

Pseudosekce:

P-T fázový diagram v jednoduchém systému
 Al_2SiO_5

s demonstrací postupu při tvorbě pseudosekce

Pseudosekce

Jak bylo uvedeno v prezentaci o termobarometrii, pseudosekce je druh fázového diagramu, ve kterém jednotlivá pole reprezentují jednotlivé stabilní minerální asociace pro zadané podmínky (T, P, složení systému). Pro modelování pseudosekce v některém z modelovacích programů je zapotřebí vnitřně konzistentní termodynamická databáze pro relevantní minerály (koncové členy) a dále tzv. solid solution modely (activity-composition modely...), které popisují termodynamické vlastnosti pevných roztoků.

Jednoduchá fázové diagramy v jednosložkovém systému (např. SiO_2 nebo Al_2SiO_5) nejsou typickými pseudosekcemi (ty se zpravidla modelují pro složitější, mnohasložkové systémy), ale prakticky splňují uvedenou definici (znázorňují pro každé pole 1 stabilní fázi v 1-složkovém systému) mohou být proto namodelovány stejným způsobem jako pseudosekce a může být na nich jednoduše demonstrován postup při tvorbě složitějších pseudosekcí

P-T diagram stability polymorfních modifikací Al_2SiO_5

Úkolem je vytvořit P-T diagram, který znázorňuje, ve které části P-T prostoru je stabilní která z polymorfních modifikací Al_2SiO_5 . Jde tedy o P-T diagram pro konstantní chemické složení, což prakticky odpovídá definici jednoduché P-T pseudosekce.

Modelovat budeme pomocí programu Perple_X (Connolly 2005, 2009), což je tedy spíše balík jednotlivých programů. **V této prezentaci je podrobně popsán postup při modelování pseudosekce, který je obecně platný i pro složitější pseudosekce.**

P-T diagram stability polymorfních modifikací Al_2SiO_5

Definice modelované úlohy se provádí pomocí programu *build.exe* v dnešní době již poněkud zastaralým způsobem otázka-odpověď v příkazové řádce.

Komentovaný postup je v dokumentu [build_Al2SiO5.doc](#)

Při definici určíme termodynamickou databázi, kterou bude program při výpočtu využívat (pro většinu úloh bude v současnosti nejvhodnější databáze Hollanda a Powella (1998) aktualiz. v r. 2003. Nachází se v souboru *hp04ver.dat*

Dále pak budeme potřebovat soubor s definovanými solid-solution modely. Soubor *solution_model.dat* nabízí výběr z desítek aktuálně využívaným SS modelů pro jednotlivé minerály.

P-T diagram stability polymorfních modifikací

Al_2SiO_5

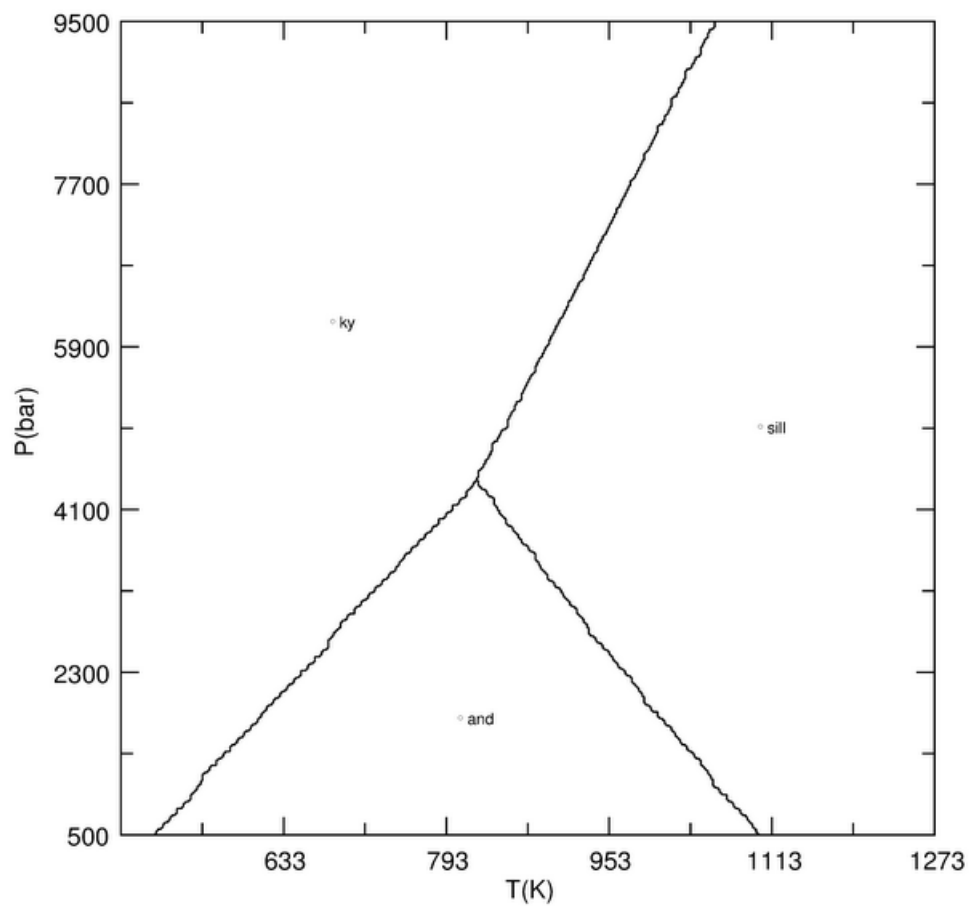
Program build vygeneruje soubor *.dat (např. *Al2SiO5.dat*). **Vlastní výpočet se spustí programem *vertex.exe***. Postup je velmi jednoduchý, po spuštění programu vertex se pouze napíše název našeho modelu (např. Al2SiO5). Během výpočtu algoritmus využívá některé parametry, které jsou definovány v souboru *perplex_option.dat*, a které mohou mít vliv např. na přesnost výsledného diagramu, ale také na dobu, po jakou výpočet trvá. Pro základní modely není nezbytné měnit nastavení. Výpočet našeho diagramu v této úloze bude probíhat pravděpodobně pouze několik sekund. Složitější výpočty však mohou zabrat i poměrně mnoho hodin.

Vertex vygeneruje několik souborů: *.spt, *.tof, *.plt, *.arf, *.blk.

P-T diagram stability polymorfních modifikací Al_2SiO_5

Vykreslení diagramu se provádí programem *pssect.exe*. Některé parametry diagramu (stínování polí, velikost popisků a možnosti jejich (ne)zobrazení) lze měnit v souboru *perplex_plot_option.dat*.

P-T diagram stability polymorfních modifikací Al_2SiO_5



P-T diagram stability polymorfních modifikací Al_2SiO_5

Extrakce kvantitativní informace se provádí pomocí programu *werami.exe*.

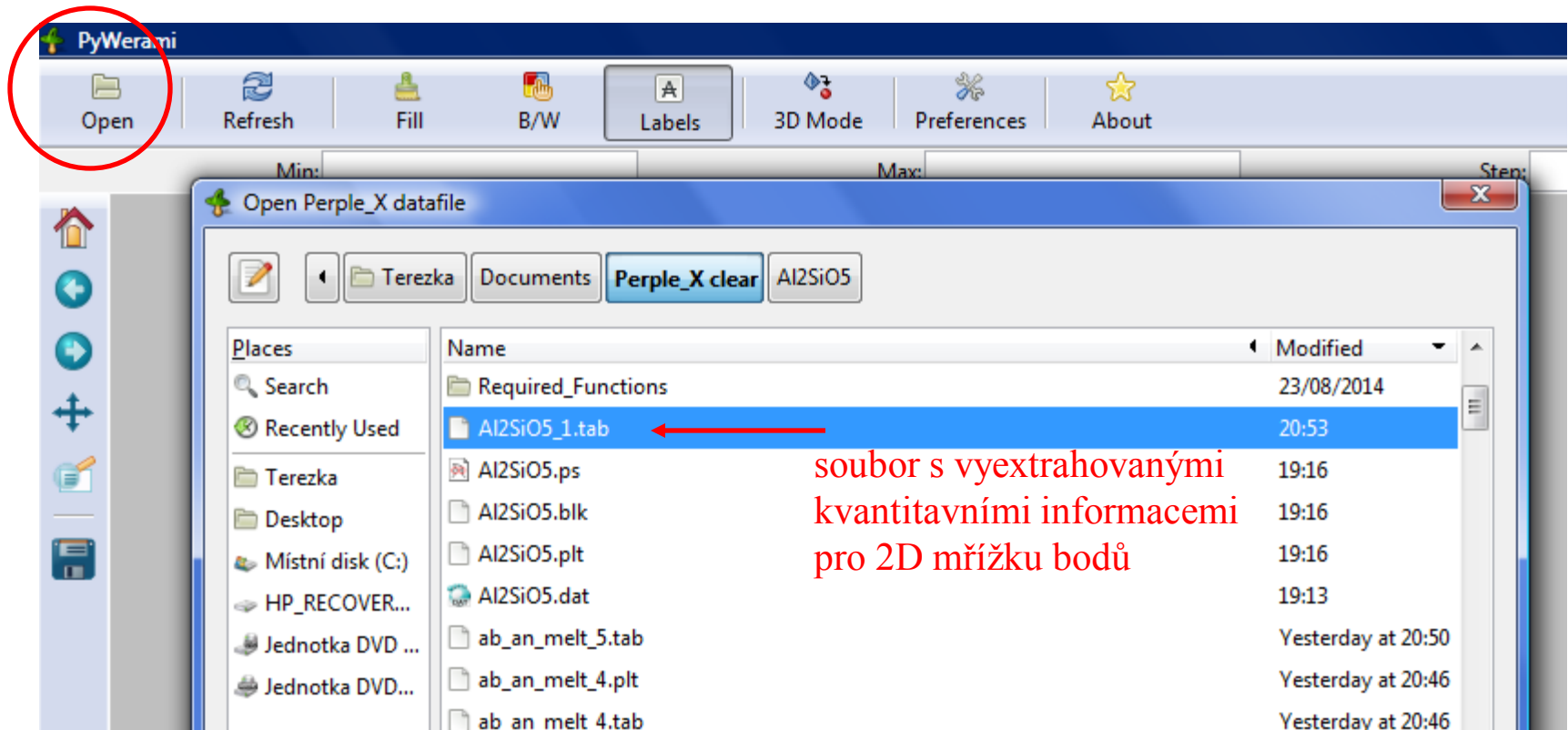
Často se používá pro tvorbu tzv. izopleť – kontur, které jsou vyneseny do grafu, a které procházejí body s konstantní hodnotou určitého parametru (běžně jde o množství určitého minerálu nebo určitý kompoziční parametr) (extrakcí těchto informací se zabývá např. cvičení na tvorbu T-X fázového diagramu krystalizace plagioklasu).

V našem případě, kdy je složení systému i příslušné fáze vždy totožné, = 1 mol Al_2SiO_5 , jsou jak složení fází, tak jejich množství v rámci celých polí jejich stabilit konstantní. Pomocí *werami* však můžeme zjišťovat i jiné informace. V tomto případě nás bude zajímat, jak se fázové přeměny budou promítat do hustoty systému. **Komentovaný postup extrakce hustoty pro mřížku bodů 200x200, které pokryjí modelovaný P-T rozsah je v souboru *werami_Al2SiO5.doc*. Výstupní soubor má příponu *_(1,2,3...).tab, zde *Al2SiO5_1.tab*.**

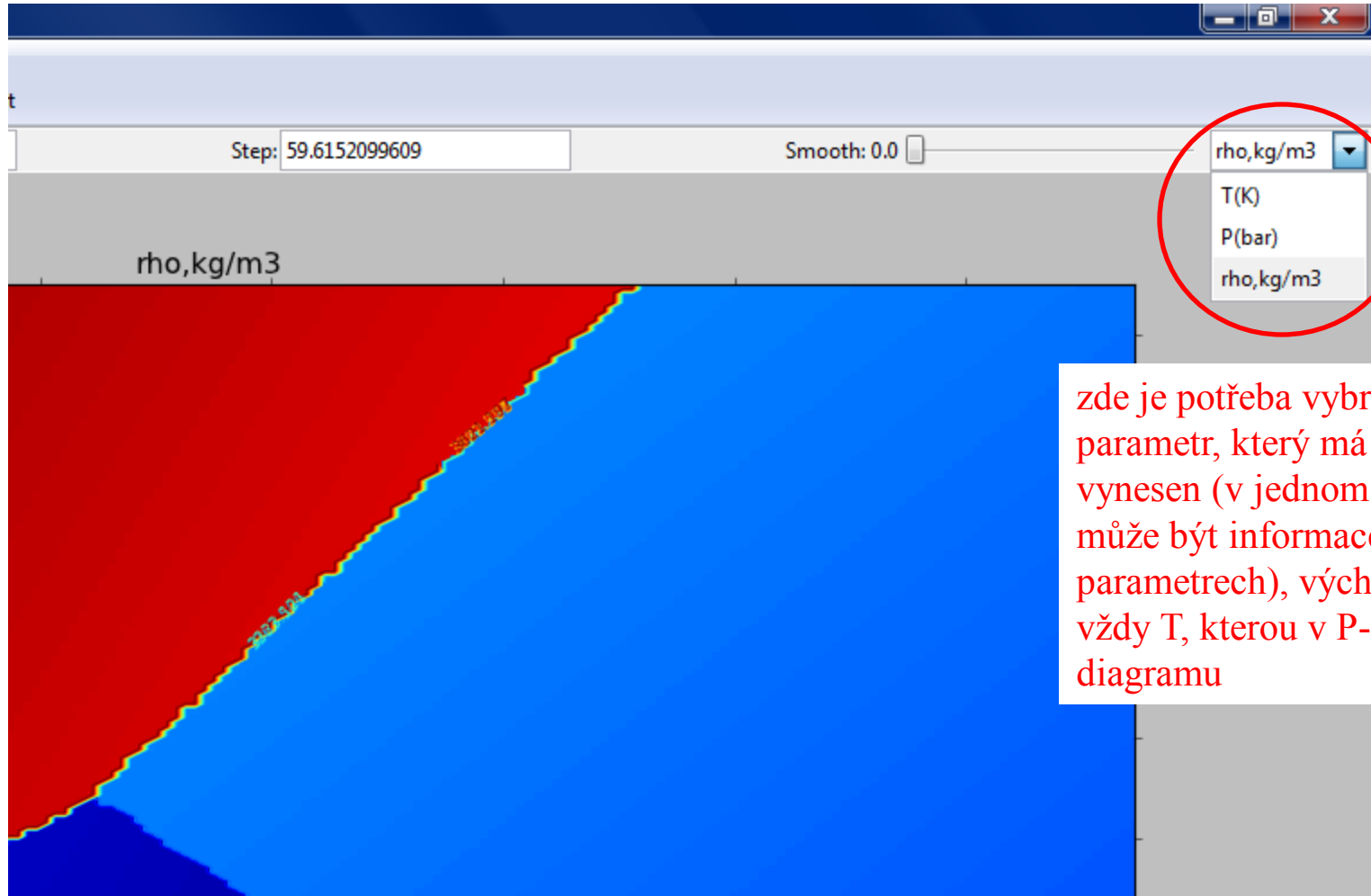
P-T diagram stability polymorfních modifikací Al_2SiO_5

Znázornění kvantitativních informací pro 2D mřížku bodů vyextrahovaných pomocí `werami.exe` je možné **znázornit např. pomocí externího programu *PyWerami.exe***, který není součástí balíku `Perple_X`, ale je určen pro tento účel. Program je ovládán v okně, je celkem intuitivní a jednoduchý.

P-T diagram stability polymorfních modifikací Al_2SiO_5



P-T diagram stability polymorfních modifikací Al_2SiO_5



zde je potřeba vybrat parametr, který má být vyneseno (v jednom souboru může být informace o více parametrech), výchozí je vždy T, kterou v P-T diagramu

P-T diagram stability polymorfních modifikací Al_2SiO_5

hustota

rho,kg/m3

