

skupina granatu

A3B2T3O12

		A	B
		pyrop Mg	Al
		almandin Fe2+	Al
A	Fe2+,Ca,Mg,Mn...	spessartin Mn	Al
B	Al, Fe3+, Cr3+, V3+, Ti, Zr.....	andradit Fe2+	Fe3+
T	Si, Al, OH, F,.....	grossular Ca	Al
		uvarovit Ca	Cr3+
		goldmanit Ca	V3+

mol. hm.	60.0843	101.961	40.3044	71.8444	70.9303	56.0774	
	SiO2	Al2O3	MgO	FeO	MnO	CaO	Total
nr.01	37.01	9.85	2.18	25.25	1.78	22.72	98.79
nr.02	38.76	21.57	2.04	16.06	1.49	20.34	100.24
nr.03	42.90	20.07	25.08	8.60	1.28	2.06	99.99
nr.04	37.15	20.25	1.93	1.44	37.23	2.36	100.36
nr.05	37.03	20.33	2.11	36.97	1.60	2.21	100.25
nr.06	36.56	20.87	2.17	37.43	1.44	2.17	100.64
nr.07	36.61	20.46	2.27	37.60	1.73	1.13	99.81
nr.08	36.58	20.56	2.24	38.09	1.64	1.06	100.17
nr.09	36.65	20.59	2.05	37.28	1.57	1.87	100.01
nr.10	36.52	20.92	1.75	36.84	2.49	2.05	100.56
nr.11	36.58	20.95	1.48	35.91	3.86	2.06	100.84
nr.12	36.99	20.33	1.17	33.84	5.51	2.45	100.29
nr.13	36.38	20.36	0.99	33.39	6.19	3.12	100.44
nr.14	36.87	20.55	0.98	31.66	6.92	3.37	100.35
nr.15	36.24	20.41	0.99	31.98	7.33	3.76	100.70
nr.16	36.48	20.24	0.93	30.92	7.36	4.03	99.96
nr.17	35.97	20.72	0.92	31.23	7.31	4.33	100.48
nr.18	36.44	20.09	0.89	30.69	7.20	4.38	99.69
nr.19	36.49	20.29	0.80	30.91	7.25	4.09	99.83
nr.20	36.57	20.61	0.91	31.20	7.37	3.79	100.44
nr.21	36.60	20.29	0.95	31.63	6.90	3.59	99.96
nr.22	36.35	20.47	1.04	32.66	6.82	3.05	100.40
nr.23	36.61	20.50	1.05	32.26	6.42	3.20	100.04
nr.24	36.55	20.35	1.10	33.10	6.25	2.84	100.19

T
Si
Si
Si
Si
Si
Si
Si

Protože u většiny analýz není stanoveno zastoupení FeO a Fe₂O₃ ale pouze FeO nebo Fe₂O₃, je potřeba Fe rozpočítat.

1) změna valence Fe na základě elektroneutality vzorce, např. na 8 cationu a 12 O

2) změna valence Fe na základě obsazování jednotlivých strukturních pozic. Pokud máme v pozici B deficit, tak jej doplníme Fe a prohlásíme jej za Fe³⁺, zbytek Fe²⁺ je o toto množství sníženo.

nakonec je nutné ještě rozdělit FeO na FeO a Fe₂O₃ podle zjištěného poměru Fe²⁺ a Fe³⁺

počet molu oxidů					
Al ₂ O ₃	MgO	FeO	MnO	CaO	
3.000	1.000	1.000	1.000	1.000	
2.000	1.000	1.000	1.000	1.000	
0.097	0.054	0.351	0.025	0.405	
0.212	0.050	0.223	0.021	0.363	
0.197	0.622	0.120	0.018	0.037	
0.199	0.048	0.020	0.525	0.042	
0.199	0.052	0.515	0.023	0.039	
0.205	0.054	0.521	0.020	0.039	
0.201	0.056	0.523	0.024	0.020	
0.202	0.056	0.530	0.023	0.019	
0.202	0.051	0.519	0.022	0.033	
0.205	0.043	0.513	0.035	0.037	
0.205	0.037	0.500	0.054	0.037	
0.199	0.029	0.471	0.078	0.044	
0.200	0.025	0.465	0.087	0.056	
0.202	0.024	0.441	0.098	0.060	
0.200	0.025	0.445	0.103	0.067	
0.198	0.023	0.430	0.104	0.072	
0.203	0.023	0.435	0.103	0.077	
0.197	0.022	0.427	0.102	0.078	
0.199	0.020	0.430	0.102	0.073	
0.202	0.023	0.434	0.104	0.067	
0.199	0.024	0.440	0.097	0.064	
0.201	0.026	0.455	0.096	0.054	
0.201	0.026	0.449	0.091	0.057	
0.200	0.027	0.461	0.088	0.051	

počet mo			
Si	Al	Mg	
0.616	0.193	0.054	
0.645	0.423	0.050	
0.714	0.394	0.622	
0.618	0.397	0.048	
0.616	0.399	0.052	
0.608	0.409	0.054	
0.609	0.401	0.056	
0.609	0.403	0.056	
0.610	0.404	0.051	
0.608	0.410	0.043	
0.609	0.411	0.037	
0.616	0.399	0.029	
0.606	0.399	0.025	
0.614	0.403	0.024	
0.603	0.400	0.025	
0.607	0.397	0.023	
0.599	0.406	0.023	
0.606	0.394	0.022	
0.607	0.398	0.020	
0.609	0.404	0.023	
0.609	0.398	0.024	
0.605	0.402	0.026	
0.609	0.402	0.026	
0.608	0.399	0.027	

lu kationů

počet molů kyslíku

Fe	Mn	Ca	O [Si]	O [Al]	O [Mg]	O [Fe2+]	O [Mn]
0.351	0.025	0.405	1.232	0.290	0.054	0.351	0.025
0.223	0.021	0.363	1.290	0.635	0.050	0.223	0.021
0.120	0.018	0.037	1.428	0.590	0.622	0.120	0.018
0.020	0.525	0.042	1.237	0.596	0.048	0.020	0.525
0.515	0.023	0.039	1.232	0.598	0.052	0.515	0.023
0.521	0.020	0.039	1.217	0.614	0.054	0.521	0.020
0.523	0.024	0.020	1.219	0.602	0.056	0.523	0.024
0.530	0.023	0.019	1.218	0.605	0.056	0.530	0.023
0.519	0.022	0.033	1.220	0.606	0.051	0.519	0.022
0.513	0.035	0.037	1.215	0.616	0.043	0.513	0.035
0.500	0.054	0.037	1.217	0.616	0.037	0.500	0.054
0.471	0.078	0.044	1.231	0.598	0.029	0.471	0.078
0.465	0.087	0.056	1.211	0.599	0.025	0.465	0.087
0.441	0.098	0.060	1.227	0.605	0.024	0.441	0.098
0.445	0.103	0.067	1.206	0.600	0.025	0.445	0.103
0.430	0.104	0.072	1.214	0.595	0.023	0.430	0.104
0.435	0.103	0.077	1.197	0.610	0.023	0.435	0.103
0.427	0.102	0.078	1.213	0.591	0.022	0.427	0.102
0.430	0.102	0.073	1.215	0.597	0.020	0.430	0.102
0.434	0.104	0.067	1.217	0.607	0.023	0.434	0.104
0.440	0.097	0.064	1.218	0.597	0.024	0.440	0.097
0.455	0.096	0.054	1.210	0.602	0.026	0.455	0.096
0.449	0.091	0.057	1.218	0.603	0.026	0.449	0.091
0.461	0.088	0.051	1.217	0.599	0.027	0.461	0.088

	normalizace na 8 vsech cationu kysl.	počet atomu ve v			
		2.000	1.500	1.000	1.000
O [Ca]	koeficient	Si	Al	Mg	Fe
0.405	4.863	2.996	0.940	0.264	1.709
0.363	4.636	2.990	1.962	0.234	1.036
0.037	4.201	3.000	1.653	2.614	0.503
0.042	4.847	2.997	1.925	0.232	0.097
0.039	4.866	2.999	1.941	0.255	2.504
0.039	4.843	2.947	1.983	0.261	2.523
0.020	4.893	2.981	1.964	0.276	2.561
0.019	4.879	2.970	1.967	0.271	2.586
0.033	4.881	2.977	1.971	0.249	2.533
0.037	4.861	2.954	1.995	0.210	2.493
0.037	4.856	2.956	1.995	0.178	2.427
0.044	4.891	3.011	1.951	0.141	2.304
0.056	4.886	2.959	1.952	0.120	2.271
0.060	4.880	2.995	1.967	0.119	2.150
0.067	4.868	2.936	1.949	0.119	2.167
0.072	4.898	2.974	1.944	0.114	2.108
0.077	4.869	2.915	1.979	0.111	2.117
0.078	4.910	2.978	1.935	0.108	2.097
0.073	4.906	2.980	1.953	0.097	2.111
0.067	4.875	2.967	1.971	0.110	2.117
0.064	4.901	2.986	1.951	0.116	2.158
0.054	4.885	2.955	1.962	0.126	2.221
0.057	4.896	2.983	1.969	0.127	2.199
0.051	4.895	2.978	1.954	0.133	2.255

vzorci

	1.000	1.000	
			Fe = Fe2+
Mn	Ca	O	
	0.122	1.970	11.465
	0.097	1.681	11.971
	0.076	0.154	11.826
	2.544	0.204	11.960
	0.110	0.192	11.969
	0.098	0.187	11.939
	0.120	0.099	11.963
	0.113	0.092	11.954
	0.108	0.163	11.963
	0.171	0.178	11.951
	0.264	0.179	11.954
	0.380	0.214	11.986
	0.427	0.272	11.935
	0.476	0.293	11.978
	0.503	0.326	11.910
	0.509	0.352	11.946
	0.502	0.376	11.904
	0.499	0.383	11.945
	0.501	0.358	11.956
	0.507	0.329	11.952
	0.477	0.313	11.961
	0.470	0.266	11.936
	0.443	0.280	11.967
	0.431	0.248	11.955

1. možnost

rozpocet Fe2+/ Fe3+ na zaklade norm

kysliku na cation	1.000
	Fe2+
	0.640
	0.978
	0.155
	0.016
	2.443
	2.400
	2.487
	2.494
	2.458
	2.395
	2.335
	2.276
	2.140
	2.107
	1.988
	2.000
	1.925
	1.988
	2.023
	2.021
	2.079
	2.093
	2.133
	2.166

rozpocet Fe2+/ Fe3+ na zaklade obsaz pozic

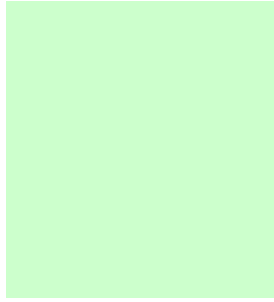
2. možnost

množství Fe3+ a Fe2+ se určí až během obsaz deficit v B site se zaplní Fe3+, zbyte

při tomto kroku není třeba pocitat "počet mol

nakonec je nutne znovu dopocitat m

nakonec je naše zlova dopetá m



analýza na 8 cat. a 12 kyslíku

1.500		cationy rozdelene						
Fe3+	pocet O po rozpoctu Fe	Mg	Mn	Ca	A site	Fe2+	subtot	
1.069	12.000	0.264	0.122	1.970		0.640	2.996	
0.058	12.000	0.234	0.097	1.681		0.978	2.990	
0.348	12.000	2.614	0.076	0.154		0.155	3.000	
0.081	12.000	0.232	2.544	0.204		0.016	2.997	
0.062	12.000	0.255	0.110	0.192		2.443	2.999	
0.123	12.000	0.261	0.098	0.187		2.400	2.947	
0.074	12.000	0.276	0.120	0.099		2.487	2.981	
0.092	12.000	0.271	0.113	0.092		2.494	2.970	
0.075	12.000	0.249	0.108	0.163		2.458	2.977	
0.097	12.000	0.210	0.171	0.178		2.395	2.954	
0.092	12.000	0.178	0.264	0.179		2.335	2.956	
0.027	12.000	0.141	0.380	0.214		2.276	3.011	
0.130	12.000	0.120	0.427	0.272		2.140	2.959	
0.043	12.000	0.119	0.476	0.293		2.107	2.995	
0.179	12.000	0.119	0.503	0.326		1.988	2.936	
0.108	12.000	0.114	0.509	0.352		2.000	2.974	
0.192	12.000	0.111	0.502	0.376		1.925	2.915	
0.110	12.000	0.108	0.499	0.383		1.988	2.978	
0.088	12.000	0.097	0.501	0.358		2.023	2.980	
0.096	12.000	0.110	0.507	0.329		2.021	2.967	
0.078	12.000	0.116	0.477	0.313		2.079	2.986	
0.128	12.000	0.126	0.470	0.266		2.093	2.955	
0.066	12.000	0.127	0.443	0.280		2.133	2.983	
0.090	12.000	0.133	0.431	0.248		2.166	2.978	

rozdelení jednotlivých strukturních

	cationy rozdelene do jednotlivých						
	Mg	Mn	Ca	A site	Fe2+	subtot	
	0.264	0.122	1.970		0.644	3.000	
	0.234	0.097	1.681		0.988	3.000	
	2.614	0.076	0.154		0.156	3.000	
	0.232	2.544	0.204		0.019	3.000	
	0.255	0.110	0.192		2.444	3.000	
	0.261	0.098	0.187		2.453	3.000	
uvolnění jednotlivých strukturních pozic. k Fe zustane jako Fe2+.	0.276	0.120	0.099		2.506	3.000	
	0.271	0.113	0.092		2.524	3.000	
	0.249	0.108	0.163		2.481	3.000	
	0.210	0.171	0.178		2.441	3.000	
	0.178	0.264	0.179		2.379	3.000	
	0.141	0.380	0.214		2.254	2.989	
ú kyslíku" před výpočtem vzorce	0.120	0.427	0.272		2.181	3.000	
	0.119	0.476	0.293		2.112	3.000	
	0.119	0.503	0.326		2.052	3.000	
	0.114	0.509	0.352		2.026	3.000	
počet kyslíku ve vzorci	0.111	0.502	0.376		2.010	3.000	

množství kyslíku ve vzduchu

0.108	0.499	0.383	2.010	3.000
0.097	0.501	0.358	2.043	3.000
0.110	0.507	0.329	2.055	3.000
0.116	0.477	0.313	2.094	3.000
0.126	0.470	0.266	2.138	3.000
0.127	0.443	0.280	2.150	3.000
0.133	0.431	0.248	2.188	3.000

do jednotlivých pozic na základe obecného vzorca

B site			T site			O
Al	Fe3+	subtot	Si	Al	subtot	
0.935	1.069	2.004	2.996	0.004	3.000	12.000
1.952	0.058	2.010	2.990	0.010	3.000	12.000
1.653	0.348	2.000	3.000	0.000	3.000	12.000
1.922	0.081	2.003	2.997	0.003	3.000	12.000
1.939	0.062	2.001	2.999	0.001	3.000	12.000
1.930	0.123	2.053	2.947	0.053	3.000	12.000
1.945	0.074	2.019	2.981	0.019	3.000	12.000
1.938	0.092	2.030	2.970	0.030	3.000	12.000
1.948	0.075	2.023	2.977	0.023	3.000	12.000
1.949	0.097	2.046	2.954	0.046	3.000	12.000
1.952	0.092	2.044	2.956	0.044	3.000	12.000
1.951	0.027	1.978	3.011	0.000	3.011	12.000
1.911	0.130	2.041	2.959	0.041	3.000	12.000
1.962	0.043	2.005	2.995	0.005	3.000	12.000
1.885	0.179	2.064	2.936	0.064	3.000	12.000
1.918	0.108	2.026	2.974	0.026	3.000	12.000
1.894	0.192	2.085	2.915	0.085	3.000	12.000
1.913	0.110	2.022	2.978	0.022	3.000	12.000
1.932	0.088	2.020	2.980	0.020	3.000	12.000
1.938	0.096	2.033	2.967	0.033	3.000	12.000
1.936	0.078	2.014	2.986	0.014	3.000	12.000
1.917	0.128	2.045	2.955	0.045	3.000	12.000
1.952	0.066	2.017	2.983	0.017	3.000	12.000
1.932	0.090	2.022	2.978	0.022	3.000	12.000

ých pozic na základe obecného vzorca

B site			T site			O
Al	Fe3+	subtot	Si	Al	subtot	
0.935	1.065	2.000	2.996	0.004	3.000	11.998
1.952	0.048	2.000	2.990	0.010	3.000	11.995
1.653	0.347	2.000	3.000	0.000	3.000	12.000
1.922	0.078	2.000	2.997	0.003	3.000	11.998
1.939	0.061	2.000	2.999	0.001	3.000	11.999
1.930	0.070	2.000	2.947	0.053	3.000	11.974
1.945	0.055	2.000	2.981	0.019	3.000	11.991
1.938	0.062	2.000	2.970	0.030	3.000	11.985
1.948	0.052	2.000	2.977	0.023	3.000	11.989
1.949	0.051	2.000	2.954	0.046	3.000	11.977
1.952	0.048	2.000	2.956	0.044	3.000	11.978
1.951	0.049	2.000	3.011	0.000	3.011	12.011
1.911	0.089	2.000	2.959	0.041	3.000	11.979
1.962	0.038	2.000	2.995	0.005	3.000	11.997
1.885	0.115	2.000	2.936	0.064	3.000	11.968
1.918	0.082	2.000	2.974	0.026	3.000	11.987
1.894	0.106	2.000	2.915	0.085	3.000	11.957

1.913	0.087	2.000	2.978	0.022	3.000	11.989
1.932	0.068	2.000	2.980	0.020	3.000	11.990
1.938	0.062	2.000	2.967	0.033	3.000	11.983
1.936	0.064	2.000	2.986	0.014	3.000	11.993
1.917	0.083	2.000	2.955	0.045	3.000	11.978
1.952	0.048	2.000	2.983	0.017	3.000	11.991
1.932	0.068	2.000	2.978	0.022	3.000	11.989

dále je nutno rozdělit FeO na FeO a Fe₂O₃ na základě zjištěného poměru Fe²⁺ a Fe³⁺

$$\text{FeO}^* = \text{FeO} \times \text{Fe}^{2+} / (\text{Fe}^{2+} + \text{Fe}^{3+})$$

$$\text{Fe}_2\text{O}_3^* = (\text{FeO} \times \text{Fe}^{3+} / (\text{Fe}^{2+} + \text{Fe}^{3+})) \times 1.1114$$

FeO*	Fe ₂ O ₃ *	kontrola sumy analýzy
9.45	17.56	100.55
15.15	1.00	100.34
2.66	6.61	100.65
0.24	1.33	100.49
36.06	1.01	100.35
35.61	2.03	100.84
36.52	1.20	99.93
36.73	1.51	100.32
36.18	1.22	100.14
35.40	1.59	100.72
34.55	1.52	100.99
33.44	0.45	100.33
31.47	2.13	100.65
31.02	0.71	100.42
29.33	2.94	101.00
29.33	1.76	100.13
28.41	3.14	100.80
29.09	1.78	99.86
29.62	1.44	99.98
29.79	1.56	100.60
30.48	1.28	100.08
30.78	2.09	100.61
31.30	1.07	100.15
31.79	1.46	100.34

dále je nutno rozdělit FeO na FeO a Fe₂O₃ na základě zjištěného poměru Fe²⁺ a Fe³⁺

$$\text{FeO}^* = \text{FeO} \times \text{Fe}^{2+} / (\text{Fe}^{2+} + \text{Fe}^{3+})$$

$$\text{Fe}_2\text{O}_3^* = (\text{FeO} \times \text{Fe}^{3+} / (\text{Fe}^{2+} + \text{Fe}^{3+})) \times 1.1114$$

FeO*	Fe ₂ O ₃ *
9.51	17.48
15.31	0.83
2.66	6.60
0.28	1.28
36.08	0.99
36.39	1.15
36.79	0.90
37.17	1.02
36.52	0.85
36.08	0.84
35.20	0.80
33.12	0.81
32.07	1.46
31.10	0.62
30.28	1.89
29.72	1.34
29.66	1.75

29.41	1.42
29.92	1.10
30.28	1.02
30.69	1.04
31.44	1.36
31.56	0.79
32.11	1.11