universität wien

MASTERARBEIT / MASTER'S THESIS

Titel der Masterarbeit / Title of the Master's Thesis

„Untersuchung des Einflusses von Abkühlart und gewöhnlichen Blei auf die Altersdatierung innerhalb des Uran/Blei bzw. des Thorium/Bleisystems mithilfe einer Octave Modellierung“

verfasst von / submitted by

Simon Niebergall (BSc)

angestrebter akademischer Grad / in partial fulfilment of the requirements for the degree of

Master of Science (MSc)

Wien, 2020 / Vienna 2020

Studienkennzahl lt. Studienblatt / degree programme code as it appears on the student record sheet:	A 066 815
Studienrichtung lt. Studienblatt / degree programme as it appears on the student record sheet:	Erdwissenschaften
Betreut von / Supervisor:	Assoz.Prof. Dr. Urs Klötzli

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit bestätige ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel benutzt habe. Die Stellen der Arbeit, die dem Wortlaut oder dem Sinn nach anderen Werken (dazu zählen auch Internetquellen) entnommen sind, wurden unter Angabe der Quelle kenntlich gemacht.

Inhaltsverzeichnis: Seite

Zusammenfassung……

Einleitung……. 5

Diffusion…… 6-7

Mathematik der Diffusion ……. 8-13

Geochronologie…….. 13-14

Uran/Bleidatierung und Thorium/Bleidatierung……... 14-17

Konkordiadiagramme…… …… 17-18

Apatit Mineralogie …….. 18

Octave…….. 18-23

Ergebnisse…… 23-48

Diskussion…… 48-50

Conclusio……. 50

Zusammenfassung

Diese Arbeit befasst sich mit der Altersdatierung innerhalb eines Apatitkristalls. Dafür wurde ein Octavecode erstellt, welcher einen Apatitkristall, die U,Th und Pb Diffusion darin und den Einbau von gewöhnlichem Blei simuliert. Anhand von den gewonnenen Diffusionsdaten und den dazugehörigen Isotopenverhältnissen konnten wiederum die jeweiligen Altersprofile, welche auch mit Octave berechnet wurden, für die verschiedenen geologische Szenarien erstellt werden. Die dabei simulierten Szenarien unterschieden sich in Abkühlart und Abkühlrate. Ebenfalls wurde der Einfluss von gewöhnlichem Blei auf die Altersdatierung untersucht. Im Zuge dessen konnte gezeigt werden, dass Abkühlart, Abkühlrate genauso wie das gewöhnliche Blei einen Einfluss auf die produzierten Altersprofile haben. Je langsamer die Abkühlung von statten geht desto größer wird der zu beobachtende Verjüngungseffekt sein, da die Schließungstemperatur erst später erreicht wird und noch keine Akkumulation stattfindet, sondern ein offenes System vorliegt. Beim gewöhnlichen Blei muss man unterscheiden, ob die Alter graphisch oder rechnerisch untersucht werden, denn bei der Analyse vom Einfluss des gewöhnlichen Bleis sieht man zwei gegensätzliche Effekte. Wenn die Probe mit gewöhnlichem Blei verunreinigt wurde und man die Proben rechnerisch auswertet, wird man die berechneten Alter zu hoch einschätzen, weil das Uran/Bleiverhältnis gestört wird. Dadurch wird vorgetäuscht, dass mehr Blei durch den radiogenen Zerfall produziert wurde als es in Wahrheit der Fall ist. Wenn man die Ergebnisse mit Hilfe des Programms IsoplotR graphisch darstellt, wird man einen umgekehrten Effekt sehen. Mit IsoplotR kann man Konkordiadiagramme erstellen und bei der Erstellung dieser Konkordiadiagramme fällt auf, dass bei der Zugabe von gewöhnlichem Blei die Kurve so rotiert, dass der untere Schnittpunkt mit der Konkordia jünger erscheint.

Einleitung

Das Thema dieser Masterarbeit ist der Einfluss von gewöhnlichem Blei auf die Altersbestimmung von Mineralen, in unserem Fall Apatit, und damit einhergehend die Bestimmung des Alters des Gesteins in welchem die Mineralkörner gefunden wurden. Die Altersbestimmungsmethoden, welche genutzt wurden, sind die Uran238/Blei206, Uran236/Blei207 sowie Thorium232/Blei208. Bei diesen Methoden nutzt man das Prinzip der Diffusion und das Modell der Schließungstemperatur (Dodson 1973). Während der Abkühlung eines Gesteins sind die Temperaturen anfangs so hoch, dass das Gestein im dauerhaften Austausch mit ihrer Umgebung ist. Dadurch kommt es zu keiner Akkumulation von bestimmten Isotopen im Gestein bzw. im Mineralkorn, da die Produktion der einzelnen Isotope genauso schnell oder vielleicht sogar langsamer ist als die Diffusionsgeschwindigkeit aus dem Mineral heraus. Dieser Austausch mit der Umgebung erfolgt über Volumen- und Selbstdiffusion. Ab einer bestimmten Temperatur, im Falle des Apatits liegt diese bei ca. 600°C, verringert sich die Geschwindigkeit der Diffusion so stark, dass sie nicht mehr im kompletten Austausch mit der Umgebung ist, bis die Temperatur so weit gefallen ist, dass quasi keine Diffusion mehr stattfindet (Dodson 1973, Blackburn et al 2011). Wenn diese Bedingung erfüllt ist spricht man von der Schließungstemperatur. Die Schließungstemperatur ist allerdings von Korngröße und Abkühlrate abhängig. Je größer das Korn und je größer die Abkühlrate desto höher ist auch die zu erwartende Schließungstemperatur (Gregor Markl 2014). Das Erreichen der Schließungstemperatur ist allerdings kein Phänomen, welches von jetzt auf gleich passiert es ist vielmehr ein Prozess, bei dem sich die Produktion und die Diffusionsgeschwindigkeit soweit anpassen bis die Tochterisotopen Produktion die Diffusionsgeschwindigkeit übersteigt und es langsam zur Akkumulation kommen kann. Der Bereich zwischen Eintritt und Beendigung wird als Partial Retention Zone (PRZ) bezeichnet. Die PRZ ist also der Übergangsbereich zwischen offenem und geschlossenem System (Blackburn et al 2011). Wie lang die PRZ letztendlich dauert hängt stark von der Abkühlrate ab, da diese bestimmt wie schnell die Diffusionsgeschwindigkeit abnimmt. Die Alter, welche wir bestimmen sind eigentlich die Alter, wenn die Schließungstemperatur erreicht bzw. die PRZ durchschritten wurde (Dodson 1973). In dieser Arbeit habe ich die Alter über das Uran/Blei Verhältnisse bzw. Thorium/Blei Verhältnisse bestimmt. Die dabei produzierten Uran/Blei Alter hängen hauptsächlich von drei Punkten ab. Erstens die Temperatur abhängigen Diffusionskoeffizienten, welche wiederum stark abhängig davon sind wie schnell die Abkühlung ist. Zweitens von der Produktion der radiogenen Tochterisotope. Dies ist mit der Zeit verknüpft und damit in welchen radioaktiven Zerfallssystem wir uns befinden. Außerdem muss die Bedingung erfüllt sein das die Halbwertszeit wesentlich länger ist als die Zeit, die benötigt wird, um die PRZ zu durchschreiten. Das ist der Fall, weil sichergestellt werden muss, dass man von einer konstanten Tochterisotopen Produktion ausgehen kann (Dodson 1973). Drittens die Länge der zurückzulegenden Strecke. Die errechneten Alter zeigen eine negative Korrelation zwischen zurückgelegter Strecke und Einfluss der Diffusion. Das liegt daran, weil ein Teilchen welches im Kern gelagert ist einfach länger benötigt um den Kristall zu verlassen als eins welches am Rand positioniert ist(Blackburn et al 2011).

Diffusion

Als Diffusion wird das Phänomen bezeichnet, welches die zufällige Bewegung von Teilchen beschreibt. Bei der Diffusion bewegt sich das Molekül oder Atom innerhalb des Kristallgitters bis es am Ende das Gitter verlässt. Die Diffusion wird stark von der thermischen Energie beeinflusst, welche auf die Umgebung wirkt. Die höheren Temperaturen beschleunigen die Bewegung der Atome/Moleküle wodurch diese den Kristall schneller verlassen. Auch Gitterfehler und die Gitterorientierung spielen eine Rolle, da diese natürliche Schwachstellen im Kristallgitter darstellen und Atome über diese gut das System verlassen können(Zhang 2008). Die Leerstellen können auch einen positiven auf die Diffusion haben, vor allem bei Substitutionsreaktionen (Zhang 2008). Grob kann man die Diffusion in drei Kategorien unterteilen erstens die Oberflächendiffusion zweitens die Korngrenzendiffusion und drittens die Volumendiffusion. Dabei kann man sagen, dass die Oberflächendiffusion am schnellsten und die Volumendiffusion am langsamsten von statten geht ($D_{Oberfläche} > D_{Korngrenze} > D_{Volumen}$) (Jost et al 1972). Die unterschiedlichen Geschwindigkeiten kommen dadurch zustande, da die zu diffundierenden Teilchen im Inneren natürlich viel besser in das Kristallgitter gebunden sind als an den Korngrenzen oder der Oberfläche (Jost et al 1972). Die Volumendiffusion ist zwar am langsamsten allerdings ist sie die System dominierende Diffusionsart. Das hängt damit zusammen, dass alle drei Diffusionsarten von der Volumendiffusion abhängig sind. Die Volumendiffusion erfolgt im inneren des Mineralkristalls. Durch die Volumendiffusion diffundieren die Atome oder Teilchen erst in Richtung der Korngrenzen und letzten endlich zur Oberfläche (Jost et al 1972). Die Geschwindigkeit der Volumendiffusion steuert dadurch also indirekt die zwei anderen Diffusionsarten mit und die Schnelligkeit der beiden anderen Diffusionsraten sind am Ende eher sekundär. Bei reiner Diffusion in einem geschlossenen System kommt es zur Homogenisierung der chemischen Komponente innerhalb des Materials dies hat keine Massenbewegung oder Volumensänderung zur Folge. Wenn es sich allerdings um ein offenes System handelt kann es durch aus auch zu einer Massenbewegung bzw. Volumensänderung kommen (Zhang 2008). Dies ist beispielsweise der Fall, wenn ein schwereres gegen ein leichteres Atom ausgetauscht wird im Zuge der Homogenisierung. Ein weiteres Phänomen was beobachtet werden kann ist die Verschiebung des gravitativen Mittelpunktes. Dies geschieht, da bei der Diffusion die Komponenten neu umgelagert werden so, dass die allgemeine Massenverteilung sich mit verändert. (Zhang 2008)

Diffusion kann nicht in einem Ein-Komponentensystem beschrieben werden, da man die einzelnen Komponenten nicht voneinander unterscheiden kann und somit auch nicht die Bewegung nachvollziehen kann. Diffusion wird aber auch hier stattfinden. Man braucht also mindestens ein binäres System, welches aus Mutter- Tochterisotop bestehen kann oder einfach aus zwei unterschiedlichen Komponenten (Zhang 2008). Wenn man ein mehr Phasiges System vorliegen hat und Diffusion auftritt wird als erstes das chemische Potential der einzelnen Phasen angepasst, damit dann eine Homogenisierung der Phasen untereinander stattfinden kann. Man kann also sagen, dass die Diffusion im ersten Moment dem chemischen Potential folgt und dann erst dem Konzentrationsgradienten um die freie Gibb´s Energie zu verringern (Zhang 2008). Ganz so einfach ist dies allerdings dann doch nicht. Da ich mich in dieser Arbeit

mit Kristallen also mit Festphasen beschäftige muss ich noch einen zusätzlichen Kommentar geben. Das Ausgleichen des chemischen Potentials kann sehr langsam vonstattengehen bzw. quasi zum Erliegen kommen vor allem eben bei Festphasen. Wenn dies der Fall ist spricht man von metastabilen Phasen ein Beispiel dafür ist Diamant (Nong M. Hwang et al 1995). Diamant und Graphit sind chemisch gesehen das Gleiche sie bestehen beide lediglich aus Kohlenstoff. Graphit hat allerdings unter Bedingungen, welche an der Erdoberfläche vorherrschen, eine geringere Enthalpie durch die Kristallstruktur und deshalb müsste sich eigentlich Diamant in Graphit umwandeln tut dies aber nicht, weil die Energie, um die Kristallstruktur zu ändern fehlt (Nong M. Hwang et al 1995). Bei einer stabilen Phase, das heißt die chemischen Potentiale der unterschiedlichen Komponenten haben eine positive Korrelation und müssen nicht mehr aneinander angepasst werden, wird die Diffusion direkt vom Konzentrationsgradienten beeinflusst. Bei einer instabilen Phase werden sich durch spontane Spaltung zwei oder mehrere Phasen bilden, welche sich untereinander dann homogenisieren, um so die Gibbs Energie zu verringern (Zhang 2008). Die beiden dominierenden Faktoren für die Geschwindigkeit sind in unserem Fall also vor allem der Konzentrationsgradient und die thermische Energie, die im System vorherrscht. Generell kann man bei der Diffusion zwischen unterschiedlichen Typen von Diffusion unterscheiden. Zum einem gibt es die sogenannte Selbstdiffusion, hier von spricht man, wenn es sich um die Diffusion von zwei Isotopen des gleichen Stoffs handelt. Ein Beispiel hierfür ist die Diffusion von ^{18}O und ^{16}O zwischen zwei Olivinen bei dem einmal das schwerere und einmal das leichtere vermehrt eingebaut wurde und jetzt in Kontakt stehen. Hinzukommt noch die chemische Diffusion, diese beschreibt eine Diffusion entlang eines starken Konzentrationsgradienten. Es gibt auch noch die sogenannte Interdiffusion, welche am besten mit einer Austauschreaktion beschrieben werden kann. Ein Beispiel hierfür ist die Austauschreaktion von Fe und Mg im Olivin. Bei der Interdiffusion kann es zu großen Schwankungen der Diffusität entlang des Profils kommen, da es zu starken Konzentration Veränderungen kommt und die Diffusität stark von der Zusammensetzung der Stoffe abhängt. Diese Diffusionsarten beschreiben alle ein binäres System heißt also ein System, welches lediglich aus zwei Komponenten besteht. Wenn ein System mehrere Komponenten hat und Diffusion stattfindet bezeichnet man diese als Multikomponenten Diffusion (Zhang 2008). In so einem Fall ist die Diffusion allerdings sehr schwer nachzuvollziehen und zu beschreiben, da alle Komponenten eine unterschiedliche Diffusion aufweisen und sich unterschiedlich Verhalten. Deswegen vereinfacht man in der Regel so ein System zu einem „binären“ System, bei dem man sich lediglich die Zwei Komponenten anschaut, die von Interesse sind und der Rest wird zu einer konstanten Zusammensetzung vereinfacht. Ein weiteres Beispiel für komplexere Diffusion ist die Multispezies Diffusion. Die Mulitspezies Diffusion beschreibt die Diffusion von mehreren Spezies derselben Komponente. Hier wird es auch wieder zu einem „binären“ System vereinfacht (Zhang 2008). Diffusion ist also der Prozess welcher den Stoff nicht nur homogenisiert, sondern auch die freie Gibbs Energie verringert, um diesen stabiler zu machen. Um die Diffusion greifbar zu machen hat Adolph Fick die sogenannten Fick´schen Gesetze formuliert. Diese beschreiben den Zusammenhang zwischen der Diffusionsstromdichte und der Veränderung der Anzahl von Teilchen bzw. der Konzentration auf einer bestimmten zurückgelegten Strecke.

Mathematik der Diffusion

Um die Mathematik der Diffusion zu verstehen fangen wir bei den Gesetzen von Fick an. Das erste Fick´sche Gesetz befasst sich mit dem Fluss von Partikeln, Molekülen, Atom, Ionen etc. Der Fluss in isotropen Medien kann laut Fick mit folgender Formel beschrieben werden:

$$J = -D\nabla C$$

J steht für den Fluss der Partikel bzw. den Diffusionsfluss

D ist der Stoff abhängige Diffusionskoeffizient

C ist die Konzentration

∇ ist der nabla Operator und zeigt das skalar von C(x,y,z,t) an

Das negative Vorzeichen zeigt, an das die Diffusion entgegen des Konzentrationsgradienten arbeitet. Die Einheit der Diffusion oder des Diffusionsflusses wird als die Anzahl der Partikel, die pro Zeiteinheit eine Fläche durchqueren definiert und mit cm^2/s oder m^2/s angegeben. Die oben aufgeführte Formel ist die einfachste Darstellung des ersten Fick´schen Gesetzes und gilt nur für isotrope Medien. Um die Diffusion eines Systems zu bewerten muss man sich den Zufluss und Abfluss des zu untersuchenden Stoffes anschauen. Soll heißen Zufluss minus Abfluss = Akkumulationsrate oder Verlustrate. Dies kann durch folgende Gleichung beschrieben werden:

$$[Jx(P) - Jx(P + \Delta x)]\Delta y\Delta z +$$

$$[Jy(P) - Jy(P + \Delta y)]\Delta x\Delta z +$$

$$[Jz(P) - Jz(P + \Delta z)]\Delta x\Delta y$$
$$= Akkumulations\ oder\ Verlustrate$$

In dieser Gleichung ist P ein willkürlich gewählter Punkt. Diese Gleichung kann mithilfe der Taylor reihe vereinfacht werden zu:

$$-\left[\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z}\right]\Delta x\Delta y\Delta z = \frac{\partial C}{\partial t}\Delta x\Delta y\Delta z$$

Wenn wir von einem infinitesimalen Volumen ausgehen können wir es sogar noch weiter zur Kontinuitätsgleichung vereinfachen:

$$-\nabla * J = \frac{\partial C}{\partial t}$$

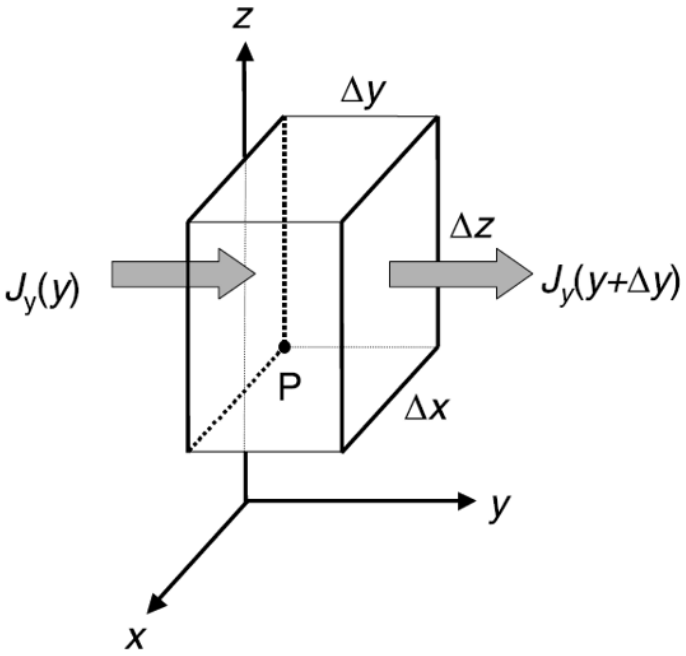


Abb.1 Zu sehen ist ein infinit kleines Testvolumen mit den ein und ausgehenden Diffusionskomponenten entlang der y-Achse (Mehrer 2007)

Beim zweiten Fick´schen Gesetz kombiniert man das erste Fick´sche Gesetz mit der Kontinuitätsgleichung dies gibt uns die sogenannte Diffusionsgleichung.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla * (D \nabla \mathrm{C})$$

Aus mathematischer Sicht kann das zweite Fick´sche Gesetz als partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung gesehen werden. Wenn D allerdings von der Konzentration abhängig ist wird diese nicht linear verlaufen. Tracer Diffusion und chemisch homogenen Systeme sind aber davon nicht abhängig weswegen und die obere Gleichung noch weiter vereinfacht werden kann.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \Delta \mathrm{C}$$

Wobei $\triangle$ für den Laplace Operator steht. Diese Gleichung ist eine partielle Ableitung zweiter Ordnung von C(x,y,z,t) . Für diese lassen sich Lösungen finden, wenn die Grenzen und Anfangsbedingungen bekannt sind.

Damit man sich dies alles besser vorstellen kann sollte man sich den Fluss auf atomarer Ebene noch einmal anschauen. Der Fluss auf atomarer Ebene betrachtet ist eigentlich ein zufälliges Springen von Atomen zwischen den Plätzen des Kristallgitters (Random Walk). Der sogenannte Random Walk ist ein Phänomen, das lediglich bei der Festkörper Diffusion auftritt (Mehrer 2007). Die vorher beschriebenen Eigenschaften sind jedoch allgemein gültig. Da ich mich mit der Diffusion innerhalb von Kristallen beschränke, sind die nachfolgenden mathematischen Beschreibungen nur noch auf die Festkörper Diffusion beschränkt. Diese Sprünge werden normalerweise von Einzelatomen getätigt und werden von verschiedenen Parametern gesteuert. Diese sind die Sprungfrequenz, -länge und der Korrelations Faktor. Vor allem werden die Bewegungen der Atome über Gitterdefekte wie Vakanzen oder Interstitial beeinflusst. Betrachten wir nun zwei sich gegenüberliegende Gitterebenen mit einer bestimmten Anzahl von Atomen, m_1 für Ebene 1 und m_2 für Ebene 2. Zwischen diesen beiden Ebenen ist ein Abstand λ und die Atome haben die Möglichkeit unter einer bestimmten Frequenz $\Gamma_{1,2}$, zwischen Ebene 1 und 2, und $\Gamma_{2,1}$, zwischen Ebene 2 und 1 zu springen. Der daraus resultierende Fluss kann wie folgt beschrieben werden:

$$J=m_1 * \Gamma_{1,2} - m_2 * \Gamma_{2,1}$$

Diese Gleichung ist wie schon bei Fick eine einfache Betrachtung, bei der die zwei Raten von einander subtrahiert werden, um den Nettofluss zu erhalten. Ohne den Einfluss durch Kräfte von außen kann man davon ausgehen das die Sprungraten $\Gamma_{1,2}$ und $\Gamma_{2,1}$ gleich sind. Dadurch lässt sich die Formel vereinfachen zu:

$$J= \Gamma * (m_1 - m_2)$$

Um nun eine Volumens Bewegung zu beschreiben muss man die Anzahl der Teilchen, m, durch die Länge des Abstands, λ, teilen.

$n_1=\frac{m1}{\lambda}$ bzw, $n_2=\frac{m2}{\lambda}$ daraus ergibt sich,

$$(m_1-m_2) = (n_1-n_2) * \lambda = \lambda^2 * \frac{(n1-n2)}{\lambda}$$

Wenn die Änderung in der Konzentration über die Strecke λ sehr gering ist dann ergibt sich:

$\frac{(n1-n2)}{\lambda} \approx -\frac{\partial n}{\partial x}$ und $(m_1-m_2)=-\lambda^2\frac{\partial n}{\partial x}$

Und der Fluss kann Letzen endlich mit folgender Gleichung beschrieben werden:

$$J=-\lambda^2\Gamma\frac{\partial n}{\partial x}$$

Diese Beschreibung zeigt aber nur den Fluss ausschließlich zwischen zwei Gitterebenen. Die Atome haben in der Realität allerdings eine größere Auswahl von Ebenen weswegen die Gleichung noch mit dem Faktor, z, korrigiert werden muss. Wobei „z“ die Anzahl an möglichen Nachbar Positionen angibt.

$$J=-\frac{1}{z}\lambda^2\Gamma\frac{\partial n}{\partial x}$$

Fügt man nun diese Gleichung und das erste Fick´sche Gesetz zusammen erhält man eine sehr einfache Definition des Diffusionskoeffizienten.

$$D=\frac{1}{2}\lambda^2\Gamma$$

Diese Definition des Diffusionskoeffizienten beruht auf der atomaren Betrachtungsweise mit den Parametern der Sprungfrequenz und der mittleren Sprungdistanz und kann nicht einfach so in der Realität oder bei unserem Versuch verwandt werden.

Nun gibt es verschiedene Bedingungen für die Diffusion zum einem gibt es die Steady State Diffusion, bei der die Konzentration konstant bleibt und die non Steady State Diffusion bei dies nicht der Fall ist. Mithilfe einer Gaußfunktion kann man eine Punktquelle innerhalb eines Steady State Systems darstellen. Dafür müssen allerdings folgende Randbedingungen herrschen:

$-\infty<x<\infty$ und $\lim_{|x|\to\infty} n(x,t)$ = finite, und

$N(x,0) = N\delta(x)$

Wobei $\delta(x)$ die Dirac`s Funktion ist

$\delta(x) = 0$ wenn $x \neq 0$

$\delta(x) = \infty$ wenn $x = 0$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\partial(x)d_x = 1$$

Wenn diese Bedingungen erfüllt werden kann man folgende Gleichung benutzen:

$$n(x,t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]$$

Mit Dieser Gleichung erhält man eine Gaußfunktion welche wie folgt aussieht und den Verlauf der Diffusion beschreibt.

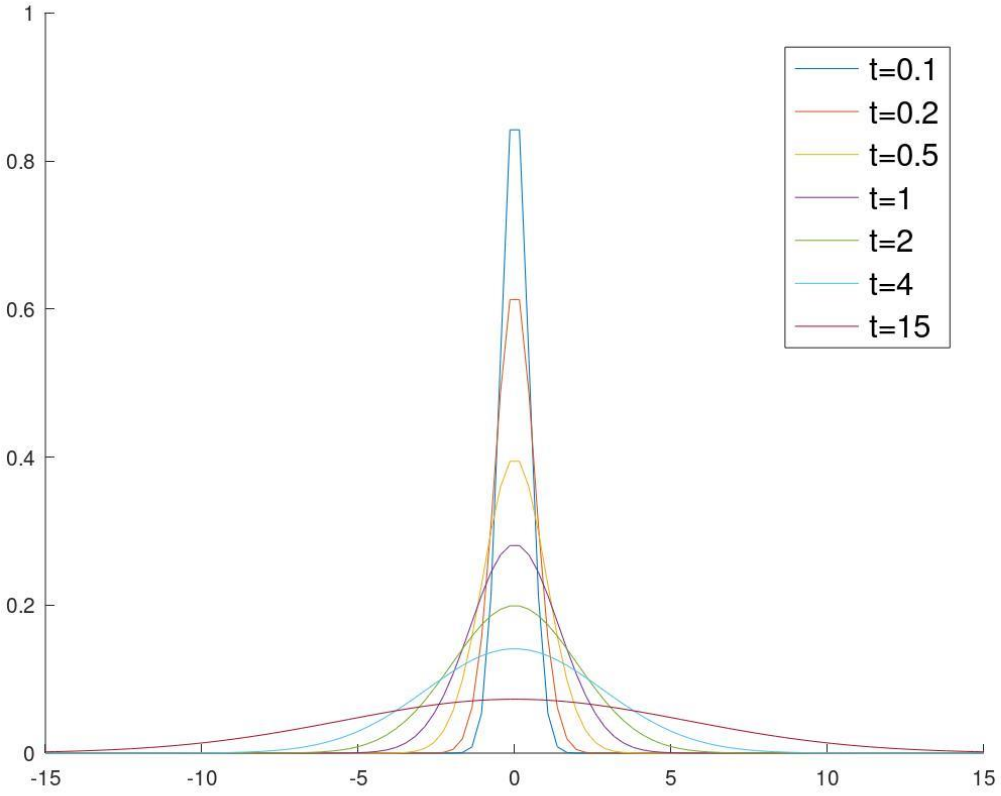


Abb.2 Gaußfunktiom für ein System im steady state

Dieses Beispiel spiegelt aber nicht unseren Fall wieder da es sich bei uns um ein non Steady State System handelt. Um dieses zu beschreiben nutzt man am besten die Errorfunction mit folgenden Randbedingungen:

$\partial_t n(x,t) = D\partial_x^2 n(x,t)$, wenn

$n_0(x) = 1$, wenn $x < 0$ und für $n_0(x) = 0$, wenn $x > 0$

Unter diesen Bedingungen kann man folgende Errorfunction nutzen um eine Semifinite Diffusion zu beschreiben.

$$n(x,t) = \frac{1}{2}\left[1 - erf\left(\frac{x}{2\sqrt{D}t}\right)\right] \; ; \; erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x e^{-s^2}$$

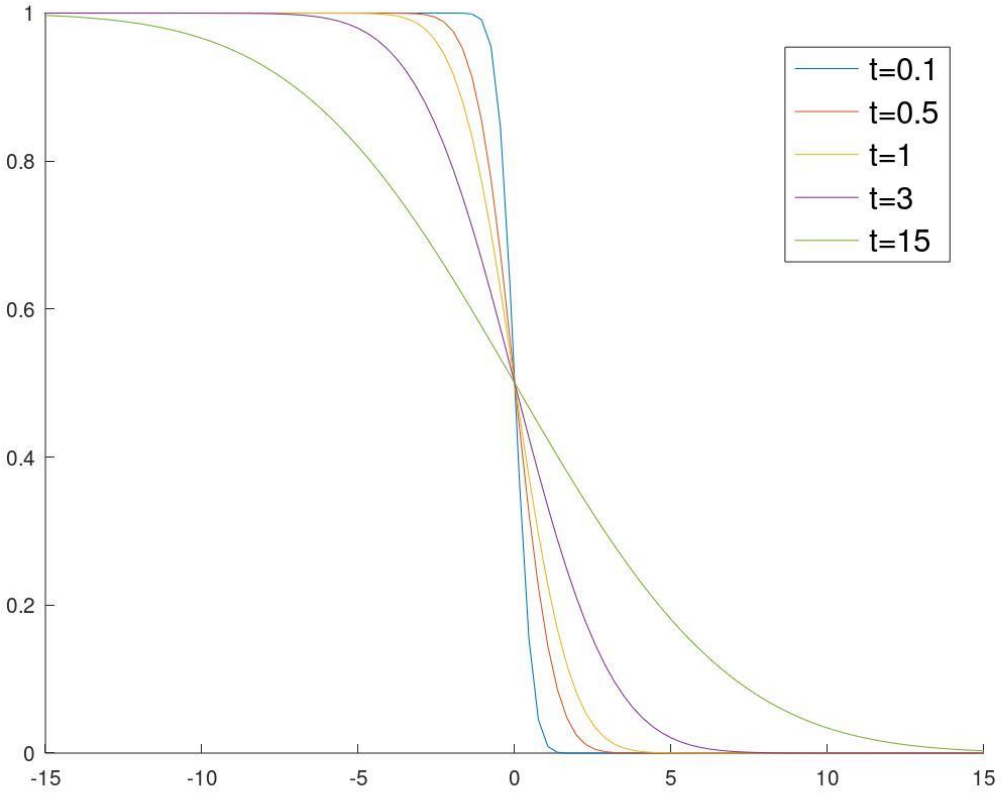


Abb.3 Errorfunction für ein non steady state System

Dies ist leider immernoch nicht ausreichend um unsere Problematik angemessen zu beschreiben, da die Diffusion in unserem Fall sehr stark Temperatur abhängig ist. Um dies in den Griff zu bekommen nutzen wir die Arrehnius Gleichung:

$D=D^0 * \exp\left(\frac{\Delta H}{RT}\right)$

Mit dieser Gleichung zur ausbesserung des Diffusionskoeffizenten und der Errorfunction können wir nun unsere Diffusion im Modell beschreiben.

Geochronologie

Die Geochronologie beschäftigt sich mit der Altersbestimmung von Gesteinen. Dafür nutzt man wie bereits in der Einleitung erwähnt das Konzept der Schließungstemperatur nach Dodson. Man bestimmt also eigentlich das Alter, welches den Zeitpunkt beschreibt, ab dem die Schließungstemperatur erreicht wurde und nicht das tatsächliche Alter oder Formationsalter. Es gibt eine Ausnahme, wenn es zu einer sehr schnellen Abkühlung kommt zum Beispiel bei Vulkaniten wie Basalte, welche sehr schnell im Wasser oder in der Luft abkühlen. Dann kann man davon ausgehen das Schließungsalter, Formationsalter bzw. der Zeitpunkt der maximalen Temperatur alle gleich sind oder der Unterschied in geologischen Maßstäben vernachlässigbar erscheint. In der Regel ist dies allerdings nicht der Fall. Vor allem bei Intrusivgesteinen,

die eine langsame Abkühlung erfahren, trifft das nicht zu. Diese weißen oft eine interessante Abkühlgeschichte auf und werden von Prozessen wie Exhumation oder Subduktion beeinflusst. Das Gestein kann also eine komplexe Abkühlgeschichte erfahren. Die Alter, die bestimmt werden, spiegeln allerdings nur einen geringen Teil dieser wieder. Um genau zu sein wird erst das Alter bestimmt wo die Schließungstemperatur erreicht wird und es zu keinem weiterem Aufheizungsprozess gekommen ist, welches die alten Merkmale wieder überprägen würde. Denn wenn es zu einer erneuten Aufheizung kommt öffnet sich das System wieder und die vorherrschenden Isotopenverhältnisse werden wieder gelöscht, da die Isotope das Mineralkorn verlassen können (Dodson 1973). Vor allem die Tochterisotope verlassen das System, da die Mutterisotope meist Teil des Kristallgitters sind und bereits mit der Umgebung im Gleichgewicht sind. Zur Bestimmung der Alter gibt es unterschiedliche Bestimmungsmethoden. Im nächsten Teil werde ich auf die von uns genutzten Methoden näher eingehen.

Datierungsmethoden

Uran/Blei Methode

Die Uran/Blei Datierung ist die wichtigste und am häufigsten benutze Methode um anhand von Isotopenverhältnissen Alter in der Geologie zu bestimmen. Sie hat eine Reichweite von 4,57Ga bis ins Pleistozän (Schoene 2014) es ist also möglich beinahe die gesamte Erdgeschichte mit dieser Methode zu datieren. Wie der Name schon sagt bezieht man sich hier auf Isotopenverhältnissen zwischen Blei und Uran. Insgesamt gibt es drei stabile Blei Isotope ^{208}Pb,^{207}Pb,^{206}Pb und ein instabiles ^{204}Pb. Die ersten drei entstehen aus dem radioaktiven Zerfall von ^{232}Th,^{235}U,^{238}U und das ^{204}Pb ist das sogenannt gewöhnliche im englischen common Blei. Das gewöhnliche Blei ist das einzige, welches nicht radiogen ist, das heißt dass es nicht aus dem radioaktiven Zerfall eines anderen Atoms entstanden ist. Ein großer Vorteil der Uran/Blei Datierung ist, dass in fast jedem Gestein Uran führende Minerale vorkommen mit denen man eine Altersbestimmung durchführen kann. Ein weiterer Vorteil ist, das diese Minerale (Zirkon, Apatit,Kaserit…) meistens sehr beständig gegenüber chemischer und physikalischer Verwitterung sind und somit auch gut die Zeit überstehen können. Die Art der Genese des Gesteins spielt auch keine Rolle man kann diese Methode in Eruptivgesteinen, Metamorphgesteinen, Hydrothermalgesteinen und Epithermalgesteinen anwenden (Schoene 2014). Im Laufe der Zeit konnten mit dieser Datierungsmethode einige Erkenntnisse dazugewonnen werden oder alte Anschauungen verbessert werden. Zum Beispiel konnte man die geologische Skala anpassen oder die Raten der paläotektonischen Prozesse in der Lithosphäre genauer bestimmen genauso wie die Rekonstruktion der Paläogeographie der Superkontinente (Schoene 2014). Der größte und beste Vorteil ist allerdings der Duale Zerfall von ^{235}Uran und ^{238}Uran zu ^{207}Blei und ^{206}Blei. Diese beiden Zerfallsreihen finden parallel zueinander zeitgleich statt aber haben jeweils unterschiedliche Zerfallskonstanten. Dadurch hat man zwei voneinander unabhängige thermochronologische Systeme, welche einen einzigartigen Abkühlpfad wiederspiegeln (Blackburn et al 2011). Damit hat man einen großen Vorteil anderen Systemen gegenüber, welche nur mit einem

einfachen Zerfall, wie z.B. Ar/Ar beschrieben werden. Solche Analysen können oft nicht genau unterscheiden ob es sich um eine langsame Abkühlung handelt oder es zu einer Aufheizung zwischendurch kam (Blackburn et al 2011).

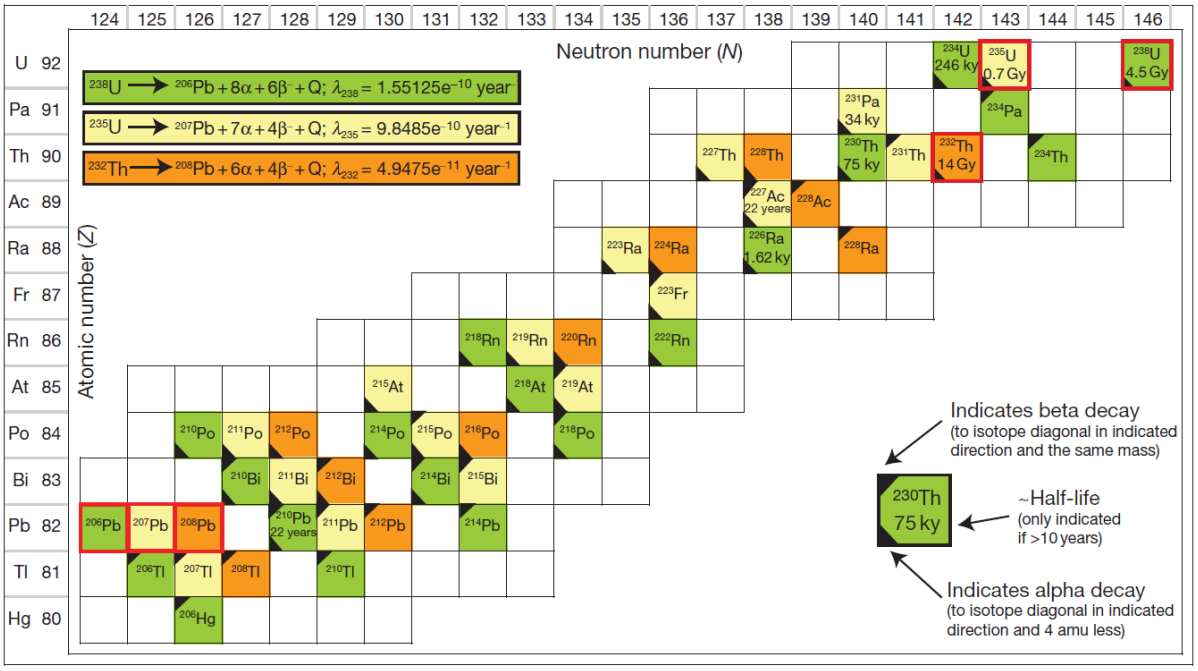


Abb.3 In der oben gezeigten Darstellung kann man die Zerfallsreihen von ^{238}Uran zu ^{206}Blei, ^{235}Uran zu ^{207}Blei und von ^{232}Th zu ^{208}Blei sehen (Schöne 2014)

1)Uran^{238} $\xrightarrow{\alpha}$ Th^{234} $\xrightarrow{\beta}$ U^{234} $\xrightarrow{\alpha}$ Th^{230} $\xrightarrow{\alpha}$ Ra^{226} $\xrightarrow{\alpha}$ Rn^{222} $\xrightarrow{\alpha}$ Po^{218} $\xrightarrow{\alpha}$ Pb^{214} $\xrightarrow{\beta}$ Bi^{214} $\xrightarrow{\beta}$ Po^{214} $\xrightarrow{\alpha}$ Pb^{206}

2)Uran^{235} $\xrightarrow{\alpha}$ Th^{231} $\xrightarrow{\beta}$ Pa^{231} $\xrightarrow{\alpha}$ Ac^{227} $\xrightarrow{\beta}$ Th^{227} $\xrightarrow{\alpha}$ Ra^{223} $\xrightarrow{\alpha}$ Rn^{219} $\xrightarrow{\alpha}$ Po^{215} $\xrightarrow{\alpha}$ Pb^{211} $\xrightarrow{\beta}$ Bi^{211} $\xrightarrow{\alpha}$ Ti^{207} $\xrightarrow{\beta}$ Pb^{207}

Das α/β unter den Pfeilen steht für die jeweilige Zerfallsart. Alpha Zerfall bedeutet, dass der Zerfall unter Abgabe eines Heliumkerns stattfindet und bei einem Betazerfall wird ein Neutron in ein Proton umgewandelt mit der Abgabe eines Betateilchens.

Die zwei Uranisotope haben wie oben bereits erwähnt unterschiedliche Halbwertszeiten was zu unterschiedlichen Mutter- Tochterisotopen Verhältnissen führt. Die Halbwertszeit von Uran^{238} beläuft sich auf 4,5 Milliarden Jahre und von Uran^{235} auf 704 Millionen Jahre (Schoene 2014). In der Zerfallsreihe hat jedes Zwischenprodukt seine eigene Halbwertszeit diese ist allerdings im Vergleich zur Mutter/Tochterhalbwerstszeit eher gering. Allerdings müssen diese in unserem Fall nicht berücksichtigt werden, weil die Halbwertszeiten der Zwischenprodukte im Vergleich zur übergeordneten Halbwertszeit des Mutterisotope so gering ist das diese keinen nennenswerten Einfluss auf die Halbwertszeit des Mutterisotops haben. Dafür nimmt man an das ein säkulares Gleichgewicht vorliegt (Schoene 2014). Das heißt, dass sich die Aktivität der einzelnen Isotope, welche sich als Zwischenprodukt bilden,

sich der Aktivität des übergeordneten Prozesses von Mutter und Tochterisotopen anpasst.

$N_1*\lambda_1=N_2*\lambda_2=N_3*\lambda_3\ldots$

Daraus folgt:$[N_1]=[N_2]=[N_3]\ldots$

N=Mole des Stoffs, λ=Zerfallskonstante des jeweiligen Stoffes, [N]= Aktivität des Stoffes (Schoene 2014). Dieses säkulare Gleichgewicht bleibt so lange bestehen bis es zu einer Störung des Systems durch zum Beispiel Fraktionierung durch chemische Verwitterung kommt. Die zwei wichtigsten Punkte die man hier beachten muss sind folgende 1) Es entsteht aus jedem Uran Atom welches zerfällt jeweils nur ein Blei Atom 2) Wenn das Gleichgewicht gestört wurde, etwa durch partielle Aufschmelzung oder Kristallisation müssen, die Alter genau auf ihre Plausibilität getestet werden (Schoene 2014).

Bei dieser Datierungsmethode geht man davon aus, dass alles Blei, welches vorhanden ist, durch den radioaktiven Zerfall entstanden ist und sich über die Jahre nach dem Erreichen der Schließungstemperatur angesammelt hat. Dadurch, dass die Halbwertszeiten bekannt sind kann man über das Verhältnis von Tochter zu Mutterisotopen das Alter bestimmen.

Zur Berechnung des Alters habe ich folgende Formeln genutzt:

$$t = \frac{1}{\lambda_{238}} * ln\left(1 + \frac{^{206}Pb}{^{238}U}\right);$$

$$t = \frac{1}{\lambda_{235}} * ln\left(1 + \frac{^{207}Pb}{^{235}U}\right)$$

λ=Zerfallskonstante des jeweiligen Uranisotops

Thorium/Blei Methode

Auch hier macht man sich wieder den radioaktiven Zerfall zunutze, um die Alter zu bestimmen. Die Zerfallsreihe von Thorium 232 zu Blei 208 sieht wie folgt aus:

$Thorium^{232} \xrightarrow{\alpha} Ra^{228} \xrightarrow{\beta} Ac^{228} \xrightarrow{\beta} Th^{228} \xrightarrow{\alpha} Ra^{224} \xrightarrow{\alpha} Rn^{220} \xrightarrow{\alpha} Po^{216} \xrightarrow{} Pb^{212} \xrightarrow{\beta} Bi^{212} \xrightarrow{\beta} Po^{212} \xrightarrow{\alpha} Pb^{208}$

Auch hier wird wieder das gleiche Prinzip wie oben angewendet genauso wie die gleiche angepasste Formel zur Verwendung kommt.

$$t = \frac{1}{\lambda_{Th232}} * ln\left(1 + \frac{^{208}Pb}{^{232}Th}\right)$$

Der einzige Unterschied ist das man die unterschiedlichen Zerfallsraten, welche durch die unterschiedlichen Halbwertszeiten enstehen, benutzt und natürlich die unterschieldichen Konzentrationen der jeweils dazugehörigen Isotopen einsetzt.

Konkordia Diagramme

Ein sehr gutes Mittel, um die gemessenen Daten darzustellen ist das Konkordia Diagramm. Es gibt zwei verschiedene Typen des Konkordia Diagramms. Zum einem das Terrawasserburg Diagramm und zum anderen das Wetherill Diagramm. Beide passieren auf dem gleichen Prinzip. Man nutzt den dualen Zerfall von Uran38 und Uran35 und testet beide gegeneinander um zu überprüfen ob es zu einer Störung des Systems von außen kam entweder durch Verunreinigung durch gewöhnlichen Blei, dem mischen von unterschiedlich alten Materialien oder den Verlust durch Diffusion(Schoene 2014).Es kann bei beiden die gleichen Informationen herausgelesen werden sie unterscheiden sich lediglich in der Achsenbestimmung. Beim Terrawasserburg Diagramm wird das Verhältnis von 207Pb/206Pb gegen das Verhältnis von 238U/206Pb geplottet und beim Wetherill Diagramm wird das 206Pb/238U Verhältnis gegen das 207Pb/235U Verhältnis geplottet. Im Ideal Fall bilden die geplotteten Verhältnisse eine Kurve, welche als Konkordia bezeichnet wird. Wenn sie auf der Konkordia liegen heißt das, dass sie nur eine einstufige Abkühlung erfahren haben und bei beiden Uran/Bleisystemen die gleichen Alter herauskommen (Schoene 2014). Das bedeutet, dass sie konstant abgekühlt sind und keine Aufheizung durch z.B. Metamorphose Ereignisse oder ähnliches erfahren haben. Wenn die Punkte unterhalb liegen kann das mehrere Gründe haben. Zum einen kann es ein Zeichen dafür sein, dass sie eine mehrstufige Abkühlung erfahren hab mit einer oder mehreren thermischen Aufarbeitungen und damit einhergehender Diffusion und der Störung des Uran/Bleiisotopen Verhältnisses. Andererseits kann es auch daran liegen, dass die Probe durch nicht radiogenes Blei verunreinigt wurde bzw. die Blei Konzentration nicht richtig korrigiert wurde (Schoen and Bowring 2007). Allerdings kann man aus den Schnittpunkten der Gerade mit der Konkordia auch Informationen ableiten. Der Punkt, der die Konkordiakurve am höchsten Punkt schneidet ist das Alter des ersten Erreichens der Schließungstemperatur und der untere Punkt das Alter der thermischen Aufarbeitung und des einhergehenden Blei Verlusts (Schoene 2014).
Um die Ergebisse darzustellen habe ich das Programm IsoplotR genutzt. Dies ist ein hervorragendes Tool zur graphischen darstellung von Isotopenverhältnissen und den dazugehörigen Altern.

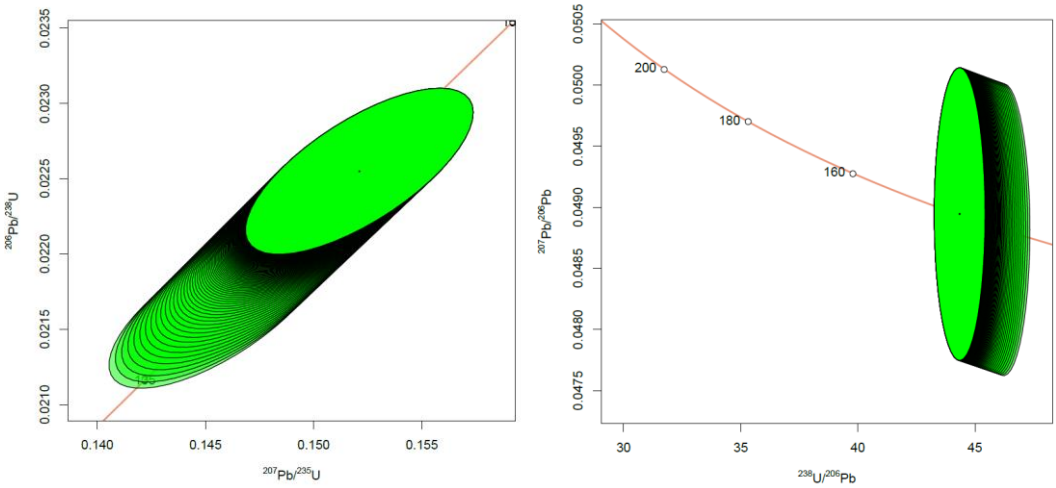


Abb.4 Links Bsp. Für Wetherhill Diagramm und rechts für Terrawasserburg

Apatit Mineralogie

Apatit ist das auf der Erde am häufigsten vorkommende Phosphat und kann eine große Bandbreite von Elementen einbauen zum Beispiel: S,Sr,U,Th und REE (Engi 2017). Das Wort Apatit leitet sich von dem griechischen Wort „απατάω“ ab und heißt täuschen. Das liegt an der großen Varianz im Erscheinungsbild des Apatits, welcher in Farben von grün über braun bis weiß reichen kann und von transparent bis opak. Sie kristallisieren im hexagonal/dipyramidalen System, haben einen muscheligen Bruch und weisen eine Mohs´sche Härte von 5 auf. Apatit als solchen gibt es eigentlich nicht. Der Begriff beschreibt eine Supergruppe von Mineralen, die alle der Mineralklasse der Phosphate, Arsenate und Vanadate zugeordnet werden können (Paser et al 2010). Sie können durch folgende allgemeine chemische Formel dargestellt werden: $(Ca,Ba,Pb,Sr,etc)_5(PO_4,CO_3)_3(F,Cl,OH)$. Die Untergruppen sind Apatit-Gruppe, Belovit-Gruppe, Britholith-Gruppe, Ellestadit-Gruppe, Hedyphan-Gruppe (Pasero et al 2010). Die häufigsten Varianten, die auftreten sind der Chlorapatit ($Ca_5(PO_4)_3Cl$, Fluroapatit ($Ca_5(PO4)_3F$ und Hydroxylapatit ($Ca_5(PO_4)_3(OH)$, welche der Apatit-Gruppe zugeordnet werden. Diese Bezeichnung ist mittlerweile allerdings veraltet. Neuerdings wird der Chlorapatit Apatit-(CaCl) genannt und dementsprechend ist die Bezeichnung Apatit-(CaF) für den Fluroapatit und Apatit-(CaOH) für den Hydroxylapatit (Burke 2008). Apatite sind ein in Magmatiten und Metamorphiten akzessorisch vorkommendes Mineral. Der Grund weswegen wir den Apatit als Versuchsobjekt ausgesucht haben liegt hauptsächlich an der Geometrie. Durch diese Verhält er sich relativ isotrop. Das bedeutet, dass die zu erwartende Diffusion nicht von der Richtung entlang der unterschiedlichen Kristallachsen abhängig ist.

Octave

Um die Diffusion bei dieser Arbeit zu erforschen und darzustellen habe ich das Freeware Programm Octave genutzt, welches Matlab sehr ähnlich ist und ebenfalls auf Matrizen Berechnungen basiert. Mithilfe dieses Programmes habe ich die

theoretische Diffusion bei einem genormten Teilchen, welches eine homogene Stoff Verteilung aufweist und in jegliche Richtung den gleichen Diffusionskoeffizienten hat, durchgeführt. Bei diesem Ansatz habe ich vorausgesetzt, dass das Blei in ein infinites Reservoir diffundiert. Soll heißen das alles Blei, welches diffundiert sich nicht akkumuliert, sondern immer sofort wieder verschwindet wie es zum Beispiel bei Fluiden der Fall sein kann. Dadurch haben wir keine Randbedingung, welche gegen unsere Diffusion arbeitet. Das Korn wurde dann durch zufällige Schnittlagen durchstoßen, um unterschiedliche Konzentrationsprofile zu generieren. Mithilfe der Konzentrationsprofile und den oben bereits erklärten Altersdatierungsmethoden habe ich den jeweiligen Konzentrationsverhältnissen Alter zu ordnen können, wodurch ich auch den jeweiligen Abständen Alter zuordnen konnte. Die dadurch gewonnen Altersprofile konnte ich nun miteinander vergleichen.

Die dafür verwendeten Octave Codes waren folgende:

Als erstes habe ich einen Kreis definiert, welcher an zwei Punkten durchstoßen wird und eine Linie dazwischen gelegt welche mit 200 Punkten versehen ist.

Parameter

```
Der Radius
r = 1
Hier definiere ich über die Winkel phi und phi2 die beiden Punkte, an den der Kreis durchstoßen wird
phi  = deg2rad(10);
phi2 = deg2rad(40);
%% Kreis
alpha = linspace(0, 2*pi, 100)';  % d
circle = r*[cos(alpha), sin(alpha)];
%% Vektoren
Als nächstes bestimme ich die Vektoren, welche die zwei Durchstoßpunkte bestimmen und bilde die Differenz. Die Differenz beschreibt den Vektor, welcher die zwei Durchstoßpunkte miteinander verbindet.
% Kompenten der Vekotren v = [x , y];
v1 = 1*r * [cos(phi)  , sin(phi) ];
v2 = 1*r * [cos(phi2) , sin(phi2)];
diff = v2 - v1;
Danach berrechen ich die Länge des Vektors und gebe ihm den richtigen Startpunkt
%% Berechne Gleichung
l = sqrt((diff(1)^2+diff(2)^2));
x = linspace(v2(1),v1(1),200-0); %Schritte auf der Schnittlage
y = diff(2)/diff(1) * (x - v1(1)) + v1(2);
Hier bestimme ich den Abstand zum Mittelpunkt (ab) mit Hilfe des Satz des Pythagoras
ab = sqrt(x.^2+y.^2);
```

Im zweiten Teil habe ich eine perfekte Schnittlage durch den Mittelpunkt simuliert und die dazugehörigen Konzentrationsveränderungen berechnet, welche danach in einer Matrix gespeichert wurden. Dies habe ich unter drei unterschiedlichen Bedingungen durchgeführt. Beim ersten Mal mit einer konstanten Abkühlrate beim zweiten Mal mit einer exponentiellen Abkühlrate und beim dritten Mal mit einer konstant Abkühlrate aber mit einem Aufheizungsevent. Die dafür verwendeten Codes unterscheidet sich lediglich am Anfang wo der Temperaturverlauf bestimmt wird.

```
D0Pb=1.27*10^-8;   Experimenteller Wert aus Tscherniak et al 600-1200°C
E=231000;   Aktivierungsenergie in Joule/mol (umgerechnet aus KJ/Mol) Tscherniak
R=8.3144598;  Gaskonstante
Ma=12;  Laufzeit in Ma
tmax = Ma*(10^6)*60*60*24*365;   Umrechnungsfaktor für Sekunden in Ma
T=273.15+800;   Temperatur in Kelvin
AK=10   Grad/Ma Abkühlrate
xa=linspace(0,0.001,100);   Korngröße
xb=0.0010000001-xa


 tj=linspace(0,Ma,Ma+1);
t=linspace(0,tmax,Ma);
 Tn=zeros(1,Ma+1,1);  Matrix wird  mit Tn-Werten aus der forschleife gefüllt
 1) Konstante Abkühlung   2)  exponetelle Abkühlung     3)  Aufheizungsevent
for u=1:length(tj)              for u=1:length(tj)              for u=1:length(tj)
  Tn(u)=T-(AK*tj(u));             Tn(u)=T*exp(-0.0231*tj(u));          Tn(u)=T-(AK*tj(u));
 end                             end                             if ((Ma/4))<u && u<=(Ma/2)
                                                                      AK=-5
                                                                 Tn(u)= Tn((Ma/4))-(AK*(tj(u)-((Ma/4)-1)));
                                                                 elseif u>((Ma/2))
                                                                     AK=10
                                                                 Tn(u)=Tn((Ma/2))-(AK*(tj(u)-((Ma/2)-1)));
                                                                else
                                                                AK=10
                                                                end
                                                                end

 for v=1:length(Tn)              In diesem Schritt werden die unterschiedlichen Diffusionskoeffizienten
                                 berechnet.
  Dn(v)=D0Pb*exp(-E./(R*Tn(v)));
end

 t=linspace(0,tmax,Ma);          Damit die einzelnen Diffusionskoeffizienten nicht über interpretiert
                                 werden normiere ich die Laufzeit auf jeweils eine Millionen Jahre.
for x=1:length(Dn)
z(x)=Dn(x)*(tmax/Ma)
end

 Profile= zeros(1,100,Ma)          Um die Profile abzuspeichern muss ich zuerst leere Matrizen
                                   erstellen, die dann mit den Ergebnissen befüllt werden können.
for  i=1:length(t)

  X=erf((xb)/(2*sqrt(z(i))));     Hier berechne ich die Diffusionsprofile und befülle die leeren Matrizen
                                  damit ich später auf alle Zugriff habe.
  Profile(:,:,i)=Profile(:,:,i)+X

    hold on;
   end

    Profilenormiert=prod(Profile,3)
```

Damit habe ich jetzt eine Matrix, welche die Werte für eine Schnittlage genau durch den Mittelpunkt beinhaltet. Mit dieser Matrix kann ich allen möglichen Abständen eine Konzentration zuordnen, da ich einen sphärischen Körper habe und ich mit einer Schnittlage perfekt durch den Mittelpunkt alle eventuell auftretenden Punkte abgedeckt habe. Im dritten Teil ordne ich innerhalb der zufälligen Schnittlagen dem jeweiligen Abstand den richtigen Konzentrationswert zu.

Als erstes lade ich die vorher produzierten Daten. Zum einem die Abstände und Konzentrationen der perfekten Schnittlage durch den Mittelpunkt und zum anderen die Abstände der zufälligen gesuchten Schnittlage, welche noch keine konkreten Konzentrationen zugeordnet haben.

```
data=load("dmatrix_ab1.txt", "-ascii", 'xa', "X");
abstaende=load("dmatrix_ab1.1.txt", "-ascii","ab");
 gesuchterWert=(abstaende)*0.01 Da ich den Kreis auf eins normiert habe das Korn aber nur 1 mm
                                groß ist muss ich dies noch korrigieren
zeile1=data(1,:); data matrix wird in zwei Spaltenvektoren aufgeteilt (Abstand)
zeile2=data(2,:);  data matrix  wird in zwei Spaltenvektoren aufgeteilt (Konzentrationswert)
```

Daraufhin wird der erst größere Abstand gesucht und der dazugehörige Konzentrationswert zugeordnet.

```
for t=linspace(1,100,100)
    p{t} = find(zeile1>=gesuchterWert(t),1);
end
A = cell2mat(p);

for o=linspace(1,100,100)     hier suchen wir den Konzentrationswert
    y(o) = zeile2(A(o));
end


Dann wird der nächst kleinere Abstand gesucht und der da dazugehörige Konzentrationswert
for u=linspace(1,100,100)
    if A==1
      B(u)=A(u)
      x(u)=zeile2(B(u))
      else
     B(u)=A(u)-1;
    x(u)=zeile2(B(u));   hier wird der Konzentrationswert gesucht
end
    end
```

Da die Abstände nicht genau denen aus der perfekten Schnittlage entsprechen finde ich mithilfe einer Geraden, welche zwischen dem größeren und dem kleineren Abstand gespannt ist die dazugehörige Gleichung und kann mit Hilfe dieser und den gemessenen Abständen die wahren Konzentrationswerte der jeweiligen Abstände berechnen.

```
K=zeile1(B);  Abstand des kleineren Werts
G=zeile1(A);   Abstand des größeren Werts
for w=linspace(1,100,100)
m(w)=((y(w)-x(w))/(G(w)-K(w))); Steigung der geraden berechnen
end
for l=linspace(1,100,100)  % b der Geradengleichung berechnen
b(l)= y(l)-(m(l)*G(l));
end

for v=linspace(1,100,100)
    Konzentration(v)=m(v)*gesuchterWert(v)+b(v);  wahre Konzentration des gemessenen Abstands
End
```

Im vierten Teil bestimme ich die Alter der Abstände mit Hilfe der Uran/Blei bzw. Thorium/Blei Methode.

```
Altersbestimmung

Korrektur_Faktor=load("Konzentration.txt", "-ascii","gesuchterWert","Konzentration")
Zeit = 150*(10^6) % in Jahren
```

```
Ma=12
t1=12*10^6
t2=138*10^6
% in mol
U238_Menge_heute = 1
U235_Menge_heute = U238_Menge_heute/137.818
Th232_Menge_heute = 1

lambda38= 1.55125*(10^-10)  Für Uran 238
lambda35= 9.8485*(10^-10)  Für Uran 235
lambdaTh232= 4.933*10^-11   Für Thorium 232
```

Als erstes berechne ich die Mengen an Uran und Thorium, welche am Startpunkt(t0) herrschten.

```
U238_t0=U238_Menge_heute*exp(lambda38*Zeit)
U235_t0=U235_Menge_heute*exp(lambda35*Zeit)
Th232_t0=Th232_Menge_heute*exp(lambdaTh232*Zeit)
```

Mit diesen Werten kann ich nun die Blei Konzentrationen berechnen für die jeweiligen Jahresschritte bis zum Zeitpunkt t1.Der Zeitpunkt t1 ist der Zeitraum in dem die Diffusion stattfindet Diese werden dann in einer Matrix gespeichert.

```
for i=linspace(1,Ma,Ma)
Pb206_t1 = U238_t0*(1-exp(-lambda38*(i*10^6)))
Pb207_t1 = U235_t0*(1-exp(-lambda35*(i*10^6)))
Pb208_t1 = Th232_t0*(1-exp(-lambdaTh232*(i*10^6)))
Matrix_Pb206(i) = Pb206_t1
Matrix_Pb207(i) = Pb207_t1
Matrix_Pb208(i) = Pb208_t1
end;
```

Im nächsten Schritt nutze ich die bereits errechneten Diffusionsprofile und korrigiere die errechneten Bleikonzentrationen mit diesen.

```
for m=linspace(1,Ma,Ma)
Pb207_diffundiert_t1= [Matrix_Pb207(m)*(Profile(:,:,m))]
Pb206_diffundiert_t1= [Matrix_Pb206(m)*(Profile(:,:,m))]
Pb208_diffundiert_t1= [Matrix_Pb208(m)*(Profile(:,:,m))]
Matrix_Pb206_diffundiert_t1(:,:,m)=Pb206_diffundiert_t1
Matrix_Pb207_diffundiert_t1(:,:,m)=Pb207_diffundiert_t1
Matrix_Pb208_diffundiert_t1(:,:,m)=Pb208_diffundiert_t1
end
Pb206_diffundiert_gesamt=mean(Matrix_Pb206_diffundiert_t1,3)
Pb207_diffundiert_gesamt=mean(Matrix_Pb207_diffundiert_t1,3)
Pb208_diffundiert_gesamt=mean(Matrix_Pb208_diffundiert_t1,3)
```

Konzentration bestimmen von Zeitpunkt t1 bis t2 wobei Zeitpunkt t2 das aktuelle Jahr ist

```
U238_t1=U238_Menge_heute*exp(lambda38*(t2))
U235_t1=U235_Menge_heute*exp(lambda35*(t2))
Th232_t1=Th232_Menge_heute*exp(lambdaTh232*(t2))
```

Zum Abschluss muss ich noch alles zusammenaddieren damit ich den gesamten Zeitraum abgedeckt habe.

```
Pb206_t2=U238_t1*(1-exp(-lambda38*(t2)))
Pb206_gesamt=Pb206_diffundiert_gesamt+Pb206_t2

Pb207_t2=U235_t1*(1-exp(-lambda35*(t2)))
Pb207_gesamt=Pb207_diffundiert_gesamt+Pb207_t2

Pb208_t2=Th232_t1*(1-exp(-lambdaTh232*(t2)))
Pb208_gesamt=Pb208_diffundiert_gesamt+Pb208_t2
```

Im letzten Schritt berechne ich die jeweiligen Alter zu den jeweiligen Abständen.

```
Alter_Uran38_Blei206=(1/lambda38)*(log((1+(Pb206_gesamt)/U238_Menge_heute)))
```

```
Alter_Uran35_Blei207=(1/lambda35)*(log((1+(Pb207_gesamt)/U235_Menge_heute)))

Alter_Thorium232_Blei208=(1/lambdaTh232)*(log((1+(Pb208_gesamt)/Th232_Menge_heute)))
```

Da ich auch noch den Einfluss von gewöhnlichem Blei zeigen will muss ich dies natürlich auch noch in die Gleichung mit einbringen. Dafür verwende ich im Prinzip dasselbe Skript lediglich mit einem kleinen Zusatz. Ich berechne mir die jeweilige Menge an gewöhnlichem Blei und addiere sie zu meinem bereits vorhanden Blei hinzu.

```
Pb206c=U235_Menge_heute/100
Pb207c=(Pb206c/18)*15
Pb208c=(Pb206c/18)*30
for i=linspace(1,Ma,Ma)
Pb206_t1 = U238_t0*(1-exp(-lambda38*(i*10^6)))
Pb207_t1 = U235_t0*(1-exp(-lambda35*(i*10^6)))
Pb208_t1 = Th232_t0*(1-exp(-lambdaTh232*(i*10^6)))
Matrix_Pb206(i) = Pb206_t1+Pb206c
Matrix_Pb207(i) = Pb207_t1+Pb207c
Matrix_Pb208(i) = Pb208_t1+Pb208c
end;
```

Die daraus resultierenden Daten kann man am besten In Diagrammen interpretieren. Dafür habe ich das Programm IsoplotR genutzt.

Mit Hilfe der gewonnen Ergebnisse hoffe ich ein allgemeines Problem bei der Altersbestimmung bzw. der Erstellung eines Alterprofils durch einen Kristall bei einer Dünschliffanalyse zu lösen. Beim Anfertigen von Dünnschliffen hat man keinen Einfluss auf die Lage der einzelnen Kristalle, dadurch erhält man immer nur zufällige Schnittlagen und nur in den aller seltensten Fällen eine durch den Mittelpunkt und selbst wenn dieser seltene Fall eintrifft kann man sich nie sicher sein ob man den Mittelpunkt getroffen hat, da der Rest des Kristalls verborgen bleibt und somit auch die Form. Wenn man nun mit Hilfe von vielen zufälligen Schnittlagen ein gesamtes Profil durch den Kristall erstellen könnte wäre das ein riesiger Schritt bei der Altersanalyse von Dünnschliffen.

Ergebnisse

Octave

Bei den präsentierten Ergebnissen wurden überall die gleichen Randbedingungen festgelegt. Das Korn hat einen Durchmesser von 1mm, die Abkühlung erfolgt über einen Zeitraum von 12 Millionen Jahren, die Startemperatur liegt bei 800°C und als Anfangswert für die Bleidiffusion wurde D0Pb=1.27*10^-8(Cherniak et al) gewählt. Außerdem habe ich die Aktivierungsenergie auf 231000 Joule pro Mol festgelegt (Cherniak et al) und die Gaskonstante mit dem allseits bekannten Betrag von 8.3144598 angegeben.

Teil 1

In der unten anstehenden Abbildung kann man das zu einem Kreis vereinfachten Mineralkorn sehen, welches von zufälligen Schnittlagen durchstoßen wird. Wie man sehen kann sind wir in der Lage jede beliebige Schnittlage darzustellen.

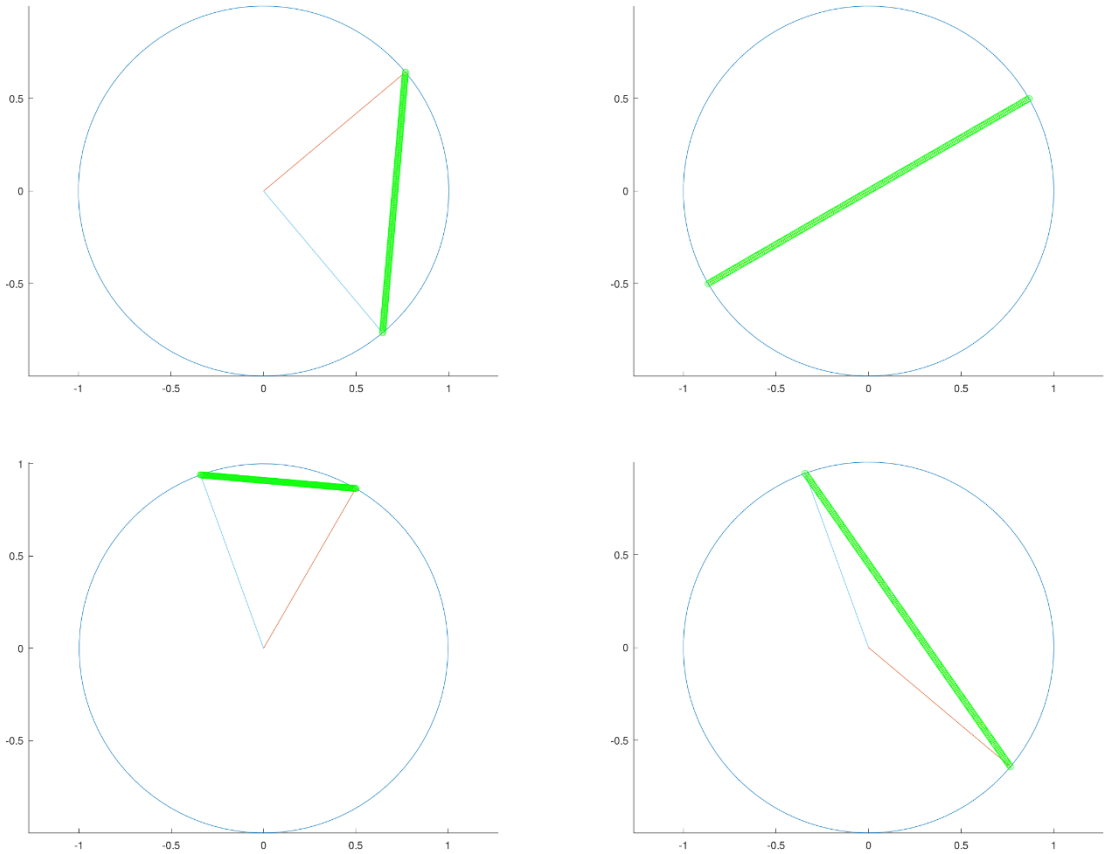
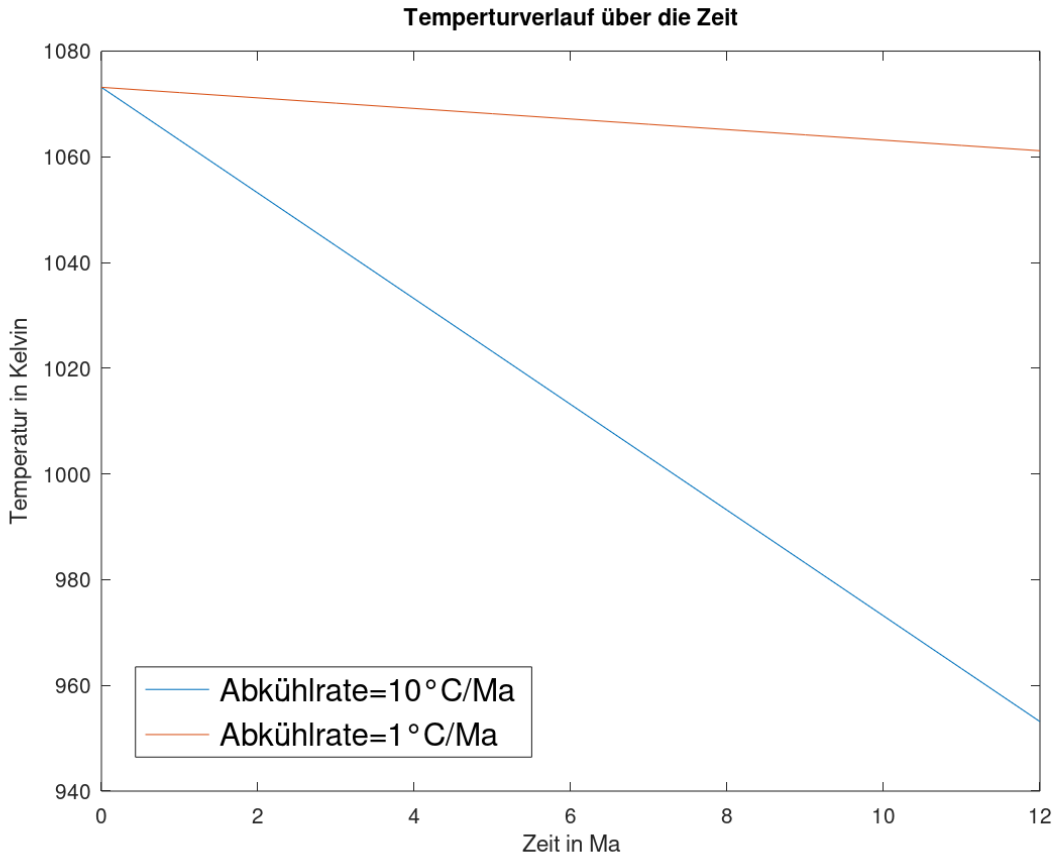


Abb.5 Mineralkorn mit zufälligen Schnittlagen

Teil 2

Bei der Simulation der perfekten Schnittlage, die durch den Mittelpunkt des Mineralkorns verläuft, habe ich zusätzlich zu den Diffusionsprofil auch den Temperaturverlauf genauso wie den Verlauf des Diffusionskoeffizienten erstellt. Dies habe ich jeweils für die drei unterschiedlichen Abkühlungsarten gemacht und unten dargestellt. Als erstes habe ich die Graphen, welche die konstante Abkühlung beschreiben, dargestellt.



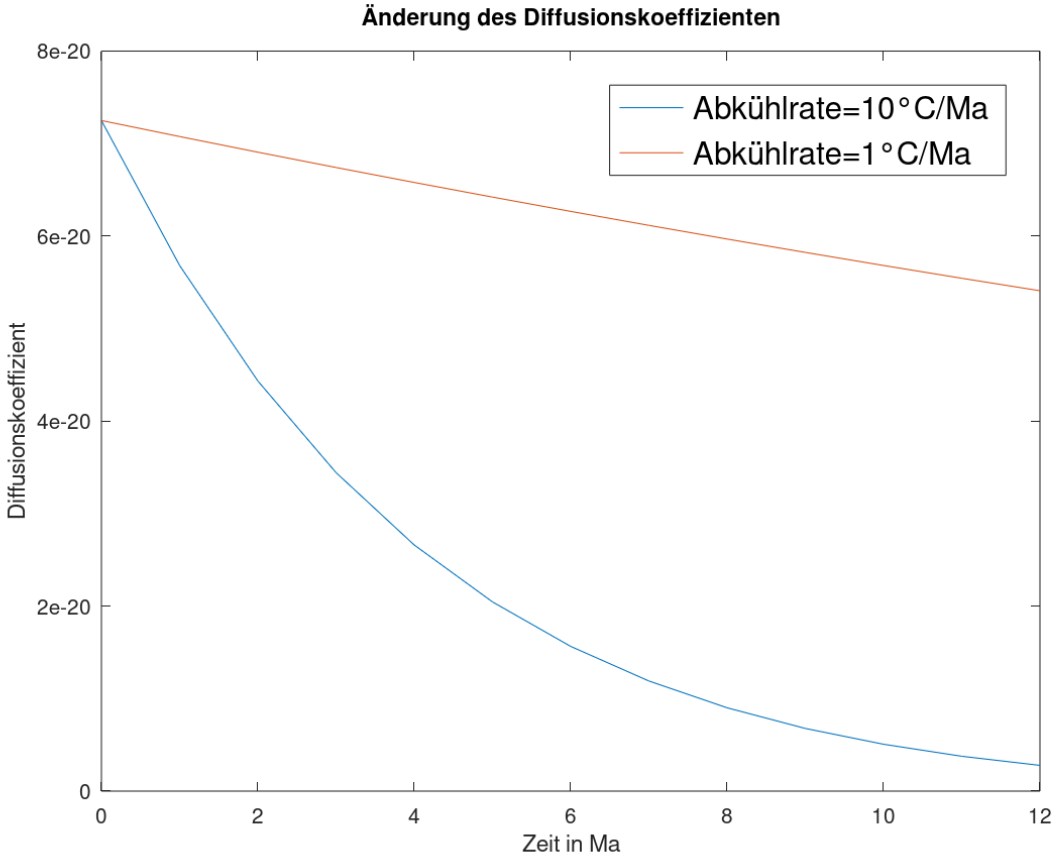
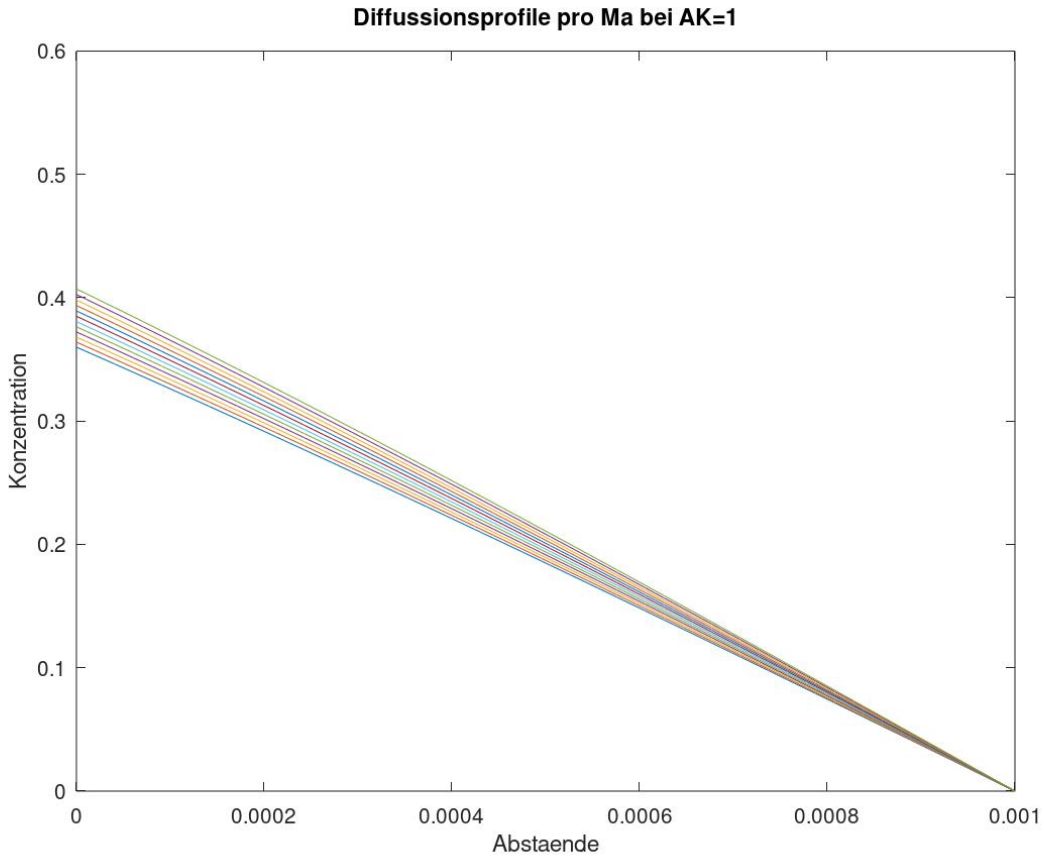


Abb.6 oben Temperaturverlauf, unten Änderung des Diffusionskoeffizienten bei konstanter Abkühlung



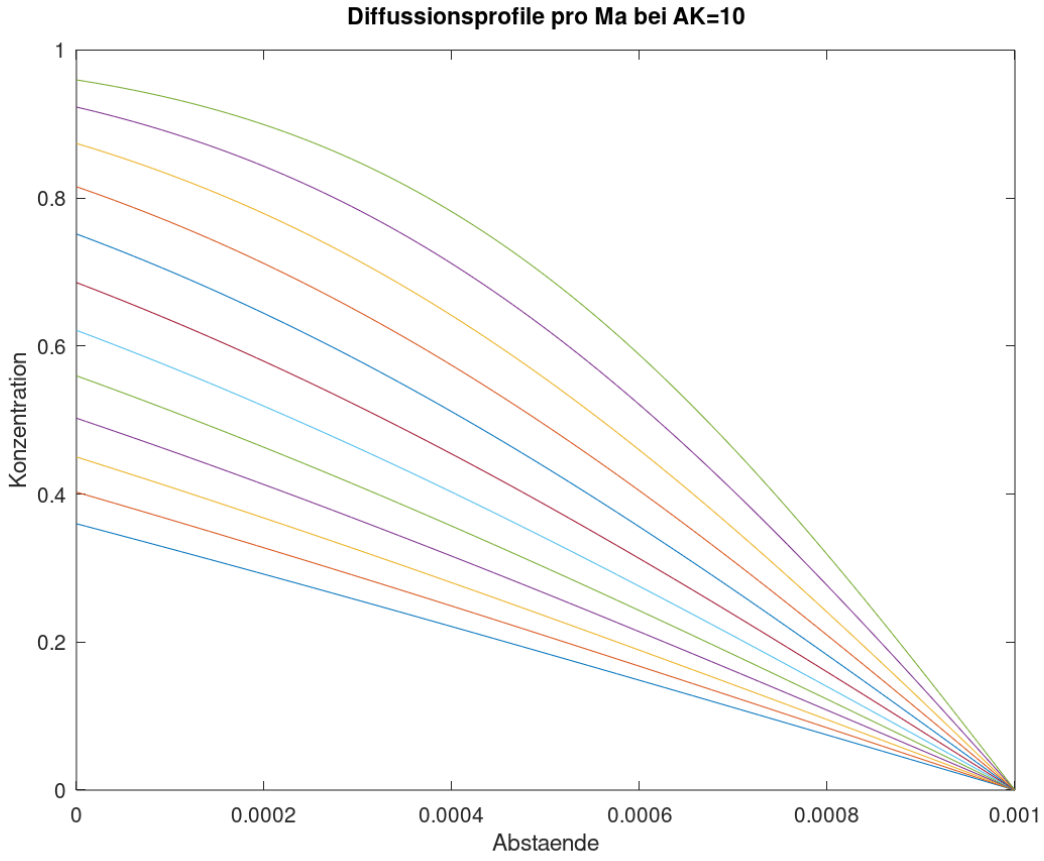
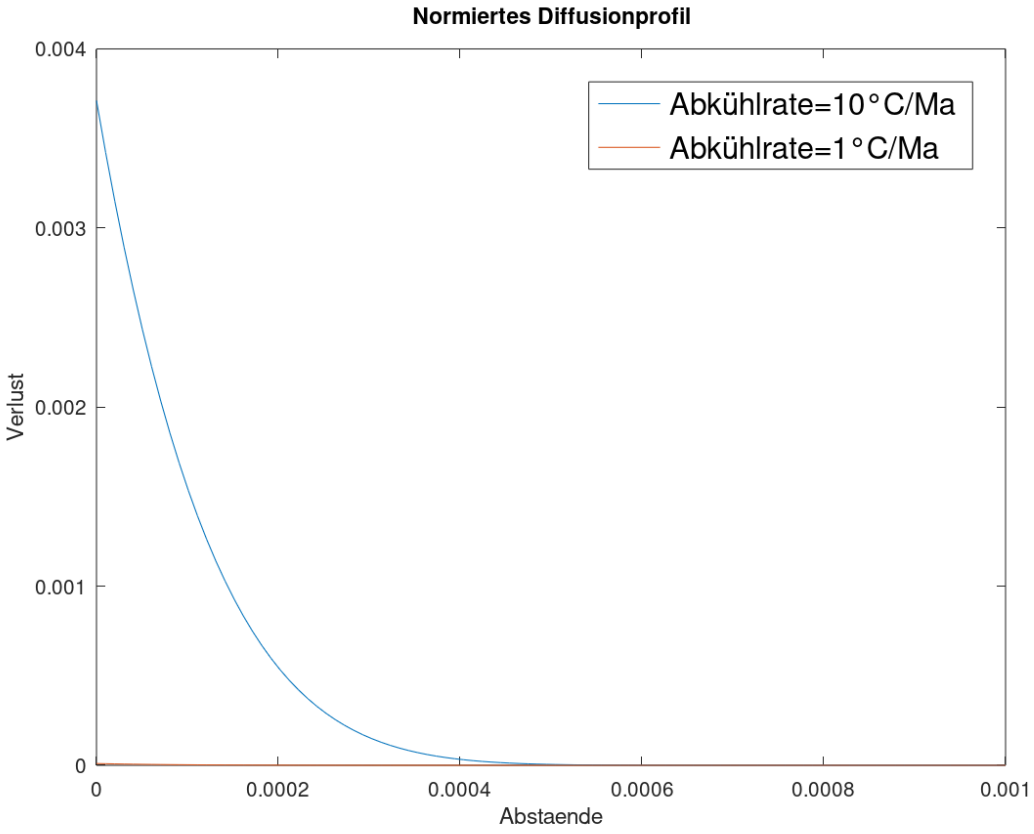


Abb.7 oben Diffusionsprofile für Ak=1 und unten Diffusionsprofile für Ak=10 bei konstanter Abkühlung



Als nächstes kommen die Graphen für die exponentielle Abkühlgeschichte.

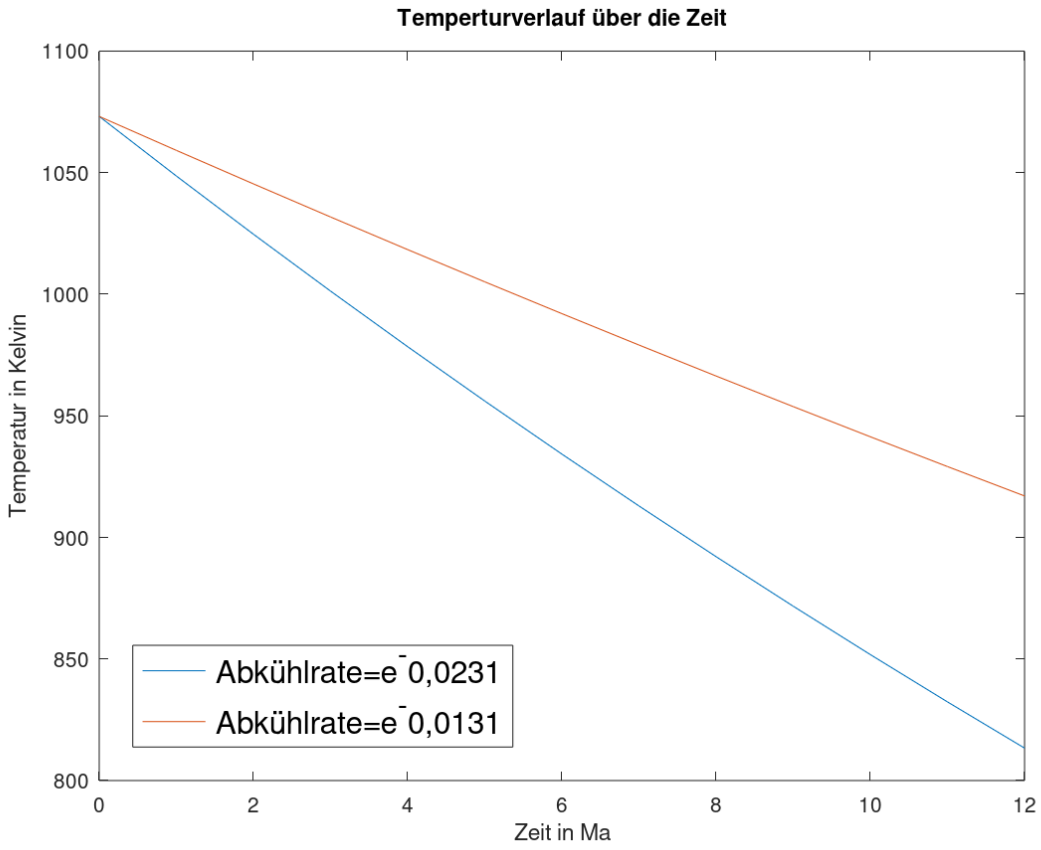
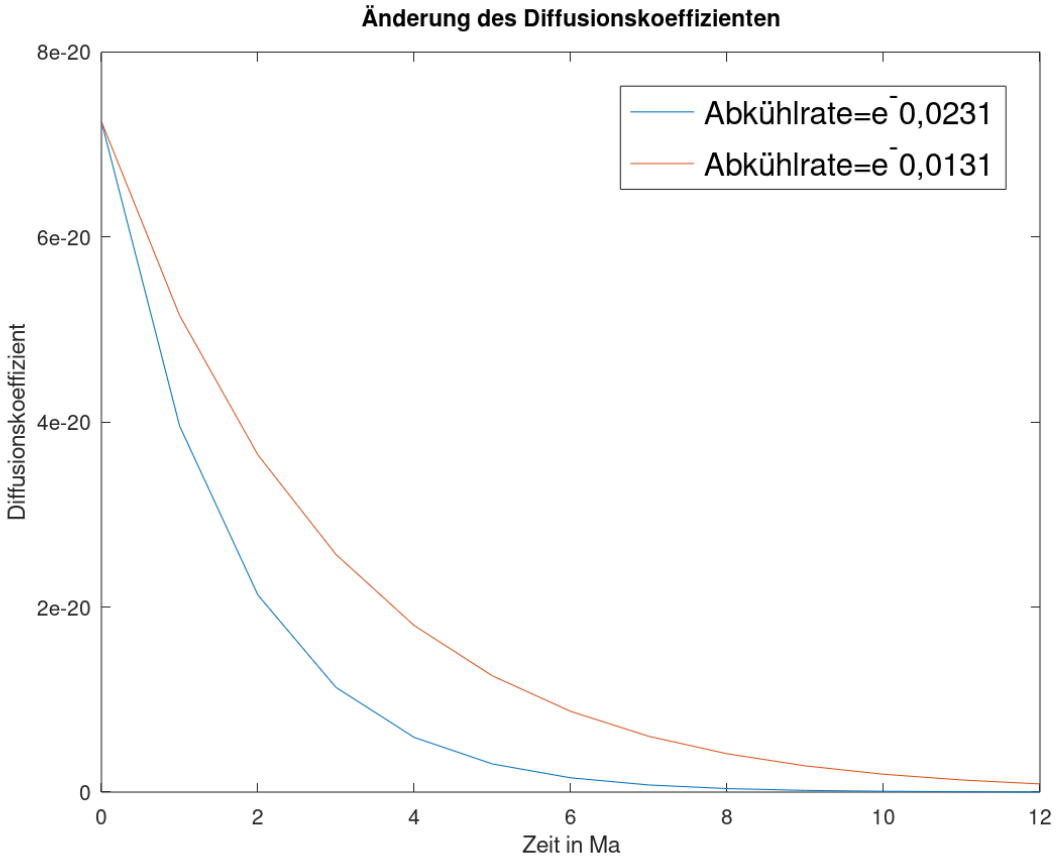


Abb.8 oben normiertes Profil bei kontanter Abkühlung unten Temperaturverlauf bei exponentieller

Abkühlung



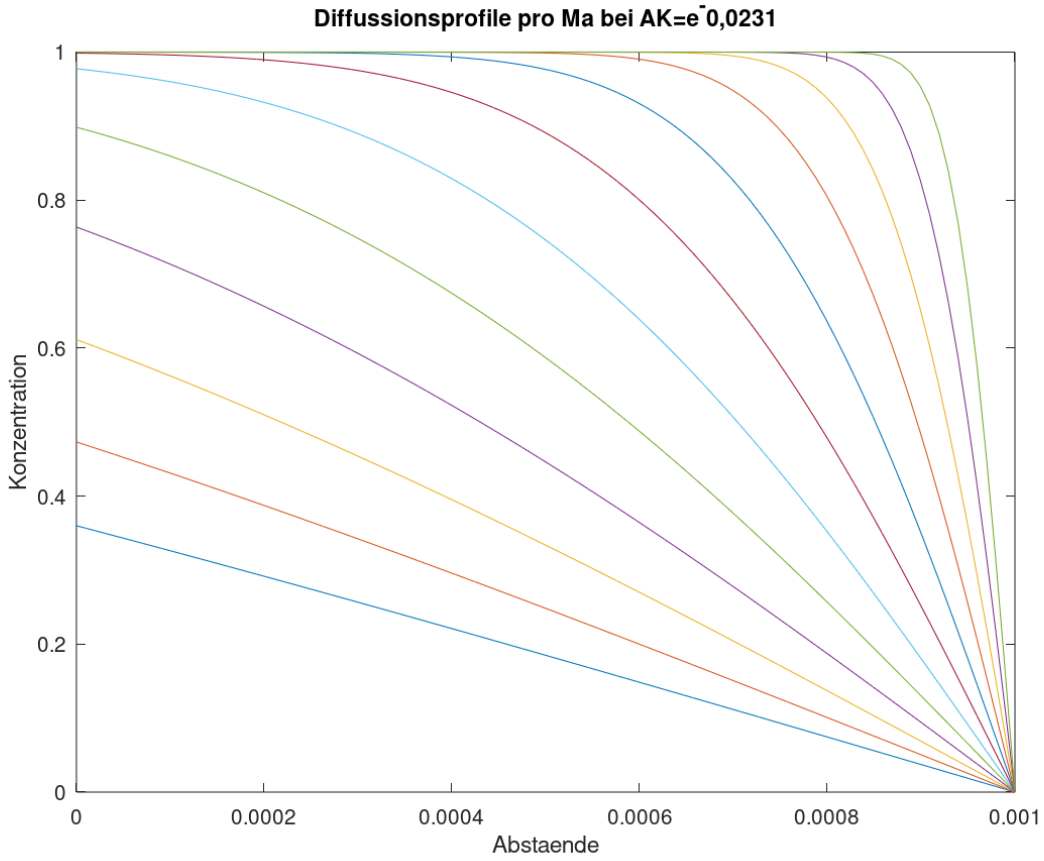
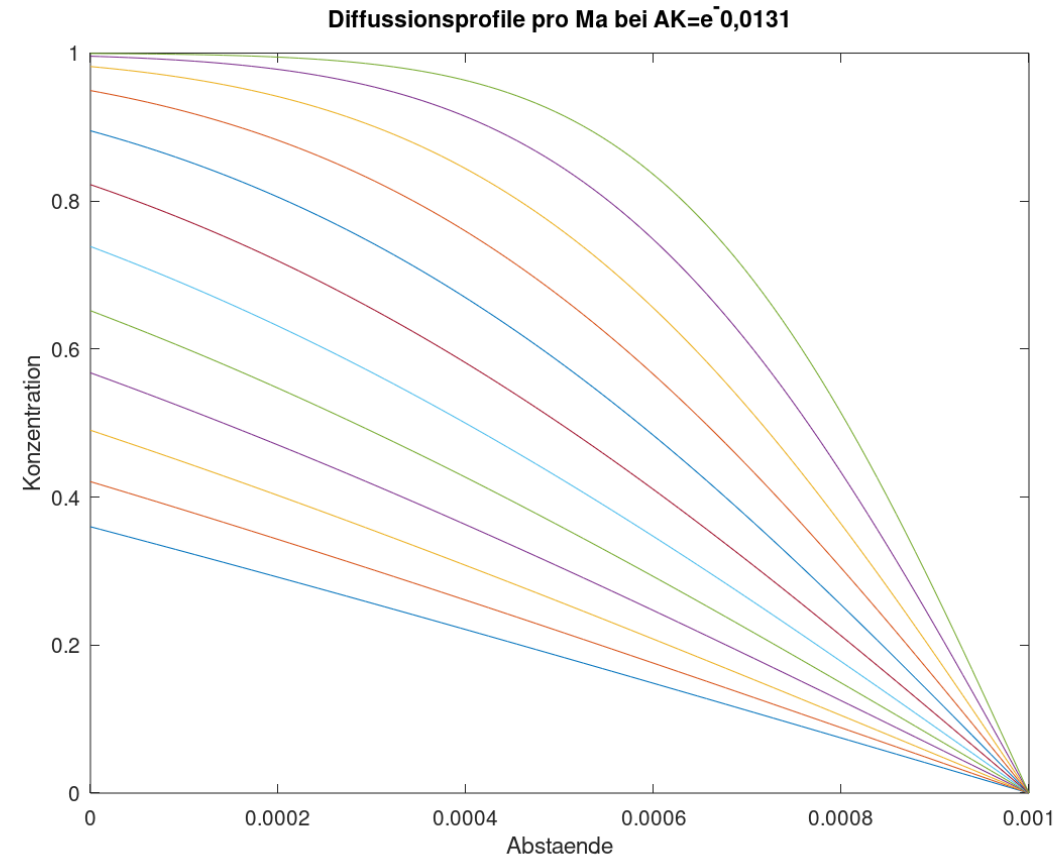


Abb.9 oben Änderung Diffusionkoeffizienten bei exp. Abkühlung unten Diffusionsprofile für Ak=$e^{-0,0231}$



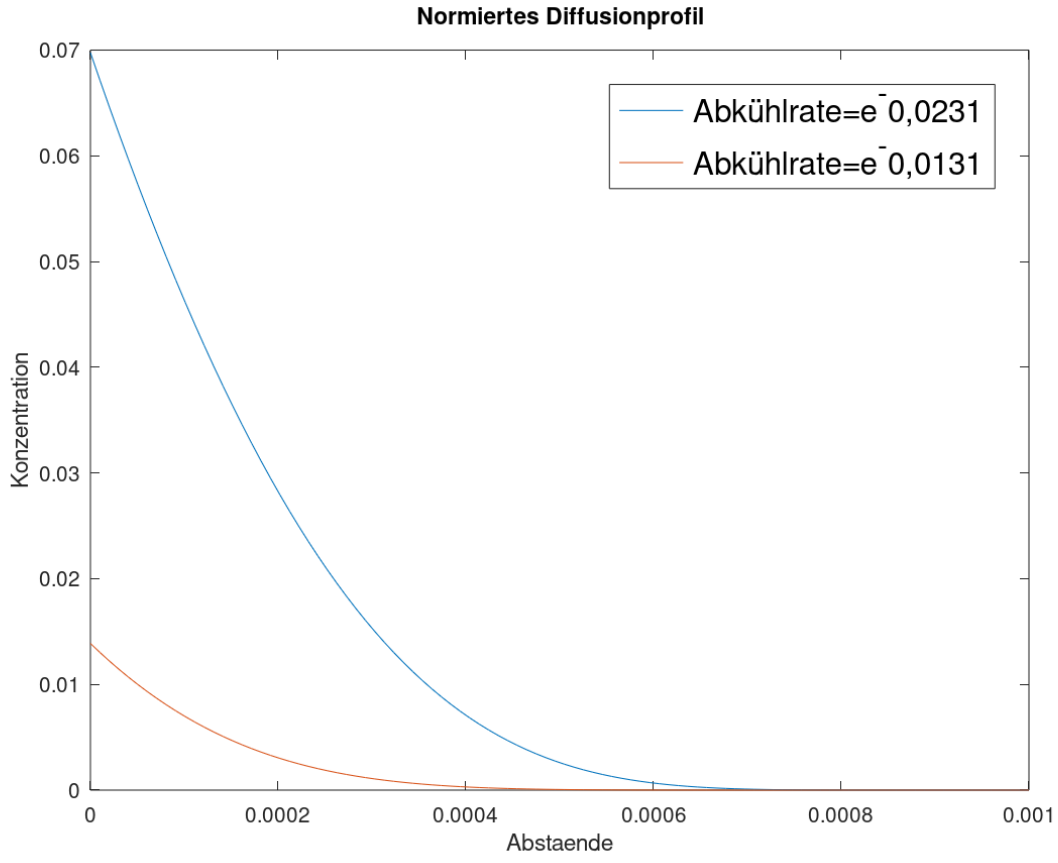


Abb. 10 oben Diffusionsprofile für Ak=$e^{-0,0131}$ unten normierte Profile bei exponentieller Abkühlung

Als letztes die Graphen für die Abkühlgeschichte mit einem kurzen Aufheizungsevent.

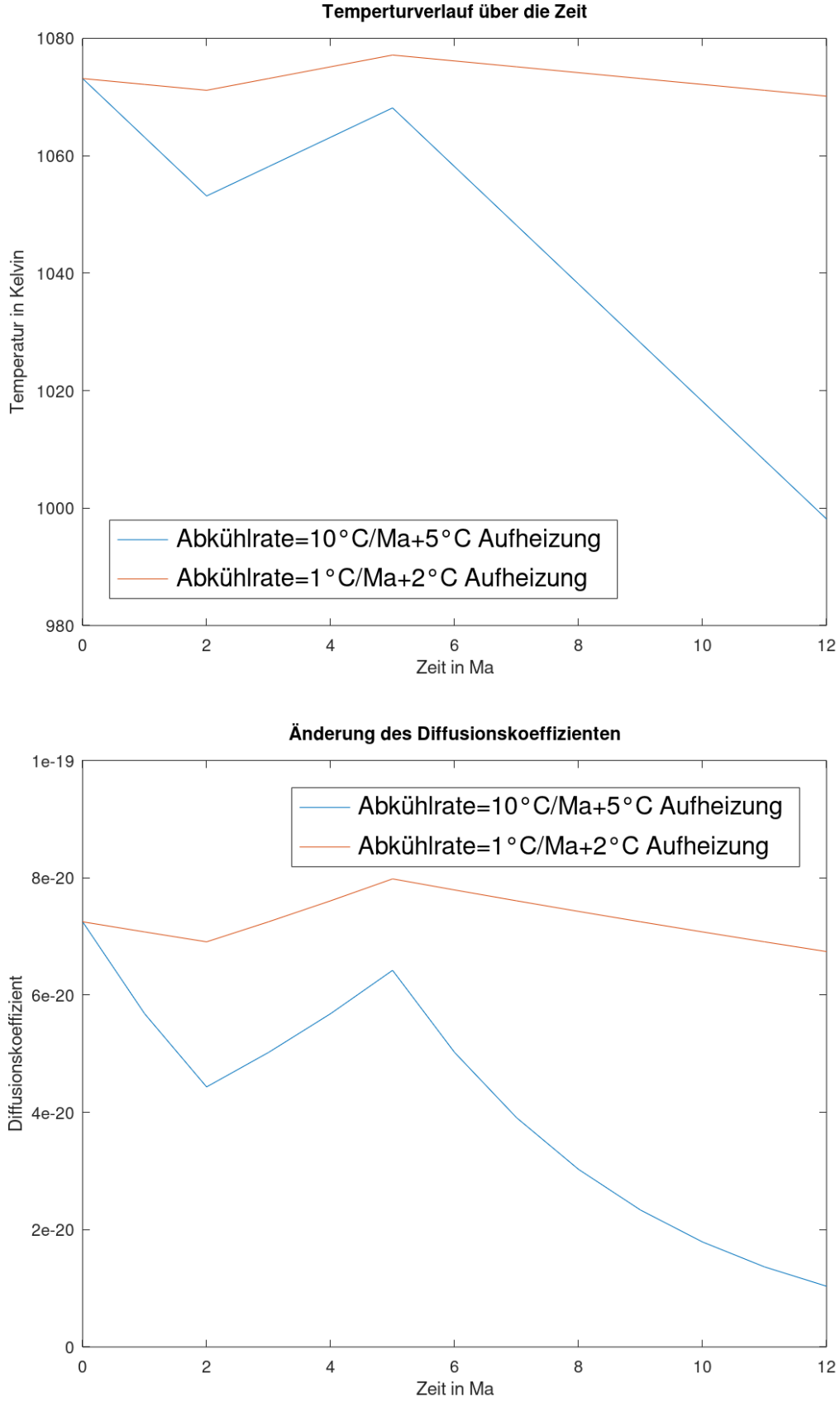
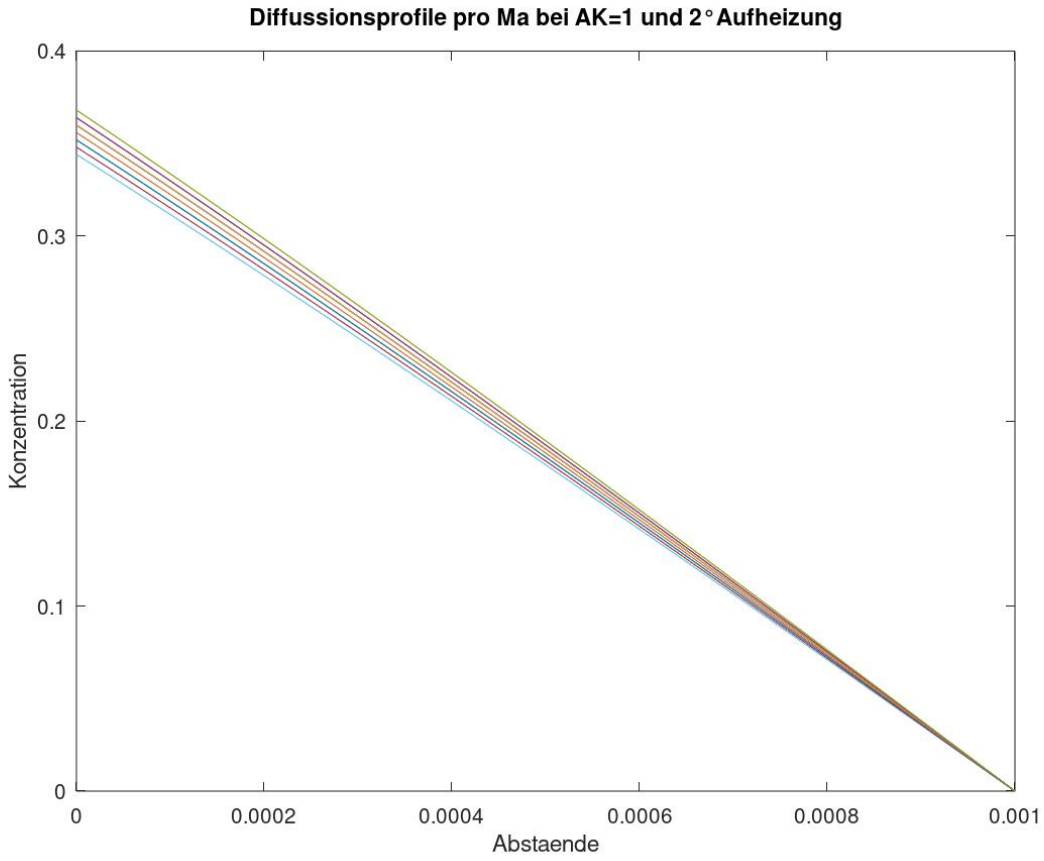


Abb.11 oben Temperaturverlauf unten Änderung Diffusionskoeffizenten mit Aufheizungsevent



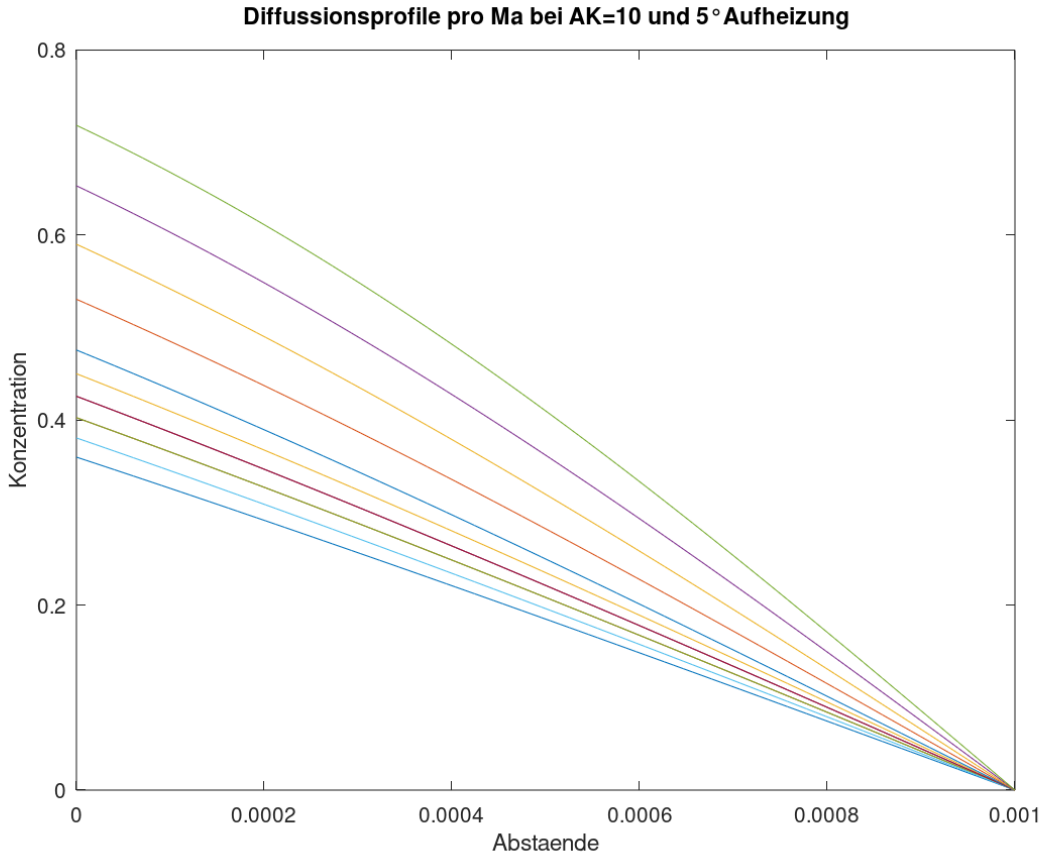


Abb.12 oben Diffusionsprofile für Ak=1 und Aufheizung =2° unten Diffusionsprofile Für Ak=10 und Aufheizung =5°

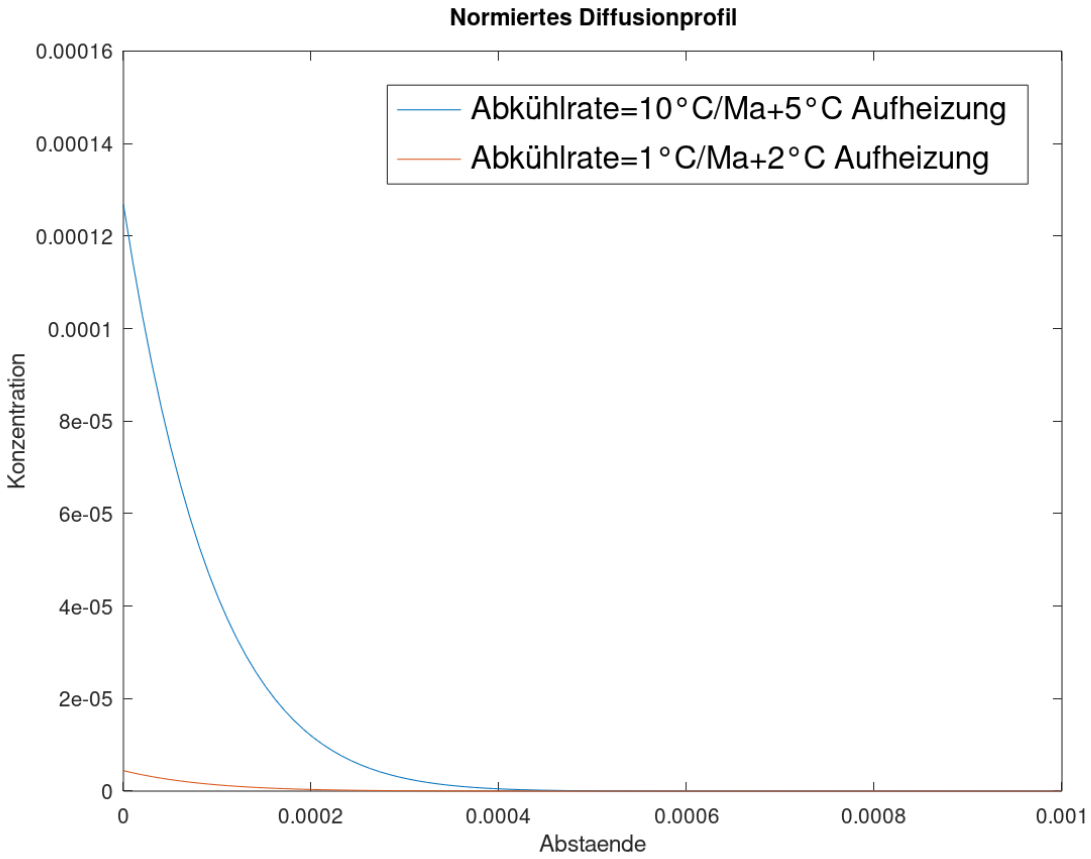


Abb.13 normierte Diffusionsprofile für eine konstante Abkühlung mit einem Aufheizungsevent

Teil 3

Im dritten Teil habe ich mithilfe der im vorherigen Teil produzierten Daten Diffusionsprofile für eine zufällige Schnittlage erstellt und in Form eines Graphen visualisiert.

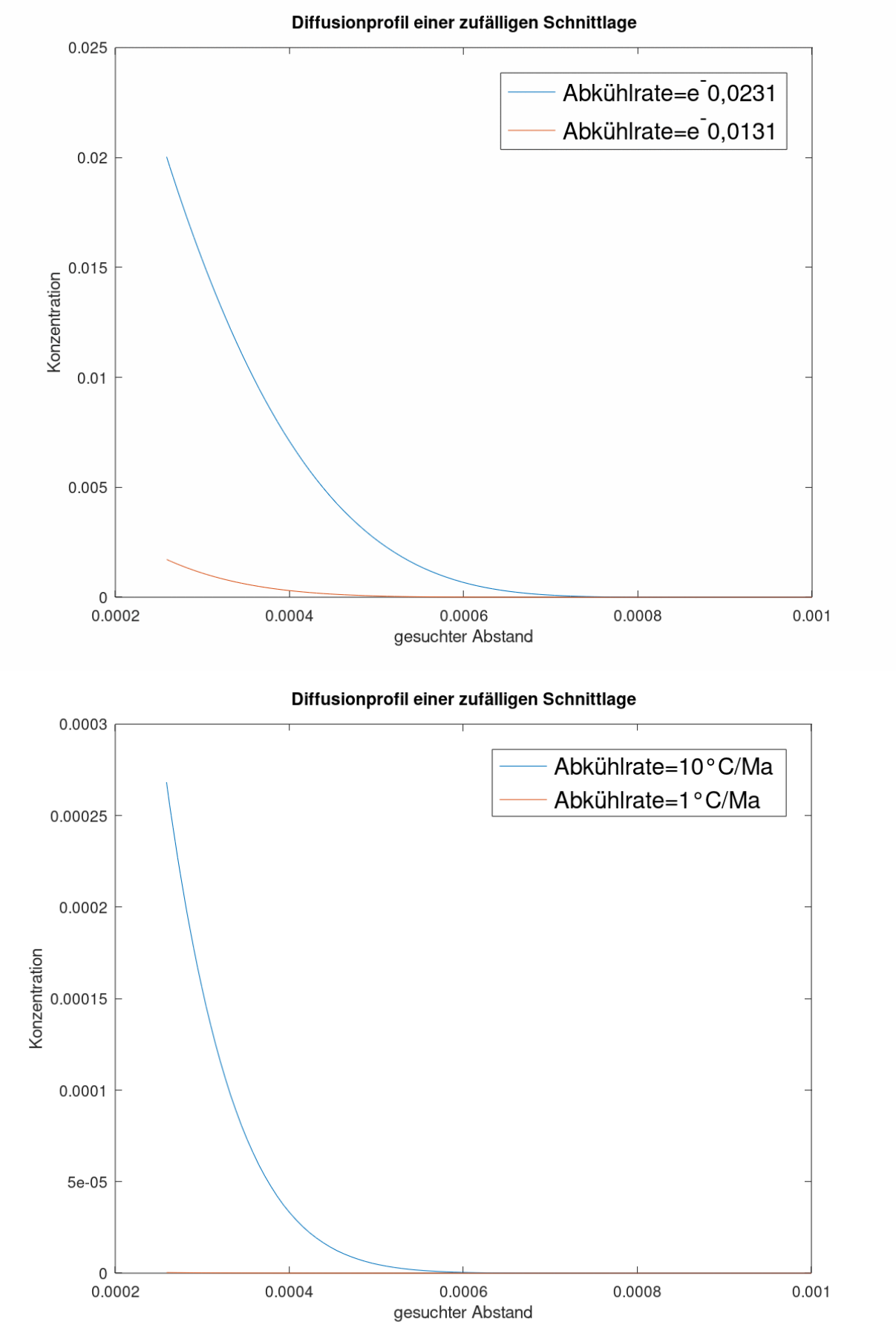


Abb.14 oben Verlauf bei exponentieller Abkühlung unten Verlauf bei konstanter Abkühlung

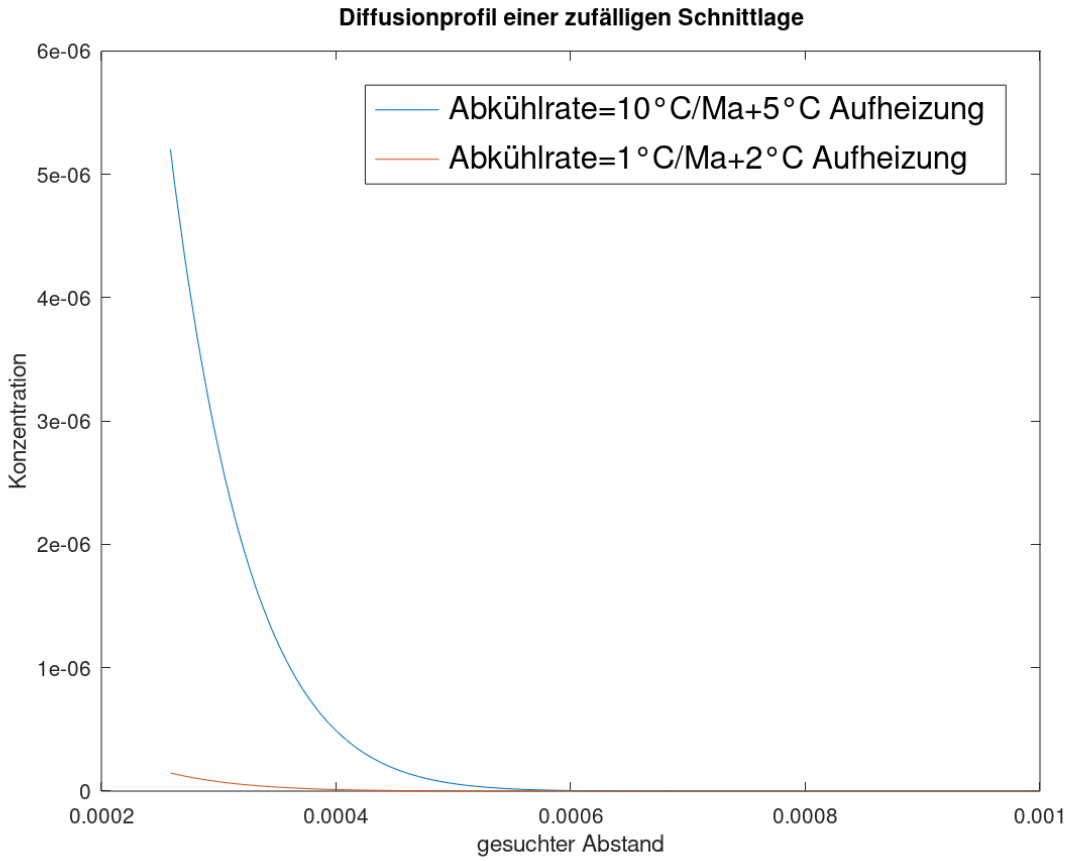


Abb.15 Verlauf bei konstanter Abkühlung und einem Aufheizungsevent

Teil 4.1

Beim vierten und letzten Teil unseres Octave Skriptes habe ich die Alter bestimmt. Dabei habe ich drei verschiedene Alter berechnet zum einen $Uran^{238}/Blei^{206}$ als auch $Uran^{235}/Blei^{207}$ und zum anderen $Thorium^{232}/Blei^{208}$. Die heutige $Uran^{238}$ und $Thorium^{232}$ Menge habe ich auf ein Mol festgelegt und dem entsprechend die $Uran^{235}$ Menge auf ein $\frac{1}{137,818}$ Mol. Als Zerfallsraten habe ich für $Uran^{238}$ ein Lambda von $1.55125*10^{-10}$ für $Uran^{235}$ ein Lambda von $9.8485*10^{-10}$ und für $Thorium^{232}$ ein Lambda von $4.933*10^{-11}$. Aus den heute gemessenen Stoffmengen und den angenommenen Zerfallsraten kann man mit Hilfe dieser Formel „StoffXY_t0=StoffXY_heute*exp(lambda_StoffXY*Zeit)“, welche auch oben im Skript zu finden ist ,die ursprüngliche Menge der jeweiligen Isotope zurückrechnen. Die gesamte Laufzeit beläuft sich auf 150 Millionen Jahre wobei lediglich 12 Millionen von dem Diffusionsereignis betroffen sind. Um die Konzentration des vorhandenen Bleis zu einem bestimmten Zeitpunkt zu errechnen benötigt man lediglich die heutige Uran Menge, da aus dem jeweiligen Uran Isotops nur ein Atom des dazugehörigen Blei Isotops entstehen kann. Dadurch kann man mit der Zerfallskonstanten und der verstrichenen Zeit die Blei Konzentrationen berechnen. Dies ist allerdings lediglich der Fall, wenn man davon ausgeht das alles Blei welches vorhanden ist nur durch den radioaktiven Zerfall von Uran angereichert wurde. Um diesen Zusammenhang besser zu verstehen hilft es die dazugehörige Formel anzuschauen. Dies ist die Formel für das Beispiel von $Blei^{206}$:

$$Pb^{206}_t1 = U^{238}_t0 * (1 - e^{(-\lambda U^{238} * (Zeit * 10^6))})$$

Diese Formel gilt auch für die andren Isotope allerdings mit den jeweiligen Zerfallskonstanten und den richtigen Mutter-, Tochterisotopen. Für die Berechnung der jeweiligen Alter habe ich die unten aufgeführten Formeln verwendet:

Uran^{238}/Blei^{206}	(1/lambdaUran38)*(log((1+(Pb206_gesamt)/U238_Menge_heute)))
Uran^{235}/Blei^{207}	(1/lambdaUran35)*(log((1+(Pb207_gesamt)/U235_Menge_heute)))
Thorium^{232}/Blei^{208}	(1/lambdaTh232)*(log((1+(Pb208_gesamt)/Th232_Menge_heute)))

Wie bereits davor wurden die drei unterschiedlichen Abkühlgeschichten durchgespielt. In den nächsten Abbildungen werden die Ergebnisse dieser präsentiert. Als erstes starten wir wieder mit der konstanten Abkühlung.

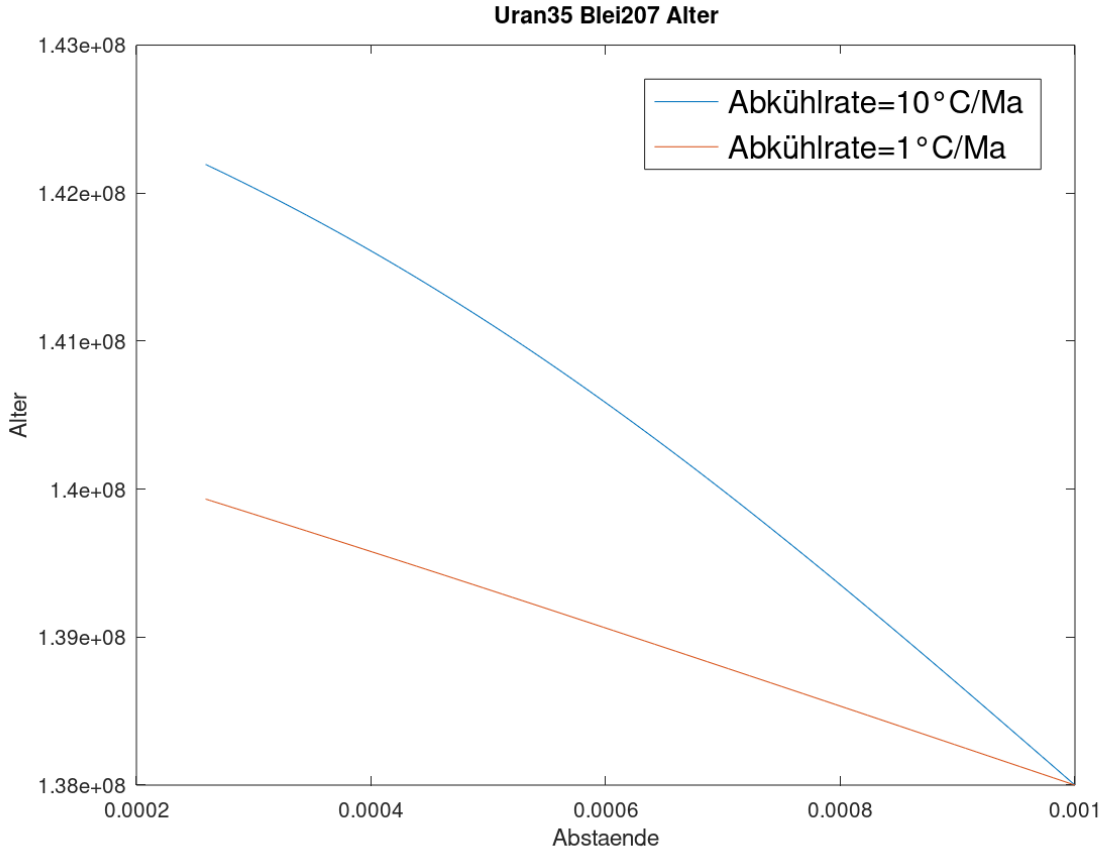
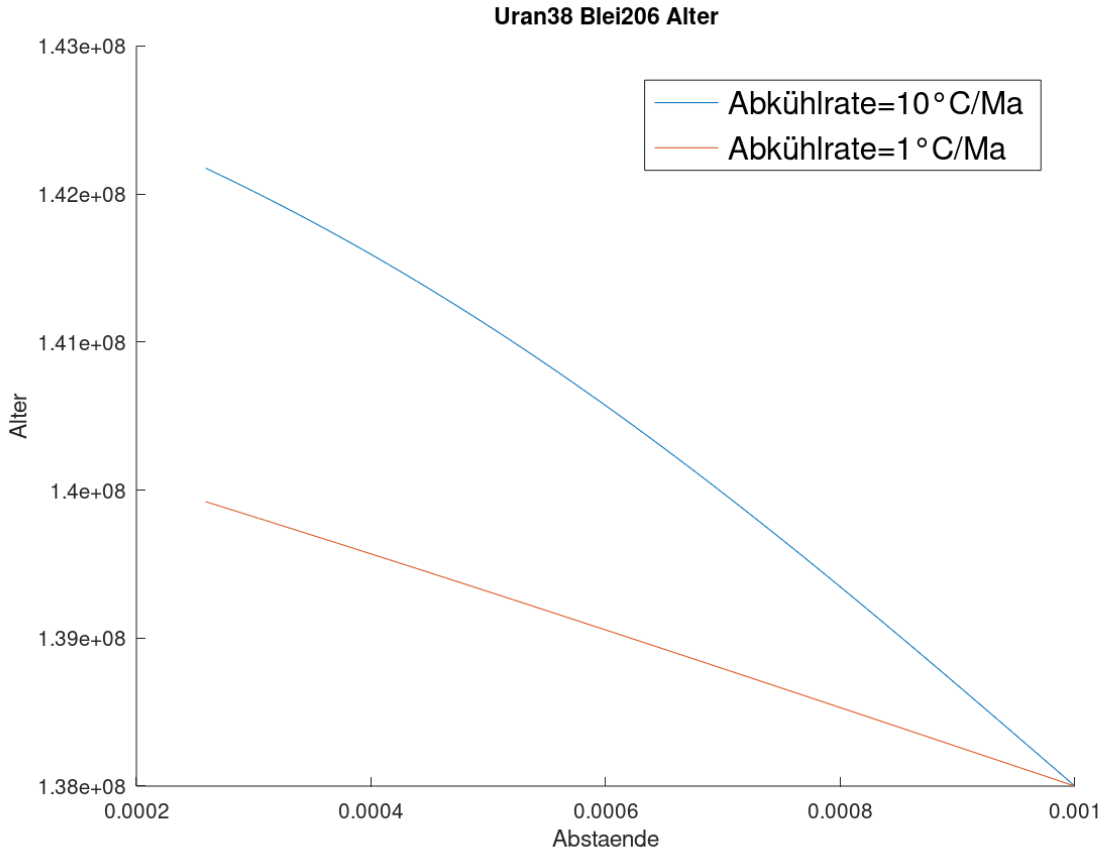


Abb.16 Altersprofile bei konstanter Abkühlung für Uran 35 Blei 207



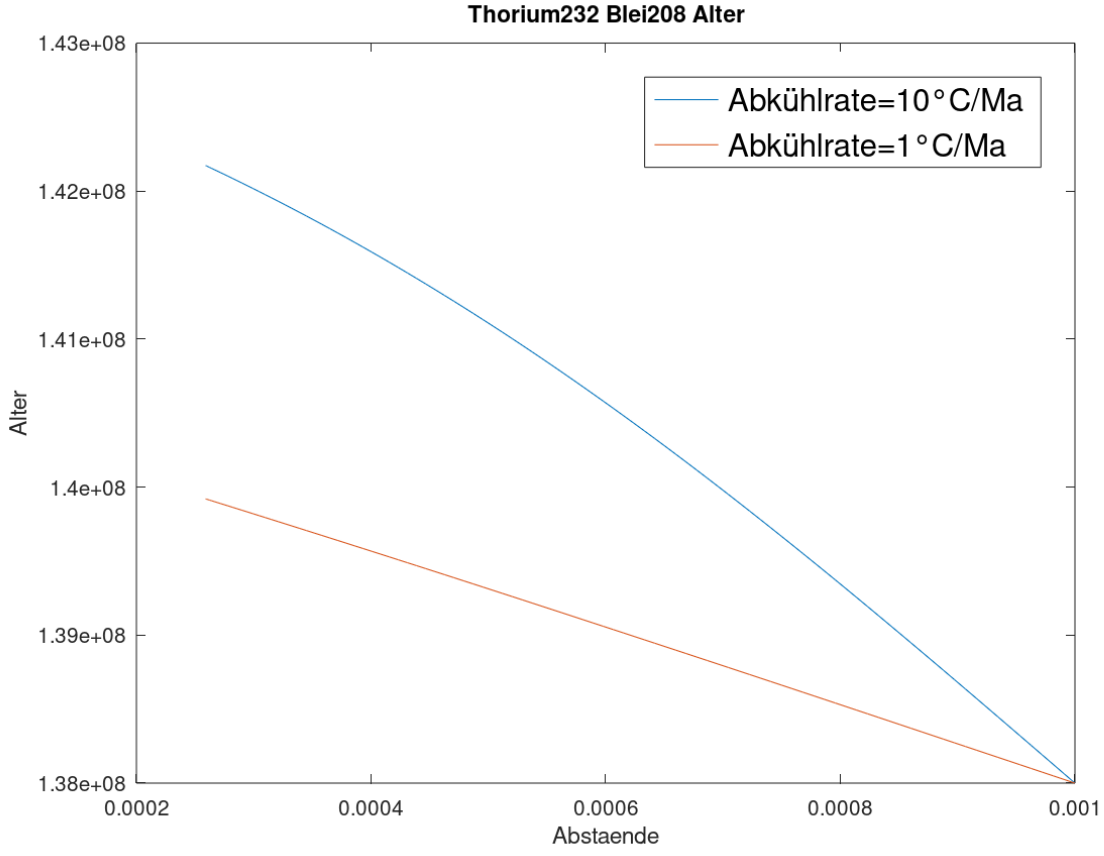


Abb. 17 Altersprofile bei konstanten Abkühlung oben:Uran38 und Blei206/ unten:Thorium232 Blei208

Im nächsten Abschnitt stelle ich die Altersprofile für die exponentielle Abkühlung dar.

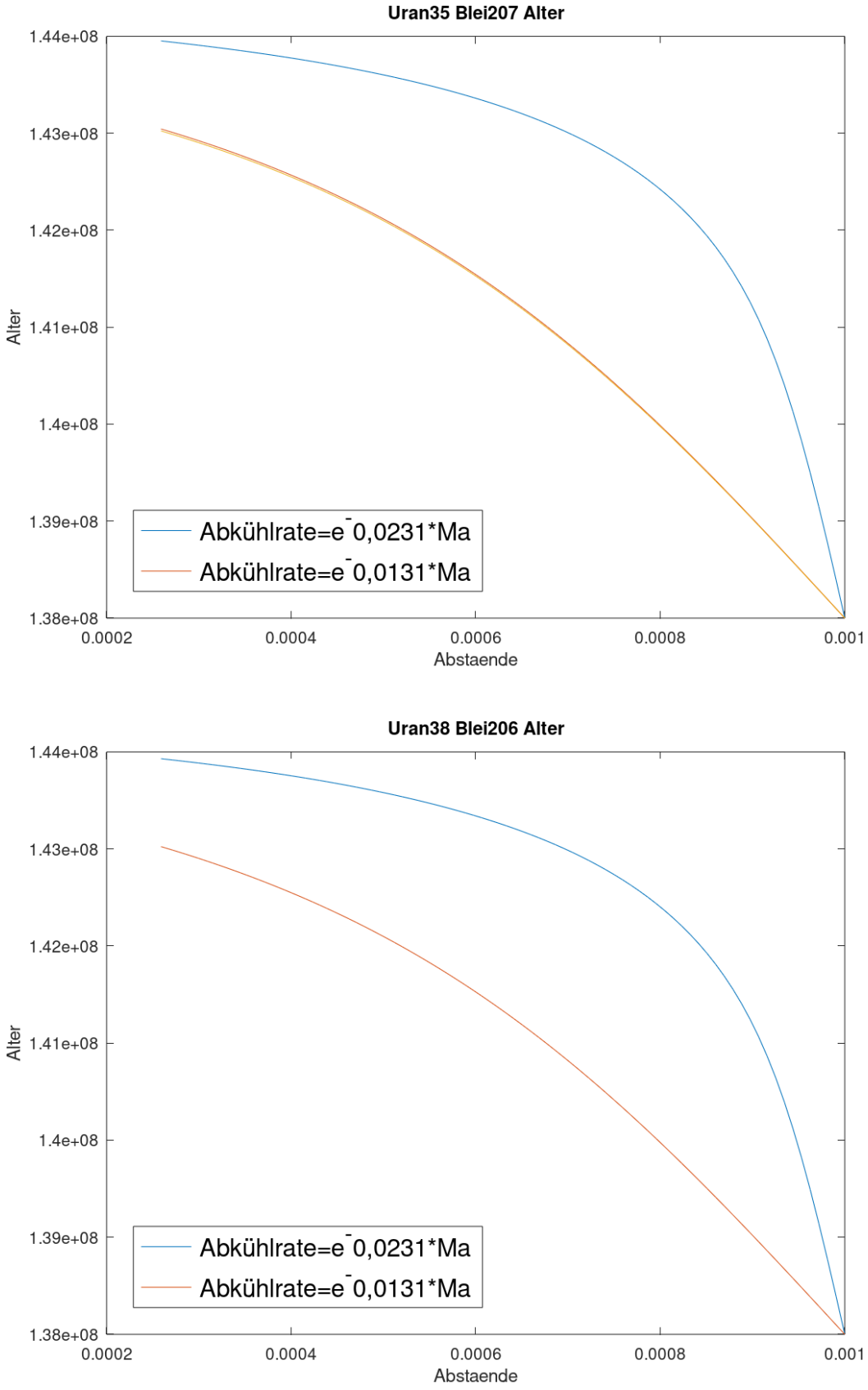


Abb.18 Altersprofile bei exponentieller Abkühlung oben: Uran35/Blei207 unten: Uran38/Blei206

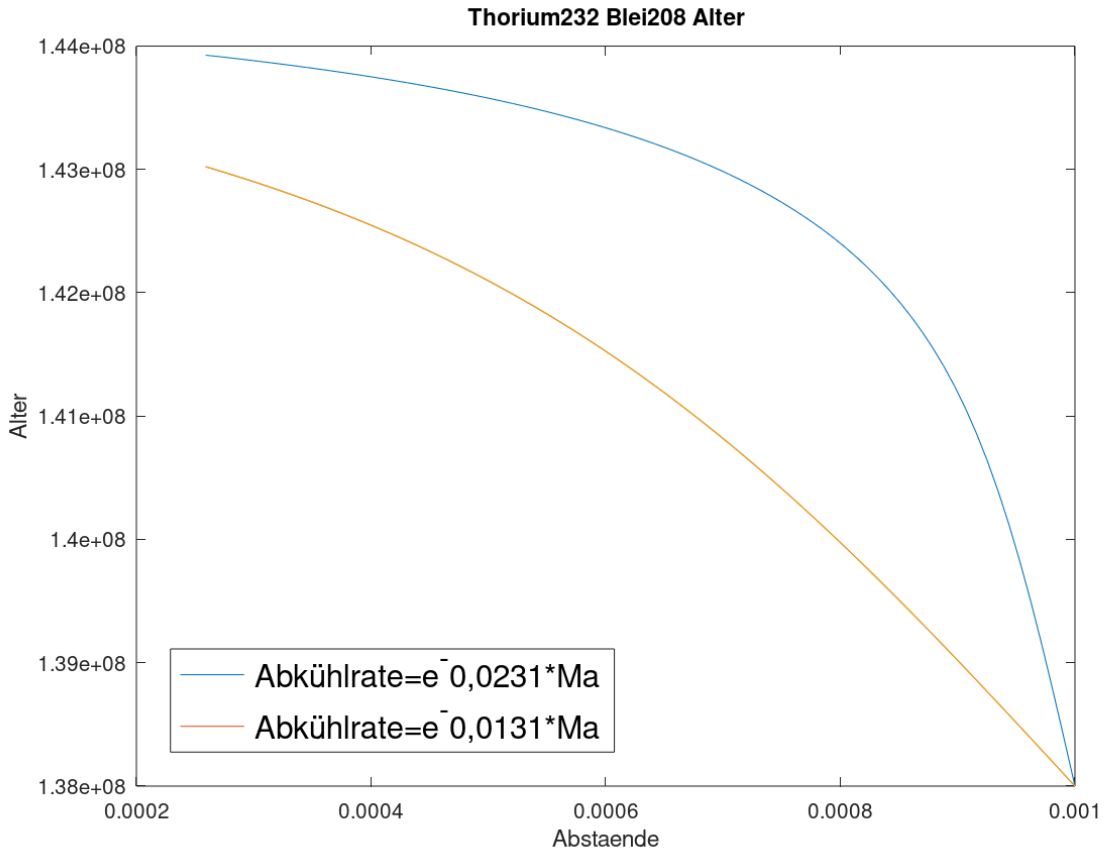
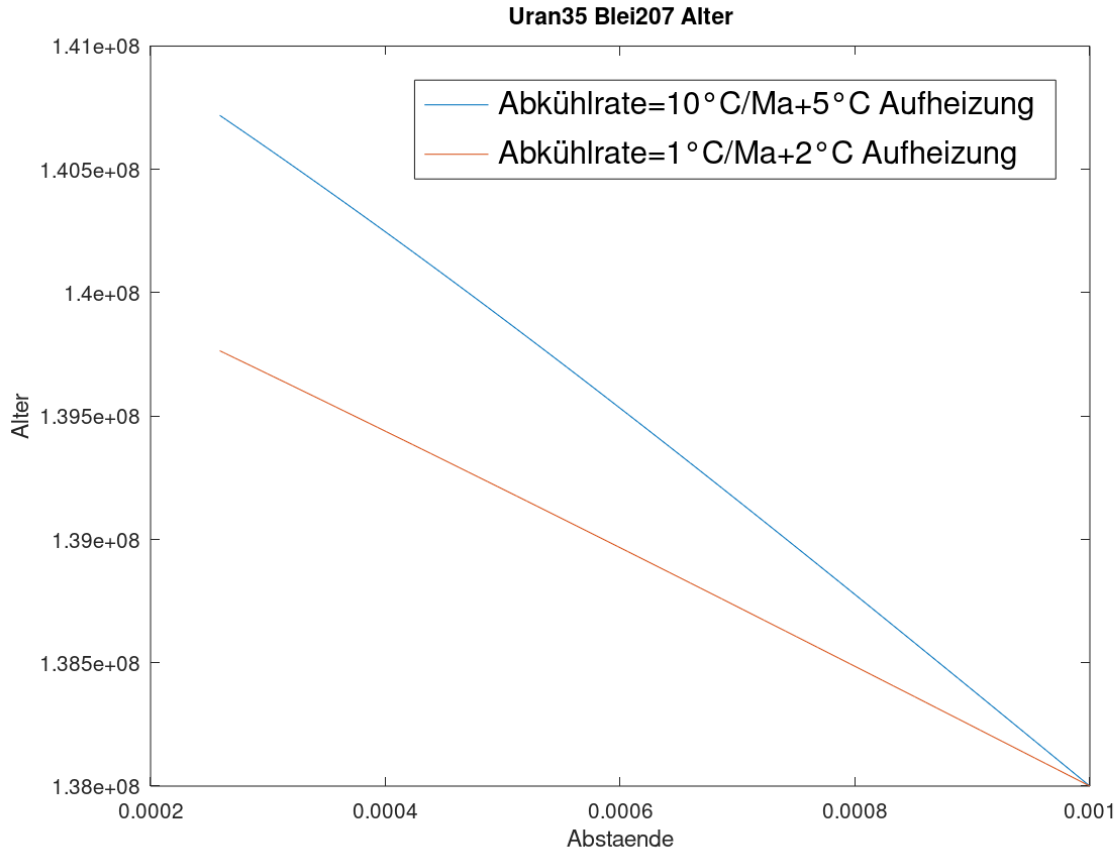


Abb.19 Altersprofile bei exponentieller Abkühlung für Thorium232/Blei208

Als letztes zeige ich die Altersprofile für das Mineralkorn mit konstanter Abkühlung und einem Aufheizungsevent.



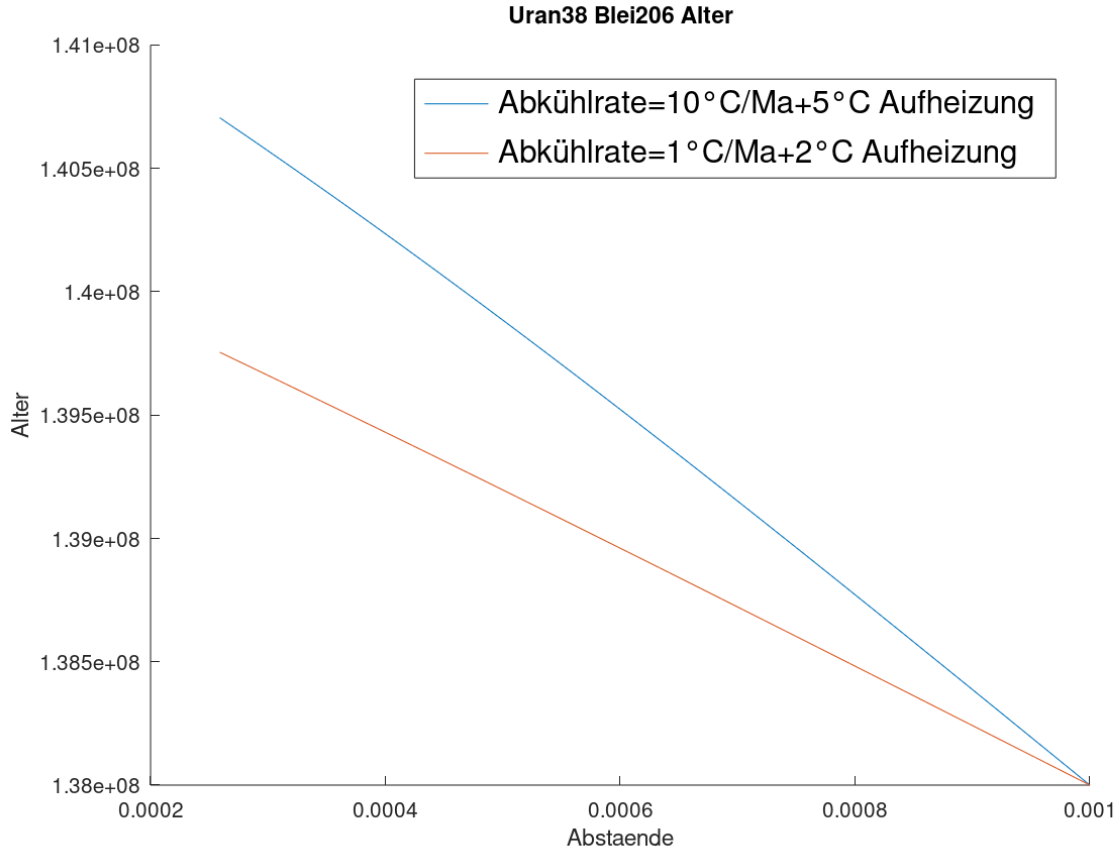


Abb.20 Altersprofile bei konstanter Abkühlung mit Aufheizungsevent oben: Uran35/Blei207 unten: Uran38/Blei206

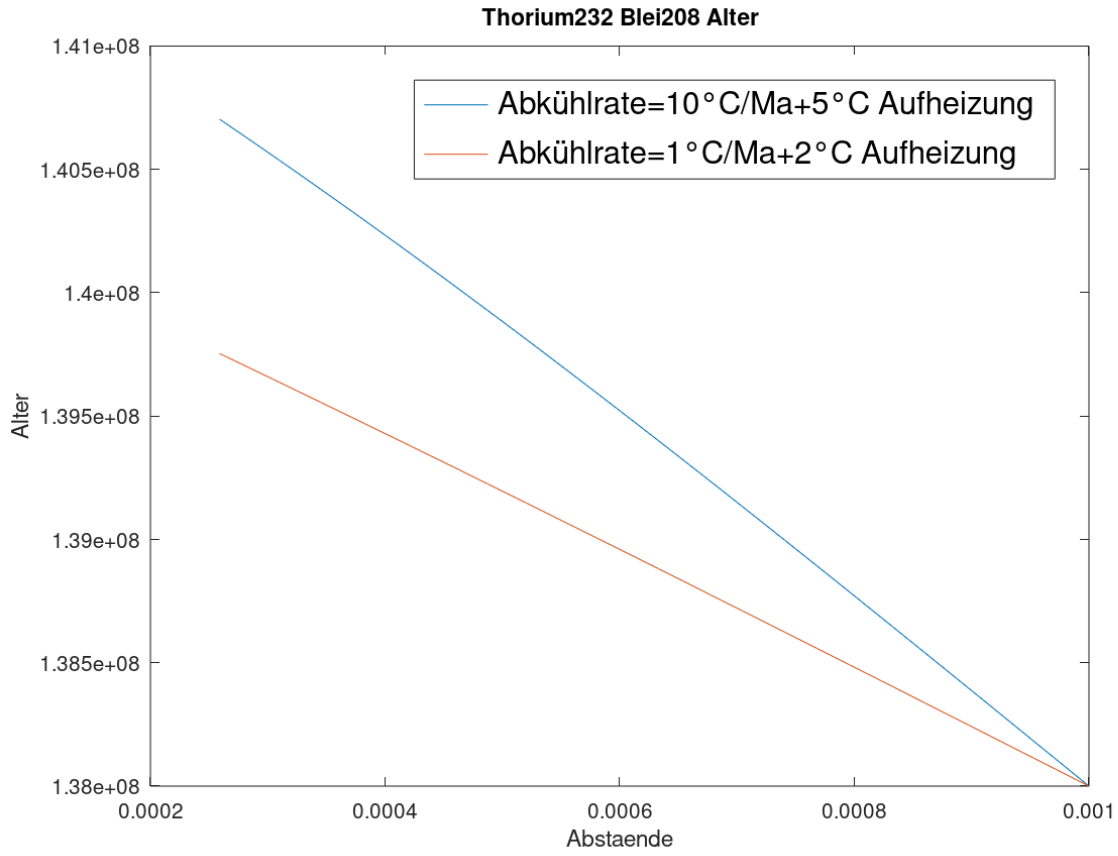


Abb.21 Altersprofile bei konstanter Abkühlung mit Aufheizungsevent für Thorium232/Blei208

Teil 4.2

Im nächsten Teil habe ich eigentlich das gleiche getan wie im vorherigen außer, dass ich zusätzlich zu dem vorhandenen Blei noch gewöhnliches Blei (Blei_c) hinzugefügt habe. Die Menge des hinzugefügten gewöhnlichen Bleis habe ich auf einhundertstel des Uran Gehalts, welcher heute gemessen werden kann, festgelegt. Um die Bleimenge neue zu bestimmen habe ich die gleichen Formeln wie davor angewandt lediglich mit dem Zusatz das ich eine vorher festgelegte Menge den jeweiligen Blei Isotope hinzuaddiere. Dies soll den Einfluss des gewöhnlichen Bleis simulieren. Dazu habe ich folgendes Aufteilungsschema verwendet:

$Pb_c^{206} = \frac{U^{235}}{100}$

$Pb_c^{207} = \frac{Pb^{206}}{18} * 15$

$Pb_c^{208} = \frac{Pb^{206}}{18} * 30$

Zu diesem Aufteilungsschema komme ich, da die unterschiedlichen Bleiisotope wie folgt mit Pb_{204} zusammenhängen:

$\frac{Pb_c{}^{206}}{18}$=Pb^{204}

$\frac{Pb_c{}^{207}}{15}$=Pb^{204}

$\frac{Pb_c{}^{208}}{30}$=Pb^{204}

Die daraus resultierenden Daten habe ich wieder in Form von Graphen dargestellt. Auch hier wurden wieder die drei unterschiedlichen Abkühlungsarten berücksichtigt.

Als erstes habe ich wieder die Graphen der konstanten Abkühlung dargestellt.

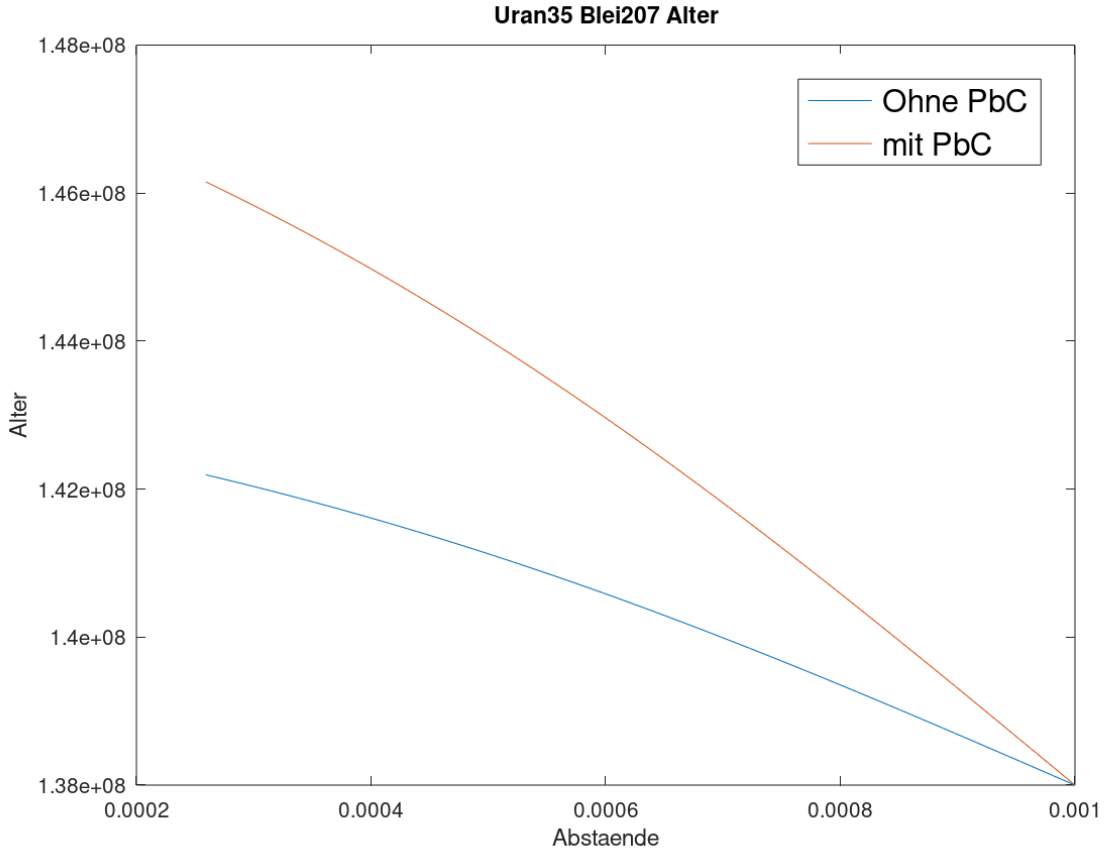
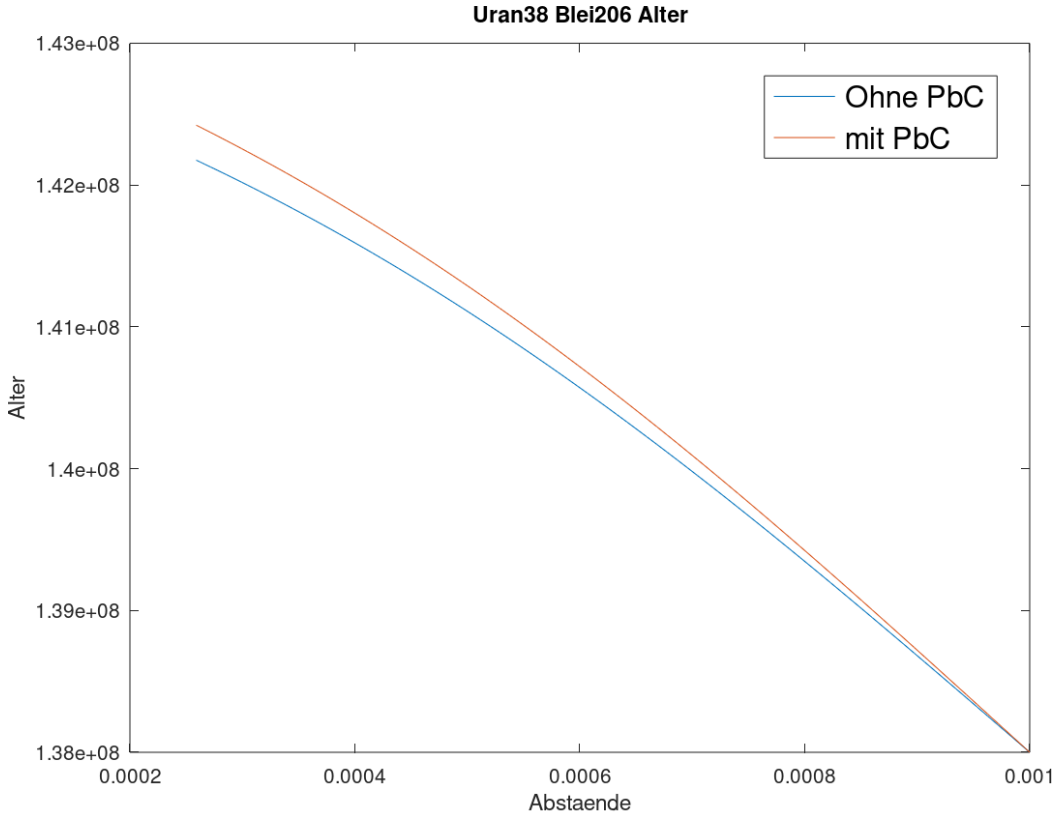


Abb.21 Altersprofile mit und ohne Zugabe PbC bei konstanter Abkühlung für Uran35/Blei207



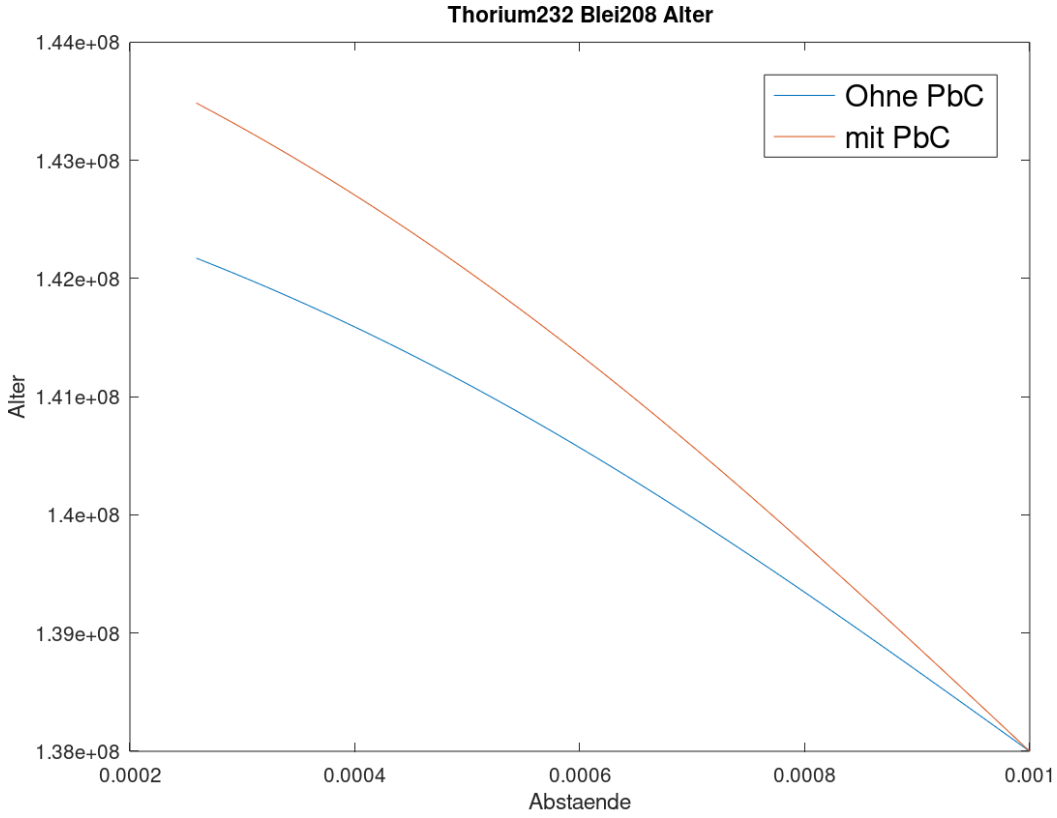
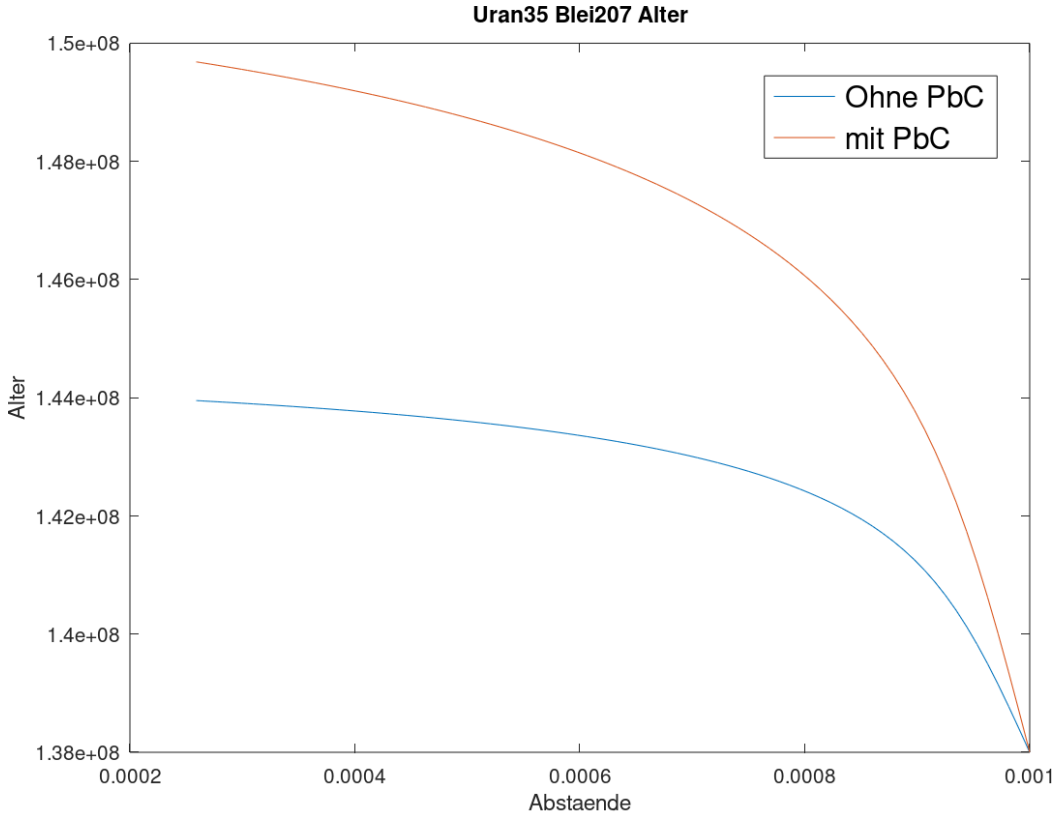


Abb.22 Altersprofile mit und ohne Zugabe PbC bei konstanter Abkühlung oben: für Uran38/Blei206 unten: für Thorium232/Blei208

Als nächstes präsentiere ich die Graphen für die exponentielle Abkühlung.



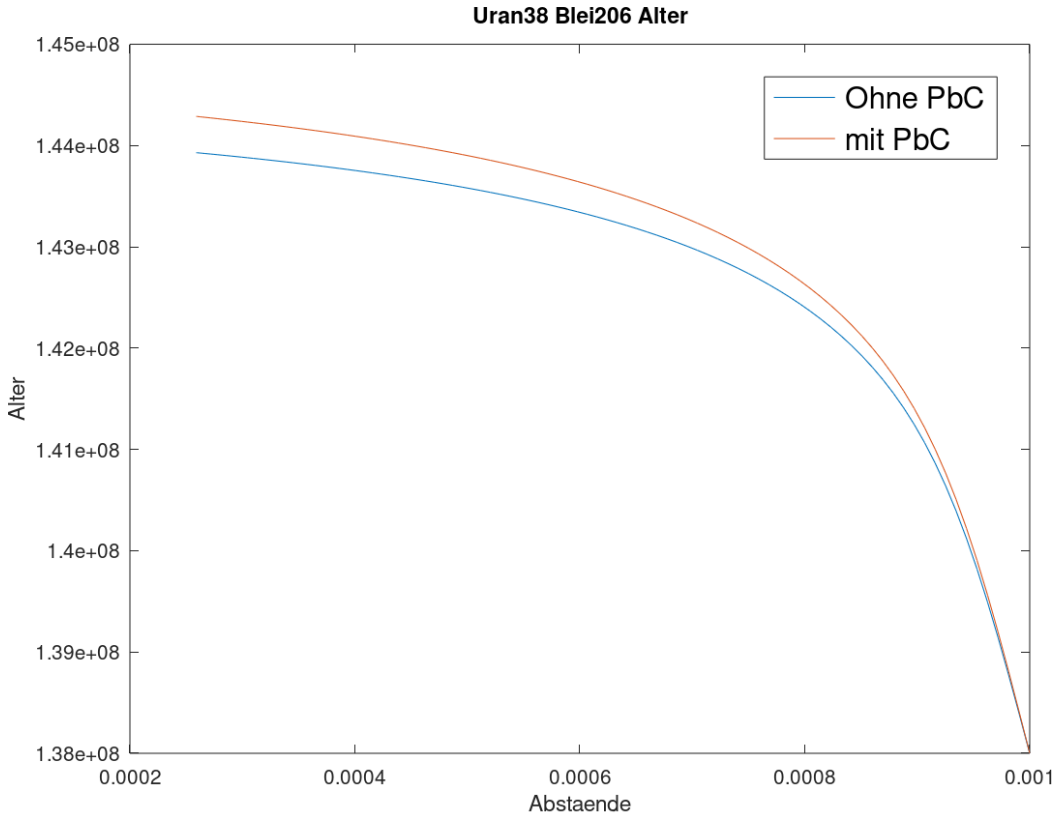


Abb.23 Altersprofile mit und ohne Zugabe PbC bei exponentieller Abkühlung oben: Uran35/Blei207 unten: Uran38/Blei206

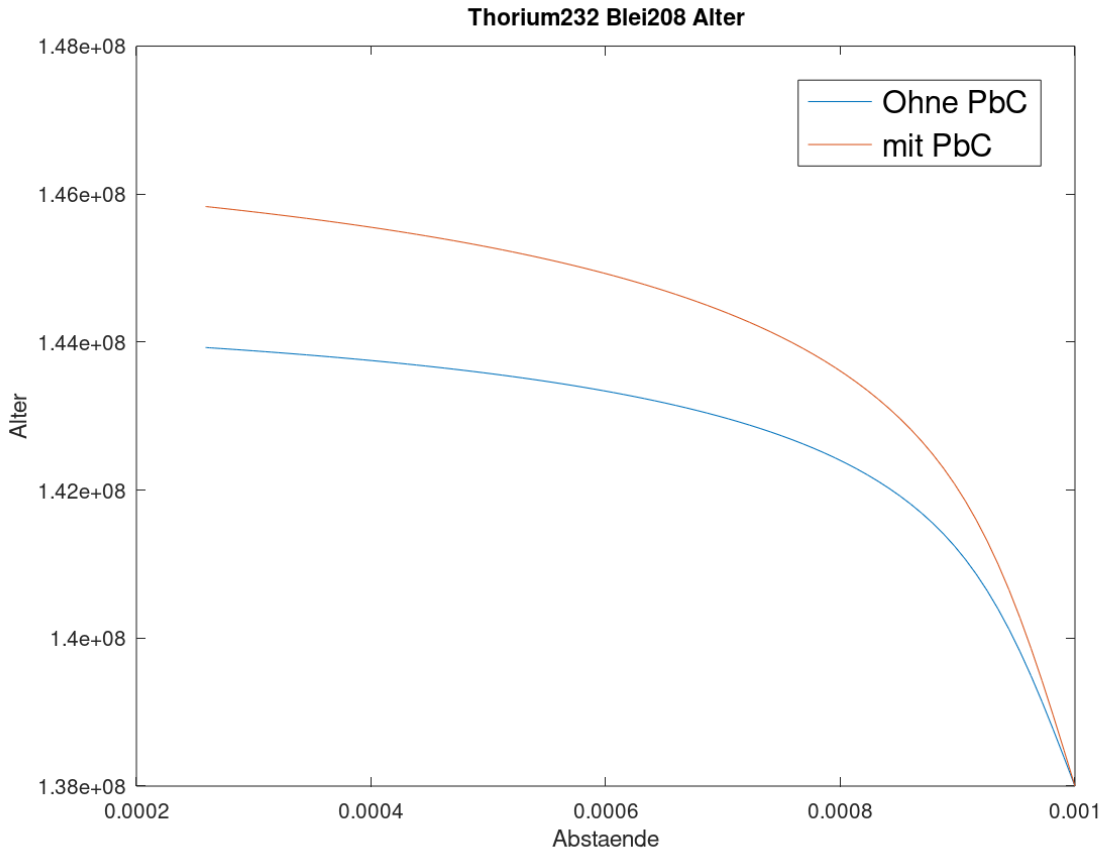


Abb.24 Altersprofile mit und ohne Zugabe PbC bei exponentieller Abkühlung für Thorium232/Blei208

Als letztes die Ergebnisse der konstanten Abkühlung mit einem Aufheizung Event.

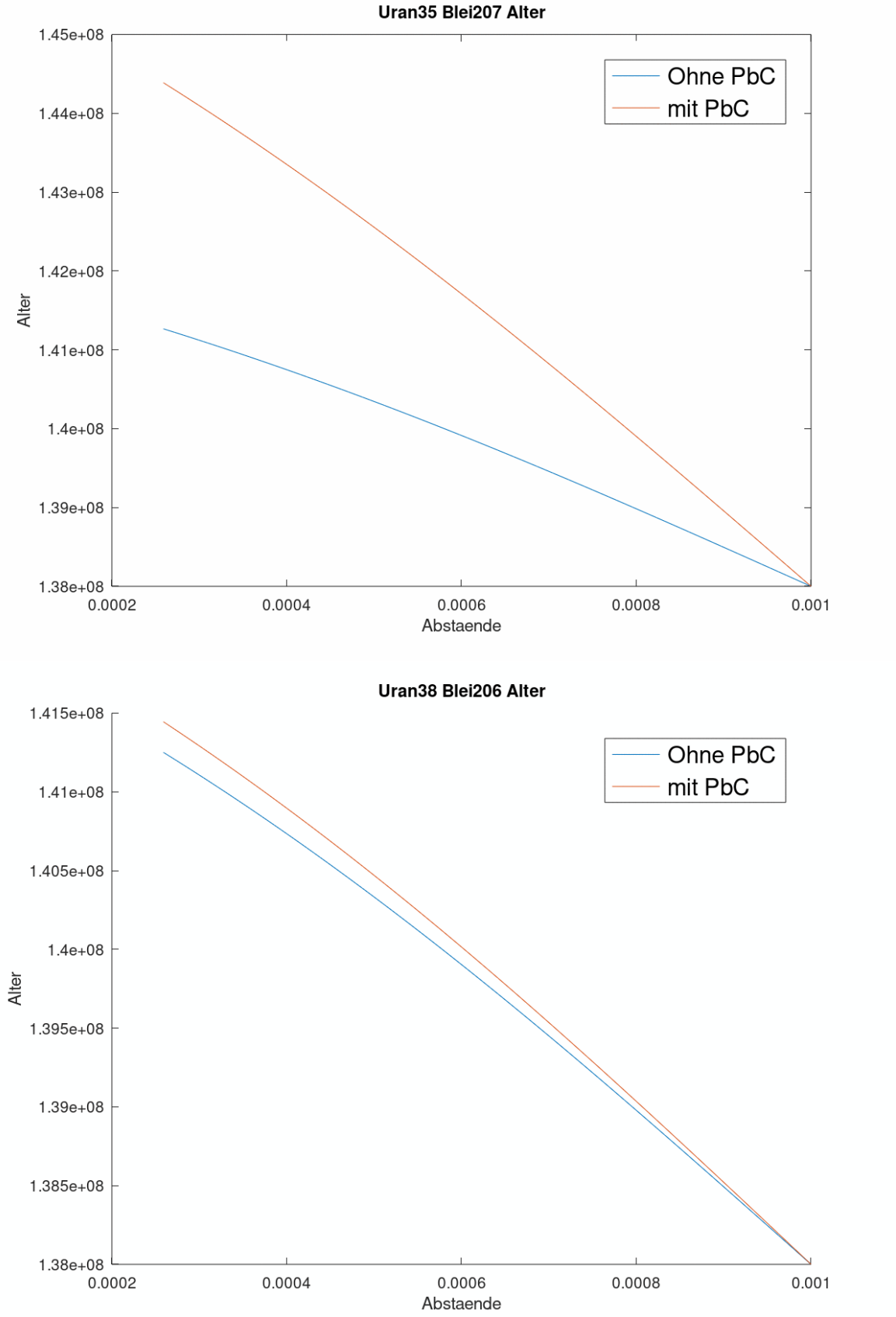


Abb.25 Altersprofile mit und ohne Zugabe PbC bei konstanter Abkühlung mit Aufheizungsevent oben:Uran35/Blei207 unten: Uran38/Blei206

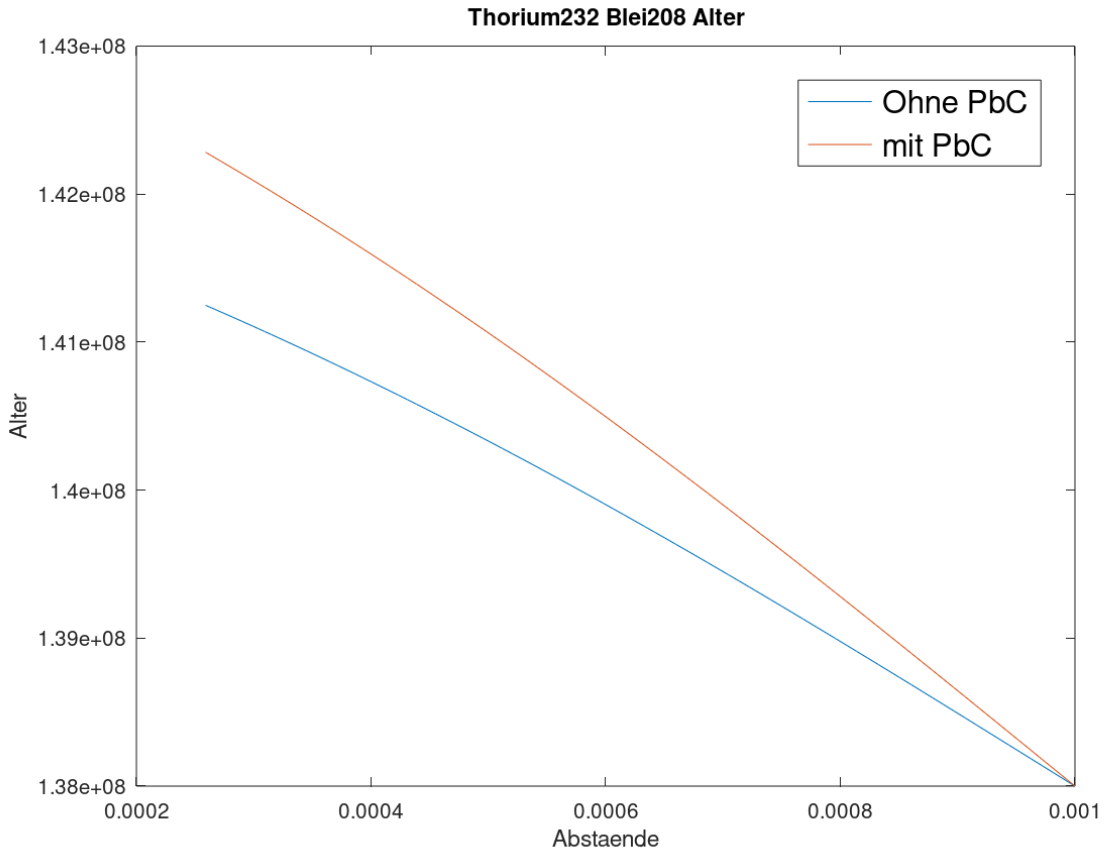


Abb.26 Altersprofile mit und ohne Zugabe PbC bei konstanter Abkühlung mit Aufheizungsevent für Thorium232/Blei208

IsoplotR

IsoPlotR ist ein Freeware Programm, mit dem man geochronologische Daten sehr gut auswerten kann. Man kann eine große Anzahl von Altersbestimmung damit auswerten: U-Pb, Pb-Pb, Ar^{40}/Ar^{39},Rb-Sr,Sm-Nd,Lu-Hf,Re-Os,U-Th-He,Fission Tracks und Uran Ungleichgewichte (Pieter Vermeesch 2018).Mit IsoplotR hat man die Möglichkeit auf eine viel Zahl von Visualisierungsmöglichkeiten zurück zugreifen. Angefangen bei zwei bis drei dimensionalen Isochron Regression, die Darstellung von multi aliquoten Datensätzen als Altersverteilung, Kerndichteschätzer und radial Plots (Pieter Vermeesch 2018). Außerdem kann man noch die mittleren Alter mit Hilfe eines modifizierten Chauvenet Arguments, welches die heteroskedastischen Datensätze mit berücksichtigt, berechnen (Pieter Vermeesch 2018). Ich habe mich auf die Altersbestimmung für U-Pb konzentriert und eine zwei dimensionale Isochrone Regression erzeugt. Dabei habe ich das discordia Model 1 verwendet und meinen Anchor auf Blei gesetzt alles andere habe ich auf default gelassen. Mit diesen Einstellungen habe ich für die jeweiligen Szenarien ein Terra Wasserburg Diagramme erstellt.

Jeweils ein Diagramm der jeweiligen Abkühlarten mit und ohne gewöhnlichen Blei

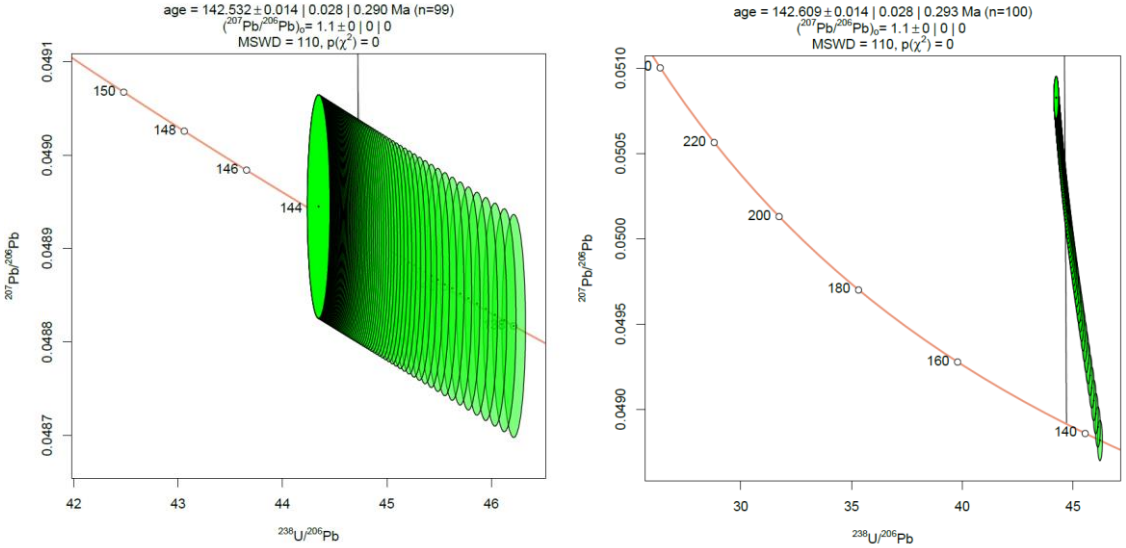


Abb.27 Terrawasserburg Diagramm für eine konstante Abkühlung. (links ohne gewöhnlichen Blei und rechts mit gewöhnlichem Blei)

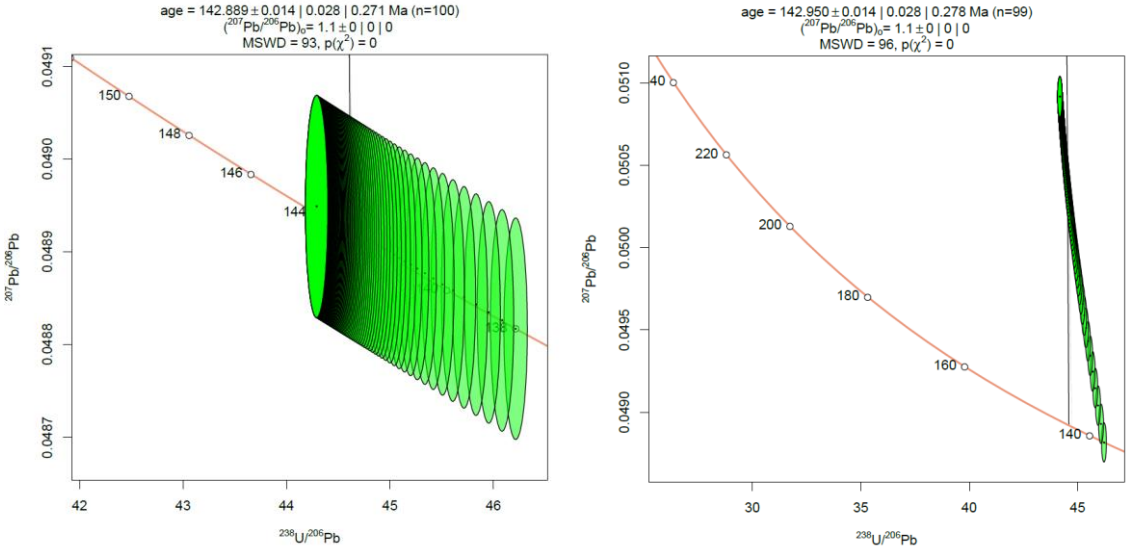


Abb.28 Terrawasserburg Diagramm für eine exponentielle Abkühlung. (links ohne gewöhnlichen Blei und rechts mit gewöhnlichem Blei)

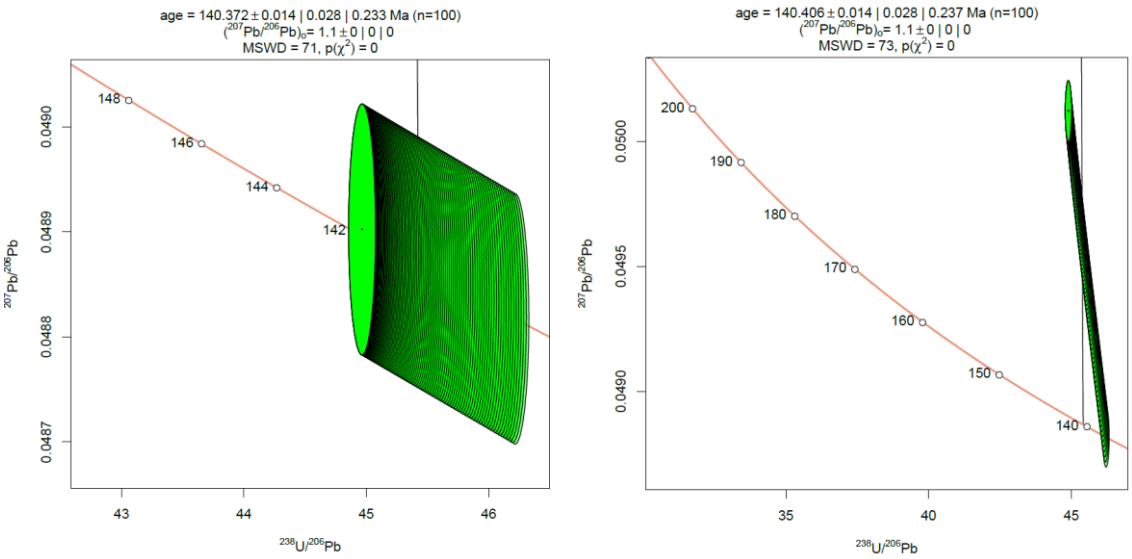


Abb.28 Terrawasserburg Diagramm für eine konstante Abkühlung, welche eine Aufheizung erfährt (links ohne gewöhnlichen Blei und rechts mit gewöhnlichem Blei)

Diskussion

Aus den oben dargestellten Graphen kann man einige Informationen ablesen. Zum einem sieht man, dass die Diffusion Abstands abhängig ist (Schoene and Bowring). Je weiter der Punkt vom Rand des Korns weg ist desto weniger wird es von der Diffusion beeinflusst bzw. umso länger würde es benötigen damit auch dort die volle Diffusion stattgefunden hat. Die abhängig der Korngröße kann man bereits aus der Formel „X=erf(Abstand/(2*sqrt(D))“ ablesen. Der Zusammenhang zwischen Diffusionskoeffizienten und Temperatur ist auch sehr schön zu erkennen. Der Verlauf von Temperatur und Diffusionskoeffizienten ist proportional zu einander. Soll heißen, wenn es heißer wird steigt auch der Diffusionskoeffizient und wenn es kälter wird fällt er. Diesen Zusammenhang kann man besonders gut erkennen in Abbildung XY während des Aufheizungsevent. Wenn man sich hier die beiden Graphen von Temperatur und Diffusionskoeffizient anschaut kann man die parallelen nicht mehr von der Hand weisen. Dies spiegelt sich auch hier in der Formel zur Berechnung des Diffusionskoeffizienten wieder „Dn=D0Pb*exp(-E./(R*Tn(v)))“. Wenn man sich die Steigung bzw. den Verlauf der Einzelnen Diffusionsprofile anschaut fällt auf, dass sie sich abhängig von der Art der Abkühlung unterscheiden. Dies hängt wahrscheinlich damit zusammen, da durch die unterschiedlichen Arten der Abkühlung die Temperatur unterschiedlich schnell sinkt und wie wir davor bereits festgestellt haben ist die Diffusion Temperatur abhängig. Wenn man also einen eher flachen Verlauf bei einem Diffusionsprofil vorfindet könnte es daran liegen, dass es zu einer schnellen Abkühlung gekommen ist und umgekehrt kann es ein Zeichen für eine langsame Abkühlung sein. Dies ist jedoch nur ein Hinweis und kann nicht als Argument genommen werden. Im Zuge dieser Arbeit ist mir ein Gedanke gekommen, den ich hier kurz ausführen möchte. In der Realität arbeiten man an Proben, welche aufbereitet werden und man hat keinen Einfluss darauf wie die Mineralkörner in der Probe liegen. Dadurch erhält man bei seinen Messungen immer eine zufällige Schnittlage und eigentlich nie die perfekte Lage durch den Mittelpunkt des Mineralkorns. Dadurch gehen Informationen verloren, da man nicht die gesamte Länge des Kristalls abdecken kann. Wenn man

allerdings mehrere Mineralkörner, der gleichen Probe die die gleiche Abkühlgeschichte aufweisen und ansonsten auch unter den gleichen Bedingungen gebildet wurden, in einer zufälligen Schnittlage schneidet könnte man vielleicht die einzelnen Fragmenten zu einem großen zusammenhängenden Bild fügen umso alle Informationen gebündelt darzustellen. Zu dieser Meinung bin ich gekommen als ich immer wieder zufällige Schnittlagen miteinander verglichen habe und mir aufgefallen ist, dass sie alle immer die gleichen Informationen lieferten nur die einen mehr und die anderen weniger. Abhängig von der Tiefe mit der sie in das Korn eingedrungen waren. Wenn man also die einzelnen Schnittlagen miteinander vergleicht und man erkennt so einen Zusammenhang könnte man versuchen aus vielen kleineren Schnittlagen eine große zu machen. Diese Behauptung muss allerdings noch in der Realität getestet werden und ist momentan ein reines Gedankenexperiment, welches auf der Grundlage dieser Modellierung basiert. Ich habe bereits erwähnt, dass die unterschiedlichen Abkühlarten sich in den einzelnen Diffusionsprofilen wiederspiegeln. Dies ist auch bei den Altersprofilen zu beobachten allerdings sind die Unterschiede hier wesentlich offensichtlicher. Das hängt wahrscheinlich damit zusammen, dass die berechneten Altersdaten sich aus den errechneten Profilen zusammensetzen. Wenn also ein Unterschied bereits vorher zusehen ist und man mit diesem weiter rechnet wird sich dieser Unterschied zwischen den einzelnen Proben immer weiter vergrößern und immer auffälliger. Im Rahmen dieser Arbeit wurde auch der Einfluss von gewöhnlichem Blei auf die Altersbestimmung untersucht. Wenn gewöhnliches Blei vorhanden ist erhöhen sich die Alter und wie man auf den Terrawasserburg Diagrammen sehr gut erkennen kann liegen die gemessenen Punkte nicht mehr auf der Konkordia. Eine weitere Auffälligkeit ist, dass die Thoriumalter anscheinend stärker davon betroffen sind als die Uranalter. Diese Auffälligkeit kann man durch den unterschiedlich starken Einfluss des gewöhnlichen Bleis erklären. Wie bereits in dieser Arbeit erwähnt beeinflusst das gewöhnliche Blei die verschiedenen Bleiisotope unterschiedlich. ^{208}Blei, das Bleiisotop, welches beim Zerfall von Thorium^{232} entsteht, wird mit einem Faktor von 30 gestört die anderen beiden lediglich mit einem Faktor von 15 bzw. 18. Dadurch wird das gewöhnliche Blei im Vergleich zu den beiden Uran-Zerfallsreihen mehr angereichert und hat dadurch auch einen größeren Einfluss auf die Altersbestimmung. Auch hier kann man den Einfluss der unterschiedlichen Abkühlarten sehen. Bei der konstanten Abkühlung verlaufen die Punkte gleichmäßig entlang der Konkordia im Gegensatz dazu ist es bei der exponentiellen mit größeren Sprüngen versehen entlang der Konkordia, welche allerdings immer kleiner werden. Bei dem letzten Szenario mit einem Aufheizungsevent kann man einen ähnlichen Verlauf wie bei der konstanten Abkühlung sehen, was auch verständlich ist da hier auch eine konstante Abkühlung vorausgesetzt wurde. Sie unterscheidet sich lediglich in der Dichte der Punkte so ist sie bei der, welche eine Aufheizung erfahren hat, wesentlich kompakter als bei der der ohne. Dies liegt daran, dass die Temperatur bei den verschiedenen Situationen unterschiedlich schnell abkühlt. Dadurch, dass die Diffusion bei höheren Temperaturen mehr Einfluss hat, wird man bei einer schnelleren Abkühlung auch weniger Effekte sehen. Wenn die Abkühlung also in exponentiellen oder in konstanten Schritten erfolgt kann man das auch in der Altersverteilung innerhalb des Korns erkennen, da sich der Verjüngungseffekt der Diffusion unterschiedlich weit ausbreiten kann. Eine weitere Beobachtung ist, dass die erzeugten Alter unterschiedlich von der Zugabe des gewöhnlichen Bleis reagieren.

Wenn man die Aller rein rechnerische erzeugt werden diese durch die Zugabe von gewöhnlichem Blei älter bei der graphischen Ermittlung der Alter kann man allerdings einen Verjüngungseffekt sehen. Diese Verjüngung kommt dadurch zustande, weil es zu einer Rotation nach oben kommt und durch diese die untere Schnittstelle mit der Konkordia zum jüngeren Altern verschoben wird. Wenn man also ein Konkordia Diagramm analysiert sollte man auch immer die Alter anhand von Isotopen Verhältnissen errechnen, damit man seine Alter immer gegenprüfen kann. Wenn es bei der Gegenprobe zu unterschiedlichen Ergebnissen kommt kann man sich sicher sein, dass die Probe durch gewöhnliches Blei verunreinigt wurde.

Conclusio

Im Zuge dieser Arbeit habe ich gezeigt, dass die Diffusion und damit einhergehend auch die Altersverteilung stark Temperatur abhängig ist genauso wie die Art und Weise der Abkühlung einen Einfluss auf beide hat. Diese Ergebnisse sind natürlich unter perfekten Bedingungen modelliert worden weswegen sie nicht eins zu eins in die Realität umgesetzt werden können. Aber sie zeigen zumindest einen Einblick in die Abläufe, welche während der Abkühlung von Gesteinen passieren. Außerdem sind sie nur für Apatite oder ähnlich Isotrope Minerale zutreffend. Wenn es sich um ein anderes Mineral handelt, welches keine Isotropen Eigenschaften vorweist, sondern in den unterschiedlichen Kristallsachen unterschiedliche Diffusionsbedingungen herrschen ist diese Modellierung nicht mehr zutreffend. Außerdem kann man sehen, dass man aus der Form und Steigung bei Altersverteilungen innerhalb eines Korns auch Informationen über die Art und Weise der Abkühlung ablesen kann. Wenn man also das nächste Mal ein a-T Diagramm anschaut sollte man nicht nur allein die Verteilung wahrnehmen, sondern auch die Form und die Steigung näher untersuchen, da man auch aus diesen Informationen ablesen kann. Den Einfluss von gewöhnlichem Blei auf die Altersberechnung kann man auch ganz klarsehen. Daraus lässt sich schließen, dass man bei der Probennahme und der einhergehenden Altersbestimmung achtsam vorgehen muss. Ersten muss man sorgfältig darauf achten, dass es zu keiner Verunreinigung von außen kommt, welche die Probe als zusätzliche Bleiquelle verfälschen könnte oder zweitens muss man immer in Betracht ziehen, dass die Probe bereits mit gewöhnlichem Blei verunreinigt ist. Dadurch das man die Menge des gewöhnlichen Bleis nur schwer abschätzen kann besteht die Möglichkeit das die berechneten Alter zu hoch eingeschätzt werden oder die graphischen Alter zu niedrig.

Referenzen

Marco Pasero, Anthony R. Kampf, Cristiano Ferraris, Igor V. Pekov, John Rakovan, and Timothy J. White: Nomenclature of the apatite supergroup minerals. Eur J Mineral 22 (2010) S. 163-179.

Burke,E.A.J. (2008): Tidying up mineral names: an IMA-CNMNC scheme for suffixes, hyphens and diacritical marks. *Mineral. Rec* ., 39, 131–135.

PieterVermeesch IsoplotR: A free and open toolbox for geochronology Geoscience Frontiers Volume 9, Issue 5, September 2018, Pages 1479-1493

Gregor Markl (2014) Minerale und Gesteine: Mineralogie – Petrologie – Geochemie Springer Verlag

Nong M. Hwang , *, Jun H. Hahn , Duk Y. Yoon(1995) Chemical potential of carbon in the low pressure synthesis of diamond Journal of Crystal Growth 160 (1996) 87-97

Wilhelm Jost, Karl Hauffe Diffusion Methoden der Messung und Auswertung Dr. Dietrich Steinkopf Verlag Darmstadt 1972 Seite 260-261

Helmuth Mehrer (2007) Diffusion in Solids Fundamentals, Methods, Materials,Diffusion Controlled- Processes Springer Verlag 2007

Blackburn et al., 2011, U-Pb thermochronology, creating a temporal record of lithosphere thermal evolution

John B. Brady , Daniel J. Cherniak (2010) Diffusion in Minerals: An overview of Published Experimantal Diffusion Data

Daniel J. Cherniak (2010) Diffusion Accessory Minerals: Zircone, Titanite, Apatite, Monazite and Xenotime

Martin H. Dodson (1973) Closure Temperature in Cooling Geochronological and Petrological Systems

Schoene and Bowring, 2007, Determining accurate temperature–time paths from U–Pb thermochronology, An example from the Kaapvaal craton, southern Africa

Schoene, 2014, U–Th–Pb Geochronology

Meesters + Dunai, 2002, Solving the production–diffusion equation for finite diffusion domains of various shapes Part I, Implications for low-temperature U+Th-He thermochronology

Kohn et al., 2016, Implications of near-rim compositional zoning in rutile for geothermometry, geospeedometry, and trace element equilibration

Ganguly + Tirone, 1999, Diffusion closure temperature and age of a mineral with arbitrary extent of diffusion, theoretical formulation and applications

Engi, 2017, 12, Petrochronology Based on REE-Minerals, Monazite, Allanite, Xenotime, Apatite

Dahl, 1997, A crystal-chemical basis for Pb retention and fission-track annealing systematics in U-bearing minerals, with implications for geochronology

Cruz-Uribe et al., 2018, Assessing trace element (dis)equilibrium and the application of single element thermometers in metamorphic rocks

Kirkland et al., 2018, Apatite, a U-Pb thermochronometer or geochronometer?

Zhang, Y, Geochemical Kinetics, 2008, Princeton University Press, 631p.