

Solvní živcová termometrie

cvičení

Úloha 1: Pomocí programu SolvCalc vykreslete křivky solvu v ternárním diagramu Ab-Kfs-An.

Použijte mixing modely

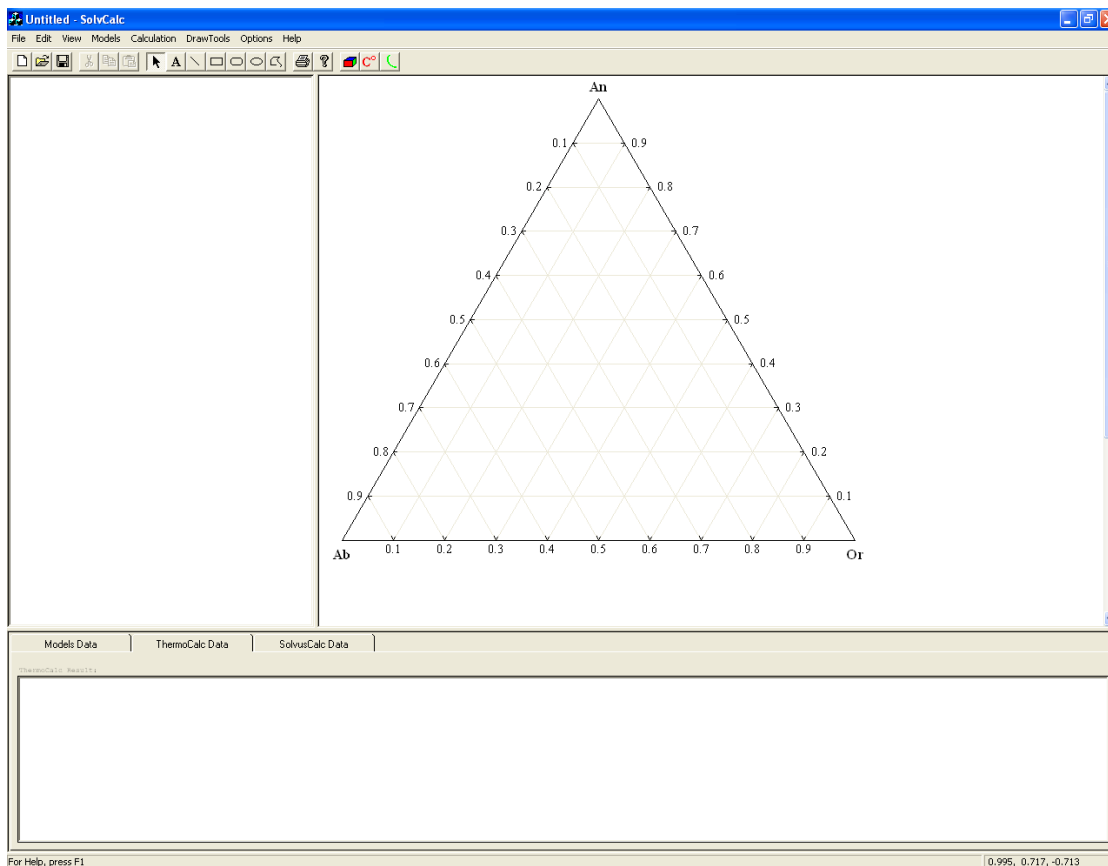
- Elkins a Grove 1990
- Fuhrman a Lindsley 1988

Zvolené P-T podmínky

- 650°C, 5 kbar
- 850°C, 5 kbar
- 1050°C, 5 kbar

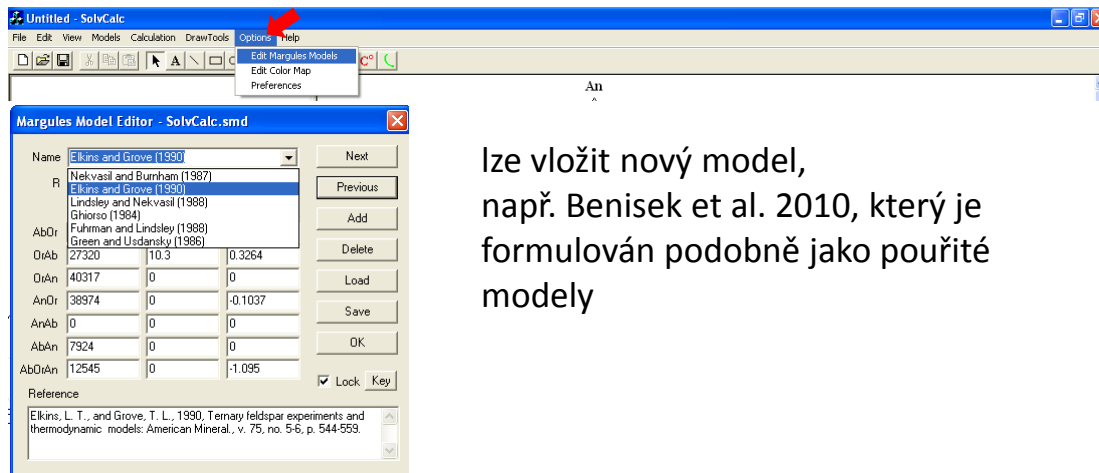
- 850°C, 1 kbar
- 850°C, 5 kbar
- 850°C, 10 kbar

pozor, v jakém rozsahu je daný model nakalibrován!



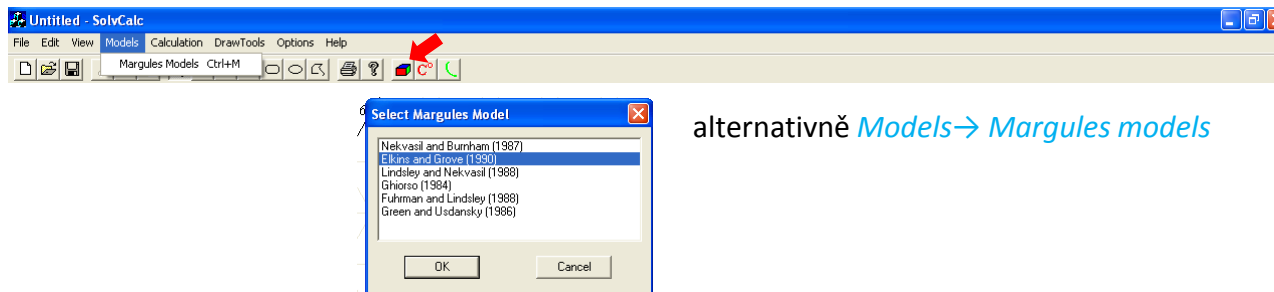
Úloha 1: Pomocí programu SolvCalc vykreslete křivky solvu v ternárním diagramu Ab-Kfs-An.

Přístup k editaci mixing-modelů



Ize vložit nový model, např. Benisek et al. 2010, který je formulován podobně jako použité modely

Výběr mixing modelu pro modelování a výpočet.



alternativně *Models* → *Margules models*

Úloha 1: Pomocí programu SolvCalc vykreslete křivky solvu v ternárním diagramu Ab-Kfs-An.

Použijte mixing modely

- Elkins a Grove 1990
- Fuhrman a Lindsley 1988

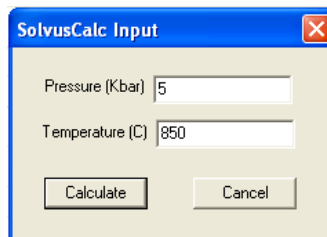
Zvolené P-T podmínky

- 650°C, 5 kbar
- 850°C, 5 kbar
- 1050°C, 5 kbar

- 850°C, 1 kbar
- 850°C, 5 kbar
- 850°C, 10 kbar



alternativně [Calculations](#) → [SolvusCalc](#)



Úloha 1: Pomocí programu SolvCalc vykreslete křivky solvu v ternárním diagramu Ab-Kfs-An.

Použijte mixing modely

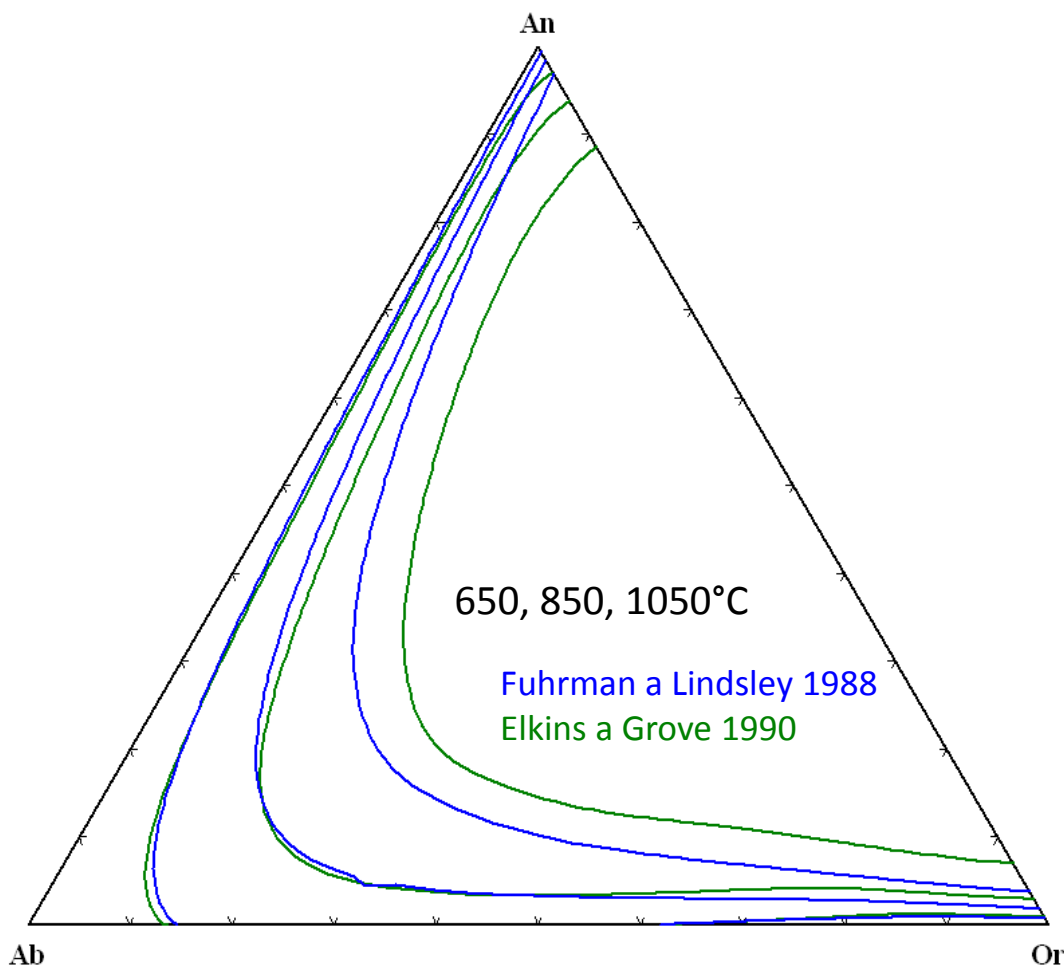
- Elkins a Grove 1990
- Fuhrman a Lindsley 1988

pozor, v jakém rozsahu PT je daný model nakalibrován!

Zvolené P-T podmínky

- **650°C, 5 kbar**
- **850°C, 5 kbar**
- **1050°C, 5 kbar**

- 850°C, 1 kbar
- 850°C, 5 kbar
- 850°C, 10 kbar



Úloha 1: Pomocí programu SolvCalc vykreslete křivky solvu v ternárním diagramu Ab-Kfs-An.

Použijte mixing modely

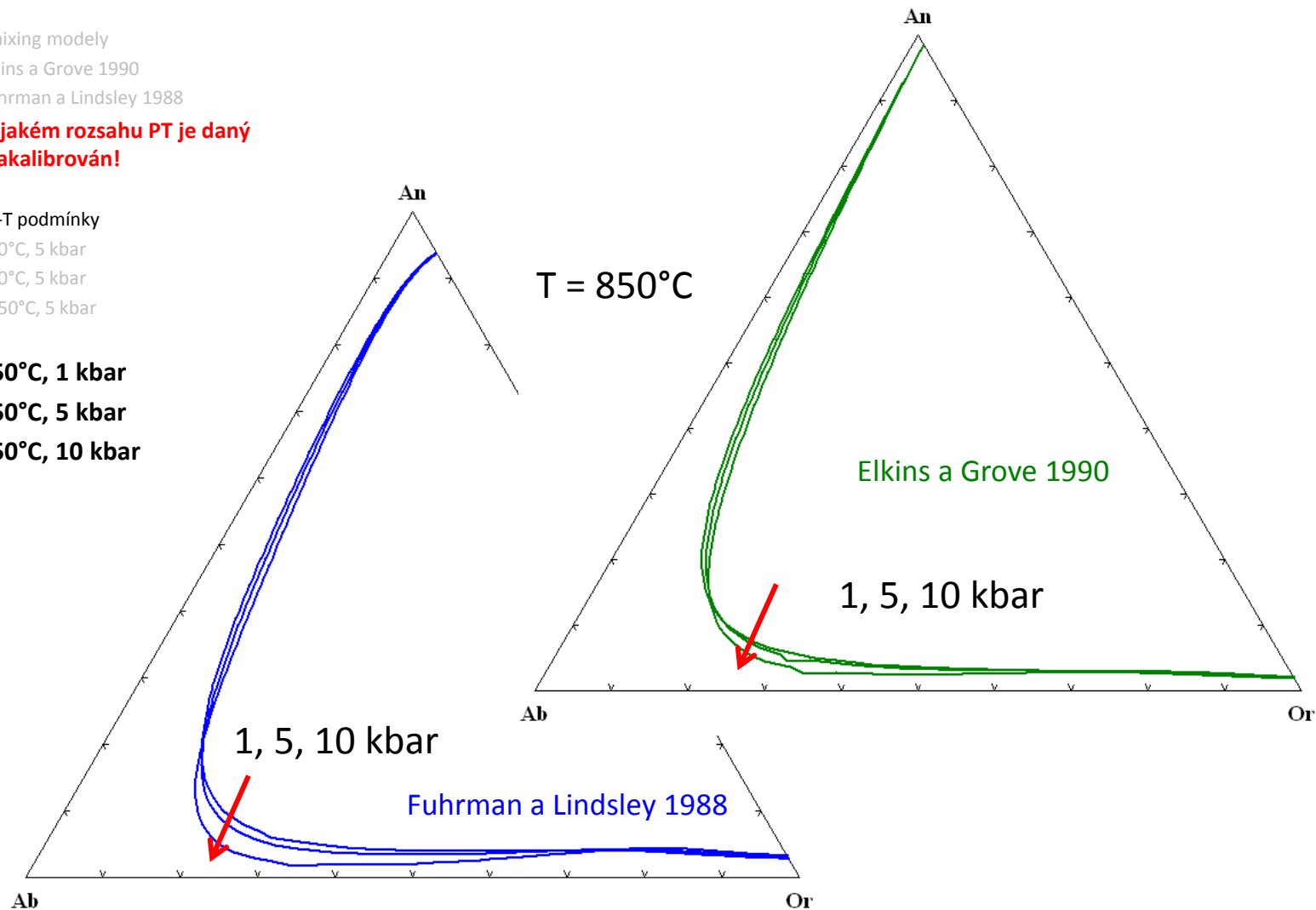
- Elkins a Grove 1990
- Fuhrman a Lindsley 1988

pozor, v jakém rozsahu PT je daný model nakalibrován!

Zvolené P-T podmínky

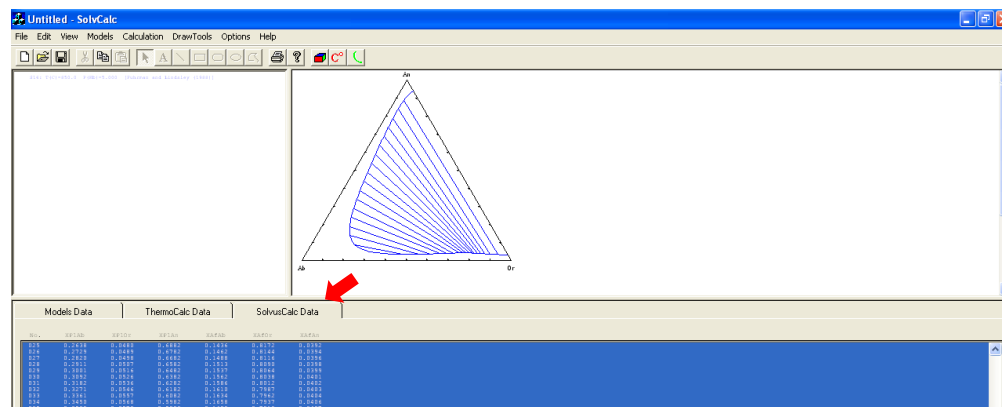
- 650°C, 5 kbar
- 850°C, 5 kbar
- 1050°C, 5 kbar

- **850°C, 1 kbar**
- **850°C, 5 kbar**
- **850°C, 10 kbar**

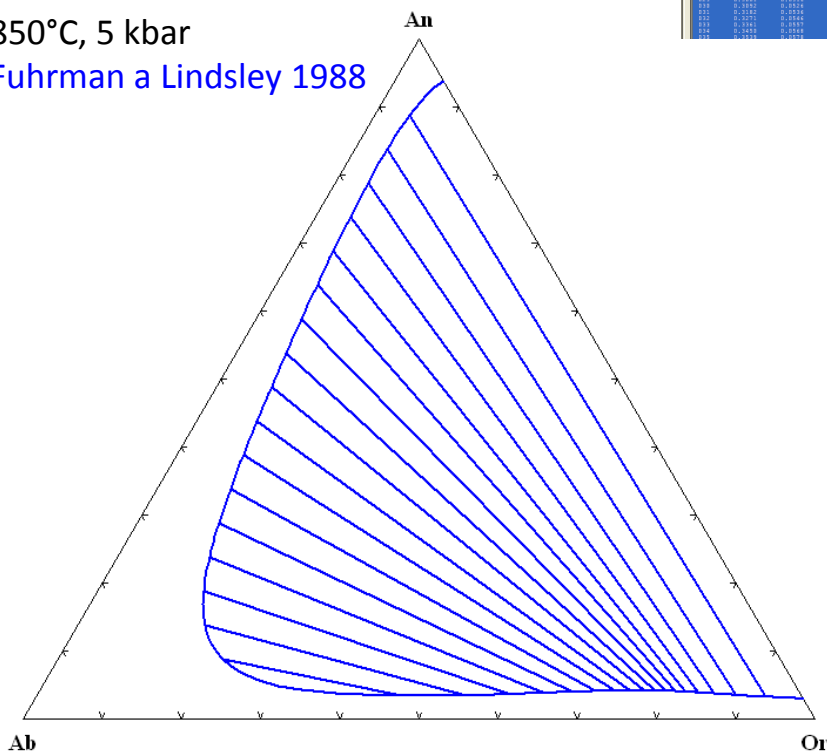


Úloha 1: Pomocí programu SolvCalc vykreslete křivky solvu v ternárním diagramu Ab-Kfs-An.

Složení párů plagioklas
– alkalický živec



850°C, 5 kbar
Fuhrman a Lindsley 1988



S01: (Mole Base)

Margules Model: Fuhrman and Lindsley (1988)

Temperature(C) = 850.00 Pressure(Kbar) =

5.0000

No.	XPlAb	XPlOr	XPlAn	XAfAb	XAfOr	XAfAn
0	0	0.0618	0.9382	0	0.9707	0.0293
1	0.0161	0.0556	0.9282	0.0104	0.9598	0.0298
2	0.0304	0.0514	0.9182	0.0203	0.9494	0.0303
3	0.0435	0.0483	0.9082	0.0296	0.9395	0.0308
4	0.0557	0.0461	0.8982	0.0386	0.9301	0.0314
5	0.0673	0.0444	0.8882	0.047	0.9211	0.0319
6	0.0786	0.0432	0.8782	0.0551	0.9125	0.0324
7	0.0895	0.0423	0.8682	0.0626	0.9044	0.033
8	0.1001	0.0417	0.8582	0.0698	0.8967	0.0335
9	0.1105	0.0413	0.8482	0.0766	0.8894	0.034
10	0.1207	0.041	0.8382	0.0829	0.8826	0.0345

...

Úloha 2: Pomocí aplikace Therter z balíku Theriak/Domino vykreslete křivku solvu v ternárním diagramu Ab-Kfs-An.

Použijte mixing model

Holland a Powell 2003 (používán zejména pro pseudosekce v Thermocalcu, Perple_X atd.)

a P-T podmínky 850°C a 5 kbar

Tento typ mixing-modelu (asymetrický formalismus) není kompatibilní s aplikací Solvcalc.

Solvcalc kromě toho může modelovat pouze do tlaku 15 kbar (např. některé vysokotlaké granulity Českého masivu mají vrcholové podmínky metamorfózy za vyššího tlaku – viz např. Kotková 2007, O'Brien a Rötzler 2003).

pozn. Dolejš (2008) modifikoval model Holland a Powell 2003 na základě HP/HT experimentů, viz také Nahodilová et al. (2012) – možné užití pro tlaky kolem 20 kbar a T kolem 1000°C

Úloha 2: Pomocí aplikace Therter z balíku Theriak/Domino vykreslete křivku solvu v ternárním diagramu Ab-Kfs-An.

Postup:

Příprava databáze

Příprava INPUT souboru THERIN

Spuštění programu Therter z příkazového řádku

Definice úlohy

Výpočet

Spuštění rutiny explot pro vykreslení diagramu

Otevření diagramu v GhostScriptu

Extrakce dat o složení párů Pl - Afs

Úloha 2: Pomocí aplikace Therter z balíku Theriak/Domino vykreslete křivku solvu v ternárním diagramu Ab-Kfs-An.

Postup:

Příprava databáze

Příprava INPUT souboru THERIN

Spuštění programu Therter z příkazového řádku

Definice úlohy

Výpočet

Spuštění rutiny explot pro vykreslení diagramu

Otevření diagramu v GhostScriptu

Extrakce dat o složení párů PI - Afs

TheriakDominoWIN/Programs by měl obsahovat databázi z Thermocalcu **např. tcdb55c2d** náš preferovaný model musí být aktivní

```
=====
! feldspar tc 325
!-----
! "ternary" feldspar from the supplementary material (file nckfmash) in:
! Baldwin J.A. et al. (2005): Modelling of mineral equilibria in ultrahigh-
! temperature metamorphic rocks from the AnapolisDItaucu Complex, central Brazil
! J. metamorphic Geol., 2005, 23, 511D531
! Based on: Holland, TJB & Powell, R (2003) Activity-composition relations for
! phases in petrological calculations: an asymmetric multicomponent formulation.
! Contributions to Mineralogy and Petrology, 145, 492-501.
!
****MINERAL DATA**** Feldspar new definition in: baldwin et al. 2005
anorthiteC1  CA(1)AL(2)SI(2)O(8)  anc1  nh
ST          0.0  7030.000  4.6600  0.0000
COM anorthite[1]  0  anorthite
!
**** SOLUTION DATA ****
FSP (MARGULES,IDEAL) M(1):Na,K,Ca
sanidine  K  1.0  0  0
high-albite  Na  0.643  0  0
anorthiteC1  Ca  1.0  0  0
!
**** MARGULES PARAMETER **** as in tc 3.25
high-albite - anorthiteC1
12  3100.  0.00  0.00
sanidine - high-albite
12  25100.  10.80  0.338
sanidine - anorthiteC1
12  40000.  0.00  0.00
!
=====
```

pro „deaktivaci“ se vepisuje MuNERAL DATA , SuLUTION, MuRGULES atd.

Úloha 2: Pomocí aplikace Therter z balíku Theriak/Domino vykreslete křivku solvu v ternárním diagramu Ab-Kfs-An.

Postup:

Příprava databáze

Příprava INPUT souboru THERIN

Spuštění programu Therter z příkazového řádku

Definice úlohy

Výpočet

Spuštění rutiny explot pro vykreslení diagramu

Otevření diagramu v GhostScriptu

Extrakce dat o složení párů PI - Afs

v poznámkovém bloku přepište vstupní soubor
THERIN

TheriakDominoWIN/Programs/THERIN

kód v souboru Therin:

```
! -----Version: 05.09.06
! Comments in this file start with ! at position 1.
!-----
> 600 4000
0 NA(10)AL(10)SI(30)O(80)K(10)AL(10)SI(30)O(80)CA(10)AL(20)SI(20)O(80) *
```

- za vykřičníky vepsány poznámky (v původním souboru mnoho řádků poznámek, nemají na běh programu vliv)
- Teplota a tlak, která však slouží pro rutinu Theriak. **Nechat být.** K oddělování se používají **minimálně** dvě mezery !!
- Nadefinujte složení např. v následující podobě. Pro prvky se používají **všechna písmena velká**. U číselné hodnoty lze zadávat i v jednotkách NA(1)AL(1)... nebo stovkách NA(100)AL(100)..., velikost systému pro náš účel nehraje roli. Nezapomeňte na konec přidat **hvězdičku (*)** !!!

Úloha 2: Pomocí aplikace Therter z balíku Theriak/Domino vykreslete křivku solvu v ternárním diagramu Ab-Kfs-An.

Postup:

Příprava databáze

Příprava INPUT souboru THERIN

Spuštění programu Therter z příkazového řádku

Definice úlohy

Výpočet

Spuštění rutiny explot pro vykreslení diagramu

Otevření diagramu v GhostScriptu

Extrakce dat o složení párů PI - Afs

*TheriakDominoWIN/Programs/
therter.exe*

database definition

Enter ["?" | CR | "files" | database filename] <JUN92.bs>?
tddb55c2d

název databáze

endmembers

AL CA E K NA O O2 SI abL abh an anL
anc1 and cats coe cor crst geh gr jd kals kspL ky
lc lime lrn mic ne pswo q qL qL8 rnk san silL
sill8 sill stv trd wo

Enter ["?" | "list" | CR | endmember 1 (formula 1)] <Ab>?

abh

Enter ["?" | "list" | CR | endmember 2 (formula 2)] <Kfs>?

san

Enter ["?" | "list" | CR | endmember 3 (formula 3)] <An>?

an

výběr koncových
členů diagramu

conditions

Enter [CR | T(C) P(Bar)] < 850.00 5000.00> ?

850 5000 **pozn. oddělit dvěma mezerami!!!!!!**

definice P-T
podmínek

Enter ["?" | CR | number of seeds] <0>?

stisknout enter

Enter ["?" | CR | scan-density tolerance] <11 0.02>?

stisknout enter

larn-bredigite -----> phase excluded (outside ternary system)

grossular -----> phase excluded (outside ternary system)

andalusite -----> phase excluded (outside ternary system)

...

considered phases:

high-albite

microcline

sanidine

anorthite

anorthite.liq

K-feldspar.liq

albite.liq

anorthiteC1

TIELINE 1/ 72

exit THERTER

Úloha 2: Pomocí aplikace Therter z balíku Theriak/Domino vykreslete křivku solvu v ternárním diagramu Ab-Kfs-An.

Postup:

Příprava databáze

Příprava INPUT souboru THERIN

Spuštění programu Therter z příkazového řádku

Definice úlohy

Výpočet

Spuštění rutiny explot pro vykreslení diagramu

Otevření diagramu plot.PS v GhostScriptu

Extrakce dat o složení párů PI - Afs

```
Program EXPLOT, Version (dd.mm.yy) 03.01.2012 (Windows, gfortran)
```

```
=====
```

```
"Create a PostScript(TM) file from graphics input"
```

```
Written by:
```

```
Christian de Capitani (Basel, Switzerland)
```

```
E-mail: christian.decapitani@unibas.ch
```

```
Input dialogue and help by:
```

```
Konstantin Petrakakis (Vienna, Austria)
```

```
E-mail: konstantin.petrakakis@univie.ac.at
```

```
=====
```

```
Run: 05.08.2016 - 15:02:31
```

```
log-file used: D:\Programs\explot.last
```

```
Enter [ "?" | CR | graphics file name ] <clean>?
```

```
plot
```

```
working directory: D:\Programs\
```

```
72 TIELINES READ.
```

```
exit EXPLOT
```

tato rutina vytvořila soubor s diagramem *plot.PS* (*PostScript file format*), který lze otevřít např. v GhostScriptu, ale také v některých grafických programech

Úloha 2: Pomocí aplikace Therter z balíku Theriak/Domino vykreslete křivku solvu v ternárním diagramu Ab-Kfs-An.

Postup:

Příprava databáze

Příprava INPUT souboru THERIN

Spuštění programu Therter z příkazového řádku

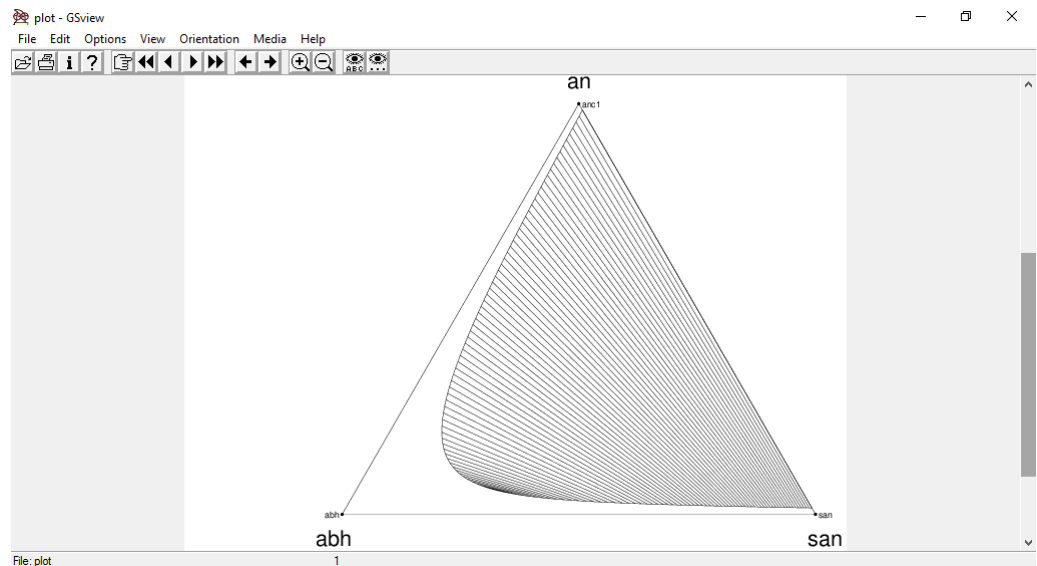
Definice úlohy

Výpočet

Spuštění rutiny explot pro vykreslení diagramu

Otevření diagramu plot.PS v GhostScriptu

Extrakce dat o složení párů PI - Afs



Úloha 2: Pomocí aplikace Therter z balíku Theriak/Domino vykreslete křivku solvu v ternárním diagramu Ab-Kfs-An.

Postup:

Příprava databáze

Příprava INPUT souboru THERIN

Spuštění programu Therter z příkazového řádku

Definice úlohy

Výpočet

Spuštění rutiny explot pro vykreslení diagramu

Otevření diagramu plot.PS v GhostScriptu

Extrakce dat o složení párů PI - Afs

složení párů plagioklas – alkalický živec se nachází v souboru *plot* (bez přípony *.PS), který lze otevřít v poznámkovém bloku

```
...
PSYM      T = 850.00 [C] 16 9 0 0.5 0 0 0 0
PSYM      P = 5000.0 [Bar] 16 9 0 0.5 0 0 -2 0
ECKEN    abh          san          an          0.5 0.5
TIELIN   1
0.000000 0.984489 0.015511
0.000000 0.015511 0.984489
0.005627 0.978749 0.015625
0.014332 0.015881 0.969787
0.011137 0.973125 0.015737
0.028259 0.016255 0.955486
0.016689 0.967459 0.015852
0.042180 0.016641 0.941179
0.022283 0.961749 0.015969
0.056093 0.017042 0.926865
0.027919 0.955994 0.016087
0.069998 0.017458 0.912545
0.033600 0.950192 0.016208
0.083894 0.017889 0.898217
0.039326 0.944344 0.016331
0.097781 0.018336 0.883883
.....
999 999 0
PUNKTE -1 0.1 0.000000 0.000000 1.000000 999 999 0
TEXT anc1          0.000000 0.000000 1.000000 0.20 0.5 0 -0.5 0
PUNKTE -1 0.1 0.000000 1.000000 0.000000 999 999 0
TEXT san          0.000000 1.000000 0.000000 0.20 0.5 0 -0.5 0
PUNKTE -1 0.1 1.000000 0.000000 0.000000 999 999 0
TEXT abh          1.000000 0.000000 0.000000 0.20 -0.5 -1 -0.5 0
ACHSEN 0 10 10 0 10 0 10
NPLOIG
0.00 10.00 0.0 10.0 10.0000 10.0000 0 0
5 0 0 0 0 0
16.00 4.000 0.2000000 0.0000 005.08.2016 - 15:01:08 CPU time: 0h 00m 17.88s
16.00 15.00 0.2000000 0.0000 0
16.00 14.65 0.2000000 0.0000 Otherter version: 03.01.2012
16.00 14.30 0.2000000 0.0000 0database: tcdb55c2p_modif
16.00 13.95 0.2000000 0.0000 OFSP: ideal+margules
FERTIG
```

Úloha 3: Pomocí programu SolvCalc spočítejte rovnovážnou teplotu pro složení Pl – Afs získaná v Úloze 1.

Použijte např. již vytvořenou křivku solvu:

mixing model: Fuhrman a Lindsley 1988; 850°C, 5 kbar

PLAGIOKLAS			ALKALICKÝ ŽIVEC		
Ab	Or	An	Ab	Or	An
0.4076	0.0650	0.5274	0.1838	0.7750	0.0412
P = 5 kbar					

Úloha 3: Pomocí programu SolvCalc spočítejte rovnovážnou teplotu pro složení Pl – Afs získaná v Úloze 1.

Nezapomeňte na prvním místě vybrat mixing-model.

PLAGIOKLAS			ALKALICKÝ ŽIVEC		
Ab	Or	An	Ab	Or	An
0.4076	0.0650	0.5274	0.1838	0.7750	0.0412
P = 5 kbar					

ThermoCalc Input

Pressure (Kbar) 5

	X _{Ab}	X _{Or}	X _{An}	Uncertainty
Plagioclase	0.4076	0.065	0.5274	0.02
Alkali Feldspar	0.1838	0.775	0.0412	0.02

Calculate Cancel

ThermoCalc Result:

T00: (Mole Base)
 Margules Model: Fuhrman and Lindsley (1988)
 Average Temperature (C) = 850.22
 Pressure (Kbar) = 5.0000
 SUM(|dT|) = 0.0000

Ab	Or	An	dX	Concordant
Temperatures (C):	<u>850.22</u>	<u>850.22</u>	<u>850.22</u>	
Original Plagioclase Composition:	0.4076	0.0650	0.5274	0.0200
Adjusted Plagioclase Composition:	0.4076	0.0650	0.5274	0.0000
Original Alkali Feldspar Composition:	0.1838	0.7750	0.0412	0.0200
Adjusted Alkali Feldspar Composition:	0.1839	0.7749	0.0412	-0.0001

T00: (Mole Base)
 Margules Model: Fuhrman and Lindsley (1988)
 Average Temperature (C) = 850.22
 Pressure (Kbar) = 5.0000
 SUM(|dT|) = 0.0000

Ab	Or	An	dX	Concordant
Temperatures (C):	<u>850.22</u>	<u>850.22</u>	<u>850.22</u>	
Original Plagioclase Composition:	0.4076	0.0650	0.5274	0.0200
Adjusted Plagioclase Composition:	0.4076	0.0650	0.5274	0.0000
Original Alkali Feldspar Composition:	0.1838	0.7750	0.0412	0.0200
Adjusted Alkali Feldspar Composition:	0.1839	0.7749	0.0412	-0.0001

Úloha 3: Pomocí programu SolvCalc spočítejte rovnovážnou teplotu pro složení Pl – Afs získaná v Úloze 1.

PLAGIOKLAS			ALKALICKÝ ŽIVEC		
Ab	Or	An	Ab	Or	An
0.4076	0.0650	0.5274	0.1838	0.7750	0.0412
P = 5 kbar					

Zkuste před výpočtem výchozí složení poněkud změnit v rozsahu ± 2 mol. %
a výpočet opakujte.

Co se při výpočtu změní?