

G5071 Modelovací metody v petrologii a mineralogii - úvod

Jakub Haifler

Software

Potřebný software bude nainstalován na počítačích v učebně Gp.
Řada úloh bude řešena pomocí MS Excel

Pro vaši potřebu:

ImageJ (obrazová analýza) <https://imagej.nih.gov/ij/download.html>

SolvCalc (živcová termometrie) v dokumentech

Perple_X (TD modelování)

http://www.perplex.ethz.ch/perplex/ibm_and_mac_archives/WINDOWS/

<http://www.perplex.ethz.ch/perplex/datafiles/>

Theriak/Domino (TD modelování)

<http://titan.minpet.unibas.ch/minpet/theriak/prog120103/>

PyWerami (konturové diagramy pro výstupy Perple_Xu)

<http://petrol.natur.cuni.cz/~ondro/pywerami:home>

Cíl předmětu

Předmět je navržen zejména pro studenty petrologie, mineralogie, geochemie a ložiskové geologie.

Klade si za cíl zejména umožnit studentům vyzkoušet si některé metody zpracování kvantitativních dat a inspirovat k užití těchto nebo podobných, modifikovaných metod k řešení jejich vlastních témat.

Má sloužit jako doplnění některých teoretických předmětů (Mineralogie, Magmatická a metamorfní petrologie, Geochemie, Fyzikální geochemie), ale zároveň se chce oprostít od jejich systematiky.

Vybrané metody

Metody nesouvisí nutně s konkrétním tématem, konkrétní skupinou minerálů či hornin, a vlastně ani konkrétní geologickou disciplínou.

Logika výběru a souvislost (provázanost) jednotlivých metod bude lépe demonstrována po jejich stručném přehledu.

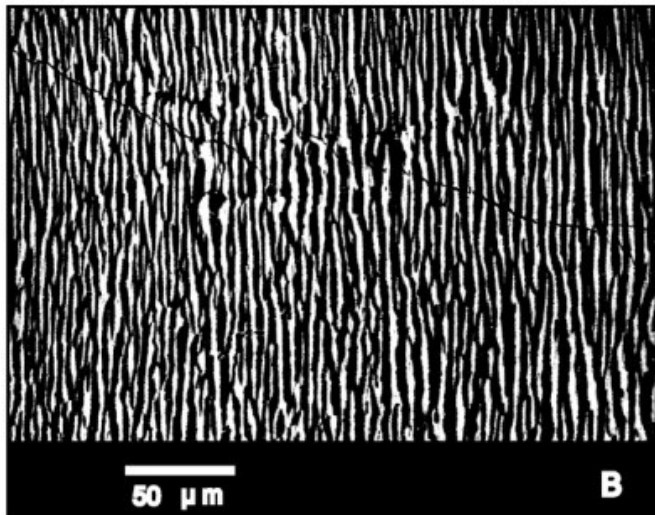
Obrazová analýza, plošné zastoupení jednotlivých fází

Obecně se pomocí obrazové analýzy dá získat množství kvantitativních informací o textuře horniny, ale také např. srůstech, odmíšeninách či inkluzích.

Pro knihovnu zakoupena kniha: [Higgins MD \(2006\): Quantitative Textural Measurements in Igneous and Metamorphic Petrology.](#)

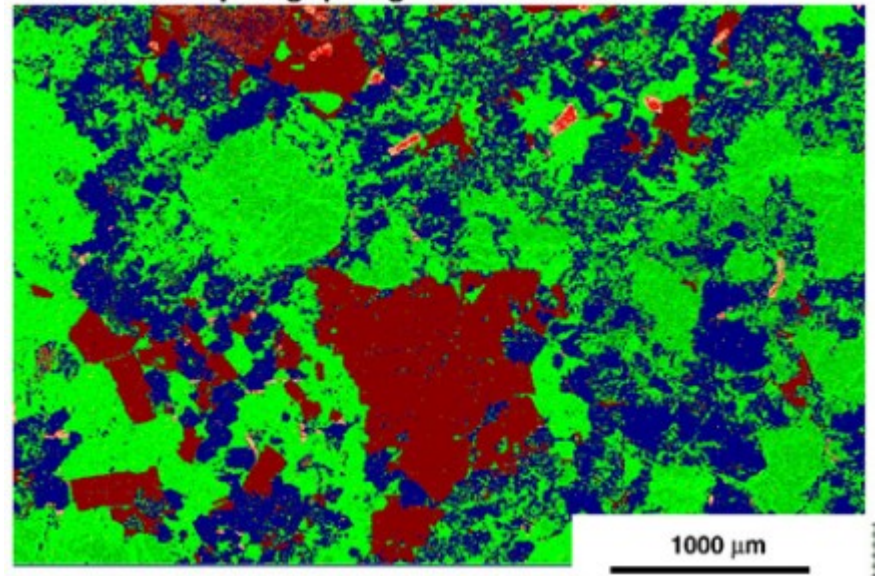
Obrazová analýza, plošné zastoupení jednotlivých fází

Program pro identifikaci fází ve vzorku
připojený k SEM (Scanning electron
microscopy) →

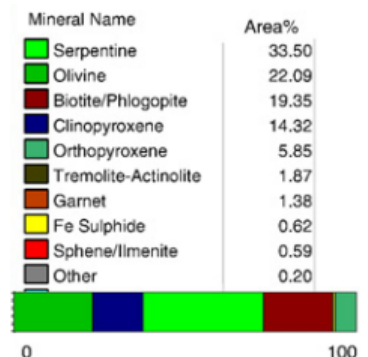


BSE obraz mezopertitu (Prakash et al., 2006)

PREM8970 – phlogopite garnet lherzolite



Hoal et al., 2009



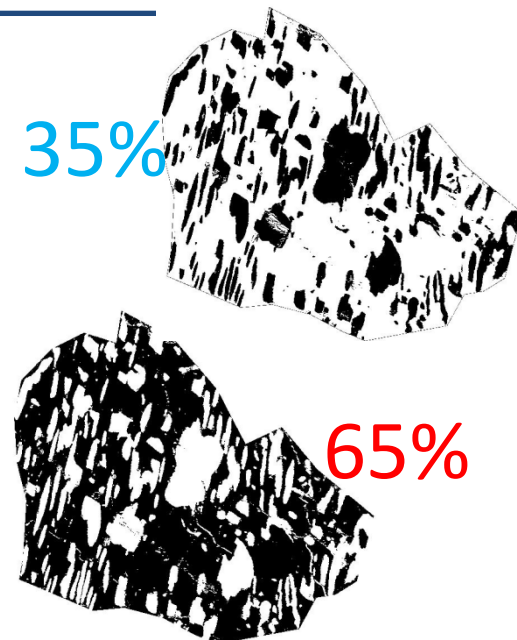
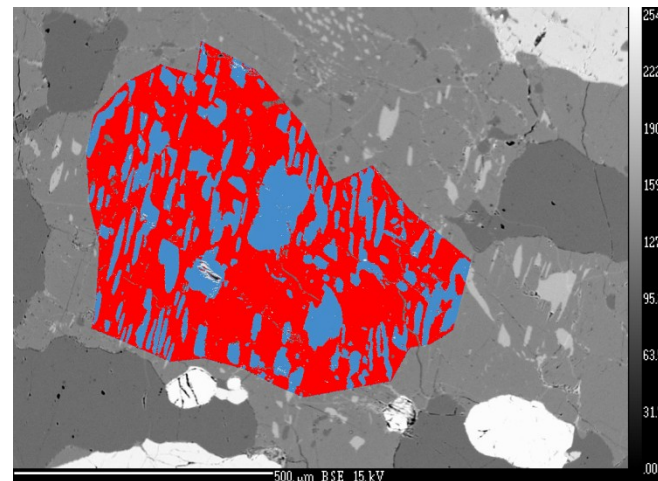
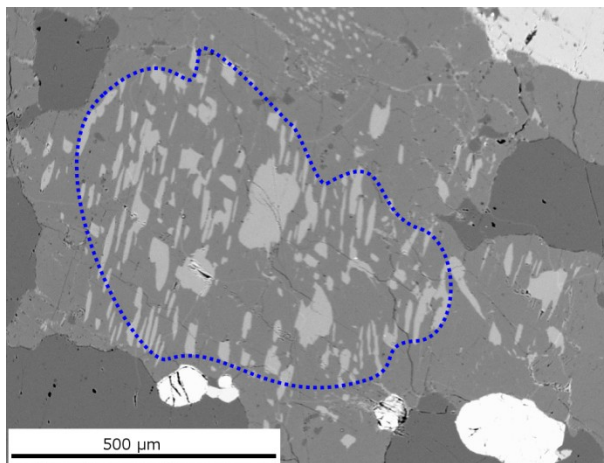
Obrazová analýza, plošné zastoupení jednotlivých fází

V našem případě – využití pro kvantifikaci zastoupení jednotlivých fází v řezu
Předpoklad, že poměry minerálů v řezu jsou blízké jejich poměrům v prostoru

digitalizovaný obraz s
dobře rozlišitelnými
fázemi (**kvalitní BSE
snímek/ XR- prvková
mapa/ optická
mikroskopie**)

převod jednotlivých
fází do odlišných
vrstev (**Photoshop,
Corel, Gimp**)

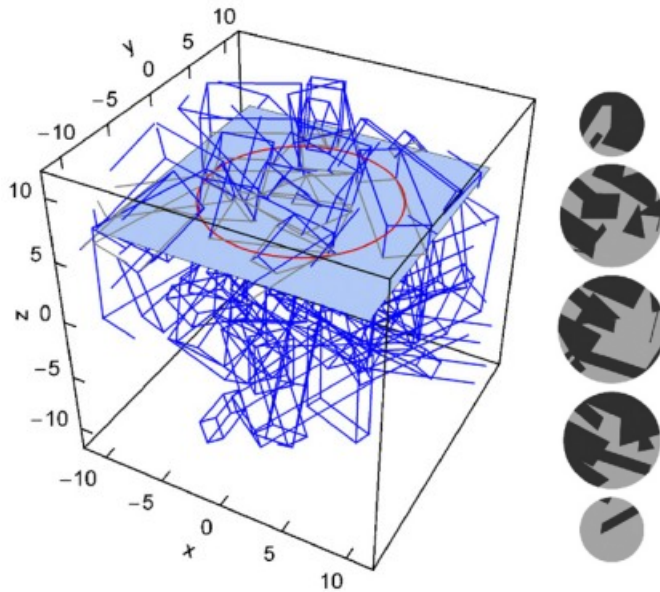
výpočet ploch
zastupujících
jednotlivé fáze



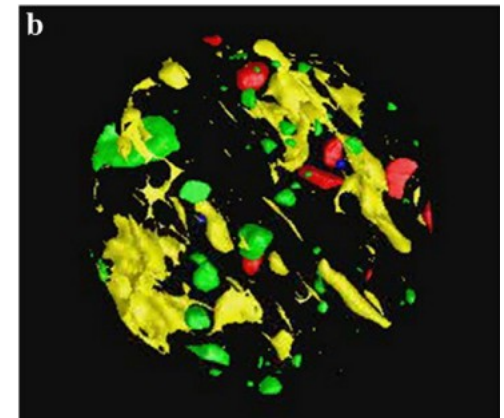
Obrazová analýza, plošné zastoupení jednotlivých fází

2 problémy:

1) poměry fází v prostoru se v některých případech mohou výrazně lišit od poměrů v řezu → průzkum dostatečně velké plochy v několika řezech; jiné metody kvantitativní fázové analýzy



Hezel, 2007



XR-tomografie – 3D technika
(Baker et al., 2012)

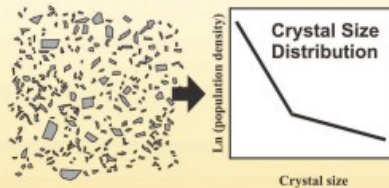
2D vs 3D texturní analýza

Jerram et al., 2007

2D textural analysis and stereological methods

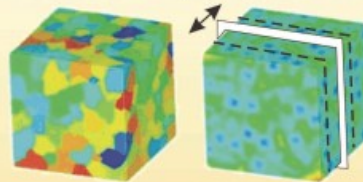
Measurement of 2D intersection parameters in thin sections (long axis, shape, orientation, etc)

Conversion to 3D using stereology



3D textural analysis by direct methods

Measurement of 3D parameters using X-ray tomography or serial section reconstructions. Individual crystals can be identified directly and measured for shape, size, etc.



Special Features

- Cheap optical microscopes are readily available
- Optical methods are well known
- Global parameters (e.g. phase abundance) can be precisely determined
- Lattice orientations are commonly available
- Chemical compositions can also be determined
- Direct methods can be used for any shape of crystal or structure
- Individual crystals or other structures can be directly measured
- Typical resolution is as good as $2\ \mu\text{m}$ for standard micro CT applications
- Very high resolution is possible for small samples using synchrotron analysis

Limitations

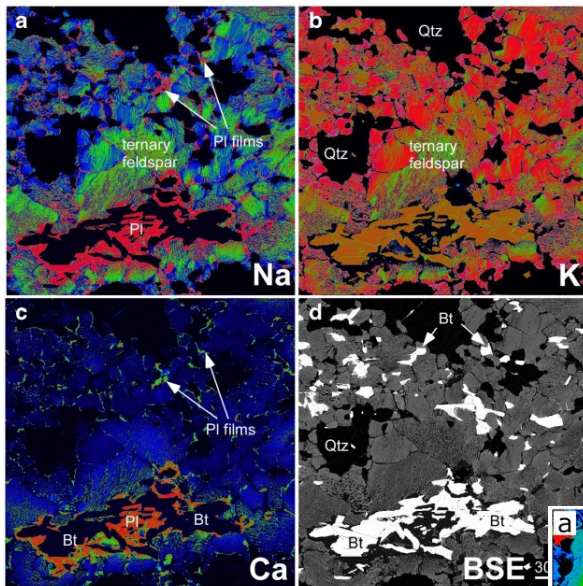
- Stereological conversion necessitates known, regular crystal shapes
- Stereological conversion is less precise for small crystals in population
- Populations of crystals are described statistically, not individually
- Specialised equipment is expensive; limited sample size
- Cannot easily separate touching crystals unless shape is assumed
- Lattice orientations are inaccessible
- Not always possible to identify different minerals

Obrazová analýza, plošné zastoupení jednotlivých fází

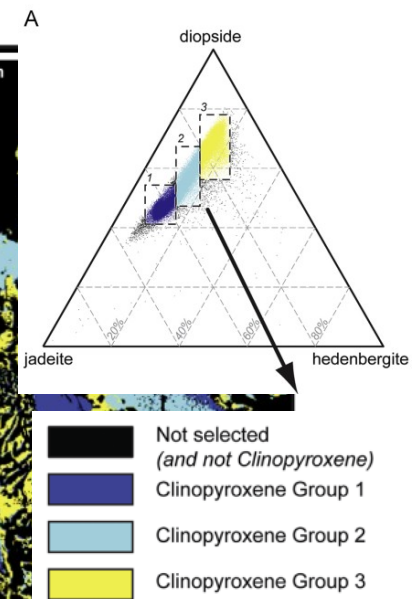
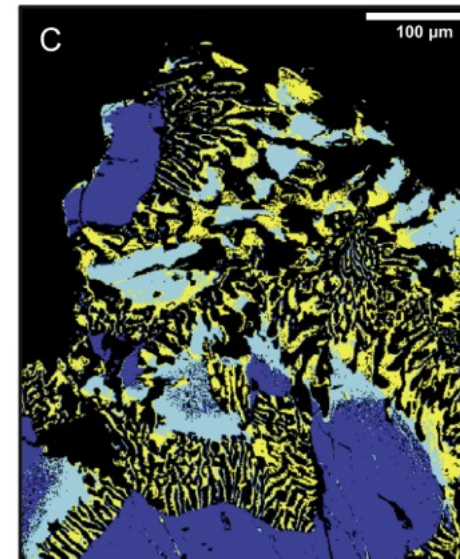
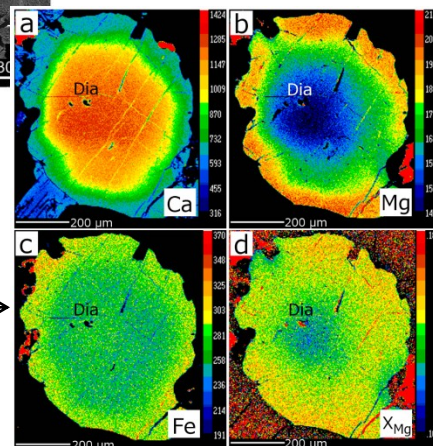
2 problémy:

2) heterogenita fází – komplikace, pokud chceme vypočítat celkové složení → odlišit jednotlivé zóny v rámci minerálů a při přípravě mapy fází jim přisoudit různé vrstvy, (komplexní metoda – kombinace XR-mapování a WDS analýz = **XMapTools**)

Lanari et al., 2014



↑ Nakamura et al., 2014
Haifler a Kotková, 2016

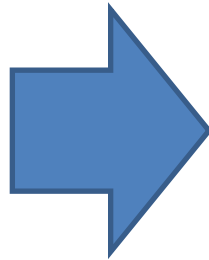


Vztah mezi minerálním a chemickým složením (horniny*)

* Nemusí jít nutně o celkové složení horniny, to se dá ostatně změřit celohorninovou analýzou. Velmi často půjde např. o výpočet složení určité reakční textury, pseudomorfózy nebo polyfázové inkluze.

minerální složení –
proporce jednotlivých
minerálů
(texturní analýza,
kvantitativní fázová
analýza...)

**chemické složení
minerálů** (elektronová
mikrosonda...)



**chemické složení směsi
(horniny, textury)...**

Vztah mezi minerálním a chemickým složením (horniny*)

v „objemových“ proporcích

minerální složení –
proporce jednotlivých
minerálů
(texturní analýza,
kvantitativní fázová
analýza...)

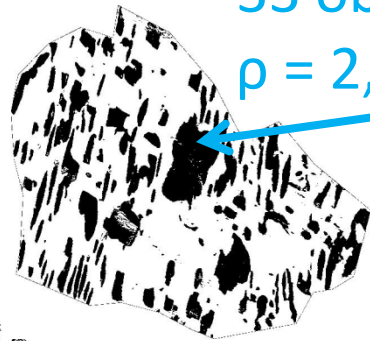
**chemické složení
minerálů** (elektronová
mikrosonda...)

převod na
hmotnostní proporce
pomocí hustoty

**chemické složení směsi
(horniny, textury)...**

v hmotnostních proporcích

Vztah mezi minerálním a chemickým složením (horniny*)



33 obj. %
 $\rho = 2,65$

	\emptyset Kfs		
SiO ₂	63.84	Ab	7.8%
Al ₂ O ₃	18.98	Kfs	88.9%
CaO	0.42	An	2.1%
Na ₂ O	0.86		
K ₂ O	14.85		
BaO	0.56		
Total	99.52		

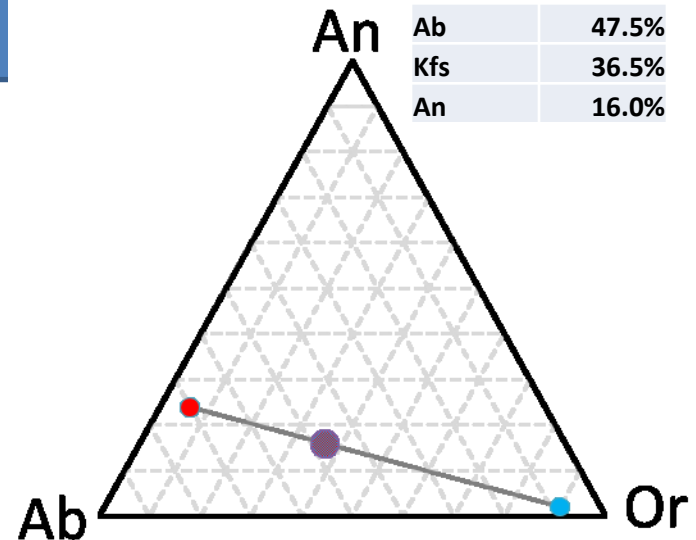
34 hm. %



67 obj. %
 $\rho = 2,56$

	\emptyset Pl		
SiO ₂	62.55	Ab	70.8%
Al ₂ O ₃	23.46	Kfs	6.0%
CaO	5.05	An	24.2%
Na ₂ O	8.16		
K ₂ O	1.05		
BaO	0.00		
Total	100.26		

66 hm. %

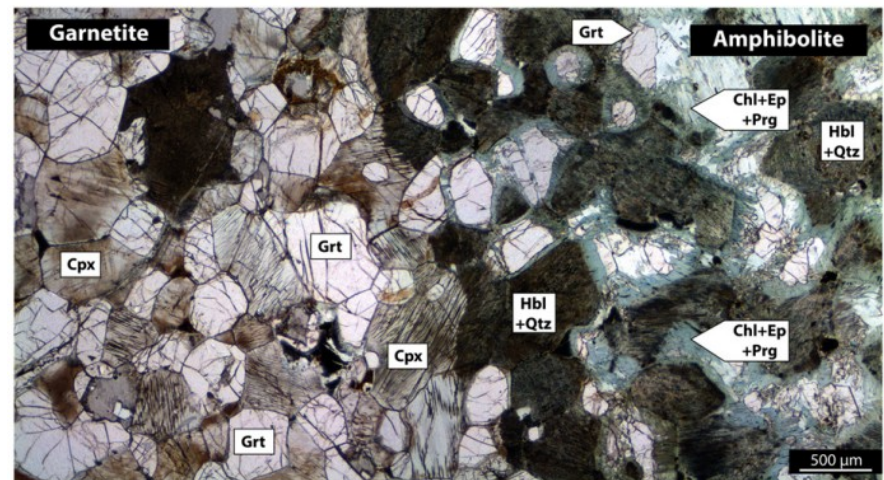


Hmotová bilance

Bilancuje se přírůstek či úbytek hmoty (a jednotlivých složek) mezi stavem výchozím a konečným.

Příkladové aplikace:

- hydrotermální alterace, metasomatóza
- střížné zóny
- segregace taveniny při migmatizaci
- zvětrávání (např. lateritický profil)



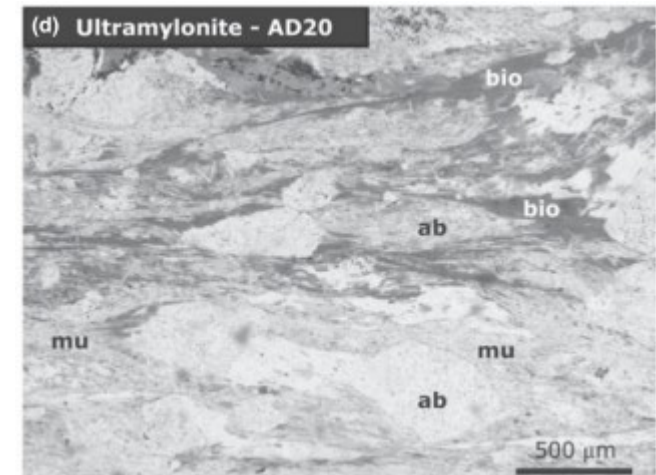
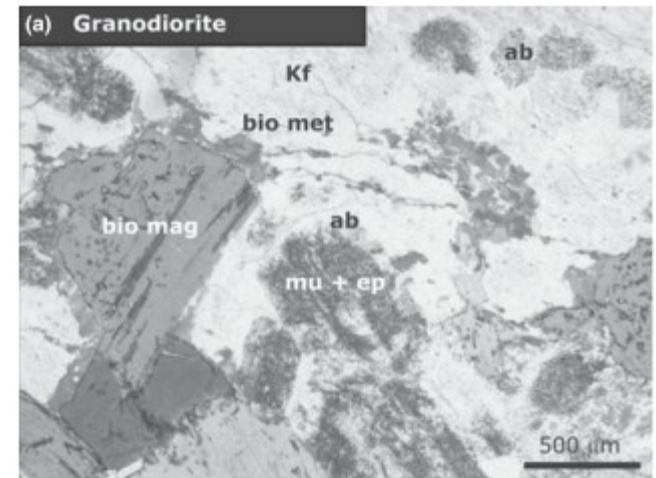
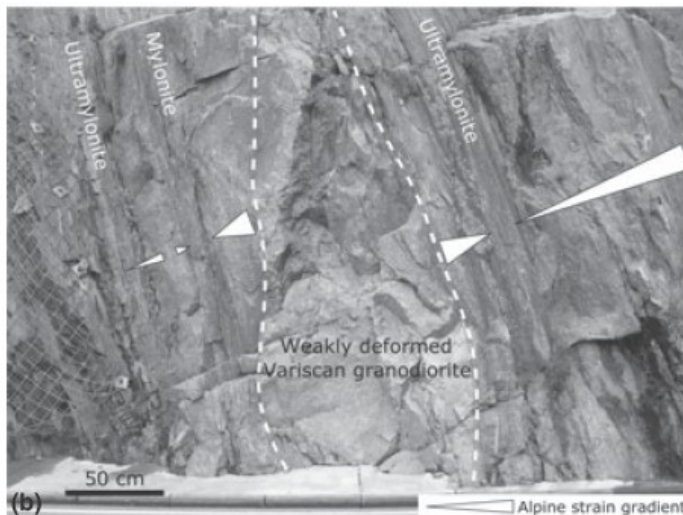
Centrella et al., 2015

Hmotová bilance

Bilancuje se přírůstek či úbytek hmoty (a jednotlivých složek) mezi stavem výchozím a konečným.

Příkladové aplikace:

- hydrotermální alterace, metasomatóza
- **střížné zóny**
- segregace taveniny při migmatizaci
- zvětrávání (např. lateritický profil)

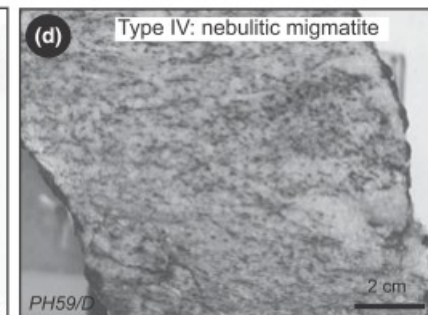
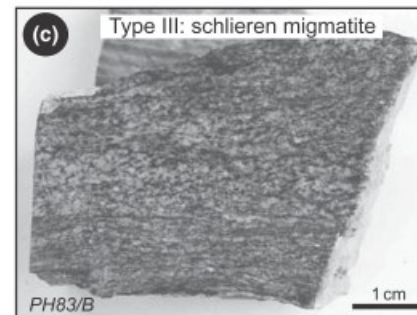
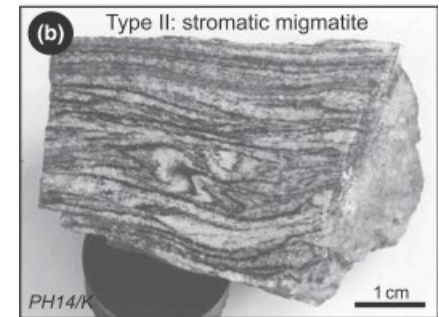
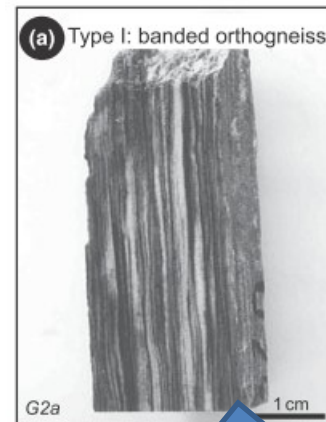


Hmotová bilance

Bilancuje se přírůstek či úbytek hmoty (a jednotlivých složek) mezi stavem výchozím a konečným.

Příkladové aplikace:

- hydrotermální alterace, metasomatóza
- střížné zóny
- **segregace taveniny při migmatizaci**
- zvětrávání (např. lateritický profil)



Hmotová bilance

Bilancuje se přírůstek či úbytek hmoty (a jednotlivých složek) mezi stavem výchozím a konečným.

Příkladové aplikace:

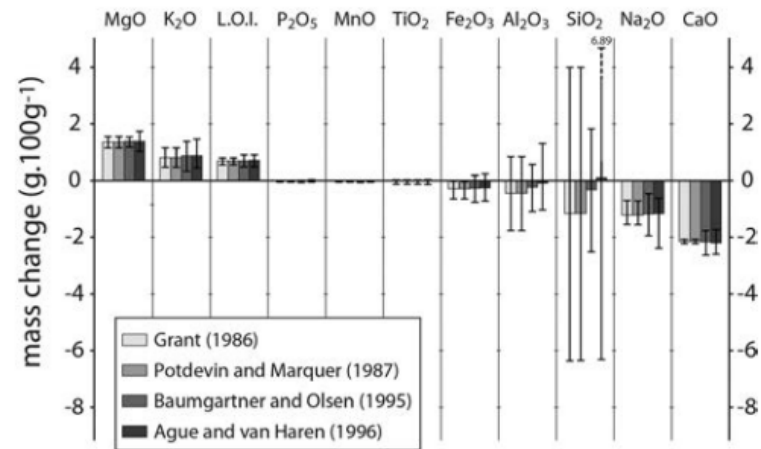
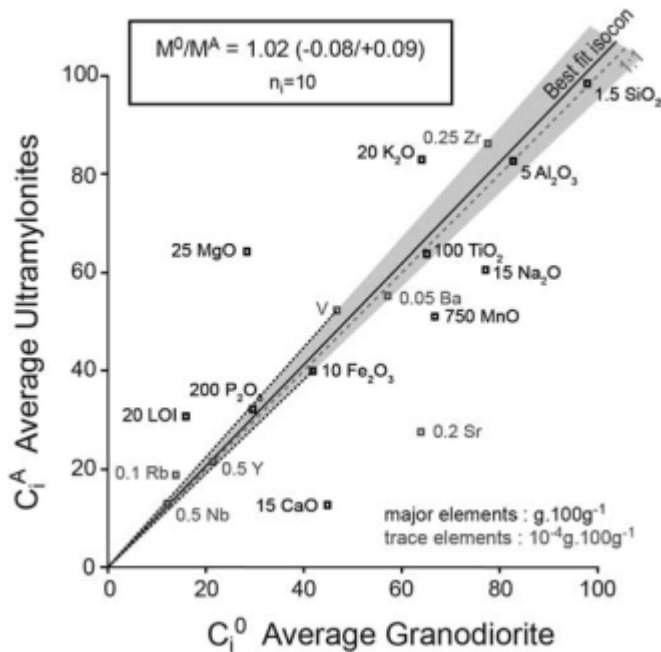
- hydrotermální alterace, metasomatóza
- střížné zóny
- segregace taveniny při migmatizaci
- **zvětrávání (např. lateritický profil)**



Berger et al., 2014

Hmotová bilance

Bilance je vztažena k určitému tzv. **referenčnímu rámci**. Tím je např. předpoklad, že některá ze složek je nemobilní (při procesu ani nepřibude ani neubude) nebo byl zachován objem tělesa výchozího (pseudomorfóza).



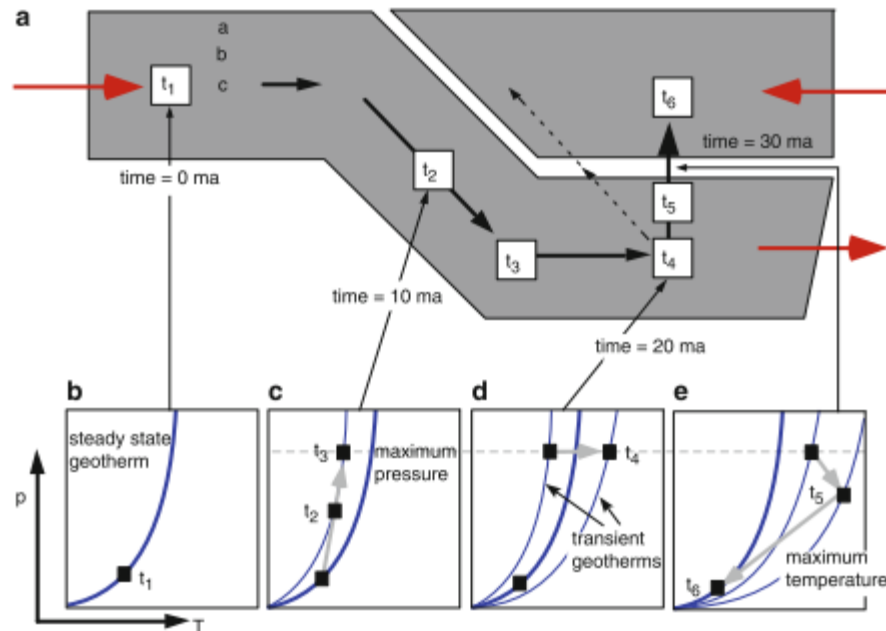
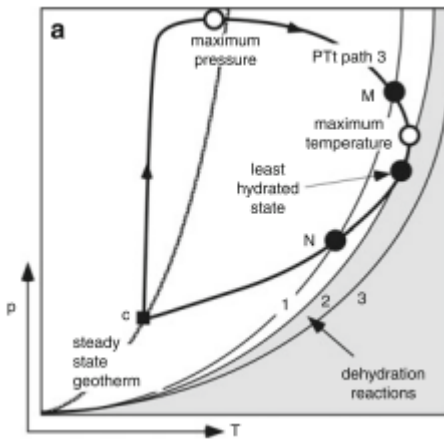
Durand et al., 2015

Termobarometrie

Slouží k odhadu P-T podmínek, za kterých byla v rovnováze určitá minerální asociace

Zejména studium metamorfních hornin

Význam např. pro konstrukci tzv. P-T drah vývoje dané horniny a v širším kontextu pro geotektonické modely

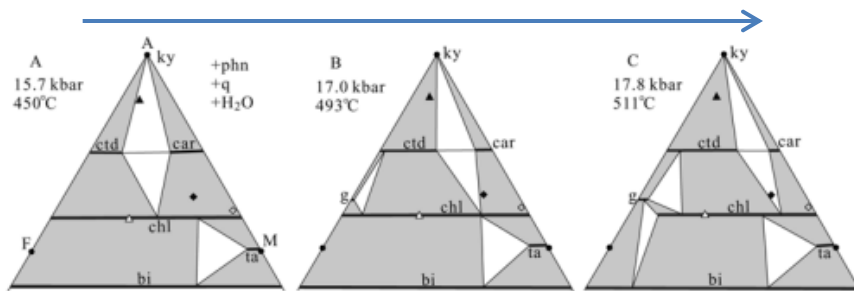


Rodney a Grapes, 2015

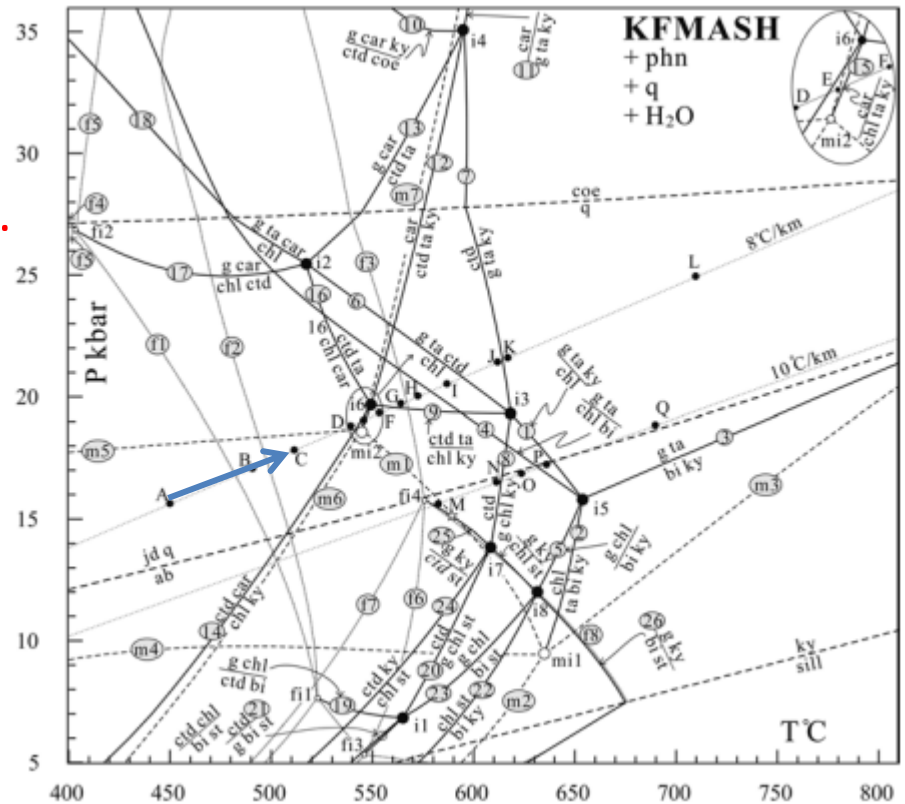
Termobarometrie

- **P-T mřížky a kompatibilitní diagramy** – užitečné pro základní orientaci v minerálních rovnováhách; komplikovanější a omezené užití pro složitější systémy

Přehled minerálních reakcí není předmětem našeho zájmu (probírá se v navazující magm. a mtrmf. petrologii).



Wei a Powell, 2003



Termobarometrie

Několik metod probíraných v tomto předmětu:

- solvní termometrie
- konvenční termobarometrie
- obsah stopových prvků v minerálech
- termodynamické modelování (pseudosekce...)

Pozor! Při aplikaci metody se předpokládá **rovnováha** mezi uvažovanými minerály – vyžaduje pečlivé petrografické studium horniny.

Solvní termometrie

Využití určité, omezené mísitelnosti minerálů s blízkou strukturou, která je závislá na teplotě.

- **solvní živcová termometrie**
- kalcit – dolomit
- ortopyroxen – klinopyroxen
- muskovit – paragonit

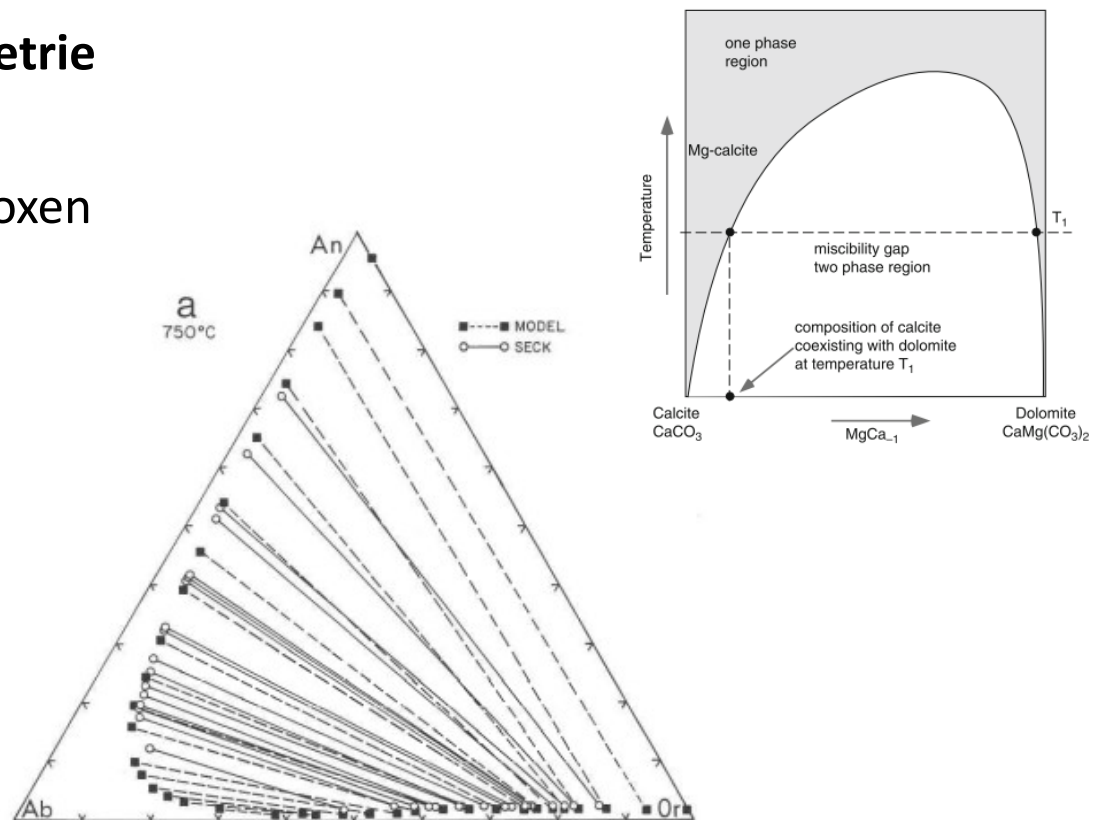
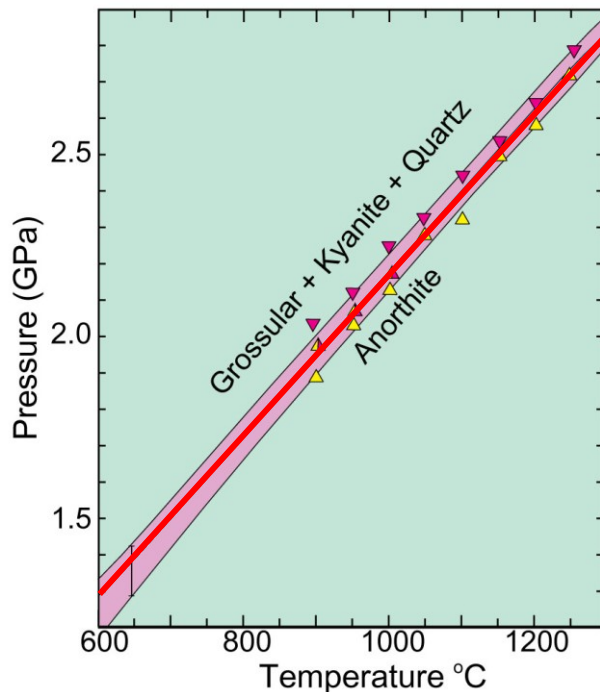


Fig. 2. Comparison of isotherms calculated from our model with the experimental data of Seck (1971a). (a) 750 °C, 1 kbar; (b) 825 °C, 1 kbar; (c) 900 °C, 0.5 kbar. In Fig. 2c, * marks the bulk composition of a mesoperthite homogenized by Morse (1969, p. 125).

Konvenční termobarometrie

Principem je distribuce hlavních prvků mezi (zejména) horninotvornými minerály v rámci určité asociace. Tato distribuce je funkcí teploty, tlaku a složení.

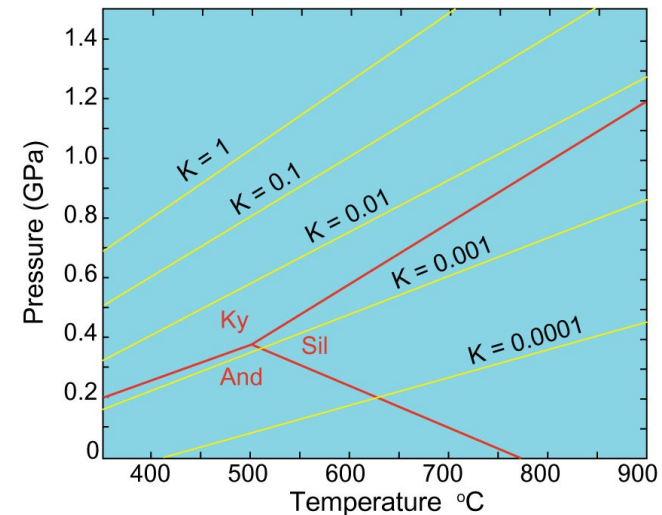
systém $\text{CaO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$



asociace Grs+Ky+Qz+An
fázové pravidlo:
složky 3
fáze 4
variance 1

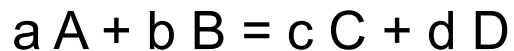
asociace Grt+Ky+Qz+Pl
fázové pravidlo:
složky ≥ 4
fáze 4
variance ≥ 2

systém o více složkách
(např. + Mg, Fe, Na)



Konvenční termobarometrie

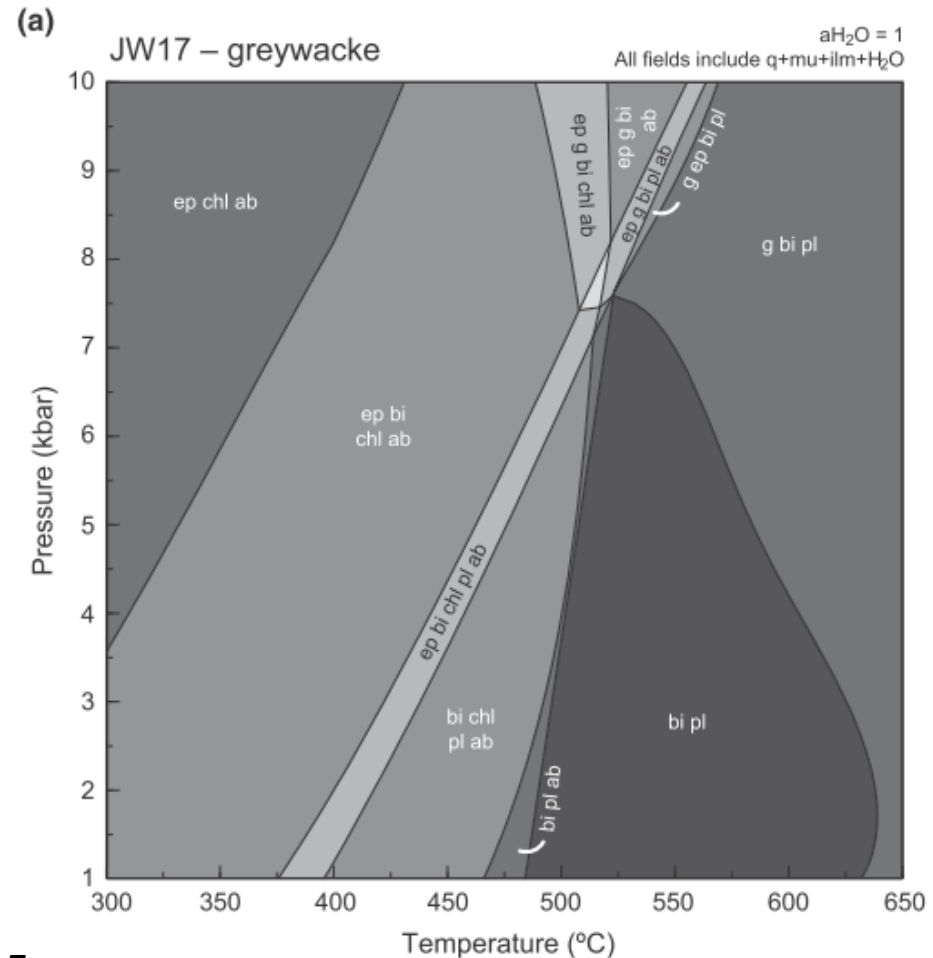
Principem je distribuce hlavních prvků mezi (zejména) horninotvornými minerály v rámci určité asociace. Tato distribuce je funkcí teploty, tlaku a složení.



$$\Delta G_r = \Delta G_r + RT \ln K_{eq} = 0$$

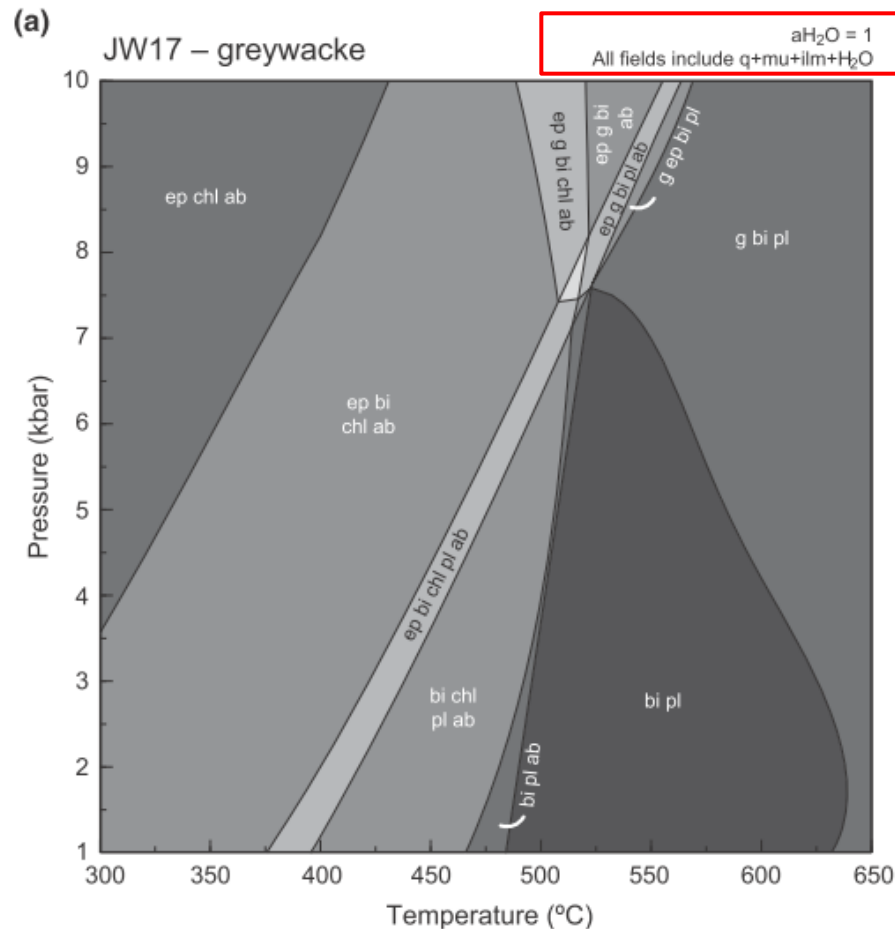
Termodynamické modelování

Principem je distribuce hlavních prvků mezi (zejména) horninotvornými minerály v závislosti na tlaku a teplotě. Modelují se (nejčastěji) **P-T diagramy pro konkrétní horninová složení** (pseudosekce), ve kterých jsou zobrazena pole se stabilními minerálními asociacemi v daném P-T rozpětí. Model se porovnává se studovanou minerální asociací.



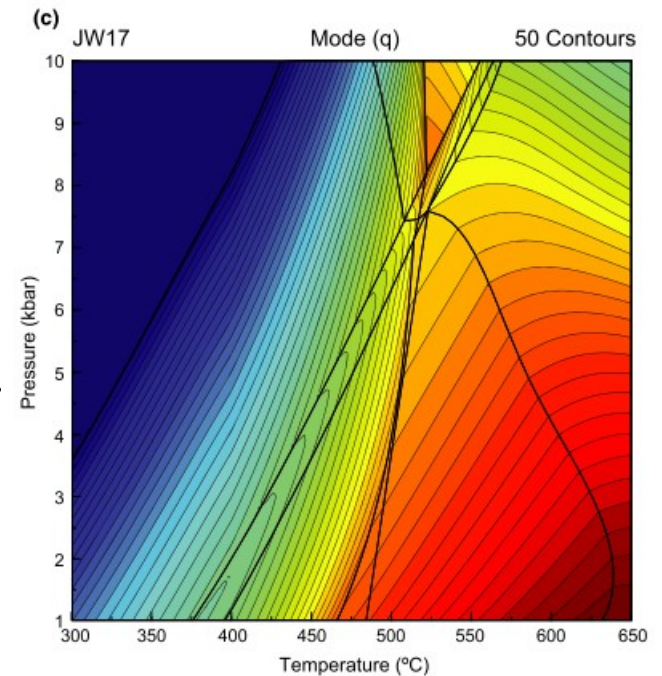
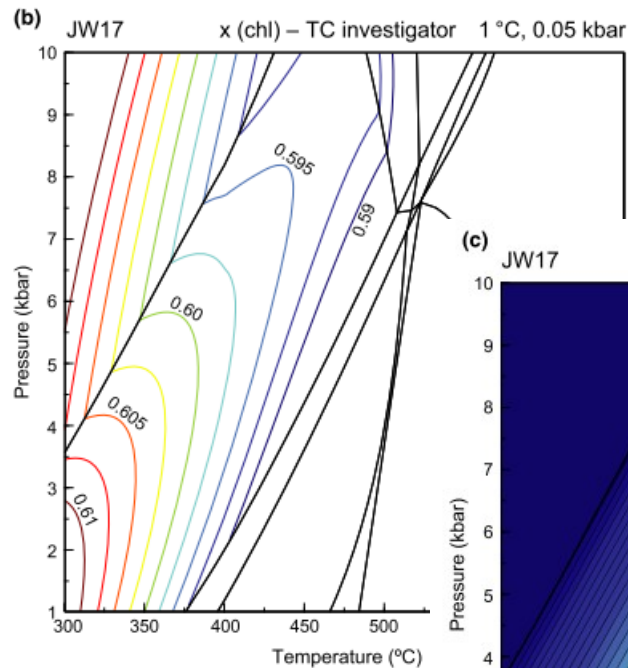
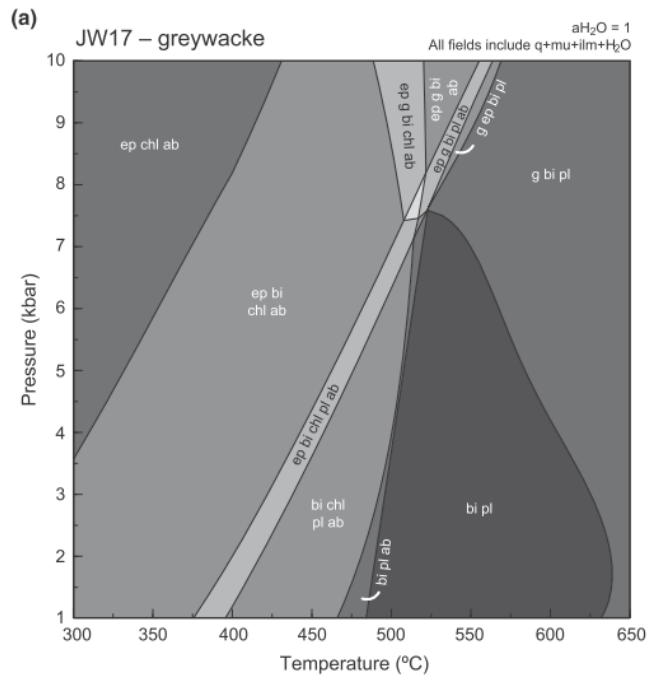
Termodynamické modelování

Modelovaný systém může obsahovat prakticky všechny významné komponenty: $\text{Na}_2\text{O}-\text{CaO}-\text{K}_2\text{O}-\text{FeO}-\text{MgO}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2-\text{H}_2\text{O}$ ($\pm\text{Fe}_2\text{O}_3-\text{MnO}-\text{TiO}_2-\text{CO}_2\dots$)



Termodynamické modelování

Modelování množství a složení fází prostřednictvím izopleť



Pearce et al., 2015

Rozdíl: konvenční termobarometrie vs termodynamické modelování

Principem obou je distribuce hlavních prvků mezi (zejména) horninotvornými minerály.

konvenční termobarometrie – tzv. inverzní přístup = z minerální asociace a složení minerálů výpočet P-T podmínek

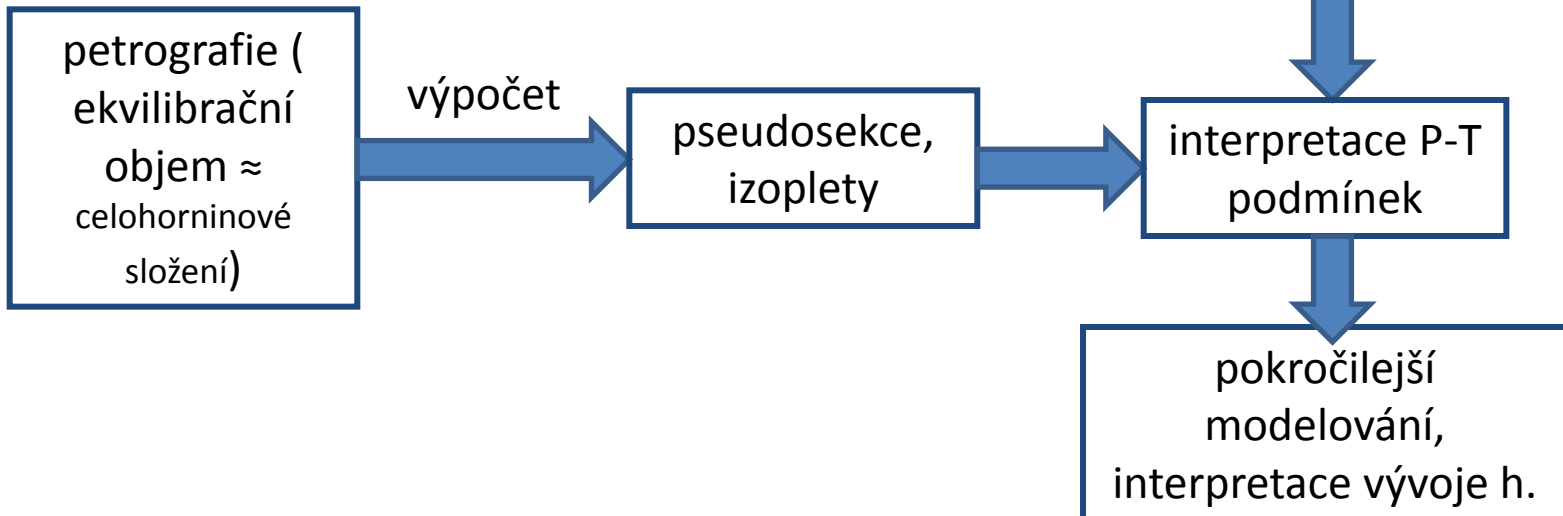
termodynamické modelování – tzv. dopředný, „forward“ přístup = pro vybrané rozpětí podmínek se modelují výsledné asociace a minerální složení, a hledá se shoda s petrografií

Rozdíl: konvenční termobarometrie vs termodynamické modelování

konvenční termobarometrie



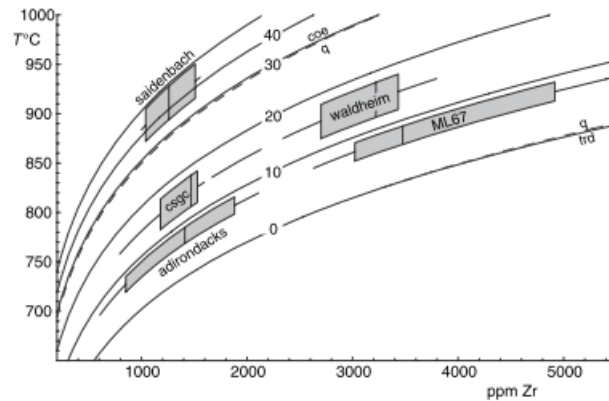
termodynamické modelování



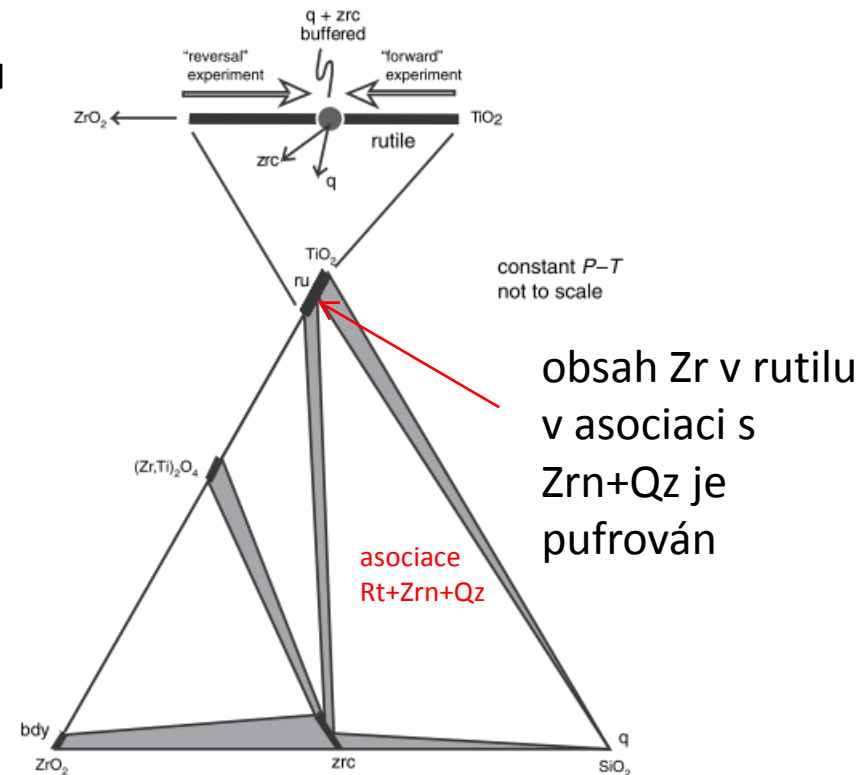
Rozpustnost stopových prvků v (horninotvorných) minerálech

- Zr v rutilu
 - Ti v zirkonu
 - Ti v křemeni
- a další

Zr v rutilu



Tomkins et al., 2007



Souvislost mezi vybranými metodami

