

# I. ANALITIKAI ADATOK MEGADÁSA, KONVERZIÓK

## I.2. Konverziók

Geokémiai vizsgálatok során gyakran kényszerülünk arra, hogy különböző kémiai koncentrációegységben megadott adatokat hasonlítsunk össze vagy alakítsuk át adatainkat egy, az értelmezéshez alkalmasabb formába. A magmás petrokémiában például, nagy szerepe van a különböző elemarányoknak, amelyekből fontos petrogenetikai következtetések vonhatók le. Ilyen arány pl. a K/Rb, Ti/V stb. Ezen elemek közül a K-t és Ti-t többnyire oxidos (tömegszázalékos koncentrációegységben), a Rb-t és V-t pedig elem (ppm-ben kifejezve) formában adják meg. Az arányok kiszámolásához ugyanabba az koncentrációegységbe kell hoznunk az elemeket. Ásványkémiai számítások során az oxidos formában kifejezett összetételt kell ionszámokká alakítanunk, hogy a vizsgált ásvány sztöchiometriai összetételét meg tudjuk határozni. E fejezetben a legfontosabb konverziókat tekintjük át, amelyeket a későbbi számítások során majd gyakran alkalmazunk. A gramm-formula tömegegység (gft; 1 mol elem vagy vegyület tömege grammban) terminust molekulatömegekre és atomtömegekre egyaránt használjuk. Jelentése: 1 mol elem vagy vegyület tömege grammban kifejezve. Az egyes elemek és a legfontosabb vegyületek gramm-formula tömeg értékeit a Konv-1 táblázat tartalmazza.

**Konv-1 táblázat: atom és molekulatömegek:**

| <b>Elem</b> | <b>Atomtömeg</b> | <b>Elem</b> | <b>Atomtömeg</b> | <b>Oxid</b>                    | <b>Molektömeg</b> |
|-------------|------------------|-------------|------------------|--------------------------------|-------------------|
| H           | 1.0079           | Sc          | 44.9559          | SiO <sub>2</sub>               | 60.0848           |
| He          | 4.0026           | Ti          | 47.900           | TiO <sub>2</sub>               | 79.8988           |
| Li          | 6.941            | V           | 50.9414          | Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 101.9612          |
| Be          | 9.01218          | Cr          | 51.996           | Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 159.6922          |
| B           | 10.81            | Mn          | 54.938           | FeO                            | 71.8464           |
| C           | 12.011           | Fe          | 55.847           | MnO                            | 70.9374           |
| N           | 14.0067          | Co          | 58.9332          | MgO                            | 40.3114           |
| O           | 15.9994          | Ni          | 58.700           | CaO                            | 56.0794           |
| F           | 18.9984          | Cu          | 63.5460          | Na <sub>2</sub> O              | 61.9790           |
| Na          | 22.98977         | Zn          | 65.380           | K <sub>2</sub> O               | 94.2034           |
| Mg          | 24.305           | Rb          | 85.4678          | P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>  | 141.9446          |
| Al          | 26.98154         | Sr          | 87.620           | CO <sub>2</sub>                | 44.0088           |
| Si          | 28.0855          | Y           | 88.9059          | H <sub>2</sub> O               | 18.0152           |
| P           | 30.97376         | Zr          | 91.220           | NiO                            | 74.7094           |
| S           | 32.06            | Nb          | 92.9064          | Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 151.9902          |
| Cl          | 35.453           | Ba          | 137.330          | BaO                            | 153.3294          |
| K           | 39.0983          |             |                  | SrO                            | 103.6194          |
| Ca          | 40.08            |             |                  | Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 151.9902          |
|             |                  |             |                  | V <sub>2</sub> O <sub>3</sub>  | 149.8798          |
|             |                  |             |                  | ZrO <sub>2</sub>               | 123.2188          |
|             |                  |             |                  | SO <sub>3</sub>                | 80.0582           |
|             |                  |             |                  | ZnO                            | 81.3794           |

**Konv-2 táblázat** - Teljes kőzetelemzés főelem- és nyomelem-geokémiai adatai.

| Főelem-oxidok (t%)             |       | Nyomelemek (ppm) |      |
|--------------------------------|-------|------------------|------|
| SiO <sub>2</sub>               | 44.39 | Ni               | 231  |
| TiO <sub>2</sub>               | 3.39  | Cr               | 528  |
| Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 13.29 | Co               | 57   |
| Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 1.36  | Sc               | 25.2 |
| FeO                            | 10.61 | V                | 321  |
| MnO                            | 0.17  | Sr               | 634  |
| MgO                            | 11.11 | Rb               | 12   |
| CaO                            | 9.78  | Ba               | 339  |
| Na <sub>2</sub> O              | 2.82  | Nb               | 39   |
| K <sub>2</sub> O               | 1.08  | Zr               | 221  |
| P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>  | 0.60  | Y                | 18   |
| LOI                            | 1.20  | Hf               | 6.1  |
| (+H <sub>2</sub> O             | 0.74) | Ta               | 2.2  |
| (-H <sub>2</sub> O             | 0.30) | Th               | 2.7  |
| (CO <sub>2</sub>               | 0.16) | U                | 0.88 |
| Összes:                        | 99.79 |                  |      |

**I.2.1 Oxid tömegszázalék → elem tömegszázalék konverzió**

Ezek az átszámítások elsősorban a kőzetek teljes összetétel adatainak feldolgozása során gyakoriak. Főelem/nyomelem arányok számításában, összvas koncentrációjából történő ferri- és ferrooxid számításban ez a konverzió elkerülhetetlen. Vegyünk először egy egyszerű számolást:

☞ A Konv-2 táblázatban megadott kőzet 11.11 t% MgO-t tartalmaz. Számoljuk ki a Mg tömegszázalékos értékét!

☺ A MgO gramm-formula tömege 40.31, míg a Mg gramm-formula tömege 24.31.

$$\begin{array}{rcl} \text{MgO:} & 11.11 \text{ t\%} & - 40.31 \text{ gft} \\ \text{Mg :} & x & - 24.31 \text{ gft} \\ & \text{-----} & \end{array}$$

$$\text{Mg (t\%)} = (11.11 \cdot 24.31) / 40.31 = 6.7$$

Ebben az esetben a MgO vegyület 1 mol Mg-t tartalmazott, így az átszámítás egyszerű volt. A Konv-2 táblázatban azonban vannak olyan oxidok is, amelyek több mol atomot tartalmaznak (pl.

$K_2O$ ,  $Na_2O$ ,  $P_2O_5$  stb.). Például a  $K_2O$  vegyület 2 mol K-t tartalmaz, ami némileg 'bonyolítja' a konverziót. Ebben az esetben a szabály az, hogy az oxidban és atomban a vizsgált elem molszámát azonos értékre állítjuk:

- ☞ A Konv-2 táblázatban megadott kőzet 1.08 t%  $K_2O$ -t tartalmaz. Számoljuk ki a K atom tömegszázalékos értékét! Vegyük figyelembe, hogy 2 mol K szükséges 1 mol  $K_2O$  képzéséhez.

- ☺ A  $K_2O$  gramm-formula tömege 94.20, míg a K gramm-formula tömege 39.10.

|          |         |   |           |
|----------|---------|---|-----------|
| $K_2O$ : | 1.08 t% | - | 94.20 gfs |
| K :      |         |   | 39.10 gfs |
| 2K :     | x       | - | 78.20 gfs |
| -----    |         |   |           |

$$K (t\%) = (1.08 \cdot 78.20) / 94.20 = 0.90$$

A Konv-2 táblázat főelem-oxid adataiból számolt atom tömegszázalékok a Konv-3 táblázatban láthatók. A gyors konverziót megkönnyítik az ún. átszámítási faktorok, amelyeket számos geokémiai kézikönyv tüntet fel mellékletében. Ezek az értékek meggyorsítják az átszámítást, mivel csak egy szorzási műveletet kell végrehajtani. Az átszámítási faktor az oxidnak megfelelő mol számú atom súlyának és az oxid molekulásúlyának hányadosa. A  $K_2O \rightarrow K$  konverzió esetében az átszámítási faktor:  $2 \cdot 39.1 / 94.2 = 0.8301$ . A  $K_2O$  súlyszázalékos értékét besorozva az átszámítási faktoralal megkapjuk a K atom súlyszázalékos értékét: pl.  $1.08 \cdot 0.8301 = 0.90$ . Az egyes főelem-oxidokhoz tartozó átszámítási faktorokat a Konv-3 táblázat 3. oszlopa tartalmazza.

Konv-3. táblázat - Oxidok tömegszázalékos adataiból számolt atom tömegszázalékok

| oxid                           | tömeg% | Átszámítási faktor | Atom            | tömeg% |
|--------------------------------|--------|--------------------|-----------------|--------|
| SiO <sub>2</sub>               | 44.39  | 0.4674             | Si              | 20.75  |
| TiO <sub>2</sub>               | 3.39   | 0.5995             | Ti              | 2.02   |
| Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 13.29  | 0.5293             | Al              | 7.03   |
| Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 1.36   | 0.6994             | Fe <sup>3</sup> | 0.95   |
| FeO                            | 10.61  | 0.7773             | Fe <sup>2</sup> | 8.25   |
| MnO                            | 0.17   | 0.7745             | Mn              | 0.13   |
| MgO                            | 11.11  | 0.6029             | Mg              | 6.70   |
| CaO                            | 9.78   | 0.7147             | Ca              | 6.99   |
| Na <sub>2</sub> O              | 2.82   | 0.7419             | Na              | 2.09   |
| K <sub>2</sub> O               | 1.08   | 0.8301             | K               | 0.90   |
| P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>  | 0.60   | 0.4364             | P               | 0.26   |

## Alkalmazás

### 1. Összvas számítása

A természetben a főelemek közül a vas kétféle oxidációs állapotban fordul elő. Egyes analitikai módszerekkel (pl. röntgenfluoreszcens spektrometria, mikroszonda stb.) nem határozható meg külön-külön a ferri- (Fe<sup>3+</sup>) és ferro- (Fe<sup>2+</sup>) oxid koncentrációja, így sok esetben csak az összes vas van megadva FeO\* vagy Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>\* formájában. Kőzetkémiai számításokban azonban többnyire szükség van mindkét oxid értékére. Más esetben, amikor az FeO és Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> értéke is ismert, szükség lehet az összes vasoxid értékének kiszámítására. Vegyünk két egyszerű példát:

☞ A Konv-2 táblázatban a bazalt FeO koncentrációja 10.61t%, míg az Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> értéke 1.36t%. Számoljuk ki az összvas értékét FeO\*, ill. Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>\* formájában (az Fe atomtömege 55.847, az FeO gft értéke 71.8464, az Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-é pedig 159.6922)!

☺ FeO → Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> átalakítás:  
 FeO=10.61t% → Fe = 10.61 · 0.7773 = 8.25t%  
 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> = 8.25 / 0.6994 = 11.80t%

azaz Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> = 0.7773/0.6994 · FeO = 1.1113 · FeO;  
 FeO = 0.6994/0.7773 · Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> = 0.8999 · Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

az összvas értékek:  
 FeO\* = 10.61 + 0.8999·1.36 = 11.83t%

$$\text{Fe}_2\text{O}_3^* = 1.36 + 1.1113 \cdot 10.61 = 13.15\text{t}\%$$

- ☞ Egy kőzetelemzésben a vas  $\text{Fe}_2\text{O}_3^*$  formájában van megadva:  $\text{Fe}_2\text{O}_3^* = 12.35\text{t}\%$ . Számoljuk ki az FeO és  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  értékét, feltételezve, hogy üde kőzet esetében az  $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{FeO}$  arány 0.2.

☺

$$\begin{aligned}\text{Fe}_2\text{O}_3 &= 0.2 \cdot \text{FeO} \\ \text{Fe}_2\text{O}_3^* &= \text{Fe}_2\text{O}_3 + 1.1113 \cdot \text{FeO} \\ \text{Fe}_2\text{O}_3^* &= 12.35\text{t}\%\end{aligned}$$

$$12.35 = 0.2 \cdot \text{FeO} + 1.1113 \cdot \text{FeO} = 1.3113 \cdot \text{FeO}$$

$$\text{FeO} = 12.35 / 1.3113 = 9.42\text{t}\%$$

$$\text{Fe}_2\text{O}_3 = 0.2 \cdot 9.42 = 1.88\text{t}\%$$

## 2. Főelem/nyomelem arány számolása

Petrogenetikai számolásokban különösen nagy jelentőségük van a különböző elemarányoknak (pl. K/Rb, Ti/Zr, Ti/Nb, Ca/Sr, P/Ce stb.). Kőzetelemzésekben a K, Ti, Ca általában oxidos formában tömegszázalékban (t%) kifejezve, a Rb, Zr, Nb viszont elemként ppm-ben kifejezve (ppm) szerepel. Az eddigi ismereteink szerint főelem és nyomelem aránya egyszerűen számolható: a t% száz egységre jutó tömegegységet jelent (pl. gramm/100 gramm), míg a ppm (parts per million) millió egységre jutó tömegegységet (pl. gramm/10<sup>6</sup>) jelent. Ennek alapján 1t% 10000ppm-nek felel meg.

- ☞ Számoljuk ki a Konv-2 táblázat adatai alapján a kőzet Ti/Nb és K/Rb arányát! (Adatok:  $\text{TiO}_2=3.39\text{t}\%$ ,  $\text{K}_2\text{O}=1.08\text{t}\%$ , Rb=12ppm, Nb=39ppm)

- ☺ A Konv-3 táblázatban megtaláljuk a Ti és K átszámítási faktorait (0.5995 ill. 0.8301). Ezek alapján:

$$\text{Ti} = 0.5995 \cdot 3.39 = 2.03\text{t}\% = 20323\text{ppm}$$

$$\text{K} = 0.8301 \cdot 1.08 = 0.90\text{t}\% = 8965\text{ppm}$$

$$\text{A keresett arányok: Ti/Nb} = 20323/39 = 521.1$$

$$\text{K/Rb} = 8965/12 = 747.1$$

### I.2.2. Tömegszázalék → mol szám konverzió

Ezt a fajta konverziót gyakran alkalmazzák kőzetkémiai adatok feldolgozása során. Ennek egyik leglényegesebb oka, hogy a moláris egységekkel egyszerűbben értelmezhető kémiai egyensúlyok, ezáltal a kőzeteken mért analitikai adatok összevethetők a termodinamikai kísérleti és elméleti eredményekkel (lásd pl. geotermometriai és geobarometriai számolások). Továbbá, ásványok sztöchiometriai képletének meghatározásához is moláris egységeken keresztül jutunk. E konverzió két típusa gyakori: oxid tömegszázalék → oxid molszázalék, illetve oxid tömegszázalék → atom (vagy ion) molszázalék számolás. Az első esetben először az oxidok tömegszázalékos adatait elosztjuk a megfelelő molekulatömeg (gft) értékkel, az így kapott számadatokat oxid *molaránynak* nevezzük. Az oxidok *molszázalék* értékeit ezután úgy kapjuk meg, hogy a molarány adatokat 100% összegre alakítjuk át ( $100 \cdot \text{molarány} / \Sigma \text{ molarány}$ ); Konv-4 táblázat).

Konv-4. táblázat - Tömegszázalékos oxid adatok konvertálása molszázalék értékekre

| oxid                           | oxid<br>tömeg<br>százalék | Molekula-<br>tömeg<br>(gft) | molarány<br>→ oxid t% /<br>molekulatömeg | molszázalék<br>→<br>100·molarány /<br>Σ molarány |
|--------------------------------|---------------------------|-----------------------------|--|--|
| SiO <sub>2</sub>               | 44.39                     | 60.0848                     | 0.7388                                   | 45.54  |
| TiO <sub>2</sub>               | 3.39                      | 79.8988                     | 0.0424                                   | 2.61   |
| Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 13.29                     | 101.9612                    | 0.1303                                   | 8.03   |
| Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 1.36                      | 159.6922                    | 0.0085                                   | 0.52   |
| FeO                            | 10.61                     | 71.8464                     | 0.1477                                   | 9.10   |
| MnO                            | 0.17                      | 70.9374                     | 0.0024                                   | 0.15   |
| MgO                            | 11.11                     | 40.3114                     | 0.2756                                   | 16.99  |
| CaO                            | 9.78                      | 56.0794                     | 0.1743                                   | 10.74  |
| Na <sub>2</sub> O              | 2.82                      | 61.9790                     | 0.0455                                   | 2.80   |
| K <sub>2</sub> O               | 1.08                      | 94.2034                     | 0.0115                                   | 0.71   |
| P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>  | 0.60                      | 141.9446                    | 0.0042                                   | 0.26   |
| H <sub>2</sub> O               | 0.74                      | 18.0152                     | 0.0411                                   | 2.53   |
| Σ                              | 99.34                     |                             | 1.6223                                   | 99.98  |

Konv-5. táblázat - Atom- és kationszázalék számolása oxid tömegszázalék adatokból

| oxid                           | oxid tömegszázalék (t%) | Molekula-tömeg (gft) | ion molarány (%/gft) · kationok száma az oxidban | oxigén molarány (%/gft) · oxigén száma az oxidban | atom (ion)      | atomszázalék $100 \cdot \text{ion molarány} / \Sigma \text{kation} + \Sigma \text{oxigén molarány}$ | kationszázalék $100 \cdot \text{ion molarány} / \Sigma \text{kation molarány}$ |
|--------------------------------|-------------------------|----------------------|--|---|-----------------|---|--|
| SiO <sub>2</sub>               | 44.39                   | 60.0848              | 0.7388   | 1.4776  | Si              | 16.49   | 41.48  |
| TiO <sub>2</sub>               | 3.39                    | 79.8988              | 0.0424   | 0.0848  | Ti              | 0.95  | 2.38   |
| Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 13.29                   | 101.9612             | 0.2606   | 0.3910  | Al              | 5.82  | 14.63  |
| Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 1.36                    | 159.6922             | 0.0170   | 0.0255  | Fe <sup>3</sup> | 0.38  | 0.95   |
| FeO                            | 10.61                   | 71.8464              | 0.1477   | 0.1477  | Fe <sup>2</sup> | 3.30  | 8.29   |
| MnO                            | 0.17                    | 70.9374              | 0.0024   | 0.0024  | Mn              | 0.05  | 0.13   |
| MgO                            | 11.11                   | 40.3114              | 0.2756   | 0.2756  | Mg              | 6.15  | 15.47  |
| CaO                            | 9.78                    | 56.0794              | 0.1743   | 0.1743  | Ca              | 3.89  | 9.79   |
| Na <sub>2</sub> O              | 2.82                    | 61.9790              | 0.0910   | 0.0455  | Na              | 2.03  | 5.11   |
| K <sub>2</sub> O               | 1.08                    | 94.2034              | 0.0230   | 0.0115  | K               | 0.51  | 1.29   |
| P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>  | 0.60                    | 141.9446             | 0.0084   | 0.0211  | P               | 0.19  | 0.47   |
| H <sub>2</sub> O               | 0.74                    | 18.0152              | 0.0822   | 0.0411  | OH <sup>-</sup> | 1.84  |  |
|                                |                         |                      |  |   | O               | 58.40   |  |
| Σ                              | 99.34                   |                      | 1.8634<br>(1.7812)*                              | 2.6981  |                 | 100.00  | 99.99  |

Az atom- és kationszázalék értékek számolásának menetét a Konv-5 táblázat mutatja be. Először az atom (ion) molarány értékeket számoljuk ki: az oxidok tömegszázalékos adatait elosztjuk a megfelelő molekulatömegekkel, majd szorozzuk az adott oxidban lévő kationok számával. Az adott oxidokhoz tartozó oxigén molarány értékeket úgy kapjuk meg, hogy az oxid molarány adatokat szorozzuk az adott oxidban lévő oxigének számával.

Pl. az Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> esetében az oxid molarány:  $13.29/101.9612 = 0.1303$ ; az Al molaránya:  $2 \cdot (13.29/101.9612) = 2 \cdot 0.1303 = 0.2606$ ; az O molaránya:  $3 \cdot (13.29/101.9612) = 3 \cdot 0.1303 = 0.3909$ .

Ezután összegezzük a kation-, és oxigén molarány számadatokat ( $\Sigma=1.7812+2.6981=4.4793$ ), és ennek az összegértéknek a felhasználásával számoljuk ki az *atomszázalékokat*. Pl. az Al atomszázalék értéke:  $100 \cdot 0.2606 / 4.4793 = 5.82$ . Az O atomszázaléka az OH<sup>-</sup> kation molaránnyal csökkentett oxigén molarány összeg osztva a kation- és oxigén molarány összeggel:  $100 \cdot 2.6159 / 4.4793 = 58.40$ .

A *kationszázalékok* úgy nyerhetők, hogy a kation molarányokat 100%-ra számoljuk át. Pl. az Al kationszázalék értéke:  $100 \cdot 0.2606 / 1.7812 = 14.63$ .