

Varga Andrea: Geokémia olvasóleckék
8. olvasólecke

A főelem-geokémia alapjai

Az olvasólecke célja: a teljes mintából meghatározott főelem adatsorok jellemzőinek bemutatása; az izzítási veszteség fogalmának és adatértelmezési szerepének tisztázása; a főelem-geokémia alapjainak megvilágítása: ásványtani kapcsolatok és összefüggések, korlátok és lehetőségek, geokémiai diagramok (a feldolgozáshoz szükséges idő kb. 50 perc)

A főelemek geokémiai jelentősége

A gyakoriság alapján megkülönböztetett „major” főelemek (*major elements*) átlagos földkéregbeli koncentrációja meghaladja az 1 tömeg%-ot, a „minor” főelemek (TiO_2 , MnO , P_2O_5 ; *minor elements*) mennyisége viszont többnyire 0,1–1 tömeg% közötti. A különböző geológiai mintákban **a főelemek koncentrációja viszonylag tág határokon belül mozoghat, amit elsősorban az ásványos összetétel befolyásol.** A főelemek mennyiségét, azaz a mintához kapcsolódó geokémiai adatot oxidos formában és tömeg%-ban (m/m% vagy g/g%) adják meg a kémiai elemzéskor („*major oxides in wt%*” vagy „*in mass%*”): SiO_2 , TiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , MnO , MgO , CaO , Na_2O , K_2O és P_2O_5 . A változó vegyértékű vas mennyisége leggyakrabban összes vasként (FeO vagy Fe_2O_3 formában kifejezve) szerepel.

1582

International Journal of Earth Sciences (2019) 108:1571–1593

Table 1 Whole rock major and trace element composition of the studied slate samples

	Samples					
	765.5	776.2	777	777.2	778	779
Major elements (in mass%)						
SiO_2	61.59	62.48	60.14	62.87	63.61	64.18
Al_2O_3	17.93	16.60	17.17	17.59	17.01	18.87
Fe_2O_3	7.00	7.72	7.99	6.19	6.02	4.00
MgO	2.81	3.19	3.68	2.92	2.92	2.05
CaO	0.46	0.28	0.26	0.30	0.29	0.08
Na_2O	1.06	2.86	2.36	2.71	1.79	1.01
K_2O	3.95	2.19	2.45	2.69	3.03	4.73
TiO_2	0.77	0.76	0.74	0.76	0.72	0.71
P_2O_5	0.30	0.12	0.11	0.13	0.16	0.05
MnO	0.09	0.07	0.10	0.08	0.05	0.03
LOI	3.80	3.50	4.80	3.60	4.20	4.10
Total	95.96	96.27	95.00	96.24	95.60	95.71
ICV	0.90	1.03	1.02	0.89	0.87	0.67

A 10 főelem koncentrációja tömeg%-ban, oxidos formában megadva.

A főelemek koncentrációjának megadása a mélyfúrásokból ismert dél-dunántúli szilur (~430–440 millió éves) agyagpala rétegsor (Szalatnaki Agypala Formáció, Horváthertelend–1 fúrás) példáján

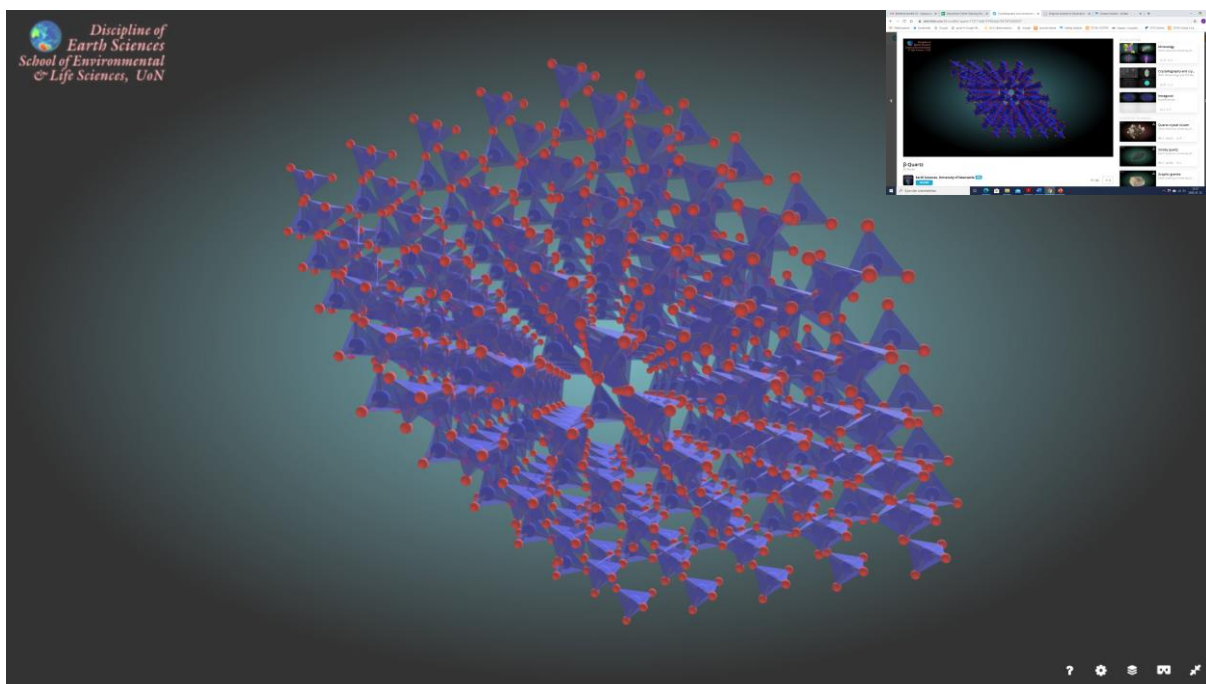
A nagy mennyiségben előforduló főelemek (major) koncentrációja a kőzetek ásványos összetételét és rendszertani helyét határozza meg, ami lehetőséget biztosít **a minta kémiai osztályozására**. Ezek az elemek a keletkezés (pl. olvadási és kristályosodási folyamatok, olvadék viszkozitása magmás rendszerben) és az átalakulás (pl. kémiai mállás mértéke üledékes rendszerben) körülményeire szintén utalnak, ezért fontos genetikai információkat rejtenek.

A kis mennyiségben előforduló főelemek (minor) általában valamelyik nagy mennyiségben előforduló főelemet helyettesítik a kőzetalkotó ásványok kristályrácsában (pl. a mangán a vasat). Gyakori az is, hogy széles körben elterjedt, de kis mennyiségben előforduló ásványokat, úgynevezett **akcesszóriákat formálnak (mellékes ásványok)**. Ilyen ásvány az apatit, ami a foszfor elsődleges hordozója, továbbá az ilmenit, a rutil és a titanit, amelyek a leggyakoribb titántartalmú fázisok. Bizonyos mintákban a króm szintén elérheti a főelemekre jellemző mennyiséget, ez az elem többnyire krómit formájában található meg.

A főelemek leggyakoribb hordozó fázisai

A főelemek leggyakoribb hordozó fázisai a különböző szilikátok és a kvarc (szerkezete miatt gyakran ezt az oxidásványt is a szilikátokkal együtt tárgyalják). Ez különösen igaz az **SiO₂** és az **Al₂O₃** teljes mintából meghatározott mennyiségére. Az **Si⁴⁺ a szilikátok leggyakoribb kationja**, ami a köpenyásványokban (pl. olivin, piroxén, plagioklász, gránát), a gyakori magmás kőzetalkotó ásványokban (pl. olivin, piroxén, amfibol, kvarc, földpátok), továbbá a törmelékes üledékekben és kőzetekben (pl. kvarc és agyagásványok), valamint metamorf ásványokban is megtalálható. A köpeny felső részében, a földkéregben és a felszínen jellemző nyomásviszonyok mellett a szilícium tetraéderes koordinációban jelenik meg, négy oxigén által formált tetraéder közepén elhelyezkedve. Ebben a pozícióban tetraéderes koordinációjú alumínium (Al³⁺) helyettesítheti, az alumínium azonban oktaéderes kationpozícióban szintén gyakran megjelenik (szilárd oldatot képezve a kalciummal, magnéziummal vagy a vassal).

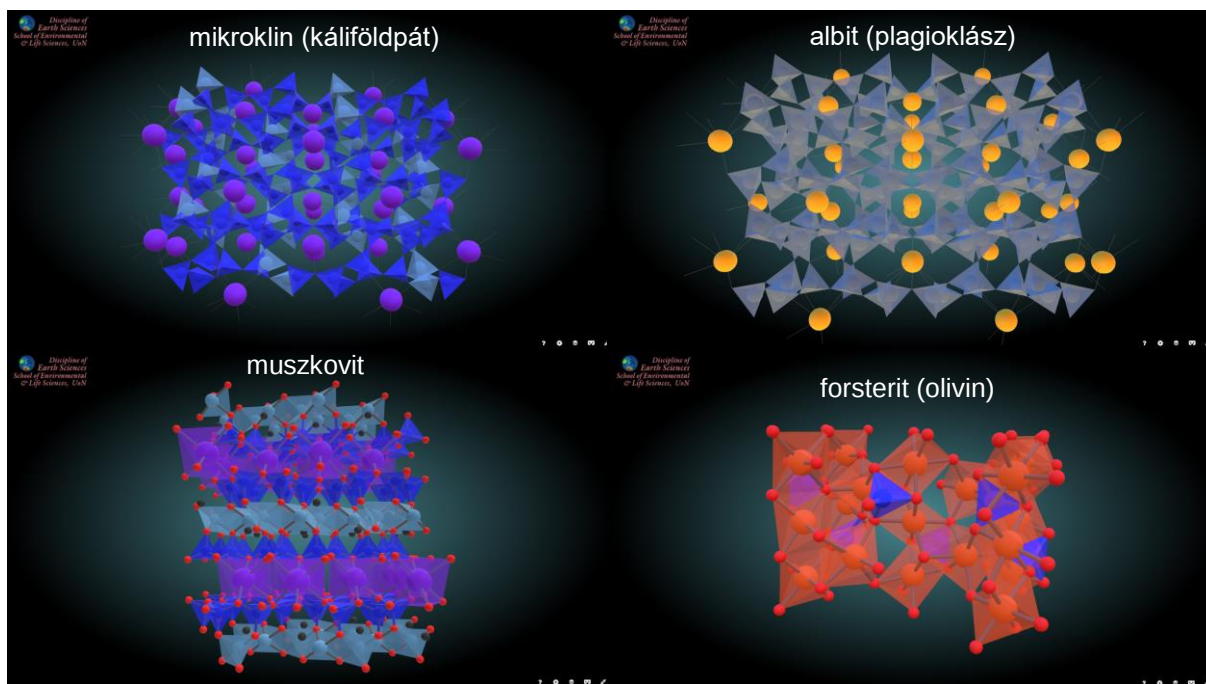
Metamorf folyamatok hatására általában nem változik a Si/Al arány (pl. az albit stabilis ásványfázis metamorf környezetben is). Üledékes környezetben az alumínium általában immobilis, a Si-tartalom viszont a pH függvényében mobilizálódhat (pl. földpátmállás: enyhén savas pH mellett Si-kilúgozódás figyelhető meg, ami az alumíniumásványok dúsulását eredményezheti; *bauxitképződés*). Az SiO₂ (kvarc) oldhatósága vizes fluidumokban növekszik a hőmérséklet és a pH növekedésével.



A kvarc kristályszerkezetének 3D modellje: a szilícium tetraédes koordinációban jelenik meg, négy oxigén (piros) által formált tetraéder közepén elhelyezkedve, a tetraéderek csúcaikkal összekapcsolódva háromdimenziós térrácsot alkotnak. Itt elérhető:
<https://sketchfab.com/WVUpetrology/collections/crystallography-and-crystal-structure>

A nátrium és a kálium a földpátokban (térhálós szilikátok) fordul elő legnagyobb mennyiségben (plagioklászok, káliföldpátok); a földpátok kristályszerkezetéből a mállás vagy a metamorf folyamatok hatására könnyen eltávoznak. A főelemek közül az **Na₂O** és a **K₂O** erősen mobilis komponensek (LIL elemek, alkálifémionok), hiszen alapvetően ionos kötéssel kapcsolódnak a térrácsban. Ez a kötés vizes közegben viszonylag könnyen felbomlik, ezért a Na⁺ és a K⁺ hidratált formában oldatba kerülhet. Üledékes környezetben a káliumion adszorpcióval szilárd fázisokon (pl. agyagásványok) kötődhet meg, ezért a kémiai mállás során tapasztalt viselkedése nem egységes.

Számos szilikátásvány (pl. olivin: forsterit, piroxén: ensztatit, amfibol, biotit, gránát), és a karbonátok közül a dolomit jellemző kationja a Mg²⁺. Ez az alkáliföldfémek közé tartozó főelem (**MgO**) a nehezebb LIL elemekhez viszonyított kisebb ionsugara miatt nem mobilis, átalakulások során viszonylag stabil. A nyomelemek közül a Ni és a Cr geokémiaiilag hasonló viselkedésű. Ennek megfelelően gyakran helyettesítik a magnéziumot (pl. olivinben). A Ni és a Cr ultrabázitokban akár főelemnyi mennyiségben is jelen lehetnek.



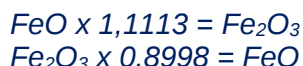
Gyakori szilikátok kristályszerkezetének 3D modellje: a káliföldpátban minden negyedik Si^{4+} -t Al^{3+} helyettesít, a töltéskiegyenlítés érdekében K^+ épül be az ideális rácsba (pl. mikroklin, $KAlSi_3O_8$); a plagioklászban az Al^{3+} -helyettesítés 25–50%, a rácsba belépő Na^+ és Ca^{2+} szilárd oldatot képez (pl. albit szélsőtag, $NaAlSi_3O_8$). A muszkovitban a tetraédes $[SiO_4]$ egységek rétegszerűen kapcsolódnak össze, az olivinben viszont izoláltak. Az olivinben két oktaédes pozícióban foglalhat helyet a Mg^{2+} és a Fe^{2+} , ezek a kationok nem rendeződnek, szilárd oldatot alkotnak (forsterit és fayalit szélsőtagok, Mg_2SiO_4 és Fe_2SiO_4). Itt elérhető: <https://sketchfab.com/WVUpetrology/collections/crystallography-and-crystal-structure>

A kalcium litofil főelemként (**CaO**) szintén közetalkotó szilikátokat (pl. plagioklász: anortit szélsőtag, $CaAl_2Si_2O_8$; piroxén, amfibol, gránát), illetve karbonátokat (kalcit, dolomit) képez, amelyekben Ca^{2+} formában épül be a kristályrácsba. Viselkedése nem egységes, bizonyos körülmények között mobilizálódhat (pl. anortitból eltávozik metamorf és üledékes környezetben). A víz-kőzet kölcsönhatások során bármely hőmérsékleten mobilis elemként viselkedik.

A vas (főelemként **FeO vagy Fe_2O_3** formában megadva) a kőzet redoxi viszonyainak jellemzésére használható. Változó vegyértékű átmenetifém, Fe^{2+} -és Fe^{3+} -ionként általában oktaédes pozíciót foglal el a közetalkotó szilikátok rácsában (pl. olivin, piroxén, amfibol), de Fe^{3+} -ionként tetraédes helyeken is megtalálható helyettesítőként (pl. földpátok). Kémiai mállás hatására a kőzet vastartalma oxidálódik, de általában

nem mobilizálódik. A folyamat során a Fe^{3+} más ásvány kristályrácsába épül be (pl. klorit, limonit). Vizes közegben a Fe^{2+} jól oldódik, a Fe^{3+} viszont rosszul oldódó hidroxid csapadékot képez.

A főelemek elemzésekor számos analitikai módszer (pl. XRF, ICP-MS, mikroszonda) csak az összes vas mennyiségének meghatározását teszi lehetővé (nincs információ a kétvegyértékű ferroion és a háromvegyértékű ferriion mennyiségi arányáról). A vastartalmat ezért „total” mennyiségként FeO vagy Fe_2O_3 formában adják meg. A geokémiai gyakorlatban bizonyos értelmezésekhez, összehasonlításához, diagramok szerkesztéséhez szükség lehet a két forma közötti átszámításra, amit a moláris tömegek alapján egyszerűen meg lehet tenni. Ehhez az átszámítások egyenletei a következők:



A magmás geokémiában fontos szerepe van a primer $\text{FeO}/\text{Fe}_2\text{O}_3$ aránynak ($\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$), ami az olvadék/szilárd fázisegyensúly oxigénfugacitásától függ, tehát tükrözi a kristályosodás körülményeit. A Fe^{3+} mennyiségének megadásához becslési módszereket dolgoztak ki. Itt megtalálható:

https://regi.tankonyvtar.hu/hu/tartalom/tamop412A/2011-0073_magmas_kozetek/ch04s04.html

A mangán (főelemként **MnO**) előfordulása, geokémiai jellege a vassal mutat nagy hasonlóságot. Szintén változó vegyértékű átmenetifém. Vizes közegben a Mn(II) -ion jól oldódik, az oxidatív környezetben stabilis Mn(IV) viszont rosszul oldódó oxid-hidroxidokat képez.

A titán nagy térerejű főelem (**TiO₂**), ami a geokémiai folyamatokban szintén a vassal párhuzamosan dúsul, azzal rokon viselkedésű. Metamorf folyamatokra gyakran az ásványfázis megváltozásával reagál (ilmenit $\rightarrow$ titanit $\rightarrow$ rutil), üledékes rendszerekben – az alumíniumhoz hasonlóan – immobilis komponens.

A foszfor mennyisége alapvetően az apatit-hoz kapcsolódik. Kis mennyiségben megjelenő főelemként (**P₂O₅**) a geokémiai folyamatokban leginkább a titánnal mutat rokonságot. Metamorfózis hatására általában nem változik a mennyisége, üledékes rendszerekben gyakran immobilis, savas pH mellett azonban oldódik és mobilizálódik.

Az izzítási veszteség (LOI) és jelentősége

Az úgynevezett **izzítási veszteséget** (**loss on ignition, LOI**) a geológiai minták elemvizsgálásának részeként szokták megadni. Ez a minta erős felmelegítés (hevítés vagy izzítás) során eltávozó illó komponenseinek (pl. szerves anyag, karbonátok, víztartalmú fázisok) tömegarányát adja meg. A meghatározás során ismert tömegű mintát egy vagy több lépcsőben megadott hőmérsékletre (~900–1000 °C) hevítenek (pl. laboratóriumi izzítókemencében, termoanalitikai berendezésben) miközben mérik a tömegvesztést. A minta felületéhez kötött víz és a pórusvíz 105 °C alatt eltávozik (jelölése: H₂O⁻), ennél nagyobb hőmérsékleten a szerkezeti víz (kristályvíz, OH-tartalom, jelölése: H₂O⁺) és a zárványokban csapdázódott illó komponensek szabadulnak fel, valamint a szerves anyag oxidációjából és a karbonátásványok hőbomlásából keletkező gázok (elsősorban CO₂) illannak el a mintából.

IV. táblázat. A BAF-ból újonnan begyűjtött minták kémiai összetétele (főelemek: g/g%, nyomelemek: ppm)
Table IV. Chemical composition of the samples newly collected from the Boda Siltstone Formation (major elements in wt% and trace elements in ppm).

fűrés jele mélység (m) közettípus	4709/1 A2	4709/1 1960,2 A2	4709/1 1848,0 A2	X. 1596,3 A2	Bat-4 1147,8 A2	Bat-4 947,5 A2	Bat-4 741,2m A2	Bat-4 567,4 A2	Bat-15 13,3 A2	Bat-13 29,8 A2	4709/1 1932,4 H2	4709/1 1903,7 H2	4709/1 1829,3 H2
SiO ₂	51,69	52,98	52,05	50,13	51,32	50,31	48,18	52,05	51,39	48,26	65,98	56,62	69,57
TiO ₂	0,73	0,68	0,65	0,67	0,74	0,67	0,52	0,67	0,72	0,64	0,23	0,30	0,43
Al ₂ O ₃	18,03	17,84	17,80	18,36	17,14	17,77	18,40	17,10	17,41	17,94	11,56	8,93	11,39
Fe ₂ O ₃	7,52	6,89	7,20	7,41	7,18	7,79	8,67	7,17	7,32	8,15	1,88	3,07	2,68
MnO	0,07	0,08	0,08	0,09	0,10	0,08	0,08	0,08	0,07	0,09	0,10	0,22	0,12
MgO	3,53	3,27	3,77	4,79	4,85	3,78	4,25	3,92	3,45	3,86	1,55	4,10	2,13
CaO	3,71	3,63	3,67	3,21	2,85	4,26	4,06	4,47	4,60	5,42	6,10	9,40	3,20
Na ₂ O	2,27	2,25	1,10	0,88	2,40	3,06	2,98	2,53	3,24	3,17	3,70	4,16	4,65
K ₂ O	5,23	5,28	5,83	5,96	5,04	4,78	5,49	4,36	4,20	4,48	2,50	0,78	1,32
P ₂ O ₅	0,34	0,45	0,30	0,31	0,28	0,32	0,37	0,32	0,26	0,45	0,15	0,09	0,12
LOI	6,61	6,26	7,54	6,24	6,87	6,48	6,72	6,91	6,62	7,48	6,55	2,62	4,94
Total	99,72	99,59	99,99	98,05	98,76	99,30	99,72	99,59	99,27	99,94	100,31	100,28	100,54
Rb	248	258	342	294	230	245	273	195	204	225	102	33	59
Sr	131	139	113	143	77	158	227	204	120	177	497	421	106
Ba	226	246	259	320	382	348	275	493	384	368	1492	841	170
Pb	40	18	25	23	14	32	29	32	38	29	7	11	8
Th	18	19	18	17	15	17	16	17	17	16	6	7	5
U	3,2	2,9	3,7	2,8	5,4	6,4	4,2	5,1	4,0	5,1	1,7	1,1	3,1
Zr	157	169	139	130	153	132	ND	123	132	ND	75	83	175
Hf	4,6	5,2	3,9	4,4	4,5	4,4	4,0	3,9	4,4	4,0	2,6	2,4	5,2
Nb	17,3	15,3	15,7	13,9	16,5	17,0	15,8	15,0	17,6	17,8	5,5	5,6	9,5
Ta	1,2	1,2	1,1	1,1	1,2	1,2	1,3	1,0	1,3	0,9	0,5	0,5	0,6

Jelmagyarázat: LOI: izzítási veszteség; A2: agyagkő; H2: homokkő; ND: nincs adat; Eu/Eu*: Eu-anómália

Legend: LOI loss on ignition; A2 claystone; H2 sandstone; ND no data; Eu/Eu* europium anomaly

14

Földtani Közlemény 136/2

véges
összeg
(100%)

Az izzítási veszteség (LOI) megadása a Bodai Agyagkő Formáció példáján

A dél-dunántúli permiai törmeléken üledékes rétegsorból származó minták főelem-összetétele a LOI-val együtt képez tömeg%-ban megadott adatsort. A véges összeg (~100%) miatt az illógazdag mintákban a 10 főelem oxidos koncentrációja látszólag kevesebb, amit korrigálni kell az adatértelmezés előtt.

A főelemek kémiai elemzésekor a hagyományosan meghatározott tíz főelem (Si, Ti, Al, Fe, Mn, Mg, Ca, Na, K és P) oxidos összetétele mellett az illótartalmat (LOI) adják meg tömeg%-ban. A mérési eredmények összege (*Total*) általában 100% körüli érték, attól csak néhány %-ban térhet el a kisebb vagy nagyobb összegek irányába (megbízható mérés esetén az eltérés egyik lehetséges oka például az FeO formában megadott összes vas, ha jelentős a Fe³⁺ mennyisége is a mintában). A szerkezeti vizet tartalmazó ásványok (pl. amfibol, csillámok, agyagásványok) és a karbonátok mennyisége azonban mintánként jelentősen eltérhet, ezért a LOI kivonását követően a 10 főelem oxidos összetételének összege nem azonos. A bemutatott törmelékes üledékes adatsorban 4,91–12,62% közötti a LOI, tehát a főelem-geokémiai értelmezés szempontjából fontos 10 főelem oxidos koncentrációjának összege 87,66% és 95,63% között változik. Az eltérő összegek miatt az adatsorok közvetlenül nem hasonlíthatók össze, korrekció szükséges úgy, hogy egységesen 100% véges összegre legyenek megadva a főelemek (már a LOI nélkül). Ezt a normalizációs eljárást **illómentes összetétel** megadásának nevezik a geokémiában.

normalizálás

normalizált érték

A 10 főelem oxidos koncentrációjának összege a LOI értékével együtt

A 10 főelem oxidos koncentrációjának összege a LOI értéke nélkül

A 10 főelem oxidos koncentrációjának illómentes összege: 100% (normált)

Minta neve	ME01	ME02	ME03	ME04	ME05	ME06	ME07	ME08	ME09	ME10	ME11	UCC	PAAS
SiO ₂	57,36	74,65	74,26	48,53	82,09	86,78	70,87	80,02	78,97	48,95	83,45	66,62	62,8
Al ₂ O ₃	20,26	11,51	12,77	14,11	9,04	6,30	16,44	11,89	12,11	14,24	7,86	15,4	18,9
Fe ₂ O ₃	8,07	4,74	4,51	14,31	2,23	2,21	4,02	1,78	1,31	11,37	2,54	5,60	7,22
MgO	1,30	0,28	0,16	4,98	1,10	0,91	0,35	0,19	0,45	4,29	1,45	2,48	2,2
CaO	0,42	0,24	0,13	7,21	0,05	0,20	0,13	0,05	0,19	6,42	0,04	3,59	1,3
Na ₂ O	2,24	4,84	5,54	2,43	0,59	0,32	1,68	1,06	0,19	3,75	0,25	3,27	1,2
K ₂ O	5,37	0,83	1,23	0,23	1,31	0,96	2,22	1,86	3,56	0,07	1,24	2,8	3,7
TiO ₂	0,74	1,22	0,24	3,18	1,01	0,38	0,95	0,86	0,76	2,58	0,61	0,64	1
P ₂ O ₅	0,21	0,09	0,01	0,44	0,04	0,05	0,11	0,03	0,14	0,51	0,02	0,15	0,16
MnO	0,01	0,03	0,02	0,22	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,19	0,01	0,1	0,11
LOI	3,8	1,5	0,9	4,1	2,4	1,8	3,0	2,2	2,2	7,4	2,5		
Total	99,78	99,93	99,77	99,74	99,86	99,96	99,8	99,9	99,88	99,76	99,97		
illómentes összetétel	95,98	98,43	98,87	95,64	97,46	98,16	96,77	97,74	97,68	92,36	97,47		
illómentes összetétel	ME01	ME02	ME03	ME04	ME05	ME06	ME07	ME08	ME09	ME10	ME11	UCC	PAAS
SiO ₂	59,76	75,84	75,11	50,74	84,23	88,41	73,24	81,87	80,85	53,00	85,62	66,62	62,8
Al ₂ O ₃	21,11	11,69	12,92	14,75	9,28	6,42	16,99	12,16	12,40	15,42	8,06	15,4	18,9
Fe ₂ O ₃	8,41	4,82	4,56	14,96	2,29	2,25	4,15	1,82	1,34	12,31	2,61	5,60	7,22
MgO	1,35	0,28	0,16	5,21	1,13	0,93	0,36	0,19	0,46	4,64	1,49	2,48	2,2
CaO	0,44	0,24	0,13	7,54	0,05	0,20	0,13	0,05	0,19	6,95	0,04	3,59	1,3
Na ₂ O	2,33	4,92	5,60	2,54	0,61	0,33	1,74	1,08	0,19	4,06	0,26	3,27	1,2
K ₂ O	5,59	0,84	1,24	0,24	1,34	0,98	2,29	1,90	3,64	0,08	1,27	2,8	3,7
TiO ₂	0,77	1,24	0,24	3,32	1,04	0,39	0,98	0,88	0,78	2,79	0,63	0,64	1
P ₂ O ₅	0,22	0,09	0,01	0,46	0,04	0,05	0,11	0,03	0,14	0,55	0,02	0,15	0,16
MnO	0,01	0,03	0,02	0,23	0,00	0,05	0,00	0,00	0,00	0,19	0,01	0,1	0,11
Total (illómentes)	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00		

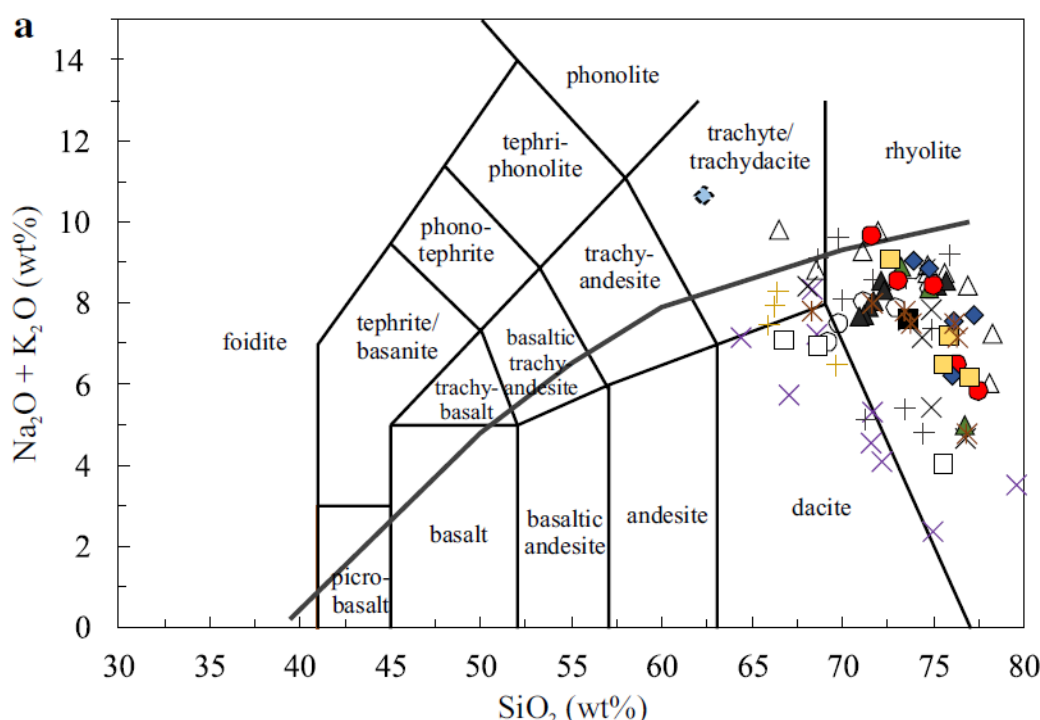
Az illómentes összetétel kiszámítása

A 10 főelem oxidos koncentrációjának normalizálása 100%-ra:
első lépésben kiszámoljuk a 10 főelem koncentrációjának összegét (LOI nélkül), majd ezt 100%-nak tekintve kiszámoljuk az illómentes összetételre vonatkozó tömeg%-os adatokat.

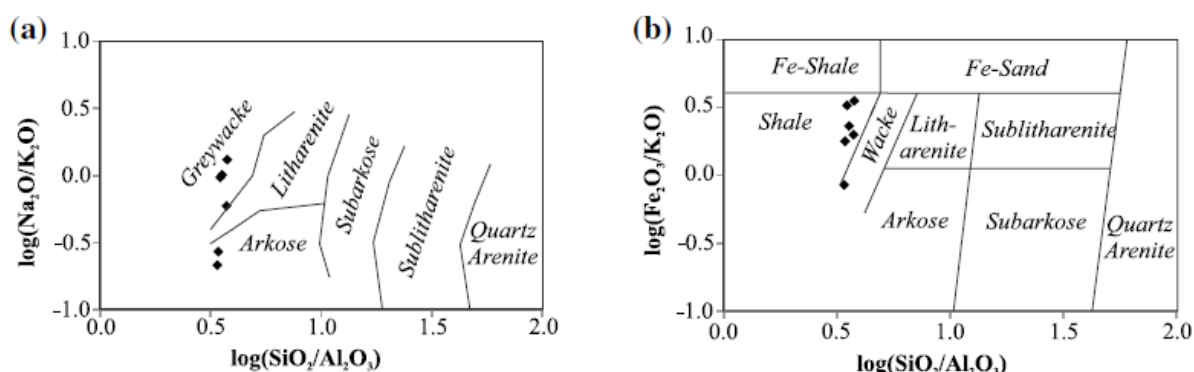
A főelemek alkalmazási lehetőségei

A főelem-geokémiában az illómentes összetételt használják fel az adatértelmezésben, aminek fontos eszköze a referencia adatsorokkal (pl. PM, MORB, UCC, PAAS) történő összehasonlítás, illetve a speciális geokémiai diagramokon történő ábrázolás. Az adatok grafikus ábrázolásának két alapvető típusa van: a **variációs (diszkriminációs) diagramok** és a **normalizált (vagy normált) sokelemes diagramok**. A variációs diagramokon kiválasztott elemek összetételét, illetve arányait ábrázolják két (x - y diagram) vagy három (**háromszögdiagram**) komponenst figyelembe véve. A diagramterületet gyakran határvonalak (görbék) osztják tartományokra, ezeknek megfelelően különíthetők el a minták, azaz diszkriminálhatók egymástól. A sokelemes normalizált diagramok (lásd 7. olvasólecke) értelmezése elsősorban a referencia adatsorhoz viszonyított görbe lefutása, illetve az elem-anomáliák alapján történik.

Miután a főelemek mennyisége alapvetően a vizsgált minta ásványos összetételét tükrözi, a magmás kőzetekben széles körben alkalmazzák a **kőzetek osztályozására és elnevezésére** (pl. **mészalkáli kőzetek osztályozása tömeg%-os SiO_2 -tartalom alapján**: 63–80% savanyú, 52–63% neutrális, 45–52% bázisos, 30–45% ultrabázisos), továbbá a törmelékes üledékes kőzetek rendszerezésében szintén szerepet játszik a főelem-geokémiai osztályozás.



Kiömlési magmás kőzetek elnevezésére szolgáló variációs diagram („TAS-diagram”) a permi Gyűrűfői Riolit Formáció kőzeteinek példáján



Törmelékes üledékes kőzetek elnevezésére szolgáló variációs diagramok a szilur Szalatnaki Aggypala Formáció kőzeteinek példáján

A magmás geokémiában a főelem összetételi adatsor segítségével **kiszámolható a minta ásványos összetétele a kémiai összetételi adatokból**. Az így kapott ásványos összetétel a *normatív összetétel* (a megfigyelhető és kimérhető ásványos összetétel a *modális összetétel*). A leggyakrabban alkalmazott módszer a kidolgozók nevének kezdőbetűiről elnevezett **CIPW normatív összetétel** meghatározása (Cross, Iddings és Pirsson petrológusok voltak, Washington pedig geokémikus). Egy kőzet megfigyelt modális összetétele és számolt normatív összetétele lényegesen eltérhet. Ez a módszer több kiindulási feltétel mellett alkalmazható (pl. a magma vízmentes, azaz nem tartalmaz OH-tartalmú ásványokat; a mafikus ásványok Mg/Fe aránya állandó; nem vehetők figyelembe helyettesítések). A számolás során az oxidos formában (tömeg%) megadott adatokat moláris mennyiségekre kell átszámolni (a moláris tömeg segítségével), majd a kapott értékeket meghatározott sorrendben szétosztani a normatív ásványok között, amelyhez az ásványok egyszerűsített képletét veszik alapul (pl. ortoklász: $KAlSi_3O_8$, normatív képlete: $K_2O-Al_2O_3-6SiO_2$). Ezt követően a normatív ásványok moláris mennyiségét kell átváltani tömeg%-ra. A normatív ásványos összetétel felhasználásának számos fontos részterülete van: segítségével jellemezhető a **Si-telítettség mértéke** (q – kvarc, illetve ne – nefelin megjelenése), lehetőség nyílik **bazaltok osztályozására**, valamint **Si-gazdag kőzetek és kőzetüvegek** (pl. obszidián) jellemzésére.

Az üledékes geokémiában a főelemek összetétele a **törmelékes üledékek és kőzetek átalakulási folyamatainak (pl. kémiai mállás, metasomatózis) jellemzésére** is felhasználható. Ezek közül kiemelt szerepet kap a kémiai mállás mértékének feltárása (*mállási indexek*, továbbá variációs és normalizált sokelemes diagramok segítségével).

Önellenőrző kérdések (főelem-geokémia):

1. Mi befolyásolja elsősorban a főelemek koncentrációját egy szilárd geológiai mintában?
2. Jellemezze a főelemek legfontosabb hordozó fázisait!
3. Mi a legfontosabb különbség a „major” és a „minor” főelemek hordozó fázisai között?
4. Mit jelent a LOI rövidítés? Mi a jelentősége a főelem-geokémiában?
5. Hogyan használhatók fel a főelemek a geokémiai értelmezésben? Ehhez milyen diagramok hívhatók segítségül?

Felhasznált és ajánlott irodalom:

Albarède, F. (2009): Geochemistry, An Introduction, Cambridge University Press, Cambridge, Second Edition

Harangi Sz., Szakmány Gy., Józsa S., Lukács R., Sági T. (2013): Magmás kőzetek és folyamatok – gyakorlati ismeretek magmás kőzetek vizsgálatához, Eötvös Loránd Tudományegyetem, ISBN 978-963-284-478-7

https://regi.tankonyvtar.hu/hu/tartalom/tamop412A/2011-0073_magmas_kozetek/ch04s02.html

Mészáros, E., Varga, A., Raucsik, B., Benkó, Zs., Heincz, A., Hauzenberger, C. A. (2019): Provenance and Variscan low-grade regional metamorphism recorded in slates from the basement of the Tisza Mega-unit (SW Hungary), International Journal of Earth Sciences 108/5, 1571–1593. <https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00531-019-01720-y>

Rollinson, H. (1993): Using geochemical data: evaluation, presentation, interpretation, Longman Group UK Ltd

Szemerédi, M., Lukács, R., Varga, A., Dunkl, I., Józsa, S., Tatu, M., Pál-Molnár, E., Szepesi, J., Guillong, M., Szakmány, Gy., Harangi, Sz. (2020): Permian felsic volcanic rocks in the Pannonian Basin (Hungary): new petrographic, geochemical, and geochronological results, International Journal of Earth Sciences 109, 101–125.

<https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00531-019-01791-x>

Varga A. (2005): Az őskörnyezeti viszonyok jellemzése a törmelékes üledékes kőzetek kémiai összetétele alapján, Földtani Közlöny 135/3, 433–458.

http://epa.oszk.hu/01600/01635/00313/pdf/EPA01635_foldtani_kozlony_2005_135_3_433-458.pdf

Varga A., Raucsik B., Szakmány Gy., Máthé Z. (2006): A Bodai Aleurolit Formáció törmelékes kőzettípusainak ásványtani, kőzettani és geokémiai jellemzői, Földtani Közlöny 136/2, 201–231.

http://epa.oszk.hu/01600/01635/00316/pdf/EPA01635_foldtani_kozlony_2006_136_2_201-231.pdf