

Gemäß ihrer Häufigkeit werden Elemente unterteilt in *Haupt-* und *Spurenelemente*

Haupt- und Spurenelemente in der Erdkruste

Hauptelemente (>0.1%):

O,
Si,
Al,
Mg,
Fe,
Ca,
Na,
K

Diese 8 Elemente bauen zu mehr als 98% der Erdkruste auf

Spurenelemente (<0.1%)*:

Rb,
Sr,
Zn,
Zr
etc.

* in ppm bzw. $\mu\text{g/g}$ (0.1% = 1000 ppm)

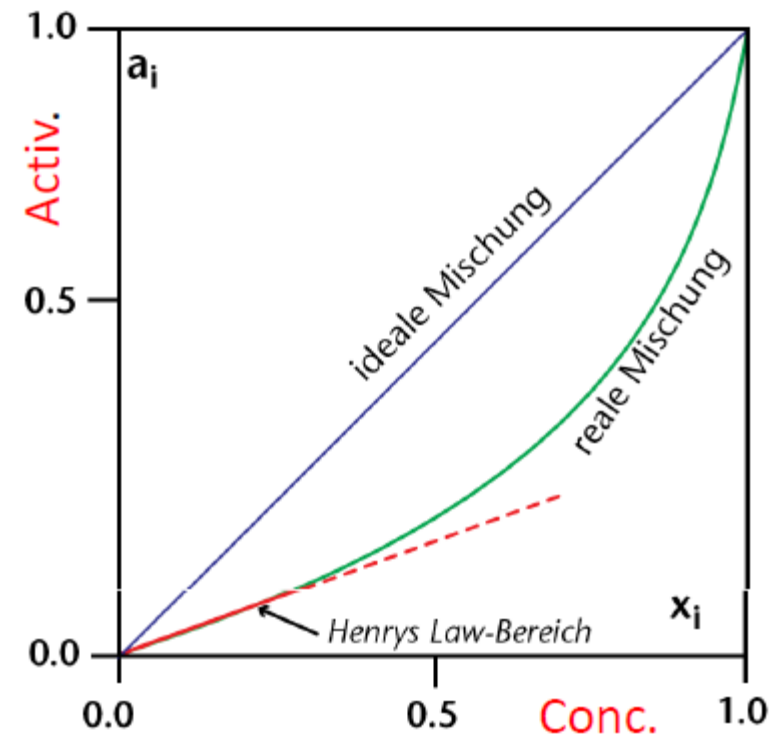
Ausnahmen, Beispiel Kalium (K)
Hauptelement in Granit
aber *Spurenelement* in Peridotit

Literatur: W. White Chapter 7
Trace Elements in Igneous Processes

<https://www.imwa.info/geochemistry/Chapters/Chapter07.pdf>

Spurenelemente

1. Große Variationen in den Konzentrationen
2. Große Anzahl von Spurenelementen
3. Stark unterschiedliches Verhalten in geochemischen Prozessen
4. Relative einfaches Verhalten (*Henri*



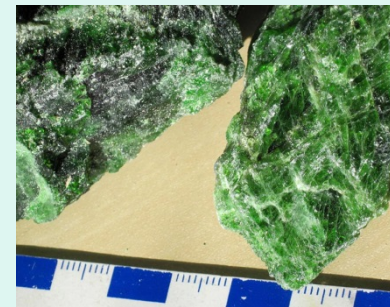
Spurenelemente

- Bilden normalerweise keine stöchiometrischen Phasenbestandteile
- Treten in Defekten der Kristallgitter auf oder substituieren bestimmte Hauptelemente
- Spurenelemente beeinflussen normalerweise nicht die chemischen und physikalischen Eigenschaften des Kristalls, allerdings z.T. farbgebend,

Beispiel: Cr in Diopsid oder Spinell:

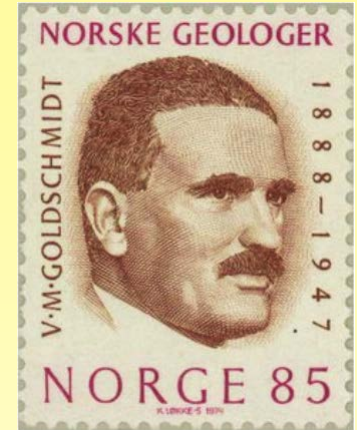
Aber:

Monazit – $(\text{SEE})[\text{PO}_4]$



V.M. Goldschmidt's geochemische Gliederung der Elemente

- Basiert darauf, wie sich Elemente zwischen verschiedenen Schmelz- oder Gasphasen verteilen
- Ein bestimmtes Element kann mehreren Gruppen angehören



Atmophile (gas-loving): H, Edelgase, O, (C, N)

Lithophile (silicate-loving): (H), Li, Be, B, (C), O, F, Na, Mg, Al, Si, P, Cl, K, Ca, (Ga), (Ge), Br, Rb, Sr, I, Cs, Ba, (Ti) Sc, Ti, V, Cr, Mn, (Fe), Y, Zr, Nb, REE, Hf, Ta, W, Th, U

Siderophile (iron-loving): Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd, Os, Ir, Pt, Mo, Re, Au, (W), C, P, Ge, Sn, (As), (Pb)

Chalcophile (sulfide-loving): Cu, Zn, Ga, Ag, Cd, In, Hg, Tl, (Ge), (As), S, (Sn), Sb, Se, Pb, Bi, Te, (Cr, Fe, Mo)

Analogie zum Hochofen-Prozess

Siderophile Elemente haben die Neigung, sich mit Fe zu legieren. Sie gehen in die Metallschmelze und formen den Bodenkörper („Ofensau“) beim Hochofen-Prozess

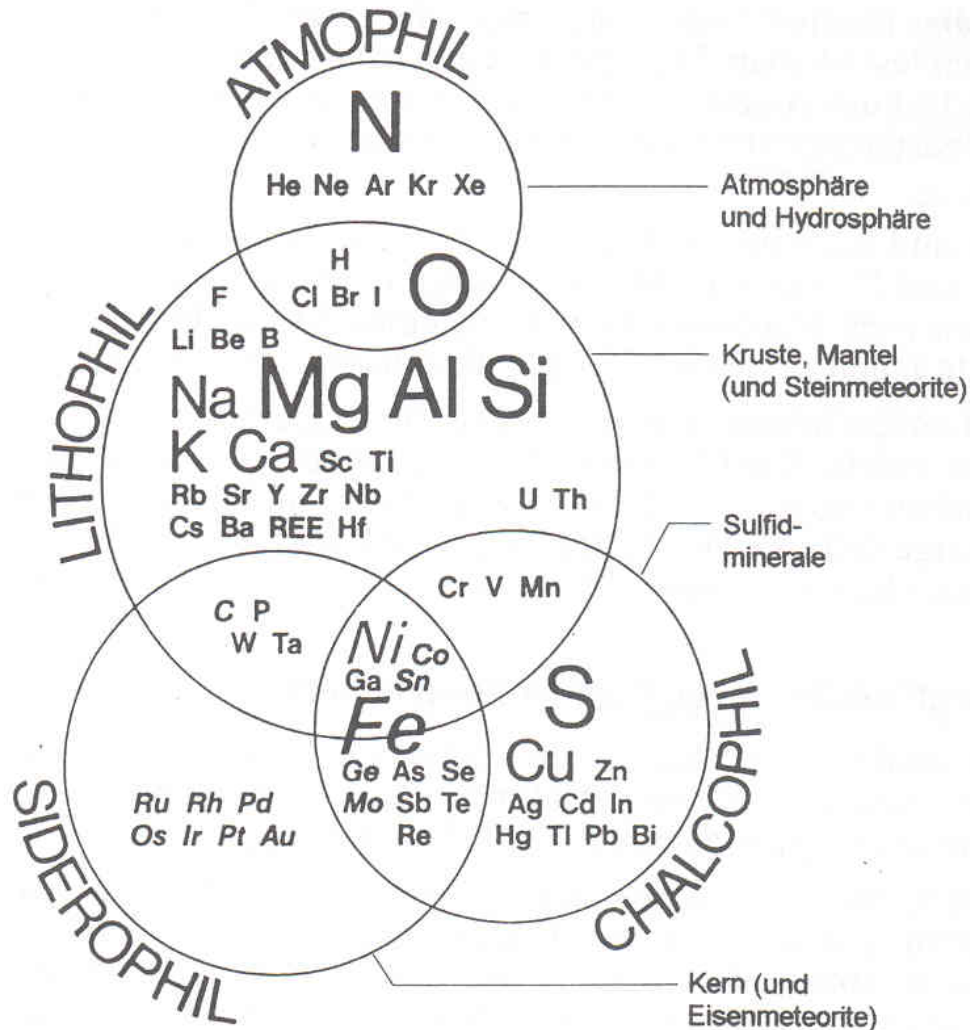
Chalkophile Elemente zeigen die Tendenz, Sulfide zu bilden; sie reichern sich im **Kupferstein** des Hochofen-Prozesses an

Lithophile Elemente neigen dazu, sich mit O_2 unter Bildung von Silikaten, Oxiden, Karbonaten zu verbinden. Sie gehen beim Hochofenprozess in die leichte Silikatschmelze, die beim Abkühlen im Hochofen zur **Schlacke** erstarrt

Atmosphäophile Elemente leichtflüchtig; reichern sich in den **Gichtgasen** an



Goldschmidt Klassifikation der Elemente



Alkalimetalle																	B-Gruppe	C-Gruppe	N-Gruppe	Chalkogene	Halogene	Edelegase	
H																	B	C	N	O	F	He	
Li	Be	Übergangsmetalle																Al	Si	P	S	Cl	Ar
Na	Mg	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr				
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	(Tc)	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe						
Cs	Ba	La*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn						
Fr	Ra	Ac*	Lanthanide																				
			La	Ce	Pr	Nd	(Pm)	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu						
			Ac	Th	Pa	U	Aktinide																

Beispiel Eisen:
 nur wenn S und O
 aufgebraucht sind
 hat Fe siderophilen
 Charakter

Verteilung der Elemente zwischen den Hauptreservoirien der Erde:
 Kern – Mantel + Kruste – Hydrosphäre + Atmosphäre

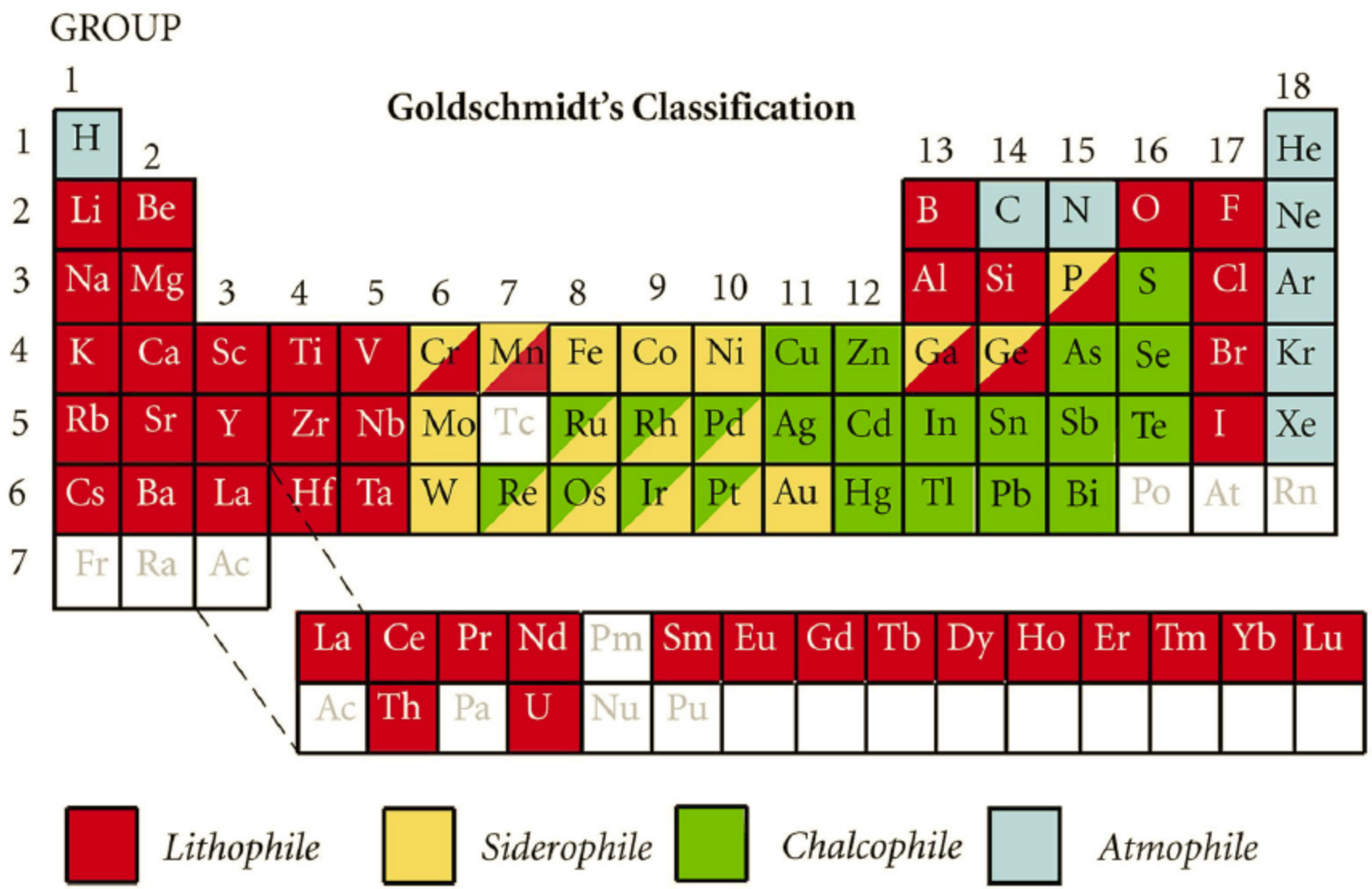
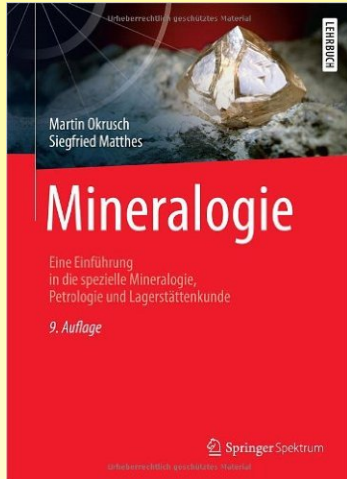


Figure 7.2 Goldschmidt's classification of the elements.

Elektronegativität und geochemischer Charakter



Quellennachweis

Der geochemische Charakter ist eine Funktion der kristallchemischen Eigenschaften

- Bindungsart
- Reaktionsenthalpie

$E < 1,6$ Lithophil				$1,6 < E < 2,0$ Chalkophil				$2,0 < E < 2,4$ Siderophil	
Cs ⁺	0,7			Pb ²⁺	1,6			← As ³⁺	2,0
Rb ⁺	0,8			← Fe ²⁺	1,65	→			
K ⁺	0,8			← Co ²⁺	1,7	→			
Ba ²⁺	0,85			← Ni ²⁺	1,7	→			
Na ⁺	0,9			← Zn ²⁺	1,7				
Sr ²⁺	1,0	U ⁴⁺	1,7				P ⁵⁺	2,1	
Ca ²⁺	1,0	W ⁴⁺	1,7						Ru ⁴⁺ 2,2
Li ⁺	1,0	Si ⁴⁺	1,8						Rh ³⁺ 2,2
REE	1,05–1,2			← Ge ⁴⁺	1,8	→			Pd ²⁺ 2,2
Mg ²⁺	1,2			← Fe ³⁺	1,8	→			Os ⁴⁺ 2,2
Sc ³⁺	1,3			← Cu ⁺	1,8	→			Ir ⁴⁺ 2,2
Th ⁴⁺	1,3			Ag ⁺	1,9				Pt ²⁺ 2,2
V ³⁺	1,35			← Sn ⁴⁺	1,9	→			Au ⁺ 2,4
Zr ⁴⁺	1,4			Hg ³⁺	1,9				
Mn ²⁺	1,4 →			Sb ³⁺	1,9	→			
Be ²⁺	1,5			Bi ³⁺	1,9				
Al ³⁺	1,5			Re ³⁺	1,9	→			
Ti ⁴⁺	1,5			← Cu ²⁺	2,0	→			
Cr ³⁺	1,6 →								

Lithophile Elemente dunkel schattiert



Gibbsche Energie (ΔG) einiger Oxide

Geochemistry

William M. White

WILEY-BLACKWELL

Quellennachweis

Oxide	$-\Delta G_f^\circ$ (kJ/mole/oxygen)	Oxide	$-\Delta G_f^\circ$ (kJ/mole/oxygen)
CaO	604.0	In ₂ O ₃	304.2
ThO ₂	584.6	SnO ₂	260.0
MgO	569.4	FeO	245.9
Al ₂ O ₃	527.3	WO ₃	247.3
ZrO ₂	521.6	CdO	221.9
CeO ₂	512.6	NiO	211.6
TiO ₂	444.7	MoO ₃	215.4
SiO ₂	428.1	Sb ₂ O ₃	207.9
Na ₂ O	398.3	PbO	189.3
Ta ₂ O ₃	374.0	As ₂ O ₃	180.1
MnO	362.8	Bi ₂ O ₃	168.8
Cr ₂ O ₃	353.1	CuO	127.6
ZnO	318.4	Ag ₂ O ₃	10.9

Goldschmidt Klassifikation der Elemente

FeNi-rich core

SiMg-rich mantle

SiAl-rich crust

V.M.Goldschmidt scheme:

Atmophile (gas loving)

H, N, noble gases....

Lithophile (silicate loving)

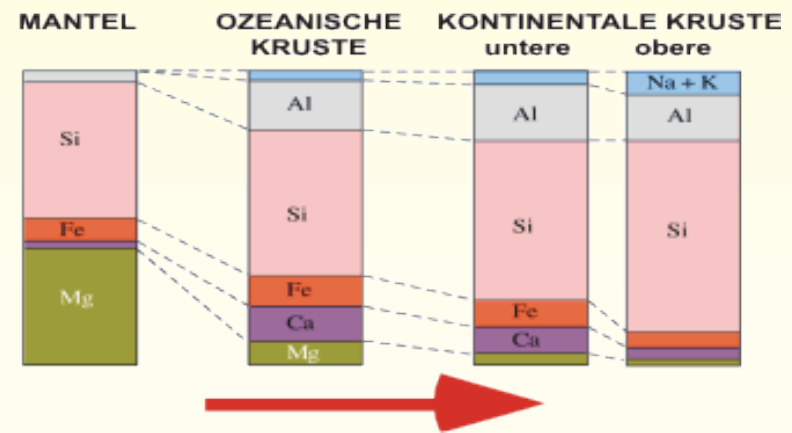
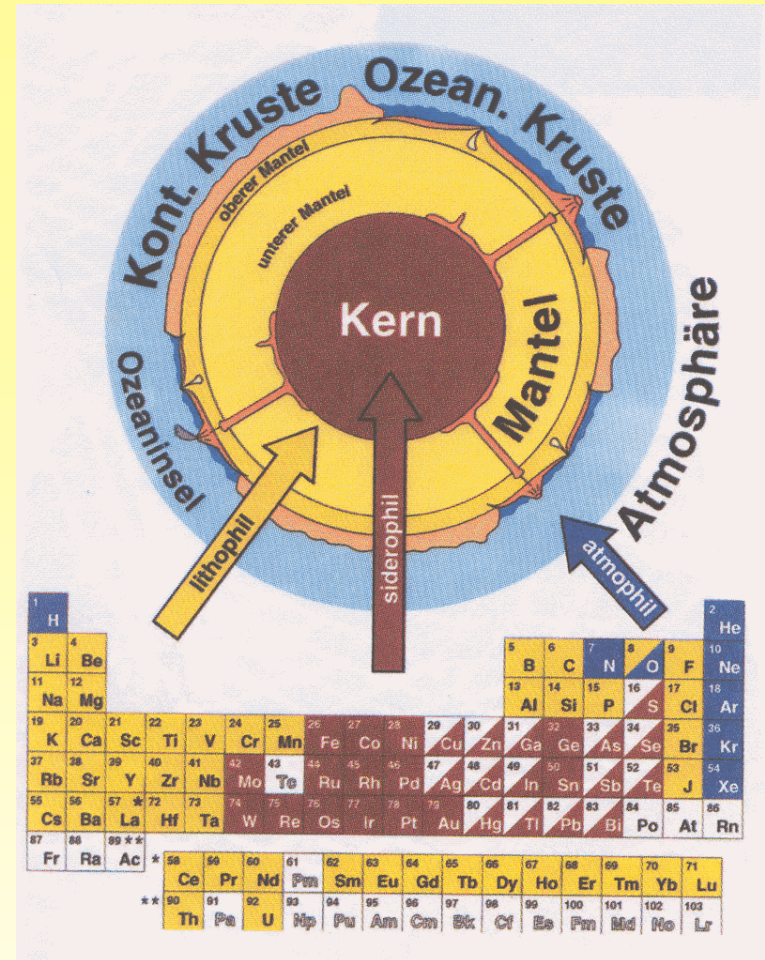
Si, Al, Mg, Na, K, Ca, Ti...

Chalcophile (sulfur loving)

Cu, Se, Cd....

Siderophile (iron loving)

Fe, Ni, Co, Pt, Au, W, PGE....












Elementeinteilung nach Verhalten in BSE

The Geochemical Periodic Table

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rd
Fr	Ra	Ac															

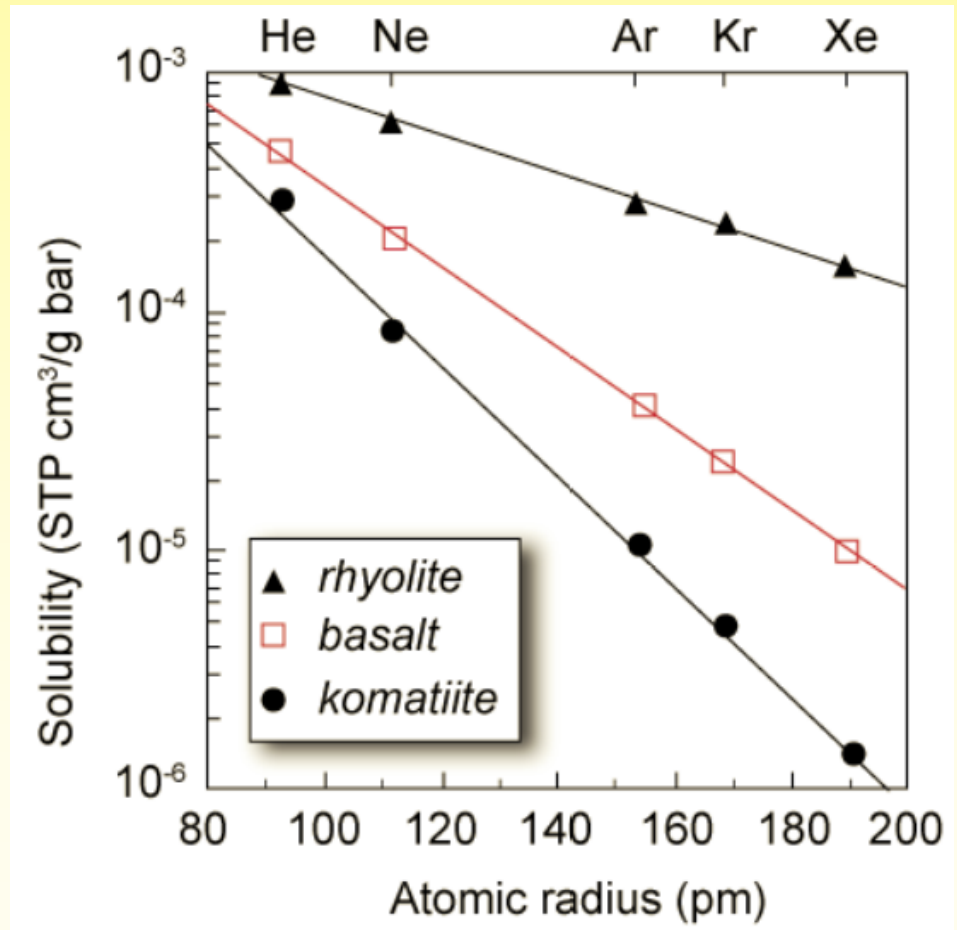
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Ac	Th	Pa	U											

 He	<i>Volatiles</i>	 Sc	<i>First Series Transition Metals</i>	 Rb	<i>Alkali/Alkaline Earth Trace Elements</i>
 S	<i>Semi-Volatiles</i>	 Zr	<i>High Field Strength Elements</i>	 La	<i>Rare Earths & Related Elements</i>
 Mg	<i>Major Elements</i>	 Pt	<i>Noble Metals</i>	 Pa	<i>U/Th Decay Series Elements</i>

Volatile Elemente

Löslichkeit von Edelgasen in Schmelzen

Löslichkeit abhängig vom Atomradius und der Schmelzzusammensetzung



Semivolatile Elemente

The Geochemical Periodic Table

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rd
Fr	Ra	Ac															
			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
			Ac	Th	Pa	U											



Volatiles



Semi-Volatiles



Major Elements



First Series
Transition Metals



High Field
Strength Elements



Noble Metals



Alkali/Alkaline
Earth Trace Elements



Rare Earths &
Related Elements



U/Th Decay
Series Elements

Semivolatile Elemente

Entmischung (Liquid immiscibility)

Kohlenstoff als CO_2
Schwefel als SO_2 oder H_2S

Liquide Entmischung
von Sulfidschmelzen



Liquide Entmischung
von CO_2
→ Karbonatite



Seltenerdelemente (SEE)

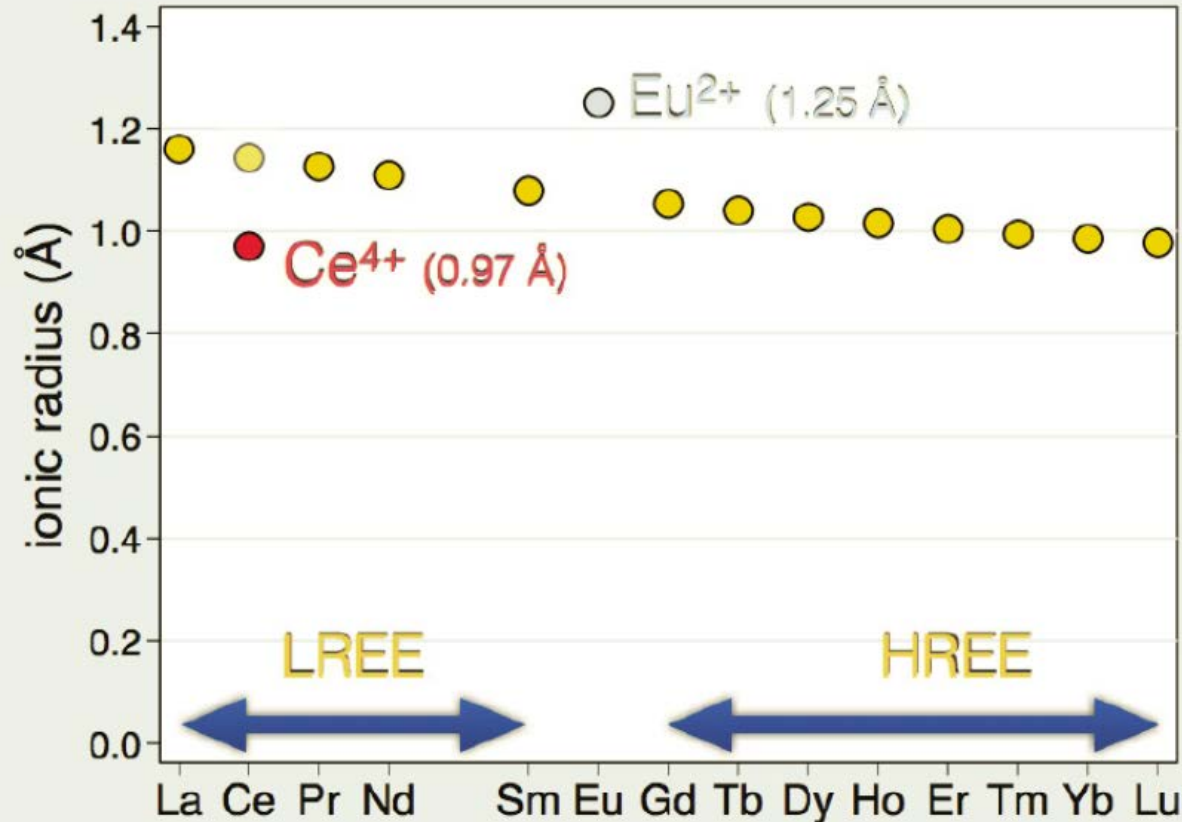
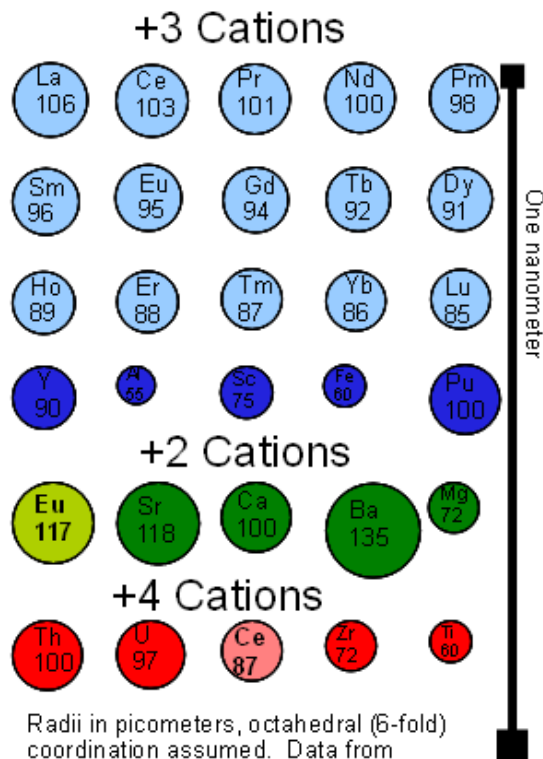
The Geochemical Periodic Table

H																	He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rd	
Fr	Ra	Ac																
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
		Ac	Th	Pa	U													

He	<i>Volatiles</i>	Sc	<i>First Series Transition Metals</i>	Rb	<i>Alkali/Alkaline Earth Trace Elements</i>
	<i>Semi-Volatiles</i>		<i>High Field Strength Elements</i>	La	<i>Rare Earths & Related Elements</i>
Mg	<i>Major Elements</i>	Pt	<i>Noble Metals</i>	Pa	<i>U/Th Decay Series Elements</i>

Ionenradien der Seltenerdelemente (SEE)

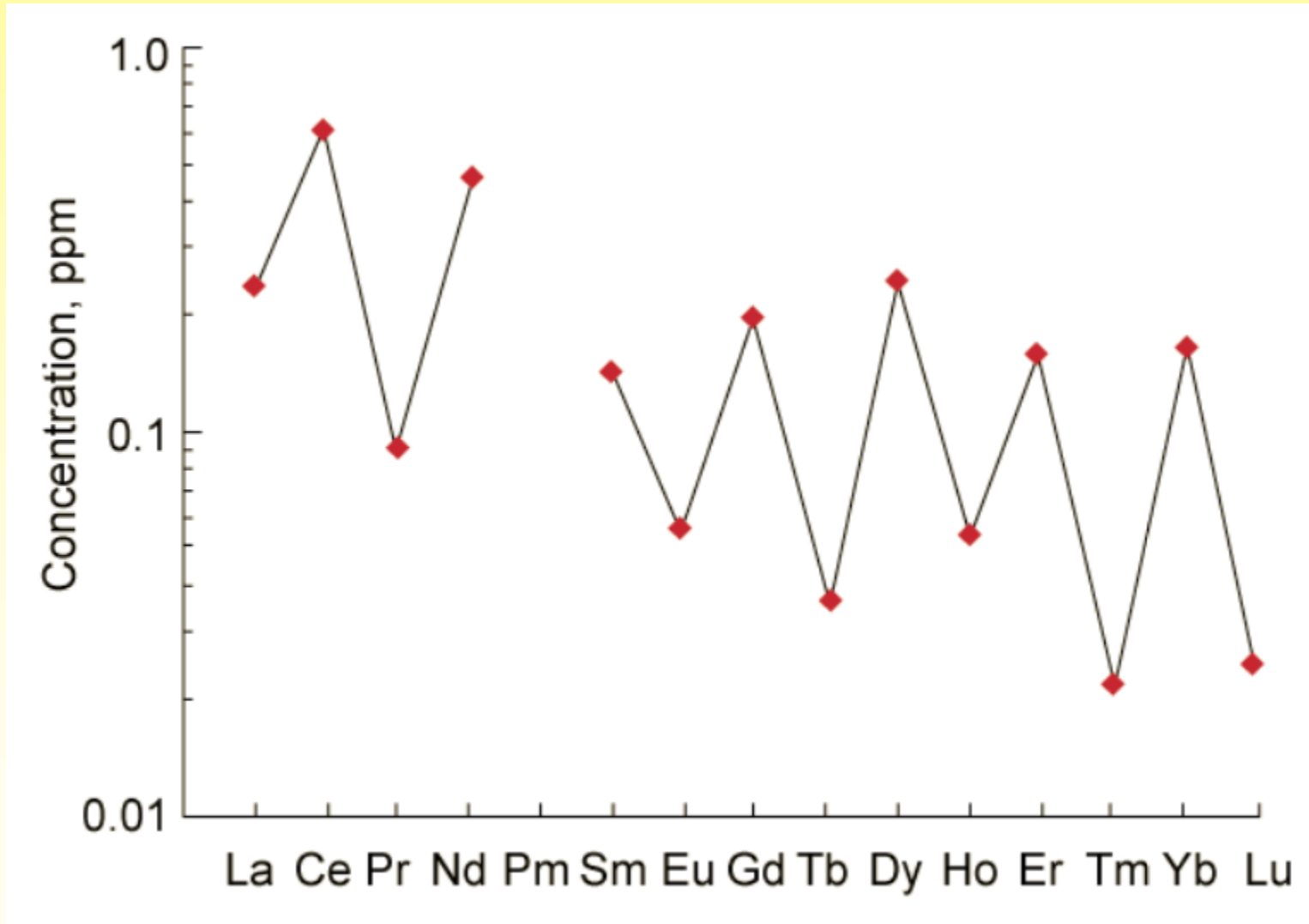
Lanthanidenkontraktion



Radii in picometers, octahedral (6-fold) coordination assumed. Data from Shannon & Prewitt(1969), as mirrored on sites linked in text. Scale is ten million to one; 1 cm=1Å
<http://lblemmlinglounge.blogspot.com/>

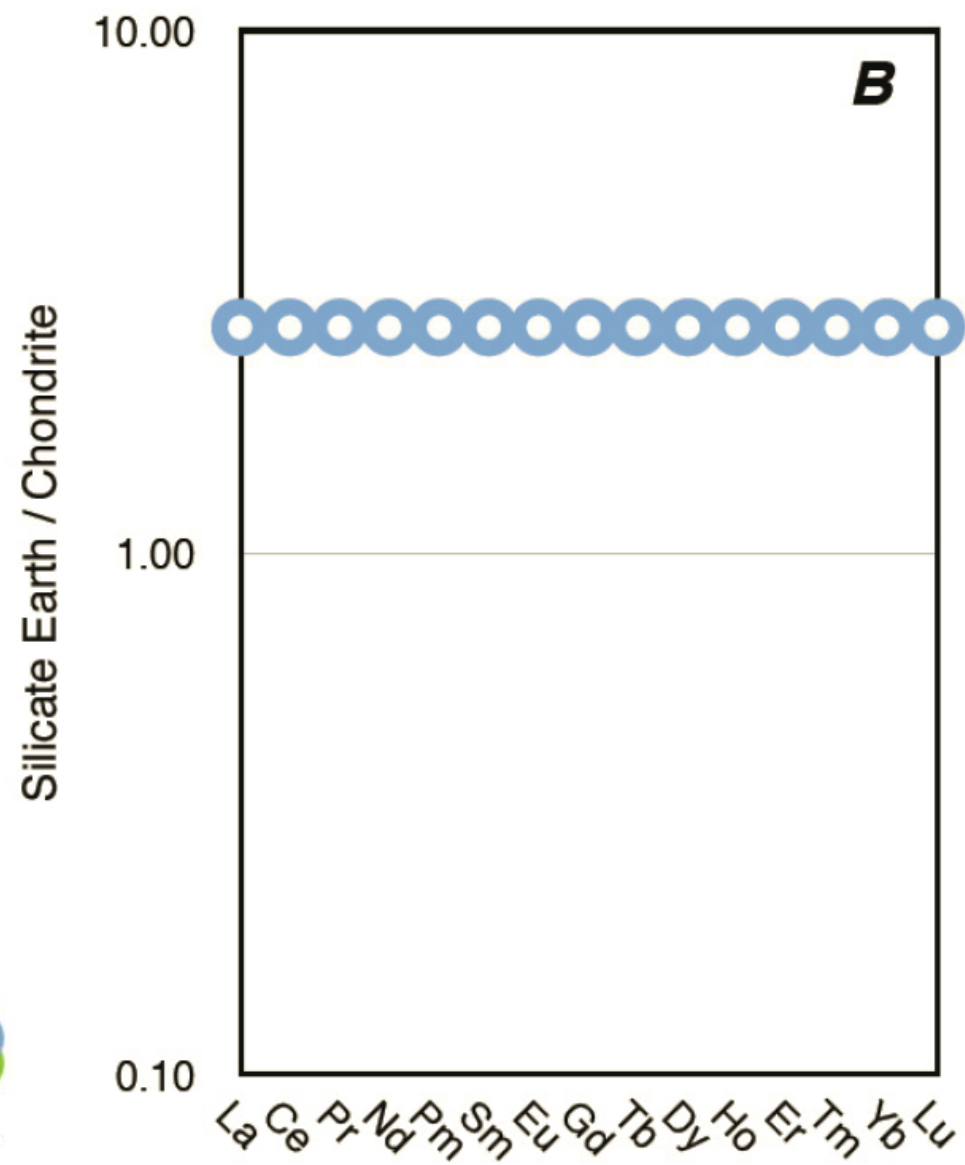
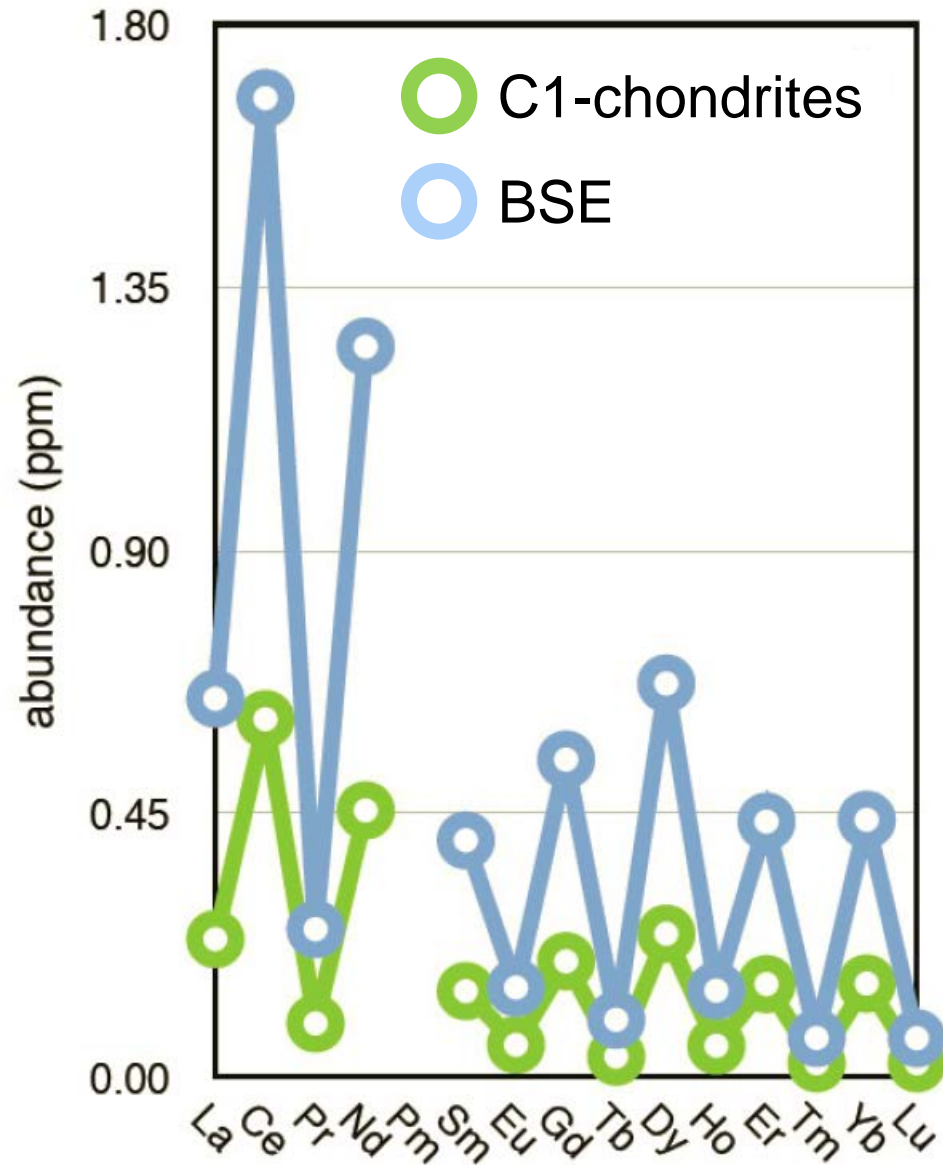
Konzentrationen der Seltenerdelemente (SEE)

Oddo-Harkins Effekt



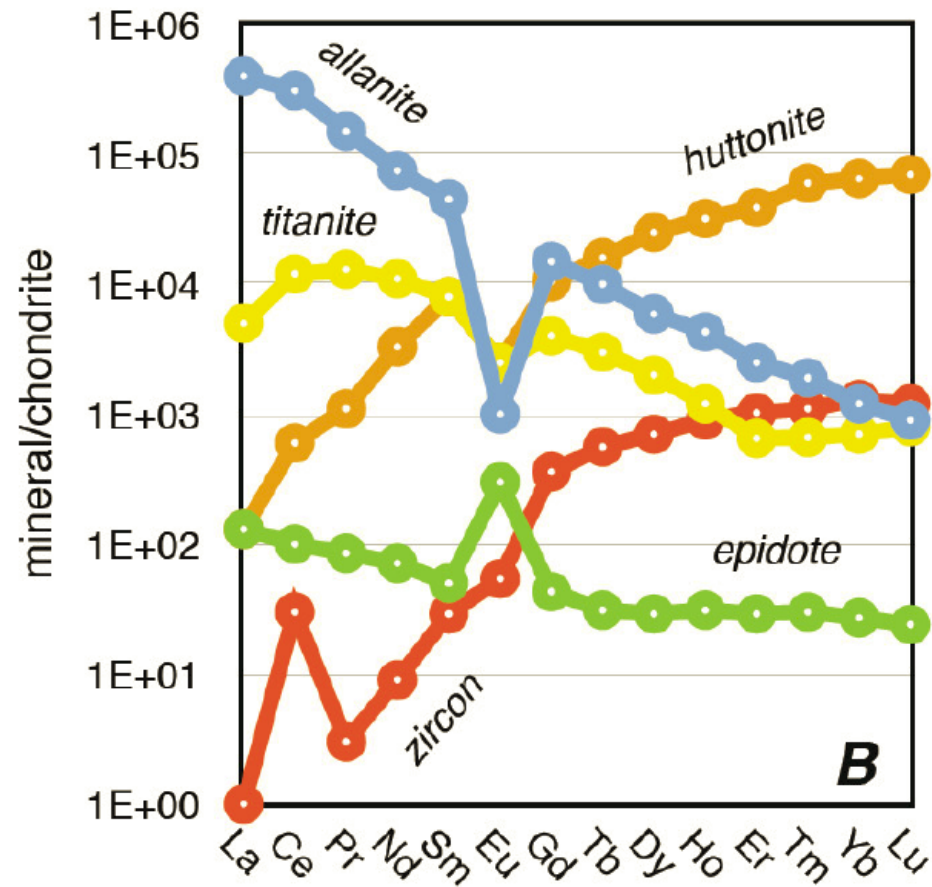
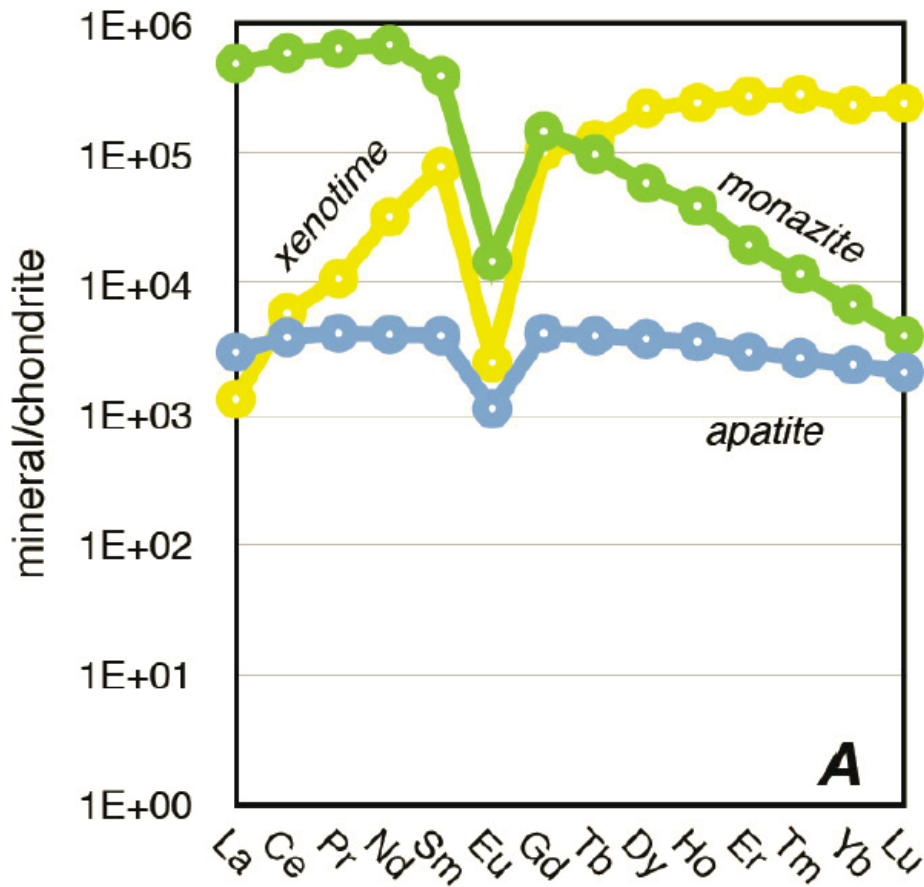
Seltenerdelemente (SEE)

Chondritnormierung



SEE-Gehalte

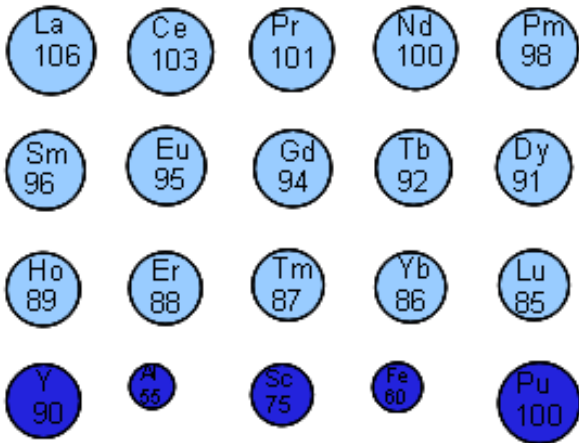
akzessorische Minerale



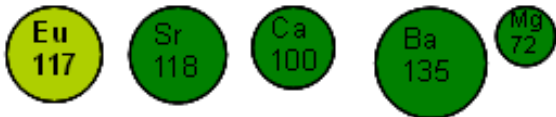
Quelle: F. Bea (1996, 2015)

Selten-Erd Elemente

+3 Cations



+2 Cations

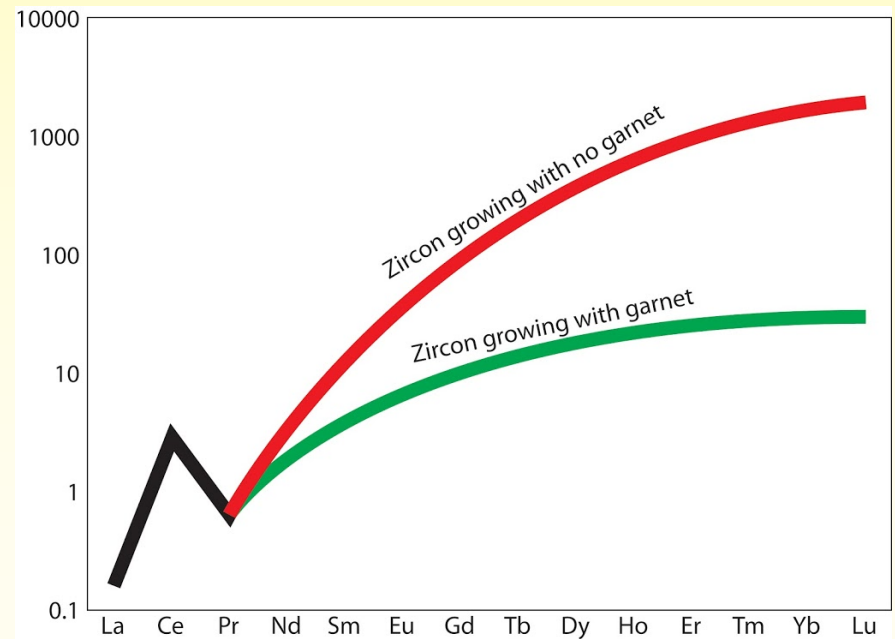
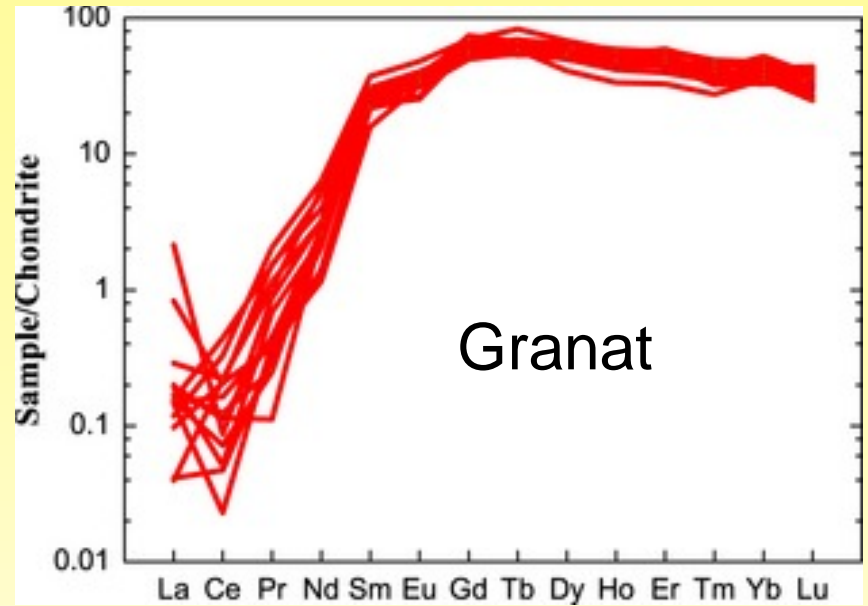


+4 Cations



Radii in picometers, octahedral (6-fold) coordination assumed. Data from Shannon & Prewitt(1969), as mirrored on sites linked in text. Scale is ten million to one; 1 cm=1Å

<http://labeledminglounge.blogspot.com/>

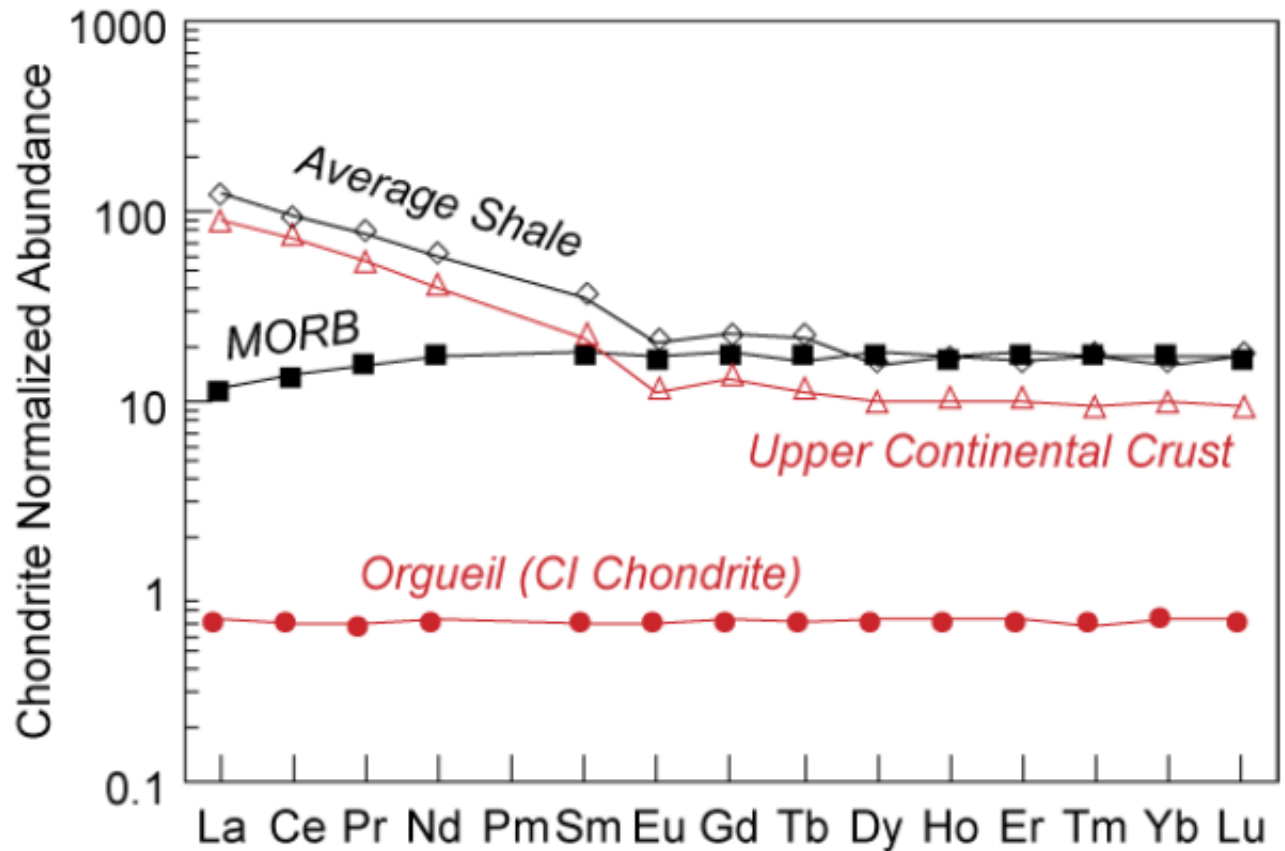


Selten-Erd Elemente

Kruste und Mantel

Normierungswerte für SEE

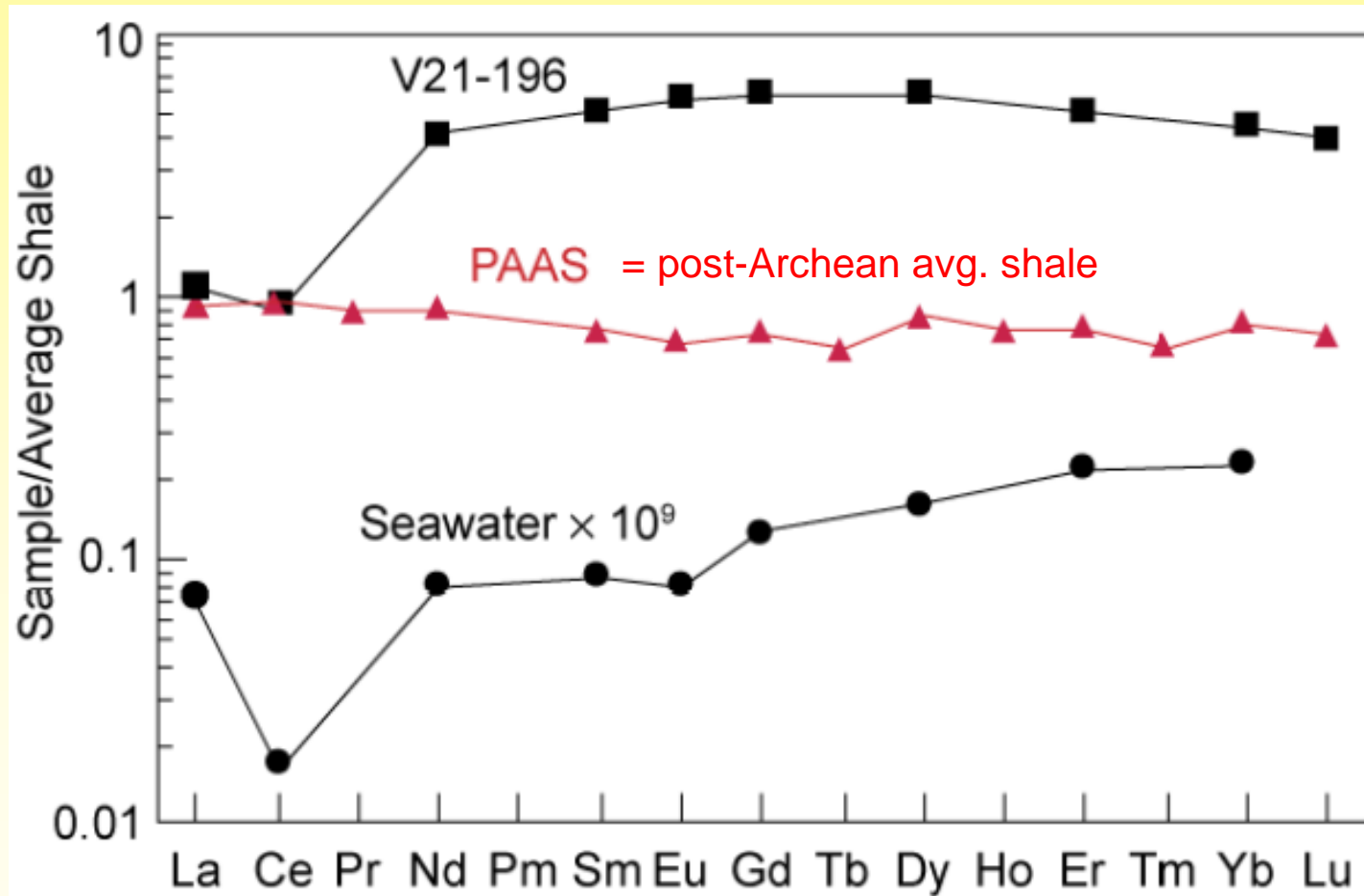
	Ordinary Chondrites	Orgueil (CI Chondrite)
La	0.329	0.245
Ce	0.865	0.638
Pr	0.130	0.0964
Nd	0.630	0.474
Sm	0.203	0.154
Eu	0.077	0.058
Gd	0.276	0.204
Tb	0.055	0.0375
Dy	0.343	0.254
Ho	0.077	0.0567
Er	0.225	0.166
Tm	0.035	0.0256
Yb	0.220	0.165
Lu	0.034	0.0254



"Ordinary chondrites" is modified from Nakamura (1974), Orgueil are the values tabulated by Palme and Jones (2005), Leedy, an ordinary chondrite, is from Masuda (1973), and Average Shale is from Piper (1974).

Selten-Erd Elemente



Meerwasser und Tiefseesedimente



Alkali- und Erdalkalielemente





The Geochemical Periodic Table

H																	He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rd	
Fr	Ra	Ac																
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
		Ac	Th	Pa	U													

He	<i>Volatiles</i>	Sc	<i>First Series Transition Metals</i>	Rb	<i>Alkali/Alkaline Earth Trace Elements</i>
	<i>Semi-Volatiles</i>		<i>High Field Strength Elements</i>	La	<i>Rare Earths & Related Elements</i>
Mg	<i>Major Elements</i>	Pt	<i>Noble Metals</i>	Pa	<i>U/Th Decay Series Elements</i>

Lithophile (Spuren)elemente

- Aufgrund ihrer Elektronenstruktur gehen die lithophilen Elemente überwiegend Ionenbindungen ein
- Das geochemische Verhalten der lithophilen Elemente wird durch die Möglichkeit der Substitution anderer Ionen in Kristallgittern bestimmt
- Die Substitution wird im Wesentlichen von Ladung und Radius bzw. dem Ionenpotential bestimmt










<u>Ionenradius</u>	
	Magnesium (Mg^{2+}): 65 pm
	Calcium (Ca^{2+}): 99 pm
	Strontium (Sr^{2+}): 118 pm
	Rubidium (Rb^{+}): 152 pm

HFSE

The Geochemical Periodic Table

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rd
Fr	Ra	Ac															

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Ac	Th	Pa	U											

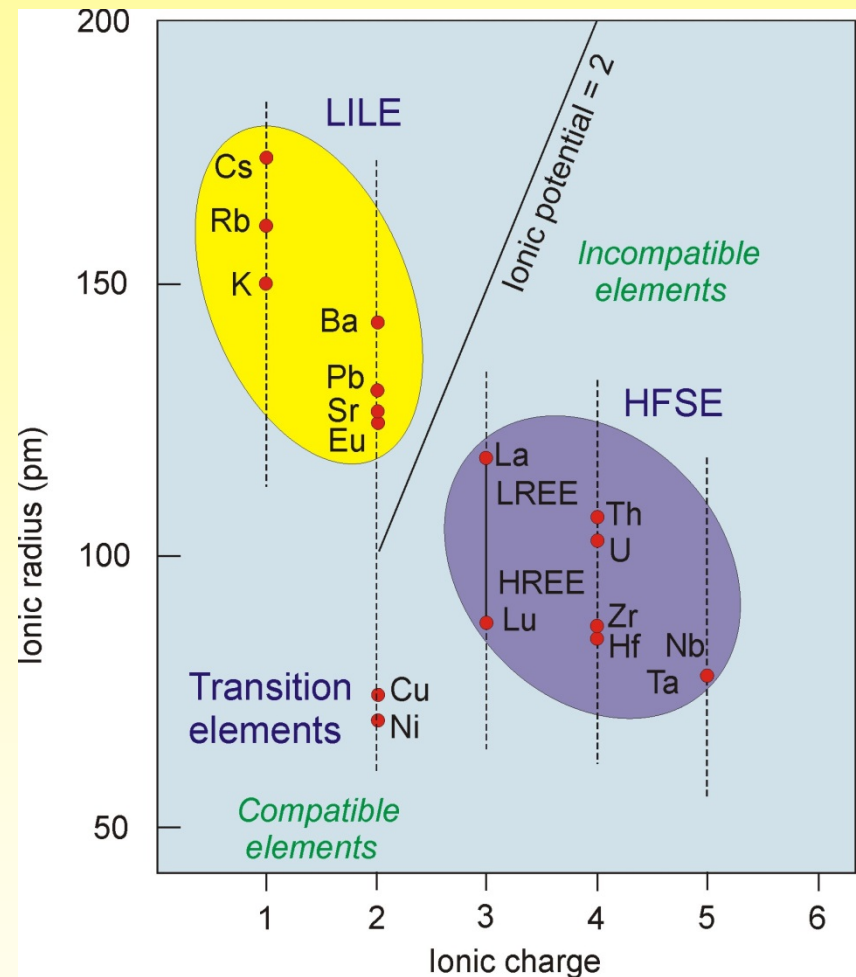
 He	<i>Volatiles</i>	 Sc	<i>First Series Transition Metals</i>	 Rb	<i>Alkali/Alkaline Earth Trace Elements</i>
 S	<i>Semi-Volatiles</i>	 Zr	<i>High Field Strength Elements</i>	 La	<i>Rare Earths & Related Elements</i>
 Mg	<i>Major Elements</i>	 Pt	<i>Noble Metals</i>	 Pa	<i>U/Th Decay Series Elements</i>

Ionenpotential

Ionenpotential = Ladung/Radius (Å)

- Maß für die Dichte der elektrischen Ladung an der Oberfläche eines Ions (und damit Maß für die Kraft, ein Anion zu polarisieren)
- Beispiele:
 - $K^+ = 1/1.46 \text{ \AA} = 0.68$
 - $Rb^+ = 1/1.57 \text{ \AA} = 0.64$
 - $Sr^{2+} = 2/1.21 \text{ \AA} = 1.65$
 - $Nb^{5+} = 5/0.7 \text{ \AA} = 7.14$

Das Ionenpotential eines Kations gibt einen wichtigen Hinweis auf sein Verhalten in magmatischen und wässrigen Systemen



LILE: large ion lithophile elements: Großionige lithophile Elemente
HFSE: high field strength elements: Elemente mit hoher Feldstärke

mobile Elemente - immobile Elemente

Kompatibel vs. Inkompatibel

Elemente, deren Ladung und/oder Ionenradius sich deutlich von dem ersetzten Ion im Kristallgitter unterscheiden, reichern sich bei partieller Aufschmelzung in der Schmelzphase an. Diese Elemente heißen **inkompatibel**

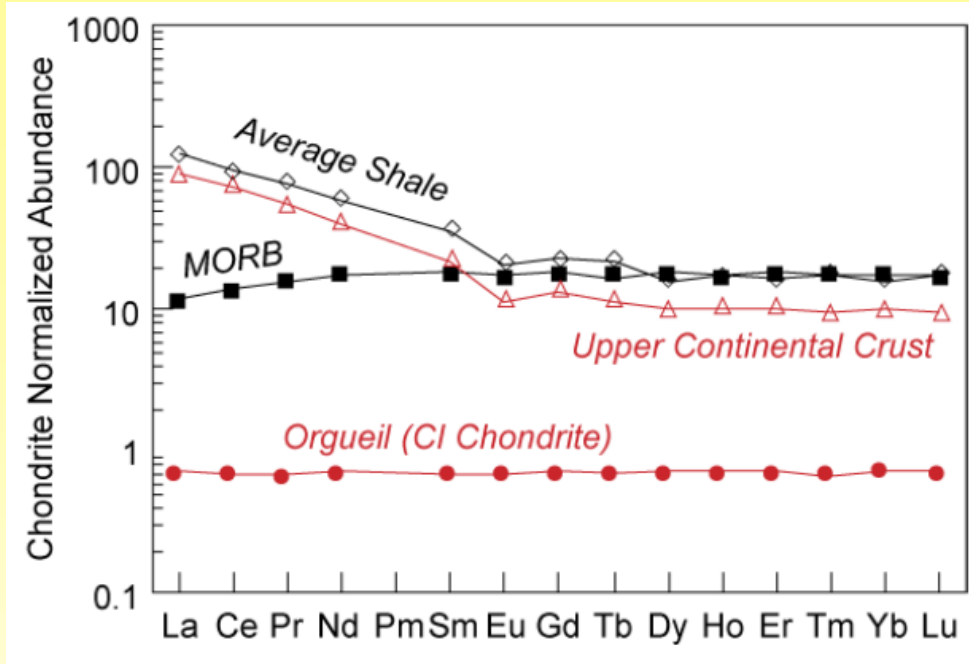
Beispiele: K, Rb, Ba, Cs, LSEE, HFSE

Elemente, die sich aufgrund der Ähnlichkeit ihrer Ladung und ihres Ionenradius zu dem ersetzten Ion im Kristallgitter leicht einbauen lassen, bleiben während der partiellen Aufschmelzung in den festen Mineralphasen. Diese Elemente heißen **kompatibel**

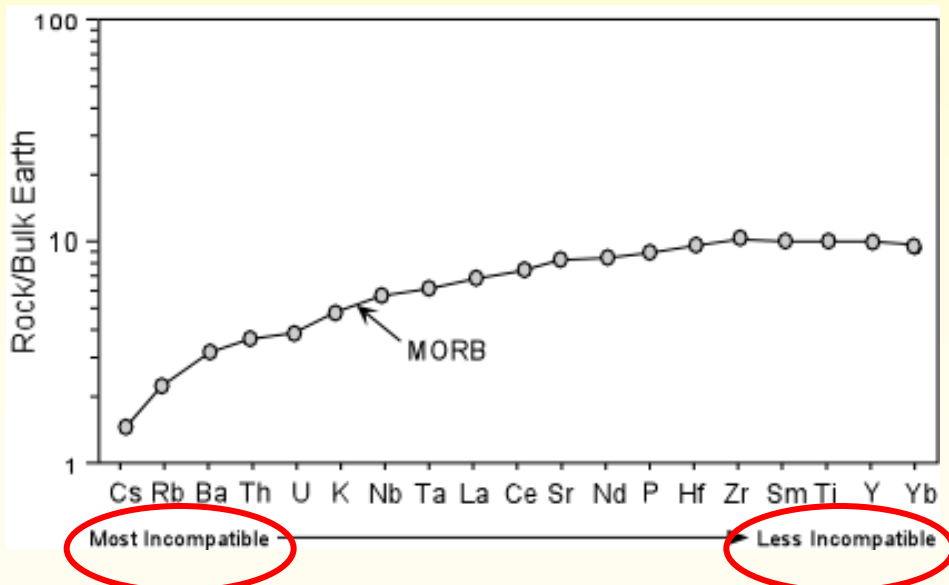
Beispiele: Ni, Cr, Co

Normierte Diagramme

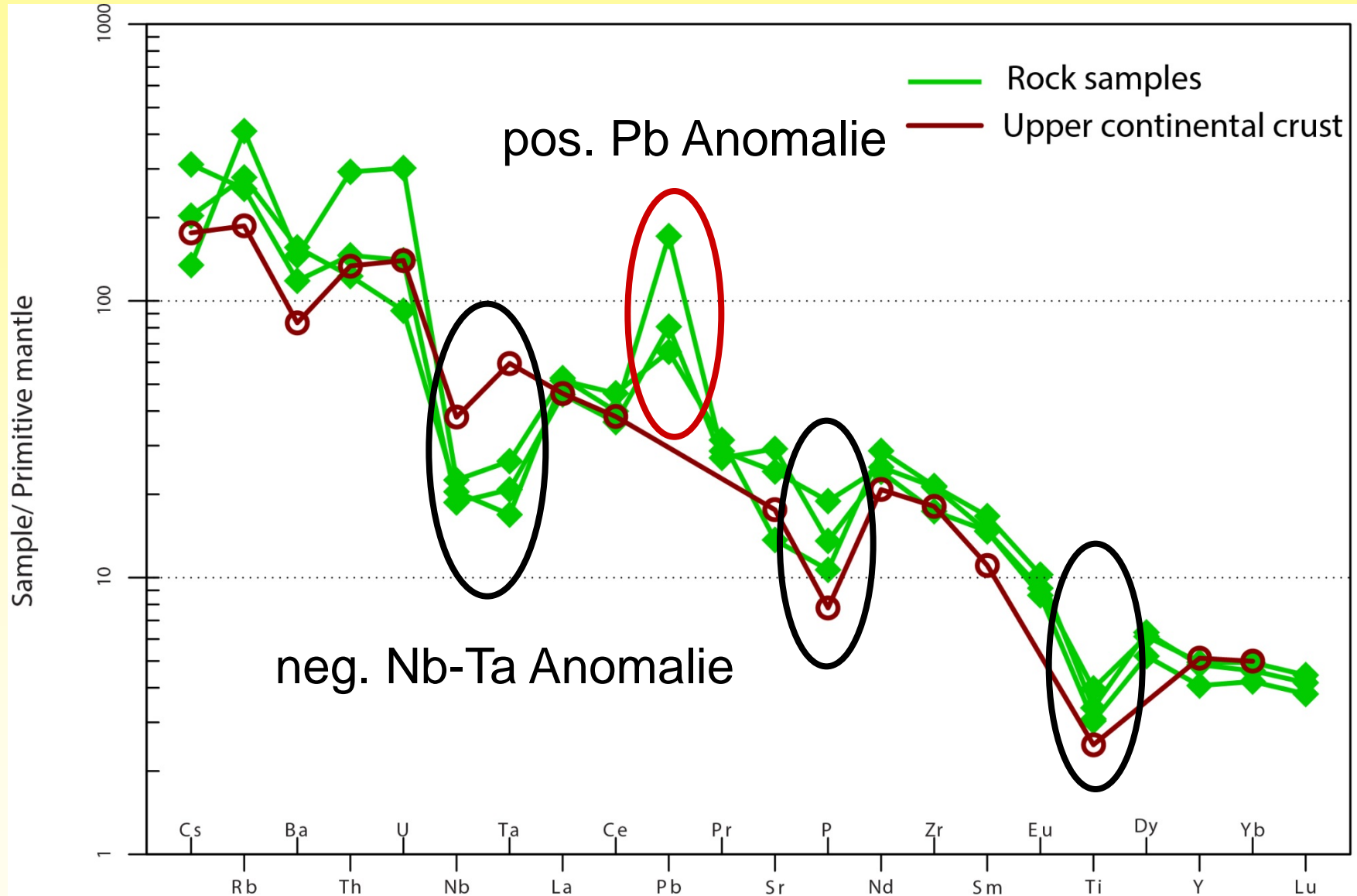
Selten-Erd-Diagramm



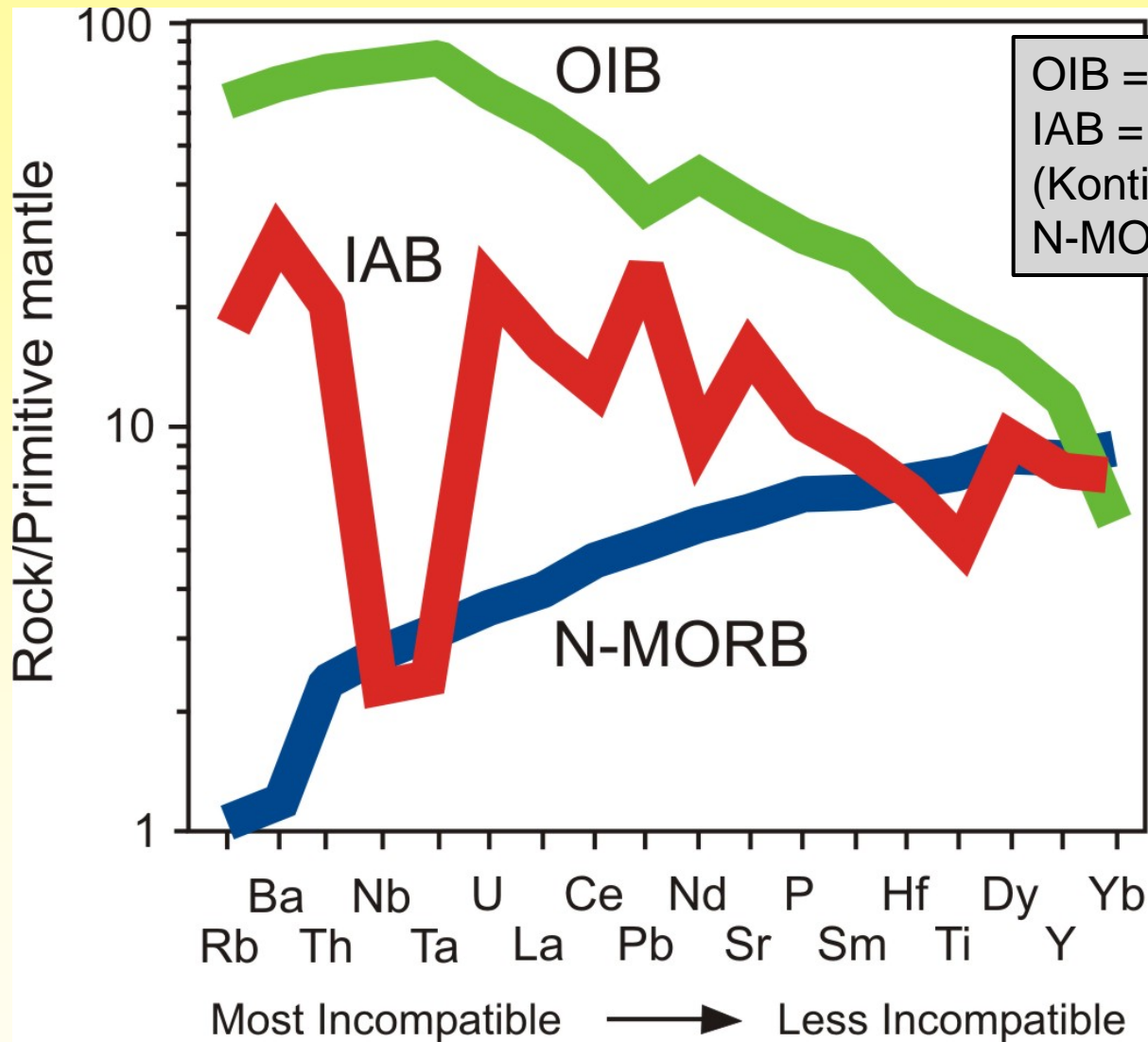
Spider-Diagramm bzw. Multi-Element Diagramm



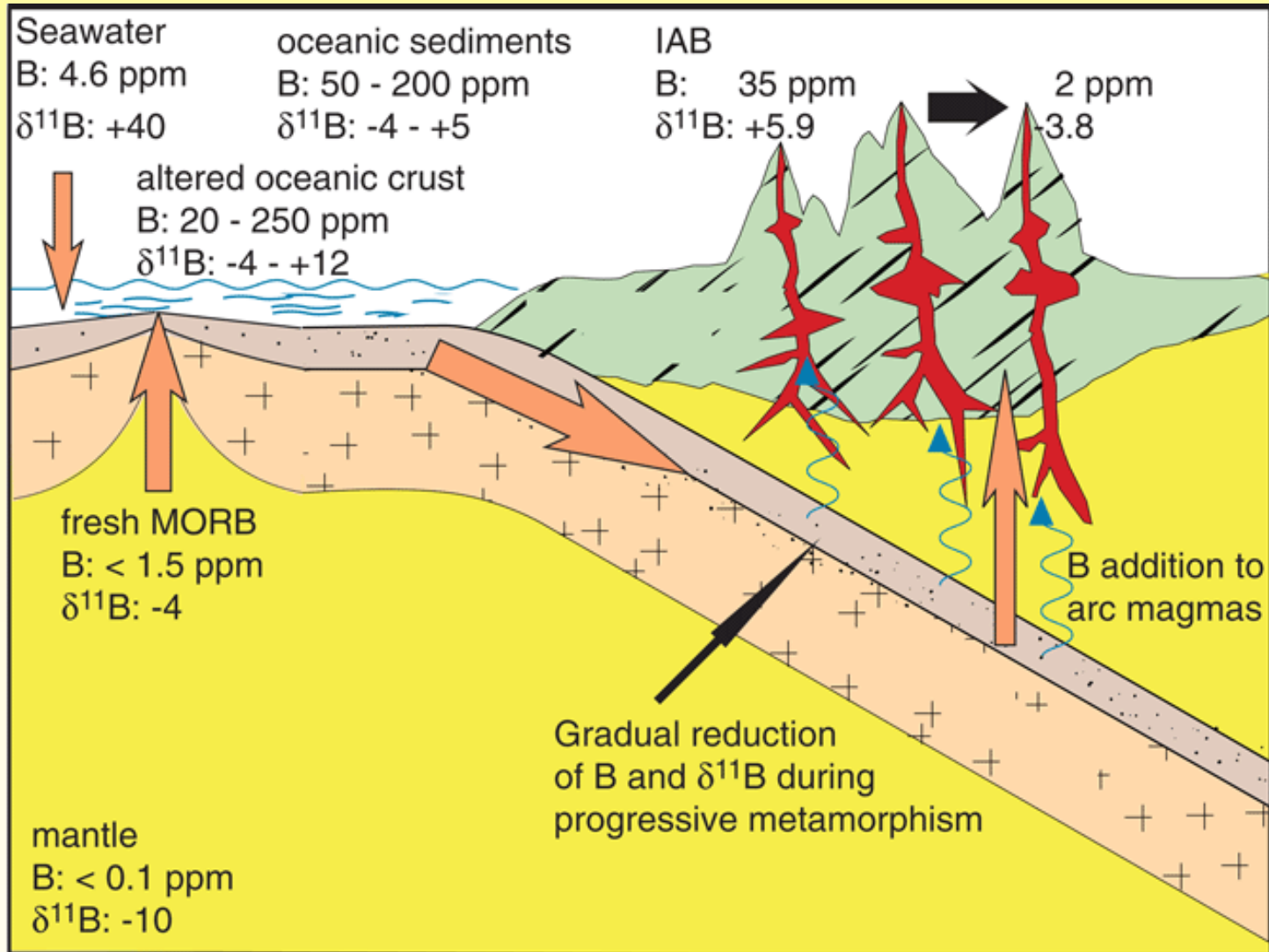
Spiderdiagramm – kontinentale Kruste



Spiderdiagramm – Basalte

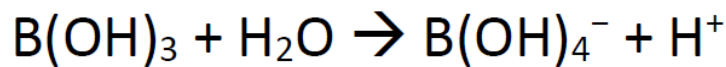
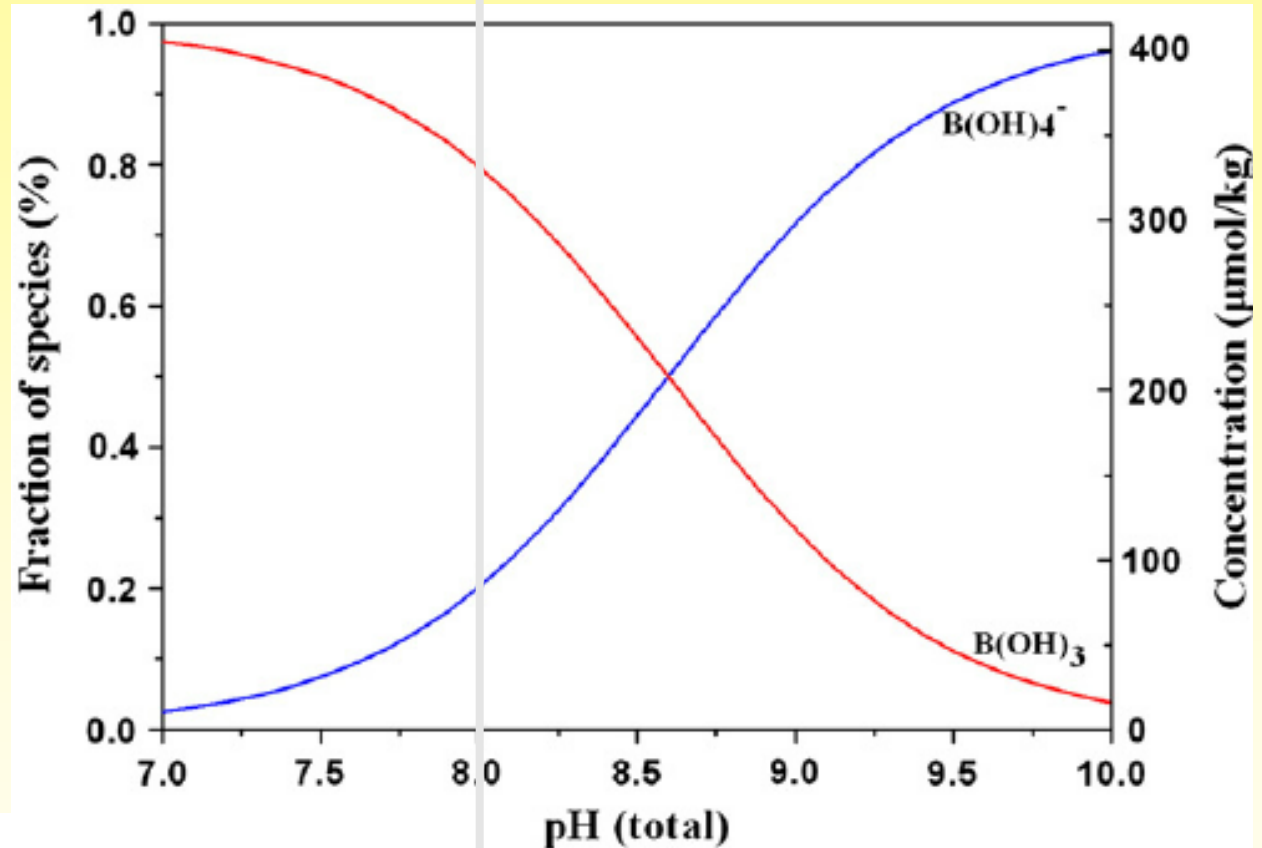


Weitere wichtige Elemente: Bor



Bor isotope als Paleo-pH proxy

Die Verteilung von $B(OH)_3$ (trigonal) und $B(OH)_4^-$ (tetraedrisch) im Meerwasser ist abhängig vom pH-Wert



$$K_B = \frac{[B(OH)_4^-][H^+]}{[B(OH)_3]}$$

Edelmetalle, PGE

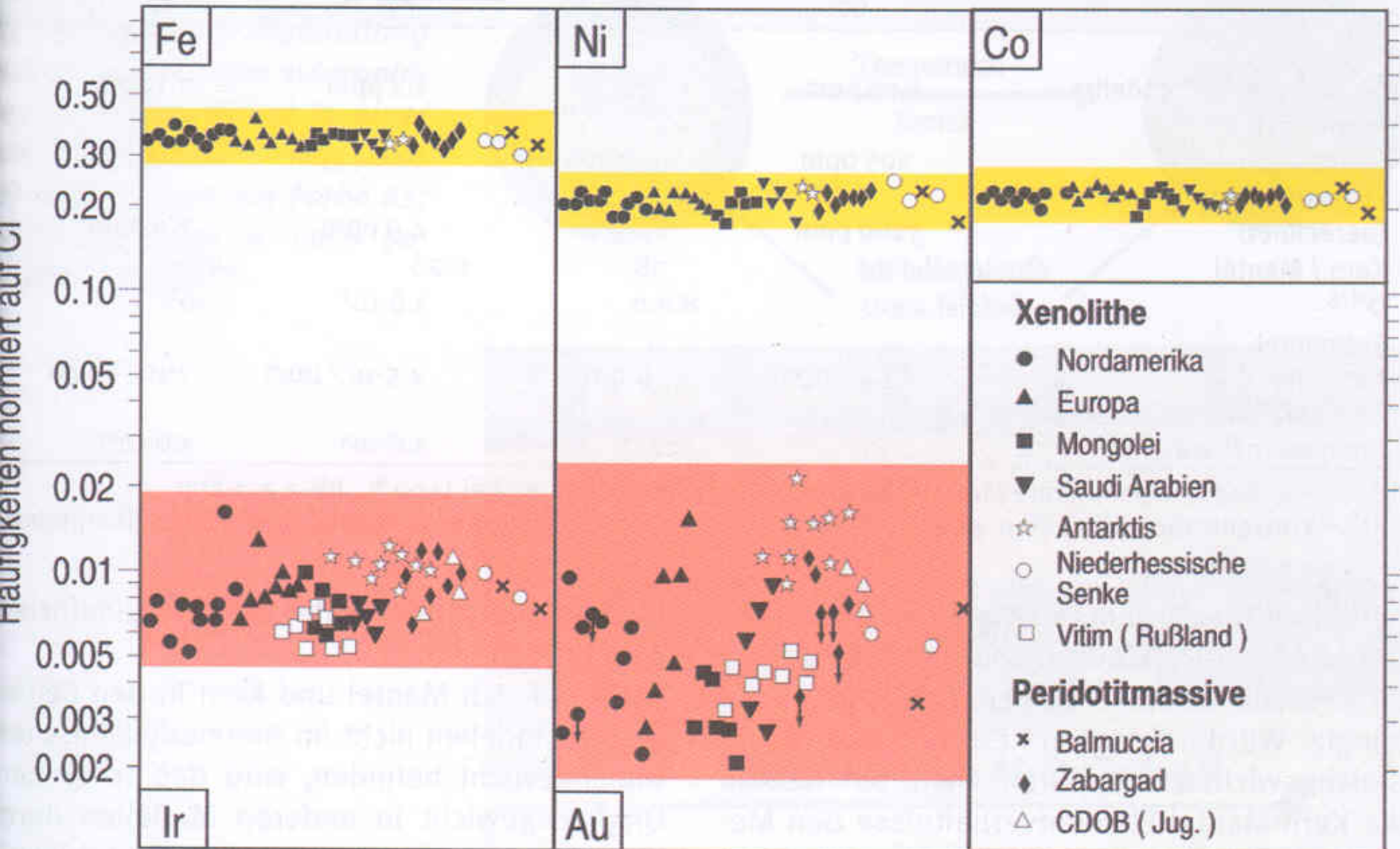
The Geochemical Periodic Table

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac															
			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
			Ac	Th	Pa	U											

He	<i>Volatiles</i>	Sc	<i>First Series Transition Metals</i>	Rb	<i>Alkali/Alkaline Earth Trace Elements</i>
S	<i>Semi-Volatiles</i>	Zr	<i>High Field Strength Elements</i>	La	<i>Rare Earths & Related Elements</i>
Mg	<i>Major Elements</i>	Pt	<i>Noble Metals</i>	Pa	<i>U/Th Decay Series Elements</i>

Weitere Elemente: Siderophile Elemente

Siderophile Elemente in Gesteinen des oberen Erdmantels



Elementkonzentrationen im Erdmantel - Hinweise zur Akkretionsgeschichte der Erde

	Co	Ni
Gesamterde (chondritisches Modell)	1107 ppm	2.40%
Erdmantel (gemessen)	105 ppm	0.20%
Erdkern (berechnet)	3200 ppm	7.50%
Kern/Mantel	31	38
D^{M/S}	710	8200
Erdmantel (berechnet)	4.5 ppm	9.0 x 10 ⁻⁴ %
Überanreicherung im Erdmantel (gemessen/berechnet)	23	222

D^{M/S} = experimentell bestimmte Metall/Silikat Verteilungskoeffizienten bei 1400 °C.

$$V = 4/3 \times \pi \times r^3$$

R = 6370 km (Erdradius)

R = 3470 km (Kernradius)

	Vol%	Masse%
Erdmantel	82.0	67.2
Erdkern	16.2	32.4

$$\rightarrow (1107 \text{ ppm} \times 1) - (105 \text{ ppm} \times 0.672) = 1036 \text{ ppm}$$

$$1036 \text{ ppm} / 0.324 = 3200 \text{ ppm}$$

$$\rightarrow 3200 \text{ ppm} / 105 \text{ ppm} = 30.5$$

$$\rightarrow 3200 \text{ ppm} / 710 = 4.5 \text{ ppm}$$

$$\rightarrow 105 \text{ ppm} / 4.5 \text{ ppm} = 23$$

late veneer hypothesis

Radiogene Isotopensysteme

Goldschmidt-Klassifikation im Periodensystem der Elemente

	1																18	
1	1 H	2											13	14	15	16	17	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	(43) Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	57-71 Lan	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	89-103 Act	(104) Rf	(105) Db	(106) Sg	(107) Bh	(108) Hs	(109) Mt	(110) Ds	(111) Rg	(112) Cn	(113) Uut	(114) Uuq	(115) Uup	(116) Uuh	(117) Uus	(118) Uuo
Lanthanoide	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	(61) Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu			
Actinoide	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	(93) Np	(94) Pu	(95) Am	(96) Cm	(97) Bk	(98) Cf	(99) Es	(100) Fm	(101) Md	(102) No	(103) Lr			

Legende:

Atmosphäphil	Chalcophil	Lithophil	Siderophil	sehr selten
--------------	------------	-----------	------------	-------------

Spurenelemente

Verteilung von Spurenelementen zwischen koexistierenden Phasen

Verteilungskoeffizient (Partition or distribution coefficient):

$$D_i^{\alpha-\beta} = \frac{C_i^{\alpha}}{C_i^{\beta}}$$

Solid-liquid partition coefficient:

$$D_i^{s/l} = \frac{C_i^s}{C_i^l}$$

$$D_{(i)} = x^1 Kd_{(i)}^1 + x^2 Kd_{(i)}^2 + x^3 Kd_{(i)}^3 + \dots \quad (x^1 - \text{proportion of mineral 1})$$

Spurenelemente

Thermodynamische Zusammenhänge

$$D_i^{\alpha-\beta} = \frac{\lambda_i^\beta}{\lambda_i^\alpha} \exp\left(\frac{-\Delta G_i^{\alpha-\beta}}{RT}\right)$$

$$D_i^{\alpha-\beta} = \frac{h_i^\beta}{h_i^\alpha} \exp\left(\frac{\mu_i^{\circ\beta} - \mu_i^{\circ\alpha}}{RT}\right)$$

Druckabhängigkeit des Verteilungskoeffizienten:

$$\left(\frac{\partial \ln D_i}{\partial P}\right)_T = \frac{-\Delta V}{RT}$$

α, β : Phasen

μ : chemisches Potential von Element i in Phasen α & β

λ = Aktivitäten

h = Henry Konstante

R = Gaskonstante

T = Temperatur

Spurenelemente

kompatibles & inkompatibles Verhalten

$$D_i^{s/l} \geq 1$$

Kompatibles Element

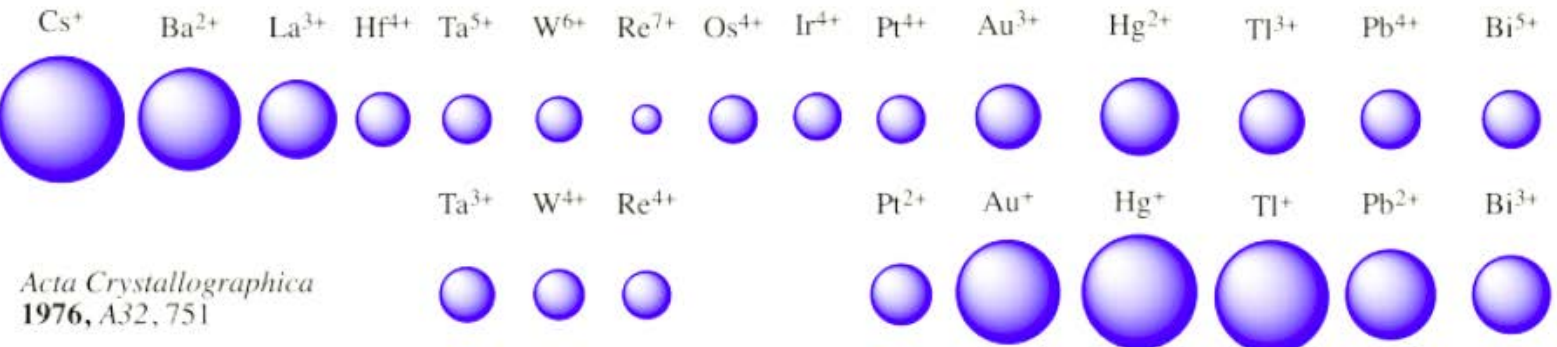
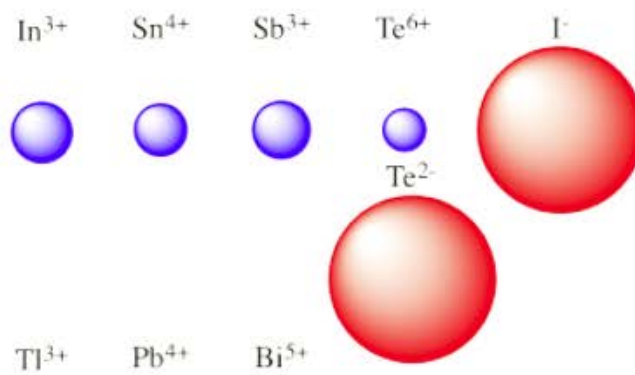
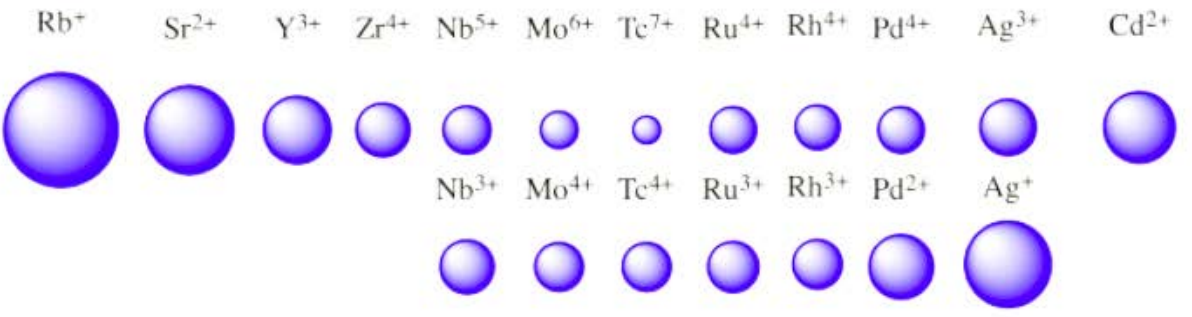
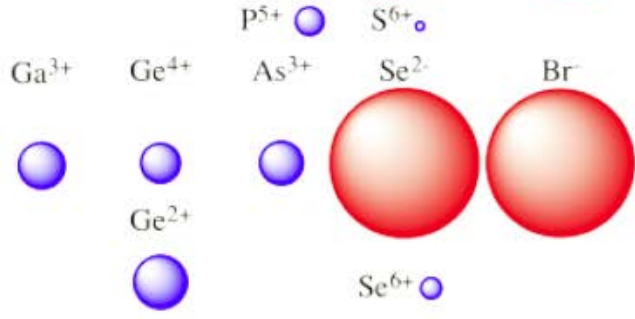
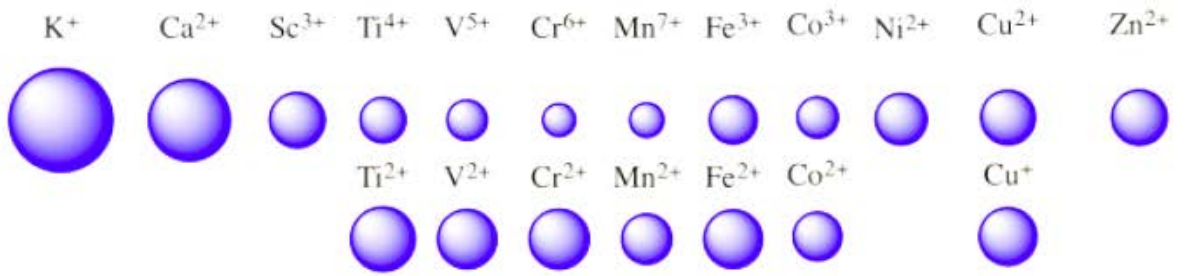
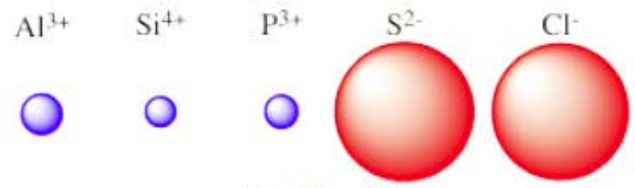
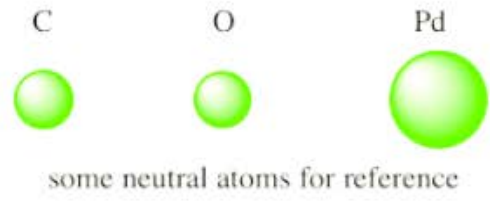
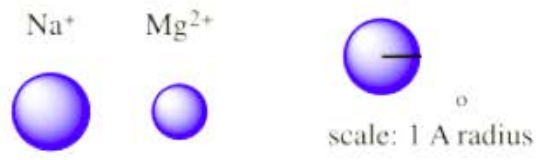
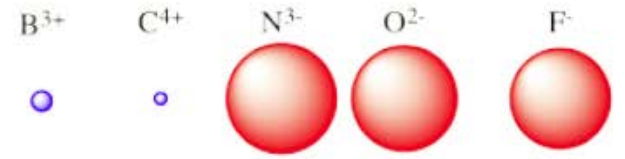
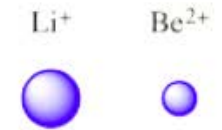
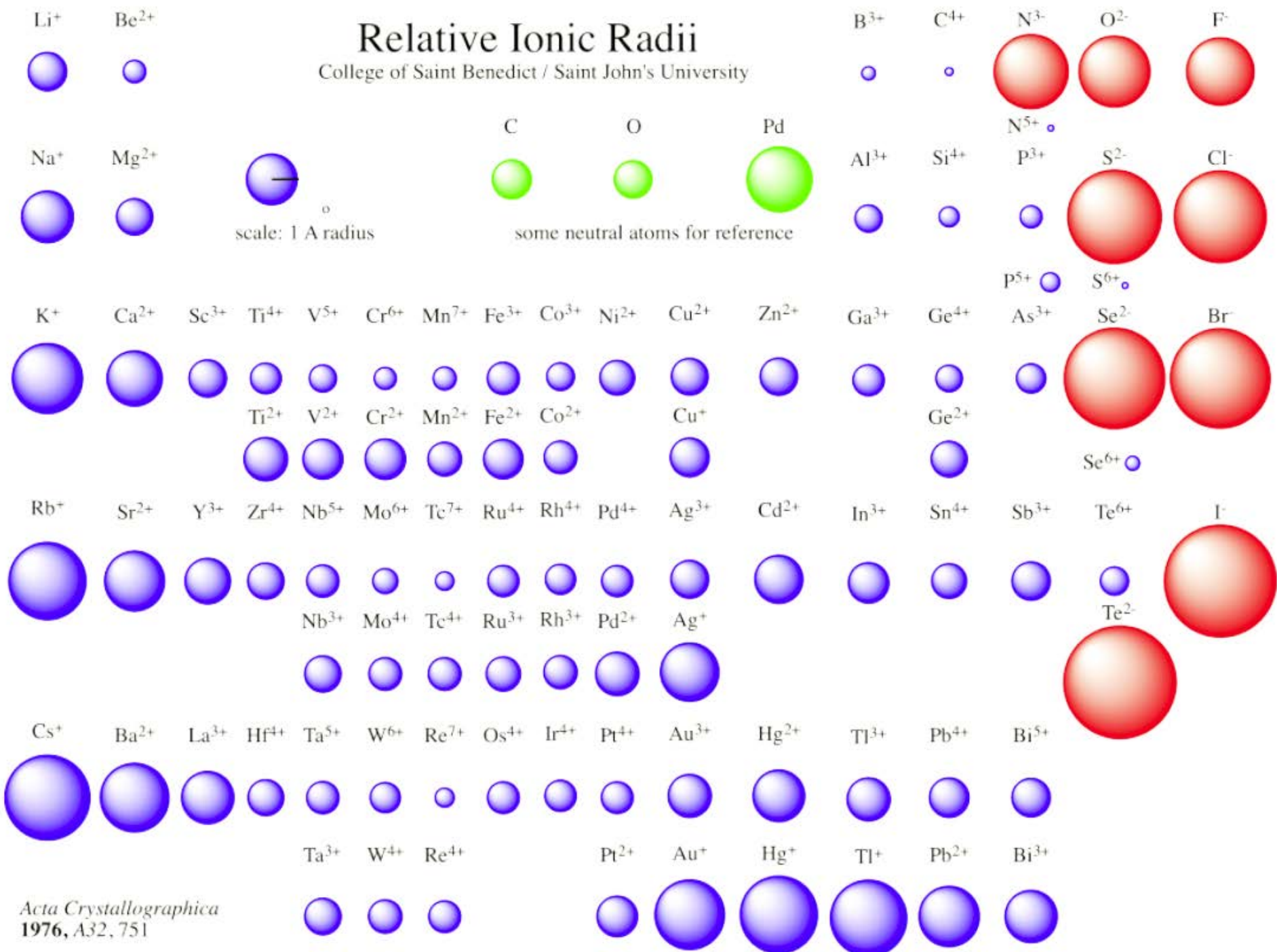
$$D_i^{s/l} \ll 1$$

Inkompatibles Element

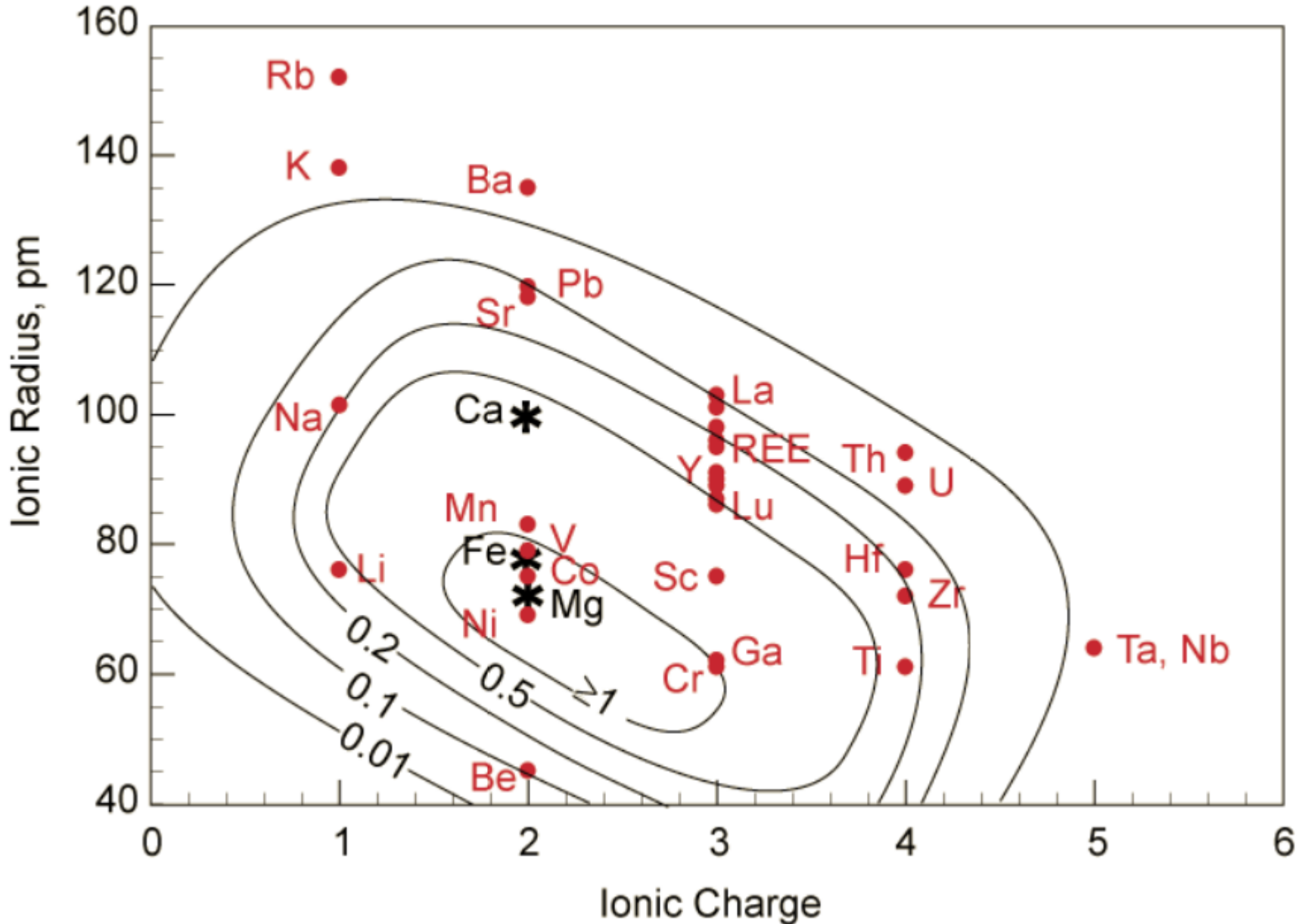
Begriffe beziehen sich gewöhnlich auf die Verteilung zwischen Phasen, die in mafischen/ultramafischen Gesteinen gesteinsbildend sind, und silikatischen Schmelzen

Relative Ionic Radii

College of Saint Benedict / Saint John's University



Ionenpotential und Verteilungskoeffizienten



Goldschmidtsche Regel(n)

ein vollständiger Austausch (Substitution) ist zwischen Atomen möglich, die gleiche Ladung besitzen und deren Radien sich um nicht mehr als 10-15 % unterscheiden.

So lassen sich lückenlose Mischkristallreihen erklären, z.B. zwischen

Fayalit (Fe_2SiO_4) und Forsterit (Mg_2SiO_4)

Gitterplätze in gesteinsbildenden Mineralen sind meistens mit zweiwertigen Kationen (Mg, Fe, Ca) besetzt.

Goldschmidtsche Regel(n)

Je größer die Differenz in der Ladung zwischen dem “normalen” Ion im Kristall und dem ersetzenden Ion, desto schwieriger wird die Substitution

Was passiert bei ungleicher Ladung?

Goldschmidt: “...*ions whose charges differ by one unit substitute readily for one another provided electrical neutrality of the crystal is maintained.*”

→ gekoppelte Substitution:

z.B. die zwischen den Plagioklas-Feldspäten

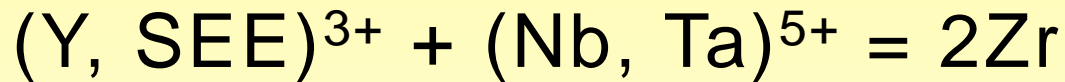
Albit ($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$) und Anorthit ($\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$)

Substitutionen sind allgegenwärtig

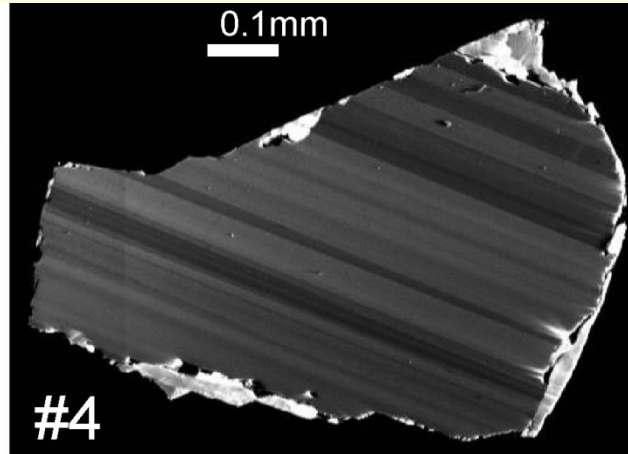
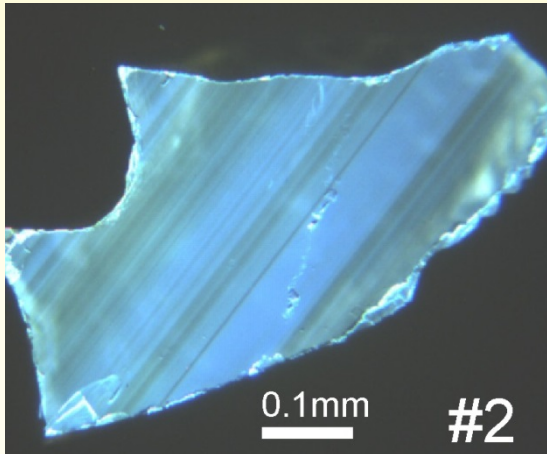
Minerale zeigen *chemische Variation* oder sind *zoniert*

Beispiel Zirkon (ZrSiO_4)

SEE (La-Lu) substituieren Zr:



verschiedenen Farben durch Einbau unterschiedlicher Mengen an SEE



Modifikation der Goldschmidt Regel(n)

Substitutionen sind limitiert bei gleicher Ionengröße (und Ladung), wenn die Ionen unterschiedliche Elektronegativitäten haben oder unterschiedliche Bindungen eingehen.

Beispiel, Na^+ and Cu^+ haben den gleichen Radius und Ladung aber substituieren sich nicht gegenseitig.

Spurenelement-Substitutionen

diadocher Ersatz eines häufigeren Elements durch ein selteneres von gleicher Wertigkeit und ähnlichem Ionenradius (ähnliches Ionenpotential)

Rb^+ (1.57 Å; $Z/r = 0.637$) \rightarrow K^+ (1.46 Å, $Z/r = 0.68$) in Kfsp

$\text{Sr}^{2+} \rightarrow \text{Ca}^{2+}$

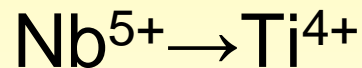
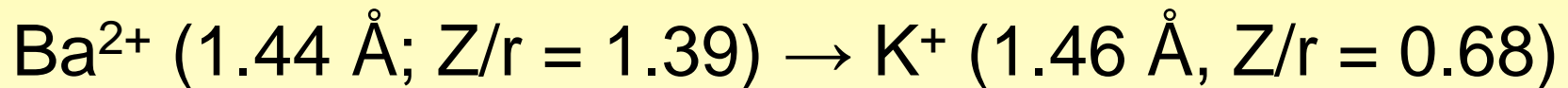
$\text{Ga}^{3+} \rightarrow \text{Al}^{3+}$

Zr^{4+} (0.80 Å); Hf^{4+} (0.79 Å)

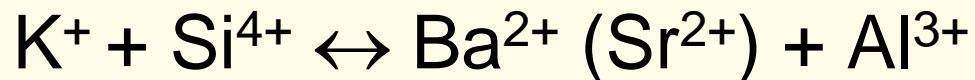
Hf bildet keine eigenen Minerale; tritt getarnt auf in Zirkon (ZrSiO_4)

Spurenelement-Substitutionen

diadocher Ersatz eines häufigeren Elements durch ein selteneres von *anderer Wertigkeit*, aber mit ähnlichem Ionenradius,

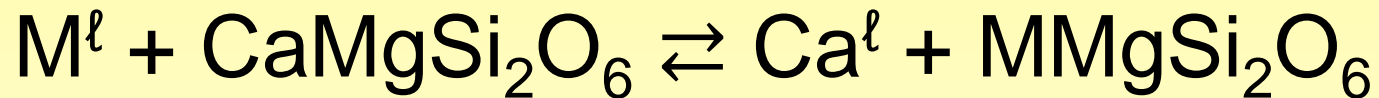


Voraussetzung: gekoppelte Substitution wegen Ladungsausgleich:



Quantitative Betrachtungen

- Substitutionsreaktion:



- Gibbs Freie Energie für diese Reaktion:

$$\Delta G_r = \Delta G_{\text{exchange}}^{M-\text{Ca}} - \Delta G_{\text{melting}}^{\text{Di}}$$

- Der Verteilungskoeffizient für Element M hängt ab von den zwei Komponenten der Freien Energie:

$$D_M^{\text{Di}/\ell} = \exp\left(\frac{\Delta G_{\text{melting}}^{\text{Di}} - \Delta G_{\text{ex}}^{M-\text{Ca}}}{RT}\right)$$

“Crystal-strain Theorie” und Verteilungskoeffizienten

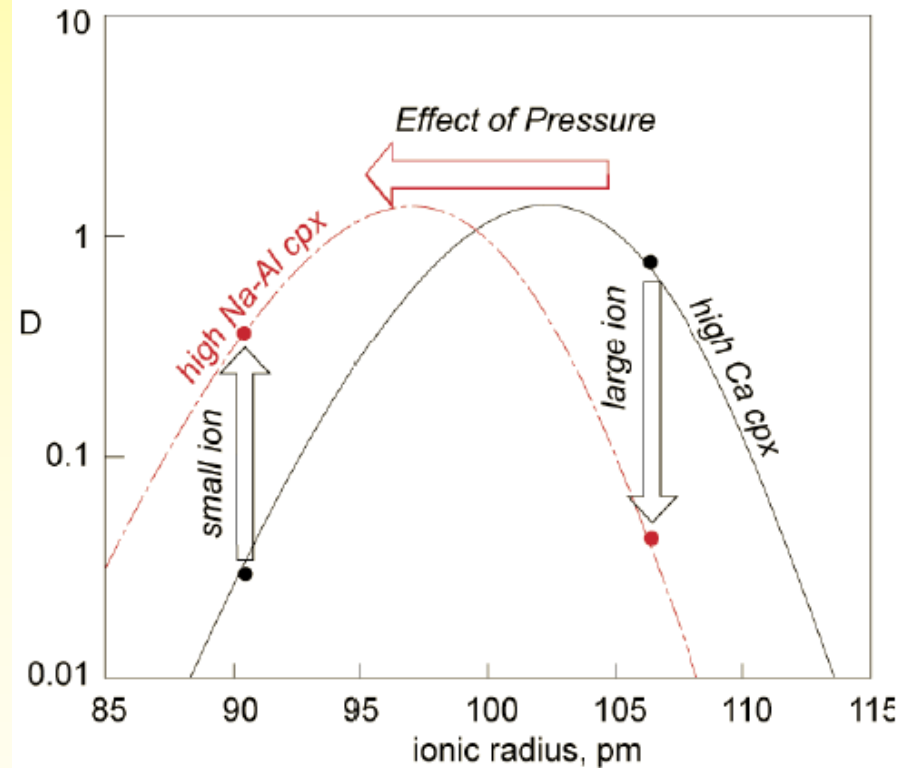
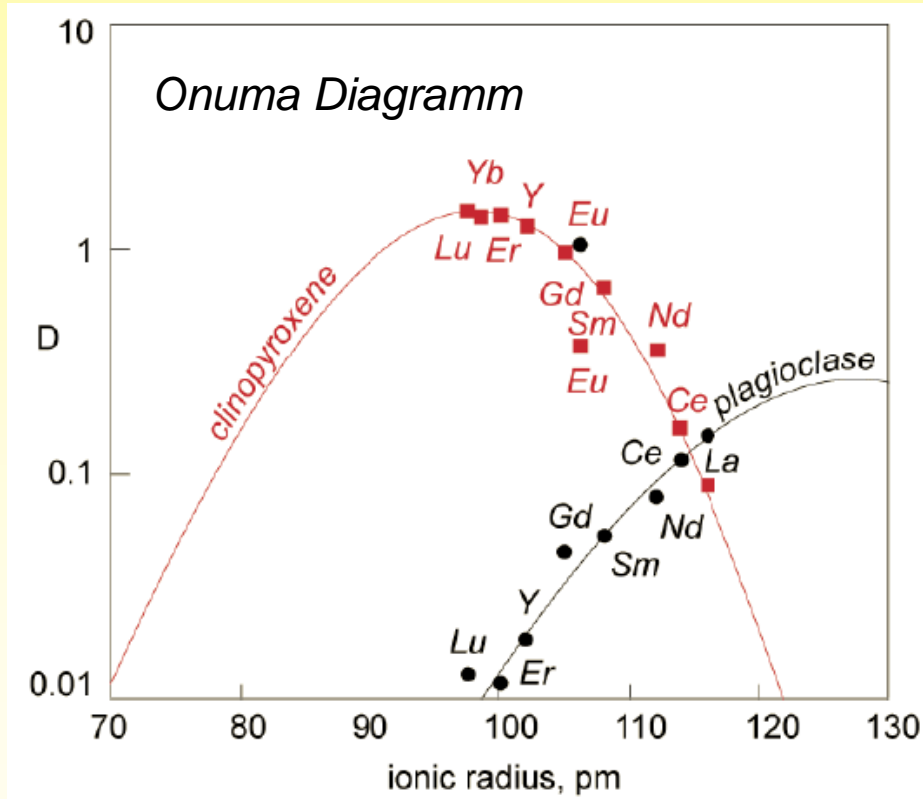
$$D_i^{s/l} = D^0 \exp \left(\frac{-4\pi EN_A \left[\frac{r_0}{2} (r_M - r_0)^2 + \frac{1}{3} (r_M - r_0)^3 \right]}{RT} \right)$$

E = Elastizitätsmodul

N = Avogadrozahl

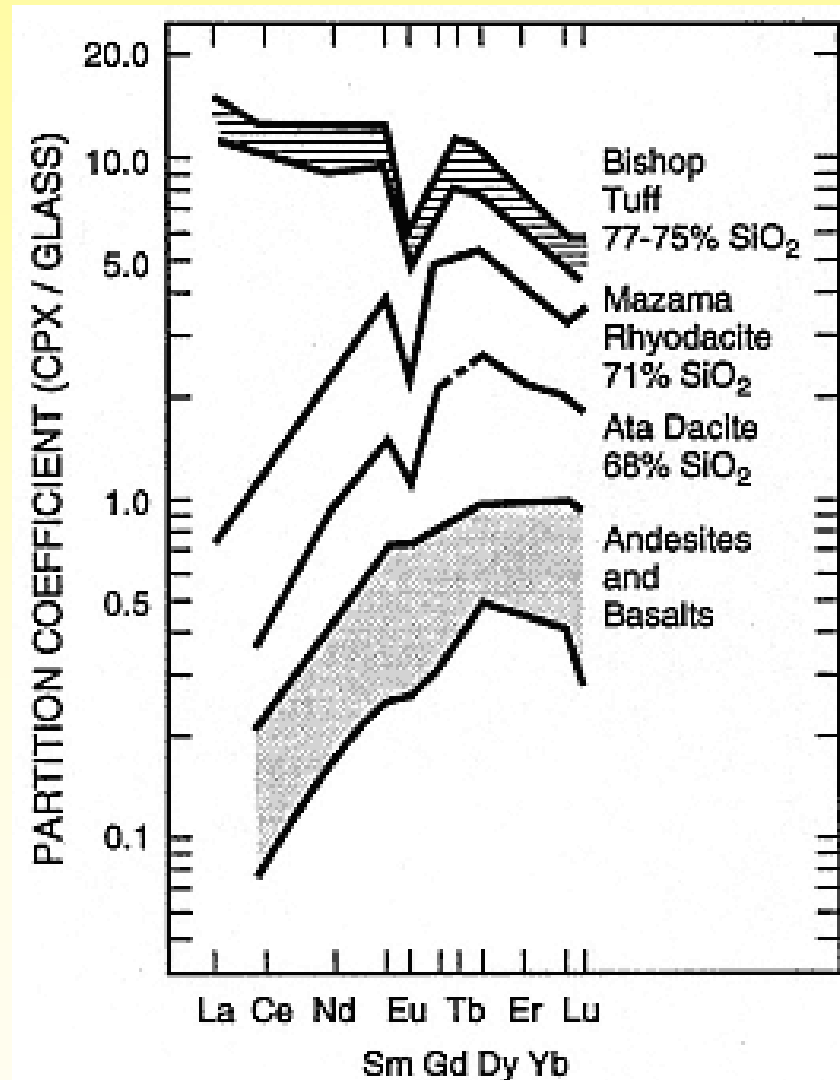
r_0 = idealer Ionenradius

r_M = tatsächlicher Ionenradius

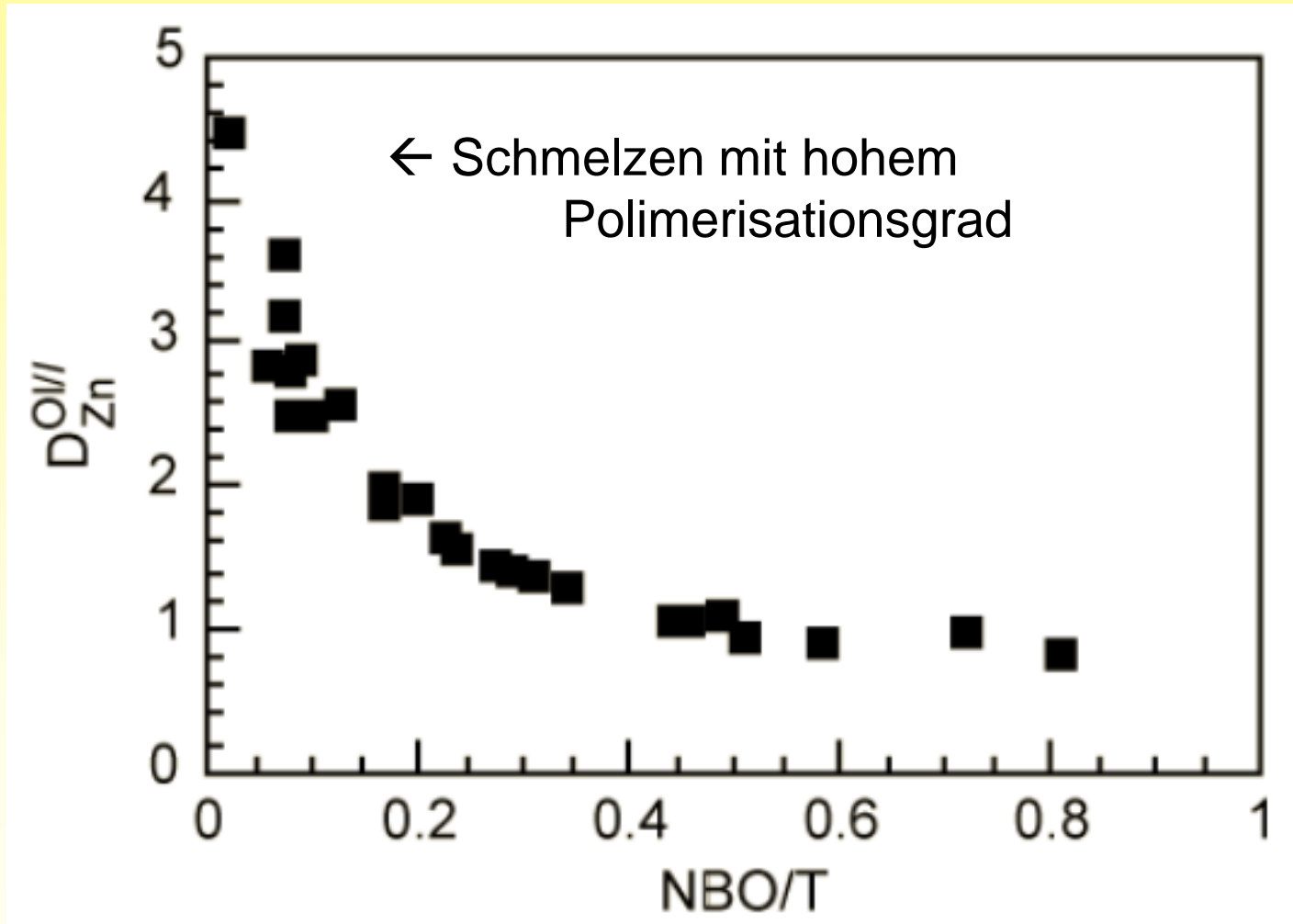


Druckanstieg \rightarrow Jadeitgehalt
($\text{NaAlSi}_2\text{O}_6$) im Cpx nimmt zu

SEE-Verteilung zwischen Cpx und Glas in verschiedenen Schmelzzusammensetzungen

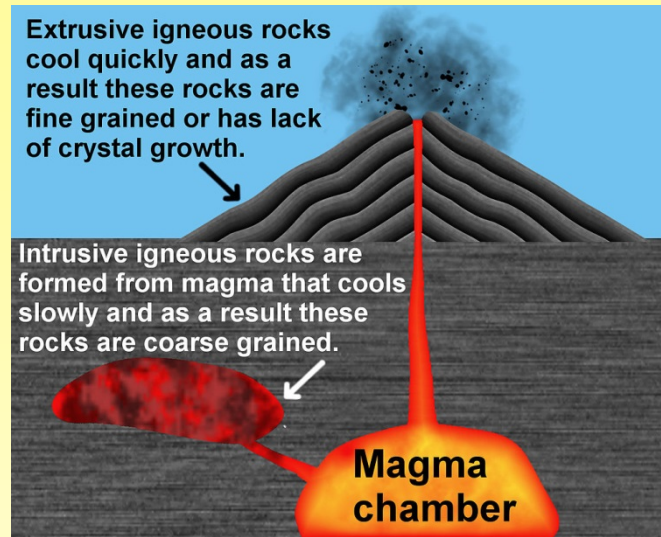
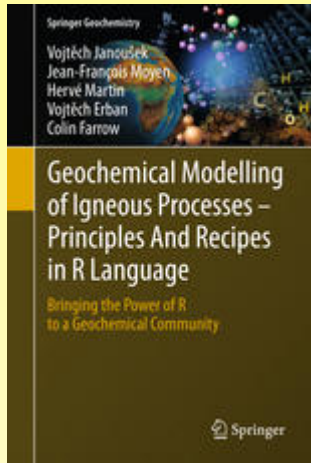


Abhängigkeit des Verteilungskoeffizienten von der Zusammensetzung

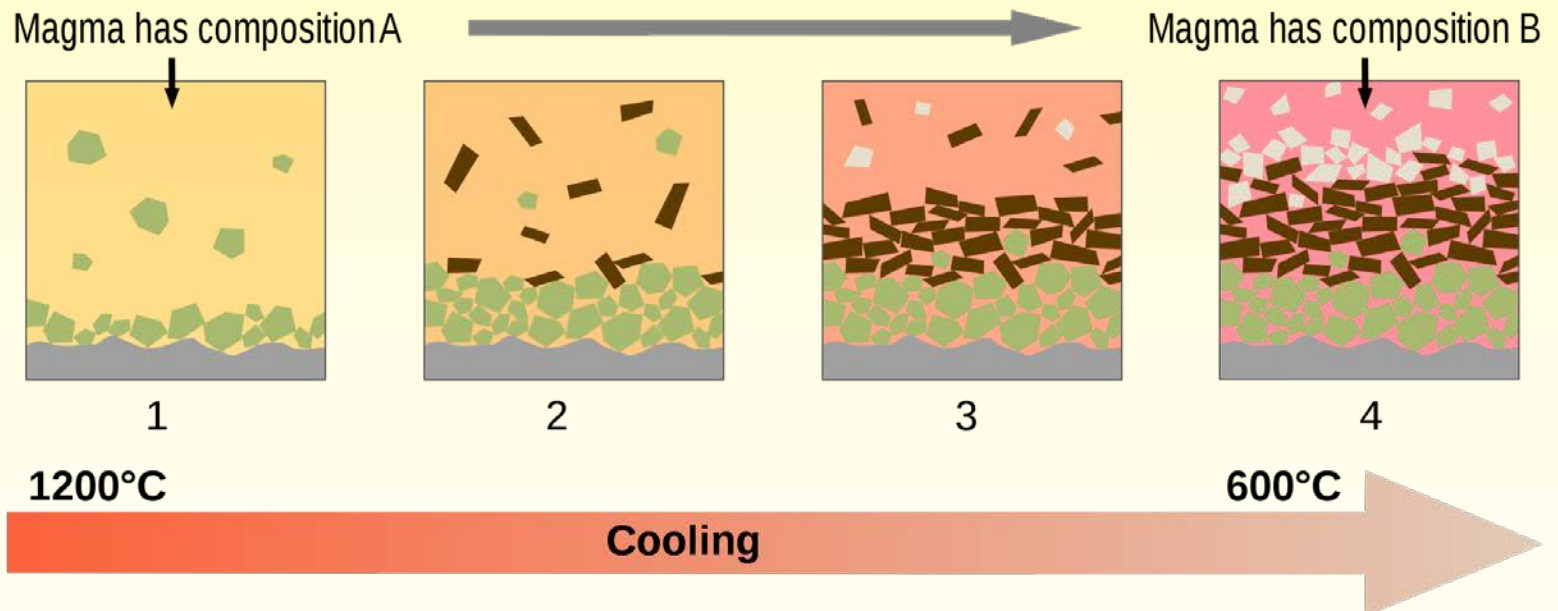


NBO/T = non-bridging oxygens per tetrahedral cation

Spurenelemente in magmatischen Prozessen

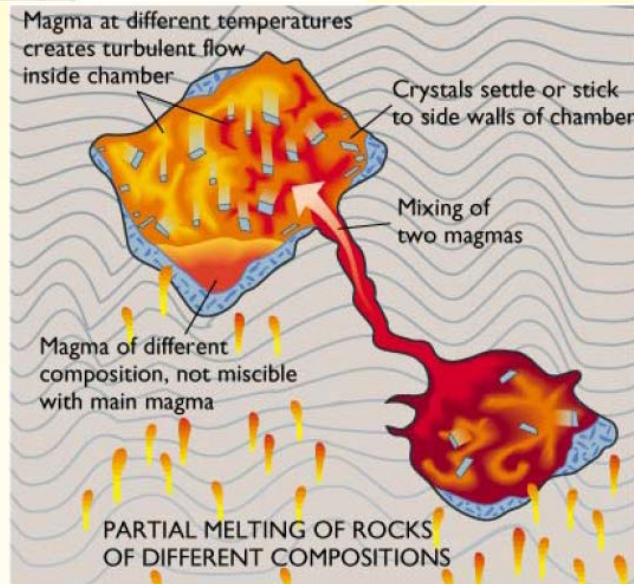
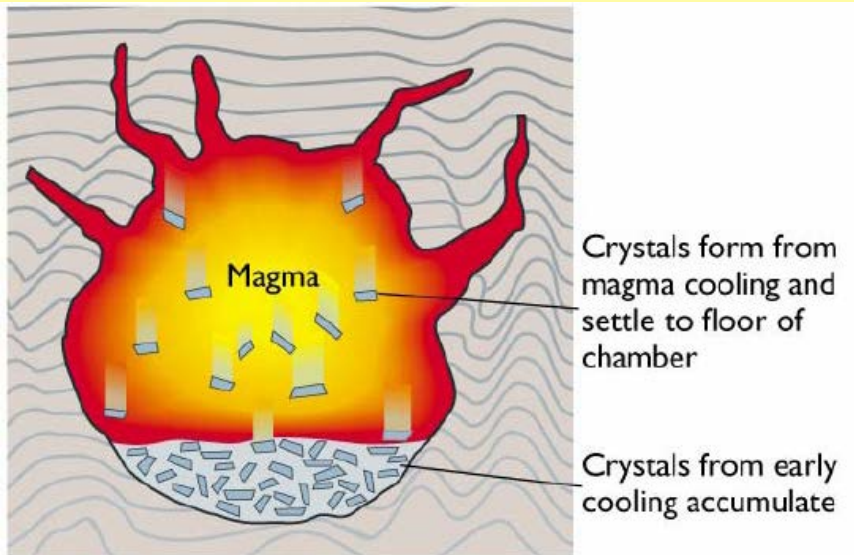


www.earthref.org

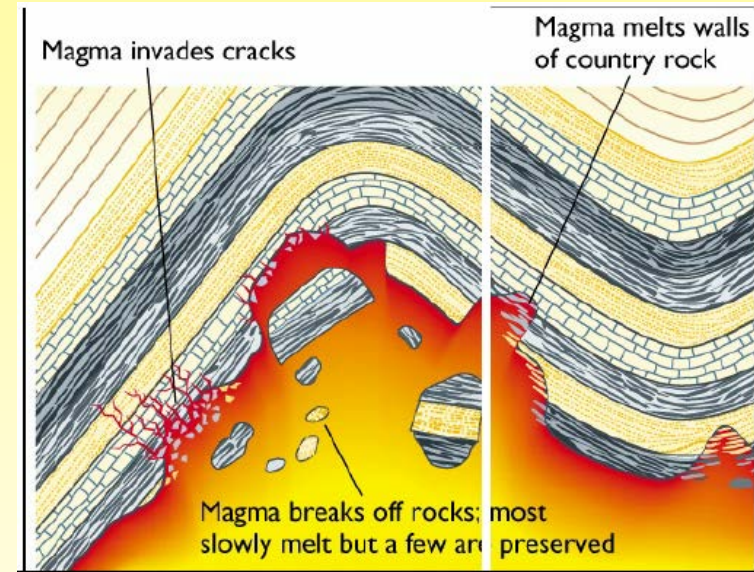


Magmatische Prozesse

Aufschmelzung und Kristallisation



Assimilation, Kontamination



Magmenmischung

Schmelzbildung

VERTEILUNG VON SPURENELEMENTEN BEI PARTIELLER AUFSCHMELZUNG

Magma-Zusammensetzung

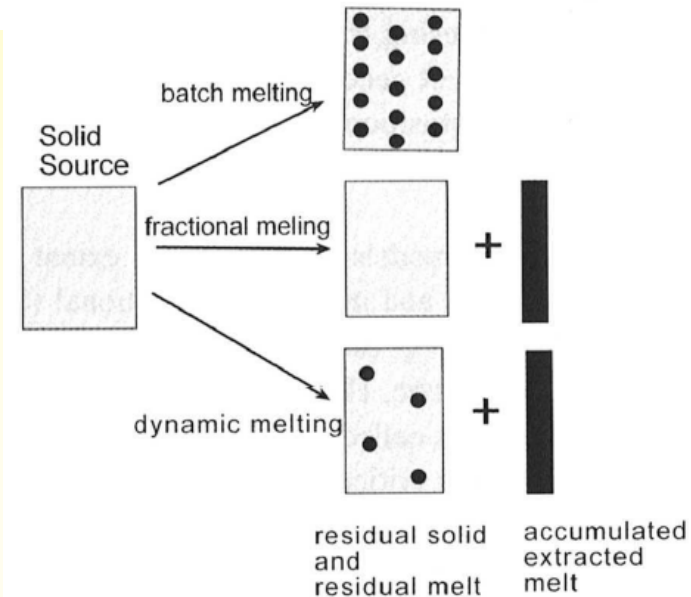
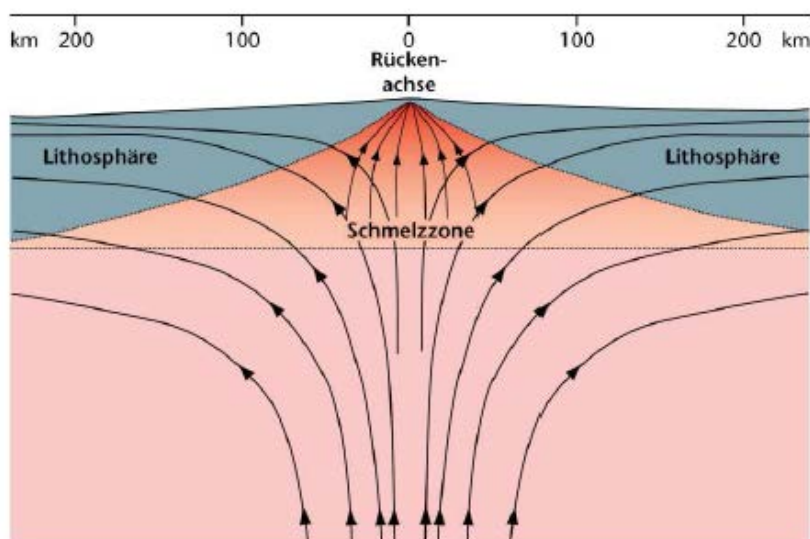


Mathematisches Modell
des Aufschmelzprozesses

Rückschlüsse auf die Magmaquelle

Modelle der Schmelzbildung

- Gleichgewichtsschmelzen = **Batch (equilibrium) melting**: Eine bestimmte Menge an Schmelze equilibriert mit dem Residualgestein
- Fraktionierte Aufschmelzung = **Fractional melting**: Die Schmelze wird sofort nach ihrer Bildung extrahiert
- Kontinuierliche Aufschmelzung = **Continuous melting**: Die Schmelze wird kontinuierlich extrahiert, aber ein Teil der Schmelze bleibt im System um die Porenräume zu füllen



Modelle der Schmelzbildung

Was für ein Schmelzbildungsprozess hat hier stattgefunden?



Modelle der Schmelzbildung

- Modal

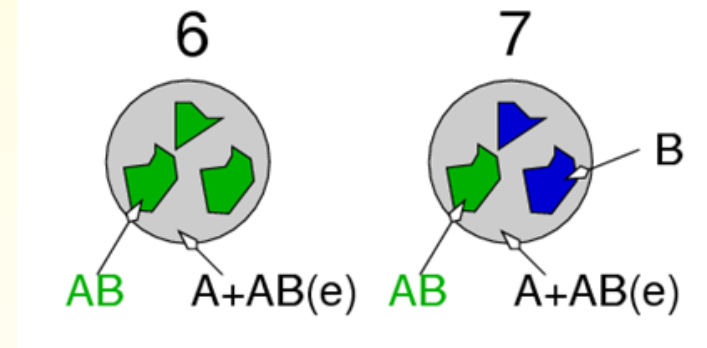
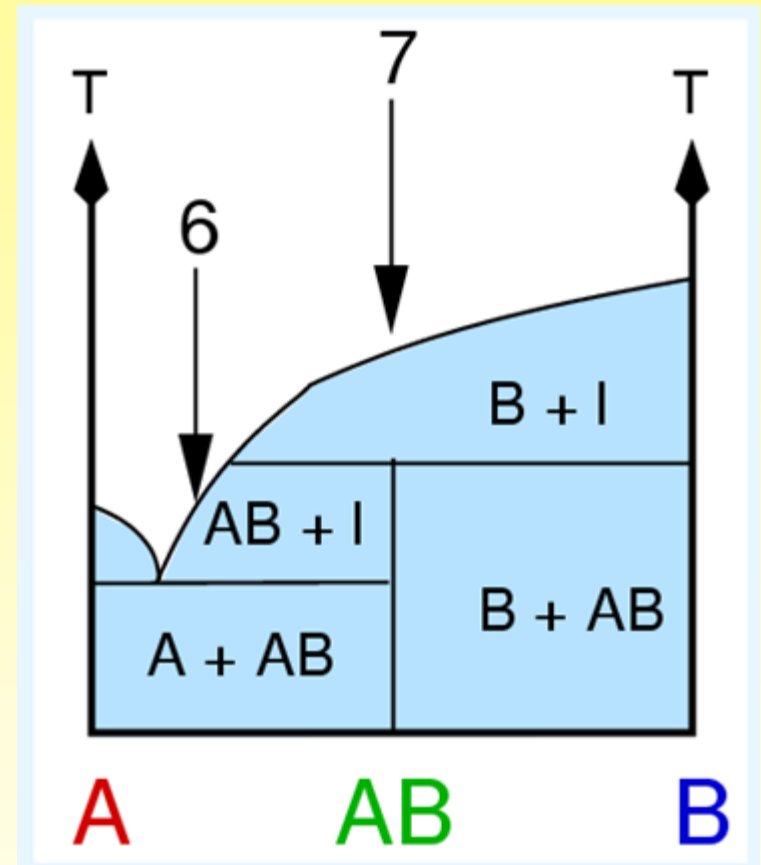
*Ausgangsgestein und Schmelze
haben gleiche modale
Zusammensetzung*

- Nicht modal

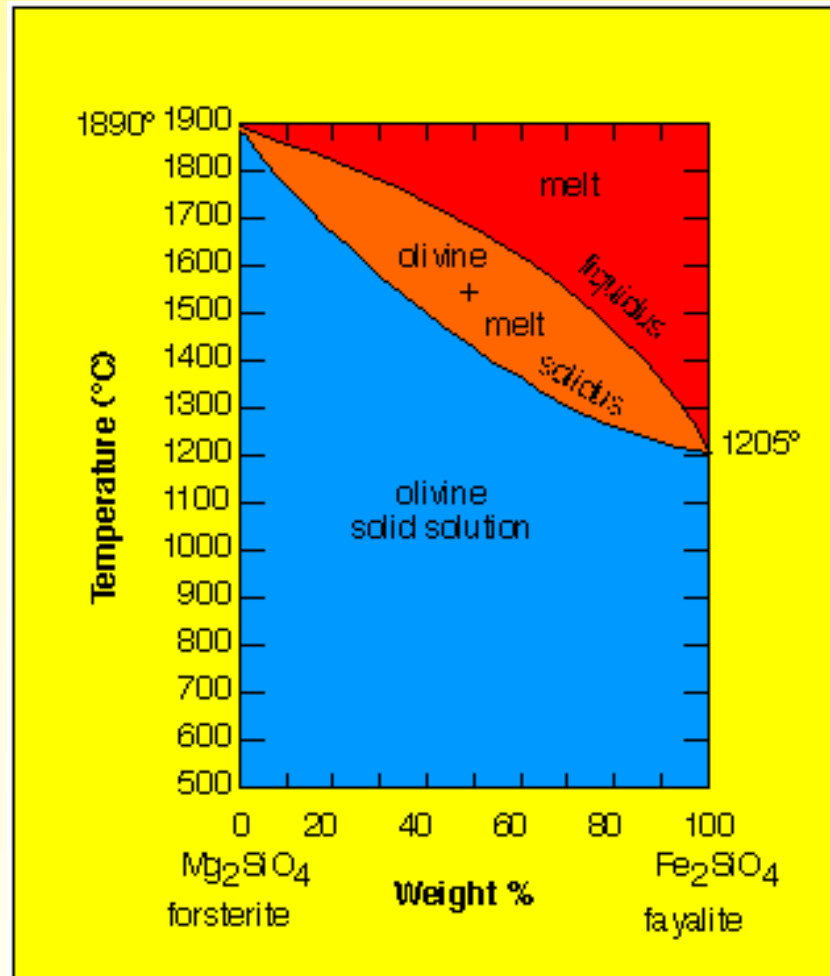
*Ausgangsgestein und Schmelze
haben unterschiedliche modale
Zusammensetzung*

- Inkongruent

*die feste Phase reagiert mit der
Schmelze. Bildung neuer
Mineralphasen*

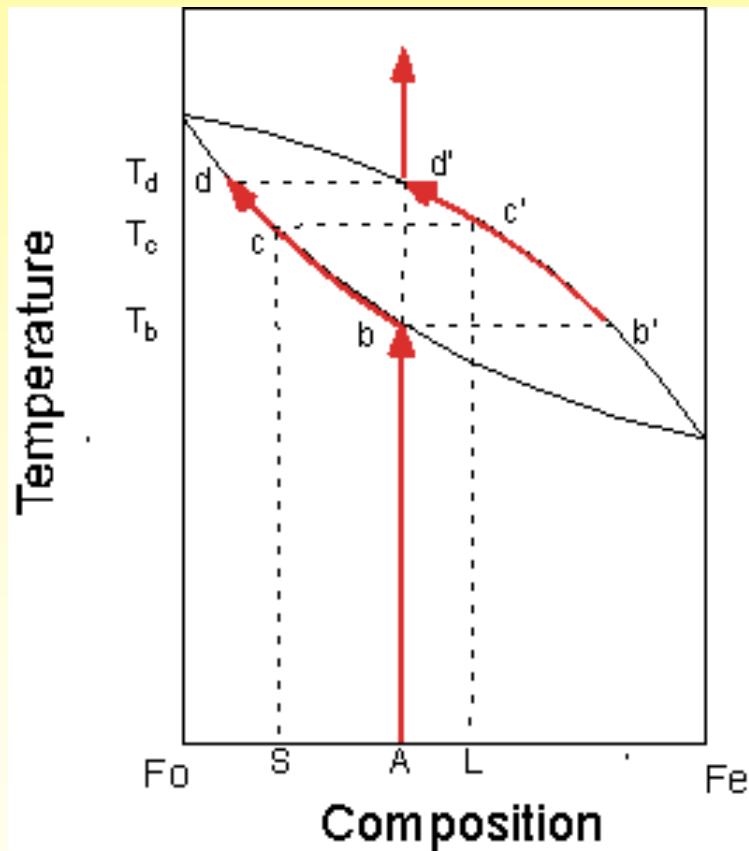


Schmelzbildung

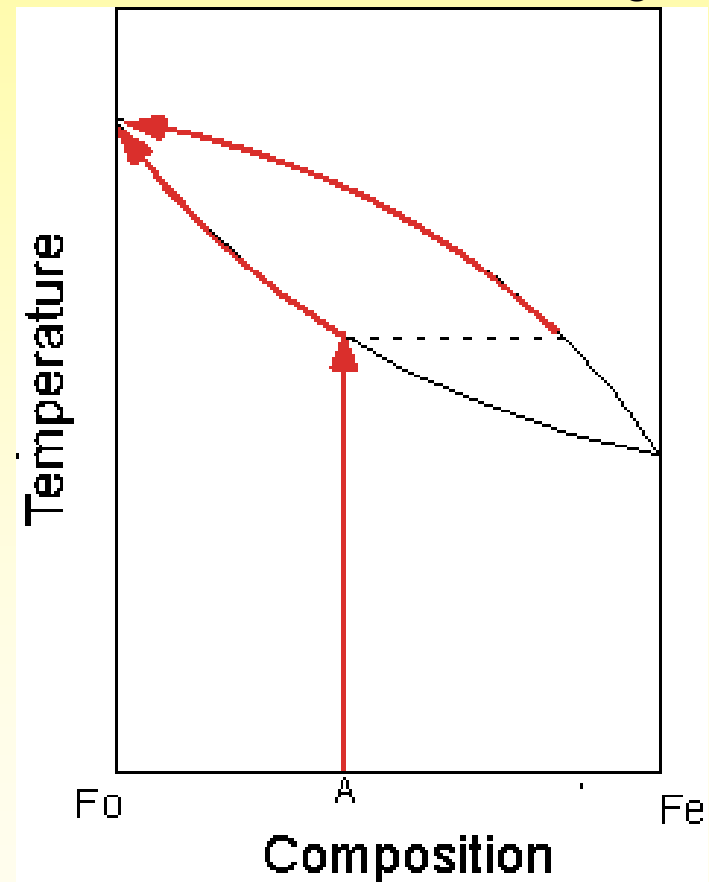


Schmelzbildung

Gleichgewichts-Schmelzbildung



Fraktionierte Aufschmelzung



Spurenelemente in magmatischen Prozessen

Verteilungskoeffizient:

$$Kd = \frac{C_i^{\min}}{C_i^{\text{Schmelze}}}$$

Gesamtverteilungskoeffizient D

$$D_i = x_1 Kd_i^{\min 1} + x_2 Kd_i^{\min 2} + x_3 Kd_i^{\min 3}$$

Massenbilanz:
$$C_i^o = C_i^s (1 - F) + C_i^l F$$

i = Element

C^o = Ursprüngliche Konzentration in den festen Phasen

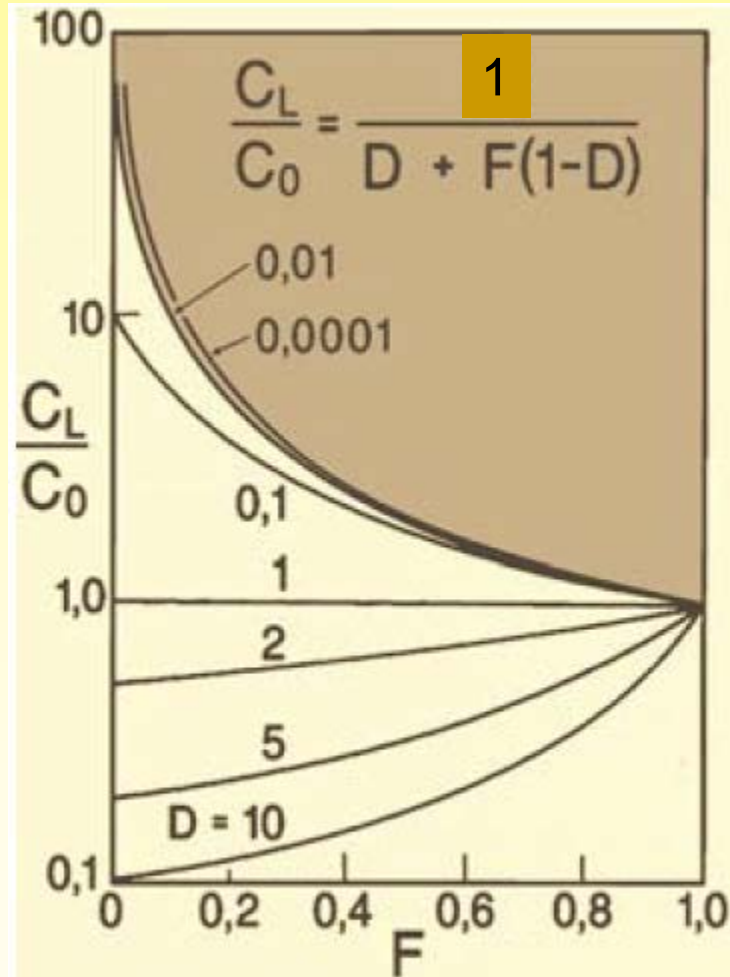
C^l = Konzentration in der Schmelze

C^s = Konzentration in den residualen festen Phasen nach der Aufschmelzung

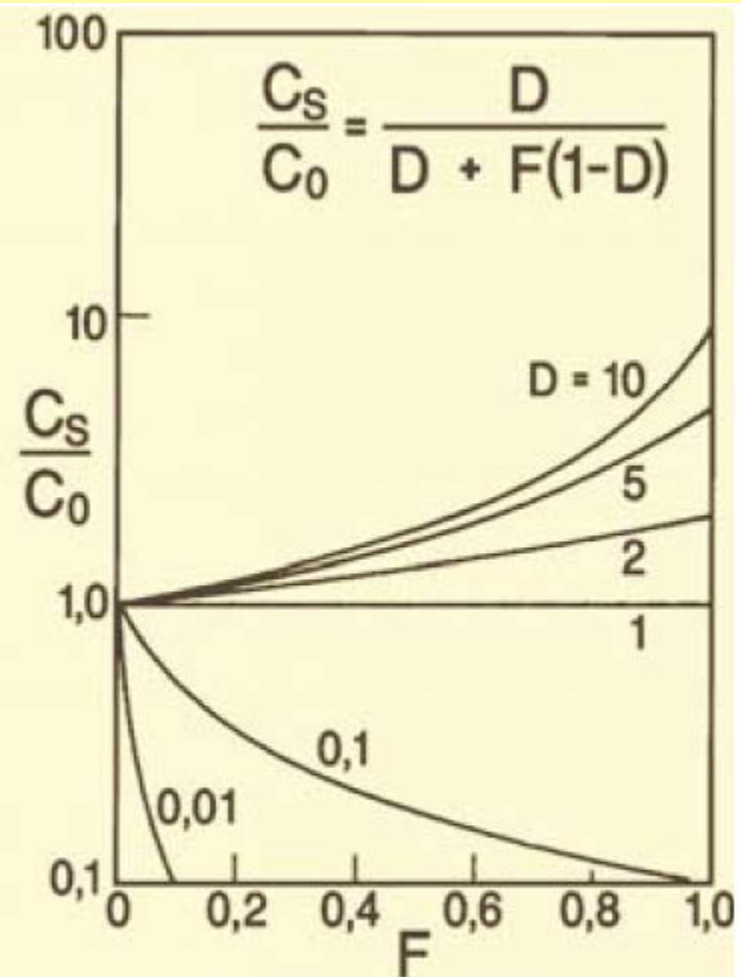
F = Aufschmelzgrad

Gleichgewichtsschmelzbildung

Batch melting bzw. equilibrium melting



a Gleichgewichts-Schmelzen:
Schmelzen



b Gleichgewichts-Schmelzen:
Residuum

Aufgabe: “Batch melting modeling”

Batch Melting is the melting process whereby the liquid remains **in equilibrium** with the residue until the liquid is removed.

$$C_L/C_0 = 1/[D_S + F(1 - D_S)] \quad \text{bzw.} \quad \frac{C_L}{C_0} = \frac{1}{\bar{D}^*(1-F) + F}$$

$$C_S/C_0 = D_S/[D_S + F(1 - D_S)]$$

C_0 = concentration of the element in the **starting material** (in the case of mantle melting, the concentration in the **original mantle**).

C_S = concentration of the element in the **solid** (i.e. residuals)

C_L = concentration of the element in the **liquid** (i.e. melt)

D_S = **bulk partition coefficient** for the residual mantle

F = weight fraction of **melt** produced [= melt/(melt + rock)]

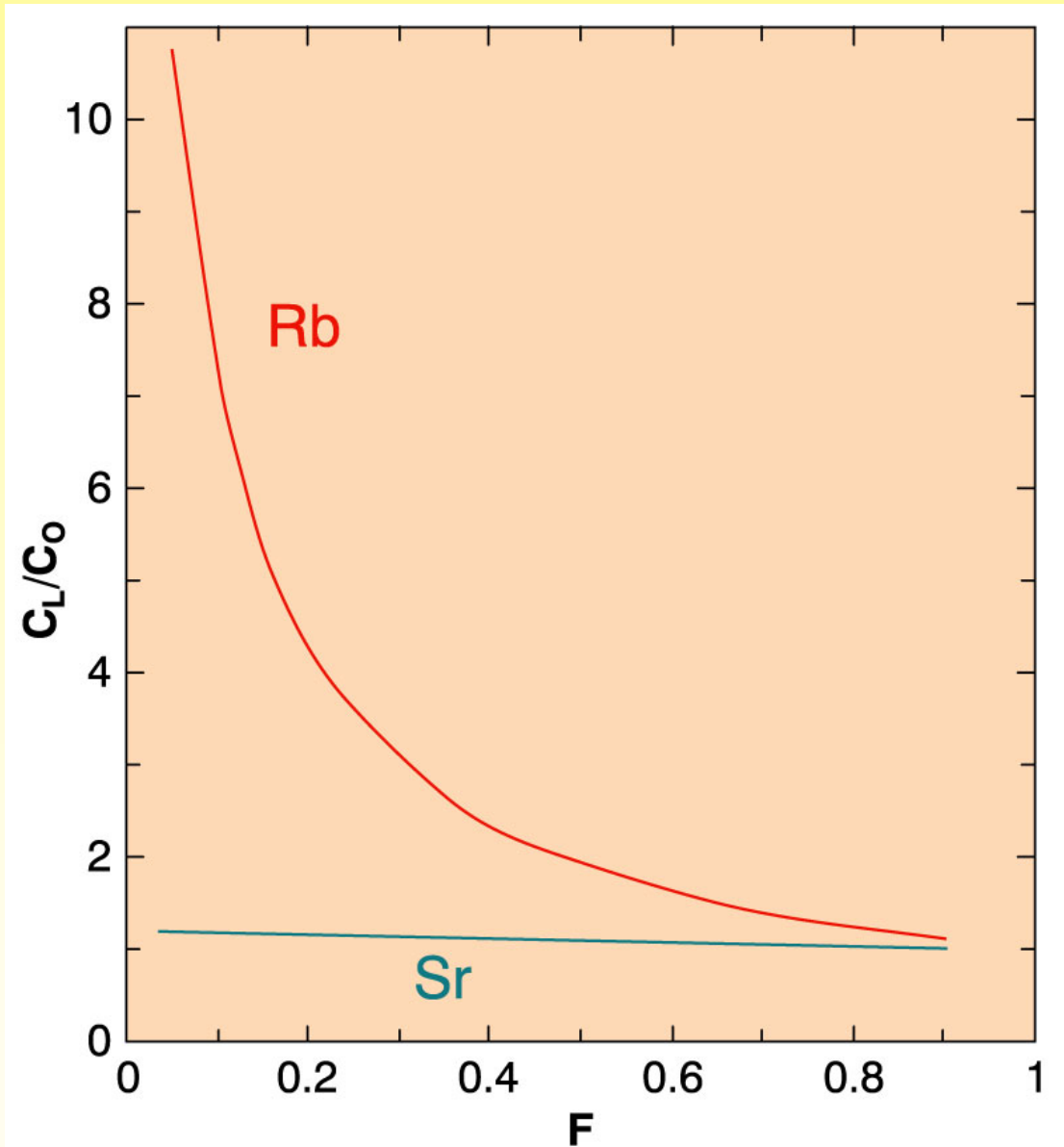
Geochemische Diagramme

Batch melting and the Rb/Sr ratio

F	$C_L/C_0 = 1/(D(1-F)+F)$		Rb/Sr
	D_{Rb} 0.045	D_{Sr} 0.848	
0.05	9.35	1.14	8.19
0.1	6.49	1.13	5.73
0.15	4.98	1.12	4.43
0.2	4.03	1.12	3.61
0.3	2.92	1.10	2.66
0.4	2.29	1.08	2.11
0.5	1.89	1.07	1.76
0.6	1.60	1.05	1.52
0.7	1.39	1.04	1.34
0.8	1.23	1.03	1.20
0.9	1.10	1.01	1.09

Veränderung der Rb und Sr Konzentrationen in der Schmelze mit steigendem Aufschmelzungsgrad. Basaltisches Ausgangsgestein (Plagioklas, Augit, Olivin).

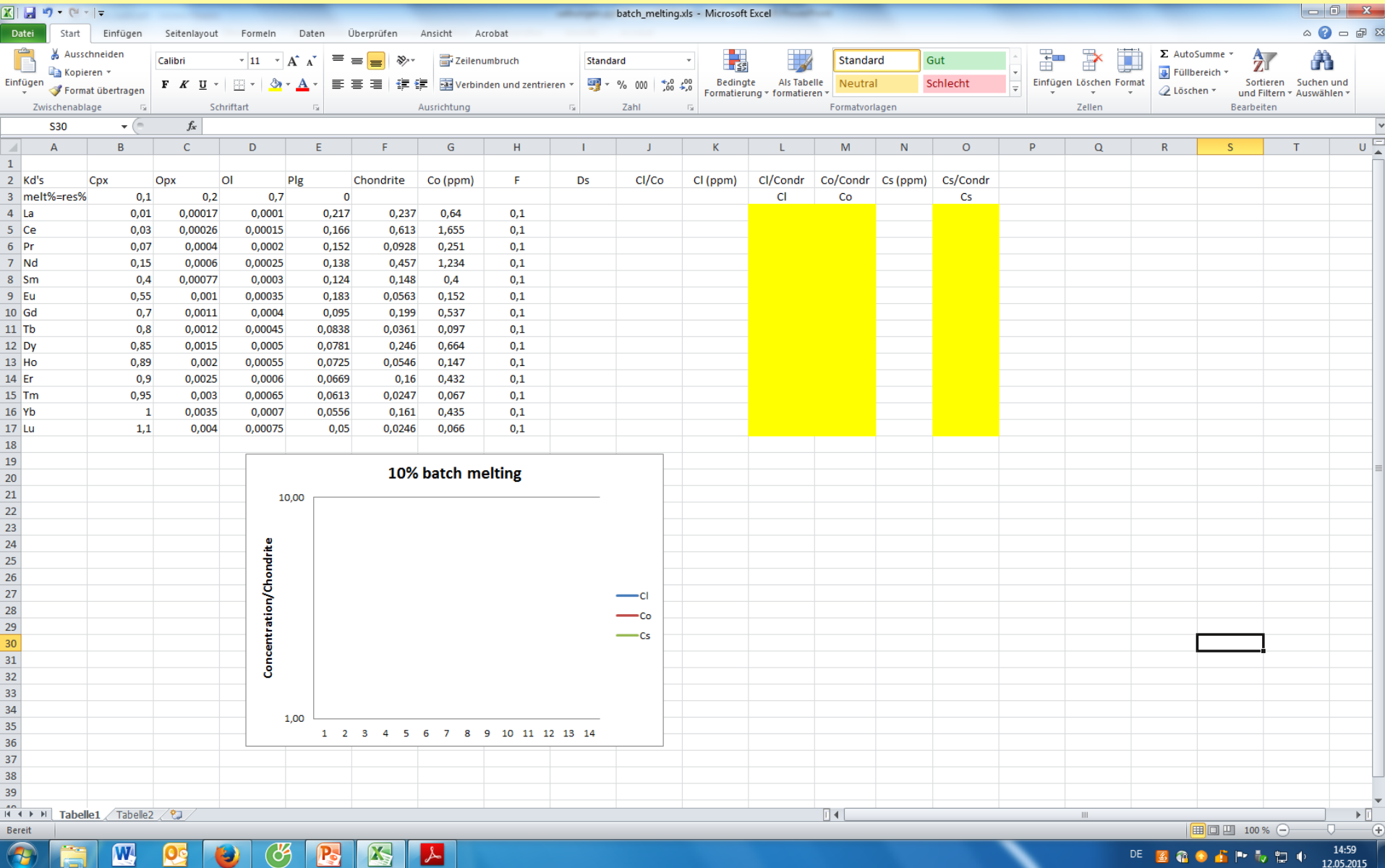
Winter (2001) Introduction to Igneous and Metamorphic Petrology



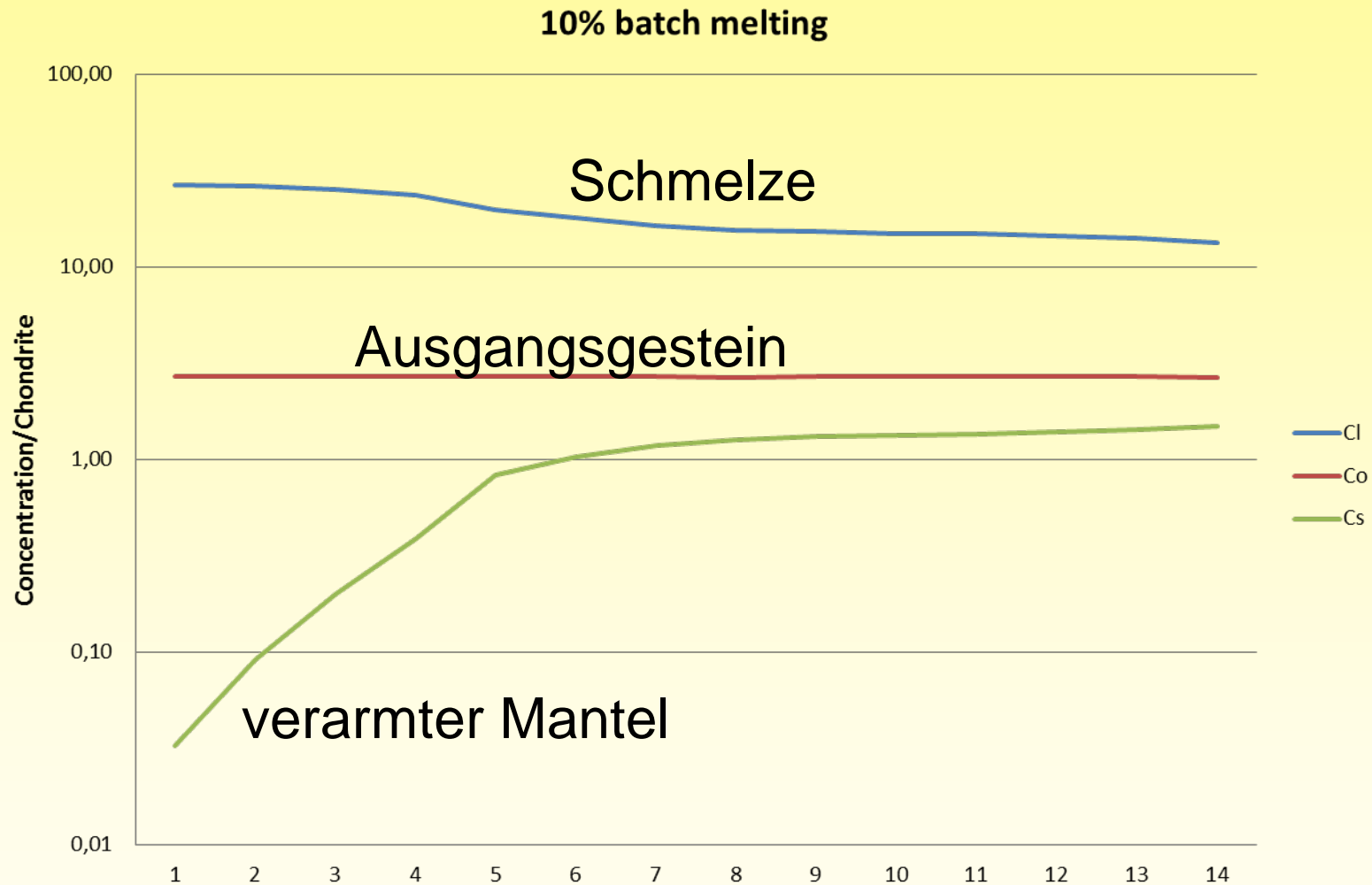
Datensatz “Batch melting modeling”

D-values	Cpx	Opx	OI	Plag	Chondrite	Co
Residue Proportion	10%	20%	70%		ppm	ppm
La	0.01	0.00017	0.0001	0.217	0.237	0.640
Ce	0.03	0.00026	0.00015	0.166	0.613	1.655
Pr	0.07	0.0004	0.0002	0.152	0.0928	0.251
Nd	0.15	0.0006	0.00025	0.138	0.457	1.234
Pm						
Sm	0.4	0.00077	0.0003	0.124	0.148	0.400
Eu	0.55	0.001	0.00035	0.183	0.0563	0.152
Gd	0.7	0.0011	0.0004	0.095	0.199	0.537
Tb	0.8	0.0012	0.00045	0.0838	0.0361	0.097
Dy	0.85	0.0015	0.0005	0.0781	0.246	0.664
Ho	0.89	0.002	0.00055	0.0725	0.0546	0.147
Er	0.9	0.0025	0.0006	0.0669	0.16	0.432
Tm	0.95	0.003	0.00065	0.0613	0.0247	0.067
Yb	1	0.0035	0.0007	0.0556	0.161	0.435
Lu	1.1	0.004	0.00075	0.05	0.0246	0.066

Berechnen Sie C_l , C_o , C_s



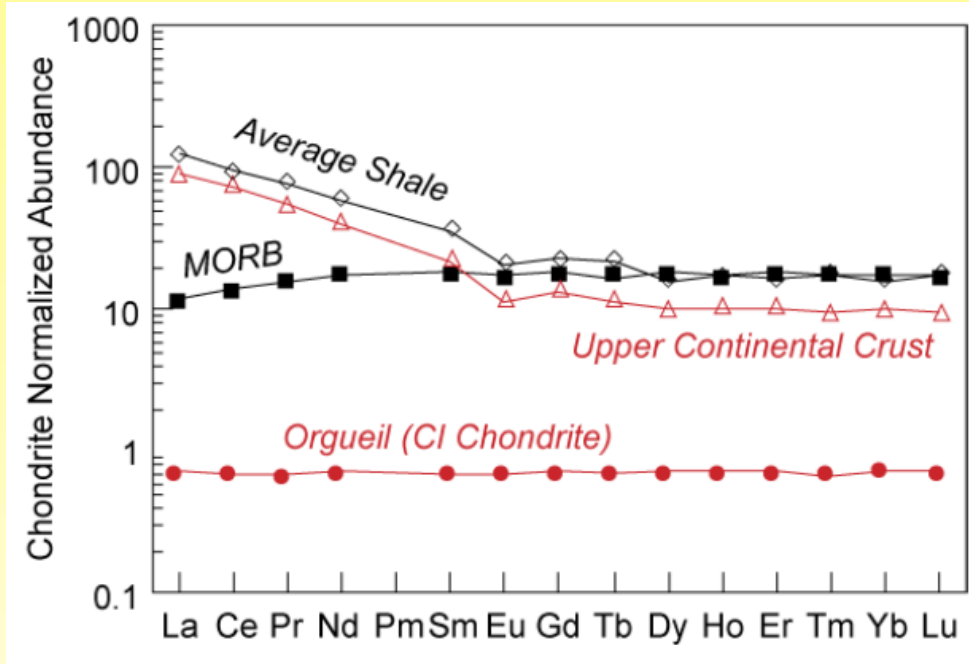
Übung: Schmelzbildung im Erdmantel



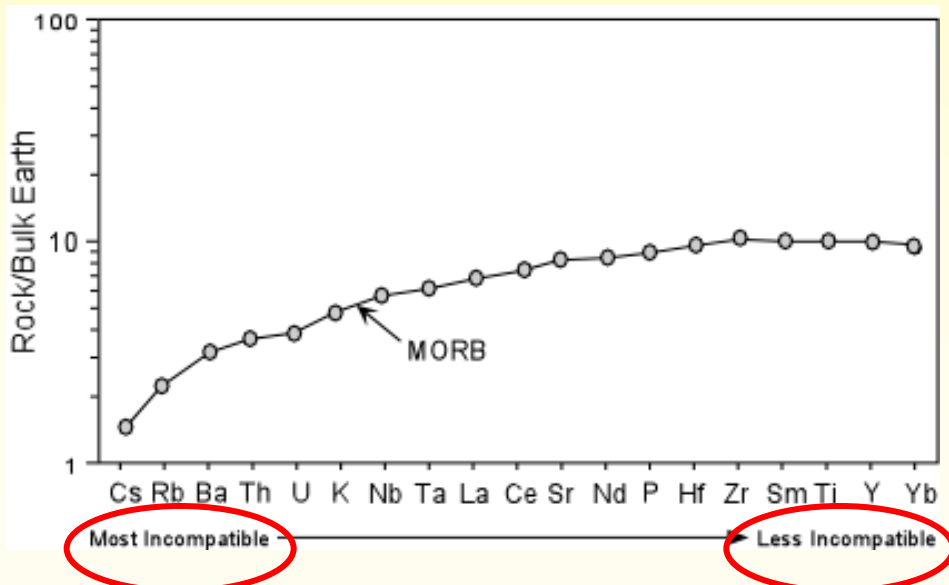
LSSE ----- SSEE

Normierte Diagramme

Selten-Erd-Diagramm



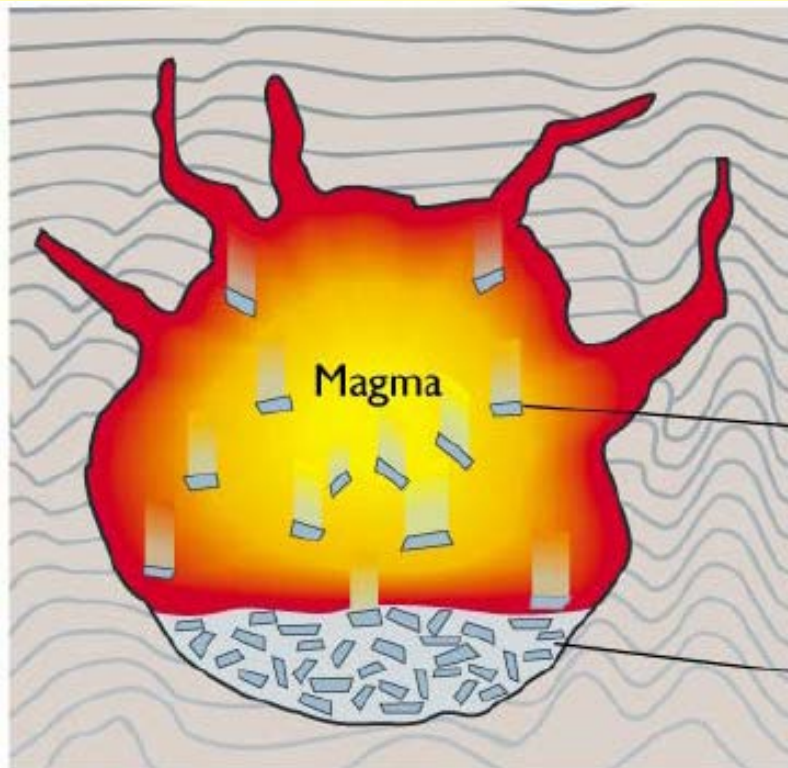
Spider-Diagramm bzw.
Multi-Element Diagramm



Kristallisationsm

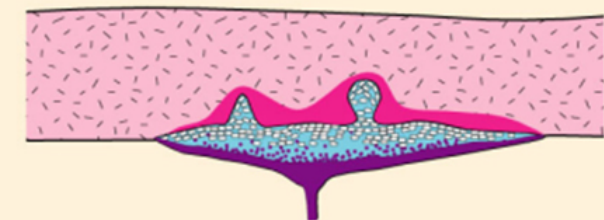
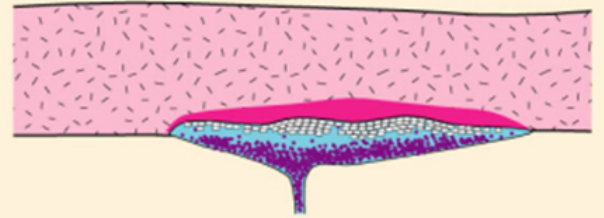
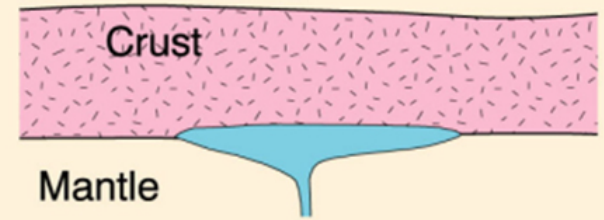
Fraktionierte Kristallisation bzw. R

Trennung zwischen Kristallen und S
durch gravitatives Absinken oder Flo



Crystals form
magma cooling
settle to floor
chamber

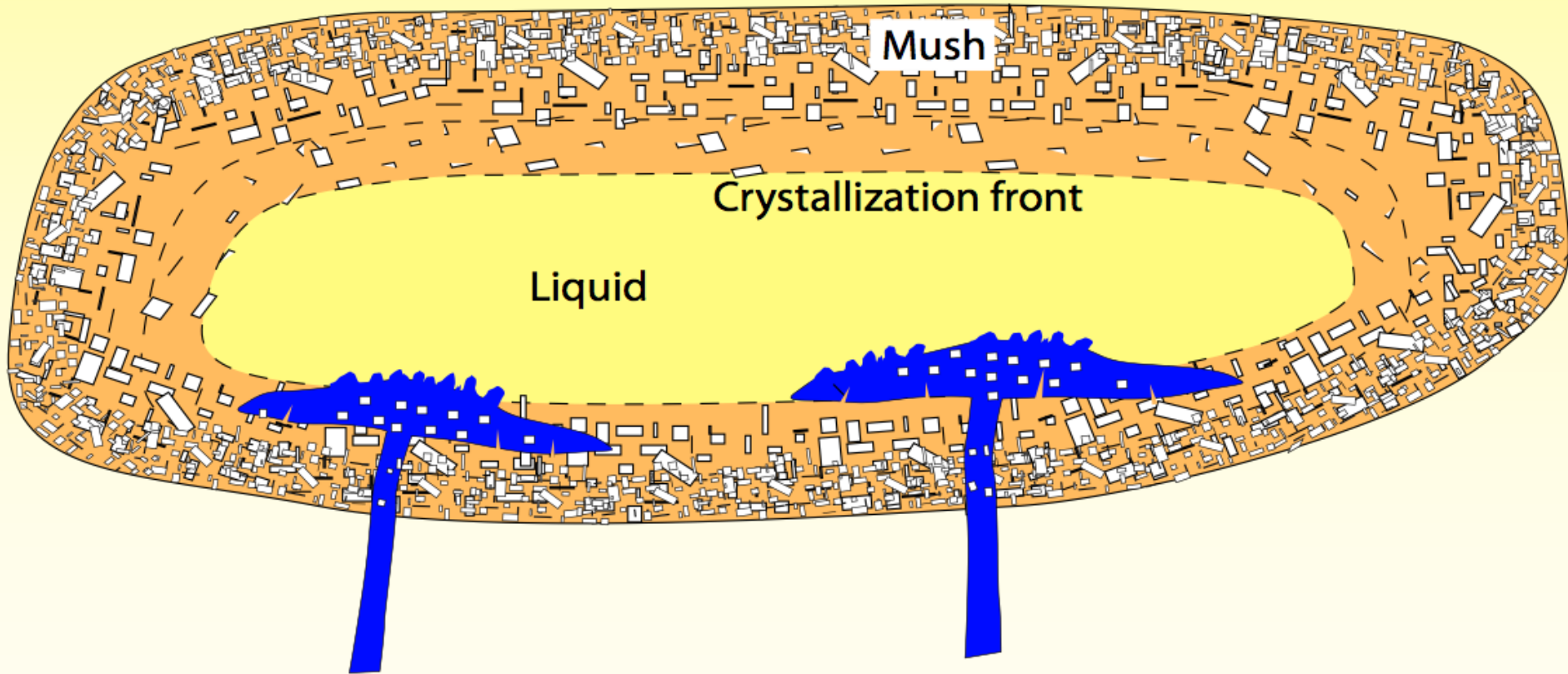
Crystals from
cooling accu



Kristallisationsmodelle

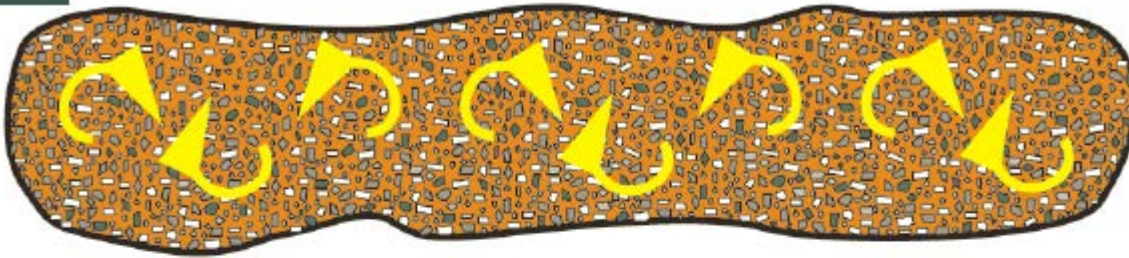
Kristallisation vom Rand zur Mitte (Kristallisationsfront)

Intrusion of mafic bodies into a crystallizing magma chamber or pluton in which a crystallization front was developed



Kristallisationsmodelle

A



(<45 vol% Kristalle
Kristallbrei, Suspension

B



(45-60 vol% Kristalle
Trennung von Kristallen
und Schmelze

C

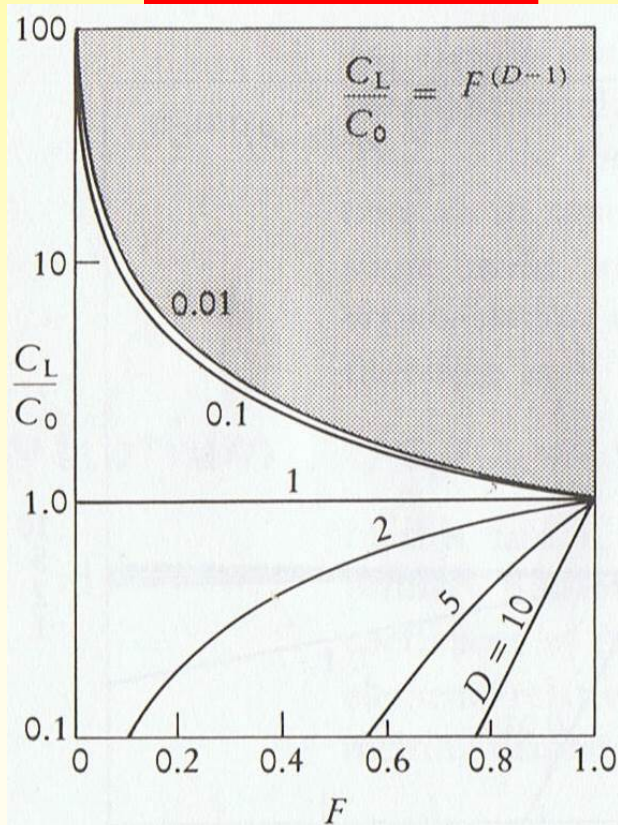


(> 60 vol% Kristalle
hohe Viskosität
geringe Permeabilität

Fraktionierte Kristallisation

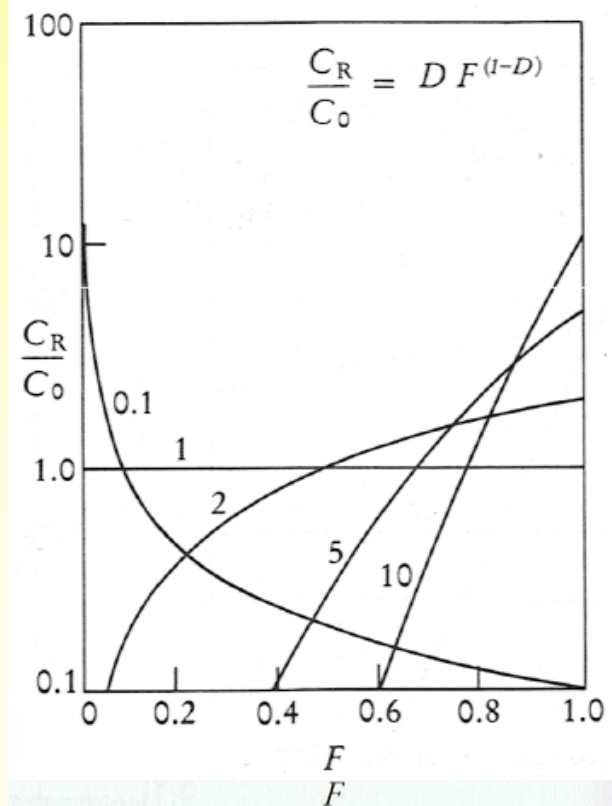
Fractional crystallization bzw. Rayleigh fractionation

$$\frac{C_L}{C_0} = F^{(D-1)}$$



(a) Rayleigh fractionation — liquids

$$\frac{C_R}{C_0} = DF^{(1-D)}$$



(c) Rayleigh fractionation — residue, instantaneous solid

Modelle der Schmelzbildung

- Schmelzbildung von Gesteinen ist oft komplexer als durch die bisherigen Gleichungen beschrieben
 - Verläuft typischerweise inkongruent
 - Minerale \rightarrow Minerale + Schmelze \rightarrow Schmelze
 - z.B. $A \text{ ol} + B \text{ cpx} \rightarrow C \text{ opx} + D \text{ liquid}$

Inkongruentes Schmelzen

(non-modal melting)

- komplexer aber realistischer
- setzt Kenntnisse über Schmelzbildungsreaktionen voraus

feste Phase reagiert mit der Schmelze. Die resultierende Schmelze hat danach einen anderen Chemismus als die feste Ausgangsphase

Modelle der Schmelzbildung

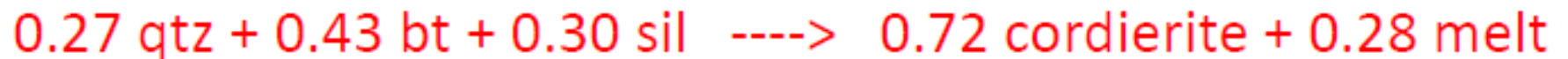
Inkongruentes Schmelzen

Beispiele:

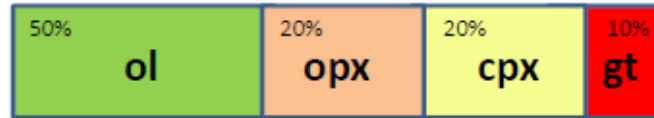
Incongruent melting of a **spinel peridotite** at 10 kbar (1 MPa; Kinzler & Grove, 1992):



Incongruent melting of a **biotite - sillimanite - gneiss** (Zeck, 1970): :

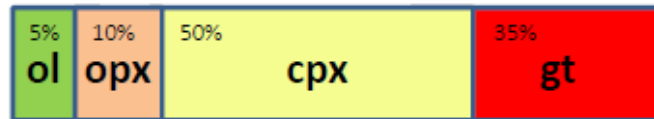


Modelle der Schmelzbildung



χ^{ol} χ^{opx} χ^{cpx} χ^{gt}

Modal composition of the solid
(here: Lherzolite, "Pyrolite")



p^{ol} p^{opx} p^{cpx} p^{gt}

"Modal composition" of the melt
(i.e. eutectic composition,
here: basaltic melt)

$$C_L/C_0 = 1/[D_S + F(1 - P)]$$

D_S = Verteilungskoeffizient zu Beginn der Aufschmelzung

P = Verteilungskoeffizient der Minerale in der Schmelze

Komplexe Magmakammer



Turkish Journal of Earth Sciences

<http://journals.tubitak.gov.tr/earth/>

Research Article

Turkish J Earth Sci
(2013) 22: 304-319

© TÜBİTAK

doi:10.3906/yer-1110-3

AFC-Modeler: a Microsoft® Excel© workbook program for modelling assimilation combined with fractional crystallization (AFC) process in magmatic systems by using equations of DePaolo (1981)

Mehmet KESKİN*

Istanbul University, Faculty of Engineering, Department of Geological Engineering, 34320 Avcılar, İstanbul, Turkey

Received: 12.10.2011 • Accepted: 29.03.2012 • Published Online: 27.02.2013 • Printed: 27.03.2013

Komplexe Magmakammer

Wallrock (assimilant)

Elemental concentration in wallrock

$$C_a$$

Isotope ratio in the wallrock

$$\epsilon_a$$

Bulk solid/liquid partition coefficient of an element between crystallizing phases and magma

$$D$$

The difference between stable isotopic ratios of crystals and magma

$$\Delta$$

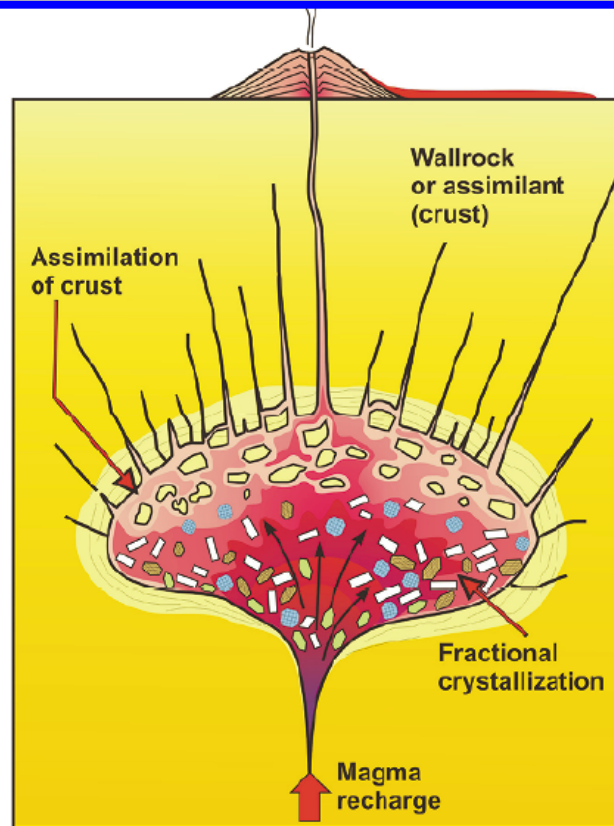
$$\Delta = \delta_{crystals} - \delta_{magma}$$

$$\approx 1000 \ln \alpha$$

Where α is the fractionation factor.

Initial stable isotope ratio in the wallrock (assimilant)

$$\delta_a$$



Magma

Mass of magma

$$M_m$$

Initial mass of magma

$$M_m^0$$

The fraction of magma remaining

$$F = \frac{M_m}{M_m^0}$$

Elemental concentration in magma

$$C_m$$

Initial elemental concentration in magma

$$C_m^0$$

Elemental concentration in crystallizing phases

$$DC_m$$

Isotope ratio in magma

$$\epsilon_m$$

Initial isotope ratio in magma

$$\epsilon_m^0$$

Stable isotopic ratio in magma

$$\delta_m$$

Initial stable isotope ratio in magma

$$\delta_m^0$$

Mass assimilation rate (mass/unit time):

$$\dot{M}_a$$

Fractional crystallization rate:

$$\dot{M}_c$$

Ratio of mass assimilation rate to fractional crystallization rate:

$$r = \frac{\dot{M}_a}{\dot{M}_c}$$

$$z = \frac{r + D - 1}{r - 1}$$

Minerals



Olivine



Plagioclase

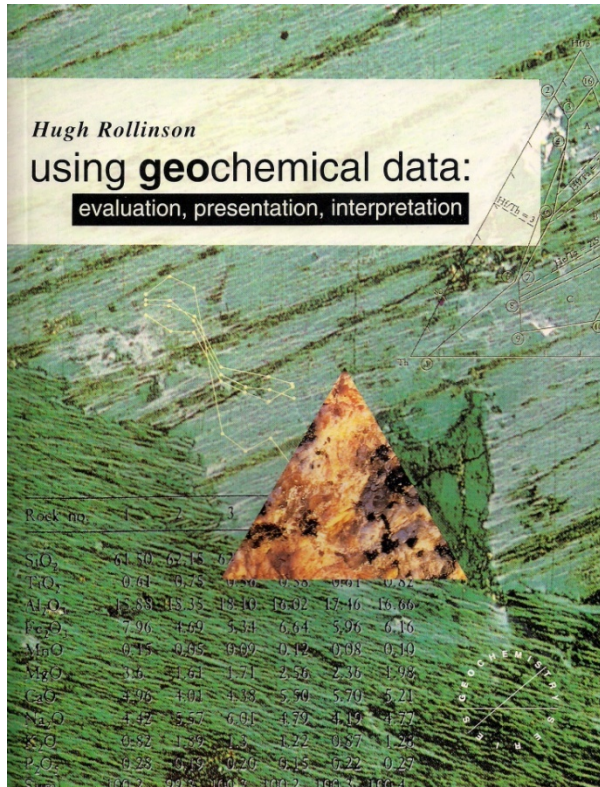


Pyroxene



Amphibole

TECTONIC PROVINCE DISCRIMINATION DIAGRAMS



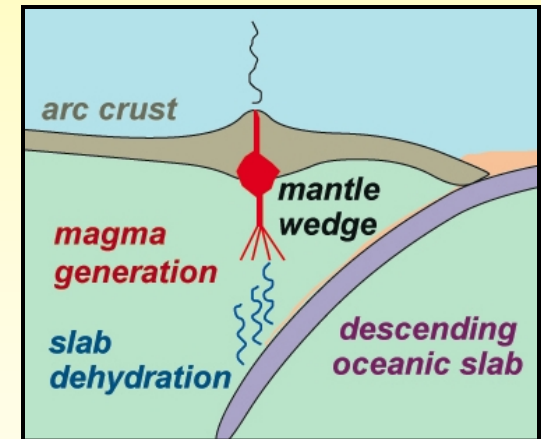
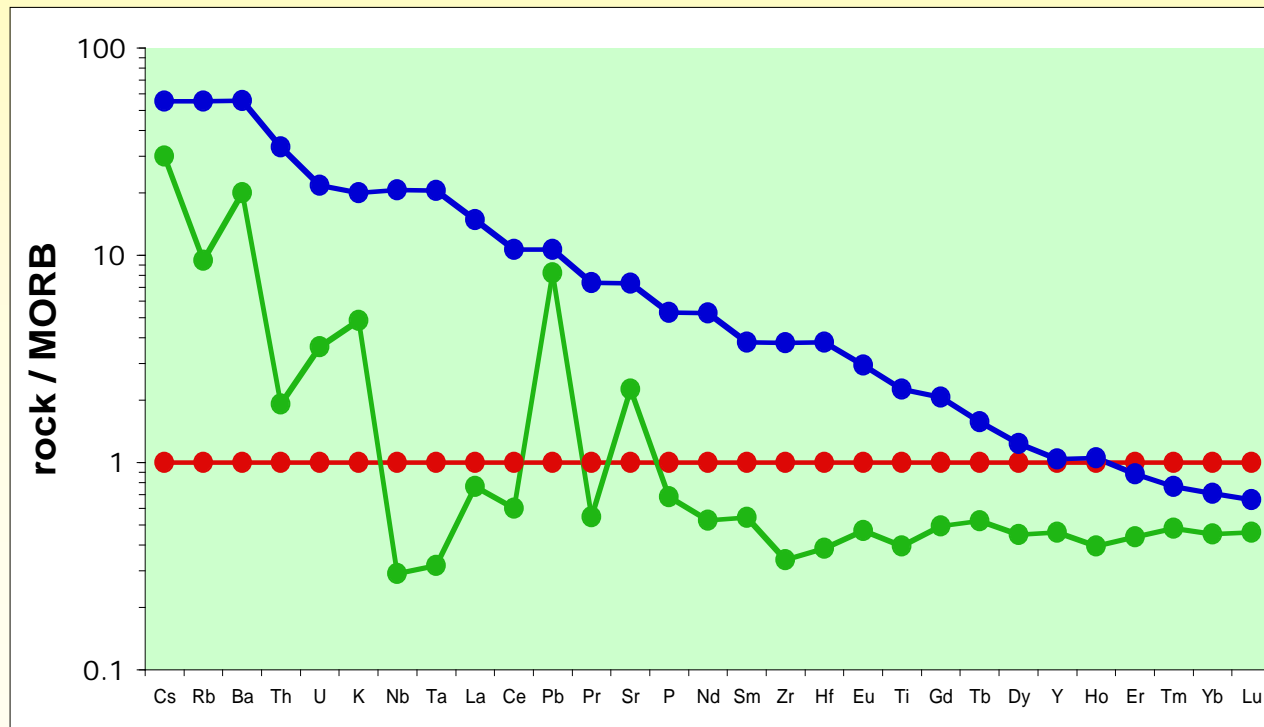
Rollinson (1993)

MORB	Figure	Within-plate basalts	Figure
Ti-Zr	5.2(a,b)	<i>Ocean-island tholeiites</i>	
Ti-Zr-Sr	5.3	Ti-V	5.10
Zr/Y-Zr	5.5	FeO-MgO-Al ₂ O ₃	5.20
Ti-V	5.10	MnO-TiO ₂ -P ₂ O ₅	5.22
Cr-Y	5.12	K ₂ O-H ₂ O	5.23
Cr-Ce/Sr	5.12	<i>Ocean-island alkali basalts</i>	
TiO ₂ -Y/Nb	5.15	MnO-TiO ₂ -P ₂ O ₅	5.22
FeO-MgO-Al ₂ O ₃	5.20	<i>Continental tholeiites</i>	
MnO-TiO ₂ -P ₂ O ₅	5.23	Ti-V	5.10
Discr. function (Ti-Zr-Y-Sr)	5.4	La-Y-Nb	5.11
Discr. function (majors)	5.19	TiO ₂ -Y/Nb	5.15
<i>N-type MORB</i>		FeO-MgO-Al ₂ O ₃	5.20
Zr-Nb-Y	5.8	K ₂ O-TiO ₂ -P ₂ O ₅	5.21
Th-Hf-Ta	5.9	<i>Continental alkali basalts</i>	
La-Y-Nb	5.11	La-Y-Nb	5.11
<i>E-type MORB</i>		<i>Volcanic-arc basalts</i>	
Zr-Nb-Y	5.8		
Th-Hf-Ta	5.9	Ti-Zr	5.2(b)
La-Y-Nb	5.11	Zr/Y-Zr	5.5(a)
FeO-MgO-Al ₂ O ₃	5.20	Cr-Y	5.12(a)
<i>Transitional MORB</i>		Cr-Ce/Sr	5.12(b)
K ₂ O/Yb-Ta/Yb	5.13	FeO-MgO-Al ₂ O ₃	5.20
<i>Back-arc basin tholeiites</i>		K ₂ O-H ₂ O	5.23
		<i>Island-arc tholeiites</i>	
Ti-V	5.10	Ti-Zr-Y	5.1
La-Y-Nb	5.11	Ti-Zr	5.2
K ₂ O-H ₂ O	5.23	Ti-Zr-Sr	5.3
<i>Within-plate basalts</i>		Discr. function (Ti-Zr-Y-Sr)	5.4
		Th-Hf-Ta	5.9
Ti-Zr-Y	5.1	Ti-V	5.10
Ti-Zr	5.2(b)	La-Y-Nb	5.11
Discr. function	5.4	K ₂ O/Yb-Ta/Yb	5.13
Zr/Y-Zr	5.5(a)	Discr. function (majors)	5.19
Zr/Y-Ti/Y	5.6	MnO-TiO ₂ -P ₂ O ₅	5.22
Cr-Y	5.12(a)	<i>Continental-arc</i>	
Cr-Ce/Sr	5.12	Zr/Y-Zr	5.5(b)
Discr. function (majors)	5.19	<i>Oceanic-arc</i>	
<i>Alkali</i>		Zr/Y-Zr	5.5(b)
Zr/Y-Nb/Y	5.7	<i>Calc-alkaline basalts</i>	
Zr-Nb-Y	5.8	Ti-Zr-Y	5.1
Th-Hf-Ta	5.9	Ti-Zr	5.2(a)
Ti-V	5.10	Ti-Zr-Sr	5.3
K ₂ O/Yb-Ta/Yb	5.13	Discr. function	5.4
TiO ₂ -Y/Nb	5.15	Th-Hf-Ta	5.9
<i>Tholeiitic</i>		La-Y-Nb	5.11
Ti/Y-Nb/Y	5.7	K ₂ O/Yb-Ta/Yb	5.13
Zr-Nb-Y	5.8	Discr. function (majors)	5.19
K ₂ O/Yb-Ta/Yb	5.13	MnO-TiO ₂ -P ₂ O ₅	5.22
<i>Transitional</i>		<i>Shoshonitic basalts</i>	
Ti/Y-Nb/Y	5.7	K ₂ O/Yb-Ta/Yb	5.13
K ₂ O/Yb-Ta/Yb	5.13	Discr. function (majors)	5.19

Elementverteilungsmuster

Ozeaninselbasalte: verglichen mit **MORB** Quelle angereichert an inkompatiblen Elementen

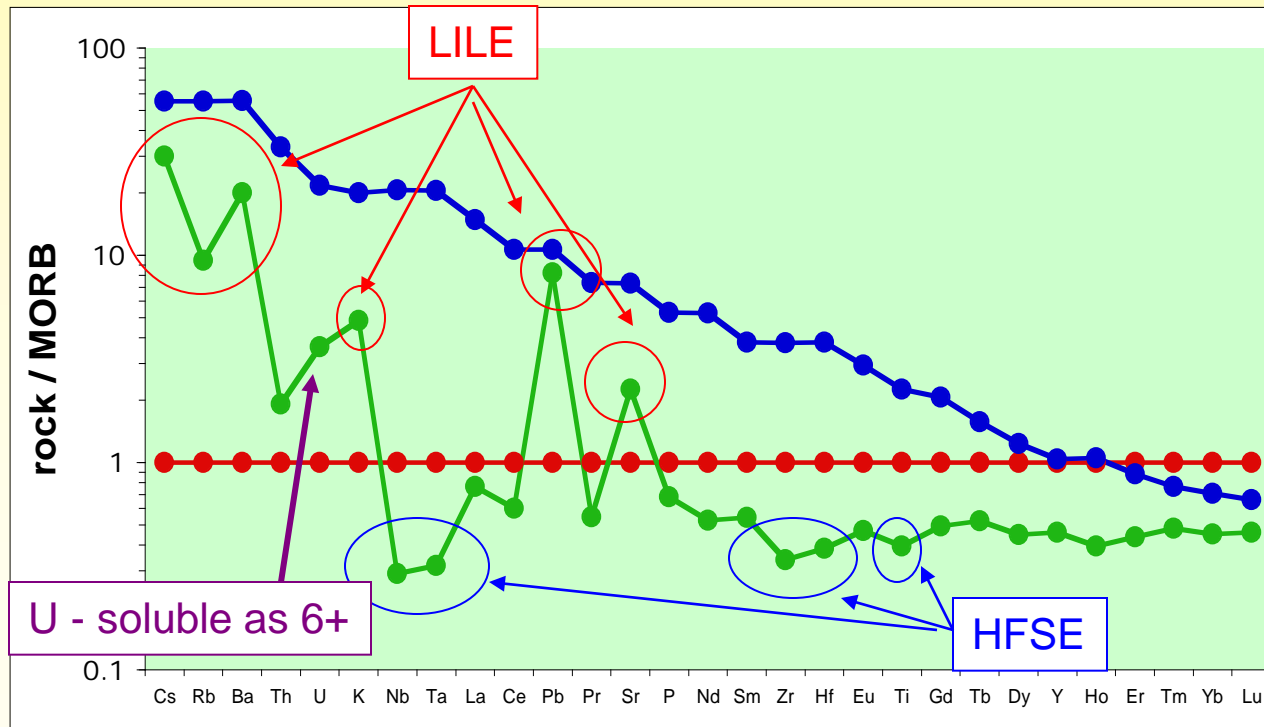
Laven aus Subduktionszonen: Zufuhr fluid-löslicher Elemente in den Mantelkeil während der Slab-Entwässerung (LIL, Pb, Sr)



Elementverteilungsmuster

Ozeaninselbasalte: verglichen mit **MORB** Quelle angereichert an inkompatiblen Elementen

Laven aus Subduktionszonen: Zufuhr fluid-löslicher Elemente in den Mantelkeil während der Slab-Entwässerung (LIL, Pb, Sr)



Geochemische Diagramme

Diagrammtypen:

- Bivariate Verteilungen (X-Y)
- Dreiecksdarstellungen
- Normierte Darstellungen (Spider-Diagramme)

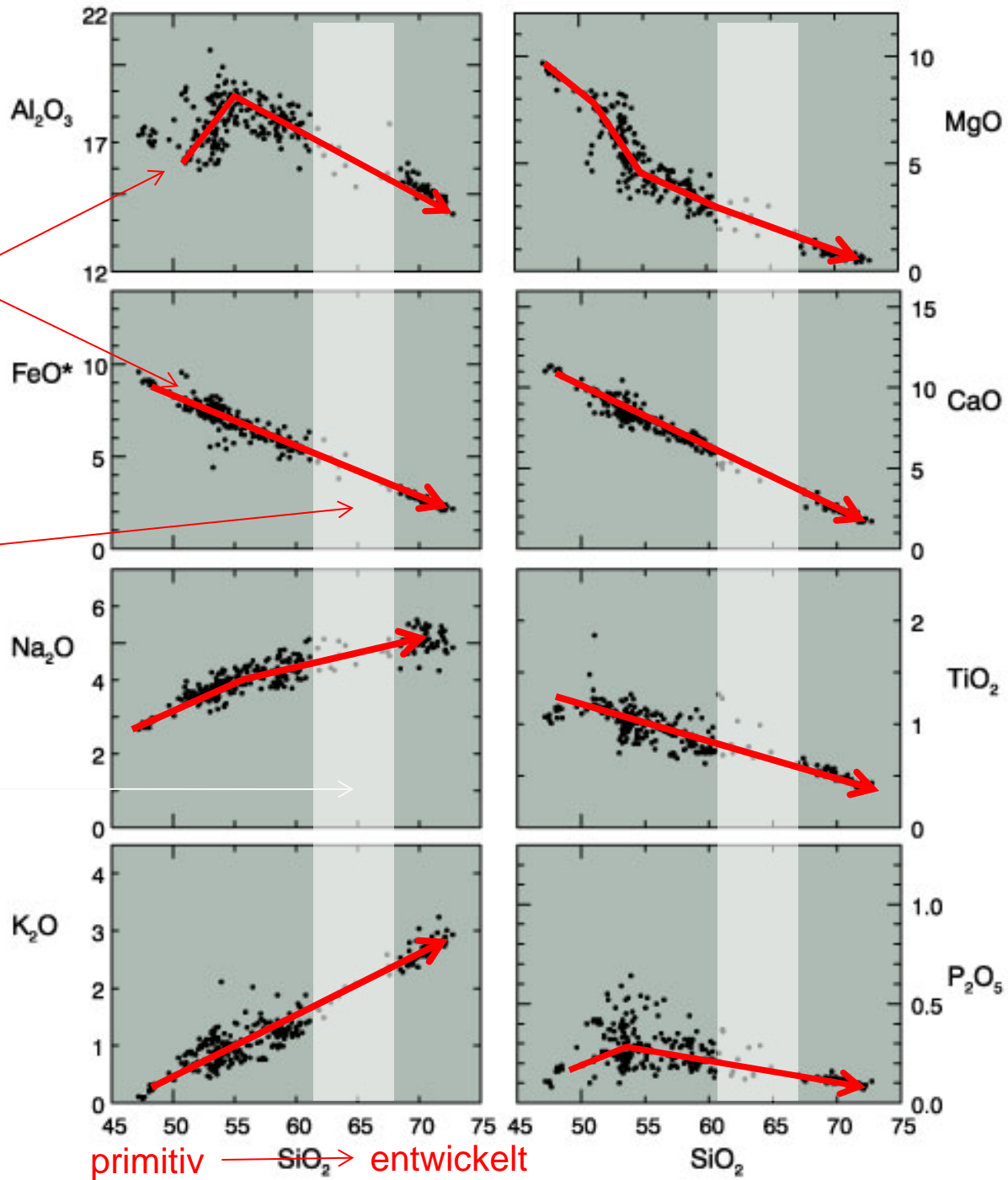
Ziel: Darstellung der Haupt- und Spurenelementvariationen, die Hinweise auf magmatische Prozesse geben können

- Fraktionierte Kristallisation
- Magmenmischung
- Nebengesteinsassimilation/kontamination
- Partielles Aufschmelzen

Harker Variationsdiagramme

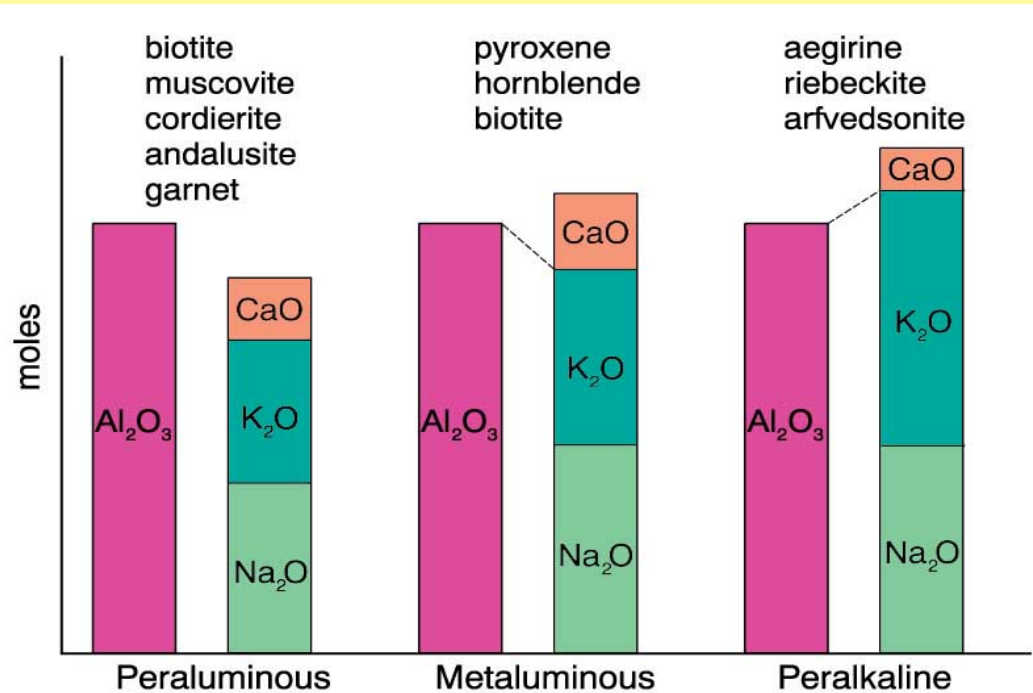
Liquid lines of descent
("Flüssigkeitsabstammungslinie")

"Daly" gap

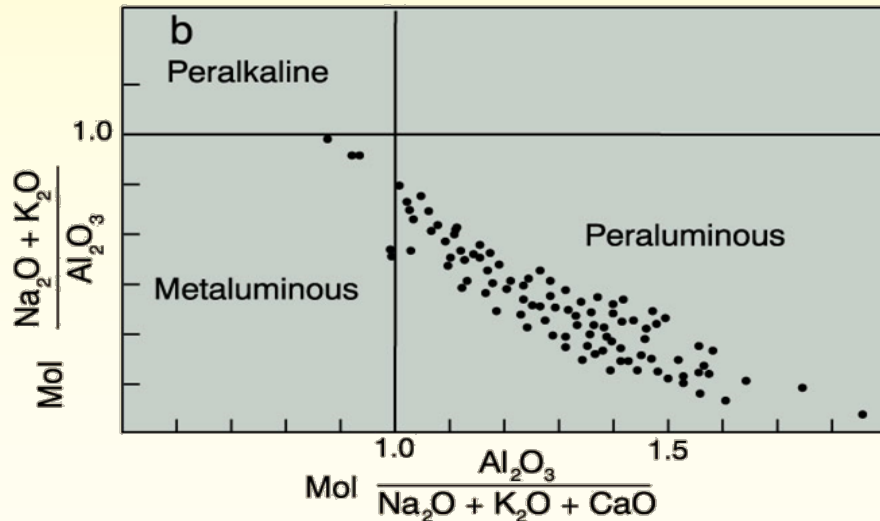
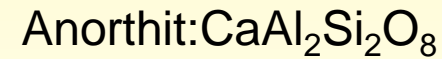
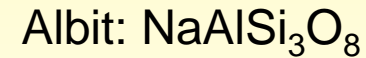
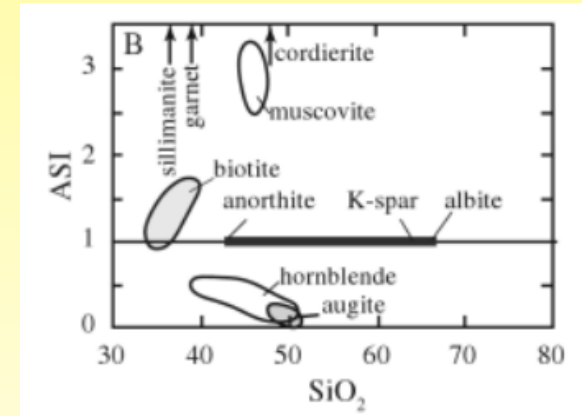


Winter (2001) Harker variation diagram for 310 analyzed volcanic rocks from Crater Lake (Mt. Mazama), Oregon Cascades.

Aluminium-Sättigungsindex, ASI



Winter (2001) Alumina saturation classes based on the molar proportions of $\text{Al}_2\text{O}_3/(\text{CaO}+\text{Na}_2\text{O}+\text{K}_2\text{O})$ ("A/CNK") after Shand (1927). Common non-quartzofeldspathic minerals for each type are included. After Clarke (1992). Granitoid Rocks. Chapman Hall.



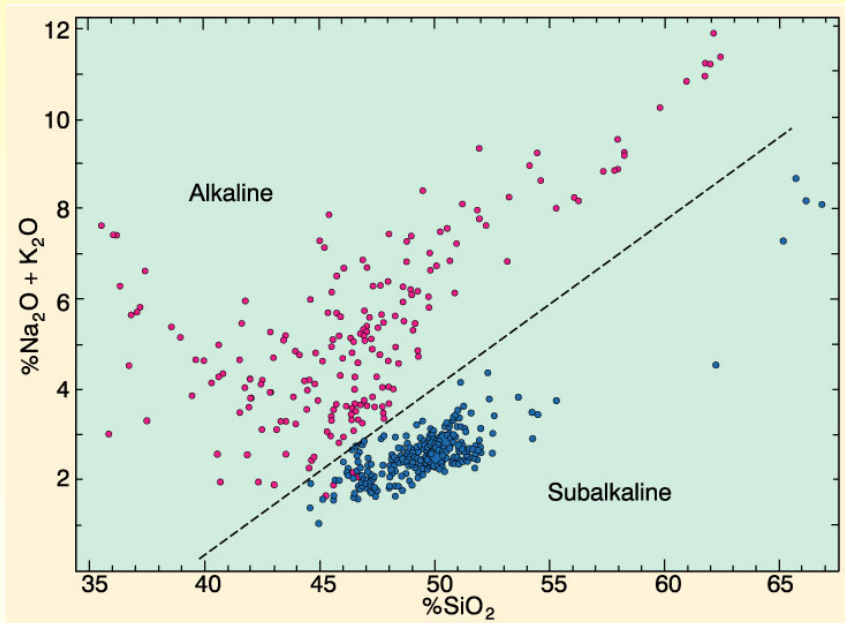
Winter (2001) Alumina saturation indices (Shand, 1927) with analyses of the peraluminous granitic rocks from the Achala Batholith, Argentina (Lira and Kirschbaum, 1990). In S. M. Kay and C. W. Rapela (eds.), Plutonism from Antarctica to Alaska. Geol. Soc. Amer. Special Paper, 241. pp. 67-76.

Identifikation von Magmenserien

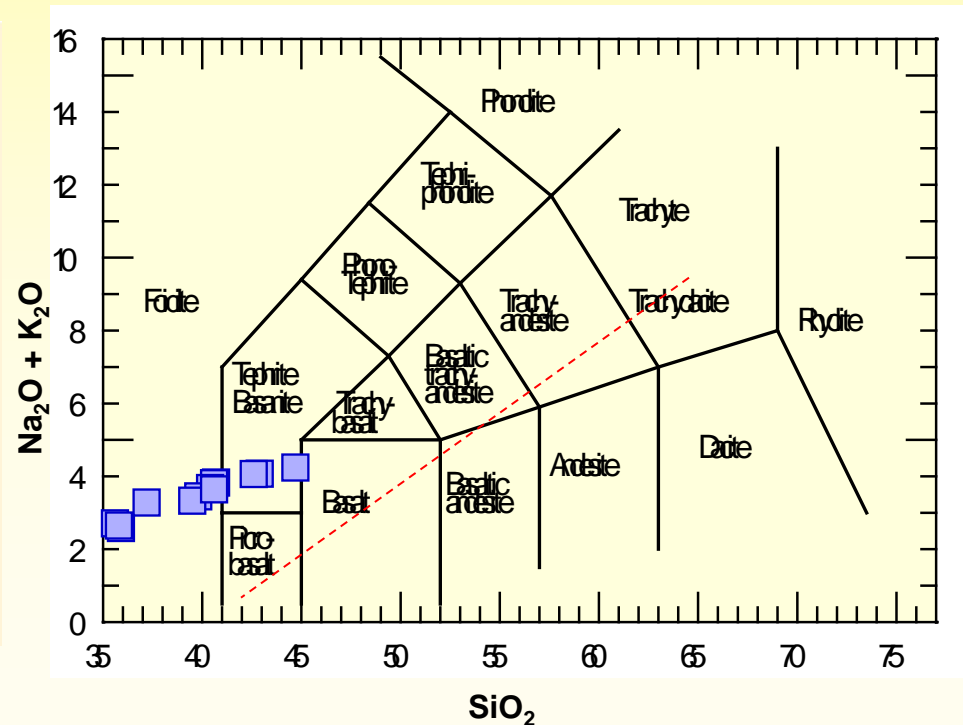
Characteristic Series	Plate Margin		Within Plate	
	Convergent	Divergent	Oceanic	Continental
Alkaline	yes		yes	yes
Tholeiitic	yes	yes	yes	yes
Calc-alkaline	yes			

Sub-alkalin

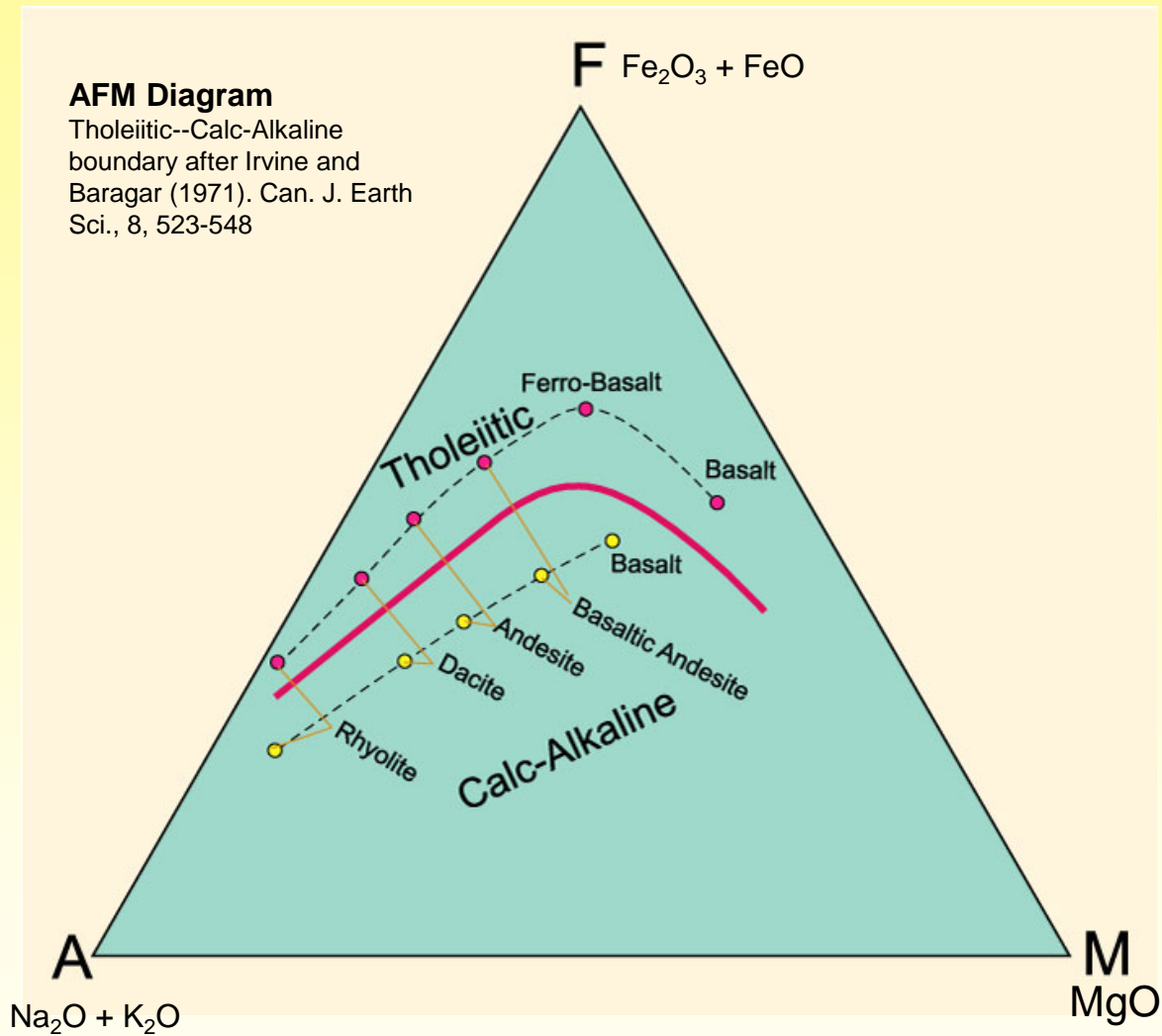
TAS-Diagramm



Winter (2001) Figure 8.11



Diskriminierungsdiagramme



Tektonische Diskriminierungsdiagramme

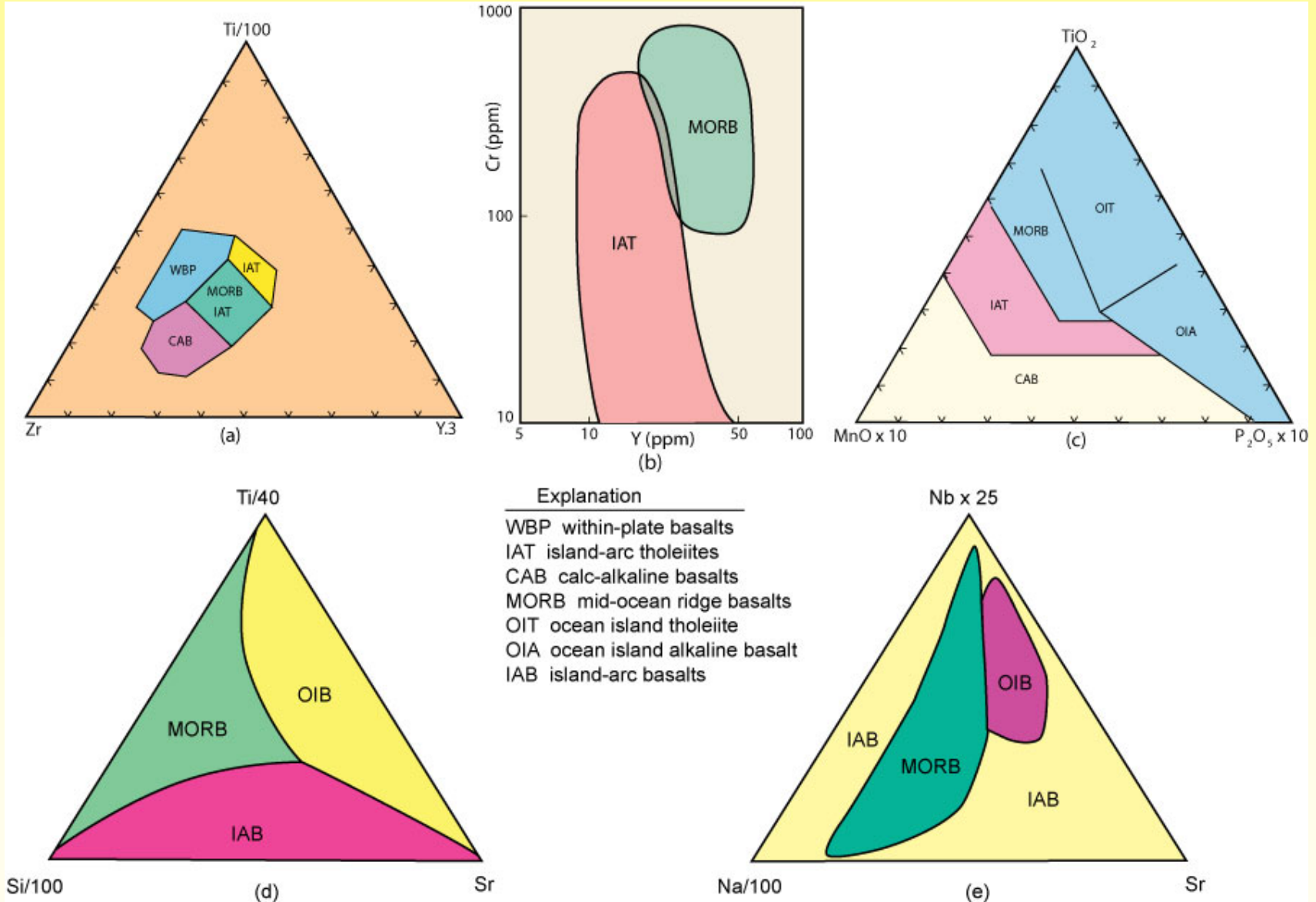


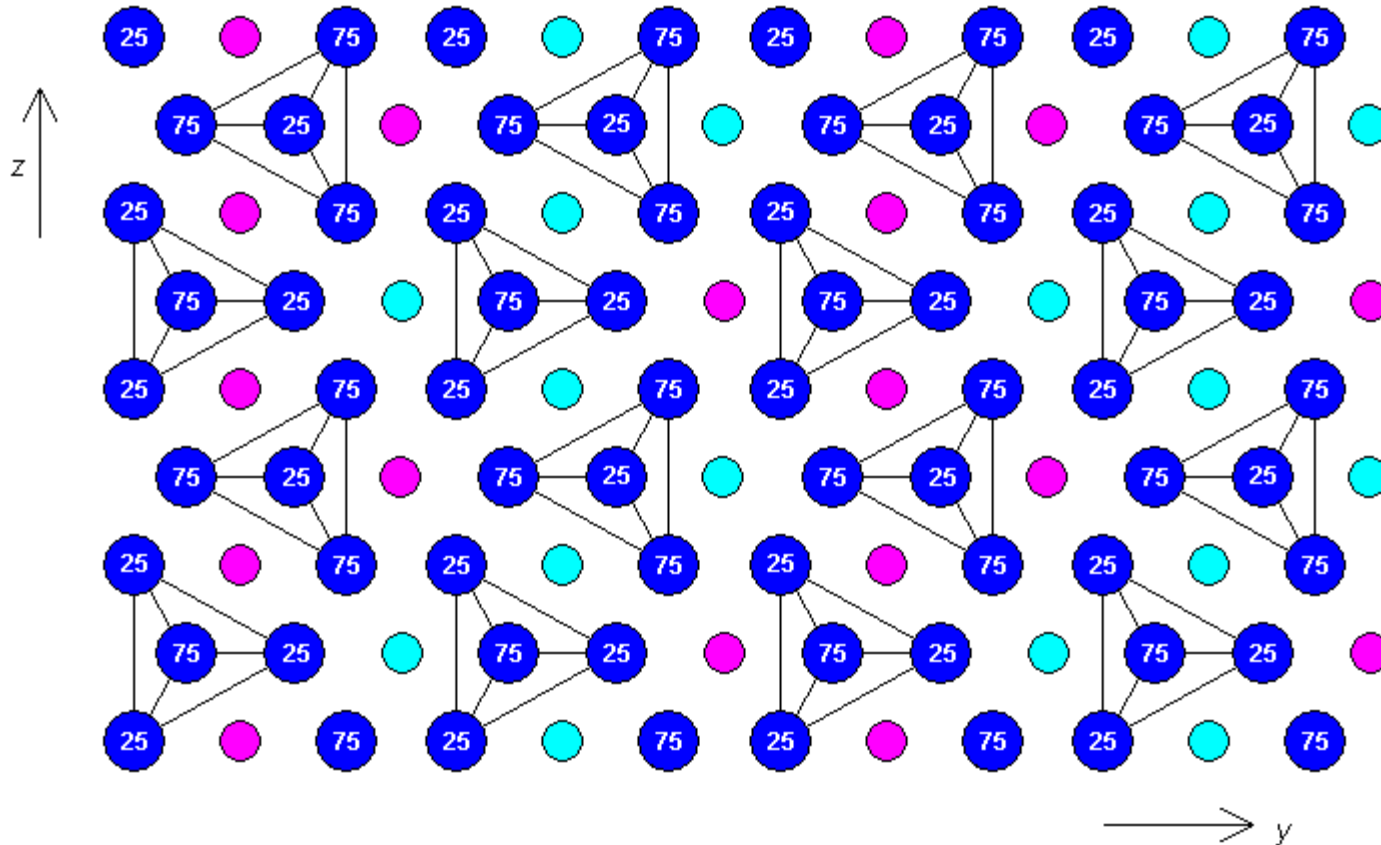
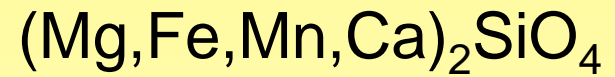
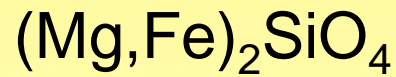
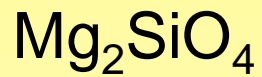
Figure 9.8 Examples of discrimination diagrams used to infer tectonic setting of ancient (meta)volcanics. **(a)** after Pearce and Cann (1973), **(b)** after Pearce (1982), Coish et al. (1986). Reprinted by permission of the American Journal of Science, **(c)** after Mullen (1983) Copyright © with permission from Elsevier Science, (d) and (e) after Vermeesch (2005) © AGU with permission.

Übung 11: Mineralformelberechnung

Tabelle 8.2 Koordination in Silikaten.

Kation	Radienquotient $r_{\text{Kation}} : r_{\text{Anion}}$	Vorhergesagte Koordination	Vorkommen in Mineralen					
Si ⁴⁺	0.26	4-facher (tetraedischer) Z-Platz						
Al ³⁺	0.36						FELD-	
Ti ⁴⁺	0.46							
Fe ³⁺	0.55	6-facher (oktaedrischer) Platz		GRANAT	PYROXEN	AMPHIBOL	GILIMMER	—
Mn ²⁺	0.56							
Mg ²⁺	0.61			OLIVIN				
Fe ²⁺	0.65							
Ca ²⁺	0.91	8-facher Platz						
Na ⁺	0.94						-SPAT	
K ⁺	1.27	≥ 12-facher Platz						

Mineralformelberechnung Olivin



● M^{2+} at $x=0$

● O^{2-} at $x=25, 75$

● M^{2+} at $x=50$

Silicons within tetrahedra not shown

Mineralformelberechnung

Tabelle 8.3 Die Mineralformel und Platzbesetzungen eines Olivins

	1	2	3	4		
Relative Molmasse	Analyse als Gew.% Oxide ¹⁾	Analyse als Mole der Oxide ²⁾	Mole Sauerst. (als O ²⁻) ³⁾	Kationen pro 4 Sauerstoffe ⁴⁾		
SiO ₂	60,09	39,41	0,6558	1,3116	1,0008	Z-Platz 1,001
FeO	71,85	16,46	0,2291	0,2291	0,3496	Y-Platz 1,998
MnO	70,94	0,21	0,0030	0,0030	0,0046	
MgO	40,32	43,27	1,0732	1,0732	1,6378	
CaO	56,08	0,23	0,0041	0,0041	0,0063	
		99,58		2,6210		
				$\frac{4}{2,6210}$		

¹⁾ Siehe Kasten 8.3.

²⁾ Spalte 1 dividiert durch die relative Molmasse.

³⁾ Spalte 2 · Anzahl Sauerstoffe pro Molekül (2 für SiO₂, 1 für den Rest).

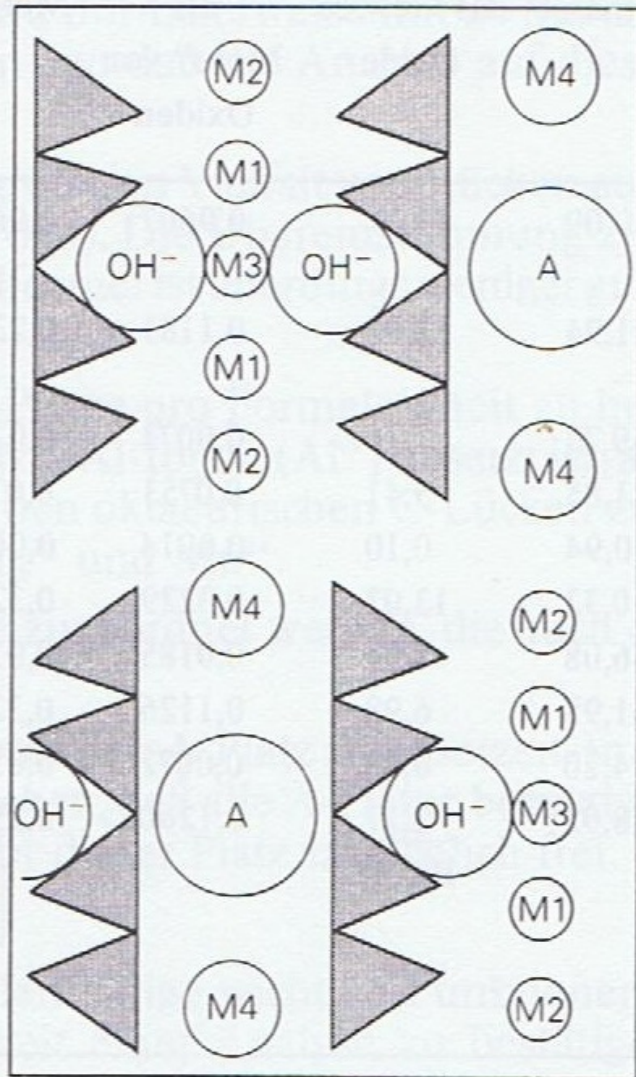
⁴⁾ Spalte 2 · 4/2,6210.



Kationenplätze in Amphibolen

Mineralformelberechnung

Amphibol:



Die Formel eines Amphibols wird normalerweise mit 24 Sauerstoffen geschrieben (OH eingeschlossen), so daß die Analyse auf diese Basis umgerechnet wird.

Die Ionen sind zwischen einer größeren Vielfalt von Lücken aufgeteilt. Die Übereinstimmung zwischen Platz-Besetzungen und der Idealformel ist allerdings weniger gut als für Olivin.

Es gibt zu wenig Si, um die 8 Z-Plätze pro Formeleinheit zu besetzen. Wir setzen voraus, daß der Rest von Al-Ionen (Al^{IV}) besetzt ist, aber das meiste Al bleibt übrig und wird den oktaedrischen C-Lücken zugeteilt (Al^{VI}), genauso wie Fe^{3+} , Fe^{2+} , Mg^{2+} und Mn^{2+} .

Ca^{2+} muß der größeren B-Lücke zugeordnet werden, die auch das Na^+ aufnimmt.

K^+ ist zu groß, um etwas anderes als den A-Platz zu besetzen. In diesem Beispiel ist es schwierig, zu erreichen, daß alle A-Plätze besetzt werden, und in vielen Amphibolen bleibt dieser Platz tatsächlich frei.

Mineralformelberechnung Amphibol: $AB_2C_5Z_8O_{22}(OH)_2$

Coordination number

Ion	Radius	Radius ratio	Predicted Coordination#	Observed Coordination#
Cs ⁺	1.70	1.22	12	12
Rb ⁺	1.49	1.06	12	8, 12
K ⁺	1.38	0.98	8	8, 12
Ba ²⁺	1.36	0.97	8	8, 12
Sr ²⁺	1.13	0.81	8	8
Na ⁺	1.02	0.73	6	6, 8
Ca ²⁺	1.00	0.71	6	6, 8
Mn ²⁺	0.82	0.59	6	6
Fe ²⁺	0.77	0.55	6	6
Li ⁺	0.74	0.53	6	6
Mg ²⁺	0.72	0.51	6	6
Ti ⁴⁺	0.67	0.48	6	6
Fe ³⁺	0.65	0.46	6	6
V ³⁺	0.64	0.46	6	6
Cr ³⁺	0.62	0.44	6	6
Al ³⁺	0.53	0.38	4	4, 6
Si ⁴⁺	0.40	0.29	4	4