

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:

Elem	Atomtömeg	Elem	Atomtömeg	Oxid	Molektömeg
H	1.0079	Sc	44.9559	SiO ₂	60.0848
He	4.0026	Ti	47.900	TiO ₂	79.8988
Li	6.941	V	50.9414	Al ₂ O ₃	101.9612
Be	9.01218	Cr	51.996	Fe ₂ O ₃	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 ₂ O	61.9790
Na	22.98977	Zn	65.380	K ₂ O	94.2034
Mg	24.305	Rb	85.4678	P ₂ O ₅	141.9446
Al	26.98154	Sr	87.620	CO ₂	44.0088
Si	28.0855	Y	88.9059	H ₂ O	18.0152
P	30.97376	Zr	91.220	NiO	74.7094
S	32.06	Nb	92.9064	Cr ₂ O ₃	151.9902
Cl	35.453	Ba	137.330	BaO	153.3294
K	39.0983			SrO	103.6194
Ca	40.08			Cr ₂ O ₃	151.9902
				V ₂ O ₃	149.8798
				ZrO ₂	123.2188
				SO ₃	80.0582
				ZnO	81.3794

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

Főelem-oxidok (t%)		Nyomelemek (ppm)	
SiO ₂	44.39	Ni	231
TiO ₂	3.39	Cr	528
Al ₂ O ₃	13.29	Co	57
Fe ₂ O ₃	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 ₂ O	2.82	Nb	39
K ₂ O	1.08	Zr	221
P ₂ O ₅	0.60	Y	18
LOI	1.20	Hf	6.1
(+H ₂ O	0.74)	Ta	2.2
(-H ₂ O	0.30)	Th	2.7
(CO ₂	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.

$$\begin{array}{rcl}
 K_2O: & 1.08 \text{ t\%} & - 94.20 \text{ gfs} \\
 K : & & 39.10 \text{ gfs} \\
 2K : & x & - 78.20 \text{ gfs} \\
 \hline
 \end{array}$$

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

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 ₂	44.39	0.4674	Si	20.75
TiO ₂	3.39	0.5995	Ti	2.02
Al ₂ O ₃	13.29	0.5293	Al	7.03
Fe ₂ O ₃	1.36	0.6994	Fe ³	0.95
FeO	10.61	0.7773	Fe ²	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 ₂ O	2.82	0.7419	Na	2.09
K ₂ O	1.08	0.8301	K	0.90
P ₂ O ₅	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- (Fe³⁺) és ferro- (Fe²⁺) oxid koncentrációja, így sok esetben csak az összes vas van megadva FeO* vagy Fe₂O₃* formájában. Kőzetkémiai számításokban azonban többnyire szükség van mindkét oxid értékére. Más esetben, amikor az FeO és Fe₂O₃ 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 Fe₂O₃ értéke 1.36t%. Számoljuk ki az összvas értékét FeO*, ill. Fe₂O₃* formájában (az Fe atomtömege 55.847, az FeO gft értéke 71.8464, az Fe₂O₃-é pedig 159.6922)!

☺ FeO → Fe₂O₃ átalakítás:
 FeO=10.61t% → Fe = 10.61 · 0.7773 = 8.25t%
 Fe₂O₃ = 8.25 / 0.6994 = 11.80t%

azaz Fe₂O₃ = 0.7773/0.6994 · FeO = 1.1113 · FeO;
 FeO = 0.6994/0.7773 · Fe₂O₃ = 0.8999 · Fe₂O₃.

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 Fe_2O_3^* formájában van megadva: $\text{Fe}_2\text{O}_3^* = 12.35\text{t}\%$. Számoljuk ki az FeO és Fe_2O_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/10⁶) 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 összevethetőek 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 tömeg százalék	Molekula- tömeg (gft)	molarány → oxid t% / molekulatömeg	molszázalék → 100·molarány / Σ molarány
SiO ₂	44.39	60.0848	0.7388	45.54
TiO ₂	3.39	79.8988	0.0424	2.61
Al ₂ O ₃	13.29	101.9612	0.1303	8.03
Fe ₂ O ₃	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 ₂ O	2.82	61.9790	0.0455	2.80
K ₂ O	1.08	94.2034	0.0115	0.71
P ₂ O ₅	0.60	141.9446	0.0042	0.26
H ₂ 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 ₂	44.39	60.0848	0.7388	1.4776	Si	16.49	41.48
TiO ₂	3.39	79.8988	0.0424	0.0848	Ti	0.95	2.38
Al ₂ O ₃	13.29	101.9612	0.2606	0.3910	Al	5.82	14.63
Fe ₂ O ₃	1.36	159.6922	0.0170	0.0255	Fe ³	0.38	0.95
FeO	10.61	71.8464	0.1477	0.1477	Fe ²	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 ₂ O	2.82	61.9790	0.0910	0.0455	Na	2.03	5.11
K ₂ O	1.08	94.2034	0.0230	0.0115	K	0.51	1.29
P ₂ O ₅	0.60	141.9446	0.0084	0.0211	P	0.19	0.47
H ₂ O	0.74	18.0152	0.0822	0.0411	OH ⁻	1.84	
					O	58.40	
Σ	99.34		1.8634 (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 Al₂O₃ 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⁻ 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: $100 \cdot 0.2606 / 1.7812 = 14.63$.