

ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΤΡΙΚΛΙΝΙΚΟΤΗΤΑΣ ΚΑΛΙΟΥΧΩΝ ΑΣΤΡΙΩΝ ΤΗΣ ΚΑΤΩΤΕΡΗΣ ΤΕΚΤΟΝΙΚΗΣ ΕΝΟΤΗΤΑΣ ΤΗΣ ΡΟΔΟΠΗΣ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ "RIETVELD"

Β. Περδικάτσης*

ΣΥΝΟΨΗ

Η δομική κατάσταση των Κ-αστρίων μελετάται με περίθλαση ακτίνων-Χ με χρήση μεθόδων κόνεως. Συνήθως διαχωρίζεται καθαρό υλικό Κ-αστρίων, προκειμένου να αποφευχθούν αλληλοκαλύψεις ανακλάσεων με άλλους αστρίους. Η μέθοδος "Rietveld" επιτρέπει τον άνετο προσδιορισμό των σταθερών πλέγματος των Κ-αστρίων χωρίς να είναι απαραίτητος ο απόλυτος διαχωρισμός τους. Η μέθοδος δοκιμάστηκε αρχικά σε δείγματα καθαρού αλβίτη, μικροκλινούς και μείγματος αλβίτη - μικροκλινούς - χαλαζία και στη συνέχεια σε Κ-αστρίους από οφθαλμογενείς της κατώτερης τεκτονικής σειράς της Ροδόπης.

Οι σταθερές πλέγματος που προσδιορίστηκαν έχουν την ίδια ακρίβεια με αυτές που προσδιορίζονται σε απόλυτα καθαρό υλικό, με την μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων.

Οι Κ-άστριοι που μελετήθηκαν χαρακτηρίζονται ως "μέγιστοι μικροκλινείς".

ABSTRACT

The cell parameters of the K-feldspars are usually studied by powder diffraction methods. In order to avoid overlapping of diffraction lines of K-feldspars with those of other feldspars, pure material must be separated. The "Rietveld" method allows easy cell parameters determination even in cases where the material is not totally pure. The method was checked with samples of albite, microcline and mixtures of albite - microcline - quartz. The accuracy was the same with those determined in pure phases by normal least square methods. Finally K-feldspars from orthogneisses of the lower tectonic unit of Rhodope were studied.

The K-feldspars were determined as "maximum microcline".

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η κρυσταλλοδομική κατάσταση των Κ-αστρίων είναι συνάρτηση των συνθηκών δημιουργίας τους και κατά συνέπεια η γνώση της δίνει πολύτιμες πληροφορίες για τις συνθήκες σχηματισμού των πετρωμάτων που τα φιλοξενούν.

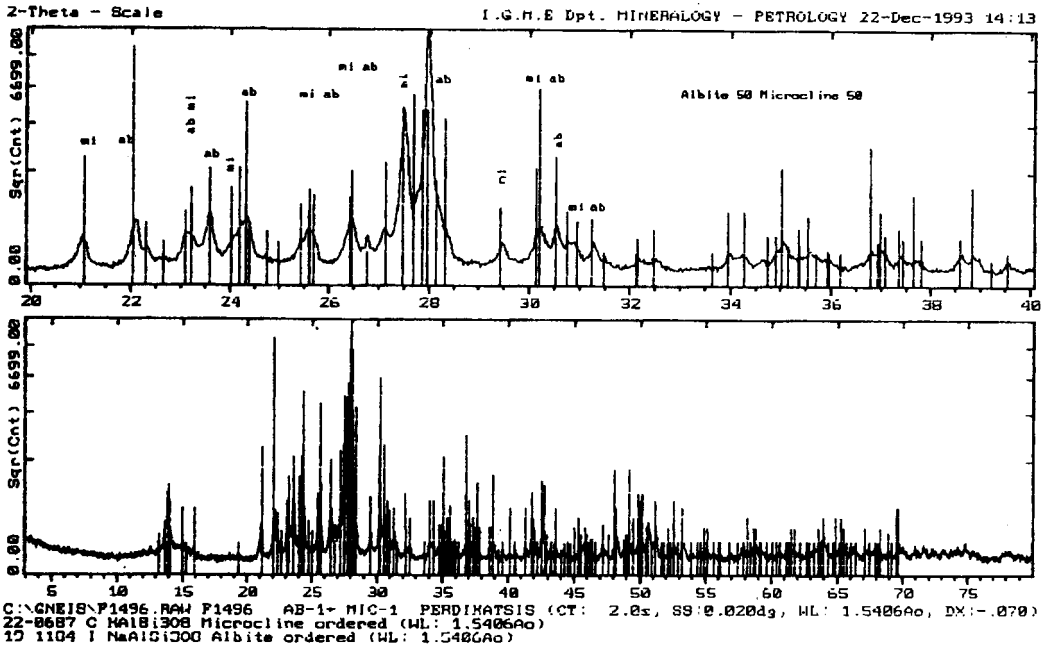
Η μελέτη των κρυσταλλογραφικών παραμέτρων των Κ-αστρίων, με περίθλαση ακτίνων-Χ και με χρήση μεθόδων κόνεως, απαιτεί κατά κανόνα το διαχωρισμό τους από τα συνυπάρχοντα ορυκτά του πετρώματος, όπως χαλαζία, αλβίτη ή πλαγιόκλαστα γενικά, μαρμαρυγίες, αμφιβόλους και λοιπά ορυκτά. Η διαδικασία αυτή είναι χρονοβόρα και απαιτεί το διαχωρισμό βάσει του ειδικού βάρους των ορυκτών με τη βοήθεια βαρέων υγρών. Ιδιαίτερα, ο διαχωρισμός των Κ-αστρίων από χαλαζία και αλβίτη είναι δύσκολος λόγω της μικρής διαφοράς του ειδικού τους βάρους

* ΙΓΜΕ, Μεσογείων 70, 11527 Αθήνα

(Χαλαζίας 2.65, Κ-άστριοι 2.56, αλβίτης 2.62).

Συνήθως ο διαχωρισμός γίνεται, μετά από κωνιοποίηση του δείγματος σε μέγεθος κόκκων της τάξεως των 100 - 70 μm , με τη βοήθεια υγρών με συγκεκριμένο ειδικό βάρος.

Ο διαχωρισμός αυτός είναι αναγκαίος προκειμένου να απομακρυνθούν τα υπόλοιπα ορυκτά και να μην υπάρχει αλληλοκάλυψη περισσότερων ανακλάσεων διαφορετικών ορυκτών στην ίδια γωνία περίθλασης 2θ . Ιδιαίτερο πρόβλημα αλληλοκάλυψης ανακλάσεων στους Κ-αστρίους δημιουργούν οι υπόλοιποι άστριοι, όπως αλβίτης ή πλαγιόκλαστα, λόγω παρόμοιας κρυσταλλικής δομής και παρεμφερών σταθερών πλέγματος, σχήμα 1. Στη συνέχεια το διάγραμμα περιθλασιμετρίας που παίρνεται από καθαρό Κ-άστριο δεικτοδοτείται και με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων, προσδιορίζονται οι ακριβείς σταθερές πλέγματος.



Σχ. 1: Διάγραμμα περίθλασης ακτίνων-Χ μείγματος αλβίτη 50% , μικροκλινούς 50%. Παρατηρείται αλληλοκάλυψη μεγάλου αριθμού ανακλάσεων. Ο βαθμός αλληλοκάλυψης αυξάνει με την γωνία 2θ . Το πρώτο διάγραμμα είναι μερική μεγένθυση του ολικού.

Fig. 1: X-ray diffractogram of a mixture albite 50% , microcline 50%. A strong overlapping is observed which increases with 2θ angle. The first Diagram is a partial zoom.

Για τη λήψη του ακτινογραφήματος χρησιμοποιείται συνήθως λυχνία χαλκού σε περιθλασίμετρο κόνεως με γεωμετρία Bragg-Brentano.

Η ακρίβεια προσδιορισμού των σταθερών πλέγματος εξαρτάται από την ακρίβεια προσδιορισμού των γωνιών 2θ και αυτές με την σειρά τους από την ποιότητα του παρασκευάσματος και τη ρύθμιση του γωνιομέτρου περιθλασιμετρίας. Εάν προστεθούν στο δείγμα μικρές ποσότητες χαλαζία ή άλλου υλικού όπως πυρίτιο, μπορούν να χρησιμοποιηθούν σαν εσωτερικά υλικά αναφοράς για τη διόρθωση των τιμών 2θ όλων των ανακλάσεων του διαγράμματος περίθλασης ακτίνων-Χ.

Επειδή, όπως αναφέρθηκε, η παραπάνω διαδικασία είναι χρονοβόρα, στην παρούσα εργασία, έγινε προσπάθεια προσδιορισμού των σταθερών πλέγματος των Κ-

αστρίων με την αποκαλούμενη μέθοδο "Rietveld".

Η μέθοδος "Rietveld" είναι μία μέθοδος εκλέπτυνσης της κρυσταλλικής δομής. Βασικό σημείο της μεθόδου είναι η παραδοχή ότι κάθε βηματική μέτρηση ($\Delta\theta$) σε ένα διάγραμμα περιθλασιμετρίας είναι μία ανεξάρτητη παρατήρηση εντάσεων $y_i(o)$ οι οποίες συγκρίνονται με θεωρητικές $y_i(c)$ (RIETVELD, 1969).

Μία καλή εισαγωγή στη μέθοδο "Rietveld" είναι η εργασία των SNYDER και BISH, HOWARD και PRESTON, POST and BISH "Modern Powder Diffraction" (1989), καθώς και του YOUNG (1993).

Όπως σε κάθε αλγόριθμο εκλέπτυνσης με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων, το μέγεθος που ελαχιστοποιείται είναι το σύνολο των τετραγώνων της διαφοράς μεταξύ πραγματικών και θεωρητικών τιμών των παρατηρήσεών μας, όπου παρατηρήσεις είναι οι εντάσεις y_i σε κάθε βήμα, $\Delta\theta$, του γωνιογράμματος περιθλασιμετρίας. Η θεωρητική τιμή $y_i(c)$ για τυχαία προσανατολισμένο κρυσταλλικό υλικό ισούται με:

$$y_i(c) = S \cdot \Sigma_{hkl} L_{hkl} \cdot F_{hkl}^2 \cdot G(\Delta\theta_{ihkl}) \cdot P_{hkl} \cdot A + y_i(b)$$

S = Συντελεστής κλίμακας

L = Συντελεστής διόρθωσης Lorenz Polarization

F = Παράγων δομής

G ($\Delta\theta_i$) = Συνάρτηση η οποία αποδίδει τη μορφή ανάπτυξης (profil) μιας ανάκλασης hkl. Η πλέον συνηθισμένη συνάρτηση είναι η Pseudo-Voigt, η οποία είναι μείξη κατανομής κατά Gauss και Lorentzian.

P = Συντελεστής προσανατολισμού

$y_i(b)$ = Ενταση θορύβου στο i - βήμα

Εφ' όσον η κρυσταλλική δομή ενός υλικού είναι γνωστή, μπορούν να υπολογιστούν οι παράγοντες δομής F_{hkl} και κατά συνέπεια και η ένταση κάθε σημείου $y_i(c)$.

Η πρόοδος και ποιότητα της εκλέπτυνσης με τη μέθοδο Rietveld μετριέται με διαφόρους δείκτες, όπως R_p , R_{wp} , R_{Bragg} , (YOUNG, 1993), όπου:

$$R_p = \Sigma |y_{i0} - y_{ic}| / \Sigma y_{i0}$$

$$R_{wp} = [\Sigma w_i \cdot (y_{i0} - y_{ic})^2 / \Sigma w_i \cdot y_{i0}^2]^{0.5}$$

$$R_{Bragg} = \Sigma |I_{ohkl} - I_{chkl}| / \Sigma I_{ohkl}$$

Σε περίπτωση περισσοτέρων της μιας φάσης στο διάγραμμα περιθλασιμετρίας, η μέθοδος Rietveld επιτρέπει την ακριβέστερη δυνατή ποσοτική ανάλυση που μπορεί να επιτευχθεί σήμερα με περίθλαση ακτίνων-X (BISH και HOWARD, 1988), (YOUNG, 1993).

Ως προς την ακρίβεια προσδιορισμού των σταθερών πλέγματος με τη μέθοδο Rietveld, οι POST και BISH (1989) διαπίστωσαν ότι είναι μεγαλύτερη με μικρότερη μέση απόκλιση από αυτή με τη συνήθη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων.

ΔΟΜΙΚΗ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ Κ-ΑΣΤΡΙΩΝ

Η δομική κατάσταση των Κ-αστρίων ($KAlSi_3O_8$) χαρακτηρίζεται από την κατανόμη του Al στις τετραεδρικές θέσεις του Si. Για τυχαία στατιστική κατανομή η συμμετρία είναι μονοκλινή με ομάδα συμμετρίας χώρου C 2/m. Με τη συμμετρία αυτή χαρακτηρίζονται οι μονοκλινείς Κ-άστριοι, όπως το σανίδινο και το ορθόκλαστο.

Με πτώση της θερμοκρασίας το Al μετακινείται σε συγκεκριμένες θέσεις με αποτέλεσμα την εξάλειψη του επιπέδου συμμετρίας και τη μείωση της συμμετρίας από μονοκλινή σε τρικλινή με ομάδα συμμετρίας χώρου $C\bar{1}$ όπως στη περίπτωση του μικροκλινούς.

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη "Θεόφραστος" - Τμήμα Γεωλογίας, Α.Π.Θ.

Ο βαθμός τάξης του Al σε τετραεδρικές θέσεις Si χαρακτηρίζει κατά τους GOLDSMITH & LAVES (1954) και το βαθμό τρικλινότητας:

$$\Delta = 12.5 \left(\frac{d_{131}}{d_{131}} - \frac{d_{131}}{d_{131}} \right)$$

Στην περίπτωση μονοκλινών K-αστρίων, λόγω του επιπέδου συμμετρίας, ισχύει $(hkl) = (h-k l)$ και η τρικλινικότητα είναι μηδέν. Η τιμή Δ κυμαίνεται από μηδέν έως ένα, που έχει ο μέγιστος μικροκλινης.

Οι κρυσταλλογραφικές σταθερές της κυψελίδας κατά τους STEWARD και RIBBE (1969), καθώς και STEWARD και WRIGHT (1974) σχετίζονται άμεσα με την κατανομή του Al/Si και μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον προσδιορισμό αυτής της κατανομής.

Η δομή των K-αστρίων αποτελείται από τρισδιάστατους δακτυλίους TO_4 τετραέδρων όπου $T=Si$ ή Al (TAYLOR 1933, RIBBE 1975). Οι θέσεις του Si/Al χωρίζονται σε 2 θέσεις T1 και 2 θέσεις T2 και επειδή το Al καταλαμβάνει το 1/4 των θέσεων αυτών, ισχύει $2t_1 + 2t_2 = 1$, όπου t_1 και t_2 η πιθανότητα ευρέσεως Al στις θέσεις T1 και T2 (KROLL 1971, 1973). Στο σανίδινο με μερική ταξινόμηση μετρήθηκε $t_1 = 0.3$ και $t_2 = 0.5$ (STEWARD & WRIGHT, 1974), ενώ οι θεωρητικές τιμές για μη ταξινομημένο σανίδινο είναι $2t_1 = 2t_2 = 0.5$.

Στο ορθόκλαστο το Al καταλαμβάνει κυρίως τις θέσεις $2T1 > 0.5$. Ο Steward και Wright (1974) προσδιόρισαν την τιμή $2T1 = 0.8$. Η μεγαλύτερη ταξινόμηση του Al οδηγεί στην εξάλειψη του επιπέδου συμμετρίας και κατά συνέπεια σε τρικλινή συμμετρία και διαφοροποίηση των θέσεων $2T1$ και $2T2$ σε θέσεις $T1o, T1m, T2o$ και $T2m$.

Η μέγιστη ταξινόμηση του Al παρατηρείται στο "μέγιστο" μικροκλινης όπου $T1 = 1$ και $T1m, T2o$ και $T2m$ είναι μηδέν. Για ενδιάμεσους μικροκλιनेίς ισχύει $T1o > T1m > T2o = T2m$ (STEWARD και WRIGHT, 1974, RIBBE, 1975).

Οι τιμές $T1o, T1m, T2o$ και $T2m$ μπορούν να προσδιοριστούν από τις σταθερές πλέγματος των K-αστρίων (STEWARD και WRIGHT, 1974).

ΥΛΙΚΟ

οι καλιούχοι άστριοι που μελετώνται στην παρούσα εργασία, προέρχονται από δείγματα οφθαλμογενεσιών της κατώτερης τεκτονικής ενότητας της Ροδόπης (Mroskos, 1989, Mroskos et al. 1989). Τα πετρώματα αυτά αντιπροσωπεύουν μεταμορφωμένα πλουτώνια σώματα τα οποία έχουν υποστεί, όπως και τα συνοδύοντα ηφλιτικής και βασικής σύστασης πετρώματα, πολυφασική μεταμόρφωση. Μεταμόρφωση υψηλών πιέσεων με συνθήκες P - T 14 Kbar και $\sim 550^\circ C$ (Mroskos 1989), τεκμηριώνεται στους ορθογενεσίους με την παραγένεση φεγγίτης με 7 άτομα Si στο δομικό τύπο για 22 οξυγόνα + K-άστριοι + αλβίτης + χαλαζίας. Λευκοί μαρμαρυγίες με ζωνώδη σύσταση, στους οποίους ελαττώνεται το σελαδονικό μόριο από το κέντρο προς την άκρη, αύξηση της περιεκτικότητας του Ti σε λευκούς μαρμαρυγίες με ελάττωση του σελαδονικού μορίου καθώς και ανάπτυξη ολιγοκλάστου γύρω από τον αλβίτη, τεκμηριώνουν ένα δεύτερο μεταμορφικό επεισόδιο με ελάττωση της πίεσης και πιθανή μικρή αύξηση της θερμοκρασίας (Mroskos 1989, Mroskos et al. 1989). Οι K-άστριοι, οι οποίοι συχνά εμφανίζονται σε μορφή πορφυροκλαστών έχουν μέγεθος που φθάνει κατά περιπτώσεις μέχρι 4 εκατοστά. Οι πορφυροκλάστες παρουσιάζουν, όχι σπάνια, διδυμία κατά Carlsbad και σε ορισμένες περιπτώσεις περθίτωση. Συχνά αντικαθίστανται από μυρμικήτες. Εγκλείσματα πλαγιοκλάστων, συχνά με μαγματική διάβρωση, έχουν αντικαταθεί από λεπτοκρυσταλλικά συσσωματώματα αποτελούμενα από αλβίτη + φεγγίτη + κλινοζοϊσίτη. Επίσης οι περθίτες σε αρκετές περιπτώσεις ανακρυσταλλώθηκαν σε συσσωματώματα ισομετρικών κόκκων αλβίτη. Οι K-άστριοι, τόσο οι μεγακρύσταλλοι όσο και εκείνοι της κύριας μάζας

έχουν μετατραπεί σε μικροκλινή, όπως δείχνει η χαρακτηριστική δικτυόμορφη πολυδυμία τους. Στους οφθαλμώδεις μεγακρυστάλλους η πολυδυμία αυτή περιορίζεται συνήθως σε εξωτερικά τμήματα του κρυστάλλου.

Στόχος της παρούσας εργασίας είναι η μελέτη του βαθμού τρικλινικότητας των μεγακρυστάλλων των Καλιούχων αστρίων, οι οποίοι σχηματίστηκαν πρωτογενώς σε θερμοκρασίες μαγματικού σταδίου και αναθερμάνθηκαν σε θερμοκρασίες ~550°C κατά τη διάρκεια των μεταμορφικών επεισοδίων, τα οποία συνοδεύονται με αντίστοιχα παραμορφωτικά επεισόδια.

ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΑ ΔΕΔΟΜΕΝΑ

Αρχικά επιλέχθηκαν μακροσκοπικά, μετά από θραύση, κομμάτια αστρίων μερικών χιλιοστών έως εκατοστού, κάτω από το στερεοσκοπικό μικροσκόπιο. Από το αρχικό αυτό υλικό πάρθηκε ακτινογράφημα περιθλασιμετρίας, για τον ορυκτολογικό προσδιορισμό του, το οποίο αποτελείται κυρίως από Κ-αστρίους, αλβίτη και χαλαζία. Μέρος του υλικού αυτού λειοτριβήθηκε <100 μm, και στη συνέχεια με κατάλληλα υγρά, ειδικού βάρους 2.60, έγινε ο διαχωρισμός των Κ-αστρίων.

Τα ακτινογραφήματα πάρθηκαν με αυτόματο περιθλασίμετρο ακτίνων-Χ τύπου Siemens D500 με λυχνία χαλκού, 40 KV και 30 mA, και μονοχρωματιστή γραφίτη. Το βήμα των μετρήσεων ήταν 0.02° με 1 sec. ανά βήμα. Ο ποιοτικός προσδιορισμός των ορυκτών έγινε με το λογισμικό της Siemens DIFFRAC AT.

Χρησιμοποιήθηκαν δύο ανεξάρτητες τεχνικές για τον προσδιορισμό των σταθερών πλέγματος των Κ-αστρίων.

Στα σχετικά καθαρά δείγματα των Κ-αστρίων χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα των APPLEMAN και EVANS (1973), αφού προηγουμένως έγιναν διορθώσεις των γωνιών 2θ με τη βοήθεια ανακλάσεων του χαλαζία, ο οποίος, είτε υπήρχε στο δείγμα σε μικρή ποσότητα, είτε προστέθηκε σε ποσοστό περίπου 10 %. Το παραπάνω πρόγραμμα βασίζεται σε αλγόριθμο των ελαχίστων τετραγώνων.

Τόσο στα καθαρά δείγματα των Κ-αστρίων όσο και στα αρχικά με χαλαζία και αλβίτη χρησιμοποιήθηκε η εκλέπτυνση των σταθερών πλέγματος με τη μέθοδο "Rietveld". Χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα H/Y για PC των BISH και HOWARD (1988). Δεν απαιτήθηκε διόρθωση των τιμών 2θ δεδομένου ότι το πρόγραμμα υπολογίζει την πραγματική απόκλιση του γωνιομέτρου ή το λάθος λόγω κακής παρασκευής του δείγματος.

Επειδή η μέθοδος απαιτεί τις κρυσταλλικές δομές των κρυσταλλικών φάσεων του δείγματος, για την εκκίνηση του αλγορίθμου με την μέθοδο "RIETVELD" δόθηκαν τα μοντέλα των σχετικών κρυσταλλικών δομών, του μικροκλινούς του αλβίτη και του χαλαζία από τη βιβλιογραφία.

ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Για τον έλεγχο της μεθόδου ως προς την ακρίβεια προσδιορισμού των σταθερών πλέγματος μετρήθηκε καθαρός μικροκλινής, μείγμα μικροκλινούς με αλβίτη, καθώς και μείγμα μικροκλινούς με αλβίτη και χαλαζία.

Και στις τρεις περιπτώσεις οι σταθερές πλέγματος προσδιορίστηκαν με τη μέθοδο Rietveld, ενώ στην περίπτωση του καθαρού μικροκλινούς προσδιορίστηκαν και με το πρόγραμμα των APPLEMAN και EVANS (1973). Οι δείκτες Rp και Rwp για όλα τα δείγματα ήταν 12 - 10 %, το δε R Bragg μικρότερο από 10%. Τα αποτελέσματα δίνονται στον πίνακα 1.

Από τη σύγκριση των σταθερών πλέγματος από τα μείγματα των ορυκτών αλλά και αυτά του καθαρού μικροκλινούς προκύπτει ότι οι σταθερές πλέγματος με τη μέθοδο Rietveld μπορούν να προσδιοριστούν με μεγάλη ακρίβεια. Το ίδιο συμπέρασμα προκύπτει και με δείγματα Κ-αστρίων από τους οφθαλμογενεσίους, τόσο σε καθαρή μορφή όσο και παρουσία αλβίτη και χαλαζία. Η ακρίβεια για τις σταθερές πλέγματος είναι ± 0.001 και για τις γωνίες ± 0.01 .

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη "Θεόφραστος" - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

Πίν. 1: Σταθερές πλέγματος μικροκλινούς και Αλβίτη από καθαρά δείγματα και μείγματα Αλβίτη - Μικροκλινούς - Χαλαζία.

Table 1: Lattice constants of Microcline and Albite from pure samples and mixtures of Albite - Microcline - Quartz.

	1	2	3	4	5	6	7	8
	Ab	Ab	Ab	Mic	Mic	Mic	qz	qz
$a_0 \text{ \AA}$	8,141	8,139	8,140	8,585	8,583	8,587	4,9129	4,913
$b_0 \text{ \AA}$	12,789	12,783	12,789	12,962	12,960	12,960	4,9129	4,913
$c_0 \text{ \AA}$	7,159	7,155	7,155	7,221	7,219	7,221	5,4051	5,405
α_0	94,26	94,24	94,25	90,65	90,63	90,64	90	90
β_0	116,61	116,64	116,63	115,96	115,93	115,97	90	90
γ_0	87,70	87,70	87,71	87,65	87,66	87,63	120	120
	Ab = Albite,			Mic = Microcline,			qu = quartz	

1 = καθαρός Αλβίτης (Ab) 2 = Αλβίτης από μείγμα Αλβίτη με Μικροκλινή (Ab + Mic) 3 = Αλβίτης από μείγμα Αλβίτη με Μικροκλινή και Χαλαζία (Ab + Mic + qz) 4 = Καθαρός Μικροκλινή 5 = Μικροκλινή από μείγμα Αλβίτη με Μικροκλινή (Ab+ Mic) 6 = Μικροκλινή από μείγμα Αλβίτη με Μικροκλινή και Χαλαζία (Ab+Mic+qz) 7 = Χαλαζίας (qz) 8 = Χαλαζίας αρχείου JCPDS (5-490).

1 = pure Albite (Ab) 2 = Albite (ab) from a mixture Albite +Microcline (Ab+Mic) 3 = Albite from a mixture Albite +Microcline +Quartz (Ab + Mic + qz) 4 = pure Microcline 5 = Microcline from a mixture Albite +Microcline (Ab + Mic) 6 = Microcline from a mixture Albite +Microcline +Quartz (Ab + Mic + qz) 7 = Quartz (qz) 8 = Quartz JCPDS (5-490)

Στο σχήμα 2 δίδεται ακτινογράφημα μείγματος μικροκλινούς - αλβίτη - χαλαζία σε αναλογία 1 : 1 : 1. Στο σχήμα διακρίνεται το αρχικό πειραματικό διάγραμμα, το θεωρητικά υπολογισμένο με βάση τον αλγόριθμο RIETVELD και η διαφορά μεταξύ πειραματικού και θεωρητικού. Όπως φαίνεται υπάρχει άριστη προσέγγιση μεταξύ θεωρητικού και πειραματικού ακτινογραφήματος περιθλασιμετρίας .

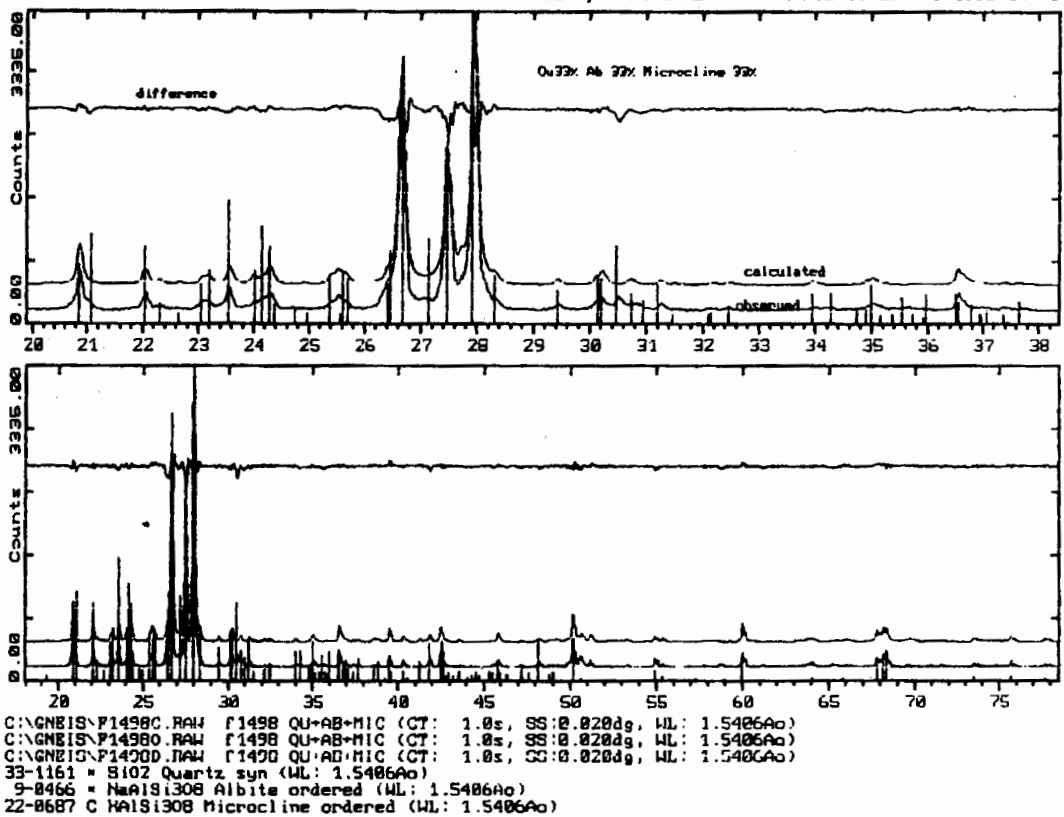
Ως προς την ποσοτική ανάλυση του δείγματος προέκυψαν τιμές όμοιες με τις αναμενόμενες θεωρητικές.

Στον πίνακα 2 δίνονται τα αποτελέσματα για τους K-αστρίους από τους οφθαλμογενεύσιους. Και εδώ οι δείκτες R_p και R_{wp} για όλα τα δείγματα ήταν 15 - 12 %, το δε R Bragg μικρότερο από 10%.

Εκτός των σταθερών πλέγματος οι υπόλοιπες σταθερές υπολογίστηκαν με βάση τη βιβλιογραφία που ήδη αναφέρθηκε σχετικά με τις σταθερές πλέγματος και τη δομική κατάσταση των αστρίων. Η σύσταση των K-αστρίων ως προς ορθόκλαστο και αλβίτη υπολογίστηκε σύμφωνα με την εργασία των STEWART και WRIGHT (1974) με τη βοήθεια του όγκου της μοναδιαίας κυψελίδας.

Στα σχήματα 3, 4, 5, απεικονίζονται διάφορες σταθερές που υπολογίστηκαν από τις σταθερές πλέγματος και σχετίζονται με την κατανομή του Al σε θέσεις Si στα τετράεδρα.

Από τα παραπάνω σχήματα και τον πίνακα 2 οι K-άστριοι που μελετήθηκαν κατατάσσονται στους "μέγιστους - μικροκλινείς". Για μερικά δείγματα προέκυψαν διαφορές ως προς την τιμή a_0 που προκύπτει από το διάγραμμα $b_0 - c_0$ των STEWART και WRIGHT (1974) και της τιμής που υπολογίστηκε από τις μετρήσεις περιθλασιμετρίας. Αυτοί οι K-άστριοι κατά τους παραπάνω ερευνητές θεωρούνται τεταμένοι. Το φαινόμενο αυτό παρατηρείται συχνά σε περθιτικούς αστρίους και οφείλεται



Σχ. 2: Ακτινογράφημα περιθλασιμετρίας μετά την εκλέπτυνση με την μέθοδο "Rietveld". Διακρίνεται το πειραματικό διάγραμμα, το θεωρητικό, που υπολογίστηκε με τη μέθοδο "Rietveld", και η διαφορά μεταξύ πραγματικού και θεωρητικού. Στη βάση διακρίνονται οι θέσεις των ανακλάσεων. Το πρώτο μέρος είναι μερική μεγένθυση του ακτινογραφήματος.

Fig. 2: X-ray diffractogram after "Rietveld" refinement. Observed and calculated pattern and the difference between them are given. The marks at the bottom give the position of the reflections. The upper part is a partial magnification.

στην απόμειξη των αστρίων σε συνδυασμό με την αλλαγή συμμετρίας.

Ως προς τις θερμοκρασίες που προκύπτουν από τον πίνακα 2 θα πρέπει να διευκρινιστούν τα εξής :

Ο βαθμός ταξινόμησης του Al σε θέσεις Si εξαρτάται από πολλούς παράγοντες, ο σπουδαιότερος των οποίων είναι η θερμοκρασία, η οποία παλαιότερα θεωρείτο αποκλειστικά υπεύθυνη για την κατανομή αυτή. Γενικά σήμερα ισχύει ότι η θερμοκρασία είναι ο σημαντικότερος συντελεστής που επηρεάζει την "τάξη ή αταξία" στους K-ατρίους. Με πτώση της θερμοκρασίας το Al καταλαμβάνει πρώτα τις θέσεις T_1 και στο τέλος τη θέση T_{10} , με μη γραμμική σχέση, STEWART και WRIGHT (1974). Από τη σχέση $T = f(t_{10} + t_{1m})$ των παραπάνω ερευνητών υπολογίστηκαν οι θερμοκρασίες του πίνακα 2.

ΣΥΖΗΤΗΣΗ - ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Από τη μελέτη των K-αστρίων της κατώτερης τεκτονικής ενότητας της Ροδόπης
 Ψηφιακή Βιβλιοθήκη "Θεόφραστος" - Τμήμα Γεωλογίας, Α.Π.Θ.

Πίν. 2: Σταθερές πλέγματος K-αστρίων από οφθαλμογενεύσιους της κατώτερης τεκτονικής ενότητας της Ροδόπης. Στον πίνακα υπολογίστηκαν και οι σταθερές που σχετίζονται με την κατανομή του Al σε θέσεις τετραέδρων.

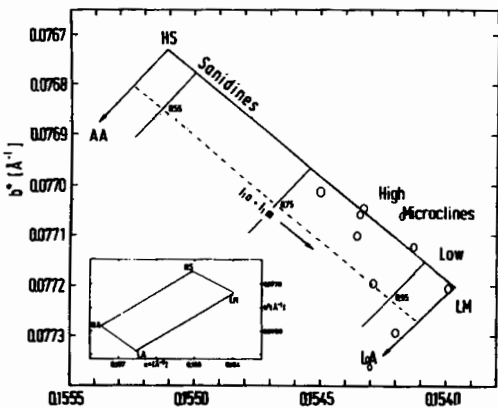
Table 2: Lattice constants of K-feldspars from Orthogneisses from the lower tectonic unit of Rhodope. In this table are also given constants related to Al distribution in SiO₄ tetrahedra.

SAMPLE		aoÅ	boÅ	coÅ	α°	β°	γ°	V	a*	b*	c*	SAMPLE		
12PK14	1	8,579	12,979	7,218	90,38	116,13	89,25	721,50	0,129841	0,077054	0,15431	12PK14		
12PK9	2	8,584	12,924	7,207	90,16	115,96	89,63	718,86	0,129571	0,077377	0,15432	12PK9		
B7-1A	3	8,585	12,919	7,203	90,28	115,89	89,36	718,66	0,129483	0,077410	0,15432	B7-1A		
PS8 (F)	4	8,559	12,948	7,210	90,08	116,02	89,67	718,03	0,130016	0,077233	0,15434	PS8 (F)		
R9AA	5	8,571	12,973	7,198	90,01	115,98	89,84	719,48	0,129788	0,077084	0,15454	R9AA		
RGB102A	6	8,585	12,926	7,205	90,48	115,85	89,18	719,46	0,129442	0,077372	0,15422	RGB102A		
RGB110A	7	8,583	12,966	7,211	90,41	116,11	89,56	720,57	0,129751	0,077128	0,15444	RGB110A		
RGB110	8	8,559	12,972	7,220	89,95	115,99	89,66	720,54	0,129984	0,077091	0,15409	RGB110		
RGB111	9	8,570	12,979	7,218	90,31	115,82	89,85	722,70	0,129627	0,077049	0,15391	RGB111		
RGB151	10	8,574	12,982	7,215	90,33	115,82	89,82	722,90	0,129566	0,077031	0,15397	RGB151		
RGB22	11	8,575	12,953	7,219	90,11	115,90	89,78	721,29	0,129639	0,077203	0,15399	RGB22		
RGB27A	12	8,577	12,980	7,211	90,21	115,99	89,46	721,58	0,129712	0,077045	0,15428	RGB27A		
SAMPLE		a°	b°	c°	α°	β°	γ°	V	a*	b*	c*	SAMPLE		
SAMPLE		α*	β*	γ*	v*	Or%	Ab%	tlo+t1m	tlo-t1m	tlo	t1m	t2o=t2m	T	SAMPLE
12PK14	1	89,95	63,87	90,65	0,0013860	95,78	4,22	0,939	0,300	0,620	0,319	0,031	480	12PK14
12PK9	2	90,00	64,04	90,33	0,0013911	88,45	11,55	0,991	0,145	0,568	0,423	0,005	410	12PK9
B7-1A	3	90,00	64,11	90,58	0,0013915	87,93	12,07	0,976	0,254	0,615	0,361	0,012	440	B7-1A
PS8 (F)	4	90,07	63,98	90,33	0,0013927	86,30	13,70	0,957	0,128	0,542	0,415	0,022	470	PS8 (F)
R9AA	5	90,07	64,02	90,17	0,0013899	90,11	9,89	0,819	0,061	0,440	0,379	0,090	600	R9AA
RGB102A	6	89,86	64,15	90,68	0,0013899	90,06	9,94	0,973	0,332	0,653	0,321	0,013	450	RGB102A
RGB110A	7	89,76	63,89	90,29	0,0013878	93,13	6,87	0,922	0,178	0,550	0,372	0,039	500	RGB110A
RGB110	8	90,22	64,01	90,40	0,0013879	93,02	6,98	0,968	0,128	0,548	0,420	0,016	430	RGB110
RGB111	9	89,73	64,18	90,02	0,0013879	99,38	0,62	0,939	0,066	0,502	0,437	0,031	460	RGB111
RGB151	10	89,72	64,18	90,04	0,0013833	100,00	0,00	0,912	0,078	0,495	0,417	0,044	500	RGB151
RGB22	11	89,99	64,10	90,19	0,0013864	95,17	4,83	1,005	0,086	0,545	0,459	0,002	<400	RGB22
RGB27A	12	90,03	64,01	90,50	0,0013858	96,02	3,98	0,890	0,213	0,551	0,338	0,055	500	RGB27A
SAMPLE		α*	β*	γ*	v*	Or%	Ab%	tlo+t1m	tlo-t1m	tlo	t1m	t2o=t2m	T	SAMPLE

με τη μέθοδο RIETVELD προέκυψε ότι οι σταθερές πλέγματός τους και κατά συνέπεια η δομική τους κατάσταση μπορούν να προσδιοριστούν ταχύτερα και ευκολότερα, επειδή δεν απαιτείται ασυτηρός διαχωρισμός τους από τους υπόλοιπους αστρίους του πετρώματος.

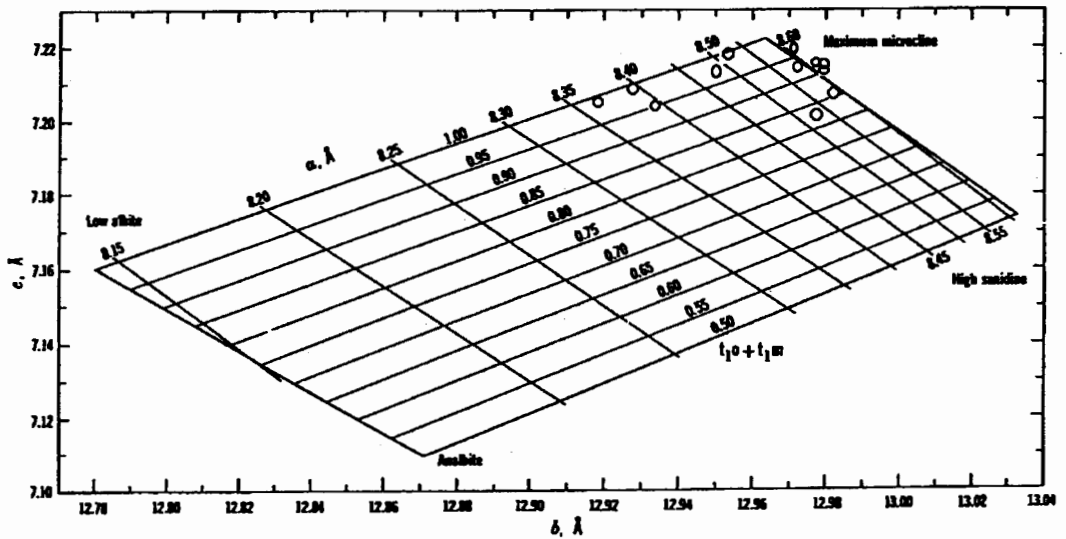
Οι K-άστριοι που μελετήθηκαν χαρακτηρίζονται σαν "μέγιστοι - μικροκλι- νείς".

Οι θερμοκρασίες που προκύπτουν βάση της κατανομής του Al κυμαίνονται από 400 έως 500°C με εξαίρεση ένα δείγμα με 600°C. Οι θερμοκρασίες αυτές είναι χαμηλότερες από αυτές που προέκυψαν σαν θερμοκρασίες



Σχ. 3: Προβολή, κατά Bambauer & Bernotat 1982, τιμών b*, c* K-αστρίων της κατώτερης τεκτονικής ενότητας της Ροδόπης.

Fig. 3: b*, c* plot, after Bambauer & Bernotat 1982, of K-feldspars of the lower tectonic unit from Rhodope.



Σχ. 4: Προβολή τιμών b_0 , c_0 , κατά Stewart & Wright 1974, K-αστρίων της κατώτερης τεκτονικής ενότητας της Ροδόπης

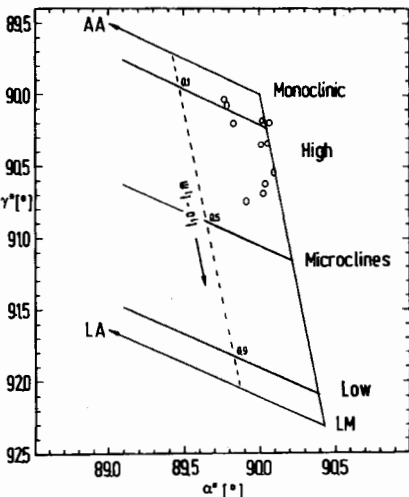
Fig. 4: b_0 , c_0 plot, after Stewart & Wright 1974, of K-feldspars of the lower tectonic unit from Rhodope.

σχηματισμού από τον Μπόσκο (1989) στην πετρολογική μελέτη των γνευσίων της κατώτερης τεκτονικής ενότητας. Ασφαλώς η δομική κατάσταση των αστρίων είναι διαφορετική, με υψηλότερο βαθμό τάξης του Al, από αυτή κατά τον σχηματισμό τους, η οποία και εξηγεί τις χαμηλότερες θερμοκρασίες.

Οι θερμοκρασίες που προέκυψαν θα πρέπει να θεωρηθούν σαν οι τελικές θερμοκρασίες στις οποίες σταμάτησε η ταξινόμηση των ατόμων του Al σε θέσεις Si και όχι οι θερμοκρασίες σχηματισμού των ορυκτών.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

APPLEMAN and EVANS (1973). USGS-GD-73-003, Report Nr. 20
 BAMBAUER, H.U, BERNOTAT, W.H. (1982). The microcline / Sanidine Transformation Isograd in Metasomorphitic Regions. Schweiz. mineral. petrogr. Mitt. 62, 185 - 230 .
 BISH, D. L., HOWARD, S.A. (1988). Quantitative phase analysis using the Rietveld method. J. Appl. Cryst. 21, pp. 86 -91 .
 BISH, D. L., POST, J.E. (1989). Modern Powder Diffraction. Reviews in Mineralogy V. 20. Mineralogical Society of America.
 GOLDSMITH, J.R., LAVES, F. (1954). The microcline -sanidine stsbility relations. Geochim. Cosmochim. Acta, 5, 1 -19 .
 HOWARD, S.A., PRESTON, K .D. (1989). Modern Powder Diffraction. Rewievs in Mineralogy V. 20. Mineralogical Society of America,



Σχ. 5: Προβολή τιμών α^* , γ^* , κατά Stewart & Wright 1974, K-αστρίων της κατώτερης τεκτονικής ενότητας της Ροδόπης.

Fig. 5: α^* , γ^* plot, after Stewart & Wright 1974, of K-feldspars of the lower tectonic unit from Rhodope.

- pp. 217 -276.
- KROLL, H. (1971). Feldspaeete im System $K[AlSi_3O_8] - Na[AlSi_3O_8] - Ca[Al_2Si_2O_8]$: Al, Si Verteilung und Gitterparameter, Phasen Transformation und Chemismus. Inaug. Diss., Westf. Wilhelms-Univ. Muenster.
- KROLL, H. (1973). Estimation of the Al,Si-distribution of Feldspars from the Lattice Translations $Tr[110]$ and $[1-1 0]$. I. Alkali Feldspars. *Contr. Mineral. Petrol.* 39, 141-156.
- MPOSKOS, E. (1989). High - pressure metamorphism in gneisses and pelitic schists in the east Rhodope zone (N. Greece). *Mineral. Petrol.* 41, 25-39.
- MPOSKOS, E., PERDIKATIS, V., LIATI, A. (1989). Compatible metamorphic conditions in the Rhodope zone (N. Greece), as evidence by the petrology of orthogneisses of the lower tectonic unit. 2nd Hellenic - Bulgarian Symposium on the geological and physico-geographical problems of the Rhodope Massive. Thessaloniki October 14 - 17. Abstracts, p. 34 .
- POST, J.E., BISH, D.L. (1989). Modern Powder Diffraction. Reviews in Mineralogy V. 20. Mineralogical Society of America, pp. 277 - 308 .
- RIBBE, P.H. (1975). The chemistry, Structure and nomenclature of feldspars. *Min. Soc. Amer.*, Short Course notes ,Vol.2, Feldspar Mineralogy, R1 - R52.
- RIETVELD, H. M. (1969). A profile refinement method for nuclear and magnetic structures. *J. Appl. Cryst.* 2, pp. 65 -71.
- SNYDER, R.L., BISH, D. L. (1989). Modern Powder Diffraction. Reviews in Mineralogy V. 20. Mineralogical Society of America, pp. 101-142.
- STEWART, D.B., RIBBE, P.H. (1969). Structural explanation for variation in cell parameters of alkali feldspar with Al/Si ordering. *Amer. J. Sci.* 267 -A, 444 - 462 .
- STEWART, D.B., WRIGHT, T.L. (1974). Al, Si order and symmetry of natural alkali feldspars, and the relationship of strained cell parameters to bulk composition. *Bull. Soc. Franc. Mineral. Cristallogr.* 97, 350 - 377 .
- TAYLOR, W. H. (1933). The structure of sanidine and other feldspars. *Zeit. Krist.* V.85, p.425.
- YOUNG, R.A. (1993). The Rietveld Method. I U Cr, Oxford University press.