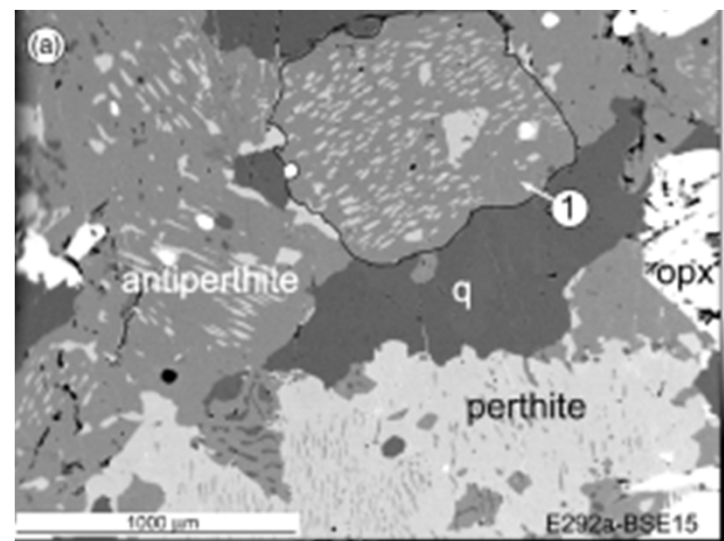
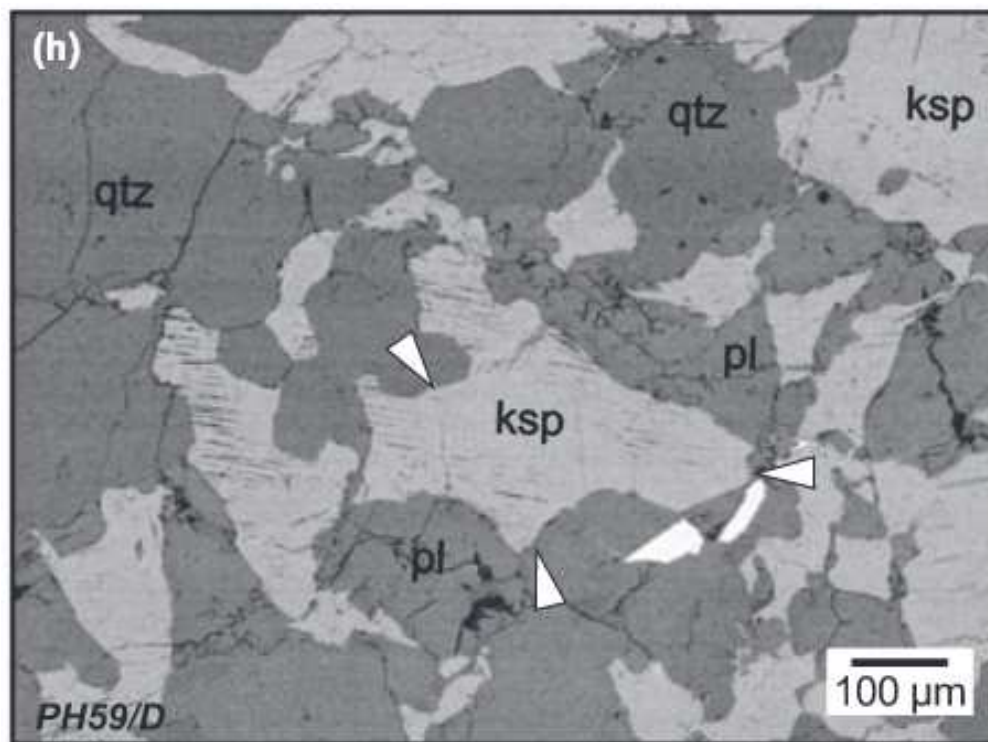


Solvní živcová termometrie

Solvní živcová termometrie

Pro solvní živcovou termometrii se využívá koexistence dvou živců v hornině (např. u granulitů, migmatitů, ortorul, granitů) – plagioklasu a alkalického živce.

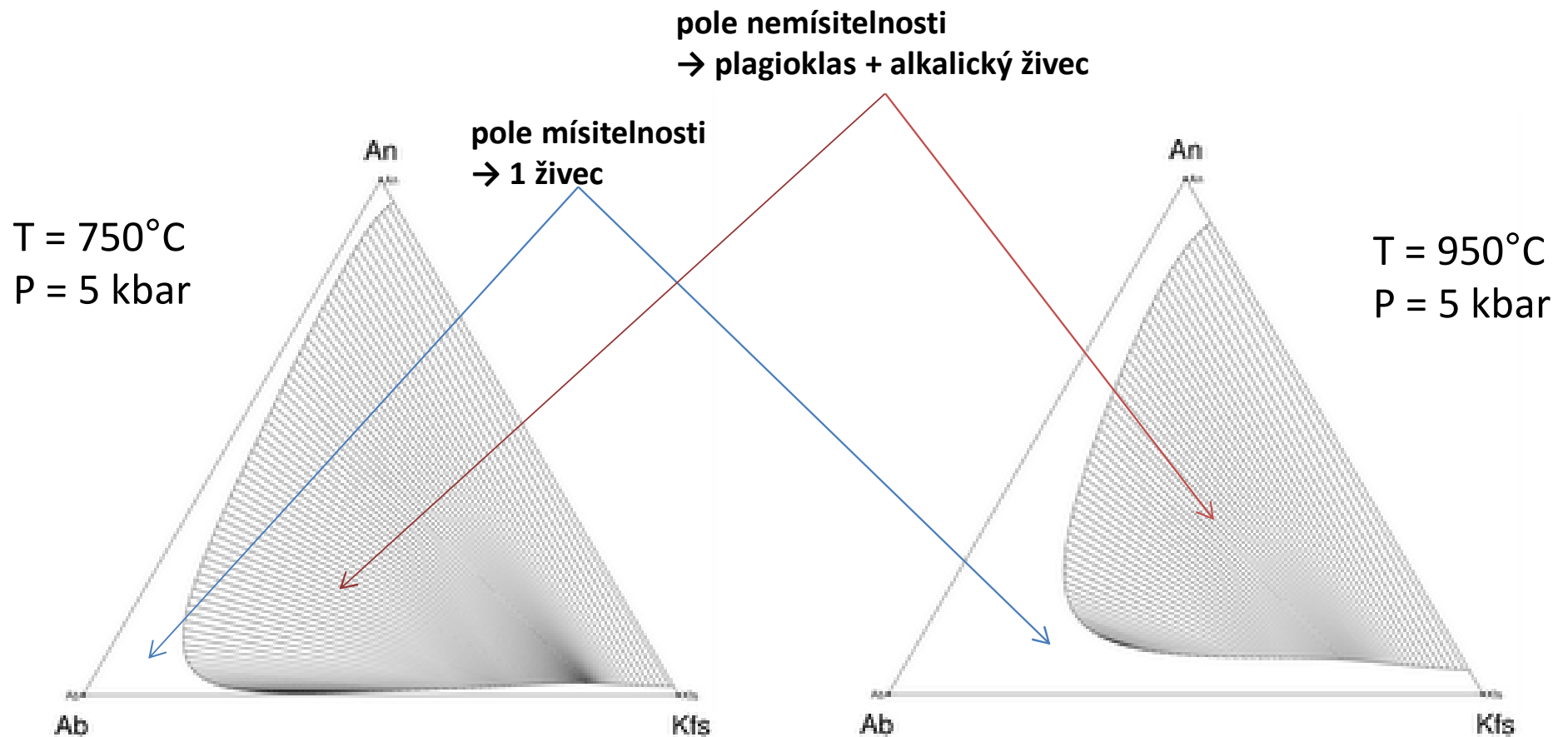
migmatit (BSE obraz); Hasalová et al. 2008



HP granulit (BSE obraz); Štípská a Powell 2005

Koexistence dvou živců je způsobena výrazně omezenou mísitelností (solvus) koncových členů v ternárním systému Ab-Kfs-An.

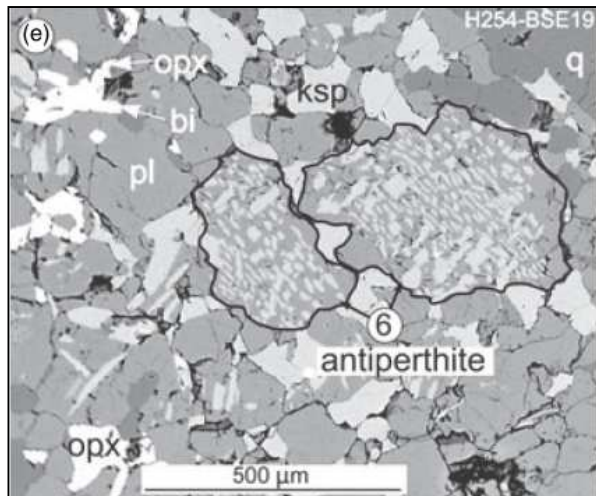
Jejich mísitelnost se mění s T a P.



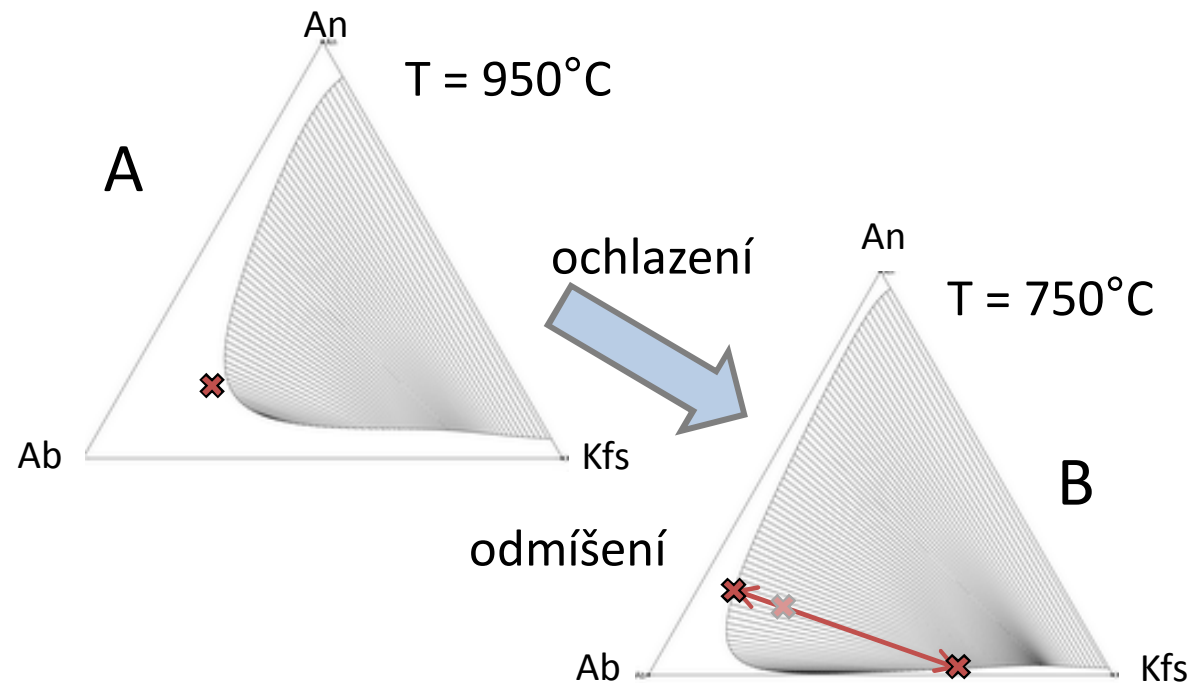
Hypersolvní a subsolvní živce a odmíšení

Za dostatečně vysoké teploty může v hornině vzniknout jeden hypersolvní ternární živec (A).

Při poklesu teploty běžně dochází k jeho rozpadu a odmíšení na pár plagioklas – alkalický živec (B). Tímto způsobem vznikají pertity (lamely Pl v Afs) a antipertity (lamely Afs v Pl).



HP granulit (BSE obraz); Štípská a Powell 2005



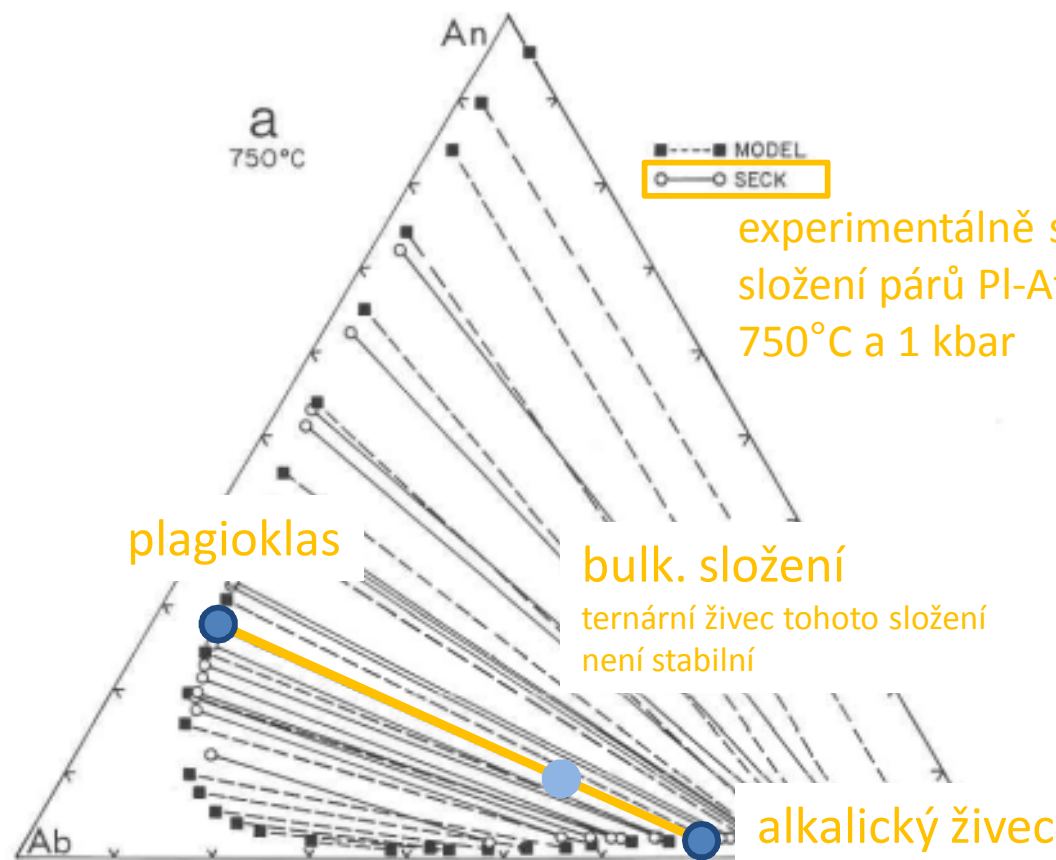
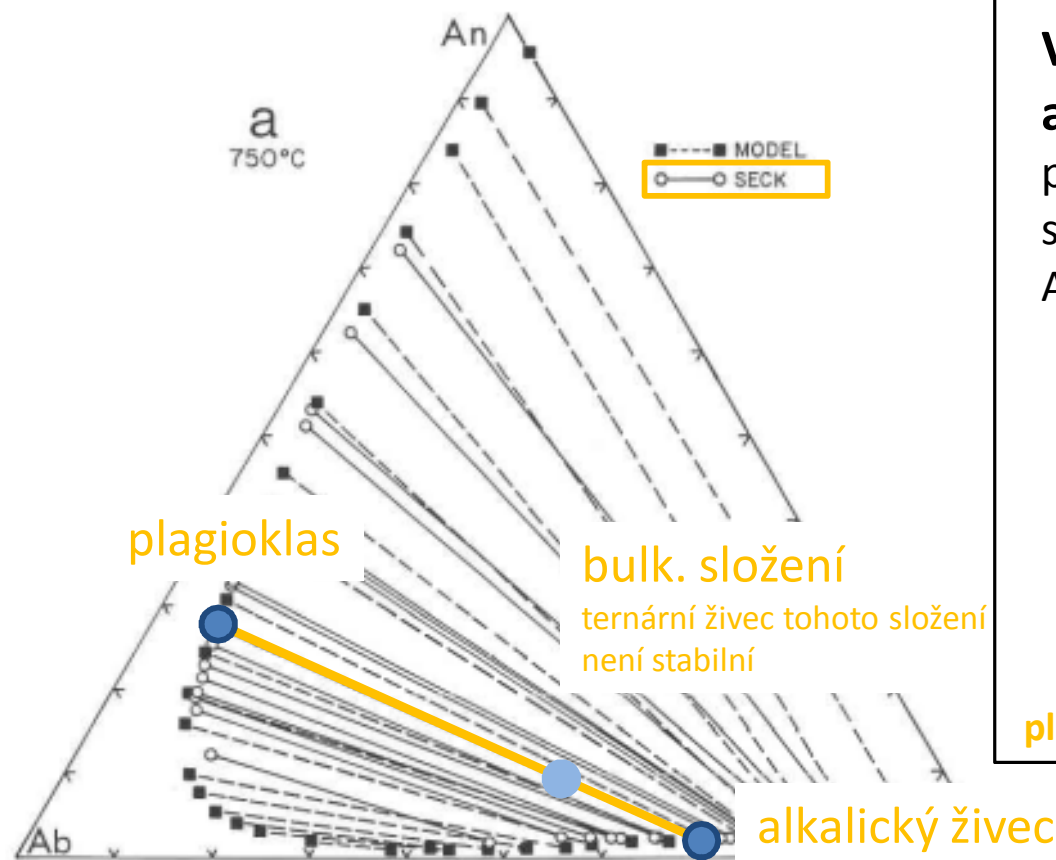


Fig. 2. Comparison of isotherms calculated from our model with the experimental data of Seck (1971a). (a) 750 °C, 1 kbar; (b) 825 °C, 1 kbar; (c) 900 °C, 0.5 kbar. In Fig. 2c, * marks the bulk composition of a mesoperthite homogenized by Morse (1969, p. 125).

Fuhrman a Lindsley 1988, experimentální data Seck 1971



Vzájemné proporce plagioklasu a alkalického živce

platí pákové pravidlo (vizuálně je složení blíže Afs, a tudíž množství $Afs > PI$)

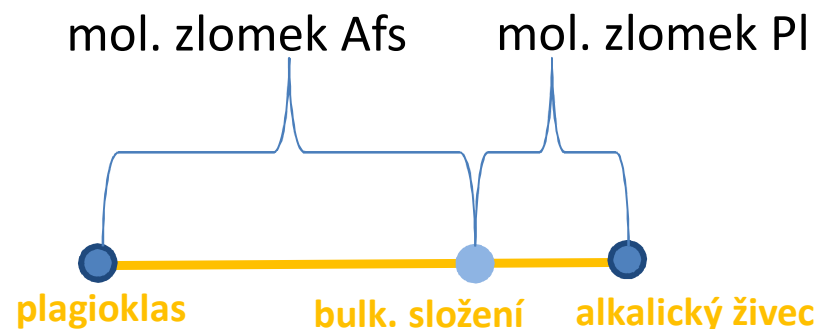
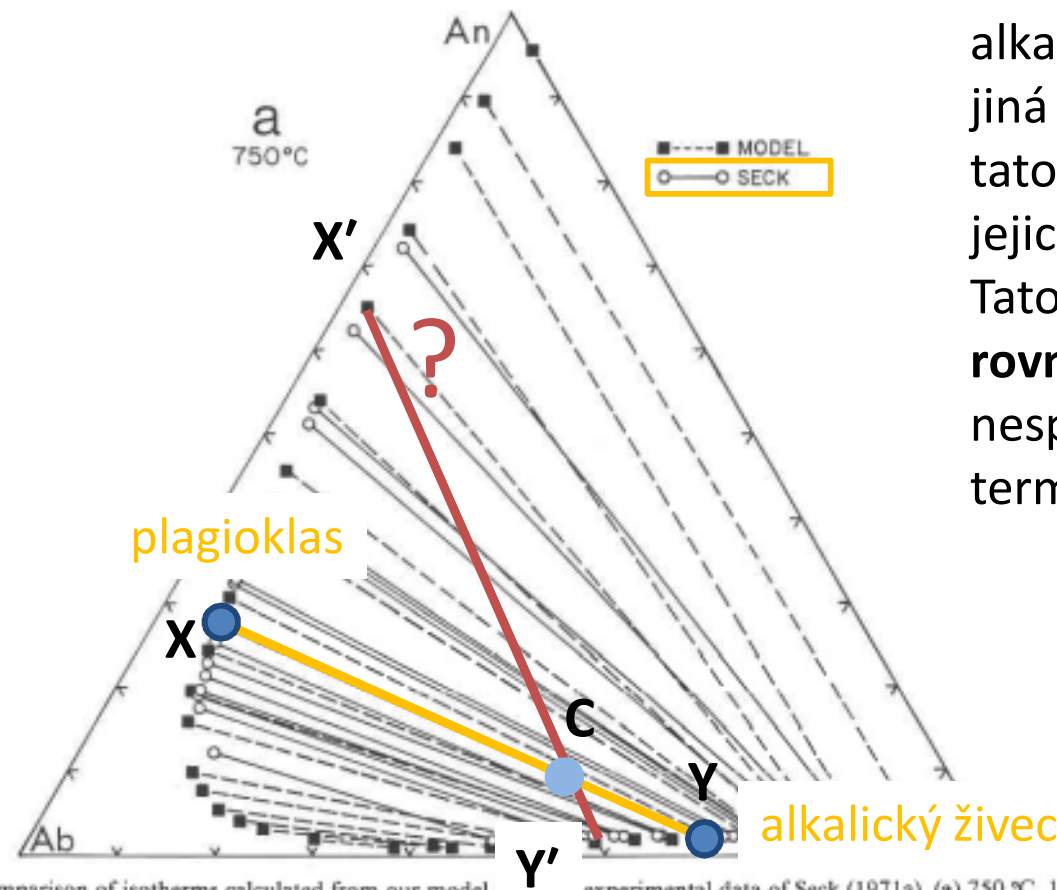


Fig. 2. Comparison of isotherms calculated from our model with the experimental data of Seck (1971a). (a) 750 °C, 1 kbar; (b) 825 °C, 1 kbar; (c) 900 °C, 0.5 kbar. In Fig. 2c, * marks the bulk composition of a mesoperthite homogenized by Morse (1969, p. 125).

Fuhrman a Lindsley 1988, experimentální data Seck 1971

Pozor!



Mohlo by se zdát, že bulk. složení C může kromě plagioklasu X a alkalického živce Y generovat různá jiná složení, např. X' a Y' atd., protože tato složení také leží na křivce solvu, a jejich kombinace dává složení C. Tato složení však **nemůžou v rovnováze koexistovat**, protože nesplňují klíčovou podmínku termodynamické rovnováhy (viz dále).

Fig. 2. Comparison of isotherms calculated from our model 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).

Fuhrman a Lindsley 1988, experimentální data Seck 1971

Složení koexistujícího páru živců

Z principů termodynamiky vyplývá, že chemické potenciály složky i v různých fázích, které jsou navzájem v rovnováze, jsou shodné. V našem případě mohou být složkami konc. členy Ab , Kfs , An a fázemi Pl a Kfs .

Pro rovnovážná složení platí v případě Ab jako složky:

$$G^{\circ}_{Ab(Pl)} + RT \ln a_{Ab(Pl)} = G^{\circ}_{Ab(Afs)} + RT \ln a_{Ab(Afs)}$$

Členy G° na levé i pravé straně jsou si rovny, protože odkazují na shodný standardní stav. Proto při rovnováze mezi Pl a Afs platí i rovnost termodynamických aktivit jednotlivých složek.

$$a_{Ab(Pl)} = a_{Ab(Afs)}$$

$$a_{Kfs(Pl)} = a_{Kfs(Afs)}$$

$$a_{An(Pl)} = a_{An(Afs)}$$

Formulace termometru

pro vyjádření aktivit potřebujeme tzv. *mixing* neboli *solid-solution* neboli *activity-composition* model (vztah mezi koncentrací X_i a aktivitou složek – koncových členů)

$$G_{i(A)}^{mix} = RT \ln a_{i(A)} = G_{i(A)}^{id.mix} + G_{i(A)}^{xs} = RT \ln(X_{i(A)} \cdot \delta_{i(A)}^{conf}) + G_{i(A)}^{xs}$$

Za rovnováhy pro každou složku platí

$$a_{i(Pl)} = a_{i(Afs)} \Leftrightarrow G_{i(Pl)}^{mix} = G_{i(Afs)}^{mix}$$

$$RT \ln(X_{i(Pl)} \cdot \delta_{i(Pl)}^{conf}) + G_{i(Pl)}^{xs} = RT \ln(X_{i(Afs)} \cdot \delta_{i(Afs)}^{conf}) + G_{i(Afs)}^{xs}$$

$$T = \frac{G_{i(Afs)}^{xs} - G_{i(Pl)}^{xs}}{R(\ln(X_{i(Pl)} \cdot \delta_{i(Pl)}^{conf}) - \ln(X_{i(Afs)} \cdot \delta_{i(Afs)}^{conf}))}$$

tuto rovnici lze napsat pro každou ze složek a spočítat tak T_{Ab} , T_{Kfs} , T_{An}

$$T_{Ab} = \frac{G_{Ab(Afs)}^{xs} - G_{Ab(Pl)}^{xs}}{R(\ln(X_{Ab(Pl)} \cdot \delta_{Ab(Pl)}^{conf}) - \ln(X_{Ab(Afs)} \cdot \delta_{Ab(Afs)}^{conf}))}$$

Vyjádření G^{xs} záleží na typu modelu

Marguleho parametry

$$W_G = W_E - TW_S + W_V P$$

celkový **Marguleho parametr** pro interakci složek (např. AbOr) se vypočítá z dílčích parametrů (viz tabulka na následující straně) a je funkcí T a P

Po dosazení formulace G^{xs} do rovnice nahoře včetně vyjádření celkových Marguleho parametrů je T jak na levé, tak na pravé straně rovnice (člen $-TW_S$). Proto je třeba rovnici ještě upravit, přesunout tento člen doleva, vytknout T a zbytek přesunout zpět doprava.

Příspěvek **Al-Si uspořádání** (δ^{conf})

u některých modelů nezahrnut (= 1)

$$\delta_{Ab}^{conf.} = [1 - X_{An} X_{An}]$$

$$\delta_{Or}^{conf.} = [1 - X_{An} X_{An}]$$

$$\delta_{An}^{conf.} = [(1 + X_{An})^2/4]$$

$$G_{Ab}^{xs} =$$

$$\begin{aligned} \bar{Y}_{Ab}^{xs} = & W_{YAbOr} (X_{Or} X_{Or} (1 - 2X_{Ab}) \\ & + X_{Or} X_{An} (0.5 - X_{Ab})) \\ & + W_{YOrAb} (2X_{Ab} X_{Or} (1 - X_{Ab}) \\ & + X_{Or} X_{An} (0.5 - X_{Ab})) \\ & + W_{YAbAn} (X_{An} X_{An} (1 - 2X_{Ab}) \\ & + X_{Or} X_{An} (0.5 - X_{Ab})) \\ & + W_{YAnAb} (2X_{Ab} X_{An} (1 - X_{Ab}) \\ & + X_{Or} X_{An} (0.5 - X_{Ab})) \\ & + W_{YOrAn} X_{Or} X_{An} (0.5 - X_{Ab} - 2X_{An}) \\ & + W_{YAnOr} X_{Or} X_{An} (0.5 - X_{Ab} - 2X_{Or}) \\ & + W_{YAbOrAn} X_{Or} X_{An} (1 - 2X_{Ab}) \end{aligned}$$

Modely pro ternární živec používané v programu SolvCalc

Table 1. Margules parameters of six ternary solution models (in joules)

Models		Elkins and Grove (1990)	Nekvasil and Burnham (1987)	Lindsley and Nekvasil (1988)	Ghiorso (1984)	Fuhrman and Lindsley (1988)	Green and Urdiansky (1986)
WE or WH	AbOr	18,810	30,978	18,810	30,978	18,810	18,810
	OrAb	27,320	17,062	27,320	17,062	27,320	27,320
	AbAn	7924	14,129.4	14,129	28,226	28,226	28,230
	AnAb	0	11,225.7	11,226	8471	8471	8473
	OrAn	40,317	25,030.3	33,415	67,469	52,468*	65,305
	AnOr	38,974	75,023.3	43,369	27,983	47,396*	-65,407
WS	AbOrAn	12,545	0	19,969	-13,869	8700	0
	AbOr	10.3	21.4	10.3	21.4	10.3	10.3
	OrAb	10.3	0	10.3	0	10.3	10.3
	AbAn	0	6.14	6.18	0	0	0
	AnAb	0	7.87	7.87	0	0	0
	OrAn	0	-10.8	0	-20.21	0	-114.104
WV	AnOr	0	22.97	8.43	11.06	0	12.537
	AbOrAn	0	0	0	-14.63	0	0
	AbOr	0.4602†	0.361	0.4602‡	0.361	0.394	0.364
	OrAb	0.3264†	0.361	0.3264‡	0.361	0.394	0.364
	AbAn	0	0	0	0	0	0
	AnAb	0	0	0	0	0	0
δ_{conf}	OrAn	0	0	0	0	0	0.9699
	AnOr	-0.1037	0	-0.1037	0	-0.120	2.1121
	AbOrAn	-1.095	0	-1.095	0	-1.094	0
Additional entropy contribution		No	No	No	Yes	Yes	Yes

*The sequence of WOrAn and WAnOr incorrectly tabulated in Fuhrman and Lindsley (1988) is shown correctly here (D. H. Lindsley, pers comm.)

†For unknown reasons these terms do not precisely replicate the temperatures tabulated by Elkins and Grove, 1990 (table 6).

‡These values were obtained by regression of ternary data and are not those of Hovis (1988). [Fortuitously WVAbOr (Fuhrman and Lindsley, 1988) is approximately numerically equal to WVOrAb (Hovis, 1988).]

Další používané modely:

Holland a Powell 2003

jiný typ modelu (asymetrický formalismus), používán zejména u modelování pseudosekcí

Benisek et al. 2010

Pozor na původní článek Fuhrman a Lindsley 1988, kde jsou hodnoty přehozené. Tato chyba je např. také zanesena v databázi JUN92.bs v programu Theriak/Domino.

Wen a Nekvasil 1994

Výpočet teplot pomocí programu SolvCalc

jako vstupní data slouží

- 1) složení plagioklasu (X_{Ab} , X_{Kfs} , X_{An}) a alkalického živce (X_{Ab} , X_{Kfs} , X_{An})
- 2) tlak
- 3) výběr mixing-modelu

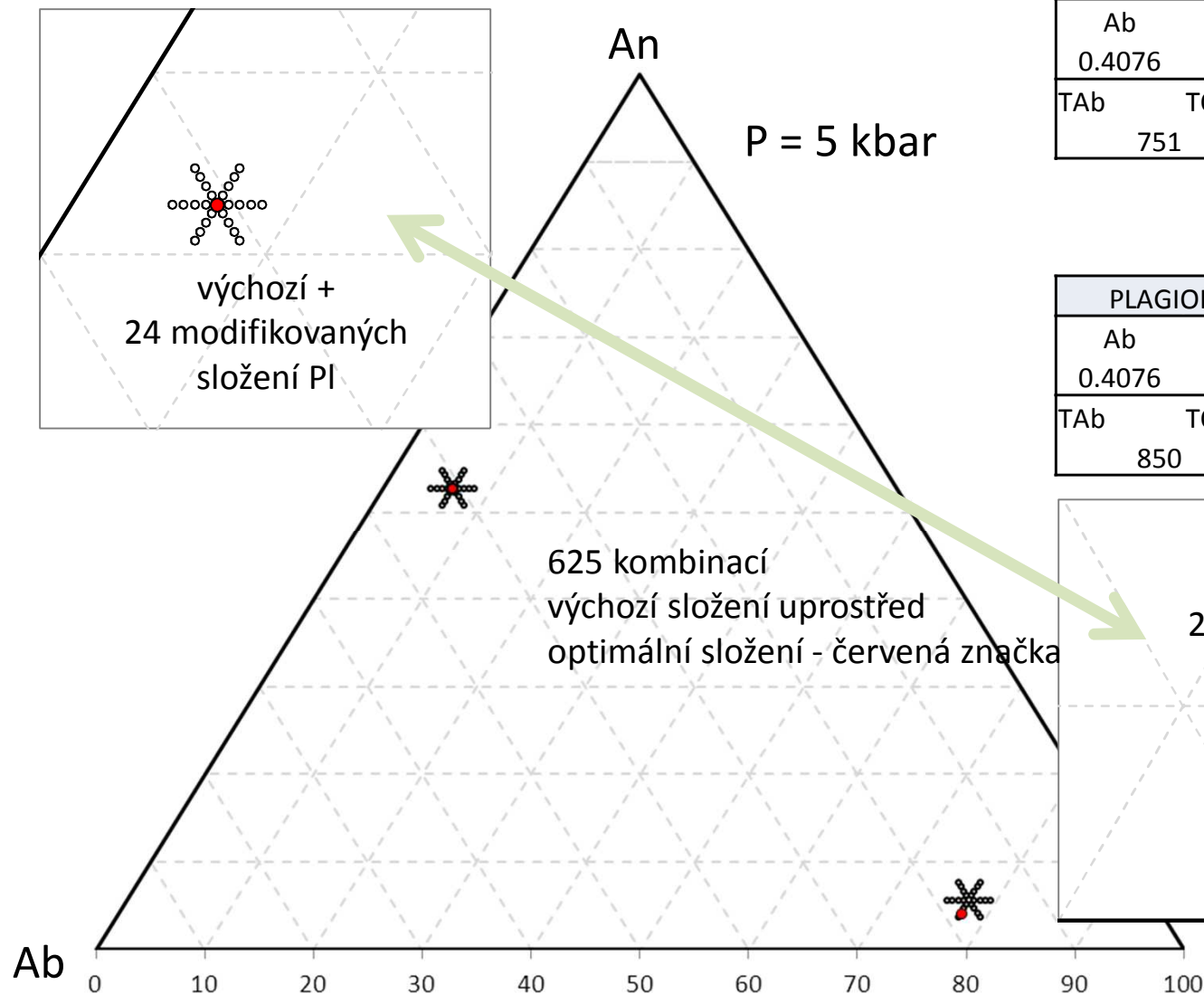
výstup: z formulace termometru (viz předchozí text) lze spočítat 3 teploty (T_{Ab} , T_{Kfs} , T_{An}), které jsou v ideálním případě totožné nebo alespoň velmi blízké – v tomto případě budou přibližně odpovídat rovnovážné teplotě

reálná složení ovšem velmi často dají poměrně různé teploty, protože výpočet může být velmi citlivý na zadaná složení

algoritmus použitý ve Fuhrman a Lindley 1998 a také v SolvCalcu zadaná složení mírně modifikuje za účelem dostat co nejvhodnější trojici teplot

Modifikace složení

optimální složení pro Pl i Afs hledáno v rozsahu
2 mol. % od výchozího, krok 0.5 mol. %

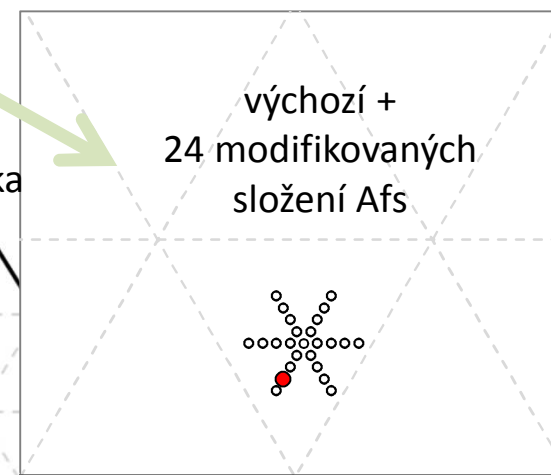


PLAGIOKLAS			ALKALICKÝ ŽIVEC		
Ab	Or	An	Ab	Or	An
0.4076	0.0650	0.5274	0.1688	0.7750	0.0562
TAb	TOr	TAn			
751	847	958 °C			

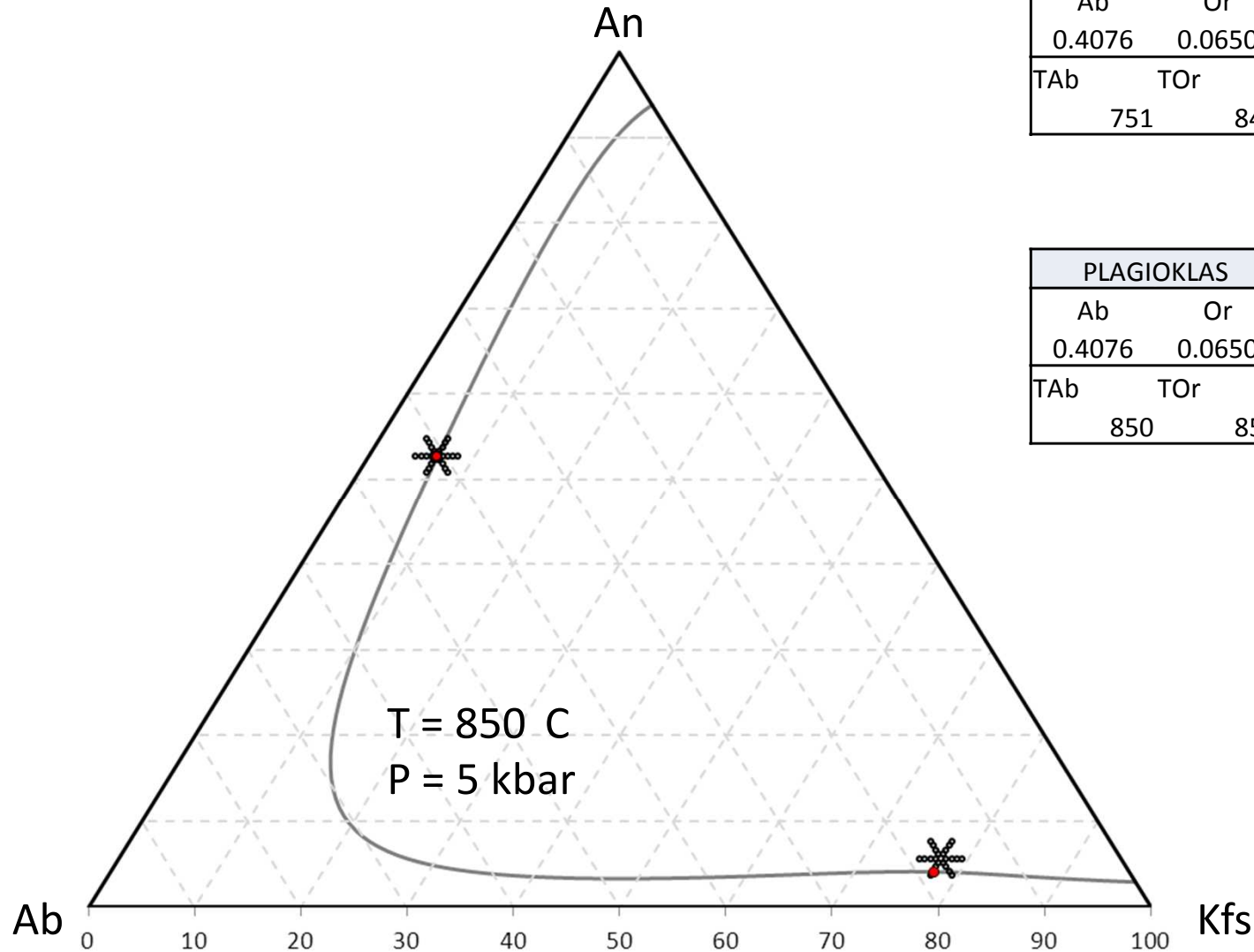
+ 1.5 mol. % Ab

-1.5 mol. % An

PLAGIOKLAS			ALKALICKÝ ŽIVEC		
Ab	Or	An	Ab	Or	An
0.4076	0.0650	0.5274	0.1838	0.7750	0.0412
TAb	TOr	TAn			
850	850	850 °C			



Modifikace složení



PLAGIOKLAS			ALKALICKÝ ŽIVEC		
Ab	Or	An	Ab	Or	An
0.4076	0.0650	0.5274	0.1688	0.7750	0.0562
TAb	TOr	TAn			
751	847	958 °C			

PLAGIOKLAS			ALKALICKÝ ŽIVEC		
Ab	Or	An	Ab	Or	An
0.4076	0.0650	0.5274	0.1838	0.7750	0.0412
TAb	TOr	TAn			
850	850	850 °C			