

# Přepočty chemických analýz pro geology

# chemické analýzy minerálů a hornin

- chemická analýza: EMPA, XRF, „mokrou cestou“
- výsledky chemických analýz jsou uvedeny v hmotnostních procentech
  - hm.% ukazují hmotnost daného prvku (oxidu) v celku (100)
    - součet hm.% všech prvků v analyzovaném materiálu by měl být 100 hm. %
  - pokud není některý prvek analyzován je suma hm. % nižší (H, B, B, Li, C...)
  - amfiboly ~ 98 hm.%, slídy ~ 96 hm.%, turmalíny ~86-88 hm.%, kalcit ~ 56 hm.%,
- suma hm.% reálných analýz 99-101
  - způsobeno např. fluktuací přístroje, kvalitou povrchu vzorku atd.
  - pokud jsou sumy vyšší nebo nižší o 1,5 hm.% a více je třeba zvážit, zda se nejedná o špatnou analýzu

# hmotnostní zlomek, hmotnostní procento

zastoupení látky X v celku vyjadřuje hmotnostní zlomek

$$w(X) = \frac{m(x)}{m_s}, \quad (\text{hodnoty } 0-1)$$

- w(X) - hmotnostní zlomek (podíl) látky X  
m(X) - hmotnost látky X  
m<sub>s</sub> - hmotnost celé soustavy  
(roztok, směs, sloučenina, minerál)

$$m_s = \sum_i m(X_i),$$

hmotnost soustavy je součtem hmotností všech jejích složek.

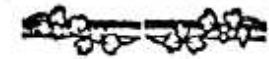
$$w(X) = \frac{m(X)}{\sum_i m(X_i)},$$

$$\sum_i w(X_i) = \frac{\sum_i m(X_i)}{\sum_i m(X_i)}, \quad \text{po upravení dostaneme } \sum_i w(X_i) = 1$$

Hmotnostní procento w<sub>%</sub>(X) látky X v soustavě je definováno jako hmotnostní zlomek w(X) této látky násobený 100.

$$w_{\%}(X) = w(X) * 100 \quad (\text{hodnoty } 0-100), \quad \sum_i w_{\%}(X_i) = 100$$

w<sub>%</sub>(X) je označován také jako hm.% nebo wt.%



Aus einem Schreiben von Hrn. Berg-  
rath Karsten in Berlin.

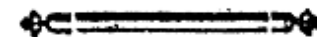
Hr. Prof. Klaproth hat wiederum folgende  
2 Steinarten zerlegt; erstlich den Lillalit, oder  
wie er ihn richtiger nennt, den Lepidolit; er  
enthält:

- 54, 50 Kieselerde
- 38, 25 Thonerde
- 0, 75 Braunstein und Eisen
- 2, 50 Wasser.

Sodann den Bitterspath aus Tyrol: er  
enthält:

- 0, 52 Kalkerde.
- 0, 45 Talkerde.
- 0, 03 Eisen.

Letzterer kommt äußerlich dem Kalkspathe  
nahe, ist aber härter, schwerer, fast immer in  
Rhomben mit rauher Oberfläche krystallisirt,  
welche in Chlorit eingewachsen sind.



# přepočty chemických analýz

- pokud analyzujeme kovy, slitiny, sulfidy, chloridy, fluoridy, atd. uvádíme analýzu v **hmotnostních procentech prvků**, protože se všechny prvky analyzují.



antimonit, M.Kampf, [www.mindat.org](http://www.mindat.org)

- pokud analyzujeme oxidické fáze uvádíme analýzu v **hmotnostních procentech oxidů**
  - měříme pouze obsahy prvků (Si, Al, Fe, atd.), ale kyslík dopočítáme podle stechiometrie



spessartin, J.A. Freilich, [www.mindat.org](http://www.mindat.org)

# základní informace

- $A_r$ =relativní atomová hmotnost
  - kolikrát je atom těžší než 1/12 atomu  $^{12}\text{C}$
- $M_r$ =relativní molekulová hmotnost
  - kolikrát je molekula těžší než 1/12 atomu  $^{12}\text{C}$
  - $M_r(\text{XY})=A_r(\text{X})+A_r(\text{Y})$
- $n$ =Látkové množství -vyjadřuje množství látky pomocí počtu částic [mol]
  - **1 mol** obsahuje tolik částic (atomů, molekul), kolik je atomů ve 12 g  $^{12}\text{C}$
  - Počet částic v 1 mol udává **Avogadrovo číslo**  $N_A = 6.023 \times 10^{23}$ .

- $M$ =Molární hmotnost

$$M = \frac{m}{n} \quad [\text{g} / \text{mol}]$$

$$n = \frac{m}{M}, \quad \text{když } n = 1, \quad \text{tak } m(\text{X}) = M(\text{X})$$

- číselná hodnota hmotnosti 1 molu látky vyjádřená v gramech je rovna  $A_r$  či  $M_r$ .

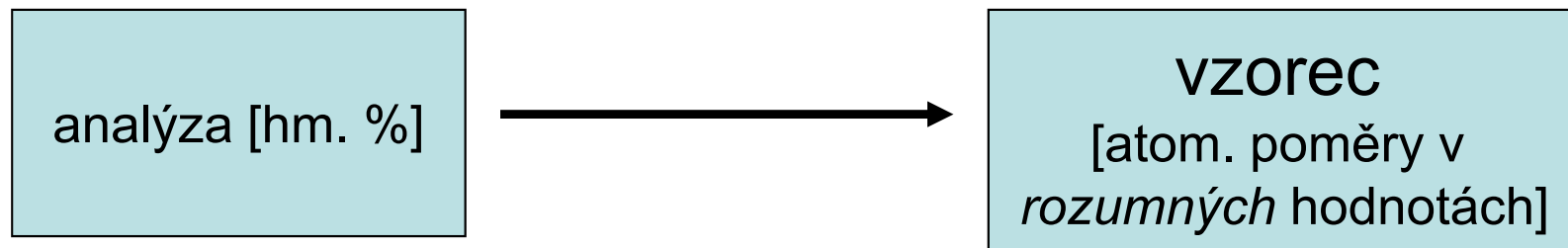
24 <b>Cr</b> Chromium 51.9961	25 <b>Mn</b> Manganese 54.938049	26 <b>Fe</b> Iron 55.845	27 <b>Co</b> Cobalt 58.933200	28 <b>Ni</b> Nickel 58.6934	29 <b>Cu</b> Copper 63.546	30 <b>Zn</b> Zinc 65.39	31 <b>Ga</b> Gallium 69.723
42 <b>Mo</b> Molybdenum 95.94	43 <b>Tc</b> Technetium (98)	44 <b>Ru</b> Ruthenium 101.07	45 <b>Rh</b> Rhodium 102.90550	46 <b>Pd</b> Palladium 106.42	47 <b>Ag</b> Silver 107.8682	48 <b>Cd</b> Cadmium 112.411	49 <b>In</b> Indium 114.818
74 <b>W</b> Tungsten 183.84	75 <b>Re</b> Rhenium 186.207	76 <b>Os</b> Osmium 190.23	77 <b>Ir</b> Iridium 192.217	78 <b>Pt</b> Platinum 195.078	79 <b>Au</b> Gold 196.96655	80 <b>Hg</b> Mercury 200.59	81 <b>Tl</b> Thallium 204.3833

# přepočty chemických analýz

- 1 mol  $\text{Al}_2\text{O}_3$  obsahuje 2 moly Al a 3 moly O
- hmotnost 1 molu Al 26.982 g
- hmotnost 1 molu O 15.999 g
- hmotnost 1 molu  $\text{Al}_2\text{O}_3$  101,96 g
  - skládá se z 2 x 26,98 g (Al) a 3 x 15.9994 g (Si)

13	14	15	16	17
IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
<b>5</b> $2P_{1/2}^{\circ}$ <b>B</b> Boron 10.811 $1s^2 2s^2 2p$ 8.2980	<b>6</b> $3P_0$ <b>C</b> Carbon 12.0107 $1s^2 2s^2 2p^2$ 11.2603	<b>7</b> $4S_{3/2}^{\circ}$ <b>N</b> Nitrogen 14.0067 $1s^2 2s^2 2p^3$ 14.5341	<b>8</b> $3P_2$ <b>O</b> Oxygen 15.9994 $1s^2 2s^2 2p^4$ 13.6181	<b>9</b> $2P_{3/2}^{\circ}$ <b>F</b> Fluorine 18.9984032 $1s^2 2s^2 2p^5$ 17.4228
<b>13</b> $2P_{1/2}^{\circ}$ <b>Al</b> Aluminum 26.981538 $[\text{Ne}]3s^2 3p$ 5.9858	<b>14</b> $3P_0$ <b>Si</b> Silicon 28.0855 $[\text{Ne}]3s^2 3p^2$ 8.1517	<b>15</b> $4S_{3/2}^{\circ}$ <b>P</b> Phosphorus 30.973761 $[\text{Ne}]3s^2 3p^3$ 10.4867	<b>16</b> $3P_2$ <b>S</b> Sulfur 32.065 $[\text{Ne}]3s^2 3p^4$ 10.3600	<b>17</b> $2P_{3/2}^{\circ}$ <b>Cl</b> Chlorine 35.453 $[\text{Ne}]3s^2 3p^5$ 12.9676

# přepočet analýzy minerálu na vzorec



$$w_{\%}(X)[\text{hm. \%}] = \frac{m(X)[\text{g}]}{m_s[\text{g}]} \cdot 100, \text{ když } m_s = 100, \text{ potom } w_{\%}(X) = m(X)[\text{g}]$$

$$M(X) = \frac{m(X)}{n(X)}, \quad n(X) = \frac{m(X)}{M(X)} \quad \text{po dosazení dostaneme} \quad n(X) = \frac{w_{\%}(X)}{M(X)}$$

$$n(X) \times A_n = \text{počet částic látky X}, \quad n(Y) \times A_n = \text{počet částic látky Y}$$

$$\frac{n(X) \times A_n}{n(Y) \times A_n} = \frac{n(X)}{n(Y)} = \text{poměr mezi počtem částicemi X a Y}$$

# přepočet analýzy minerálu na vzorec

- chalkopyrit  $\text{CuFeS}_2$
- můžeme normalizovat na 2 S, 1 Cu, 1 Fe nebo 4 Cu+Fe+S

$$n(X) = \frac{w\%(X)}{M(X)}$$

	hm. %	M	n			
		g/mol	mol <sup>-1</sup>	normalizace	koef. přepočtu	výsledek
Cu	34.63	63.55	0.5449	1	1.8353	1
Fe	30.43	55.85	0.5449	1		1
S	34.94	32.065	1.0897	2		2
suma	100		2.1794	4		4



# přepočty chemických analýz

- galenit – PbS
  - olovo : síře je 1:1
  - chemická analýza galenitu

prvek	hm. %
Pb	86,60
S	13,40
suma	100,00

- 100 g galenitu obsahuje tedy 86,6 g Pb a 13,4 S

# přepočty chemických analýz

- wollastonit –  $\text{CaSiO}_3$ 
  - Ca:Si:O je 1:1:3
  - CaO:SiO<sub>2</sub> je 1:1

prvek	hm.%	oxid	hm.%
Ca	34,5	CaO	48,28
Si	24,18	SiO <sub>2</sub>	51,72
O	41,32	suma	100,00
suma	100,00		

# přepočty chemických analýz

- galenit PbS
- 1 mol Pb 207,2 g a 1 mol S 32,065 g
- 1 mol galenitu 239,265 g
  
- jak vypočítat teoretickou analýzu galenitu ?
  
- $239,265/100=2,39265$
- $\text{Pb } 207,2 / 2,39265=86,599$
- $\text{S } 32,065 / 2,39265=13,401$

# přepočty bezvodých oxidů

- silikáty –forsterit-ferrosilit  $(\text{Fe},\text{Mg})_2\text{Si}_2\text{O}_6$   
– normalizace na 2 Si

	1	2	3	4	5	6	7
	hm. %	mol. mh	počet molů oxidů	počet prvku v oxidu	počet molů prvku	koeficient	
MgO	17.34	40.305	0.430219576	1	0.430219576		0.999418
FeO	30.93	71.845	0.430510126	1	0.430510126		1.000093
SiO <sub>2</sub>	51.73	60.0855	0.860939827	1	0.860939827	2.32304272	2
suma	100						

- normalizace na 6 kyslíků

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
	hm. %	mol. mh	počet molů oxidů	počet kyslíků v oxidu	počet molů kyslíků	koeficient	počet prvku v oxidu	počet molů prvku	výsledek
MgO	17.34	40.305	0.430219576	1	0.430219576		1	0.43022	0.9995
FeO	30.93	71.845	0.430510126	1	0.430510126		1	0.43051	1.000175
SiO <sub>2</sub>	51.73	60.0855	0.860939827	2	1.721879655		1	0.86094	2.000163
suma	100				<b>2.582609357</b>	2.32323173			

# dopočet neanalyzovaných prvků

- dopočet neanalyzovaných prvků (OH, CO<sub>2</sub>, B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, BeO, Li<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>O) podle stechiometrie
- nejprve postupujeme jako např. u bezvodých silikátů až po normalizaci
- určíme množství prvku, které chceme dopočítat, na základě stechiometrie nebo na základě valenčního vyrovnaní
- zpětně vypočítáme hm. % oxidů neanalyzovaných prvků tak, že postupujeme analogicky pozpátku (inverzně)

# dopočet neanalyzovaných prvků (OH)

dopočet OH anit –  $\text{KFe}_2\text{AlSi}_3\text{O}_{10}(\text{OH})_2$

počítáme na: 10 kyslíků + (2 OH = 1 O) = 11 kyslíků

	hm. %	mol.hm	počet molů	počet molů O	počet molů M	koeficient	vzorec
K <sub>2</sub> O	9.2	94.196	0.0976687	0.097669	0.195337	počítáno na 11 O, OH=1/2O	0.999926
FeO	42.11	71.8444	0.5861278	0.586128	0.586128		3.000371
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.96	101.961	0.0976844	0.293053	0.195369		1.000087
SiO <sub>2</sub>	35.21	60.0843	0.58601	1.17202	0.58601		2.999768
suma	96.48			2.14887		5.1189702	
H <sub>2</sub> O	<b>3.519321</b>	18.0153	<b>0.195352</b>		<b>0.390704</b>		<b>2</b>



# dopočet neanalyzovaných prvků (CO<sub>2</sub>, BeO, B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Li<sub>2</sub>O)

- pokud dopočítáváme neanalyzovaný oxid (ne OH), tak jeho kyslíky při normalizaci nezapočítáváme.
- dopočet CO<sub>2</sub> např. v karbonátech - dolomit CaMg(CO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>
- CaO + MgO + 2 CO<sub>2</sub>
- dolomit počítáme na 2 kyslíky

	hm. %	mol.hm	počet molů	počet molů O	počet molů M	koeficient	vzorec
MgO	21.86	40.3044	0.542373	0.542373	0.542373	na 2 O	1.00008
CaO	30.41	56.0774	0.542286	0.542286	0.542286		0.99992
suma	52.27			1.084659	0	1.84389792	
CO <sub>2</sub>	<b>47.73561</b>	44.0098	<b>1.084659</b>		<b>1.084659</b>		<b>2</b>

# dopočet neanalyzovaných prvků

- např. fluorapatit  $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{F}, \text{Cl}, \text{OH})$
- 5 CaO
- $\frac{3}{2}$  P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>
- po součtu dostaneme 5 Ca, 3 P a 12,5 O, ve vzorci je ale jen 12 kyslíku
- místo  $\frac{1}{2}$  O je ve vzorci F, Cl nebo OH
- měříme prvky, ale vyjadřujeme je jako oxidy podle valence
- pokud jsou přítomny i jiné anionty mimo kyslíku (F, Cl), je třeba odečíst část O, které ve skutečnosti valenčně vyváže F, Cl.
- vyjadřuje se jako F=-O
  
- dopočet OH za přítomnosti F, Cl



# přepočty s F a Cl

při normalizaci počítáme s F a Cl podobně jako s OH

flourapatit  $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{F},\text{Cl},\text{OH})$

normalizace na např.  $12 \text{ O} + \{(\text{F},\text{Cl},\text{OH})=1/2 \text{ O}\} = 12,5 \text{ O}$

	hm. %	mol. hm.	počet molů	počet molů O	počet molů M	koeficient	výsledek
CaO	55.6	56.0774	0.991487	0.991487	0.991487		5.000069
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	42.22	141.945	0.297439	1.487196	0.594878		2.999972
F	3.77	18.9984	0.198438		0.198438		1.000722
suma	101.59			2.478683		5.043002	
F=-O	-1.59						
F=-O	=3.77/mol.hm. F x (mol.hm.O/2) x -1						

## PRO MINERÁLY SKUPINY APATITU

pokud nám vyšel součet F a Cl menší než 1 apfu, je třeba dopočítat OH

pokud nám vyšel obsah P (+Si, As, V, S...) menší než 3 apfu, je třeba dopočítat CO<sub>2</sub>