

# Aplikovaná RTG prášková analýza

Živce



# Nomenklatura živců

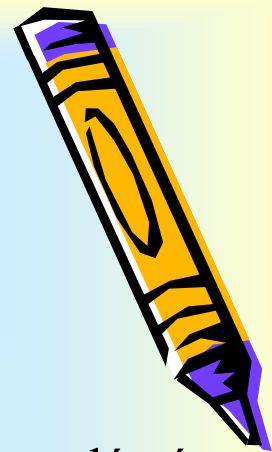
Chemismus živců lze vyjádřit obecným vzorcem:



kde  $0 < (x+y) < 1$  a  $x$  představuje molární zlomek K živce (Or),  $y$  molární zlomek Na-živce (Ab) a  $1-(x+y)$  molární zlomek Ca-živce (An).

Základní rozdělení živců se provádí na dvě skupiny:

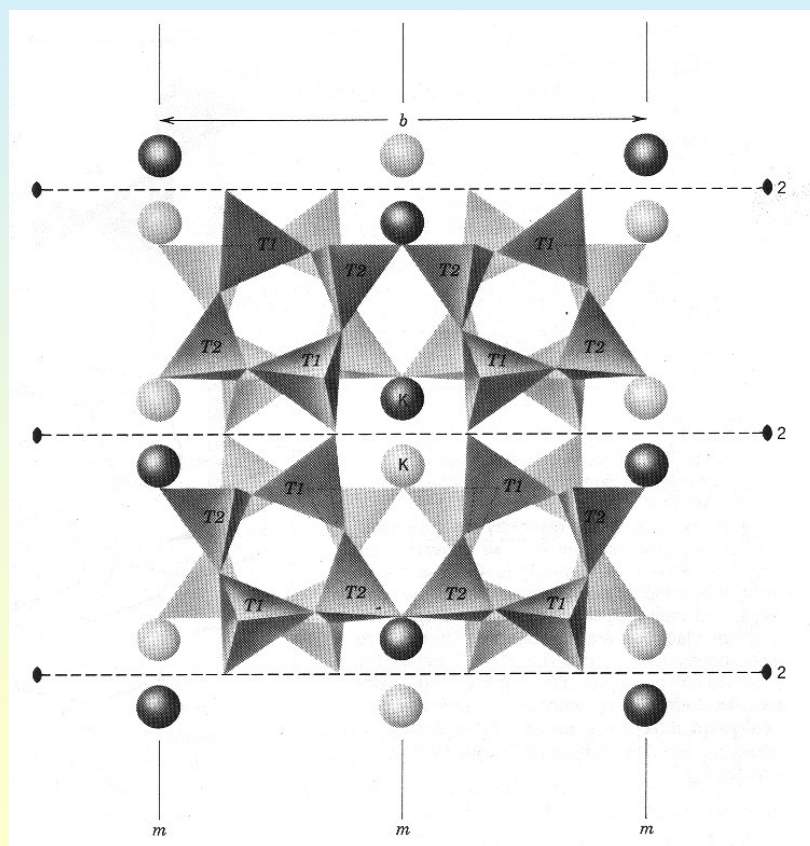
- **alkalické živce** mají poměr  $Al : Si = 1 : 3$  a mřížkový parametr  $c \cong 7 \text{ \AA}$ . Sem patří ortoklas (Or), sanidin (Sa), mikroklin (Mi) a albit (Ab).
- **plagioklasy** jsou zastoupeny řadou albit (Ab) - anortit (An). Živce, které mají  $Al : Si = 2 : 2$ , mají mřížkový parametr blízký  $c \cong 14 \text{ \AA}$ .



# Struktura živců



Základem živcové struktury je síť propojených  $\text{TO}_4$  přibližně pravidelných tetraedrů, centrovaných Si nebo Al. Každý kyslík je sdílen dvěma T kationy. Kostra kyslíkových atomů vytváří v prostotu nepravidelné dutiny, do kterých vstupují kationy Na, K, Ca. Celá struktura pak vypadá jako síť dvojitých zvlněných tetraedrických řetězců, které jsou příčně propojeny do jakýchsi 8-čtých eliptických cyklů.



# Alkalické živce s $Al:Si = 1:3$

V **monoklinických živcích** ( $C2/m$ ) jsou dvě symetricky neekvivalentní tetraedrické pozice  $T_1$  a  $T_2$ . V základní buňce ( $Z = 4$ ) je celkem 16 T pozic, obsazených 4 Al + 12 Si atomy. Obě uvedené pozice jsou součástí tetraedrického čtyřčetného prstence.

Celkový obsah Al ve čtyřech tetraedrických pozicích je roven jedné (resp. jeden atom na vzorcovou jednotku, při  $Z = 4$  čtyři atomy na základní buňku).

Obsah Al v pozicích  $T_1$  označme jako  $t_1$  a obsah Al v pozicích  $T_2$  jako  $t_2$ . Pro čtveřici tetraedrů platí:

$$2t_1 + 2t_2 = 1.$$

Při náhodném uspořádání Al a Si v těchto pozicích mluvíme o *neuspořádané struktuře* a platí:

$$t_1 = t_2 = 0,25 \text{ nebo } 2t_1 = 2t_2 = 0,5.$$



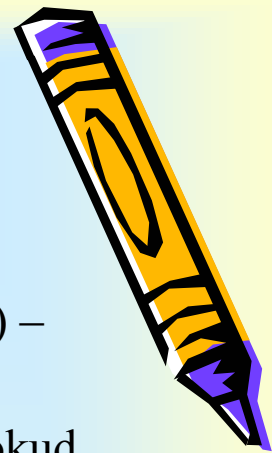
# Alkalické živce s $Al:Si = 1:3$

Toto uspořádání odpovídá vysokému sanidinu (HS) nebo monalbitu (MA) – polymorfní modifikaci sodného živce (C2/m).

V živcových strukturách však může vznikat jistý stupeň uspořádanosti, pokud Al přednostně obsazuje pozice  $T_1$  a Si přednostně obsazuje pozice  $T_2$ . Alkalické živce (C2/m) lze pak charakterizovat rozsahem uspořádanosti pomocí hodnoty veličiny  $2t_1$ .

Např. pro K-živce:

- |                       |                       |
|-----------------------|-----------------------|
| ✓ vysoký sanidin (HS) | $0,5 < 2t_1 < 0,666$  |
| ✓ nízký sanidin (LS)  | $0,667 < 2t_1 < 0,74$ |
| ✓ ortoklas (OR)       | $0,74 < 2t_1 < 1,0$   |

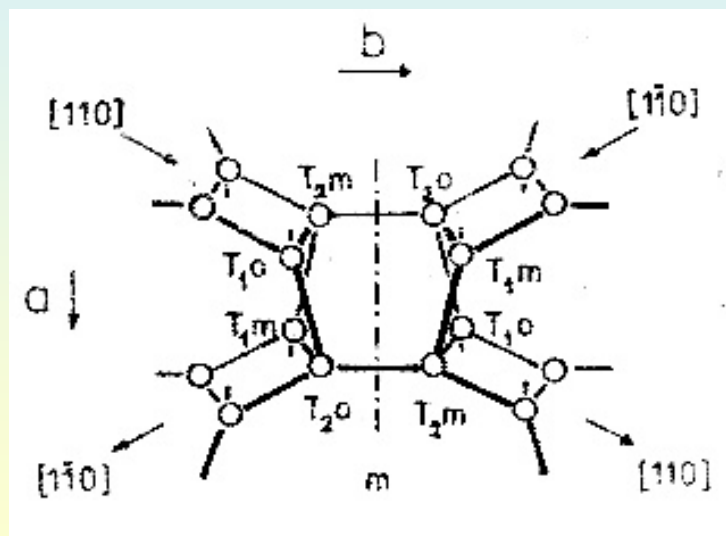


# Alkalické živce s $Al:Si = 1:3$

U živců s tendencí k uspořádanosti je třeba v každém čtyřčlenném prstenci tetraedrů rozlišit dvě pozice  $T_1$  a dvě pozice  $T_2$  a to indexy  $o$  a  $m$ .

Pro monoklinické živce pak platí (vysoká neuspořádanost):

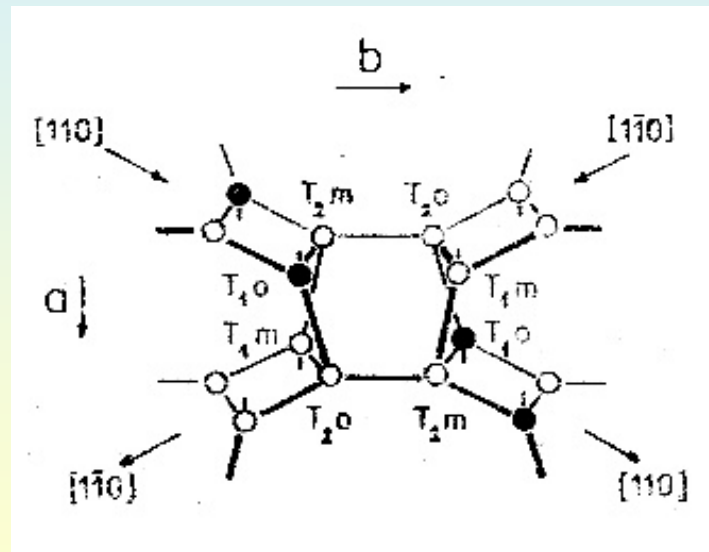
$$t_1o = t_1m \text{ a } t_2o = t_2m \quad 2t_1 > 0,5 \text{ a } 2t_2 = 1 - 2t_1.$$



# Alkalické živce s $Al:Si = 1:3$

V důsledku koncentrace atomů Al v pozicích  $T_1o$  dochází k uspořádání struktury vzhledem k distribuci Al a Si v tetraedrických pozicích. Prostorová grupa  $C2/m$  degeneruje na  $C-1$  (mizí rovina symetrie a dvojitá osa). Pro obsazení pozic lze zapsat (vysoká uspořádanost):

$$t_1o = 1,0 \text{ a } t_1m = t_2o = t_2m = 0.$$



# Alkalické živce s Al:Si = 1:3

Vysoce uspořádaný stav odpovídá **nízkému albitu (LA)** a **nízkému mikroklinu (LM)**.

Přechodné strukturní stavy s různým stupněm uspořádání lze vyjádřit:

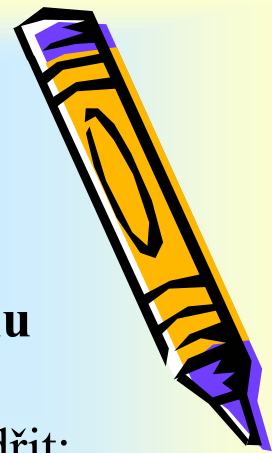
$$t_1o \geq t_1m > t_2o = t_2m.$$

To je případ **přechodního mikroklinu (IM)** a **přechodních albitů**.

**Analbit (AA)** je triklinický živec s uspořádáním spíše monoklinickým.

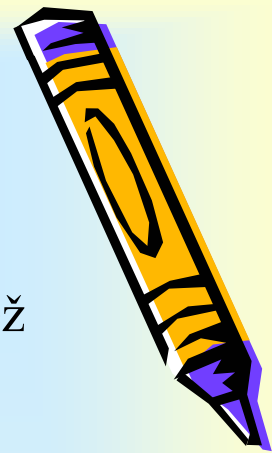
**Adulár** je K- živec s proměnlivým strukturním stavem.

Termín **vysoký albit (HA)** se používá pro vysoce neuspořádaný Na - živec.





## Ca živce s Al:Si = 2:2

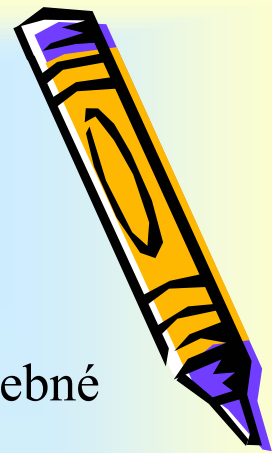


Ve stabilních alumosilikátech nemůže být vyšší počet atomů Al než je počet atomů Si, v krajním případě rovnosti jejich počtu se musí v tetraedrických pozicích pravidelně střídat.

Tetraedrický skelet **anortitu** (AN) je stejný jako u ostatních triklinických živců, ale má odlišnou distribuci Al a Si a parametr  $c = 14 \text{ \AA}$ . Čtyřčetné prstence se nad sebou opakují ve směru osy  $c$  a pozice T jsou střídavě obsazovány Si a Al tak, že perioda  $c$  musí být dvojnásobná vzhledem k ostatním triklinickým živcům. Celkem existuje 16 jedinečných T pozic, kde 8 je obsazeno Al a 8 Si. Prostorová grupa anortitu je P-1, ale za teploty kolem  $240^\circ\text{C}$  se mění na I-1.



# Velikost tetraedrů a distribuce Al-Si



Množství atomů Al v tetraedrických pozicích lze odvozovat z vazebné délky T - O, protože ionový poloměr kationu  $\text{Al}^{3+}$  je větší než u kationu  $\text{Si}^{4+}$ .

Obecně existuje závislost mezi délkou vazby  $\langle d(\text{T-O}) \rangle$  a poměrem  $\text{Al}/(\text{Al}+\text{Si})$ .

Velkým množstvím vyřešených struktur bylo statisticky zjištěno, že ve strukturách živců je průměrná vazebná délka  $\langle d(\text{Si-O}) \rangle$  rovna 1,608 – 1,617 a průměrná vazebná délka  $\langle d(\text{Al-O}) \rangle$  se pohybuje v rozmezí 1,742 – 1,755.



# Velikost tetraedrů a distribuce Al-Si

Obsazení tetraedrických pozic  $T_i$  atomy Al ( $t_i$  značí počet atomů Al v pozicích  $T_i$  dělený počtem těchto pozic) lze vyjádřit jako:

$$t_i = 0,25 (1 + n_{An}) + (\langle T_i-O \rangle - \langle\langle T-O \rangle\rangle) / \xi$$

kde  $\xi = \langle\langle Al-O \rangle\rangle - \langle\langle Si-O \rangle\rangle$  je rovno

- 0,125 Å pro K bohaté živce a
- 0,13 Å pro Na-Ca živce.

Hodnota  $\langle T_i-O \rangle$  představuje průměr vazebných délek v jednom tetraedru struktury a  $\langle\langle T-O \rangle\rangle$  představuje průměr vazebných délek všech tetraedrů. Proměnná  $n_{An}$  je obsah anortitové složky.



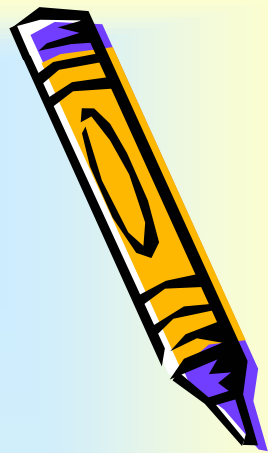
# Velikost tetraedrů a distribuce Al-Si

Výraz

$$\langle t \rangle = 0,25 (1 + n_{An})$$

lze nahradit regresními rovnicemi:

- o pro alkalické živce a Ab - bohaté plagioklasy  
 $\langle t \rangle = -11,215 + 6,981 \langle \langle T-O \rangle \rangle + 0,124 (\langle T_{1o-O} \rangle - \langle T_{1m-O} \rangle)$
- o pro An bohaté plagioklasy  
 $\langle t \rangle = -12,088 + 7,491 \langle \langle T-O \rangle \rangle.$



# Určení strukturního stavu alkalických živců



Mřížkové parametry živců vypovídají o jejich složení, vnitřním uspořádání Al a Si, případně také o napětí mezi doménami (např. při přechodu sanidin - mikroklin).

Hodnoty mřížkových parametrů lze zpětně použít pro stanovení strukturního stavu živců, popř. lze provést odhad strukturního stavu z polohy některých difrakcí.



# Určení strukturního stavu alkalických živců

Pro stanovení ortoklasové (Or) složky platí následující regresní rovnice (V je objem základní buňky):

- v řadě **analbit (AA) - vysoký sanidin (HS)**

$$n_{Or} = -584,6683 + 2,58732V - 3,83499 \cdot 10^{-3} V^2 + 1,90428 \cdot 10^{-6} V^3$$

- a pro řadu **nízký albit (LA) - nízký mikroklin (LM)**

$$n_{Or} = -1227,8023 + 5,35958V - 7,81518 \cdot 10^{-3} V^2 + 3,80771 \cdot 10^{-6} V^3$$



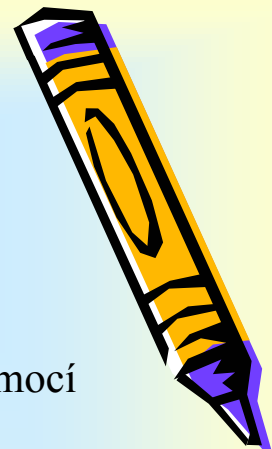
# Stanovení distribuce Al, Si

Podle Rolla a Ribbeho (1987) lze provést odhad obsazení pozic  $T_1$  atomy Al pomocí přímých mřížkových parametrů  $b$ ,  $c$  a reciprokových parametrů  $\alpha^*$ ,  $\gamma^*$  nebo poloh difrakčních linií 060,  $\bar{2}04$ , 130, 1-30,  $\bar{2}01$ . Vztahy platí pro topochemicky monoklinické živce (AA - HS - OR), pro něž platí  $t_{1o} = t_{1m}$ .

$$2t_1 = \frac{b + 5,1479 - 2,56437c}{2,7945 - 0,44621c}$$

$$2t_1 = \frac{2\Theta(060) + 12,1814 - 1,04093 \cdot 2\Theta(\bar{2}04)}{0,6112 + 0,01592 \cdot 2\Theta(\bar{2}04)}$$

Veškeré hodnoty  $2\Theta$  jsou uvažovány pro záření  $\text{CuK}\alpha_1$ .



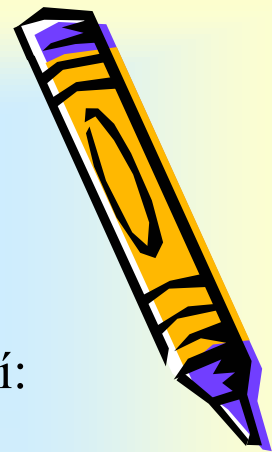
# Stanovení distribuce Al, Si

Pro topochemicky triklinické živce (LM - LA - HA) s  $t_1o \neq t_1m$  platí:

$$t_1o + t_1m = \frac{b - 1,6757 - 1,61388c}{-8,921 + 1,18443c}$$

$$t_1o + t_1m = \frac{2\Theta(060) + 8,3063 - 0,96459 \cdot 2\Theta(\bar{2}04)}{-6,5616 + 0,15724 \cdot 2\Theta(\bar{2}04)}$$

$$t_1o - t_1m = \frac{\gamma^* - 44,778 - 0,50246\alpha^*}{6,646 - 0,05061\alpha^*}$$





# Stanovení distribuce Al, Si

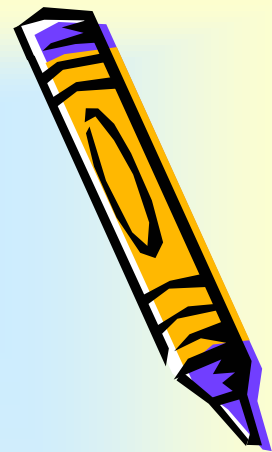
Pro živce bohaté K složkou a ty, které mají difrakční úhel  $2\Theta (-201) < 21,4^\circ$  je platný následující vztah:

$$t_{1o} - t_{1m} = \frac{2\Theta(130) - 2\Theta(1\bar{3}0)}{-2,7 + 0,08986 \cdot 2\Theta(\bar{2}01)}$$

Pro živce bohaté Na složkou a ty, které mají difrakční úhel  $2\Theta (-201) > 21,8^\circ$  platí následující vztah:

$$t_{1o} - t_{1m} = \frac{[2\Theta(130) - 2\Theta(1\bar{3}0)] + 25,606 - 1,1985 \cdot 2\Theta(\bar{2}01)}{7,0791 - 0,36583 \cdot 2\Theta(\bar{2}01)}$$

Obě rovnice jsou v oblasti  $21,4 - 21,8^\circ 2\Theta$  neplatné, neboť v této oblasti nejsou závislosti lineární.



# Určení distribuce Al-Si pomocí $tr[110]$



Na distribuci Al a Si ve strukturách živců jsou citlivé posuny ve směrech  $[110]$  a  $[1-10]$ . Tyto posuny označuje Kroll (1971, 1973) jako  $tr[110]$  a  $tr[1-10]$ . Hodnoty posunu lze vypočítat z mřížkových parametrů takto:

- $tr[110] = 1/2 (a^2 + b^2 + 2ab \cos\gamma)^{1/2}$
- $tr[1-10] = 1/2 (a^2 + b^2 - 2ab \cos\gamma)^{1/2}$



# Určení distribuce Al-Si pomocí $tr[110]$

Pro všechny živce se předpokládá, že platí

$$t_{2o} = t_{2m} = 1 - (t_{1o} - t_{1m}) / 2,$$

a proto lze efekt související s uspořádaností v obsazení pozic  $T_{1o}$  a  $T_{1m}$  atomy Al odvodit:

- ✓  $\Delta tr_1 = tr[110] - tr[1-10]$  a
- ✓  $\Sigma tr_1 = tr[110] + tr[1-10]$ .



# Určení distribuce Al-Si pomocí $tr[110]$

U topochemicky monoklinických živců je Al rozloženo přibližně pravidelně podél směrů  $[110]$  a  $[1-10]$ .

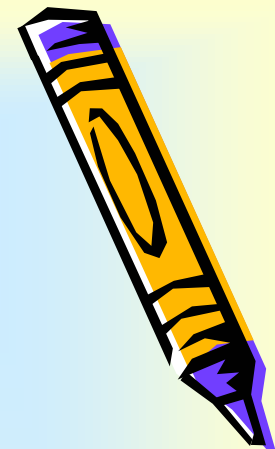
Pro plně uspořádané struktury ( $t_1 = 1$ ) je Al koncentrováno převážně podél směru  $[110]$ . Díky tomu se hodnoty  $tr[110]$  a  $tr[1-10]$  mění opačně vzhledem ke vzrůstajícímu stupni uspořádání. Pro veličiny  $tr[110]$  a  $tr[1-10]$  nemá pozice  $T_2$  tutéž identifikační hodnotu.

Pro veličiny  $tr[110]$  a  $tr[1-10]$  byly odvozeny následující vztahy platné pro topochemicky *monoklinické* živce:

$$t_1 = 35,758 - 6,5241(tr[1-10] - 0,00022 \Delta V) + 0,02138 V,$$

kde  $\Delta V = 0$ , je-li  $V > 690,5 \text{ \AA}^3$  a

$$\Delta V = 723,22 - V, \text{ je-li } V < 690,5 \text{ \AA}^3$$



# Určení distribuce Al-Si pomocí $tr[110]$

Pro topochemicky *triklinické* živce pak platí rovnice ( $\Delta V = |V - 692|$ ):

$$t_{1o} = \frac{tr[1\bar{1}0] - 5,545 - 0,003255V + 0,0002416 \cdot \Delta V}{-0,2793 + 0,000604 \cdot \Delta V}$$

$$t_{1o} - t_{1m} = \frac{(tr[110] - tr[1\bar{1}0]) - a_1 - a_2 \cdot V}{a_3 - a_4 \cdot V}$$

kde pro objem buňky  $V < 692 \text{ \AA}^3$  platí:

$$a_1 = -0,839$$

$$a_2 = 0,001213$$

$$a_3 = 0,4579$$

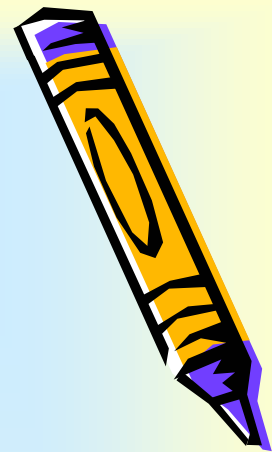
$$a_4 = 0,00022$$

a pro objem  $V > 692 \text{ \AA}^3$ :

$$a_1 = a_2 = 0$$

$$a_3 = 0,6452$$

$$a_4 = 0,00049$$



# Určení distribuce Al-Si pomocí $tr[110]$

Kroll a Ribbe (1987) odvodili další vztahy, které vychází z korigovaných hodnot  $\Delta tr_{cor}$  a  $\sum tr_{cor}$ . Jejich hodnoty získáme z následujících rovnic:

$$\Delta tr_{cor} = 334,822 - \frac{a_1 - 334,822}{-0,4629 - a_2} \cdot 0,4629$$

$$a_1 = \frac{b_1 \cdot \Delta tr_{obs}}{b_1 + b_2 \cdot V}$$

$$a_2 = \frac{b_2 \cdot \Delta tr_{obs}}{b_1 + b_2 \cdot V}$$

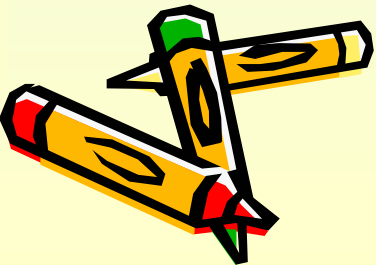
$$b_1 = 0,6457,$$

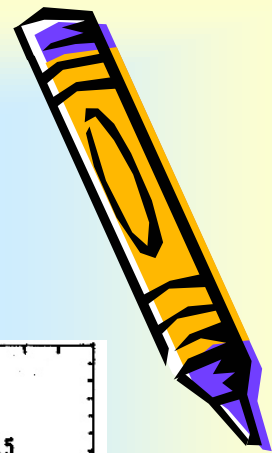
$$b_2 = -0,4902 \text{ a}$$

$$\sum tr_{cor} = -60,543 + \frac{a_1 + 60,543}{0,098747} \cdot 0,1053$$

kde  $a_1 = \sum tr_{obs} - 0,006553V$ .

Veličiny  $tr$  s indexem  $obs$  jsou hodnoty vypočtené ze zjištěných mřížkových parametrů.



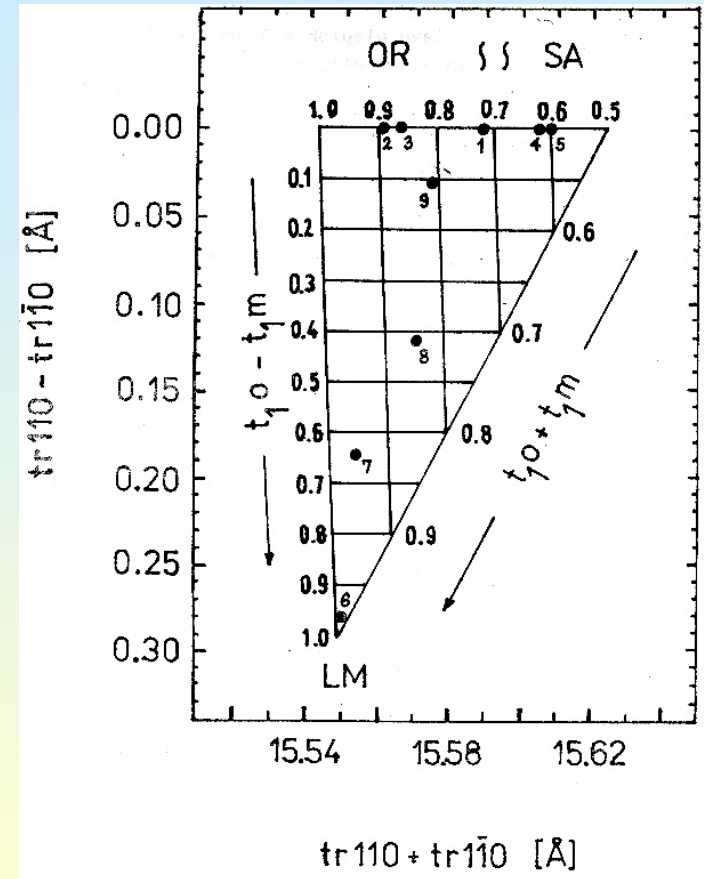


# Určení distribuce Al-Si pomocí $tr[110]$

Z korigovaných veličin  $tr_{cor}$  lze vyčíslit parametry charakterizující obsazení  $T_1$  pozic atomy Al podle následujících vztahů:

- ❖  $t_{1o} - t_{1m} = 3,4341 \cdot \Delta tr_{cor}$
- ❖  $t_{1o} + t_{1m} = 96,996 - 6,1762 \cdot \sum tr_{cor} + 0,1258 \cdot \Delta tr_{cor}$

Z uvedených rovnic lze sestavit nomogram pro rychlý odhad distribuce Al pomocí vynášení veličin  $t_{1o} + t_{1m}$  a  $t_{1o} - t_{1m}$ . Konstrukce je provedena pro systém LM - HS - OR.



# Určení strukturního stavu plagioklasů

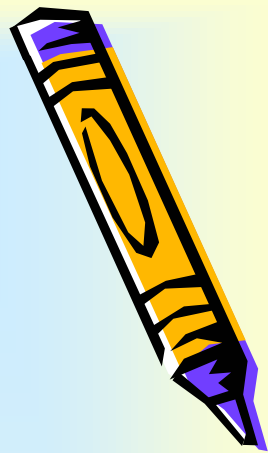
U živců lze vazebné vzdálenosti  $\langle T_2o - O \rangle$  a  $\langle T_2m - O \rangle$  považovat za relativně stálé a proto lze předpokládat  $t_{2o} = t_{2m}$ .

Pro charakterizaci pozice  $T_2$  z hlediska obsazení Al atomy lze zapsat průměrnou hodnotu:

$$\langle t_{2o} \rangle = (t_{2o} + t_{2m})/2.$$

Dále lze u plagioklasů předpokládat, že průměrná délka tetraedrických vazeb u  $T_1m$ ,  $T_2o$  a  $T_2m$  je velmi blízká a lze proto aplikovat další zjednodušení:

$$\langle t_1m \rangle = (t_1m + t_{2o} + t_{2m})/3$$





# Určení strukturního stavu plagioklasů

Za těchto předpokladů lze odvodit závislosti pro strukturní stavy plagioklasů pomocí parametrů  $t_1o$  a  $\langle t_1m \rangle$ .

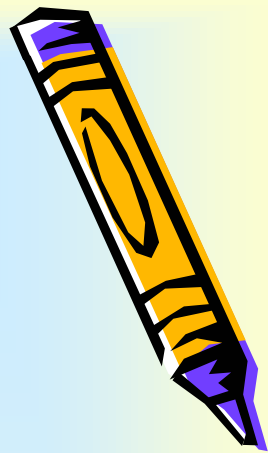
Hodnota  $t_1o$  vzniká u struktur s grupou **I-1** z průměru dvou parametrů

$$t_1o = (t_{1oo} + t_{1zo}) / 2$$

a u struktur s grupou **P-1** ze čtyř parametrů

$$t_1o = (t_{1ooo} + t_{1ozo} + t_{1ooi} + t_{1ozi}) / 4,$$

kde parametry  $t_{1ooo}$  atd. vyjadřují obsazení jednotlivých symetricky nezávislých tetraedrických pozic.



# Určení strukturního stavu plagioklasů

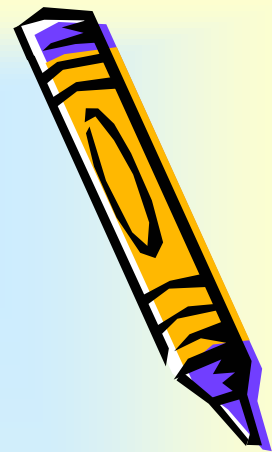
První z metod pro stanovení hodnot  $t_{10}$  a  $\langle t_{1m} \rangle$  (podle Krolla, 1983) využívá hodnot parametrů  $tr [110]$ ,  $tr [1-10]$  a obsah složky An ( $n_{An}$ ). Jednotlivé parametry se počítají podle rovnic:

$$t_{10} = \frac{tr[1\bar{1}0] - 7,695 - 0,1327 \cdot n_{An} - 0,04578 \cdot |n_{An} - 0,33|}{-0,2377 - 0,109 \cdot |n_{An} - 0,33|}$$

$$\langle t_{1m} \rangle = \frac{tr[110] - 7,715 - 0,1319 \cdot n_{An}}{-0,4687 - 0,134 \cdot n_{An}}$$

$$t_{10} - \langle t_{1m} \rangle = \frac{\Delta tr + 0,031 + 0,1018 \cdot n_{An} + 0,03844 \cdot |n_{An} - 0,33|}{0,2815 + 0,124 \cdot |n_{An} - 0,33|}$$

kde  $\Delta tr = tr[110] - tr[1-10]$



# Určení strukturního stavu plagioklasů

V případě přítomnosti složky Or v plagioklasech (ternární živec) je nezbytné provést korekce veličin  $tr[110]$  a  $tr[1-10]$  podle následujících rovnic, odvozených Krollem (1983):

Pro živce  $An_0 - An_{33}$ :

$$tr[110]_{cor} = \frac{tr[1\bar{1}0]_{obs} - 0,773 \cdot tr[110]_{obs} - 7,6345 + 7,603 \cdot a_1}{a_1 - 0,773}$$

$$a_1 = \frac{-0,198 + 0,4894 \cdot n_{An}}{0,1115 - 0,2348 \cdot n_{An}}$$



# Určení strukturního stavu plagioklasů

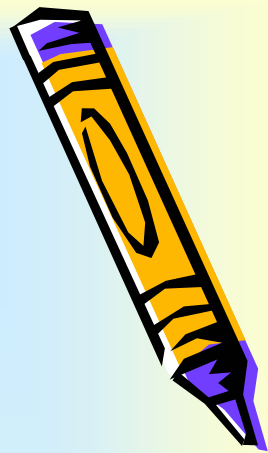
Pro živce s  $An_{33} - An_{87,5}$ :

$$tr[110]_{cor} = 8,4569 - 0,4848 tr[1-10]_{obs} + 0,3747 tr[110]_{obs}$$

Pro korekci hodnot  $tr[1-10]$  u živců s  $An_0 - An_{87,5}$  pak platí:

$$tr[1-10]_{cor} = tr[1-10]_{obs} + 0,773 (tr[110]_{cor} - tr[110]_{obs})$$

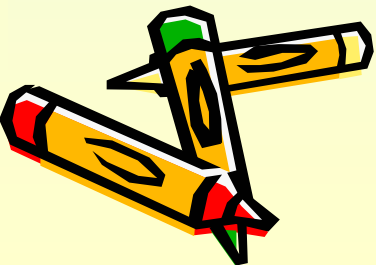
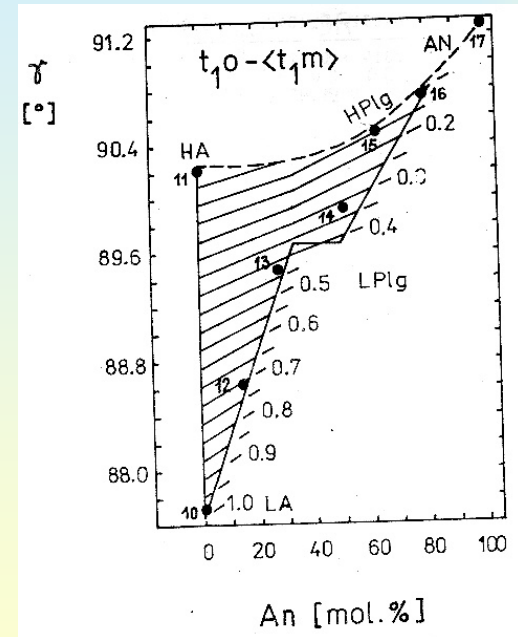
Hodnoty veličin  $tr$  vypočtené z mřížkových parametrů jsou značeny indexem „obs“ a korigované veličiny indexem „cor“.



# Určení strukturního stavu plagioklasů

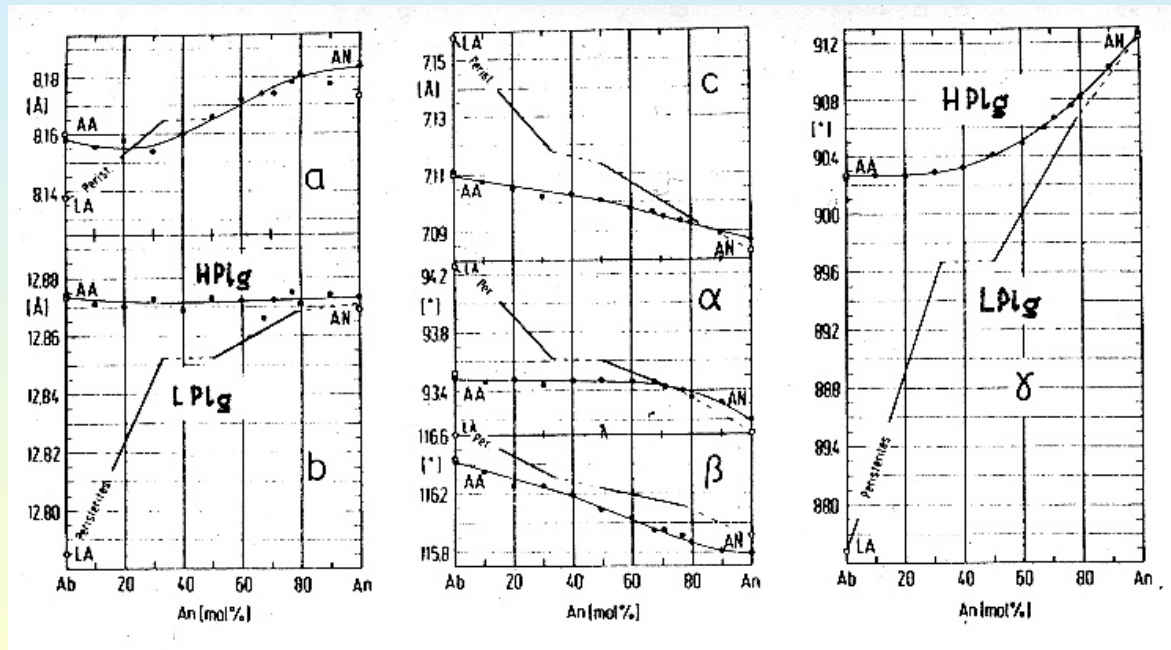
Hodnoty  $t_{10} - \langle t_{1m} \rangle$  lze vypočítat z velikosti úhlu  $\gamma$  přímé mřížky a obsahu složky An, nebo lze použít nomogram pro vysoké (HPlg) i nízké (LPlg) plagioklasy.

$$t_{10} - \langle t_{1m} \rangle = \frac{\gamma - 90,252 - 0,816 \cdot n_{An} - 0,3605 \cdot |n_{An} - 0,33|}{-2,362 - 1,030 \cdot |n_{An} - 0,33|}$$



# Určení strukturního stavu plagioklasů

Na základě mřížkových parametrů lze odhadnout obsah anortitové složky  $n_{An}$  s využitím následujících grafů Krolla (1983).

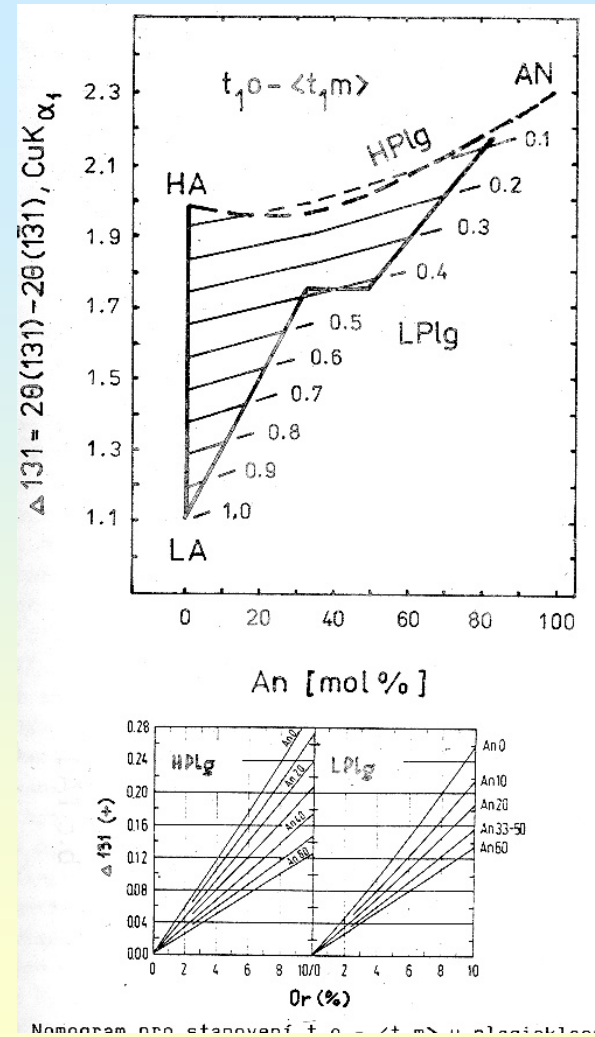


# Určení strukturního stavu plagioklasů

Další možnou metodou stanovení hodnoty  $t_{10} - \langle t_{1m} \rangle$  je využití poloh difrakcí  $2\Theta$  (131) a  $2\Theta$  (1-31) a obsahu anortitové složky. Hodnoty poloh difrakcí jsou vztaženy na záření  $\text{CuK}\alpha_1$ . Z poloh difrakcí vypočteme veličinu:

$$\Delta 131 = 2\Theta(131) - 2\Theta(1-31)$$

a podle hodnoty  $n_{\text{An}}$  můžeme při použití následujícího nomogramu odhadnout veličinu  $t_{10} - \langle t_{1m} \rangle$ . Obsahuje-li živec Or složku je nutno hodnotu  $\Delta 131$  korigovat podle grafu vpravo.



# Index napětí alkalických živců

Dosavadní výpočty předpokládali práci s homogenní živcovou fází. V přírodě ale velmi často dochází k jemnému prorůstání více živců, nejčastěji jsou to K-fáze a Na-fáze.

U odlišných fází najdeme určité strukturní odlišnosti, které způsobují vznik napětí mezi doménami. Práškovou difrakční analýzou studujeme průměrný vzorek, ale vysoká úroveň napětí mezi doménami může ovlivnit hodnoty mřížkových parametrů.

Pro živce bohaté K-složkou byl odvozen index napětí

$$SI = 3391,84 + 67,96a - 42,516bc$$

a pro živce bohaté Na-složkou platí vztah

$$SI = 1028,0 + 193,883a - 28,472bc,$$

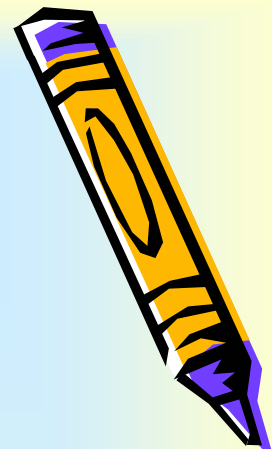
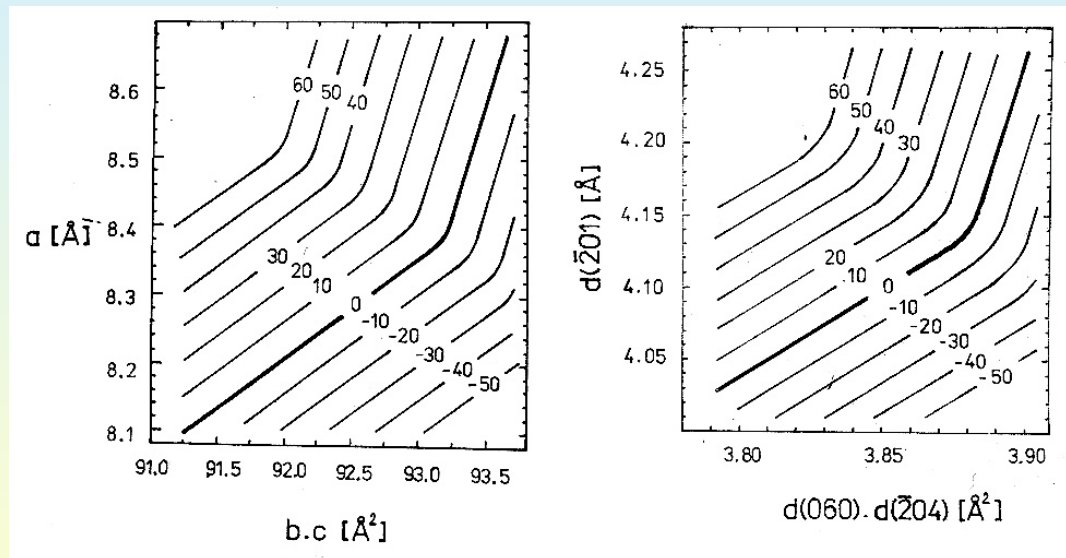
kde a,b,c jsou hodnoty mřížkových parametrů.





# Index napětí alkalických živců

Index SI lze také z mřížkových parametrů stanovit pomocí nomogramu (Kroll a Ribbe, 1987). Odhad SI podle poloh difrakce  $d(-201)$  a součinu  $d(060)$  a  $d(-204)$  lze provést podle podobného nomogramu.



# Aplikace výpočtu

Při aplikaci této metodiky je třeba získat mřížkové parametry studovaného živce a mít základní představu o jeho složení a symetrii. Pro topochemicky monoklinické živce použijeme rovnici:

$$2t_1 = \frac{b + 5,1479 - 2,56437c}{2,7945 - 0,44621c}$$

Jelikož u těchto živců platí  $t_1o = t_1m$ , výpočet dalších neznámých je následující:

Byl-li výsledek rovnice např.  $2t_1 = 0,72$ , potom

$t_1o = t_1 = 0,36$  a jednoduše  $t_1m = t_1o = 0,36$

$2t_2 = 1 - 2t_1 = 0,28$  a podobně  $t_2o = t_2 = 0,14$  a  $t_2m = t_2o = 0,14$



# Aplikace výpočtu

Pro topochemicky trojklonné živce použijeme rovnice:

$$t_{1o} + t_{1m} = \frac{b - 1,6757 - 1,61388c}{-8,921 + 1,18443c}$$

$$t_{1o} - t_{1m} = \frac{\gamma^* - 44,778 - 0,50246\alpha^*}{6,646 - 0,05061\alpha^*}$$

Rozpočet provedeme podle následujícího schématu:

$$t_{1o} + t_{1m} = 0,98$$

$$t_{1o} - t_{1m} = 0,96 \quad (\text{obě rovnice sečteme})$$

$$2t_{1o} = 1,94$$

$$t_{1o} = 0,97 \quad t_{1m} = 0,98 - 0,97 = 0,01$$

$$t_{2o} + t_{2m} = 1 - (t_{1o} + t_{1m}) = 1 - 0,98 = 0,02$$

$$t_{2o} = t_{2m} = (t_{2o} + t_{2m})/2 = 0,01$$



# Aplikace výpočtu

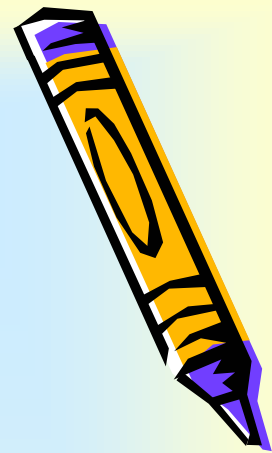
Výpočet charakteristik  $t_{1o}$  a  $t_{2m}$  pro alkalické živce můžeme provést z hodnot  $\text{tr}[110]$  a  $\text{tr}[1-10]$  podle rovnic:

$$t_1 = 35,758 - 6,5241(\text{tr}[1-10] - 0,00022 \Delta V) + 0,02138 V$$

Výpočet jednotlivých hodnot je pak následující:

$$t_1 = 0,44 \text{ a jednoduše } \mathbf{t_{1m}} = t_{1o} = 0,44$$

$$2t_2 = 1 - 2t_1 = 0,12 \text{ a podobně } \mathbf{t_{2o}} = t_2 = 0,06 \text{ a } \mathbf{t_{2m}} = t_{2o} = 0,06$$



# Aplikace výpočtu

Pro topochemicky triklinické živce platí rovnice:

$$t_{1o} = \frac{tr[1\bar{1}0] - 5,545 - 0,003255V + 0,0002416 \cdot \Delta V}{-0,2793 + 0,000604 \cdot \Delta V}$$

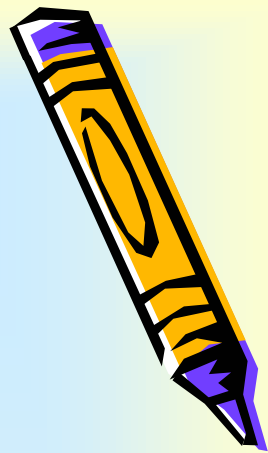
$$t_{1o} - t_{1m} = \frac{(tr[110] - tr[1\bar{1}0]) - a_1 - a_2 \cdot V}{a_3 - a_4 \cdot V}$$

Rozpočet všech veličin je následující:  $t_{1o} = 0,79$

$$t_{1m} = t_{1o} - (t_{1o} - t_{1m}) = 0,79 - 0,65 = 0,14$$

$$t_{2o} + t_{2m} = 1 - (t_{1o} + t_{1m}) = 1 - 0,93 = 0,07$$

$$t_{2o} = t_{2m} = (t_{2o} + t_{2m})/2 = 0,035$$



# Aplikace výpočtu

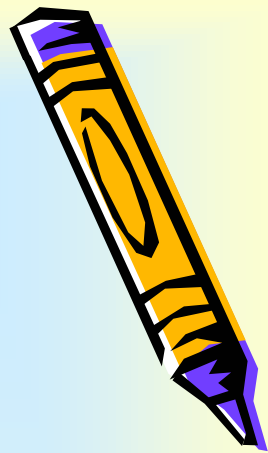
Parametry strukturního stavu K-živců lze dále počítat z korigovaných hodnot  $\Delta tr_{cor}$  a  $\sum tr_{cor}$  podle rovnic:

$$\Delta tr_{cor} = 334,822 - \frac{a_1 - 334,822}{-0,4629 - a_2} \cdot 0,4629$$

$$\sum tr_{cor} = -60,543 + \frac{a_1 + 60,543}{0,098747} \cdot 0,1053$$

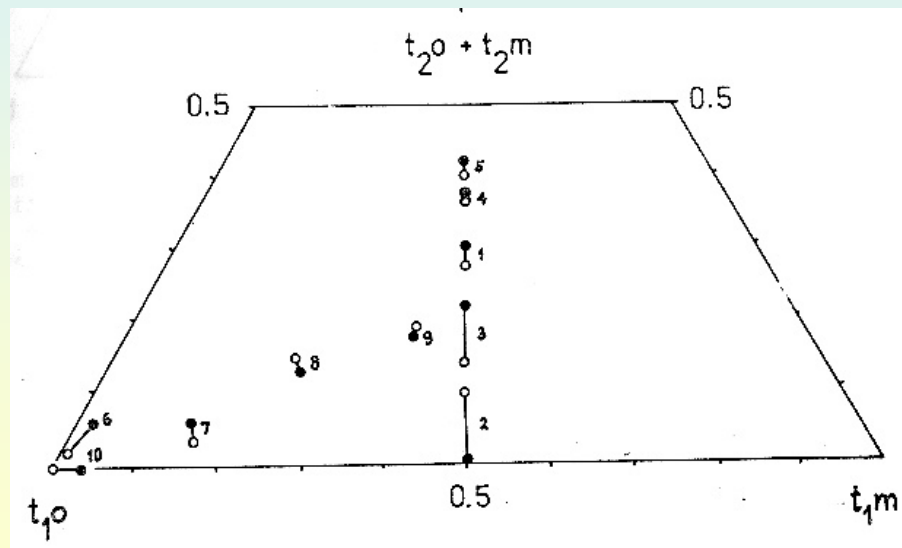
$$\begin{aligned} t_{1o} - t_{1m} &= 3,4341 \cdot \Delta tr_{cor} \\ t_{1o} + t_{1m} &= 96,996 - 6,1762 \cdot \sum tr_{cor} + 0,1258 \cdot \Delta tr_{cor} \end{aligned}$$

Výpočet jednotlivých proměnných viz výše.



# Aplikace výpočtu

Pro zobrazení Al v tetraedrických pozicích navrhli Stewart a Wright (1974) trojúhelníkový diagram, ve kterém středová svislá linie představuje ideální ortoklas ( $t_{1o} = t_{1m} = 0,5$ ;  $t_{2o} + t_{2m} = 0$ ) a ideální sanidin ( $t_{1o} = t_{1m} = 0,25$ ;  $t_{2o} + t_{2m} = 0,5$ ). Projekční body v levém dolním rohu představují ideálně uspořádané triklinické živce ( $t_{1o} = 1$ ;  $t_{1m} = t_{2o} = t_{2m} = 0$ ).



# Používané zkratky živců

<b>zkratka</b>	<b>české označení</b>	<b>anglický název</b>
<b>OR</b>	ortoklas	orthoclase
<b>AD</b>	adular	adularia
<b>SA</b>	sanidin	sanidine
<b>LS</b>	nízký sanidin	low sanidine
<b>HS</b>	vysoký sanidin	high sanidine
<b>MI</b>	mikroklin	microcline
<b>LM</b>	nízký mikroklin	low microcline
<b>IM</b>	přechodný mikroklin	intermediate microcline
<b>AB</b>	albit	albite
<b>AA</b>	analbit	analbite
<b>MA</b>	monalbit	monalbite
<b>HA</b>	vysoký albit	high albite
<b>LA</b>	nízký albit	low albite
<b>OL</b>	oligoklas	oligoclase
<b>AZ</b>	andezín	andesine
<b>LB</b>	labradorit	labradorite
<b>BY</b>	bytownit	bytownite
<b>AN</b>	anortit	anorthite
<b>Plg</b>	plagioklas	plagioclase
<b>LPlg</b>	nízký plagioklas	low plagioclase
<b>HPlg</b>	vysoký plagiokls	high plagioclase

