³²Th的丰度值作为100%。

$$w(Th) = {}^{232}Th \times 232.038 \times 1000$$

$$\frac{\text{Th}}{\text{U}} = \frac{137.88}{138.88} \cdot \frac{^{232}Th}{^{238}U} \cdot \frac{232.038}{238.03}$$
$$= \frac{137.88}{138.88} \cdot \frac{^{232}Th^{/204}Pb}{^{238}U^{/204}Pb} \cdot \frac{232.038}{238.03}$$
$$= 0.9678 \cdot \omega/\mu \tag{15}$$

2.1.2.4 单阶段模式年龄 (t_{CDT})

模式年龄作为成岩-成矿年龄来使用已经不 被认可,但仍不失为一个重要的铅同位素参数,如 华南的铅锌矿床,成因不同其模式年龄也不同^[1]。 因此,模式年龄特别是单阶段模式年龄仍是学者们 常用的参数之一。

单阶段模式年龄是从地球形成时的原始铅开 始,按一定的μ值进行演化到脱离该U-Pb体系(不 再接受放射性铅的积累)的年龄。地球原始铅取自 Canyon Diablo 铁陨石中的陨硫铁(参数参见表 1), 2) 因此本文用 t_{CDT} 表示单阶段模式年龄,以便与两阶 段模式年龄相区别。

联立公式 (9) 和 (11),得

$$\frac{\binom{207Pb}{204}Pb}{c^{206}Pb}_{s}-b_{0}}{\binom{206}Pb}_{s}-a_{0}} = \frac{^{235}U}{^{238}U} \cdot \frac{e^{\lambda_{235}T}-e^{\lambda_{235}t_{CDT}}}{e^{\lambda_{238}T}-e^{\lambda_{238}t_{CDT}}}$$

$$= \frac{1}{^{137.88}} \cdot \frac{e^{\lambda_{235}T}-e^{\lambda_{235}t_{CDT}}}{e^{\lambda_{238}T}-e^{\lambda_{238}t_{CDT}}}$$
(16)

由上式可以看出,只要测得²⁰⁶Pb/²⁰⁴Pb和²⁰⁷Pb/²⁰⁴Pb值,就可以算出模式年龄*t_{cDT}*。式(16)是一个超越方程,手工是无法获得其解的,但用计算机计算已不再是难题。

2.1.2.5 两阶段模式年龄 (tsk)

Stacey 和 Kraners^[2]提出了 Pb 同位素两阶段 演化模式。他们认为第一阶段从 45.7 亿年开始至 37 亿年,在 37 亿年时地球发生分异事件,从 37 亿 年至现在为第二阶段。

类似于单阶段模式年龄,我们可以获得两阶段 模式年龄(t_{sk})的计算公式如下:

$$\frac{\binom{207}{Pb}\binom{204}{Pb}_{S}-b_{1}}{\binom{206}{Pb}\binom{204}{Pb}_{S}-a_{1}} = \frac{235}{238}\frac{U}{U} \cdot \frac{e^{\lambda_{235}\,\mathrm{T}_{1}}-e^{\lambda_{235}\,\mathrm{I}_{5K}}}{e^{\lambda_{238}\,\mathrm{T}_{1}}-e^{\lambda_{238}\,\mathrm{I}_{5K}}}$$

该公式与单阶段模式年龄公式基本一致,所 不同的是起始时间和初始比值不同,相关参数详 见表1。

2.1.2.6 $\triangle \alpha , \triangle \beta , \triangle \gamma$

$$\Delta \alpha = \left[\frac{\binom{2^{06}Pb}{2^{04}Pb}_{S}}{\binom{2^{06}Pb}{2^{04}Pb}_{M}} - 1\right] \times 1000$$
(18)

$$\Delta \beta = \left[\frac{\binom{207}{Pb}/\frac{204}{Pb}}{\binom{207}{Pb}/\frac{204}{Pb}}_{M} - 1\right] \times 1000$$
(19)

$$\Delta \gamma = \left[\frac{(^{208}Pb/^{204}Pb)_S}{(^{208}Pb/^{204}Pb)_M} - 1\right] \times 1000$$
(20)

式中右下角标,S为普通铅的测定结果,M为 同时期地幔铅。某一时间(t)地幔值可根据现代地 幔值(参见表1),按公式(4)~(6)进行计算。关于年 龄t,计算时优先使用给定的年龄值,如果缺少年龄 值,则以单阶段模式年龄值代之,如果单阶段模式 年龄值 <0,则取 t=0Ma,其中以给定年龄的计算结 果最为可靠。如果缺少样品的形成年龄,也可大致 估计一个年龄值,如已知样品采自燕山早期花岗 岩体,可估计年龄160 Ma,可能比使用模式年龄 更可靠。

 $2.1.2.7 V_1, V_2$

铅同位素组成的一大特点就是同时有 ²⁰⁶Pb/²⁰⁴Pb、²⁰⁷Pb/²⁰⁴Pb、²⁰⁸Pb/²⁰⁴Pb 三组同位素比值, 转换成相对于同时代地幔铅的千分差为 $\Delta \alpha \ \Delta \beta$ 和 $\Delta \gamma$ 。在普通的直角坐标图中,一次只能使用两 个变量。朱炳泉等^[3]、常向阳等^[4,5]通过拓扑分析, 将 $\Delta \alpha - \Delta \beta - \Delta \gamma$ 三维坐标图中的点投影到下列 回归平面中:

 $\triangle \gamma = a + b \cdot \triangle \alpha + c \cdot \triangle \beta$

在该回归平面中 Δ α , Δ β 的投影点的坐标 变换为:

$$\Delta \alpha_{p} = \frac{(1+c^{2})\Delta\alpha + b(\Delta\gamma - c \cdot \Delta\beta - a)}{1+b^{2}+c^{2}}$$
$$\Delta \beta_{p} = \frac{(1+b^{2})\Delta\beta + c(\Delta\gamma - b \cdot \Delta\alpha - a)}{1+b^{2}+c^{2}}$$

 $\Delta \gamma_p = a + b \cdot \Delta \alpha_p + c \cdot \Delta \beta_p$

将 △ 值回归平面强制通过 0 点 (即地幔源的 点), 可得 *a*=0, *b*=2.0367, *c*=-6.143

在该回归平面中进一步建立通过源点的新二 维直角坐标系 (V₁, V₂),则新坐标值为^[5]:

$$V_{1} = \frac{b \Delta \gamma_{p} + \Delta \alpha_{p}}{\sqrt{1 + b^{2}}}$$
(21)

$$V_2 = \frac{\sqrt{1+b^2+c^2}}{\sqrt{1+b^2}} \Delta \beta_p \tag{22}$$

将常数*a*、*b*、*c*的数值代入到公式(19)和(20) 中,可得如下近似计算式:

 $V_1 \approx 0.441 \Delta \alpha_p + 0.898 \Delta \gamma_p \tag{23}$

$$V_2 \approx 2.8862 \Delta \beta_p \tag{24}$$

2.1.2.8 初始比值 (²⁰⁶Pb/²⁰⁴Pb)_i、(²⁰⁶Pb/²⁰⁴Pb)_i、(²⁰⁶Pb/²⁰⁴Pb)_i

初始比值,也称校正值,是扣除矿物(岩石) 形成后放射性成因铅后的铅同位素比值。由公式 (4)~(6)可得:

$$\frac{2^{206}Pb}{2^{04}Pb}_{i} = \left(\frac{2^{06}Pb}{2^{04}Pb}\right)_{s} - \frac{2^{38}U}{2^{04}Pb} \left(e^{\lambda_{238}t} - 1\right)$$
(25)

$$\frac{\binom{207}{204}Pb}{\binom{204}{204}Pb}_{i} = \binom{207}{\frac{204}{204}Pb}_{s} - \frac{\frac{235}{204}U}{\frac{204}{204}Pb} \left(e^{\lambda_{235}t} - 1\right)$$
(26)

$$\binom{208Pb}{204Pb}_{i} = \binom{208Pb}{204Pb}_{s} - \frac{232Th}{204Pb} \left(e^{\lambda_{232}t} - 1\right)$$
(27)

由上式可以看出,计算初始值关键是要求得²³⁸U,²³⁵U,²³²Th和²⁰⁴Pb的值。计算步骤如下:

① n(²⁰⁴Pb) 值 (简作 ²⁰⁴Pb,下同)的计算

铅的四个同位素之间遵循下列关系

$$p(^{204}\text{Pb}) + p(^{206}\text{Pb}) + p(^{207}\text{Pb}) + p(^{208}\text{Pb}) = 1$$
 (28)

式中 p(²⁰⁴Pb),p(²⁰⁶Pb),p(²⁰⁷Pb),p(²⁰⁸Pb) 分别代 表 ²⁰⁴Pb,²⁰⁶Pb,²⁰⁷Pb,²⁰⁸Pb 在总铅中所占的比例 (摩 尔分数),由公式 (19) 可得:

 $p(^{204}\text{Pb}) = 1/(^{206}\text{Pb}/^{204}\text{Pb} + ^{207}\text{Pb}/^{204}\text{Pb} + ^{208}\text{Pb}/^{204}\text{Pb} + 1)$

总铅的摩尔数:n(Pb)=w(Pb)/207.2×1000

 ${}^{204}\text{Pb} = n(\text{Pb}) \times p({}^{204}\text{Pb})$

②²³⁵U、²³⁸U的计算

 $n(U) = w(U)/238.03 \times 1000;^{238}U = n(U) \times$

 $(137.88/138.88);^{235}U=n(U) \times (1/138.88)$

③²³²Th 的计算

 232 Th= w(Th)/232.038 × 1000

由上述三步,我们就可以求得样品的²³⁵U/²⁰⁴Pb、²³⁸U/²⁰⁴Pb和²³²Th/²⁰⁴Pb,然后根据公式(25)~(27)求得各同位素比值的初始值。至于公式(25)~(27)中的*t*,一定要用样品形成的年龄而不是模式年龄。

2.2 锶 (Sr) 同位素参数

2.2.1 Sr 同位素组成及 ⁸⁷Sr 增长方程

自然界 Rb 有⁸⁵Rb 和⁸⁷Rb 两种同位素,分别 占 72.15% 和 27.85%。Sr 有⁸⁸Sr、⁸⁷Sr、⁸⁶Sr 和⁸⁴Sr 四 个同位素,其所占的比例分别为:82.56%,7.02%, 9.86% 和 0.56%;其中⁸⁷Sr 是放射性成因的,其由母 体同位素⁸⁷Rb 通过一个 β⁻衰变而来:

$${}^{87}_{37}$$
Rb → ${}^{87}_{37}$ Sr+ β + γ + Q
其对应的增长方程为:

$$\binom{^{87}Sr}{^{86}Sr}_{s} = \binom{^{87}Sr}{^{86}Sr}_{i} + \binom{^{87}Rb}{^{86}Sr}_{s}(e^{\lambda_{87}t}-1)$$
(29)

2.2.2 Sr 同位素组成的主要参数

由公式 (20) 可得:

$$\binom{{}^{87}Sr}{{}^{86}Sr}_{i} = \binom{{}^{87}Sr}{{}^{86}Sr}_{s} - \binom{{}^{87}Rb}{{}^{86}Sr}_{s} (e^{\lambda_{87}t} - 1)$$
(30)

在样品没有测试 $\left(\frac{8^{\circ}Sr}{8^{\circ}Sr}\right)_{s}$ 比值的时候,需要通过

Rb、Sr含量来进行换算,其中:

$$n(^{6'}\text{Rb}) = w(\text{Rb})/85.4678 \times 1000 \times 0.2785$$
$$n(^{86}\text{Sr}) = w(\text{Sr})/87.62 \times 1000 \times 0.0986$$
$$\left(\frac{^{87}Rb}{^{86}\text{Sr}}\right)_{s} = \frac{w(\text{Rb})}{w(\text{Rb})} \times 2.89567$$
(31)

2.2.2.2 ε_{Sr}

$$\varepsilon_{Sr}(0) = \left[\frac{\binom{8^7 Sr}{8^6 Sr}_{S}}{\binom{8^7 Sr}{8^6 Sr}_{UR}} - 1\right] \times 10^4$$
(32)
$$\varepsilon_{Sr}(t) = \left[\frac{\binom{8^7 Sr}{8^6 Sr}_{t}}{\binom{8^7 Sr}{8^6 Sr}_{UR,t}} - 1\right] \times 10^4$$
$$= \left[\frac{\binom{8^7 Sr}{8^6 Sr}_{S} - \binom{8^7 Rb}{8^6 Sr}_{S} \binom{e^{j_{ert}} - 1}{S^2}}{\binom{8^7 Sr}{8^6 Sr}_{UR} - \binom{8^7 Rb}{8^6 Sr}_{S} \binom{e^{j_{ert}} - 1}{S^2}}{S^2} - 1\right] \times 10^4$$
(33)

下标 UR 代表均一地幔库。

 $2.2.2.3 f_{Rb/Sr}$

该参数反映 Rb/Sr 比值相对于均一地库的富 集与亏损程度,计算公式如下:

$$f_{Rb/Sr} = \frac{\binom{8^7 Rb}{8^6 Sr}_s}{\binom{8^7 Rb}{8^6 Sr}_{UR}} -1$$
(34)

2.3 钕 (Nd) 同位素参数

2.3.1 Nd 的同位素组成及¹⁴³Nd 增长方程

自然界 Nd 有 ¹⁴²Nd、¹⁴³Nd、¹⁴⁴Nd、¹⁴⁵Nd、¹⁴⁶Nd、 ¹⁴⁸Nd 和 ¹⁵⁰Nd 七个同位素。其中 ¹⁴⁴Nd 具有天然 α 衰变, ¹⁵⁰Nd 有 β ⁻衰变, 但是它们的半衰期都很长 (>10¹⁵ 年), 自地球形成以来衰减的量是当前测试 水平无法准确测出, 且也是可以忽略不计。¹⁴⁴Nd 的 相对丰度为 23.7938%。

自然界 Sm 有¹⁴⁴Sm、¹⁴⁷Sm、¹⁴⁸Sm、¹⁴⁹Sm、¹⁵⁰Sm、¹⁵²Sm 和¹⁵⁴Sm 七个同位素,其中¹⁴⁷Sm 的相对丰 度为 14.9957%。¹⁴⁷Sm 因 α 衰变引起子体同位素¹⁴³Nd 增长。

¹⁴⁷₆₂Sm → ¹⁴³₆₀Nd+α+Q
其对应的增长方程为
$$\left(\frac{^{143}Nd}{^{144}Nd}\right)_{s} = \left(\frac{^{143}Nd}{^{144}Nd}\right)_{i} + \left(\frac{^{147}Sm}{^{144}Nd}\right)_{s} (e^{^{\lambda_{147}t}}-1)$$
 (35)

2.3.2 Nd 同位素主要参数 ^[6]

2.3.2.1 初始比值 (¹⁴³Nd/¹⁴⁴Nd)_i
由公式 (32) 得:
$$\left(\frac{^{143}Nd}{^{144}Nd}\right)_{i} = \left(\frac{^{143}Nd}{^{144}Nd}\right)_{s} - \left(\frac{^{147}Sm}{^{144}Nd}\right)_{s} (e^{\lambda_{147}t} - 1)$$
 (36)

在样品没有测试
$$\left(\frac{SM}{144}Nd\right)_s$$
比值的时候,需要通

过 Sm、Nd 的含量来进行换算,其中:

∴
$$n({}^{147}\text{Sm}) = w(\text{Sm})/150.36 \times 1000 \times 0.149957$$

 $n({}^{144}\text{Nd}) = w(\text{Nd})/144.24 \times 1000 \times 0.237938$
∴ $\left(\frac{{}^{147}\text{Sm}}{{}^{144}\text{Nd}}\right)_s = \frac{w(\text{Sm})}{w(\text{Nd})} \times 0.60458$ (37)

2.3.2.2 模式年龄 T_{CHUR}、T_{DM} 和 T_{2DM}

实测一组 Sm-Nd 同位素 (¹⁴³Nd/¹⁴⁴Nd)_s和 (¹⁴⁷Sm/¹⁴⁴Nd)_s,当给定初始值后就可计算公式 (33) 中的年龄值,即模式年龄。如果以同时代 (*t*) 球粒陨石地幔库 (CHUR) 的值作为样品的初始值,我们会得到相对于球粒陨石地幔库的模式年龄,即 T_{CHUR};如果采用同时代亏损地幔库 (DM) 的值作为样品的初始值,我们就得到了亏损地幔模式年龄 T_{DM}。以下以 T_{CHUR} 为例:

$$\begin{pmatrix} \frac{1^{43}Nd}{1^{44}Nd} \\ s = \begin{pmatrix} \frac{1^{43}Nd}{1^{44}Nd} \\ \end{pmatrix}_{CHUR,t} + \begin{pmatrix} \frac{1^{47}Sm}{1^{44}Nd} \\ s \end{pmatrix}_{s} (e^{\lambda_{147}t} - 1)$$
(38)
其中:

$$\binom{^{143}Nd}{^{144}Nd}_{CHUR,t} = \binom{^{143}Nd}{^{144}Nd}_{CHUR} - \binom{^{147}Sm}{^{144}Nd}_{CHUR} (e^{\lambda_{147}t} - 1)$$
(39)

将 (27) 代入 (26) 得:

$$\begin{pmatrix} {}^{143}Nd \\ {}^{144}Nd \end{pmatrix}_{s} = {}^{143}Nd \\ {}^{144}Nd \end{pmatrix}_{CHUR} - {}^{147}Sm \\ {}^{144}Nd \end{pmatrix}_{CHUR} (e^{\lambda_{147}t} - 1)
+ {}^{147}Sm \\ {}^{147}Sm \\ {}^{144}Nd \\ {}^{s}(e^{\lambda_{147}t} - 1) \\ T_{CHUR} = \frac{1}{\lambda_{147}} ln \\ {}^{1(43}Nd/{}^{144}Nd)_{CHUR} - ({}^{143}Nd/{}^{144}Nd)_{S} + 1 \\ {}^{1}d \\ {}^{(147}Sm/{}^{144}Nd)_{CHUR} - ({}^{147}Sm/{}^{144}Nd)_{S} + 1 \end{bmatrix}$$
(40)

同理,我们可以得到相对于亏损地幔 (DM) 的 模式年龄:

$$T_{DM} = \frac{1}{\lambda_{147}} ln \left[\frac{(^{143}Nd/^{144}Nd)_{DM} - (^{143}Nd/^{144}Nd)_{S}}{(^{147}Sm/^{144}Nd)_{DM} - (^{147}Sm/^{144}Nd)_{S}} + 1 \right]$$
(41)

$$T_{2DM} = \frac{1}{\lambda} ln \left\{ \frac{\left(\frac{143}{144}Nd\right)_{S} - \left(\frac{143}{144}Nd\right)_{DM}}{\left(\frac{144}{144}Nd\right)_{CC}} - \left(\frac{147}{144}Nd\right)_{DM}} \right] (e^{\lambda t} - 1) - \left(\frac{147}{144}Nd\right)_{CC}}{\left(\frac{147}{144}Nd\right)_{CC}} - \left(\frac{147}{144}Nd\right)_{DM}} + 1 \right\}$$

$$(42)$$

如果先计算出 T_{DM},则 T_{2DM} 可按下式计算^[7]:

$$T_{2DM} = T_{DM} - (t_{DM} - t) \times \frac{f_{CC} - f_{Sa}}{f_{CC} - f_{DM}}$$
(43)

式 中:
$$f_{Sa} = \frac{({}^{147}Sm/{}^{144}Nd)_S}{({}^{147}Sm/{}^{144}Nd)_{CHUR}} - 1$$
, $f_{CC} =$

 $\frac{({}^{147}Sm/{}^{144}Nd)_{CC}}{({}^{147}Sm/{}^{144}Nd)_{CHUR}}\mathbf{1}, f_{DM} = \frac{({}^{147}Sm/{}^{144}Nd)_{DM}}{({}^{147}Sm/{}^{144}Nd)_{CHUR}}\mathbf{1}, t 为部分$ 熔融发生的时间,即第二阶段开始的时间 [8-9],通常用岩体的侵位年龄来表示。

一般来说,对于太古代岩石,由于当时的壳幔 还没有充分分离,因此我们通常以球粒陨石地幔库 为参照;元古代以后,壳幔已经完全分离,此时的地 幔多为亏损地幔,因此常以亏损地幔为参照。需要 注意的是球粒陨石地幔库没有单阶段与两阶段之 分,是一个理想的均一、稳定的同位素体系。

2.3.2.3
$$\epsilon_{Nd}$$

$$\varepsilon_{Nd}(0) = \left[\frac{({}^{143}Nd/{}^{144}Nd)_{\rm S}}{({}^{143}Nd/{}^{144}Nd)_{CHUR}} - 1\right] \times 10^4$$
(44)

$$\varepsilon_{Nd}(t) = \left[\frac{(^{143}Nd/^{144}Nd)_{t}}{(^{143}Nd/^{144}Nd)_{CHUR,t}} - 1\right] \times 10^{4}$$
$$= \left[\frac{(^{143}Nd/^{144}Nd)_{S} - (^{147}Sm/^{144}Nd)_{S}(e^{^{\lambda_{147}}t}-1)}{(^{143}Nd/^{144}Nd)_{CHUR} - (^{147}Sm/^{144}Nd)_{CHUR}(e^{^{\lambda_{147}}t}-1)} - 1\right]$$
$$\times 10^{4}$$
(45)

2.4 Hf 同位素参数

2.4.1 Hf 的同位素组成及 ¹⁷⁶Hf 增长方程

在自然界中 Hf 有¹⁷⁴Hf、¹⁷⁶Hf、¹⁷⁷Hf、¹⁷⁸Hf、¹⁷⁹Hf 与¹⁸⁰Hf 六个同位素,Lu 有¹⁷⁵Lu 和¹⁷⁶Lu 两个同位 素,其中¹⁷⁶Lu 通过一个 β⁻衰变转变为¹⁷⁶Hf:

2.4.2 Hf 同位素主要参数^[10]

2.4.2.1 初始比值 (¹⁷⁶Hf/¹⁷⁶Lu)_i

由式 (45)得:

$$\left(\frac{{}^{176}Hf}{{}^{177}Hf}\right)_{i} = \left(\frac{{}^{176}Hf}{{}^{177}Hf}\right)_{s} - \left(\frac{{}^{176}Lu}{{}^{177}Hf}\right)_{s} (e^{\lambda_{176}t} - 1)$$
 (47)

2.4.2.2 模式年龄 (T_{CHUR}、T_{DM}、T_{DMC})

Hf 同位素模式年龄的推导过程与 Nd 同位素 模式年龄是一致的,此处从略。

$$T_{CHUR}^{Hf} = \frac{1}{\lambda_{176}} ln \left[\frac{(^{176}Hf)^{177}Hf)_{S} - (^{176}Hf)^{177}Hf)_{CHUR}}{(^{176}Lu/^{177}Hf)_{S} - (^{176}Lu/^{177}Hf)_{CHUR}} + 1 \right]$$
(48)

$$T_{DM}^{Hf} = \frac{1}{\lambda_{176}} ln \left[\frac{(^{176}Hf)^{177}Hf)_{S} - (^{176}Hf)^{177}Hf)_{DM}}{(^{176}Lu'^{177}Hf)_{S} - (^{176}Lu'^{177}Hf)_{DM}} + 1 \right]$$
(49)

$$T_{DMC}^{Hf} = T_{DM}^{Hf} - (T_{DM}^{Hf} - t) \times \frac{f_{CC}^{Hf} - f_{S}^{Hf}}{f_{CC}^{Hf} - f_{DM}^{Hf}}$$
(50)

$$\vec{x} \div: f_{s}^{Hf} = \frac{\binom{176}{Lu}\binom{177}{Hf}_{s}}{\binom{176}{Lu}\binom{177}{Hf}_{CHUR}} - 1,$$

$$f_{s}^{Hf} = \frac{\binom{176}{Lu}\binom{177}{Hf}_{CC}}{Lu} + \frac{f_{s}^{Hf}}{Lu} - \frac{\binom{176}{Lu}\binom{177}{Hf}}{Lu}$$

$$f_{CC}^{Hf} = \frac{(Lu' Hf)_{CC}}{({}^{176}Lu'{}^{177}Hf)_{CHUR}} 1 f_{DM}^{Hf} = \frac{(Lu' Hf)_{DM}}{({}^{176}Lu'{}^{177}Hf)_{CHUR}} 1,$$

(注:上述各参数中,上标 Hf 是为了与 Nd 同 位素的相关参数相区别,单独使用时可不加上标。 T^{Hf}_{CHUR}在文献中很少见到,本文参照 Nd 的 T_{CHUR} 计 算公式建立了 T^{Hf}_{CHUR} 的计算公式,可用于壳幔还没 有充分分离的太古代岩石的研究)

2.4.2.3 ϵ_{Hf}

$$\varepsilon_{Hf}(0) = \left[\frac{({}^{176}Hf)^{177}Hf)_{S}}{({}^{176}Hf)^{177}Hf)_{CHUR}} - 1\right] \times 10^{4}$$
(51)
$$\varepsilon_{Hf}(t) = \left[\frac{({}^{176}Hf)^{177}Hf)_{t}}{({}^{176}Hf)^{177}Hf)_{CHUR,t}} - 1\right] \times 10^{4}$$

$$= \left[\frac{(^{176}Hf)^{177}Hf)_{S} - (^{176}Lu/^{177}Hf)_{S}(e^{i_{176}}-1)}{(^{176}Hf)^{177}Hf)_{CHUR} - (^{176}Lu/^{177}Hf)_{CHUR}(e^{i_{176}}-1)} - 1 \right] \times 10^{4}$$
(52)

2.5 同位素常数

上述许多公式中都使用了各种同位素的常数, 表1中汇总了 Pb-Sr-Nd-Hf 同位素的主要常数。

表 1 Pb-Sr-Nd-Hf 同位素的主要常数

Table 1 M	Iain constants	of Pb-Sr-Nd-H	f isotopes
-----------	----------------	---------------	------------

同位素	参数	数	值	参数说明与资料来源			
	λ ₂₃	5	$9.8485 \times 10^{-10} a^{-1}$	²³⁵ U 衰变常数, 文献 [11,12]			
	λ ₂₃	18	$1.55125 \times 10^{-10} \text{ a}^{-1}$	²³⁸ U 衰变常数, 文献 [11,12]			
	λ ₂₃	2	$4.94752 \times 10^{-11} \text{ a}^{-1}$	232Th 衰变常数, 文献 [12]			
	²³⁸ U/	²³⁵ U	137.88	文献 [13]			
		a_0	9.307	²⁰⁶ Pb/ ²⁰⁴ Pb, 文献 [2,14]			
		b_0	10.294	²⁰⁷ Pb/ ²⁰⁴ Pb,文献[2,14]			
	地球原始铅	C_0	29.476	²⁰⁸ Pb/ ²⁰⁴ Pb, 文献 [2,14]			
U-Th-Pb 同位		т	4430Ma	地球形成年龄*,适用于 U-Pb 体系,[2]			
素体系		1	4570Ma	地球形成年龄*,适用于Th-Pb体系,[2]			
		a_1	11.152	第二阶段开始时的 ²⁰⁶ Pb/ ²⁰⁴ Pb, [2,14]			
	一阶印加拉机	b_1	12.998	第二阶段开始时的 ²⁰⁷ Pb/ ²⁰⁴ Pb, [2,14]			
	一时权彻如扣	C_1	31.23	第二阶段开始时的 ²⁰⁸ Pb/ ²⁰⁴ Pb, [2,14]			
		T_1	3700Ма	第二阶段开始时间, 文献 [2]			
		$a_{\rm n}$	18.549/18.700	现代 ²⁰⁶ Pb/ ²⁰⁴ Pb, 文献 [2]			
	地球现代铅	b_{n}	15.681/15.628	现代 ²⁰⁷ Pb/ ²⁰⁴ Pb, 文献 [2]			
		C_{n}	38.373/38.630	现代 ²⁰⁸ Pb/ ²⁰⁴ Pb, 文献 [2]			
	λ_{87}		1.42×10^{-11}	⁸⁷ Rb 衰变常数; 文献 [11]			
Rb-Sr 同位素	(⁸⁷ Rb/ ⁸⁶ S	r) _{UR}	0.0827	均,地壘床 文計 [15]			
体系	(⁸⁷ Sr/ ⁸⁶ Sr) _{UR}	0.7045	对一地咬片,又瞅[15]			
	BABI		0.69897	地球初始值; 文献 [16]			
	λ_{147}		$6.53974 \times 10^{-11} a^{-1}$	¹⁴⁷ Sm 衰变常数, 文献 [17]			
	(¹⁴⁷ Sm/ ¹⁴⁴ No	d) _{chur}	0.1967	文献 [18]			
Sm-Nd 同位素	(¹⁴³ Nd/ ¹⁴⁴ Nd	ł) _{chur}	0.512638	文献 [18]			
体系	(¹⁴⁷ Sm/ ¹⁴⁴ N	(d) _{DM}	0.2136	云捐卅幅库 文献 [8]			
	(¹⁴³ Nd/ ¹⁴⁴ N	(d) _{DM}	0.513151	了顶地设计,入版[0]			
	(¹⁴⁷ Sm/ ¹⁴⁴ N	Vd) _{cc}	0.118	上地壳值, 文献 [19]			
	λ_{176}		$1.867 \times 10^{-11} a^{-1}$	¹⁷⁶ Lu 衰变常数, 文献 [20]			
	(¹⁷⁶ Lu/ ¹⁷⁷ H	f) _{chur}	0.0332	我粒陨石地幅度 文献[10,21]			
Lu-Hf 同位素	(¹⁷⁶ Hf/ ¹⁷⁷ Hf	f) _{chur}	0.282772	林西欧石地较佳,天脉[10,21]			
体系	(¹⁷⁶ Lu/ ¹⁷⁷ H	If) _{DM}	0.0384	云捐卅幅库 文献 [22]			
	(¹⁷⁶ Hf/ ¹⁷⁷ H	If) _{DM}	0.28325	7 顶地取开,入版[22]			
	(¹⁷⁶ Lu/ ¹⁷⁷ H	If) _{cc}	0.015	上地壳值, 文献 [23,24]			

*目前趋向于使用统一地球形成时间为 4550 Ma,软件中设有选择窗口,便于用户选择.

240	华南地	质	2021 年
3程序设计		以更新的日期命名,女	口一个完整的版本号 Geokit-
		Pro20210328 代表 202	1年3月28日更新。有关同
3.1 Pb-Sr-Nd-Hf 同位素参数	 执 计算程序简介	位素参数计算,在Ge	okitPro 中均集成在"地球化
Pb-Sr-Nd-Hf 同位素参	数计算是作者开发的	学数据库"模块中。用	户可以点击 Geokit 菜单中的
Geokit 软件中的一个组成著	部分 ^[25] 。十多年来,在广	相关菜单项 4 地球化学数据库	,就可以打开数据处理工作
大用户的支持下,作者先周	后发布了多个 Geokit 升	薄,然后根据需要切接	色需要的工作表(图1)。详细
级版本,当前版本命名为G	eokitPro。该版本的小号	的使用方法请参阅随转	次件发布的的帮助文件。
项目和数据集	[元素 稳定同位素 钅	四 <u>同位素</u> 锶钕同位素	铪同位素 (千

化声抽质

进入到工作表后,用户可以在工作表中直接进 行相关数据库管理与数据处理工作。由于工作表有 很多快速输入功能,也可以使用复制-粘贴的功能, 因此录入数据较工作窗口方便得多,数据准备工作 可以在表格中进行,用户可以直接在相应的表格中 按要求输入相关数据(少量的数据修改也可以在窗 口中进行)。如果数据库中已有相关数据,可以直接 调入到工作表中,方法是点击相关工作表中第一行

左侧的图形(按钮),弹出相应的工作窗口,在 窗口中先选择项目、再选择数据集,选择数据集后, 该数据集下的数据就会调入到工作表中。图2是 Sr-Nd 同位素工作窗口,铅同位素、铅同位素工作窗 口的结构与之类似。当在工作表中准备好数据后, 点击窗口或工作的按钮"参数计算",即可完成当 前工作表中的相关参数的计算,并将计算结果显 示在工作表中。

2021 年

Geochemist	ieochemistry DataBase — 锶钕同位素: 1003003, Sr-Nd同位素数据								
选择项目	边择坝目与数据库 选择项目 1003, Sr-Nd同位素示例数据								
选择数据集 1003003, Sr-Nd同位素数据3一拉萨地块查加寺钾质火山.▼									
选择样品	选择样品 🚽 1, GJ10-5-1, 钾质火山岩 🔽 🕨								
一样品信息									
样品编号	GJ10)-5-1	样品描述	钾质火山	岩				
经度	8115	500	81° 15' 00"	纬度	320200	32° 02' 00"			
地理位置	西藏	t							
一锶钕同位素	分析	数据及相	关参数 ————						
Age/I	Ma 🛛	24	¹⁴⁷ Sm/ ¹⁴⁴ Nd	.09271	T _{DM}	1463			
Rb(ppr	n) [423.9	¹⁴³ Nd/ ¹⁴⁴ Nd	.511988	T _{2DM}	1843			
Sr(ppr	n) [300	I _{Sr}	.73233	Tchur	953			
⁸⁷ Rb/ ⁸⁶	Sr	4.098	ε _{sr} (0)	414.8	ε _{Nd} (0)	-12.68			
⁸⁷ Sr/ ⁸⁶	Sr	.733725	ε _{sr} (t)	395.5	$\epsilon_{Nd}(t)$	-12.37			
Sm(ppr	n) [9.634	∫ _{Rb/Sr}	48.55	f Sm/Nd	53			
Nd(ppr	n) [62.85	J. Nd	.511973	道 45.1				
参数计算保存到数据库关闭									

图 2 Sr-Nd 同位素数据管理与参数计算窗口

Fig. 2 The window of data manage and parameter calculating for Sr-Nd isotopes

图 1 地球化学数据库的工作薄的工作表标签

Fig. 1 The menu of Geochemical database

3.2 计算实例与结果检验

3.2.1 铅同位素参数

(1) 输入参数:必需参数 (²⁰⁶Pb/²⁰⁴Pb)_s、(²⁰⁷Pb/²⁰⁴Pb)_s、
 (²⁰⁸Pb/²⁰⁴Pb)_s(下标 S 代表样品测试值,以下省略)。

可选参数(计算初始值时为必须):参考年龄(t/Ma),U,Th,Pb含量。

(2) 输出参数:²⁰⁶Pb/²⁰⁷Pb、 t_{CDT} 、 t_{SK} 、 μ 、 ω 、Th/U、V1、V2、 $\Delta \alpha$ 、 $\Delta \beta$ 、 $\Delta \gamma$ 、(²⁰⁶Pb/²⁰⁴Pb)_i、(²⁰⁷Pb/²⁰⁴Pb)_i、(²⁰⁸Pb/²⁰⁴Pb)_i)

此外,为保证数据的完整性,在数据库中需要 录入样品信息等相关数据(下同)。

不同的作者因研究目的不同,使用的参数也有 所不同。因此,这些参数通常不会出现在同一篇论 文中。以下我们选择了几篇论文中的数据,分别对 (3) 计算实例

```
①模式年龄
```

模式年龄包括单阶段模式年龄(*t_{cot}*)和两阶段模式年龄(*t_{sx}*)。由式(16)和式(17)可知,两个模式年龄的公式是一样的,只是参数不同。我们利用 Stacey and Kramers^[2]原文中的前6组数据对本软件进行考核,可以发现,所有计算结果均只在末位存在微小差异,这种差异可能与计算过程中所采用不同的数据精度有关,而不是由计算错误所引起。因此,可以认为本文的计算结果与原作者的计算结果是一致的。本软件除了 Stacey and Kramers^[2]的两阶段模型外,还设计了用户自定义两阶段模型,用户只需要给出自己样品的第二阶段起始时间和第二阶段的初始值即可。

表 2 两阶段模式年龄 (tsk) 计算实例

 Table 2 An Example for two-stage model ages of lead isotopes

序号	²⁰⁶ Pb/ ²⁰⁴ Pb	²⁰⁷ Pb/ ²⁰⁴ Pb	²⁰⁸ Pb/ ²⁰⁴ Pb	t _{sk} /Ma	原文结果
1	12.73	14.09	32.32	2746	2745
2	12.75	14.07	32.22	2654	2655
3	13.986	15.085	34.038	2925	2925
4	13.59	14.72	33.53	2806	2800
5	13.28	14.53	33.43	2861	2860
6	13.16	14.5	35.08	2969	2970

*双线后为计算结果,下列各表相同.

 $(2) V_1, V_2$

由于 V_1 、 V_2 两个参数是在 $\Delta \alpha$ 、 $\Delta \beta$ 、 $\Delta \gamma \equiv$ 个参数的基础上完成的,因此验证了 V_1 、 V_2 的正确 性也就自然验证了 $\Delta \alpha$ 、 $\Delta \beta$ 、 $\Delta \gamma =$ 个参数的正 确性。Geokit 对 V₁、V₂ 两参数的计算采用的是公式 (21)和(22)。表 3中的计算实例数据取该参数建立 者的原文^[4-5],由对比可以看出,本文的计算结果与 原文是一致的。

表3 V	1 V ₂	参数计算实例
------	------------------	--------

Table 3 An Example for V_1 and V_2 of lead isotopes

样号	²⁰⁶ p] / ²⁰⁴ p]	²⁰⁷ Pb/ ²⁰⁴ Pb	²⁰⁸ Pb/ ²⁰⁴ Pb	\mathbf{V}_1		V_2		A*	Λß	$\wedge \gamma$
件亏	Pb/ Pb			本文	原文	本文	原文	Δα	Δβ	Δγ
308-10	19.141	15.668	40.268	112.4	112.5	63.5	63.9	102.91	21.80	74.65
YL-90	20.475	15.856	40.846	160.2	160.2	126.1	126.3	179.77	34.06	90.08
8702-1	19.525	15.672	40.221	121.1	121.1	82.7	82.9	125.03	22.06	73.40
7903A-1	19.799	15.671	40.758	140.9	140.9	90.1	90.3	140.82	22.00	87.73
YL-74	20.050	15.708	40.544	142.1	142.2	105.5	105.7	155.28	24.41	82.02
PD2-2	20.023	15.701	40.734	146.0	146.1	101.9	102.1	153.73	23.96	87.09

*注:原文未给出 $\Delta \alpha \ \Delta \beta \ \Delta \gamma$.

③初始值计算

由于大多数学者在研究铅同位素时多采用矿 石铅,不需要进行铅同位素校正,因此在铅同位素 研究中,初始值计算并不多。表 4 中的计算实例数 据为秦岭古 MORB 型岩石的铅同位素组成^[26]。作 者原文中有两组年龄值,一组是本文引用的 MORB 形成年龄(1000 Ma),另一组是变质年龄(350 Ma)。 从表 4 可以看出:用本软件的计算结果与原文给出 的结果都是一致的。

表 4 初始铅计算实例 Table 4 An Example for Initial ratios of lead isotopes

编号	U (µg/g)	Th (μg/g)	Pb (µg/g)	t (Ma)	$\frac{{}^{206}Pb}{{}^{204}Pb}$	$\frac{{}^{207}Pb}{{}^{204}Pb}$	$\frac{{}^{208}Pb}{{}^{204}Pb}$	$\left(\frac{{}^{206}Pb}{{}^{204}Pb}\right)_i$	$\left(\frac{^{207}Pb}{^{204}Pb}\right)_i$	$\left(\frac{^{208}Pb}{^{204}Pb}\right)_i$
松树沟1	0.4	0.845	7.9	1000	18.407	15.568	38.091	17.870	15.529	37.737
松树沟 2	0.2	0.937	4.8	1000	18.66	15.631	38.428	18.215	15.599	37.776
松树沟 3	0.4	0.454	4.6	1000	18.054	15.538	37.770	17.141	15.472	37.447
勉力1	0.4	0.97	2.8	350	18.101	15.542	37.753	17.602	15.515	37.362
勉力 2	0.64	1.03	6.9	350	18.006	15.536	37.658	17.683	15.519	37.49
勉力 3	0.46	0.75	2.0	350	17.993	15.607	37.932	17.189	15.564	37.508

我们对高庚等^[27]报道的安徽铜陵白芒山辉石 闪长岩体的铅同位素数据也进行了验算,结果也是 除个别数据在末位有 ±1的差异外,绝大部分计算 结果是一致的。

3.2.2 Sr-Nd 同位素参数计算

(1) 输入参数

必要参数:⁸⁷Rb/⁸⁶Sr,⁸⁷Sr/⁸⁶Sr,¹⁴⁷Sm/¹⁴⁴Nd, ¹⁴³Nd/¹⁴⁴Nd,t。

选择参数:Rb、Sr、Sm、Nd,当缺失 ⁸⁷Rb/⁸⁶Sr 时, 时年龄采用 24 Ma。限于输 Rb、Sr 为必须参数,当缺失 ¹⁴⁷Sm/¹⁴⁴Nd 时,Sm、Nd 组数据(下列各例相同)。

为必须参数。

(2) 输出参数

 $({}^{87}$ Sr/ 86 Sr)_i, $\varepsilon_{Sr}(0)$, $\varepsilon_{Sr}(t)$, $f_{Rb/Sr}$, $({}^{143}$ Nd/ 144 Nd)_i, T_{DM}, T_{2DM}, T_{chur}, $\varepsilon_{Nd}(0)$, $\varepsilon_{Nd}(t)$, $f_{Sm/Nd}$ 。其中 T_{chur} 一般用 于壳幔还没有明显分离的太古代岩石。

(3) 计算实例

表 5 和表 6 中的数据为拉萨地块西段中新世 查加寺钾质火山岩的 Sr-Nd 同位素组成^[28],计算 时年龄采用 24 Ma。限于篇幅,本文只列出其中前 6 组数据(下列各例相同)。

表 5	Sr	同位素参数计算实例
-----	----	-----------

ľa	b	le 5	An	Exampl	le for	Sr	isotope	paramet	ters
----	---	------	----	--------	--------	----	---------	---------	------

世日	Rb	Sr	⁸⁷ Rb/ ⁸⁶ Sr		870 1860	$(^{87}Sr/^{86}Sr)$	c (0)	ε _{sr} (t)	C
件亏	样亏 (µg/g) (µg/g) 测気	测定值	计算值*	Sr/ Sr	(Sr/Sr) _i	$\epsilon_{Sr}(0)$	$\mathcal{E}_{Sr}(t)$	$J_{Rb/Sr}$	
GJ10-5-1	423.9	300	4.098	4.092	0.733725	0.73233	414.8	395.5	48.55
GJ10-5-2	395.1	302.7	3.789	3.780	0.733362	0.73207	409.7	391.8	44.82
GJ10-5-3	404.9	300.8	3.905	3.898	0.733459	0.73213	411.1	392.6	46.22
GJ10-5-4	409.8	303.4	3.918	3.911	0.733616	0.73228	413.3	394.7	46.38
GJ10–5–5	408	302	3.919	3.912	0.733514	0.73218	411.8	393.3	46.39
GJ10-5-6	384.4	298.3	3.737	3.731	0.733626	0.73235	413.4	395.7	44.19

注:分析数据取自文献 [22];* 计算值是根据元素含量由式(29)计算所得.

表 6 Nd 同位素参数计算实例

 Table 6
 An Example for Nd isotope parameters

样号 Sm Nd (ppm) (ppm) 测定值	Sm	Nd	¹⁴⁷ Sm/	¹⁴⁴ Nd	143 N 1/144 N 1	(143 N. 1/144 N. 1)	т	т	a (0)	a (I)	f
	测定值	计算值	ING/ ING	$(\ln \alpha / \ln \alpha)_i$	$1_{\rm DM}$	1 _{2DM}	$\epsilon_{Nd}(0)$	$\epsilon_{Nd}(t)$	J _{Sm/Nd}		
GJ10-5-1	9.634	62.85	0.09271	0.09267	0.511988	0.511973	1464	1845	-12.7	-12.4	-0.53
GJ10-5-2	11.607	77.32	0.09081	0.09076	0.511986	0.511972	1444	1848	-12.7	-12.4	-0.54
GJ10-5-3	9.857	64.34	0.09267	0.09262	0.511990	0.511976	1461	1842	-12.6	-12.3	-0.53
GJ10-5-4	9.859	63.85	0.09349	0.09335	0.511982	0.511967	1481	1855	-12.8	-12.5	-0.52
GJ10-5-5	10.247	66.3	0.09349	0.09344	0.511982	0.511967	1481	1855	-12.8	-12.5	-0.52
GJ10-5-6	9.556	62.15	0.09301	0.09296	0.511983	0.511968	1474	1853	-12.8	-12.5	-0.53

另外,对田世洪等^[29]所给青海玉树东莫扎抓 铅锌矿床 Sr-Nd 同位素数据进行验证,本文给出的 结果与原文也是一致的。

3.2.3 Hf 同位素参数计算

息及数据。

(2) 输出参数

 $({}^{176}\text{Hf}/{}^{177}\text{Hf})_i, T_{\text{DM}}, T_{\text{DMC}}, T_{\text{CHUR}}, \varepsilon_{H}(0), \varepsilon_{H}(t), f_{I_{II}/H'}$ (3) 计算实例

(1) 输入参数

为保证数据的完整性,在数据库中需要录入相关信 差异外,其它数值完全一致。

表7中的数据为西藏冈底斯东部察隅花岗岩 (¹⁷⁶Lu/¹⁷⁷Hf)_s,(⁷⁶Hf/¹⁷⁷Hf)_s,t。此外,样品信息及体(CY1-01) 锆石部分 Hf 同位素数据^[30]。与原文数 元素含量不参与计算,不作为计算的输入参数,但 据对比,除个别初始值、T_{DM}、T_{DMC}在末位有 ±1 的

表 7 Hf 同位素参数计算实例 Table 7 An Example for Hf isotope parameters

编号	¹⁷⁶ Lu/ ¹⁷⁷ Hf	⁷⁶ Hf/ ¹⁷⁷ Hf	t(Ma)	$(^{176}\text{Hf}/^{177}\text{Hf})_i$	$\epsilon_{H}(0)$	$\epsilon_{Hf}(t)$	$T_{\rm DM}$	$T_{\rm DMC}$	$f_{_{Lu/\!H\!f}}$
1	0.000870	0.282599	125	0.282597	-6.1	-3.5	921	1402	-0.97
2	0.000846	0.282613	129	0.282611	-5.6	-2.9	901	1368	-0.97
3	0.001516	0.282456	129	0.282452	-11.2	-8.5	1141	1724	-0.95
4	0.000812	0.282504	130	0.282502	-9.5	-6.7	1053	1613	-0.98
5	0.000714	0.282569	130	0.282567	-7.2	-4.4	959	1465	-0.98
6	0.000708	0.282533	132	0.282531	-8.5	-5.6	1009	1545	-0.98

以上计算实例及其与前人计算结果的对比表 明,本软件设计是合理的,计算结果是正确的。

4 结语

许多地质-地球化学研究的最终结论来源于 同位素地球化学数据的支持,因此同位素地球化学 数据处理的正确与否关系到这些结论的准确与正 确性,必须引起有关科学家及相关期刊编辑部的高

度重视。

本文系统地给出了 Pb-Sr-Nd-Hf 各同位素参 数的计算公式及其导出过程,在此基础上作者编写 了一个计算机软件,并将本软件的数据处理结果 与前人的数据处理结果进行了对比,结果证明程 序设计是合理的,计算结果是正确的。希望该软 件能成为国内学者处理相关数据的工具,避免再 出现数据处理错误。

参考文献:

- 路远发.南岭地区产于碳酸盐岩中铅锌矿床的成因[J]. 湖南地质,1993,(1):23-28.
- [2] Stacey J S, Kramers J D. Approximation of terrestrial lead isotope evolution by a two-stage model [J]. Earth and Planetary Science Letters, 1975, 26(2): 207-221.
- [3] 朱炳泉. 矿石 Pb 同位素三维空间拓扑图解用于地球 化学省与矿种区划[J]. 地球化学,1993,(3): 209-216.
- [4] 常向阳,朱炳泉. Pb 同位素三维空间拓扑投影与化探 评价 [J]. 地球学报, 1997, 18(S1): 182-184.
- [5] 常向阳,朱炳泉,邹日.铅同位素系统剖面化探与隐 伏矿深度预测——以云南金平龙脖河铜矿为例[J].
 中国科学(D辑),2000,30(1):33-39.
- [6] 陈江峰,江博明.Nd、Sr、Pb 同位素示踪和中国东南大 陆地壳演化[M].//郑永飞(主编),化学地球动力学论 文集,北京:科学出版社,1999:262-287.
- [7] Jacobsen S B. Isotopic Constraints on Crustal Growth and Recycling [J]. Earth and Planetary Science Letters, 1988, 90(3): 315-329.
- [8] Liew T C, Hofmann A W. Precambrian Crustal Components, Plutonic Associations, Plate Environment of the Hercynian Fold Belt of Central Europe: Indications From a Nd and Sr Isotopic Study[J]. Contributions to Mineralogy and Petrology, 1988, 98(2): 129-138.
- [9] 李献华,赵振华,桂训唐,于津生.华南前寒武纪地壳 形成时代的 Sm-Nd 和锆石 U-Pb 同位素制约 [J].地球 化学,1991,(3): 255-264.
- [10] 吴福元,李献华,郑永飞,高山.Lu-Hf 同位素体系及 其岩石学应用 [J]. 岩石学报, 2007, 23(2): 185-220.
- [11] Jaffey A H, Flynn K F, Glendenin L E, Bentley W C, Essling A M. Precision Measurement of Half-lives and Specific Activities of ²³⁵U and ²³⁸U[J]. Physical Review C, 1971, 4(5): 1889-1906.
- [12] Steiger R, Jäger E. Subcommission on geochronology convention on the use of decay constants in geo- and cosmochronology[J]. Earth and Planetary Science Letters, 1977, 36(3): 359-362.
- [13] Cowan G A, Adler H H. The variability of the natural abundance of ²³⁵U[J]. Geochimica et Cosmochimica Acta, 1976, 40(12): 1487-1490.

- [14] Tatsumoto M, Knight R J, Allegre C J. Time differences in the formation of meteorites as determined from the ratio of lead-207 to lead-206[J]. Science, 1973, 180(4092): 1279-1283.
- [15] Depaolo D J. Implications of Correlated Nd and Sr Isotopic Variations for the Chemical Evolution of Crust and Mantle[J]. Earth and Planetary Science Letters, 1979, 43(2): 201-211.
- [16] Hans U, Kleine T, Bourdon B. Rb–Sr chronology of volatile depletion in differentiated protoplanets: BABI, ADOR and ALL revisited [J]. Earth and Planetary Science Letters, 2013, 374, 204-214.
- [17] Lugmair GW, Marti K. Lunar initial ¹⁴³Nd/¹⁴⁴Nd: differential evolution of the lunar crust and mantle[J]. Earth and Planetary Science Letters, 1978, 39:349-357.
- [18] Jacobsen S B, Wasserburg G J. Sm-Nd isotopic evolution of chondrites[J]. Earth and Planetary Science Letters, 1980, 50(1): 139-155.
- [19] Jahn B M, Condie K C. Evolution of the Kaapvaal Craton as viewed from geochemical and Sm-Nd isotopic analyses of intracratonic pelites[J]. Geochimica et Cosmochimica Acta, 1995, 59(11): 2239-2258.
- [20] Söderlund U, Patchett P J, Vervoort J D, Isachsen C E. The ¹⁷⁶Lu Decay Constant Determined By Lu-Hf and U-Pb Isotope Systematics of Precambrian Mafic Intrusions [J]. Earth and Planetary Science Letters, 2004, 219(3-4): 311-324.
- [21] Blichert-Toft J, Albarède F. The Lu-Hf geochemistry of chondrites and the evolution of the mantle-crust system[J]. Earth and Planetary Science Letters, 1997, 148: 243-258.
- [22] Griffin W L, Pearson N J, Belousova E, Jackson S E, van Achterbergh E, O'Reilly S Y, Shee S R. The Hf isotope composition of cratonic mantle: LAM-MC-ICPMS analysis of zircon megacrysts in kimberlites [J]. Geochimica et Cosmochimica Acta, 2000, 64(1): 133-147.
- [23] GERM. Geochemical Earth Reference Model[OL]. http:// earthref.org/GERM/, 2001.
- [24] Griffin W L, Wang X, Jackson S E, Pearson N J, O'Reilly

S Y, Xu X S, Zhou X M. Zircon Chemistry and Magma Mixing, SE China: In-situ Analysis of Hf Isotopes, Tonglu and Pingtan Igneous Complexes[J]. Lithos, 2002, 61(3): 237-269.

- [25] 路远发. GeoKit: 一个用 VBA 构建的地球化学工具软件包 [J]. 地球化学, 2004, 33(5): 459-464.
- [26] 许继锋,韩吟文.秦岭古 MORB 型岩石的高放射性成 因铅同位素组成——特提斯型古洋幔存在的证据[J]. 中国科学(D辑),1996,22(S1):34-41.
- [27] 高 庚,徐兆文,杨小男,王云健,张 军,蒋少涌,凌洪 飞.安徽铜陵白芒山辉石闪长岩体的成因:Sr-Nd-Pb-O 同位素制约[J].南京大学学报(自然科学版),2006,

42(3): 52-62.

- [28] 胡文洁,田世洪,杨竹森,张兆卿.拉萨地块西段中 新世查加寺钾质火山岩岩石成因[J].矿床地质,2012, 31(4):813-830.
- [29] 田世洪,杨竹森,侯增谦,刘英超,宋玉财,王富春,薛 万文.青海玉树东莫扎抓铅锌矿床 S、Pb、Sr-Nd 同位 素组成:对成矿物质来源的指示 [J]. 岩石学报,2011, 27(7):2173-2183.
- [30] 朱弟成,莫宣学,王立全,赵志丹,牛耀龄,周长勇,杨岳 衡.西藏冈底斯东部察隅高分异 I 型花岗岩的成因:锆 石 U-Pb 年代学、地球化学和 Sr-Nd-Hf 同位素约束 [J]. 中国科学 (D 辑),2009,39(7): 833-848.