



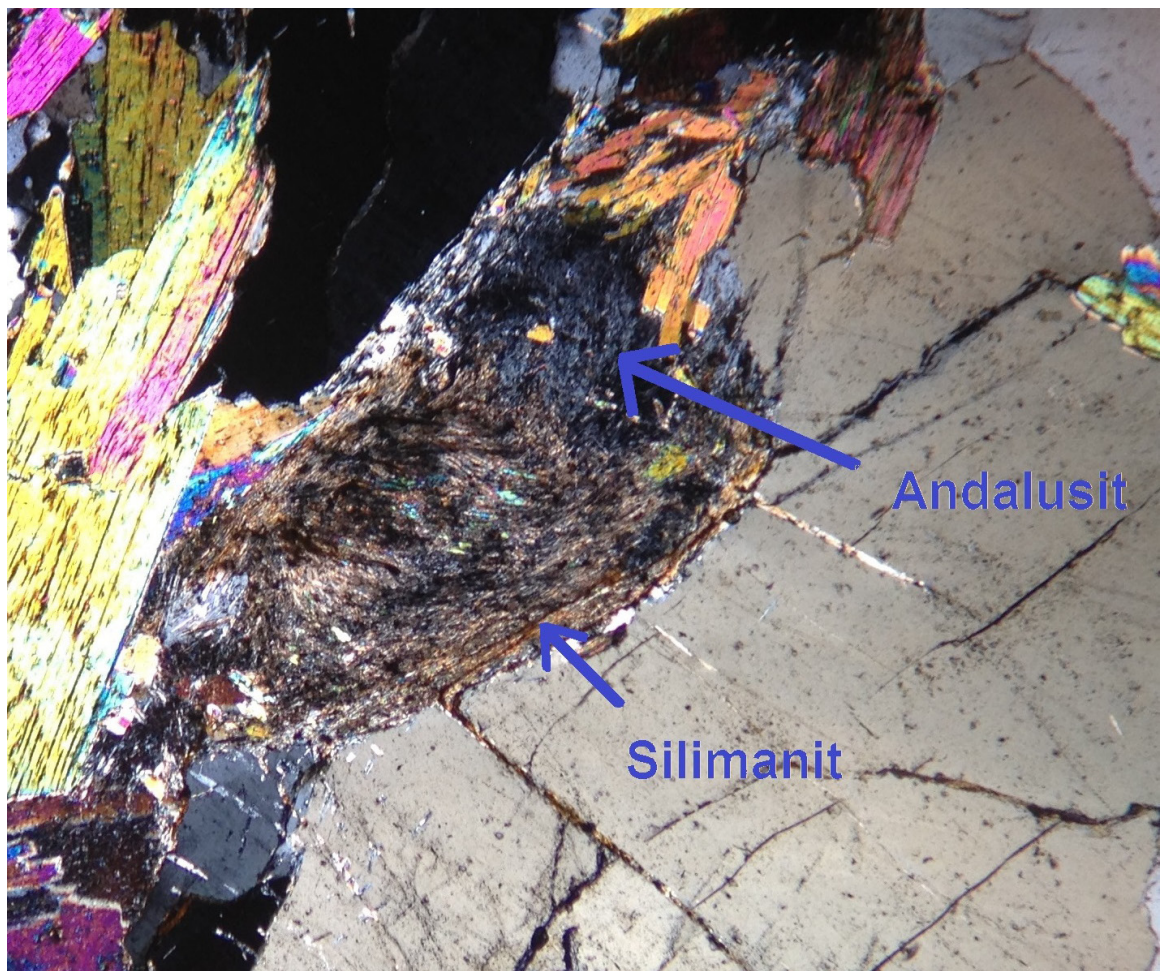
Stockholm
University

Bachelor Thesis

Degree Project in
Geology 15 hp

Tryck- och temperaturförhållande under metamorfos av migmatitisk gnejs på centrala Utö

Amanda Bergman



Stockholm 2015

Department of Geological Sciences
Stockholm University
SE-106 91 Stockholm

Abstract

As a part of the SGU financed (Geological Survey of Sweden) work called “Metamorphic Map of Sweden” this project aimed to contribute with metamorphic data (P-T conditions) from the island of Utö. In order to achieve this almost two weeks of mapping was carried out in the designated area for this thesis. Samples were selected according to their mineral composition and location in the area of interest. Preparation of the samples was done at Stockholm University before they were sent to Canada where they were made into thin sections. From the petrographic analysis of the thin sections, minerals were selected for further analysis using the electron microprobe analyzer at Uppsala University. With the results of the analyzer (i.e. mineral compositions), activities of the minerals could be calculated by the program AX_2 and pressure and temperature for the stable reactions were calculated by the program THERMOCALC.

During the calculation process it became evident that an important phase was missing among the phases entered into the program THERMOCALC. A deeper study of the literature revealed the presence of the mineral andalusite, which had been overlooked in the thin section-analysis as it was covered by fibrolite (sillimanite). Once the phase of andalusite had been confirmed and added as a phase into THERMOCALC the calculated pressure and temperature corresponded better with the migmatitic texture of the bedrock sampled.

The end result which is based on the interpretation that the migmatitic bedrock examined is both sillimanite and andalusite bearing, was that the pressure and temperature of metamorphism was 2.8 kbar and 658 degrees C.

Framsida bild: en andalusitkärna kantad med fibrolite (se pilarna), till höger syns ett kvartskorn och till vänster syns muskovit samt ett utsläckt kvartskorn.

Innehållsförteckning

Abstract	1
Innehållsförteckning	3
Introduktion	4
Syfte	4
Det karterade området	4
Geologisk bakgrund	4
Metod	5
Kartering	5
Provtagning	6
Preparering av prover	6
Petrografisk analys	7
EMPA analys	7
AX och THERMOCALC	8
Resultat	8
Berggrundskartering	8
Geologisk karta	11
Petrografisk analys	12
EMPA resultat	16
Tryck och Temperatur av THERMOCALC	17
Diskussion	19
Slutsats	20
Tack	20
Referenser	21
Appendix	22
Appendix 1, EMPA	22
Appendix 2, AX_2	23
Appendix 3, THERMOCALC	24

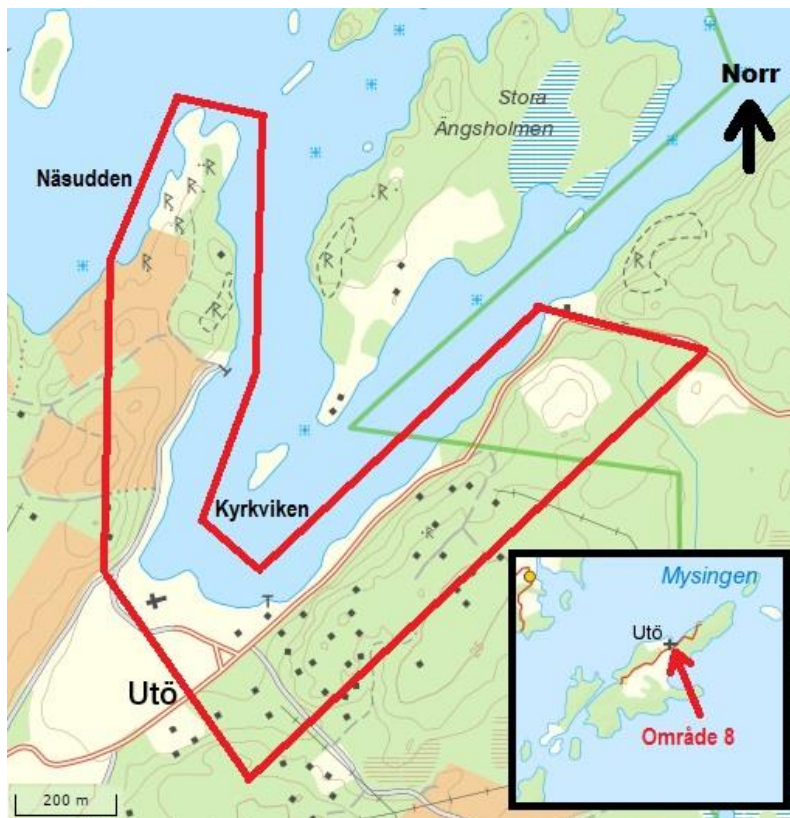
Inledning

Syfte

Syftet med det här arbetet är att beräkna tryck- och temperaturförhållandet under metamorfosen av ett område på centrala Utö. Det aktuella området karterades och från utvalda platser togs prover för vidare petrografisk analys i tunnslip. För att genomföra den geotermobarometriska beräkningen användes en elektronmikrosond (EMPA) samt datorprogrammen AX_2 och THERMOCALC.

Det karterade området

Området som karterats till detta arbete stäcker sig på bägge sidorna kring Kyrkviken (se figur 1). Beräkningarna för metamorfosen är baserat på prover från migmatiten på norra Näsudden där radierande pegmatitgångar är ett påtagligt inslag i litologin. Av denna anledning har även dessa undersökts närmare med petrografisk analys i mikroskop samt med elektronmikrosondanalys (EMPA).



Figur 1. Karta över Utö, området som undersöks är inom den röda rammen och är utmarkerat som "Område 8" på den lilla kartan till höger i bilden.

Geologisk bakgrund

Utö tillhör området Bergslagen, vilken är en Sveriges två svekofenniska delprovinser, som är karakteriserat av vulkaniska- och sedimentära bergarter samt intrusiva bergarter som resultat av en aktiv öbåge-miljö (Andréasson et al. 2006). Formationen av det som idag kallas för Utö

började för omkring 1905 miljoner år sedan (Ma) (Lundström et al. 1998), då främst med vulkaniska och sedimentära avlagringar (Allen et al. 1996). Vulkanen befanns sig under havsytan och ryolitiska lava varvades med pelitiska gråvackor men under perioder då vulkanen var passiv kunde biogena karbonater bildas (Talbot 2008). Även då dessa avlagringar genomträngdes av granitoider är det främsta bergarterna från denna tidsperiod felsisk vulkaniska bergarter, gråvackor och kalksten. Vulkanen nådde sin högsta höjd för 1900 Ma efter att flertalet gånger kollapsat till så kallade kaledra (från spanska ”kittel”) efter våldsamma pyroklastiska eruptioner (Allen et al. 1996).

Det som till största del har påverkat deformationen av dessa bergarter är en konvergent plattgräns med subduktions-zon vilket gav upphov till berggrunden i hela Bergslagen området (Talbot, 2008). Vulkanismen blev inte långlivad utan avtog 1880 Ma och sjönk åter under havsytan. En period av deformation tog vid omkring 1850 Ma då konvergensen av plattorna fortskred även efter att havet stängts, vilket gav upphov till en bergsbildande miljö. Veckning och metamorfos var resultatet av kollisionen mellan öbågar och vulkaniska bågar och på Utö skedde metamorfosen vid höga temperaturer och lågt tryck. Barrientos (2011) stödjer detta i sin kandidatavhandling där hon skriver att både andalusit och sillimanit förekommer på Stora Pärsholmen, vilket är en del av Utö. I Talbots artikel från 2008 beskrivs ”Utö Shear Zone” (UZS) vilket är en sydvästlig till nordostligt strykande skjuvzon som löper längst mitten av Stora Pärsholmen och fortsätter in över ön. Talbot beskriver också hur UZS sammanför gråvackor från olika tektoniska faser bredvid varandra: gråvackorna nordöst om skjuvzonen som aldrig nådde tillräckliga djup för att smälta mot liknande gråvackor nordväst om skjuvzonen som bevisligen delvist har smält i och med uppkomsten av migmatiter vilka utgör en stor del av litologin i området.

Omkring 1800 Ma följdes kollisionen av en kollaps som tros ha smält underliggande berggrund vilken har trängt upp som en yngre generation graniter i Bergslagenområdet Dessa graniter går inte att se på Utö, men det finns dock gott om de pegmatiter som ofta ses i samband med graniterna (Lundström & Koyi, 2003). Dessa pegmatiter var det sista bergsbildande eventet på Utö och att tektoniska händelser längre bort gett upphov till sprickbildningar och förkastningar på ön. I dag syns de metamorfa gråvackorna både på öns nordvästra och sydöstra del, medan det i mitten av ön främst går att finna en komplicerat veckad berggrund av metamorfa vulkaniska och karbonatrika bergarter.

Metod

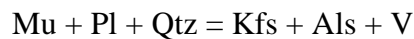
Kartering

Under dagarna 30:e mars till 3:e april samt 6:e till 10:e april 2015 genomfördes berggrundskarteringen som detta arbete utgår ifrån. För att identifiera mineral i fält användes lupp. På platser med en extremt vittrad yta användes en hammare för att slå upp en ny brottyta vilket underlättade identifieringen av bergarten. Modelleringen av berggrundskartan skedde i Quantum GIS (QGIS), som är ett geografiskt informations system, vilket de olika bergarterna har lagts in som enskilda lager.

Provtagning

Detta arbete är inriktat på att få fram en avgränsning hos tryck- och temperaturförhållandena under metamorfosen som bildat denna berggrund. Därför riktades insamlandet av prover för analys till det område som troligt innehåller metamorfa mineraler, samtidigt eftersträvades en så bred redovisning av berggrunden som möjligt. Det stuffer som valdes ut för tillverkning av tunnslip omfattades således av Näsuddens pegmatiter och migmatit, gnejs, skiffer, mylonit samt gråvackor från östra delen av viken. Vart de olika proven togs och den omgivande bergarten kommer att beskrivas övergripande i anknytning till redovisandet av respektive tunnslip.

Om metamorfosen är tillräcklig för att bilda indexmineral som aluminiumsilikaten sillimanit måste dess närvaro styrkas i petrografisk analys, för att senare kunna användas i den geotermobarometrisk beräkningen. Aluminiumsilikater bildas i och med metamorfos av muskovit enligt reaktionen (Philpotts och Ague, 2009):



Mu = muskovit

Pl = plagioklas

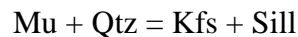
Qtz = kvarts

Kfs = kaliumfeldspat

Als = aluminium silikat

V= volatiles

Tidigare arbete på Utö av Barrientos (2011) har undersökt närvaron av sillimanit på Stora Persholmen i och med uppsmältandet av muskovit enligt:



Mu = muskovit

Qtz = kvarts

Kfs = kaliumfeldspat

Sill = sillimanit

Denna reaktion befinner sig på muskovit-sillimanit isograden, det vill säga gränsen mellan två metamorfa zoner. Vad Barrientos också kommer fram till är att sillimanit-andalusit isograden också befinner sig i det undersökta området. I detta arbete var därför provtagningen från migmatiten speciellt viktig eftersom det i den migmatiska texturen förekom i band rika på glimmermineral (muskovit).

Preparering av prover

Sex av sju prover skickades till Kanada, Vancouver Peterographics Ltd, för tillverkning av tunnslip, det sjunde tillverkades på Stockholms universitet. Alla prover preparerades inför tunnslipstillverkningen genom att först sågats till klossar av standardstorlek (10x20x35 mm) för att sedan polerats. Handledare i såglaboratoriet, där dessa förberedelser utfördes, var Dan Zetterberg som både översåg det praktiska arbetet och introducerade teorin bakom tunnslipstillverkningen. Sågnitten placerades så att man på det färdiga tunnslipet kom att

betrakta den så kallade B-ytan, vilket är en av det huvudsakliga planen i kristallstrukturen (Nesse, 2012). Detta innebar att sågbladet gick tvärs emot provets foliation och i den mån det var möjligt även längs med lineationen. Ett korrekt tillverkat tunnslip ger en låg interferensfärg hos kvarts, detta kan sedan användas som utgångspunkt för att standardisera interferensfärger hos övriga mineral och på så sätt möjliggöra identifikation (Nesse, 2012). Ett sjunde tunnslip tillverkades på Stockholms universitet.

Petrografisk analys

Med ett petrografiskt mikroskop (Leica DM LSP) identifierades de olika tunnslipens mineralogi. Intressanta upptäckter, som texturer och sekundära mineraler, finns redovisade i beskrivningen för respektive tunnslip. För att underlätta EMPA analysen (se nedan) skannades de aktuella slipen. På de utskrivna bilderna markerades analyspunkterna för respektive mineral.

EMPA analys

På Geocentrum vid Uppsala universitet genomfördes EMPA analys (Electron Microprobe Analys, Jeol JXA-8530F) på två av proven: UÖAB-1 och UÖAB-P2. Analysen syftade till att ta fram olika mineralers kemiska sammansättning. För att åstadkomma detta användes en elektronstråle riktad mot det mineral som skulle analyseras. När provet bombarderades av elektronstrålen slogs elektroner från provets kärna ut, vilket frigjorde platser i orbitalen för yttre elektron att falla in i. Detta gav upphov till en överskottsenergi som emitterades i form av röntgenstrålar. Beroende på mineralets sammansättning kommer röntgenstrålarna att uppträda på ett karaktäristiskt sätt, vilket läses av en detektor som räknar ut provets elementära sammansättning i oxider (Reed, 2005).

Analyserna gjordes på plagioklas, kalifältspat, muskovit och biotit för migmatit-provet UÖAB-1 och på granat, kvarts och plagioklas för pegmatit-provet UÖAB-P2. Inför analysen täcktes slipen av en tunn kol-film för att göra ytskiktet ledande. Varje mineral analyserades på tre ställen (förutsatt att mineralstorleken var tillräcklig för att det skulle få plats): två inne i mineralet och en på kanten avgränsande mot andra analyserade mineral. Det är på kanten som jämvikt mellan mineralerna tros vara närmast (Winter, 2014).

UÖAB-1 valdes ut för att med resultatet från analysen genomföra tryck- och temperaturberäkning. UÖA-P2 valdes då den innehåller granater. Detta prov lämpar sig av flera anledningar *inte* till att utföra tryck och temperaturberäkningar på: dels innehåller bergarten ingen biotit, Mg/Fe-motsvarigheten till granaten vilket innebär att det inte går att använda GARB-metoden (för mer info se Ferry and Spear, 1978) dels är förmodligen granaterna xenokryster, d.v.s. att dom egentligen inte tillhör den här magman (vilket är en ovanlig förekomst enligt Baxter et al, 2013), och dels är pegmatiten inte med i metamorfosen som skapat den omgivande bergarten, vilket är uppenbart då den inte visar samma deformationstextur. Av dessa anledningar analyserades provet i mån av tid. Det intressanta med provet var att ta reda på vilken typ av granat det innehöll.

AX och THERMOCALC

Tim Holland och Roger Powel (1988) har tagit fram både program och dataset för att bland annat kunna genomföra geotermobarometriska uträkningar och fas diagram (Holland och Powell, 1998). Fältspat är en fast lösning, det vill säga, består av olika ändkomponenter. Det sker ett utbyte av grundämnen mellan dessa komponenter beroende på rådande tryck och temperatur. Mäter man därför de olika sammansättningarna hos mineral inom samma fasta lösning kan man utifrån detta beräkna trycket och temperaturen som dessa mineral bildades vid, genom att jämföra med experimentellt känd data (Holland and Powell, 1994).

Det första programmet, AX_2, tar fram aktiviteter givet tryck och temperatur som föreslås av programmet (550 °C och 6 kbar). Aktivitet avgör ifall en reaktion, som resulterar i en lägre energifas hos mineralet, kommer att ske (Nesse, 2014). Dessa aktiviteter används av THERMOCALC för att fastställa vilka stabila reaktioner som kan ske och var dessa plottar i ett P-T-diagram. Där det olika reaktionerna korsar varandra kan trycket och temperaturen för formationen av det analyserade provet läsas av. Hela denna process görs av THERMOCALC som i slutet av en körning presenterar värden för tryck och en temperatur, samt deras standardavvikelse och hur troligt värdet uppskattas vara. Dessa tryck- och temperaturvärden användes då en ny körning av AX_2 genomförs, detta för att under det ändrade förutsättningarna beräkna nya aktiviteter. Processen med THERMOCALC upprepas och nya tryck och temperaturer genereras vilka åter användes av AX_2. Detta upprepas tills värdena inte längre ändras.

Resultatet från EMPA-analysen sorterades så att beräkningarna i AX_2 och THERMOCALC inkluderar ett analysvärde vardera från varje mineral. Detta innebar att alla analyser på kanten av ett mineral gjordes till en ax-fil (ax-ab1rim.txt). Det två andra filerna består av analysvärden från mitten av mineralen och heter följaktligen ax-ab1core.txt samt ax-ab1.txt. Efter att dessa ax-filer körts i AX_2 programmet sparades det resulterande filerna (ax-namn_tcd.txt) som tc-nammax.txt i vilka mineralen sillimanit och andalusit lades till. Dessa kördes i THERMOCALC med kommandot för ”average P-T calculations” med närvaro av vatten.

Resultat

Berggrundskartering

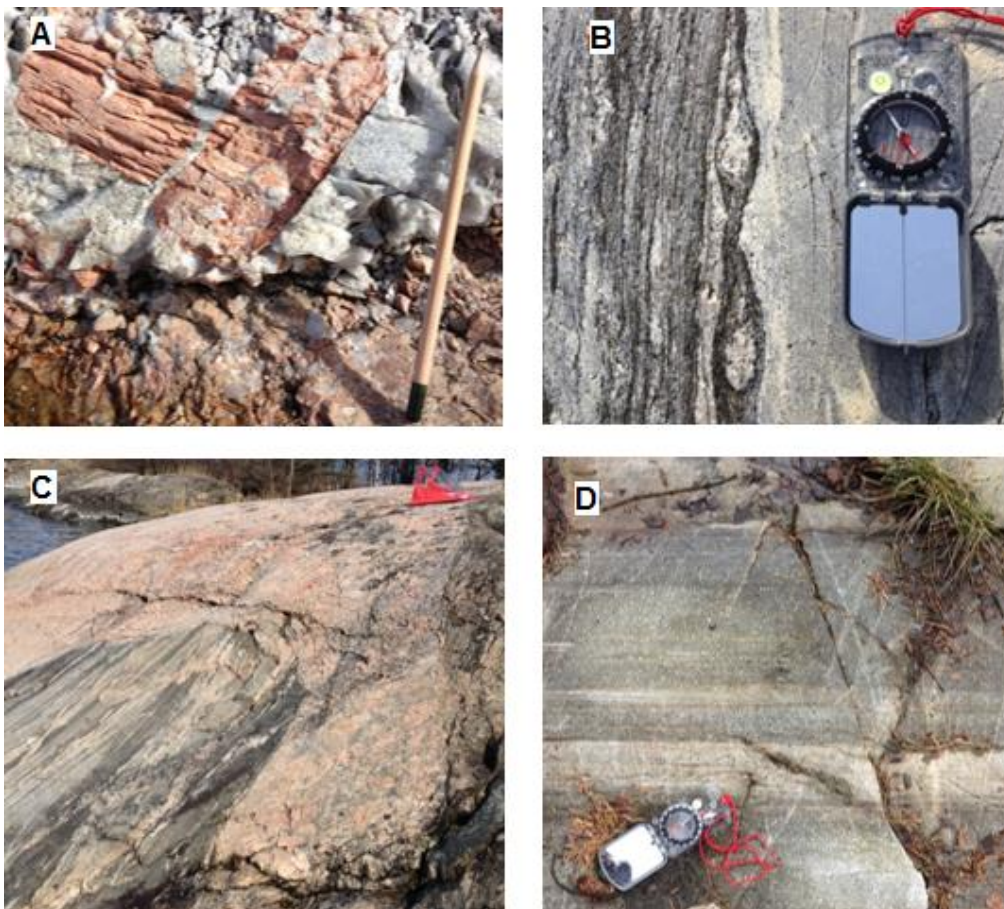
Området som undersöktes, Kyrkviken, delas med fördel upp i två sektioner. Dessa skiljs åt av en skjuvzon som går tvärs igenom viken. Här nedan följer en beskrivning av området utifrån de observationer som gjordes på plats samt av den vidare analys som gjordes på Stockholms universitet av de insamlade proverna.

Västra delen av Kyrkviken: Skiffer-gnejs-migmatit och mylonit

Den västra sidan av viken består av en berggrund som omfattar hela spektrumet från skiffer till gnejs till migmatit. Migmatit beskrivs av Winter (2014) som en ”mixed rock” och avser den textur som bildas när metamorfosen resulterat i uppsmältning av berggrunden (Andréasson, 2011). Skiffern är till stor del täckt av det jordlager som ansamlats i sänkan och

vert efter man kommer upp på bergskammen övergår det till en mer "gnejsig" bergart för att längst ut på Näsuddens nordligaste spets kunna beskrivas som migmatit. Migmatiten har närmast en stromatisk, eller lagrad struktur (figur 2C) (Winter 2014). Övergången mellan skiffer till gnejs är inte tydlig, då mycket av berget som karterades är täckt av vegetation som skog och mossa. Uppdelningen mellan de båda bergarterna försvåras då det inte finns en tydlig regel som separerar texturerna. Ett sätt att skilja gnejs från skiffer är dock att uppskatta när granulära mineral dominerar mängden glimmer mineral (Philpotts et al., 2009). Berggrunden för det här området tycks härstamma från gråvackor som möjligtvis varvats med ljusare vulkaniska avlagringar, vilket framförallt är tydligt uppe på bergskammen. Av den tidiga sedimentära berggrunden är det bara lokala delar längst ut mot kusten som nått tillräckliga tryck- temperaturförhållande för att smälta och bilda migmatit. Gränsen mellan gnejs och migmatit är inte heller entydigt tolkad i fält, men området där mest migmatit tycks förekomma är markerat som "migmatit" på bergartskartan.

Det finns även sektioner på bergskammen där det går att se ett mylonit-band i gnejsen (figur 2D). Myloniter bildas vanligen i deformationszoner och kan vara lätta att förväxla med ljusa vulkaniska bergarter (Andréasson, 2006). Det finns även rikligt med pegmatiter längst ut på udden som radierar ut från ett område utanför kusten. Längre in på bergskammen finns det större granitiska intrusioner som skiljer sig från pegmatiterna närmare kusten då dessa uppträder med en mer homogen komposition samt har en mindre kristallstorlek.



Figur 2. A) Stora kalifältspatkristaller i pegmatiten. B) Små boudinage strukturer i gnejsen. C) En pegmatit som skär igenom migmatiten, weatherwiter som skala. D) Myloniten, kompassen ligger med spegeln åt norr.

Skjuvzonen

Uppdelningen av dessa två litologier görs tydlig då det i Kyrkvikens sänka går en skjuvzon. Denna skjuvzon brukar i litteraturen kallas för "Utö Shear Zone" (UZS). Effekterna av denna skjuvzon går att se på de mindre och mer lokala strukturerna som kinkveck (se figur 3). På grund av jordlagret i sänkan kan dessa strukturer bara ses på klipphällarna vid kyrkan. På en av hällarna närmast färjan går det att urskilja graderad textur hos den omvandlade gråvackan, med en strykning ca 40 grader i nordöstlig riktning.



Figur 3. Kinkveck i skjuvzonen vid kyrkan, den orange linsen visar i vilken riktning deformationen skett.

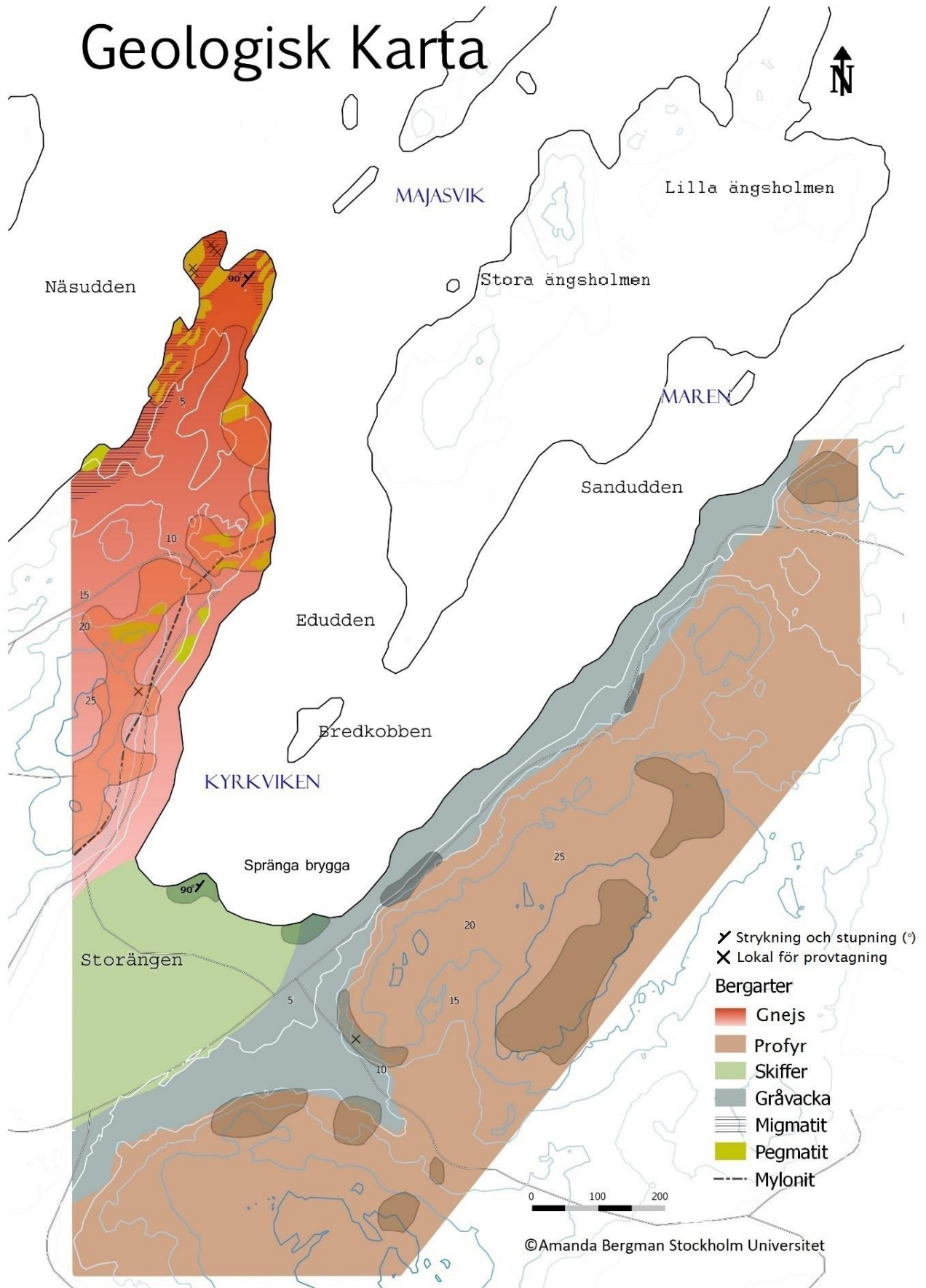
Östra delen av Kyrkviken: Metagråvackor och kvarts porfyr

Östra delen av Kyrkviken beskrivs av Talbot (2008) främst består av kvarts porfyr och lagrade gråvackor. Porfyren är klassificerad efter sin textur och går att tilldela den bergart som breder ut sig tämligen oförändrad över större delen av bergskammen. De större kornen, fenokrysterna, består av kvarts (se figur 4), de mindre kornen är biotit, kvarts, plagioklas och kalifältpat vilket ger en ryolitisk sammansättning (Winter, 2014). Metagråvackorna visar inte någon tydlig lagring i fältt, men som prov UÖAB-8 tydliggör finns det en lagring som syns tydligare på fräscha ytor.



Figur 4. Kvarts porfyr, de röda pilarna pekar på en del av kvarts-fenokrysterna.

Geologisk Karta

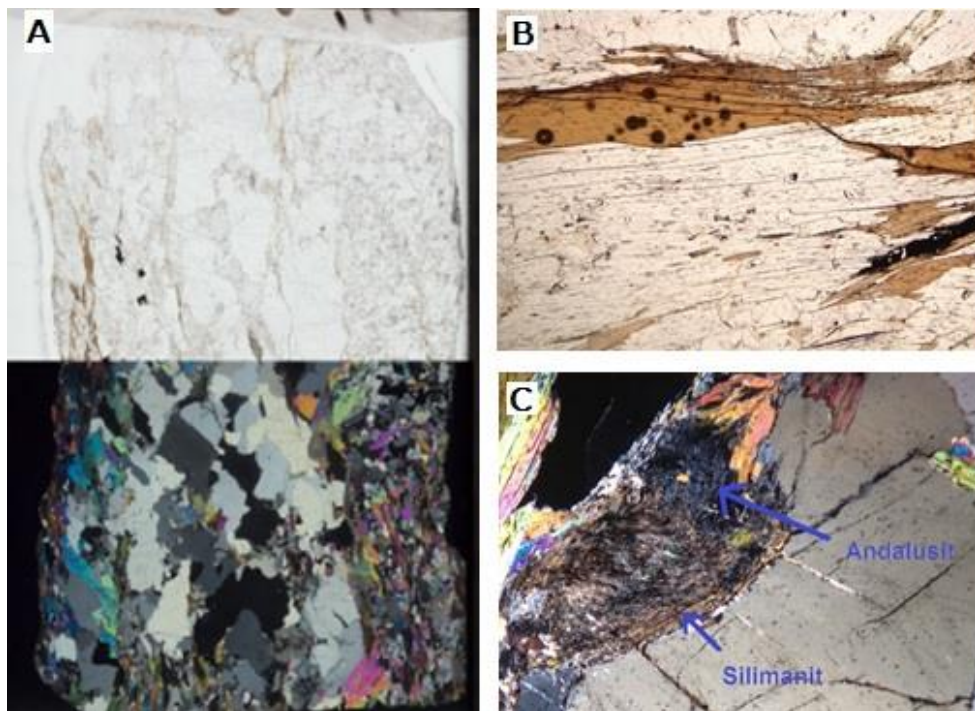


Figur 5. Berggrundskarta baserat på kartering runt Kyrkviken. Gnejsen visas med en starkare färg närmare förekomsten av migmatit och ljusare närmare skiffern. Migmatiten symboliseras med horisontella linjer som överbeteckning på gnejsen. Det mörkare skuggorna är lokaler där det var lättare att se litologin och det är utifrån studier av dessa platser som resten av kartan har extrapolerats.

Petrografisk Analys

UÖAB-1, Migmatit: Kvarts, biotit, muskovit, klorit, fältspat (plagioklas och kalifältspat), flusspat, sillimanit, andalusit och opaka mineral.

Från norra Näsudden. Området är av Talbot (2007) markerat som en migmatitisk berggrund men har av Skelton under ett besök till området identifierats som gnejs. Det går att enas om att migmatiten som förekommer inom det här området är lokal, men inom hela området där migmatiten förekommer har markerats som "migmatit" på bergartskartan. Provet togs ut från ett melanosom- band i veckningen då detta parti såg ut att innehålla mycket glimmermineral och har därmed stor chans att även innehålla sillimanit. Med lupp kan större och vanliga korn som kvarts och biotit identifieras.



Figur 6, UÖAB-1 A) Tunnslipet med planpolariserat ljus översta halvan, och korspolariserat ljus i undre halvan.

B) visar pleokroistiska halos i biotiten, omgivande mineral är muskovit. C) Fibrolit och andalusit omgivet av muskovit, övre vänstra hörn, och kvarts, till höger.

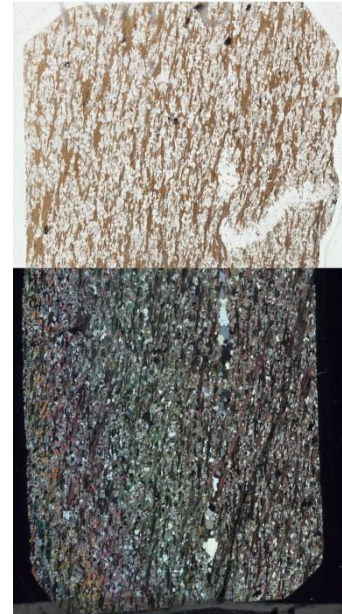
Biotiten har så kallade pleokroistiska halos vilket beror på inneslutningar av radioaktiva mineral som genomgår alfasönderfall (Nesse, 2014). Flusspat är ett fluor-mineral, det är isotropiskt, har en relief lägre än kvarts och kan ge en lila färg i påfallande ljus. Enligt Nesse (2014) brukar ortoklas visa ett tydligare tecken på vittring och kan ibland misstas för kvarts. I tunnslipet syns två olika fältspater, den men mest vittring och otydligast bandning antas vara kalifältspat, möjligen ortoklas. Fältspaten visar på sina ställen en myrmekitisk textur av kvarts. Sillimanit går att hitta i väldigt små mineralkluster i muskovit. I slipet syns även större fibrösa kluster, stora nog att se på slipet utan mikroskop. En av dessa ser ut att vara kloritomvandling av ett tidigare mineral. Ett annat ser ut att bestå till mesta del av fibrolit, vilket är en form av sillimanit (Nesse, 2014). I fibroliten syns det som senare uppmärksammades som andalusit.

UÖAB-1A, Mafisk intrusion: Biotit, kvarts, opaka mineral, epidot, muskovit och klorit

Från norra Näsudden. Detta prov togs ur ett mörkare band i gnejsen. Bandet tros vara en syn-tektonisk intrusion i berggrunden då foliationen följer den omgivande veckningen. Det mineral som går att identifiera med lupp är biotit.

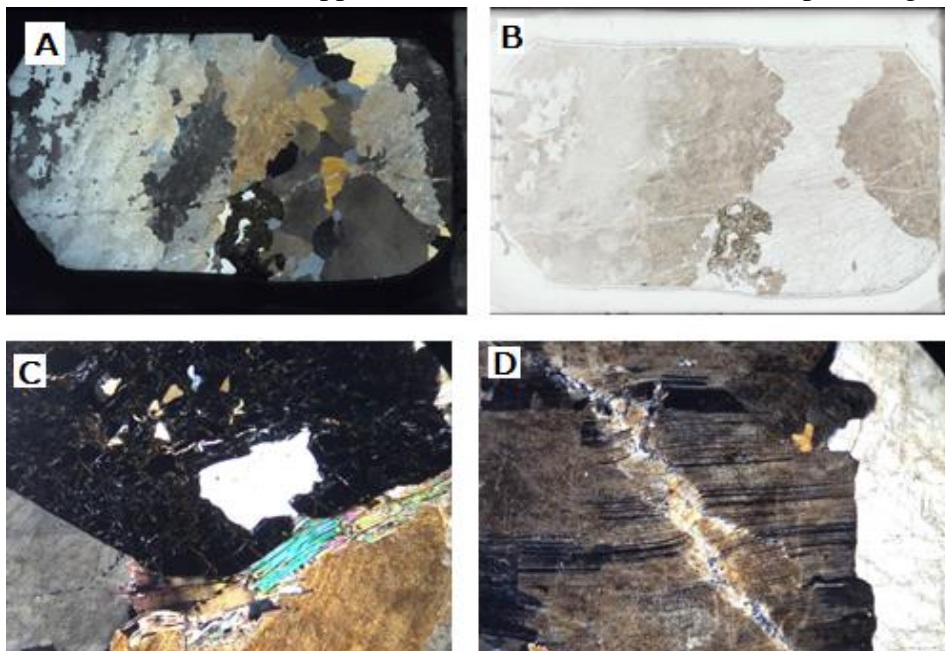
Tunnslipet innehåller främst biotit och kvarts. Biotiten har en tydlig foliation i en grovkornig matrix av kvarts och retrograd muskovit. Även denna biotit har pleokroistiska halos. Slipet har även en spricka som fyllts med kvarts som löper först med foliationen och sedan bryter tvärs igenom den vilket medför att biotiten runtomkring böjer av i kvartsgångens riktning.

Figur 7, UÖAB-1A. Översta halvan är i planpolariserat ljus och den undre i kors polariserat ljus. Foliationen syns tydligt.



UÖAB-P, Pegmatit: Granat, kvarts, fältspat (plagioklas och kalifältspat), muskovit och sericit.

En pegmatit från norra Näsudden. Pegmatiterna i Kyrkviken skiljer sig nämnvärt från varandra då de som befinner sig längre ut mot kusten innehåller mindre muskovit än de som går att hitta inåt ön. De ute vid kusten har även större kristaller. UÖAB-P togs från en pegmatit längst ut mot havet och ser i lupp inte ut att innehålla någon muskovit alls. Det som med lätthet kan identifieras utan lupp är stora kristallerna av kvarts, fältspat och granat.

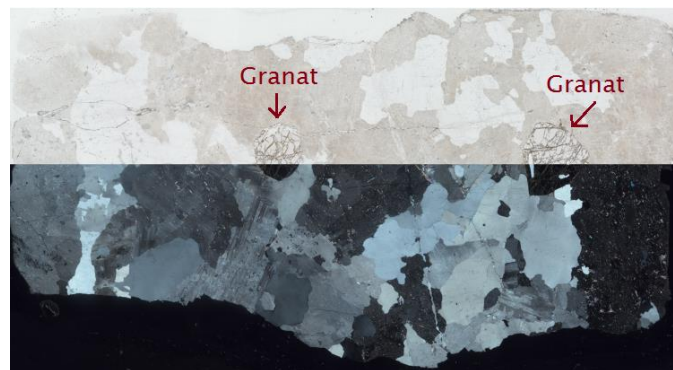


Figur 8, UÖAB-P. A) Tunnslipet i kors polariserat ljus, den ojämna interferensfärgen hos kvartskristallerna syns tydligt. B) Tunnslipet i plan polariserat ljus, granaten syns tydligt i nedre delen av bilden. C) Granaten och tryckskuggor av muskovit i kosrpolariserat ljus. D) Kink-struktur i fältspaten, kors polariserat ljus.

Det här provet har förmodligen inte slipats tillräckligt och på grund av dess tjocklek har framför allt kvartskristallerna fått fel interferensfärg. Det går ändå att urskilja en del mineral och strukturer. Runt granaten syns tryckskuggor där det går att hitta en liten mängd muskovit (se figur 8 C). Det finns även små muskovitkornen utsprida framför allt i plagioklasen. Detta kan på ställen då muskovitkorna är väldigt små tolkas som sericitation men på andra ställen blir texturen närmas poikilitisk. Granaten är utan tvekan poikilitisk då den innehåller kvartsinneslutningar, som även dessa får fel färg i korspolariserat ljus. I fältspaten syns en kink-struktur (se figur 8 D) som kan ha bildats i samma händelse som gav upphov till tryckskuggorna.

UÖAB-P2, Pegmatit: Granat, kvarts, fältspat (plagioklas och kalifältspat), muskovit samt sericit.

Det här provet är från samma pegmatit som det föregående beskrivna provet. Även detta prov ser ut att innehålla granater, kvarts och fältspats.



Figur 9. UÖAB-P2, övre i plan polariserat ljus och under i kors polariserat ljus. Två granater syns på bilden.

Detta slip har tillverkats på Stockholms universitet av Carola Lindstöm. Detta prov innehåller samma mineral som UÖAB-P. Det här provet är väldigt likt UÖAB-P och skiljer sig endast utseendemässigt då detta prov har slipats till rätt tjocklek.

UÖAB-3, Gnejs: Kvarts, muskovit, biotit, klorit och fältspat (plagioklas och kalifältspat) samt sericit.

Från norra Näsudden. Detta prov är taget ur ett band av berghällen som ser ut att vara en blandning av gnejs och pegmatit. Mineralen har en foliation som löper längs med veckningen av berghällen. Mineralen som går att identifiera med och utan lupp är kvarts, biotit, muskovit och fältspat.



Figur 10. UÖAB-3, övre halvan i plan polariserat ljus och under i kors polariserat ljus.

I mikroskopet avslöjas att merparten av glimmermineralen är muskovit och inte biotit som den mörkare färgen på handstufven indikerar. Kvartsen visar undulös utsläckning. Mineralerna i detta prov visar tydliga tecken på en retrograd förändring, då de flesta glimmermineralen ersätts av klorit och fältspaten av sericit. Kloriten har halos vilket endast observerats på biotiten i föregående slip.

UÖAB-6, Mylonit: Kvarts, biotit, amfiboler (hornbländ), sericiterad fältspat (plaioklas), muskovit, samt apatit.

Från gnejs-zonen på Näsudden. Provet är taget från ett område som på Talbots karta från 2008 har markerats som en mylonit. Detta prov är väldigt mörkt och finkornigt och det går att se en tydlig foliation. Det syns även två band av kvarts längst med foliationen. Myloniter bildas då berggrunden utsätts för kraftig plastisk deformation, är ursprungsbergarten granit händer det ofta att linser av kvarts bildas (Andréasson, 2011).

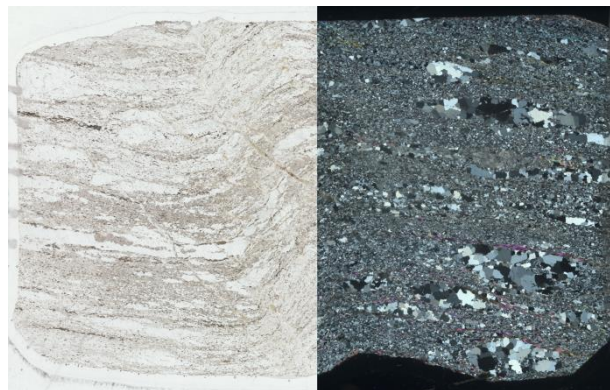
I mikroskopet syns en tydlig foliation av biotiten och amfibolerna. Slipet har en granoblastisk textur, med 120-graders vinklar mellan kornens hörn. Amfibolerna har av sin gröna färg identifierats som hornblände. Fältspat är väldigt sericiterad. Även detta provs biotiter har halos. Apatiten kan mistas för kvarts men den har en noterbart högre relief och förekommer ofta som mindre korn.

Figur 11. UÖAB-6, övre i plan polariserat ljus och undre i kors polariserat ljus.



UÖAB-8 Gråvacka: Kvarts, biotit, muskovit, klorit, fältspat (mikroklin), sericit omvandlade mineral och opaka mineral.

Från östra sidan Kyrkviken. På kartan av Talbot är detta område markerat som lagrade gråvackor. Berghällen det här provet togs ifrån saknade dock tydlig lagring. Provet som togs härifrån är ljus till färgen, finkornigt och har en kink-struktur som blev synlig först när sten sågats itu.



Figur 10. UÖAB-8, vänster i plan polariserat ljus och höger i kors polariserat ljus.

Kvartsen, muskoviten och biotiten visar en tydlig foliation i mikroskopet och på sina ställen finns tjockare aggregat av kvarts mellan lagren. En del biotiter har kloritiserats, vilket visar på en retrograd process i vilken opaka mineral bildas för att balansera reaktionen. Fältspaten förekommer ofta i mindre korn tillsammans med kvarts. Fältspaten har tvillingbildning i korsande plan, (se figur 11) vilket är typiskt för mikroclin.



Figur 11. Fältspat med tvillingbildning i korsande plan vilket identifierar mineralet som mikroclin. Bilden är tagen i korspolariserat ljus.

EMPA resultat

UÖAB-P: I detta prov analyserades fyra mineral: granat (Grt), kalifältspat (Kfs), plagioklas (Pl) och muskovit (Ms). Positionerna för var analyserna gjordes på mineralen finns redovisat hos de mineralen som var stora nog att en sådan uppdelning tycktes lämplig. Resultatet hos granaten visar på höga järnvärden vilket indikerar att granaten är en almandin. Granaten har enligt dessa resultat också en något avtagande mängd Mn på kanten av kristallen jämfört med proverna tagna i dess kärna. Detta föreslår att granaten har en zonerings (Nesse, 2014). Fullständig analys finns tillgå i Appendix 1-EMPA.

Total	Prov-mineral-position	SiO ₂	Al ₂ O ₃	FeO	MnO	MgO	Cr ₂ O ₃	CaO
99.82	AB-P-Grt-core	35.920	21.09	31.620	9.460	1.510	0.000	0.058
100.01	AB-P-Grt-core	35.800	21.24	31.960	9.470	1.309	0.004	0.114
100.03	AB-P-Grt-rim	36.490	21.10	31.920	8.780	1.311	0.034	0.285

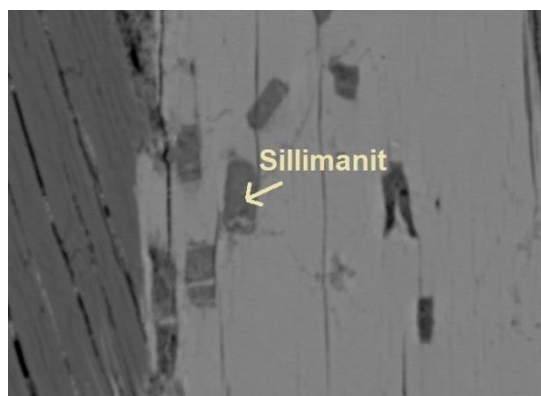
Tabell 1. Resultat av elektronmikrosond analys på prov UÖAB-P2 som med sina höga järn värden för granat analyserna (Grt) visar på det är mineralet almandin.

UÖAB-1: Analyserna med EMPA gjordes på fyra mineral: plagioklas (Pl), kalifältspat (Kfs), muskovit (Mu) och biotit (Bi). Även dessa analyserades på tre ställen, två i mitten av mineralet och en på kanten, förutsatt att mineralet var stort nog att detta kunde genomföras. Kalifältspaten som analyserades var så liten att den bara gav ett bra analysvärde. Samtliga analyser finns redovisat i appendix 1.

Prov	Mineral	SiO2	TiO2	Al2O3	Cr2O3	Fe2O3	FeO	MnO	MgO	CaO	Na2O	K2O
ab1	kfs	65,21	0,002	18,29	0	0	0,015	0,062	0,028	0,021	0,085	15,97
	pl	64,99	0	21,76	0	0	0,005	0	0	2,78	10,29	0,117
	mu	46,15	0,364	35,76	0,019	0	0,835	0	0,619	0,001	0,747	9,97
	bi	35,19	1,66	20,34	0,07	0	20,05	0,164	8,33	0	0,307	8,9
ab1core	kfs	65,21	0,002	18,29	0	0	0,015	0,062	0,028	0,021	0,085	15,97
	pl	64,48	0,037	21,83	0	0	0,015	0	0,029	2,56	10,36	0,149
	mu	45,36	0,326	35,74	0,012	0	0,894	0	0,55	0,001	0,814	9,77
	bi	35,48	1,88	20,45	0,002	0	20,13	0,161	8,24	0	0,189	8,75
ab1rim	kfs	65,21	0,002	18,29	0	0	0,015	0,062	0,028	0,021	0,085	15,97
	pl	65,17	0	21,76	0	0	0	0	0	2,31	10,45	0,118
	mu	45,8	0,379	35,21	0	0	0,899	0,018	0,489	0	0,844	9,89
	bi	35,32	1,87	20,75	0,072	0	20,25	0,131	8,17	0	0,473	8,9

Tabell 2. Resultat av EMPA analysen av prov UÖAB-1. Kalifältspaten kristaller var så små att analysen av detta mineral bara resulterade i ett användbart värde.

Det som också säkerställdes med EMPA analysen var närvaron av aluminiumsilikater. På bilden nedan, en backscattered electron image (BSE), visas aluminiumsilikater som med sin kristallform och lägre atomvikt, vilket ger den en mörkare färg på bilden, har identifierats som sillimanit.



Figur 12. Aluminiumsilikater analyserade av EMPA, dessa små kristaller har identifierats som mineralet sillimanit, omgivande mineralet är muskovit och till vänster syns biotit.

Tryck och Temperatur av THERMOCALC

Tryck och temperatur har beräknats på prov UÖAB-1 med hjälp av programmen AX_2 (se appendix 2) och THERMOCALC utifrån resultat erhållna av elektronmikrosond-analys (EMPA) på Uppsala universitet. De första beräkningarna utfördes då enda fasen som lades till var sillimanit. Det erhållna värdena blev 766, 723 och 767 grader Celcius med respektive tryck på 6,8, 5,1 och 7,4 kbar. Till dessa höga värden tillkom höga sd-värden (standard avvikelser). Sigfit-värdet indikerar hur väl de beräknade tryck och temperaturerna stämmer med in-datan. Sd(fit) är ett gränsvärde genererat av programmet, om sigfit värdet hamnar inom detta gränsvärde är P-T resultatet uppskattat att vara till 95 % tillförlitligt.

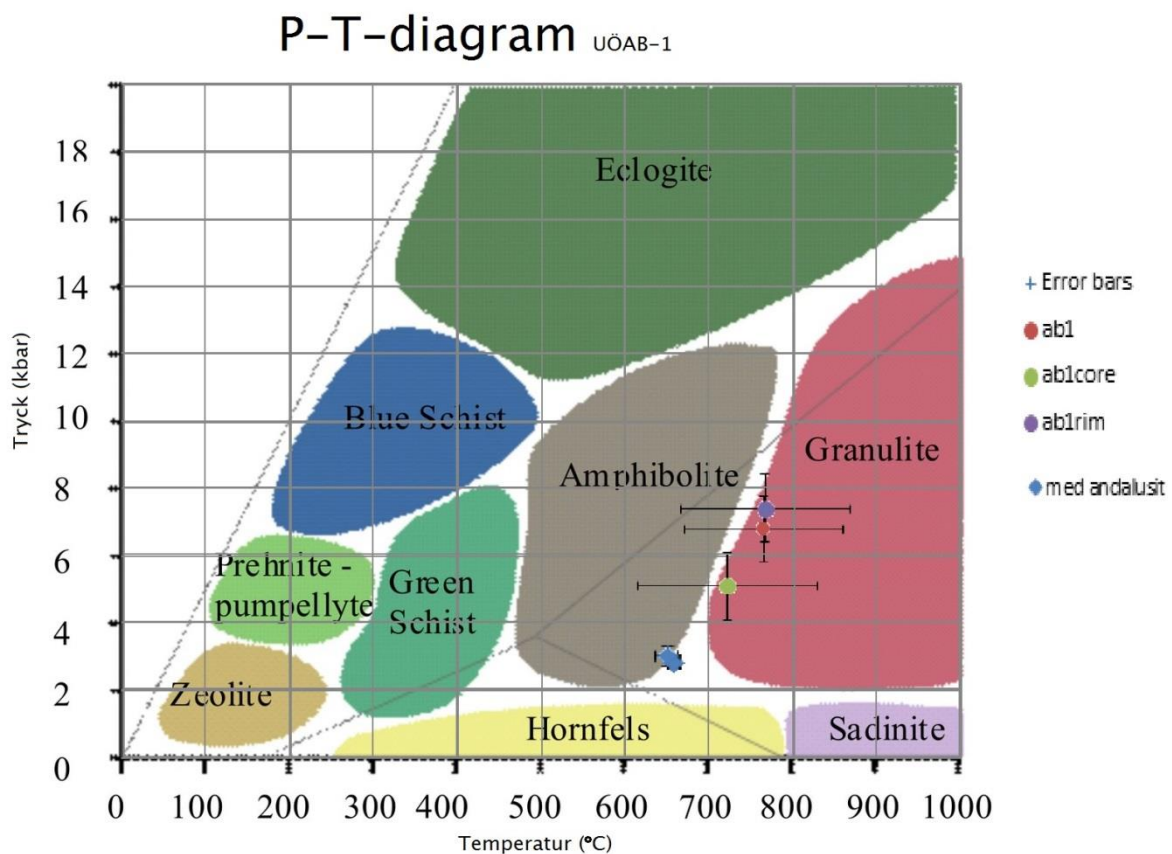
Den första omgången av uträkningar gav P-T-värden som anses orimliga för metamorfos av detta område då dessa höga temperaturer bland annat inte ger den migmatitiska texturen som observerats i fält. Därför gjordes en ny bedömning av tunnslipet samt en noggrannare analys av litteraturen. Det som då blev intressant var att den fibrösa sillimaniten, fibrolit, förmodligen har vuxit sig fram som en krans runt en äldre andalusit kristall (Talbot, 2008). Fasen andalusit lades till i THERMOCALC och resultatet hamnade på många sätt inom

rimligare gränser med ett tryck av 2.8-3 kbar samt en temperatur på 658-650 grader Celsius. Alla filerna genererade av programmet finns redovisade i appendix 3.

	Mineral	Temp (°C)	sd	P (kbar)	sd	sigfit	For 95% confidence
ab1	pl, k-sp, bi, mu, sill	766	94	6.8	3.8	0.77	< 1.61
ab1core	pl, k-sp, bi, mu, sill	723	107	5.1	4.2	0.84	< 1.61
ab1rim	pl, k-sp, bi, mu, sill	767	101	7.4	4.2	1.41	< 1.61
ab1	pl, k-sp, bi, mu, sill, and	658	8	2.8	0.2	0.94	< 1.54
ab1core	pl, k-sp, bi, mu, sill, and	658	8	2.8	0.2	0.82	< 1.54
ab1rim	pl, k-sp, bi, mu, sill, and	650	13	3	0.3	1.64	< 1.54

Tabell 3. THERMOCALC uträkningar av tryck och temperatur under metamorfos för prov UÖAB-1. Första tre beräkningar gjordes utan att faser andalusit lades till. Det nedre tre beräkningar gjordes med faser andalusit, vilket genererade lägre värden för tryck- och temperaturförhållandet och lägre standard avvikelser.

Dessa resultat plottades på ett diagram för metamorfa facies, vilket tydliggör skillnaderna mellan de olika uträkningarna samt deras felmarginaler. Som diagrammet visar ligger proverna med andalusit i lägre amfibolit facies och inom stabilitetsfältet för sillimanit. Proverna utan andalusit har en större spridning och hamnar i granulit facies.



Figur 13. Tryck och temperatur både med och utan andalusit för prov UÖAB-1.

Diskussion

Denna studie har bland annat visat att pegmatiten som går att finna ute på Näsudden är granatbärande, vilket är sällsynt i magmatiska bergarter så vida det inte förekommer som xenocryster (Baxter et al. 2013). Till detta bör dock nämnas att Utö är känd för att vara ett område präglad av säregna mineralförekomster. Enligt resultatet från EMPA analysen har granaten ett högt järninnehåll, och går därmed att identifiera som almandin (Nesse, 2014). Metamorfos av pelitiska sedimentära bergarter är en av bildningsmiljöerna för Fe-rika granater (Baxter et al. 2013), dessa skulle sedan kunnat hamna i magman utan att smälta och går nu att finna i pegmatiterna på Näsudden.

Då det karterade området innehöll en migmatitisk bergart föll det sig naturligt att försöka hitta sillimanit i ett glimmerrikt prov, enligt reaktion $\text{Mu} + \text{Qtz} = \text{Kfs} + \text{Sill}$ (Barrientos, 2011), för att utföra en geotermometrisk beräkning av tryck- och temperaturförhållandet under metamorfosen. Det erhållna värdena blev sedan höga nog att hamna i granulit facies, kring 700 °C och mellan 5.1 till 7.4 kbar. Detta stämmer inte överens med den mineralsammansättning som identifierats i tunnslipsanalysen där närvaron av muskovit fastslåts, ett mineral som inte är typiskt för granulit facies (Nesse, 2014). Till detta bör det också tilläggas att om temperaturen låg på över 700 grader under metamorfosen skulle smältan som nu genererat en migmatitisk textur ha nått en tillräckligt hög smältfraktion för lämna berggrunden (Winter, 2014).

Därmed uppstod idén att andra viktiga faser kunde vara närvarande i provet. I tidigare arbeten, redovisade i Talbot artikel (2008), har det påvisats att andalusitkristaller kantade med fibrolit finns vid den lokal som prov UÖAB-1 togs ifrån. Talbots identifiering av andalusiten skedde med petrografiskt mikroskop, och bilden som ligger till grund för uttalandet stämmer väl överens med liknande observationer gjorda på provet UÖAB-1 (se figur 6C).

Resultaten av THERMOCALC-uträkningarna ger en större spridning av tryck och temperatur samt större avvikelser då beräkningarna görs utan fasen andalusit. Detta kan jämföras med beräkningarna då andalusit finns med, då två av tre analyserade värden ger ett tryck av 2.8 (± 0.2) kbar samt en temperatur på 658 (± 8) grader Celsius. Den tredje uträkningen gjordes på mineralkornens kanter, detta värde har något avvikande tryck och temperatur men också en sämre säkerhet på värdenas signifikans. Om detta tryck och temperatur befunnit sig inom gränsen för 95 % säkerhet skulle denna avvikelse kunna bero på variationer i ett eller flera av mineralens sammansättning. Mer troligt är det dock att elektron-analysen på något eller flera av mineralen på kristallens kanter också analyserade intilliggande eller underliggande mineral.

Då värdena plottas i ett P-T-diagram blir det ännu tydligare vilka värden som har lägst standardavvikelser och samtidigt bra sigfit-värden: nämligen de med andalusit. Mindre standardavvikelser och bra sigfit-värden tolkas positivt då in-datan passar inom ett mindre tryck- och temperaturintervall. Inom ett större intervall, som för beräkningen utan andalusit, går det att passa in olika tryck och temperaturer och ändå få ett bra sigfit-värde.

Det är därför rimligt att fastslå att provet innehåller andalusit och att tryck- och temperaturförhållandena under metamorfosen låg på 2.8 kbar och 658 grader. Detta placerar metamorfosen i amfibolit facies, vilket producerar metamorfa bergarter rika på plagioklas och hornblände och vars protolit antingen är en mafisk magma eller gråvackor (Winter, 2014). Att protoliten för gnejsen ute på Näsudden är gråvackor har observerats och fastslagits i fält.

Slutsats

Tryck- och temperaturförhållandet under metamorfosen av den andalusit- och sillimanitbärande migmatiten var 2.8 (± 0.2) kbar och 658 (± 8) grader Celsius, är placerat i lägre amfibolitfacies och inom stabilitetsfältet för sillimanit.

Tack

Personalen på Utö Vårdshus för tillhandahållandet av cyklar under vistelsen på Utö.

Richard Gyllencreutz för introduktion till programmet QGIS.

Dan Zetterberg för bra handledning i såglabbet.

Jarek Mika vid Uppsala universitet för handledandet av microsond-analysen.

Handlarna Alasdair Skelton och Joakim Mansfeld för hjälp under processen både på Utö och på Stockholms Universitet.

Referenser

Andréasson P., 2011: *Geobiosfären en introduction*. Studentlitteratur AB, Lund

Allen, R.L., Lundström, I., Ripa, M., Simeonov, A. & Christofferson, H., 1996: *Facies analysis of a 1.9 Ga continental margin, back-arc, felsic, caldera province with diverse Zn-Pb-Ag-(Cu-Au) sulfide and Fe oxide deposits, Bergslagen region, Sweden*. *Economic Geology* 91, 979–1008.

Barrientos N., 2011: *Determination of metamorphic conditions in metapelites on Stora Persholmen, Ne Utö, with EMPA analysis*. Unpubl. Batchelor thesis. Department of Geological Sciences, Stockholm University.

Baxter et al. 2013: *Garnet: Common Mineral, Uncommonly Useful*. *Elements*, Vol 9, pp.415-419

Lundström, I., Allen, R.L., Persson, P.-O. & Ripa, M., 1998: *Stratigraphies and depositional ages of Svecofennian, Palaeoproterozoic metavolcanic rocks in E. Svealand and Bergslagen, south central Sweden*. *GFF* 120, 315–320.

Lundström, I. & Koyi, H., 2003: *Vulkanön som blev ett fritidsparadis – några glimtar från Utös allra tidigaste historia*. *Geologiskt forum* 37, 4–13

Nesse W. D., 2012: *Introduction to Mineralogy*, Oxford University Press, 2nd edition

Philpotts A. R. and Ague J. J., 2009: *Principles of Igneous and Metamorphic Petrology*, 2nd edition, Cambridge University Press

Holland T. J. B. and Powell R., 1994: *Optimal geothermometry and geobarometry*, *American Mineralogist*, Vol. 79, 120-133

Holland T. J. B. and Powell R., 1998: *An internally consistent thermodynamic data set for phases of petrological interest*. *Journal of Metamorphic Geology*, Volume 16, Number 3, 1998, 309–343

Reed S. J. B., 2005: *Electron Microprobe Analysis and Scanning Electron Microscopy in Geology*, Cambridge University Press, kap 2 Electron-specimen interactions pp. 7-20

Talbot C. J., 2008: *Palaeoproterozoic crustal building in NE Utö, southern Svecofennides, Sweden*, *GFF*, 130:2, 49-70

Winter J. D., 2014: *Principles of Igneous and Metamorphic Petrology*, 2nd edition, Pearson New International Edition,

Appendix 1

EMPA

Na2O	SiO2	Al2O3	MgO	F	MnO	TiO2	K2O	CaO	Cl	NiO	FeO	Cr2O3	V2O3	SrO	BaO	CO2	Total	Prov (mineral)
10.180	65.230	21.520	0.003	0.000	0.015	0.000	0.218	2.280	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.041	0.000	99.487	AB-1 (Kfs)
0.085	65.210	18.290	0.028	0.000	0.062	0.002	15.970	0.021	0.000	0.000	0.015	0.000	0.000	0.000	0.178	0.000	99.861	AB-1 (Kfs)
10.290	64.990	21.760	0.000	0.000	0.000	0.000	0.117	2.780	0.000	0.000	0.005	0.000	0.000	0.000	0.038	0.000	99.980	AB-1 (pl)
0.747	46.150	35.760	0.619	0.000	0.000	0.364	9.970	0.001	0.000	0.027	0.895	0.019	0.047	0.000	0.427	0.000	94.966	AB-1 (mu)
0.307	35.190	20.340	8.330	0.000	0.164	1.660	8.900	0.000	0.001	0.000	20.050	0.070	0.010	0.000	0.197	0.000	95.217	AB-1 (bi)
10.360	64.480	21.830	0.029	0.000	0.000	0.037	0.149	2.560	0.000	0.000	0.015	0.000	0.000	0.000	0.081	0.000	99.542	AB-1-core (pl)
0.814	45.360	35.740	0.550	0.000	0.000	0.326	9.770	0.001	0.005	0.000	0.894	0.012	0.018	0.000	0.504	0.000	93.994	AB-1-core (mu)
0.189	35.480	20.450	8.240	0.000	0.161	1.880	8.750	0.000	0.008	0.000	20.130	0.002	0.000	0.000	0.137	0.000	95.428	AB-1-core (bi)
10.450	65.170	21.760	0.000	0.000	0.000	0.000	0.118	2.310	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.033	0.000	99.840	AB-1-rim (pl)
0.844	45.800	35.210	0.489	0.000	0.018	0.379	9.890	0.000	0.001	0.000	0.899	0.000	0.018	0.000	0.499	0.000	94.047	AB-1-rim (mu)
0.473	35.320	20.750	8.170	0.000	0.131	1.870	8.900	0.000	0.000	0.000	20.250	0.072	0.000	0.000	0.259	0.000	96.195	AB1-rim (bi)
																		Prov-mineral-
																		position
Na2O	SiO2	Al2O3	MgO	F	MnO	TiO2	K2O	CaO	Cl	NiO	FeO	Cr2O3	V2O3	SrO	BaO	CO2	Total	
0.001	35.920	21.090	1.510	0.000	9.460	0.056	0.008	0.058	0.000	0.095	31.620	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	99.818	AB-P-Grt-core
0.079	35.800	21.240	1.309	0.000	9.470	0.000	0.017	0.114	0.000	0.000	31.960	0.004	0.025	0.000	0.000	0.000	100.018	AB-P-Grt-core
0.048	36.490	21.100	1.311	0.000	8.780	0.030	0.004	0.285	0.000	0.014	31.920	0.034	0.019	0.000	0.000	0.000	100.033	AB-P-Grt-rim
0.210	64.410	17.890	0.009	0.000	0.015	0.000	16.250	0.010	0.000	0.000	0.084	0.000	0.000	0.000	0.019	0.000	98.896	AB-P-Kfs
0.173	64.290	18.010	0.000	0.000	0.000	0.000	16.330	0.000	0.000	0.000	0.011	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	98.815	AB-P-Kfs
10.890	67.270	19.460	0.016	0.000	0.000	0.007	0.156	0.403	0.000	0.000	0.069	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	98.270	AB-P-Pl-core
11.080	67.030	19.630	0.032	0.000	0.000	0.000	0.053	0.599	0.000	0.000	0.052	0.000	0.000	0.000	0.031	0.000	98.506	AB-P-Pl-core
11.070	66.710	20.010	0.048	0.000	0.064	0.002	0.137	0.896	0.000	0.000	0.050	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	98.987	AB-P-Pl-rim
0.497	45.000	35.710	0.365	0.000	0.056	0.000	10.360	0.026	0.002	0.018	1.067	0.000	0.000	0.000	0.054	0.000	93.154	AB-P-Ms
0.471	45.280	35.350	0.398	0.000	0.031	0.000	10.440	0.030	0.006	0.002	0.990	0.005	0.042	0.000	0.000	0.000	93.044	AB-P-Ms

Tabell 1. Mätdata från EMPA. Översta halvan av tabellen visar värden för prov UÖAB-1, rödmarkerat är det missvisande-k-sparvärdet som användes i alla uträkningar för provet UÖAB-1. Undre halvan av diagrammet visar mätdata för pegmatiten, granatens höga järnvärden är markerade i orange.

Appendix 2

AX_2

Infiler

Ax-ab1.txt

SiO2 TiO2 Al2O3 Cr2O3 Fe2O3 FeO MnO MgO CaO Na2O K2O

fsp /ksp

65.21 0.0022 18.2900 0.00 0.00 0.0149 0.0617 0.0281 0.0214 0.0851 15.9700

fsp /Pl

64.99 0.00 21.76 0.00 0.00 0.0053 0.00 0.00 2.78 10.29 0.1168

mu /core

46.15 0.3638 35.76 0.0193 0.00 0.835 0.00 0.6186 0.0014 0.747 9.97

bi /core

35.19 1.6599 20.34 0.0697 0.00 20.05 0.1635 8.33 0.00 0.3065 8.9

*

Ax-ab1core.txt

SiO2 TiO2 Al2O3 Cr2O3 Fe2O3 FeO MnO MgO CaO Na2O K2O

fsp /ksp

65.21 0.0022 18.29 0.00 0.00 0.0149 0.0617 0.0281 0.0214 0.0851 15.97

fsp /Pl core

64.48 0.0372 21.83 0.00 0.00 0.015 0.00 0.0292 2.56 10.36 0.1493

mu /core

45.36 0.3262 35.74 0.0121 0.00 0.8938 0.00 0.5496 0.0005 0.8138 9.77

bi /core

35.48 1.88 20.45 0.0023 0.00 20.13 0.161 8.24 0.00 0.1892 8.75

*

Ax-ab1rim.txt

SiO2 TiO2 Al2O3 Cr2O3 Fe2O3 FeO MnO MgO CaO Na2O K2O

fsp /ksp

65.21 0.0022 18.2900 0.00 0.00 0.0149 0.0617 0.0281 0.0214 0.0851 15.9700

fsp /pl rim

65.17 0.00 21.76 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 2.31 10.45 0.1175

mu /rim

45.8 0.3786 35.21 0.00 0.00 0.8993 0.0181 0.4889 0.00 0.8437 9.89

bi /rim

35.32 1.87 20.75 0.0719 0.00 20.25 0.1314 8.17 0.00 0.4728 8.9

*

Appendix 3 THERMOCALC

tc-ab1-o.txt

calcs use:

an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	san	ab	mu	cel	fcel	pa	phl	
a	0.990	0.870	0.750	0.0137	0.0104	0.313	0.0351	
sd(a)/a	0.05000	0.05000	0.10000	0.72993	0.96154	0.14159	0.39624	

	ann	east	q	H2O	and	sill
a	0.0570	0.0380	1.00	1.00	1.00	1.00
sd(a)/a	0.34057	0.38888	0		0	0

Independent set of reactions

- 1) sill = and
- 2) 3cel = 2san + phl + 3q + 2H2O
- 3) 3cel + 2and = 2mu + phl + 5q
- 4) 2cel + 2and = mu + east + 5q
- 5) 3fcel = 2san + ann + 3q + 2H2O
- 6) ab + cel + east = san + pa + phl

Calculations for the independent set of reactions

(for x(H2O) = 1.0)

	P(T)	sd(P)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)
1	3.7	0.22	-3.38	0.04	0.00308	0.189	0	0.000
2	4.4	3.05	71.05	1.04	-0.18550	5.314	9.501	2.228
3	11.4	7.51	-39.95	0.96	-0.05658	2.162	8.946	2.234
4	10.7	5.86	-17.46	0.91	-0.04464	1.880	5.023	1.514
5	3.5	3.89	44.72	1.41	-0.16047	5.442	10.813	2.906
6	10.4	22.84	-21.18	0.41	-0.00566	0.296	3.179	0.931

Average PT (for x(H2O) = 1.0)

Single end-member diagnostic information

avP, avT, sd's, cor, fit are result of doubling the uncertainty on ln a :

a ln a suspect if any are v different from lsq values.

e* are ln a residuals normalised to ln a uncertainties :

large absolute values, say >2.5, point to suspect info.

hat are the diagonal elements of the hat matrix :

large values, say >0.46, point to influential data.

For 95% confidence, fit (= sd(fit)) < 1.54

however a larger value may be OK - look at the diagnostics!

	avP	sd	avT	sd	cor	fit
lsq	2.8	0.2	658	8	0.108	0.94

	P	sd(P)	T	sd(T)	cor	fit	e*	hat
san	2.86	0.18	656	9	-0.018	0.91	0.29	0.12
ab	2.82	0.17	659	9	0.065	0.92	-0.26	0.04
mu	2.90	0.19	653	10	-0.162	0.85	-0.63	0.48
cel	2.82	0.17	658	8	0.107	0.81	1.09	0.00
fcel	2.83	0.17	658	8	0.108	0.92	0.43	0.00
pa	2.79	0.18	661	9	-0.036	0.86	0.75	0.32
phl	2.83	0.17	658	8	0.108	0.91	0.42	0.00
ann	2.83	0.17	658	8	0.108	0.94	-0.05	0.00
east	2.83	0.17	658	8	0.108	0.83	-0.91	0.00
q	2.83	0.17	658	8	0.108	0.94	0	0
H2O	2.83	0.17	658	8	0.108	0.94	0	0
and	2.83	0.17	658	8	0.108	0.94	0	0
sill	2.83	0.17	658	8	0.108	0.94	0	0

T = 658jC, sd = 8,

P = 2.8 kbars, sd = 0.2, cor = 0.108, sigfit = 0.94

tc-ab1core-o.txt

calcs use:

an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	san	ab	mu	cel	fcel	pa	phl
a	0.990	0.870	0.750	0.0100	0.00910	0.319	0.0335
sd(a)/a	0.05000	0.05000	0.10000	1.00000	1.09890	0.13913	0.40046

	ann	east	q	H2O	sill	and
a	0.0560	0.0370	1.00	1.00	1.00	1.00
sd(a)/a	0.34308	0.39138	0	0	0	0

Independent set of reactions

- 1) and = sill
- 2) 3cel = 2san + phl + 3q + 2H2O
- 3) 3cel + 2sill = 2mu + phl + 5q
- 4) 2cel + 2sill = mu + east + 5q
- 5) 3fcel + east = mu + 2cel + ann
- 6) ab + cel + east = san + pa + phl

Calculations for the independent set of reactions

(for x(H2O) = 1.0)

	P(T)	sd(P)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)
1	3.7	0.22	3.38	0.04	-0.00308	-0.189	0	0.000
2	3.3	4.14	71.05	1.04	-0.18550	5.314	10.399	3.028
3	7.6	8.68	-46.72	0.96	-0.05041	2.540	9.844	3.033
4	7.5	6.57	-24.22	0.91	-0.03847	2.258	5.626	2.040
5	2.8	69.07	-48.82	1.47	0.01308	0.410	5.015	3.892
6	2.9	28.37	-21.18	0.41	-0.00566	0.296	3.492	1.157

Average PT (for x(H2O) = 1.0)

Single end-member diagnostic information

avP, avT, sd's, cor, fit are result of doubling the uncertainty on ln a :

a ln a suspect if any are v different from lsq values.

e* are ln a residuals normalised to ln a uncertainties :

large absolute values, say >2.5, point to suspect info.

hat are the diagonal elements of the hat matrix :

large values, say >0.46, point to influential data.

For 95% confidence, fit (= sd(fit)) < 1.54

however a larger value may be OK - look at the diagnostics!

	avP	sd	avT	sd	cor	fit
lsq	2.8	0.2	658	8	0.113	0.82

	P	sd(P)	T	sd(T)	cor	fit	e*	hat
san	2.86	0.18	656	9	-0.011	0.78	0.33	0.12
ab	2.82	0.17	659	9	0.067	0.78	-0.31	0.04
mu	2.90	0.19	653	10	-0.155	0.71	-0.64	0.48
cel	2.83	0.17	658	8	0.112	0.79	0.51	0.00
fcel	2.83	0.17	658	8	0.113	0.81	0.26	0.00
pa	2.78	0.18	661	9	-0.035	0.68	0.85	0.32
phl	2.83	0.17	658	8	0.113	0.76	0.51	0.00
ann	2.83	0.17	658	8	0.113	0.82	-0.03	0.00
east	2.83	0.17	658	8	0.113	0.70	-0.84	0.00
q	2.83	0.17	658	8	0.113	0.82	0	0
H2O	2.83	0.17	658	8	0.113	0.82	0	0
sill	2.83	0.17	658	8	0.113	0.82	0	0
and	2.83	0.17	658	8	0.113	0.82	0	0

T = 658jC, sd = 8,

P = 2.8 kbars, sd = 0.2, cor = 0.113, sigfit = 0.82

tc-ab1rim-o.txt

calcs use:

an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	san	ab	mu	cel	fcel	pa	phl
a	0.990	0.890	0.740	0.0157	0.0162	0.394	0.0319
sd(a)/a	0.05000	0.05000	0.10000	0.63694	0.61728	0.11017	0.40481

	ann	east	q	H2O	and	sill
a	0.0560	0.0380	1.00	1.00	1.00	1.00
sd(a)/a	0.34308	0.38888	0	0	0	0

Independent set of reactions

- 1) sill = and
- 2) 3cel + 2and = 2mu + phl + 5q
- 3) 2cel + 2and = mu + east + 5q
- 4) 2cel + and = san + east + 4q + H2O
- 5) 3cel + ann = 3fcel + phl
- 6) ab + cel + east = san + pa + phl

Calculations for the independent set of reactions
(for $x(\text{H}_2\text{O}) = 1.0$)

	P(T)	sd(P)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)
1	3.7	0.22	-3.38	0.04	0.00308	0.189	0	0.000
2	13.4	6.61	-39.95	0.96	-0.05658	2.162	8.415	1.963
3	11.9	5.18	-17.46	0.91	-0.04464	1.880	4.737	1.336
4	6.0	2.81	38.04	0.94	-0.10910	3.456	5.028	1.333
5	8.4	154.72	26.33	1.48	-0.02503	-0.128	-0.469	2.713
6	11.0	21.09	-21.18	0.41	-0.00566	0.296	3.154	0.859

Average PT (for $x(\text{H}_2\text{O}) = 1.0$)

Single end-member diagnostic information

avP, avT, sd's, cor, fit are result of doubling the uncertainty on ln a :

a ln a suspect if any are v different from lsq values.

e* are ln a residuals normalised to ln a uncertainties :

large absolute values, say >2.5, point to suspect info.

hat are the diagonal elements of the hat matrix :

large values, say >0.46, point to influential data.

For 95% confidence, fit (= sd(fit)) < 1.54

however a larger value may be OK - look at the diagnostics!

	avP	sd	avT	sd	cor	fit
lsq	3.0	0.3	650	13	0.173	1.64

	P	sd(P)	T	sd(T)	cor	fit	e*	hat
san	3.02	0.27	646	13	0.069	1.55	0.73	0.11
ab	2.93	0.27	652	13	0.096	1.55	-0.70	0.08
mu	3.10	0.24	640	12	-0.039	1.31	-1.66	0.41
cel	2.96	0.26	650	12	0.171	1.53	1.38	0.01
fcel	2.96	0.26	650	12	0.171	1.55	1.27	0.01
pa	2.86	0.25	657	12	-0.011	1.39	1.54	0.37
phl	2.97	0.28	650	13	0.172	1.63	0.29	0.00
ann	2.97	0.28	650	13	0.172	1.63	-0.23	0.00
east	2.97	0.27	650	13	0.173	1.59	-0.85	0.00
q	2.97	0.28	650	13	0.173	1.64	0	0
H2O	2.97	0.28	650	13	0.173	1.64	0	0
and	2.97	0.28	650	13	0.173	1.64	0	0
sill	2.97	0.28	650	13	0.173	1.64	0	0

T = 650jC, sd = 13,

P = 3.0 kbars, sd = 0.3, cor = 0.173, sigfit = 1.64