**Zeitschrift:** Schweizerische mineralogische und petrographische Mitteilungen = Bulletin suisse de minéralogie et pétrographie

**Band:** 16 (1936)

**Heft:** 2

**Artikel:** Über Molekularnormen zur Gesteinsberechnung

**Autor:** Niggli, P.

**DOI:** https://doi.org/10.5169/seals-16106

**Nutzungsbedingungen**

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Mehr erfahren

**Conditions d'utilisation**

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. En savoir plus

**Terms of use**

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. Find out more

**Download PDF:** 15.07.2025

**ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, https://www.e-periodica.ch**

# Über Molekularnormen zur Gesteinsberechnung

Von *P. Niggli* (Zürich)

Bei Anlass der Arbeit über das Bushveld[1]) ist ein Vorschlag zur Berechnung einer sogenannten Molekularnorm gemacht worden. In der Zwischenzeit erfolgte der Ausbau und die Prüfung auf die Anwendbarkeit.

Innerhalb der Petrographie ist die Synthese zwischen mineralogischer und chemischer Charakterisierung eines der wichtigsten Ziele. Wir sollten zudem ein gegebenes Gestein immer nur als eine von verschiedenen möglichen Erscheinungsformen ansehen, die alle miteinander zu vergleichen sind. Zur Herstellung dieser Beziehungen ist innerhalb der Klasse der Eruptivgesteine die Normberechnung der C. P. J. W.-Klassifikation ein ausgezeichnetes Hilfsmittel. Ein genau vorgeschriebener Weg der Berechnung eines normierten Mineralbestandes ist darin aufgezeigt. Er ermöglichte Vergleiche und verdeutlichte Heteromorphiebeziehungen. All das ist jedoch für die Lehre von den metamorphen Gesteinen noch viel bedeutsamer als für die Eruptivgesteinskunde. Trotzdem hat sich bei ersteren nie eine Normberechnung eingebürgert. Der Grund ist offensichtlich. Die amerikanische Normberechnung stützt sich auf Gewichtsprozente einfachster Mineralzusammensetzungen. Die Umrechnung verlangt Tabellen für jedes einzelne Normmineral, mit Hilfe derer aus Molekularzahlen Gewichtsprozente erhalten werden. Jede neue Stoffverteilung ergibt umfangreiche Rechnungen. Will man normiert oder modal mineralogisch verschiedene Facien der Metamorphose miteinander vergleichen, ist jedoch grösstmögliche Labilität notwendig. Viele selbst in „idealer" Schreibweise komplexe Mineralien sind zu berücksichtigen. Die Tabellenwerke würden zu umfangreich und zudem kaum unmittelbar jede wünschenswerte Umrechnung verschiedener Katanormen in Meso- oder Epinormen gestatten.

[1]) Schweiz. Min. Petr. Mitt. 13 (1933).

Der Ausweg ist gegeben. Die Mineralbeziehungen, die Grundlage für derartige Umrechnungen sind, werden in Form von Reaktionsgleichungen mit Molekularkoeffizienten geschrieben. Somit wird alles viel einfacher, wenn die Verbindungen nicht in Gewichts-, sondern in Molekulareinheiten berechnet werden. Nun sollte uns jedoch die prozentuale Verteilung eines gegebenen Gesteinschemismus auf Mineralverbindungen bereits ungefähr das Bild ergeben, das die makroskopische oder mikroskopische Betrachtung zeigt. Am leichtesten ist es, Volumprozente zu bestimmen, die sich in normalen Gesteinen zudem nicht allzusehr von Gewichtsprozenten unterscheiden. Wie sich nun die prozentuale Verteilung bei Benützung von Molekulareinheiten gestaltet, hängt von der Wahl der Grösse dieser Molekulareinheiten ab, der Molekular- oder, wie wir besser sagen wollten, Äquivalentgewichte und Äquivalentvolumina. Sind die Äquivalentgewichte aller in Betracht gezogener Verbindungen gleich gross, so ist zwischen Molekular- und Gewichtsprozenten überhaupt kein Unterschied vorhanden. Sind die Äquivalentvolumina einander gleich, so erhält man direkt Volumprozente. Die Wahl der Formelgrösse, also der Äquivalentgewichte und Äquivalentvolumina, steht in unserem Belieben. Ich kann z. B. unter 1 Or verstehen $[(SiO_2)_3AlO_2]K$ oder $K_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 6\,SiO_2$ oder 1/5 $Si_3AlKO_8$ usw. Die Äquivalentgewichte oder Äquivalentvolumina der obigen drei Einheiten würden sich verhalten wie 5 : 10 : 1. Wir müssen die Wahl so vornehmen, dass ein einfaches leicht verständliches Prinzip durchgeführt wird und die Äquivalentgewichte bezw. Äquivalentvolumina der hauptsächlichsten gesteinsbildenden Mineralien sich wenig voneinander unterscheiden. Geochemische Gesetzmässigkeiten sind es, die ein derartiges Vorgehen ermöglichen. Bekanntlich sind alle wichtigen elektropositiven gesteinsbildenden Elemente von relativ niedriger und benachbarter Ordnungszahl, die Unterschiede im Atomgewicht sind nicht allzugross, es spielen, von H abgesehen, die ganz leichten und die schweren Atome keine wesentliche Rolle. Die Grosszahl der gesteinsbildenden Mineralverbindungen sind Oxysalze und Silikate, so dass zudem die Unterschiede der übrigen Elemente durch gleichartige Kombination mit Si und O in den Verbindungen abgeschwächt werden.

Als übereinstimmende Formelgrössen können wir daher diejenigen bezeichnen, welche die gleiche Anzahl der wichtigen elektropositiven Elemente der Gruppe Si, Al, Fe, Mn, Mg, Ca, Na, K, Ti, Zr, Cr usw. enthalten. Schreiben wir z. B. für Nephelin $Na_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 2\,SiO_2$, so ist die Summe dieser

Elemente = 2 Na + 2 Al + 2 Si = 6. Wir müssten dann für Forsterit äquivalent schreiben $4\,MgO \cdot 2\,SiO_2$(4 Mg + 2 Si = 6), für Enstatit $3\,MgO \cdot 3\,SiO_2$(3 Mg + 3 Si = 6). Am einfachsten ist es, das Äquivalentgewicht der Verbindungen auf die Summe dieser elektropositiven Elemente = 1 zu beziehen. Wird die Äquivalentgrösse durch eine Abkürzung bezeichnet, wie Ne für Nephelin, Fo für Forsterit, En für Enstatit, so gibt die Summe der genannten Atome die Anzahl der molekularen Einheiten an. So ist $Na_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 2\,SiO_2$ = 6 Ne, $4\,MgO \cdot 2\,SiO_2$ = 6 Fo, $3\,MgO \cdot 3\,SiO_2$ = 6 En, $MgO \cdot SiO_2$ = 2 En. Reaktionsgleichungen lassen sich dann mit diesen Abkürzungen sehr einfach schreiben, z. B.

$$2\,MgO \cdot SiO_2 + SiO_2 = 2(MgO \cdot SiO_2)$$
$$3\,Fo + 1\,Q\,(Quarz) = 4\,En.$$

Da bei derartigen Reaktionen oder Beziehungen die Summe der Elemente konstant bleibt, ist die Summe der Reaktionskoeffizienten auf beiden Seiten der Gleichung stets dieselbe, z. B.

$$\underbrace{3\,Ne + 2\,Q}_{5} = \underbrace{5}_{5}\,Ab\,(Albit).$$

60 Mol · % Ne + 40 Mol · % Q geben daher 100 Molekular % Or, die Molekularmengensumme bleibt konstant. Ist einmal irgend eine prozentuale Verteilung angenommen, so lassen sich alle Umrechnungen auf andere Verbindungen ausführen, die Gesamtsumme bleibt 100. Das ist ein ausserordentlicher Vorteil, man hat nur einmal auf die Summe 100 umzurechnen und kann dann neu kombinieren, ohne das Prinzip einer prozentualen Verteilung zu zerstören.

Inbezug auf die Bewertung der oben nicht genannten, im ganzen völlig untergeordneten Elemente bei der Bestimmung der Formelgrösse darf man sich nicht zu sehr von den Atomgewichten beeinflussen lassen, viel zweckmässiger ist eine leicht einprägsame und für die normale Gesteinsberechnung vorteilhafte Regelung. Der Einfluss als Ganzes ist ja unbedeutend. So werden wie Si, Al, Fe, Mg, Mn, Ca, Na K, usw. alle metallischen Elemente behandelt, also auch Li, Be, B, Sr, Ba, usw. Das ermöglicht die frühzeitige Zusammenfassung zu molekularen bezw. isomorph-atomaren Gruppen, wie sie allgemein üblich ist. Nicht gezählt werden, wie bereits dargetan, O und damit alle verwandten Elemente der ersten Horizontalreihe des periodischen Systems, also C, N, F oder H. Vertreten wie in Sulfiden und Halogeniden S und Cl den Sauerstoff, so werden als elektronegative Elemente auch diese nicht gezählt, sie rechnen jedoch bei der Grössenbestimmung mit in Sulfaten, Chloraten etc. (Letz-

teres gilt nicht für C und N in Karbonaten, Nitraten.) Es hat diese Regelung den grossen Vorteil, dass $H_2O$, $CO_2$ und S der Sulfide in der Summenbildung nicht zu berücksichtigen sind, was für einen einfachen Vergleich metamorpher Gesteine, bei denen Wasser und Kohlensäure oft neu hinzukommen oder im Verlauf einer Metamorphose ausgetrieben werden, unerlässlich ist. Naturgemäss sind dann in den Reaktionsgleichungen zur Gewinnung der Summenäquivalenz auf beiden Seiten der Gleichung die Reaktionskoeffizienten für die Mengen $H_2O$ und $CO_2$ (eventuell S, F, Cl) nicht zu berücksichtigen. Man setzt diese Grössen in Klammern, z. B.[2])

$$\begin{array}{l} 14\,\mathrm{Ms} + 1\,\mathrm{Cc} + 2\,\mathrm{En} + 3\,\mathrm{Q} = 10\,\mathrm{Or} + 4\,\mathrm{Di} + 6\,\mathrm{Sil} + (2\,\mathrm{W}) + (1\,CO_2) \\ 14 \quad + 1 \quad + 2 \quad + 3 \quad = 10 \quad + 4 \quad + 6 = 20 \end{array}$$

oder in Formeln:

$$\underbrace{K_2O \cdot 3\,Al_2O_3 \cdot 6\,SiO_2}_{14} \cdot 2\,H_2O + \underset{1}{CaCO_3} + \underbrace{MgO \cdot SiO_2}_{2} + \underset{3}{3\,SiO_2} =$$

$$\underbrace{K_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 6\,SiO_2}_{10} + \underbrace{CaO \cdot MgO \cdot 2\,SiO_2}_{4} + \underbrace{2\,(Al_2O_3 \cdot SiO_2)}_{6} + (2\,H_2O) + (1\,CO_2)$$

In Tabelle 1 sind nach diesen Prinzipien die Äquivalentgewichte und Äquivalentvolumina der wichtigsten gesteinsbildenden Oxyde zusammengestellt. Man erkennt bereits hier, dass die Schwankungen sich in erträglichen Grenzen bewegen und im Mittel für die Äquivalentvolumina etwas geringer sind als für die Äquivalentgewichte. Weit besser gestalten sich (mit wenigen Ausnahmen) die Verhältnisse, wenn die massgebenden Verbindungstypen gebildet werden.

Tabelle 1.

Die gesteinsbildenden Oxyde

| | Aequivalentgewichte | Aequivalentvolumen (berechnet nach Biltz) |
|---|---|---|
| $SiO_2$ | 60,1 | 24 |
| 1/2 $Al_2O_3$ | 51,0 | 13—21 |
| 1/2 $Fe_2O_3$ | 79,8 | 15,1 |
| FeO | 71,8 | 11,8 |
| MnO | 70,9 | 13,2 |
| MgO | 40,3 | 11,3 |
| CaO | 56,1 | 16,7 |
| 1/2 $Na_2O$ | 31,0 | 12,8 |
| 1/2 $K_2O$ | 47,1 | 18—20 |
| $TiO_2$ | 79,9 | 18,9 |

[2]) W = $H_2O$, Cc = Calcit, Or = Orthoklas, Di = Diopsid, Sil = Sillimanit, Ms = Muskowit.

Tabelle 2.

Basismolekülgruppen

| | | | Bezeichnung | Aequivalentgewicht |
|---|---|---|---|---|
| 1/3 | K Al Si | $O_4$ | Kp | 52,7 |
| | Na Al Si | $O_4$ | Ne | 47,4 |
| | Ca Al Al | $O_4$ | Cal | 52,7 |
| | Mg Al Al | $O_4$ | Sp | 47,4 |
| | Fe Al Al | $O_4$ | Hz | 57,9 |
| | K K Si | $O_3$ | Ks | 51,4 |
| | Na Na Si | $O_3$ | Ns | 40,7 |
| | Ca Ca Si | $O_4$ | Cs | 57,4 |
| | Mg Mg Si | $O_4$ | Fo | 46,9 |
| | Fe Fe Si | $O_4$ | Fa | 67,9 |
| | Fe Cr Cr | $O_4$ | Cm | 74,6 |
| 1 | Na | Cl | Hl | 116,9 |
| 1/2 | Al Al | $O_3$ | C | 51,0 |
| | Fe Fe | $O_3$ | Hm | 79,8 |
| | Zr Si | $O_4$ | Z | 91,6 |

| | | | Bezeichnung | Aequivalentgewicht |
|---|---|---|---|---|
| 1 | Si | $O_2$ | Q | 60,1 |
| | Ti | $O_2$ | Ru | 79,9 |
| | Fe | $S_2$ | Pr | 120 |
| | Ca | $F_2$ | Fr | 78,1 |
| 1/5 | $Ca_3P_2$ | $O_8$ | Cp | 62,1 |
| 1 | Ca | $CO_3$ | Cc | 100,0 |
| 1/2 | CaS | $O_4$ | A | 68,1 |
| 1/3 | $Na_2S$ | $O_4$ | Th | 47,3 |
| 1/2 | $Na_2$ | $CO_3$ | Nc | 53,0 |
| 1/3 | $Fe_2Si$ | $O_5$ | Fs | 73,2 |
| | | $H_2O$ | W | 0 |

Gewisse unter ihnen, (mit ihren Äquivalentgewichten) zum grossen Teil in Tabelle 2 zusammengestellt, wollen wir als „Basismoleküle" bezeichnen. Die wesentlichen gesteinsbildenden Mineralverbindungen lassen sich aus ihnen mit Leichtigkeit zusammensetzen, wie Tabelle 3 und 4 dartun. In beiden Tabellen sind die Abkürzungen für die Äquivalenteinheiten vermerkt, die Bezeichnungen schliessen sich an die Normbezeichnungen der Amerikaner an, jedoch werden durchwegs grosse Anfangsbuchstaben verwendet, so dass kaum Verwechslungen möglich sind. (Siehe Seite 309 und 310.)

Normalerweise wird man bei der Berechnung eines normalen Silikatgesteines wie folgt vorgehen: In bekannter Weise durch Division mit den Molekulargewichten oder mit Hilfe der Tabellen bestimmt man aus den gewichtsprozentischen Werten der Gesteinsanalyse die Molekularzahlen. Man schreibt sie jedoch so hin, dass sie (mit Ausnahme von $H_2O$) Atomzahlen bedeuten, also:

Si, Al, Fe‴, Fe″, Mn, Mg, Ca, Na, K, Ti, P, Cl, usw.

d. h. die Molekularzahlen für $Fe_2O_3$, $Al_2O_3$, $Na_2O$, $K_2O$, $P_2O_5$ usw. müssen mit 2 multipliziert werden. Bei kleinen Mengen rechnet man Mn und Ni etc. zu Fe″, Sr und Ba zu Ca, Li zu K, Cr zu Al, und berücksichtigt sie nicht gesondert. Sehr kleine Mengen von P, Cl, F, S werden ganz unberücksichtigt gelassen, bei deutlicher Anwesenheit bildet man Calciumphosphat Cp = $Ca_3P_2O_8$, Hl = NaCl, Fr = $CaF_2$, Pr = $FeS_2$, eventuell auch Cm = $FeCr_2O_4$ aus Cr und scheidet diese

Verbindungen von vornherein aus. Analoges geschieht mit den Karbonaten, z. B. Cc, sofern Calcit primärer Gemengenteil ist.

Die Hauptzusammenfassung geschieht nach folgendem Schema:

1. $xK + xAl + xSi = 3x\,Kp$ entsprechend $3x\left[\frac{K\,Al\,Si\,O_4}{3}\right]$

   a) bleibt yK übrig (K > Al), so bildet man

   $$yK + \frac{y}{2}Si = \frac{3}{2}y\,Ks = \frac{3y}{2}\left[\frac{K_2\,Si\,O_3}{3}\right]$$

   b) ist mehr Al als K vorhanden, so liefern

2. $xNa + xAl + xSi = 3x\,Ne =$ entsprechend $3x\left[\frac{Na\,Al\,Si\,O_4}{3}\right]$

   a) ist zur Eliminierung von Na zu wenig Al da, so wird der Rest von Na wie folgt abgesättigt:

   $$yNa + \frac{y}{2}Si = \frac{3}{2}y\,Ns = \frac{3y}{2}\left[\frac{Na_2\,Si\,O_3}{3}\right]$$

   b) ist mehr Al als Na vorhanden, so bildet man

3. $\frac{x}{2}Ca + xAl = \frac{3x}{2}Cal = \frac{3x}{2}\left[\frac{Ca\,Al_2\,O_4}{3}\right]$ (Calcium-Aluminat)

   a) bleibt nach Verbrauch von Al noch Ca übrig, so wird aus dem Rest von Ca nach dem Schema

   $$yCa + \frac{y}{2}Si = \frac{3y}{2}Cs = \frac{3y}{2}\left[\frac{Ca_2\,Si\,O_4}{3}\right] \text{ gebildet.}$$

   b) Bleibt Al gegenüber Ca im Überschuss, so bildet man aus

   $$\frac{y}{2}Mg + yAl = \frac{3y}{2}Sp = \frac{3y}{2}\left[\frac{Mg\,Al_2\,O_4}{3}\right] \text{ (Mg-Spinell).}$$

   Bleibt noch Al übrig, so bildet man entsprechend

   $$\frac{z}{2}Fe'' + zAl = \frac{3z}{2}Hz = \frac{3z}{2}\left[\frac{Fe\,Al_2\,O_4}{3}\right] \text{ (Herzynit).}$$

   Bleibt immer noch Al übrig, so ergibt der Rest von Al $Al_2O_3$ nach der Formel $wAl = wC = \left[\frac{Al_2\,O_3}{2}\right]$

4. Fe''' kommt als hypothetisches Ferrisilikat $Fe_2SiO_5$ in Rechnung

   $$xFe''' + \frac{x}{2}Si = \frac{3x}{2}Fs = \frac{3x}{2}\left[\frac{Fe_2\,Si\,O_5}{3}\right]$$

5. Bleiben gegenüber Al-Absättigung Mg und Fe zurück, so bildet man:

$$x\,Mg + \frac{x}{2}\,Si = \frac{3x}{2}\,Fo = \frac{3x}{2}\left[\frac{Mg_2\,Si\,O_4}{3}\right]$$

$$x\,Fe + \frac{x}{2}\,Si = \frac{3x}{2}\,Fa = \frac{3x}{2}\left[\frac{Fe_2\,Si\,O_4}{3}\right]$$

6. $TiO_2$ kommt als $TiO_2$ Ru direkt in Rechnung

   $x\,ZrO_2$ liefert mit $x\,SiO_2 = 2x \cdot Z = 2x\left[\frac{Zr\,Si\,O_4}{2}\right]$

7. $H_2O$ wird als solches aufgeführt, jedoch mit der Molekularzahl für $H_2O$ und nicht für $\frac{H_2O}{2}$ (also direkte oxydische Molekularzahl).

8. Restierendes $SiO_2$ liefert als Molekularzahl die Molekularzahl für $Q = SiO_2$.

Nach der Berechnungsart hat man somit für die Hauptbestandteile folgende Kombinationsmöglichkeiten:

| 1. Alkaliüberschuss (A) vorhanden | | 2. Kein Alkaliüberschuss kein Tonerdeüberschuss $t = al - alk - c$ | | 3. Tonerdeüberschuss t vorhanden | |
|---|---|---|---|---|---|
| α) K > Al | β) K < Al, K + Na > Al | α) oder | β) | α) Al < K + Na + 2 Ca + 2 Fe″ + 2 Mg | β) Al > K + Na + 2 Ca + 2 Fe + 2 Mg |
| Kp | Kp | Kp | Kp | Kp | Kp |
| Ks | Ne | Ne | Ne | Ne | Ne |
| Ns | Ns | Cal | Cal | Cal | Cal |
| Cs | Cs | | Cs | Sp | Sp |
| Fo | Fo | Fo | Fo | Fo oder Hz | Hz |
| Fa | Fa | Fa | Fa | Fa | C |

+ Q, Fs, Ru, etc.

Entsprechend der Seite 297 festgesetzten Normierung der Molekulargrösse ist, wie obige Ableitung zeigt, die Bildung der Molekularzahlen dieser Ausgangsverbindungen eine einfache, man hat jeweilen nur die Atomzahlen für Si, Al, Fe, Mg, Ca, Na, K zu addieren. Für die Seite 299 erwähnten Nebenbestandteile gilt nach den früheren Erläuterungen (Seite 297) folgendes:

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| Cp | die Molekularzahl ist | = Σ | der Atomzahlen | Ca + P | (also bei $x\,P = \frac{5x}{2}$) |
| Hl | „ „ „ | = Σ | „ „ | Na | (also bei $x\,Cl = x$) |
| Fr | „ „ „ | = Σ | „ Atomzahl von | Ca | (F zählt so wenig wie sonst O) |
| Pr | „ „ „ | = Σ | „ „ „ | Fe | (S zählt nicht) |
| Cm | „ „ „ | = Σ | „ Atomzahlen | Fe + Cr | (also bei $x\,Cr = \frac{3}{2}\,x$) |

Die Molekularzahlen der so erhaltenen Verbindungstypen (mit Ausschluss derjenigen von $H_2O$) addiert man und erhält durch Division der Einzelzahlen mit der Summenzahl und nach Multiplikation mit 100 Prozentzahlen. Sie bilden das, was wir die B a s i s nennen wollen, eine Molekulardarstellung, wie sie die Molekularwerte lie-

fert, jedoch nach Verbindungstypen geordnet. Man kann daher auch sehr leicht aus den Molekularwerten si, al, fm, c, alk, k, mg die Rechnung wenigstens für die Hauptbestandteile (unter Vernachlässigung von Cp usw.) durchführen[3]). Es gilt

$$\begin{aligned}
Si &= si \\
Al &= 2\,al \\
Fe &= fm\,(1 - mg) \\
Mg &= fm\,(mg) \\
Ca &= c \\
Na &= 2\,alk\,(1 - k) \\
K &= 2\,alk \cdot k \\
Ti &= ti \\
\hline
\Sigma &= si + 100 + al + alk + ti
\end{aligned}$$

Daraus erhält man beispielsweise für den Fall $2\beta$

$$\begin{aligned}
Kp &= 6\,alk \cdot k \\
Ne &= 6\,alk\,(k - 1) \\
Cal &= 3\,(al - alk) \\
Cs &= 3/2\,(c - al + alk) \\
Fo &= 3/2\,fm \cdot mg \\
Fs + Fa &= 3/2\,fm\,(1 - mg) \\
Q &= si - (50 + 2\,alk - al) \\
Ru &= ti \\
\hline
\Sigma &= 100 + si + alk + al + ti
\end{aligned}$$

Division der Einzelzahlen durch $100 + al + alk + si + ti$ ergibt die Basis. Wir sehen aus diesem Beispiel auch, wie gross si sein muss, damit überhaupt die Verteilung auf die genannten Basismoleküle möglich ist. Es muss $si - 2\,alk \geqq 50 - al$ sein. Das ist in typischen Eruptivgesteinen stets der Fall. In magmatischen Erzlagerstätten und einzelnen metamorphen Gesteinen können Ausnahmen auftreten, in diesem Falle muss zunächst nach den Gleichungen

$$\begin{aligned}
Fe_2'''SiO_5 + \tfrac{1}{2}\,Fe_2SiO_4 &= Fe\,Fe_2O_4 + 1\tfrac{1}{2}\,SiO_2 \\
3\,Fs + 1\tfrac{1}{2}\,Fa &= 3\,Mt + 1\tfrac{1}{2}\,Q
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\text{überschüssiges } Fe_2SiO_5 &= Fe_2O_3 + SiO_2 \\
3\,Fs &= 2\,Hm + 1\,Q
\end{aligned}$$

Mt und ev. Hm an Stelle von Fs und Fa treten.

[3]) Normalerweise wird man von den Atomzahlen direkt ausgehen, weil bei der Bildung der Molekularwerte bereits auf- und abgerundet wurde. Die Molekularwerte brauchen ja nie auf mehr als eine halbe Einheit genau angegeben zu werden.

Alle derartigen Umformungen sind nun ausserordentlich einfach zu vollführen, die Gesamtsumme ändert sich nicht, die einmalige Berechnung auf 100 genügt, man kann in einfacher stöchiometrischer Weise den Molekularanteil neuer Verbindungen berechnen. Darauf beruht der grosse Wert dieser Berechnungsart. Die Umformungen sind spielend zu vollführen, alle Heteromorphiebeziehungen lassen sich studieren, die Berechnung ist gleich gut geeignet für das Studium metamorpher Gesteine wie für das der Eruptivgesteine. Nachfolgend ist die Berechnung eines Beispiels durchgeführt.

Granit (Pyterlit) Wiborg (Süd-Finnland)

| | Gew. % | | Atomzahlen | Kp | Ne | Cal | Cs | Fs | Fa | Fo | Ru | Q | $H_2O$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $SiO_2$ | 75,81 | Si | 1262 | 117 | 73 | | 3,5 | 5,5 | 13,5 | 4 | | 1045,5 | |
| $Al_2O_3$ | 11,22 | Al | 220 | 117 | 73 | 30 | | | | | | | |
| $Fe_2O_3$ | 0,86 | Fe | 11 | | | | | 11 | | | | | |
| FeO | 1,91 | Fe | 27 | | | | | | 27 | | | | |
| MgO | 0,34 | Mg | 8 | | | | | | | 8 | | | |
| CaO | 1,25 | Ca | 22 | | | 15 | 7 | | | | | | |
| $Na_2O$ | 2,27 | Na | 73 | | 73 | | | | | | | | |
| $K_2O$ | 5,49 | K | 117 | 117 | | | | | | | | | |
| $TiO_2$ | 0,32 | Ti | 4 | | | | | | | | 4 | | |
| $P_2O_5$ | Sp | P | — | | | | | | | | | | |
| $H_2O+$ | 0,40 | | | | | | | | | | | | |
| | 99,87 | | 1744 | 351 | 219 | 45 | 10,5 | 16,5 | 40,5 | 12 | 4 | 1045,5 | |
| Basis: 100 | | | | 20,1 | 12,6 | 2,6 | 0,6 | 0,9 | 2,4 | 0,7 | 0,2 | 59,9 | |
| | | | | | 35,3 | | | | 4,6 | | | 60,1 | |
| [4]) Kata-Molekularnorm: 100 | | | | 33,5 | 21,0 | 4,3 | 0,8 | 0,9 | 2,6 | 0,9 | 0,2 | 35,8 | |
| | | | | Or | Ab | An | Wo | Mt | Hy | En | Ru | Q | |
| | | | | | 58,8 | | | | 5,2 | | | 36,0 | |
| Beobachtet Gew. % | | | | 54 Feldspäte | | | 8 Biotit + Erz | | | | 38 Quarz | | |
| Kata-Molekularnorm: Biotitvariante | | | | | | | Tn | Wo | Mt | Bi. | Quarz | | |
| | | | | 30,6 | 21,0 | 4,3 | 0,6 | 0,4 | 0,9 | 4,7 | 37,5 | | |
| | | | | | 55,9 | | | | 6,6 | | | | |

Die Basis selbst ist noch keine theoretische oder normative Mineralbestandsberechnung. Sie fasst nur Gruppen zusammen, aus denen weitere Verbindungen gebildet werden können, die Grundzusammensetzungen wichtiger koexistierender Mineralien sind. Normalerweise findet man in Eruptivgesteinen neben Nephelin, Olivin, Spinell keinen Quarz. Der wirkliche Mineralbestand geht daher aus der Basis, wenigstens in normativer Weise, hervor durch Verteilung des Q auf die übrigen Verbindungsgruppen unter Bildung anders-

[4]) Wird im Folgenden erläutert.

silifizierter Verbindungen. Wir können versuchen, aus der Basis eine Kata-Molekularnorm zu berechnen, die wenigstens mit den Regeln der Koexistenzmöglichkeiten nicht mehr im Widerspruch steht. Zu dem Zwecke müssen wir zunächst jeder der genannten Verbindungen die höchst silifizierte Form gegenüberstellen, die erfahrungsgemäss mit Quarz bei hohen Temperaturen koexistent ist.

Wir erhalten

$$K\,Al\,SiO_4 + 2\,SiO_2 = K\,Al\,Si_3O_8 = [(SiO_2)_3\,AlO_2]\,K$$
$$3\,Kp \quad + 2\,Q \quad = 5\,Or$$
$$Na\,Al\,SiO_4 + 2\,SiO_2 = Na\,Al\,Si_3O_8 = [(SiO_2)_3\,AlO_2]\,Na$$
$$3\,Ne \quad + 2\,Q \quad = 5\,Ab$$
$$Na_2SiO_3 + Fe_2SiO_5 + 2\,SiO_2 = 2\,[SiO_2 \cdot SiO_4]\,Na\,Fe$$
$$3\,Ns \quad + 3\,Fs \quad + 2\,Q \quad = 8\,Ac \text{ (Akmit bezw. Aegirin).}$$

Analog eventuell $K_2SiO_3 + Fe_2SiO_5$ zu K-Ac. Einzeln würde dies bedeuten:

$$Na_2SiO_3 + SiO_2 = [SiO_2 \cdot SiO_4]\,Na_2$$
$$3\,Ns \quad + 1\,Q \quad = 4\,Ns'$$
$$K_2SiO_3 + SiO_2 = [SiO_2 \cdot SiO_4]\,K_2$$
$$3\,Ks \quad + 1\,Q \quad = 4\,Ks'$$
$$Fe_2'''SiO_5 + SiO_2 = \left[\begin{matrix} SiO_2 \cdot SiO_4 \\ O \end{matrix}\right] Fe_2$$
$$3\,Fs \quad + 1\,Q \quad = 4\,Fs'$$

Ferner:

$$[(AlO_2)_2]\,Ca + 2\,SiO_2 = [(SiO_2)_2\,(AlO_2)_2]\,Ca$$
$$3\,Cal \quad + 2\,Q \quad = 5\,An$$
$$[SiO_4]\,Mg_2 + SiO_2 = [SiO_2 \cdot SiO_4]\,Mg_2$$
$$3\,Fo \quad + 1\,Q \quad = 4\,En$$
$$[SiO_4]\,Fe_2 + SiO_2 = [SiO_2 \cdot SiO_4]\,Fe_2$$
$$3\,Fa \quad + 1\,Q \quad = 4\,Hy$$
$$[SiO_4]\,Ca_2 + SiO_2 = [SiO_2 \cdot SiO_4]\,Ca_2$$
$$3\,Cs \quad + 1\,Q \quad = 4\,Wo$$
$$2\,[(AlO_2)_2]\,Mg + 5\,SiO_2 = [5\,SiO_2 \cdot 4\,(AlO_2)]\,Mg_2$$
$$6\,Sp \quad + 5\,Q \quad = 11\,Cord \text{ (Cordierit)}$$
$$2\,[(AlO_2)_2]\,Fe + 5\,SiO_2 = [5\,SiO_2 \cdot 4\,(AlO_2)]\,Fe_2$$
$$6\,Hz \quad + 5\,Q \quad = 11\,Fe\text{-}Cord$$
$$Al_2O_3 + SiO_2 = \left[\begin{matrix} SiO_4 \\ O \end{matrix}\right] Al_2$$
$$2\,C + 1\,Q \quad = 3\,Sil. \text{ (Sillimanit)}$$
$$TiO_2 + \tfrac{1}{2}\,[SiO_2\,SiO_4]\,Ca_2 = \left[\begin{matrix} SiO_4 \\ O \end{matrix}\right] Ti\,Ca$$
$$1\,Ru \quad + 2\,Wo \quad = 3\,Tn \text{ (Titanit)}$$

Man kann leicht berechnen, wie gross bei gegebener Basis und gegebenen oxydischen Molekularwerten si sein muss, damit sich alle Verbindungen der Basis (alles Fe gleichartig gerechnet) in die genannten höchstsilifizierten Formen überführen lassen. Es sei dies in folgender Tabelle vermerkt, die zugleich auch das minimale notwendige si anzeigt, damit sich die Basis bilden lässt.

| | 1. Alkaliüberschuss alk > al | 2. al > alk al ≦ alk + c | 3. al > alk + c al < 50 | 4. al > 50 |
|---|---|---|---|---|
| si notwendig zur Basisbildung | $50 + \frac{1}{2}$ al $+ \frac{1}{2}$ alk | 50 + 2 alk − al | 50 + 2 alk − al | 2 alk |
| si notwendig zur vollständigen Silifizierung [5]) | 100 + 3 al + alk | 100 + 4 alk | 100 + 4 alk + $\frac{1}{2}$ t | 100 + 4 alk + $\frac{1}{2}$ fm |

Ist si grösser als den Werten der ersten Horizontalreihe entspricht, so lässt sich ohne weiteres die Basis bilden; ist es grösser als die Werte der zweiten Horizontalreihe, so lassen sich alle oben genannten hochsilifizierten Verbindungen bilden und es bleibt noch Q übrig. Man nennt daher si — (100 + 4 alk) bezw. si — (100 + 3 al + alk) bezw. si — (100 + 4 alk + $\frac{1}{2}$ t) bezw. si — (100 + 4 alk + $\frac{1}{2}$ fm) die Quarzzahl qz.

Ist ausnahmsweise si kleiner als das zur Basisbildung notwendige si, so wird nach den Seite 302 erwähnten Bezugsgleichungen Mt bezw. Hm gebildet. Wäre der Oxydationsgrad des Fe leichter bestimmbar und nicht von verschiedenen, an sich nebensächlichen Faktoren abhängig, hätte man von vornherein Mt bezw. Hm bezw. beide als Basisverbindungen benutzen können. So aber ist es zweckmässig, vorerst in der Basis Fe‴ und Fe″ gleich zu behandeln, so weit das mit dem $SiO_2$-Gehalt verträglich ist.

Man kann zu Übersichtszwecken die wichtigern Basisverbindungen wie folgt zusammenfassen:

1. Kp + Ne + Cal = Feldspat und Feldspatoidgrundkomplexe
2a. Cs + Fo + Fa = Olivin + Augit-Grundkomplexe
2b. C = Korund- und Sillimanitgrundkomplexe
3. Q = Quarz und -Silifizierungssubstanz
4a. Ns (ev. Ks) + Fs = Alkaliaugit-Fe-, Erz-Grundsubstanzen
4b. Sp + Hz + Fs = Spinell-, Cordierit-, Erz-Grundsubstanzen.

Es sind jeweilen entweder 4a) oder 4b), ferner 2a) oder 2b) vorhanden, so dass im ganzen nur 4 Sammelkomponenten gleichzeitig vorhanden sind. In vielen Fällen fehlen Ks, Sp, Hz, C bei Eruptiv-

[5]) Es ist t = al — (alk + c).

gesteinen völlig, Fs, eventuell auch Ns lassen sich dann sinngemäss mit Cs + Fo + Fa vereinigen. Wir wollen in solchen Fällen

$$\begin{aligned} &Kp + Ne + Cal = L \\ &Cs + Fo + Fa + Fs + Ns = M \\ &Q = Q. \end{aligned}$$

nennen. Jetzt sind eine erste Orientierung und ein erster Vergleich nach prozentualem Gehalt an diesen „Molekülen" durch graphische

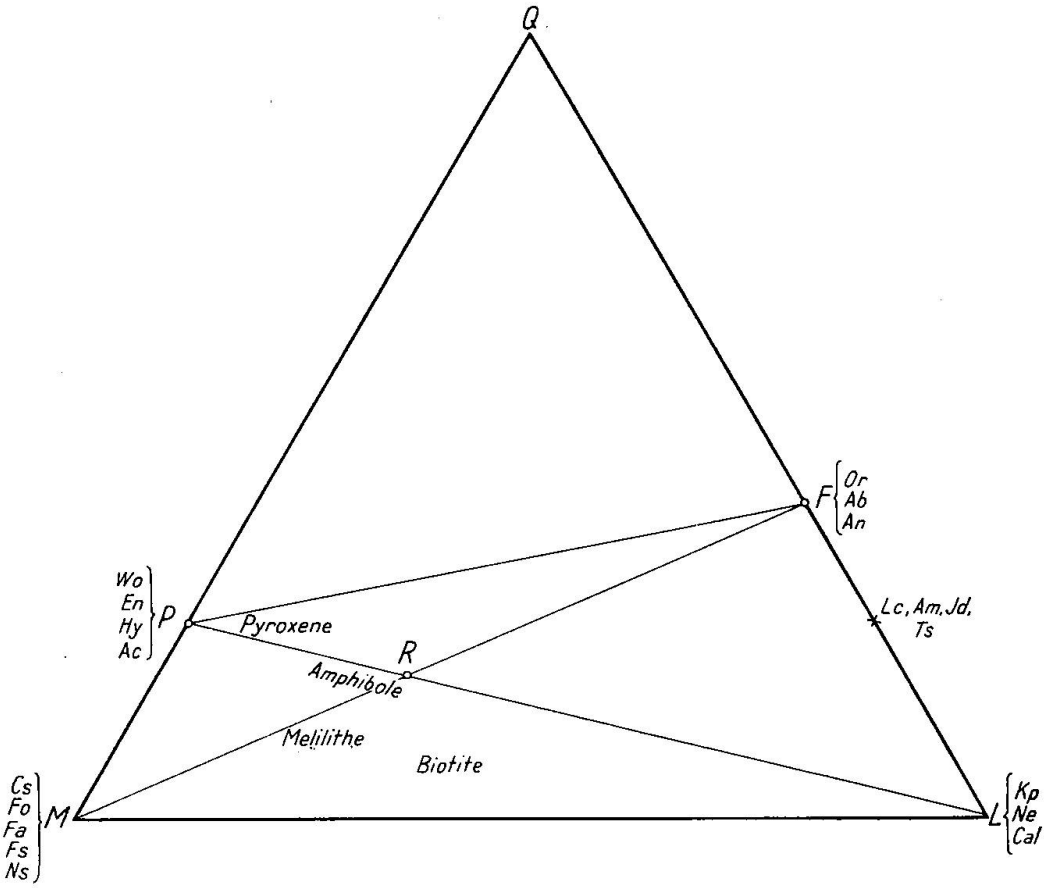


Fig. 1

Darstellung in einem Dreieck möglich. In diesem Dreieck lassen sich auch die Zusammensetzungspunkte der höher silifizierten Verbindungen eintragen. Es ergibt sich unmittelbar, dass eine vollständige Umwandlung der Basismoleküle in die höchst silifizierten Komplexe dann und nur dann möglich ist, wenn der darstellende Punkt in das Dreieck PFQ fällt. PF ist die „Sättigungslinie". Aus der Darstellung ist ersichtlich, dass innerhalb des Dreieckes PRF die Berechnung auf 2 prinzipiell verschiedene Arten möglich ist. Es lassen sich aus Kp, Ne, Cal vollständig Feldspatverbindungen bilden, dann bleibt ein Rest der Basisbestandteile in der niedrig silifizierten Form,

oder man kann Kp, Ne, Cal unverändert lassen, dann ist es möglich, alle M-Moleküle in P-Verbindungen umzuwandeln.

In der Hauptsache bedeutet dies die Heteromorphie Olivin-Feldspat $\rightleftarrows$ Augit-Feldspatoid. Im Dreieck PRM bleiben unter allen Umständen niedrigsilifizierte M-Verbindungen übrig, vollständige Feldspatbildung ist jedoch möglich. Im Dreieck RFL bleibt unter allen Umständen L übrig, P-Bildung ist denkbar. Im Dreieck RML ist der Kieselsäuregehalt so gering, dass nur teilweise Silifizierung durchführbar ist, sowohl L wie M werden übrig bleiben. Der untere Teil des Dreiecks zeigt somit sehr schön Möglichkeiten der Heteromorphie, die bereits bei Eruptivgesteinen auftreten. Ist die Quarzzahl qz negativ, so lässt sich Q der Basis in verschiedener Weise auf die Basiskomponenten verteilen. Zu Vergleichszwecken kann man nun nach dem Vorschlag der hervorragenden amerikanischen Petrographen ein normiertes Verfahren einschlagen, um aus der Basis die Kata-Molekularnorm zu erhalten. Absichtlich sieht man hierbei zunächst von der Heteromorphie ab, was für uns keinerlei Unzukömmlichkeiten hat, da infolge der molekularen Beziehung jederzeit, ohne grosse Rechnung, eine andere Verteilung erfolgen kann.

Folgendes Verfahren wird zum grossen Teil im Anschluss an die gewichtsprozentische Norm vorgeschlagen.

1. Eventuell vorhandenes Ns wird mit der gleichen Menge Fs zu Fns $[SiO_4]NaFe'''$ vereinigt. 1 Ns + 1 Fs = 2 Fns. Ebenso 1 Ks + 1 Fs = 2 Fks.

2. Der Rest von Fs wird zur Magnetit- bezw. Hämatitbildung verwendet. Es braucht zur Magnetitbildung zu x Fs x/2 Fa. Es entsteht somit dann und nur dann Hämatit, wenn der Rest von Fs > 2 Fa ist.

Es sei der Rest von Fs durch x bezeichnet, der Fa-Gehalt sei grösser x/2, dann gilt x Fs + x/2 Fa = x Mt + x/2 Q.

Ist der Fa-Gehalt = y = kleiner als der doppelte restliche Fs-Gehalt, so gilt

$$2y\,Fs + y\,Fa = 2y\,Mt + y\,Q$$

$$(x - 2y)\,Fs = \frac{2(x-2y)}{3}\,Hm + \frac{1}{3}(x - 2y)\,Q.$$

Es wird somit durch die Mt- bezw. Hm-Bildung x/2 bezw. y + 1/3 (x — 2 y) Q frei. Dieses Q wird zu dem bereits vorhandenen Q hinzugezählt und die Gesamtmenge des Q wird nun folgendermassen verteilt:

3. Ist Cal vorhanden, so wird direkt aus Cal nach der Gleichung $x\,Cal + 2/3\,x\,Q = 5/3\,x\,An$, die Verbindung An gebildet.

4. Bleibt nach Bildung von An noch Q übrig, so wird bei Vorhandensein von Cs zunächst Wo gebildet

$$x\,Cs + 1/3\,x\,Q = 4/3\,x\,Wo$$

Bleibt Q übrig, und ist Fks und Fns vorhanden, so werden KAc und Ac gebildet nach

$$x\,Fks + \frac{x}{3}\,Q = \frac{4}{3}\,x\,K\text{-}Ac$$

$$x\,Fns + \frac{x}{3}\,Q = \frac{4}{3}\,x\,Ac.$$

Hat die Bildung von Fks und Fns einen Überschuss von Ks bezw. Ns hinterlassen, so wird bei weiter vorhandenem Q die Verbindung Ks′ bezw. Ns′ gebildet gemäss

$$x\,Ns + \frac{1}{3}\,x\,Q = \frac{4}{3}\,x\,Ns'$$

$$x\,Ks + \frac{1}{3}\,x\,Q = \frac{4}{3}\,x\,Ks'$$

5. Bleibt nach diesen Operationen noch Q übrig, so wird aus Kp Or gebildet gemäss

$$x\,Kp + \frac{2}{3}\,x\,Q = \frac{5}{3}\,x\,Or \text{ bezw. } y\,Q + \frac{3}{2}\,y\,Kp = \frac{5}{2}\,y\,Or$$

6. Bei weiterem Q-Überschuss wird soweit als möglich Ab gebildet

$$y\,Q + 3/2\,y\,Ne = 5/2\,y\,Ab$$

7. Bei weiterem Q-Überschuss wird bei allfälligem Sp und Hz die Silifizierung zu Cord und Fe-Cord vorgenommen

$$y\,Q + 6/5\,y\,Sp = 11/5\,y\,Cord$$
$$y\,Q + 6/5\,y\,Hz = 11/5\,y\,Fe\text{-}Cord$$

8. Jetzt ist an niedrig silifizierten Molekülen noch Fo und Fa oder C zurückgeblieben, soweit als möglich bildet man En und Hy bezw. Sil.

$$1\,y\,Q + 3\,y\,Fo = 4\,y\,En$$
$$1\,y\,Q + 3\,y\,Fa = 4\,y\,Hy$$
$$1\,y\,Q + 2\,y\,C = 3\,y\,Sil$$

Trotz allen derartigen Änderungen bleibt die Summe immer 100, da infolge der einheitlichen Wahl der Molekulargrössen die Summe der Koeffizienten der linken Seite gleich ist der Summe der Koeffizienten rechts. In Sonderfällen lassen sich rasch Kata-Molekularnormen mit besonderen theoretischen Mineralzusammensetzungen berechnen,

z. B. Leucit statt Or + Kp, Gehlenit, Grossular, oder Pyrop, Almandin, Tschermaksches Molekül. Wir kennzeichnen sie durch die Beifügung der nicht standardmässigen Mineralien, z. B. Leucitvariante, Granatvariante, usw. Die Umrechnung ist einfach, z. B. nach folgenden Schematas, die auch dartun, wie sich die Verhältnisse gestalten, wenn Nephelin + augitähnliche Moleküle statt Albit + Plagioklas gebildet werden.

5 Or + 3 Kp = 8 Lc (Lc = Leucit)
3 Cal + 2 Wo = 5 Ge (Ge = Gehlenit)
5 An + 3 Cs = 8 Gro (Gro = Grossular)
4 Ts + 4 Wo = 8 Gro
1 Ru + 2 Wo = 3 Tn
3 Cal + 1 Q = 4 Ts (Tschermak'sches Molekül)
5 An = 4 Ts + 1 Q
Ru + 2 Wo = 2 Pf + 1 Q (Pf = Perowskit)
3 Ne + 8 En = 5 Ab + 6 Fo
4 Ts + 4 En = 5 An + 3 Fo
3 Cs + 3 Fo + 4 Wo = 10 Åk (Åkermanit)
11 Cord + 8 En = 16 Pyp + 3 Q (Pyp = Pyrop)
11 Fe-Cord + 8 Hy = 16 Alm + 3 Q (Alm = Almandin)

Bei Mineralien stark wechselnder Zusammensetzung lassen sich die erwähnten Idealzusammensetzungen bilden (Tabelle 3 und 4) oder unter Umständen Zusammensetzungen, wie sie durch die spezielle Analyse festgestellt und auf Standard-Molekularnormen umgerechnet wurden. In dem Seite 306 erwähgten Dreieck können viele dieser Mineralzusammensetzungen eingetragen werden, was zur graphischen Veranschaulichung der Beziehungen dient.

Tabelle 3.

Wichtige Idealmineralzusammensetzungen[6])

| Name | Bildung aus der Basis | Abkürzung und Aequivalentgewicht | | |
|---|---|---|---|---|
| Quarz | Q | Q | 60,1 | + |
| Kalifeldspat | 3 Kp + 2 Q = 5 Or | Or | 55,7 | ~ |
| Leucit | 3 Kp + 1 Q = 4 Lc | Lc | 54,6 | ~ |
| Kalinephelin | Kp | Kp | 52,7 | — |
| Albit | 3 Ne + 2 Q = 5 Ab | Ab | 52,4 | — |
| Na-Nephelin | Ne | Ne | 47,4 | — |
| Anorthit | 3 Cal + 2 Q = 5 An | An | 55,6 | ~ |
| Analcim | 3 Ne + 1 Q (+ 1 W) = 4 Am | Am | 55,0 | ~ |

[6]) Die Zeichen ~, +, — bedeuten ähnlich, grösser, kleiner als ein mittleres Äquivalentgewicht von 53—56.

| Name | Bildung aus der Basis | Abkürzung und Aequivalentgewicht | | |
|---|---|---|---|---|
| Marialithe | 30 Ab + { 2 Hl, 3 Th, 2 Nc } = 32/34 Ma | Ma | um 52 | — |
| Mejonite | 30 An + { 2 Cc, 4 A } = 32/34 Me | Me | um 57 | ∼ |
| Sodalith | 18 Ne + 2 Hl = 20 Sod | Sod. | um 48 | — |
| Nosean | 18 Ne + 3 Th = 21 Nos | Nos | 47,3 | — |
| Hauyn | 18 Ne + 4 A = 22 Hn | Hn | 51,1 | — |
| Cancrinit | 18 Ne + 2 Cc = 22 Canc | Canc | um 50 | — |
| Sillimanit, Andalusit, Disthen | 2 C + 1 Q = 3 Sil | Sil | 54,0 | ∼ |
| Apatit | 15 Cp + 1 Fr = 16 Ap | Ap | ca. 63 | + |

Zusammenfassend zeigt Tabelle 5, wie für komplexe Mineralien, z. T. bereits der Meso- oder Epizone angehörig, Verbindungstypen gebildet werden können. In Tabelle 6 schliesslich sind nochmals eine Reihe von Mineralbeziehungen zusammengestellt, die zur Umrechnung dienen und gleichzeitig wichtige Prozesse der Metamorphose veranschaulichen. Tabelle 7 zeigt die Berechnung ein- und desselben Gesteines auf verschiedene „Normen". Die grosse Bedeutung derartiger Versuche für die vergleichende Gesteinslehre wird aus diesem Beispiel wohl genügend ersichtlich sein.

Tabelle 4.

Wichtige Idealmineralzusammensetzungen[7])

| Name | Bildung aus der Basis | Abkürzung und Aequivalentgewicht | | |
|---|---|---|---|---|
| Olivine | Fo | Fo | — 46,9 | mittl. Olivin um 52 — |
| | Fa | Fa | — 67,9 | mittl. Olivin um 52 + |
| Enstatit | 3 Fo + 1 Q = 4 En | En | 50,2 | — |
| Eisen-Hypersthen | 3 Fa + 1 Q = 4 Hy | Hy | 65,9 | + |
| Wollastonit | 3 Cs + 1 Q = 4 Wo | Wo | 58,1 | + |
| Diopsid | 2 Wo + 2 En = 4 Di | Di | 54,1 | ∼ |
| Tschermak'sche Verbindung | 3 Cal + 1 Q = 4 Ts | Ts | 54,5 | ∼ |
| Acmit, Aegirin | 3 Ns + 2 Hm + 3 Q = 8 Ac | Ac | 57,7 | + |
| Jadeit | 3 Ne + 1 Q = 4 Jd | Jd | 50,8 | — |
| Titanit | 1 Ru + 2 Wo = 3 Tn | Tn | 65,3 | + |
| Cordierit | 6 Sp + 5 Q = 11 Cord | Cord | 53,2 | ∼ |
| Fe-Cordierit | 6 Hz + 5 Q = 11 Fe-Cord | Fe-Cord | 58,9 | + |
| Gehlenit | 3 Cal + 2 Wo = 5 Ge | Ge | 54,8 | ∼ |
| Åkermanit | 3 Cs + 2 En = 5 Ak | Ak | 54,5 | ∼ |
| Grossular | 3 Cal + 4 Wo + 1 Q = 8 Gro | Gro | 56,3 | ∼ |

[7]) Die Zeichen ∼, +, — bedeuten ähnlich, grösser, kleiner als ein mittleres Äquivalentgewicht von 53—56.

| Name | Bildung aus der Basis | Abkürzung und Aequivalentgewicht | | |
|---|---|---|---|---|
| Pyrop | 3 Sp + 4 En + 1 Q = 8 Pyp | Pyp | 50,4 | — |
| Almandin | 3 Hz + 4 Hy + 1 Q = 8 Alm | Alm | 62,2 | + |
| Andradit | 2 Hm + 6 Wo = 8 Andr | Andr | 63,5 | + |
| Magnetit | Mt | Mt | 77,2 | ++ |
| Hämatit | Hm | Hm | 79,8 | ++ |
| Ilmenit | 2 Hm + 2 Ru = 4 Ilm | Ilm | 75,9 | ++ |

Tabelle 5.

Beispiele von Bildung komplexer Mineralien

Grammatit (Ho): 8 Di + 6 En + 1 Q + (1 W) = 15 Ho
Muskowit (Ms) : 10 Or + 4 C + (2 W) = 14 Ms
Biotit (Bi) : 6 Kp + 9 Fo + 1 Q + (2 W) = 16 Bi
Vesuvian (Ves) : 18 [Cs, Fo] + 6 Sil + 1 Q + (2 W) = 25 Ves
Zoisit (Zo) : 9 Cal + 2 Wo + 5 Q + (1 W) = 16 Zo
Serpentin (Serp) : 3 Fo + 2 En + (2 W) = 5 Serp
Amesit (At) : 3 Sp + 2 En + (2 W) = 5 At
Talk (Tc) : 6 En + 1 Q + (1 W) = 7 Tc
Kaolin (Ka) : 3 Sil + 1 Q + (2 W) = 4 Ka
Chloritoid / Ottrelith } (Ot) : 3 Hz + 1 Q + (2 W) = 4 Ot
Staurolith (Sta) : 3 Hz + 3 Sil + 1 Q + (1 W) = 7 Sta

Tabelle 6.

Einige wichtige Mineralbeziehungen

10 Or + 6 Sil + (2 W) = 14 Ms + 2 Q
10 Or + 10 An + (2 W) = 14 Ms + 4 Wo + 2 Q
30 Or + (2 W) = 14 Ms + 6 Ks + 10 Q
40 An + 10 Or + (4 W) = 14 Ms + 32 Zo + 4 Q
10 Or + 12 En + (2 W) = 16 Bi + 6 Q
10 Or + 9 Fo + (2 W) = 16 Bi + 3 Q
4 En + 6 Sil + 1 Q = 11 Cord
33 Cord = 16 Pyp + 12 Sil + 5 Q
10 Or + 33 Cord + (2 W) = 16 Bi + 18 Sil + 9 Q
9 Fo + 1 Q + (4 W) = 10 Serp
24 Gro + (5 $CO_2$) + (1 W) = 16 Zo + 5 Cc + 3 Q
8 Di + 6 En + 1 Q + (1 W) = 15 Ho

Tabelle 7.

Berechnungsbeispiel

Zweiglimmerschiefer Piora:

si 85, al 34, fm 53, c 1,5 alk 11,5 k 0,89 mg 0,71

| | Kata- | | | Meso | | | Epi-Molekularnormen | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | Or | 44,1 | | Bi | 43,1 | | Ms | 61,8 | |
| Plag. | Ab | 5,6 | | Ms | 24,1 | | Ab | 5,7 | |
| | An | 3,0 | Plag. | Ab | 5,6 | | Zo | 2,4 | |
| | Cord | 2,4 | | An | 3,0 | | At | 3,6 | Chlorit |
| | Sp | 27,2 | (Disthen) | Sil | 4,6 | | Serp | 13,1 | Chlorit |

| | Kata- | | Meso- | | Epi-Molekularnormen |
|---|---|---|---|---|---|
| Ol { Fo | 10,0 | Sta | 15,8 | | 10,5 [Fe, Mg] $CO_3$ |
| Ol { Fa | 3,4 | | | Hm | 2,9 |
| Mt | 4,3 | Mt | 4,3 | | |
| | 100,0 | | 100,5 | | 100,0 |
| | | Quarzmanko | 0,5 | | |
| | | | 100,0 | | |

Beispiel der Umwandlungsberechnung:

$$\begin{cases} 10\ Or + 18\ Sp + (2\ W) = 16\ Bi + 12\ C \quad \text{bezw.} \\ 40\ Or + 18\ Sp + (8\ W) = 16\ Bi + 42\ Ms \end{cases}$$

$$10\ Or + 9\ Fo + (2\ W) = 16\ Bi + 3\ Q$$

$$11\ Cord = 3\ Fo + 6\ Sil + 2\ Q$$

$$4\ C + 10\ Or + (2\ W) = 14\ Ms$$

$$2\ C + 1\ Q = 3\ Sil$$

Alternativen: (Beispiel)

$$42\ Sta + 14\ Ms + 2\ Q = 16\ Fe\text{-}Bi + 42\ Sil\ (Disthen) + (6\ W)$$

Nicht selten ist Biotit auch ungefähr:

$$Bi' = 6\ Kp + 1\tfrac{1}{2}\ Sil + 7{,}5\ Fo + 1\ Q + (1\tfrac{1}{2}\ W) \text{ statt } 6\ Kp + 9\ Fo + 1\ Q + (2\ W)$$

Sericit:

$$Ms' = 40\ Or + 9\ Sp + 3\ Sil + 5\ C + (7{,}5\ W) \text{ statt } 40\ Or + 16\ C + (8\ W)$$

Noch gilt es indessen nachzuprüfen, inwiefern eines der Ziele unserer Bemühungen erreicht wurde, nämlich eine Molekulardarstellung zu erhalten, ohne zu sehr von einer gewichts- bezw. volumprozentischen Berechnung abzuweichen. Bereits der Vergleich des Rechnungsbeispiels Seite 303 zeigt die nahe Übereinstimmung. Wie eingangs betont, würde die Molekularberechnung ein exaktes Bild der gewichtsprozentischen Verteilung ergeben, wenn die Äquivalentgewichte einander gleich wären. Die volumprozentische Darstellung verlangt Gleichheit der Äquivalentvolumina. In den Tabellen 2, 3 und 4 sind die Äquivalentgewichte angegeben. Von einigen Nebengemengteilen abgesehen, sind sie einander recht ähnlich, sie liegen um 55 herum. Man kann sich leicht überzeugen, dass auch für wasserhaltige komplexe Mineralien die Übereinstimmung mit diesem Mittelwert recht gut ist. Fe- und Mg-Silikate weichen etwas stärker, aber in einander entgegengesetztem Sinne ab, so dass die so häufigen Mischkristalle wieder mittlere Werte annehmen. Die Äquivalentgewichte der Erze sind deutlich höher, für sie ergibt die Molekulardarstellung einer gewichtsprozentischen gegenüber zu kleine Werte. Im Ganzen vermitteln jedoch die Reaktionsgleichungen mit ihren Reaktionskoeffizienten bereits ein ungefähres Bild der Mengenverhältnisse, die verbraucht werden.

Wenn wir zum Beispiel schreiben: 3 Kp + 2 Q = 5 Or,
so entstehen in Wirklichkeit aus

316,26 gr Kalinephelin + 240,24 gr Quarz 556,50 gr Orthoklas.

316:240 ist nahe 3:2 der Reaktionsgleichung. Die neue Schreibweise der Reaktion (mit den genannten Abkürzungen und Einheitsfestsetzungen) dient somit auch sehr zur besseren Veranschaulichung der quantitativen Beziehungen, die zwischen den Mineralien herrschen.

Noch günstiger gestaltet sich im Mittel der Vergleich der Molekulardarstellung mit einer volumprozentischen Berechnung auf entsprechende Mineralien.

Tabelle 8.

Äquivalentvolumen einiger Normmineralien

(In runden Klammern Korrektur zur Erhaltung von Volumprozenten, in eckigen Klammern zum Vergleich Korrektur zur Erhaltung von Gewichtsprozenten)

| | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Q | 24,0 | (+) | [+] | Fo | 14,6 | (- -) | [—] | Hz | 13,5 | (- -) | [+] |
| Or | 21,8 | (+) | [∾] | Fa | 15,8 | (—) | [+] | Sp | 13,2 | (- -) | [—] |
| Ab | 20,1 | (∾) | [—] | Cs | 17,5 | (—) | [∾] | Ilm | 16 | (—) | [++] |
| An | 20,1 | (∾) | [∾] | En | 15,8 | (—) | [—] | Ru | 18,9 | (—) | [+] |
| Kp | 20,7 | (∾) | [—] | Di | 16,5 | (—) | [∾] | Pr | 23,9 | (+) | [++] |
| Lc | 22,5 | (+) | [∾] | Gro | 15,7 | (—) | [±] | C | 12,9 | (- -) | [—] |
| Ne | 18,1 | (—) | [—] | Alm | 14,4 | (- -) | [+] | Hl | 26,3 | (++) | [+++] |
| Sil | 16,3 | (—) | [∾] | Cord | 21,5 | (+) | [≃] | Nc | 20,5 | (∾) | [∾] |
| Z | 19,4 | (∾) | [++] | Tn | 18,5 | (—) | [+] | Fr | 24,3 | (+) | [++] |
| Ge | 18,9 | (∾) | [∾] | Cm | 14,5 | (—) | [++] | Ap | ca. 20 | (∾) | [+] |
| Cc | 36,8 | (+++) | [+++] | Hm | 15,2 | (—) | [++] | | | | |
| Ns | 15,4 | (—) | [- -] | Mt | 14,8 | (—) | [++] | | | | |

Mittleres Äquivalentvolumen:

I. Gruppe Q Pr Hl Fr um 24
II. Gruppe Or Ab An Kp Lc Ne Z Ge Cord Ru Nc Tn Ap um 20 (Mittelfall)
III. Gruppe Sil Ns Fo Fa Cs En Di Gro Alm Cm Hm Mt Ilm um 16

Nach dem wertvollen Buch von Wilhelm Biltz „Raumchemie der festen Stoffe" (Leipzig 1934) sind in Tabelle 8 für einige wesentliche Mineralverbindungen der Katanormen die Äquivalentvolumina berechnet worden. Für viele wichtige, besonders leukokrate Hauptgemengteile, liegen sie um 20, so dass praktisch die Molekularverteilung auch die Volumverteilung angibt (Gruppe II). Für Quarz und einige seltenere Mineralien sind die Äquivalentvolumina um ca. $^1/_5$ höher (Gruppe I), für manche, besonders melanokrate Mineralien, um $^1/_5$ niedriger (Gruppe III). Bei mittleren bis kleinen Prozentgehalten an Mineralien der Gruppen I und III und Vorherrschen

von II spielt die Korrektur praktisch keine Rolle, bei grösserem Gehalte ist daran zu denken, dass zu Q bis gegen $^1/_5$ des Q-Wertes hinzugezählt, zu Mineralien der Gruppe II bis $^1/_5$ des Molekularwertes weggezählt werden muss, um Volumprozente zu erhalten. Im übrigen zeigt die Tabelle 8, dass volumprozentischer Darstellung gegenüber recht häufig die Korrekturen umgekehrt sind als gegenüber der gewichtsprozentischen Verteilung. Die Molekularnormdarstellung liegt also zu einem grossen Teil zwischen gewichts- und volumprozentischer Normberechnung, sie vermittelt ein völlig zutreffendes Bild von der Mineralverteilung, das durchaus als einziges an Stelle der strengeren Gewichts- bezw. Volumberechnung treten kann. Bedenkt man die Fehlerquellen beim Ausmessen der Dünnschliffe, so wird die Übereinstimmung unter Berücksichtigung der oben erwähnten Bauschalkorrekturen zum Vergleich völlig genügen. Eines aber ist bei karbonatreichen Gesteinen (besonders calcitreichen) zu bedenken. Der Karbonatgehalt erscheint in der Molekulardarstellung beinahe nur halb so gross als Gewichts- bezw. Volumberechnungen verlangen. Doch das ist leicht zu merken, es rechtfertigt nicht eine andere Äquivalenteinheit (z. B. unter Berücksichtigung von C) für die Karbonate anzunehmen, weil ja dadurch ein Hinzufügen der leichtflüchtigen Substanz $CO_2$ ohne Summenänderung verhindert würde.

Gewiss wird die Einführung der Molekularnormen Widerstand finden. Wer damit einmal gearbeitet hat und wer sie für metamorphe Gesteine anwendet, wird die Vorzüge rasch erkennen, ohne Nachteile zu finden. Zum Schlusse mögen daher nur noch zwei weitere Beispiele zeigen, dass auch für Eruptivgesteine diese Berechnungen vollständig die gewichtsprozentischen amerikanischen Normenberechnungen ersetzen können. Dazu wählen wir zwei an $SiO_2$ untersättigte Gesteine, deren Analysen sich in W. E. Tröger, „Spezielle Petrographie der Eruptivgesteine" vorfinden. Nicht die gewöhnliche Norm wird gegeben, sondern eine Variante derselben, wobei, dem Mineralbestand entsprechend, statt Olivin sofort Feldspatoide gebildet werden.

Von einem Lujavrit von Lujavr Urt Kola (Tröger Nr. 421) wurde volumprozentisch bestimmt:

40 % Mikroklinperthit, 26 % Nephelin, 32 % Ägirin, 2 % Akzessorien.

Aus der Analyse und daraus gewonnener Basis lässt sich folgende Variante einer Katamolekularnorm berechnen:

Or + Ab 40,7 %, Ne + Kp 28,2 %, Ac 21,4 %, Wo 2,9 %,
En + Hy 5,2 % = Alkaliaugit 29,5 %, Mt 1,0 %, Ru 0,6 %.

Ein Foyait der Sierra de Monchique (Portugal) (TRÖGER 414) weist gewichtsprozentisch auf:

Orthoklasmikroperthit 67 %, Nephelin ± Hauyn 24 %, Ägirinaugit ± Lepidomelan 7 %, Akzessorien 2 %. Ohne Berücksichtigung von $H_2O$, Cl, S, $P_2O_5$ lässt sich aus der Analyse nachstehende Variante einer Molekularnorm berechnen: Or + Ab + 6 % An = 65,8 %, Ne 29,1 %, Wo + En + Hy = 3,6 %, Mt 1,1 %, Ru 0,4 %. Hier ist z. B. noch an die Beziehung

$$3\ \mathrm{Mt} + 10\,\mathrm{Ab} + 2\,\mathrm{Wo} = 8\,\mathrm{Ac} + 2\,\mathrm{Hy} + 5\,\mathrm{An}$$

zu denken, um zu verstehen, dass Ägirinaugit auftritt. Ausserdem ist stets zu berücksichtigen, dass 2 Wo + 1 Ru = 3 Tn ergeben. Auf alle Fälle ist es somit möglich, bei Übereinstimmung von Analysen- und Dünnschliffmaterial aus den Molekularberechnungen allein bereits ein zutreffendes Bild von der quantitativen Mineralverteilung zu erhalten oder anomale komplexe Mineralzusammensetzungen bezw. falsche Zuordnungen von Analysen und Dünnschliffen zu erkennen.

Tabelle 9.

Aufteilung wichtiger Basismineralien in Gehalte an elektropositiven Elementen

| | | | |
|---|---|---|---|
| 1 Kp | = 1/3 Si + 1/3 K + 1/3 Al | 1 Cm | = 1/3 Fe + 2/3 Cr |
| 1 Ne | = 1/3 Si + 1/3 Na + 1/3 Al | 1 C | = 1 Al |
| 1 Cal | = 1/3 Ca + 2/3 Al | 1 Q | = 1 Si |
| 1 Sp | = 1/3 Mg + 2/3 Al | 1 Cc | = 1 Ca |
| 1 Hz | = 1/3 Fe + 2/3 Al | 1 Hl | = 1 Na |
| 1 Cs | = 1/3 Si + 2/3 Ca | 1 Ru | = 1 Ti |
| 1 Fo | = 1/3 Si + 2/3 Mg | 1 Z | = 1/2 Zr + 1/2 Si |
| 1 Fa | = 1/3 Si + 2/3 Fe | 1 Cp | = 3/5 Ca + 2/5 P |
| 1 Fs | = 1/3 Si + 2/3 Fe''' | 1 Mt | = 1/3 Fe'' + 2/3 Fe''' |
| 1 Ns | = 1/3 Si + 2/3 Na | 1 Nc | = 1 Na |
| 1 Ks | = 1/3 Si + 2/3 K | 1 Th | = 2/3 Na + 1/3 S |
| 1 Fns | = 1/3 Si + 1/3 Na + 1/3 Fe | 1 Fr | = 1 Ca |

Nicht unbeachtet bleiben darf noch ein wichtiger Vorteil der neuen Normberechnung. Es ist in der molekularen Basis- und Normberechnung die Summe der Elemente Si + Al + Fe + Mn + Mg + Ca + Na + K + Ti ev. + P + S (Sulfate) usw. = 100, da ja die Zahl dieser Atome die Prozentzahl einer Verbindung gibt. Man kann daher beispielsweise aus der Basis jederzeit leicht die Atomprozente (ohne Sauerstoff, H, C, F ev. S usw.) berechnen. So sind in x Kp enthalten x/3 K + x/3 Al + x/3 Si-Atome. Wie die Zusammenstellung

vorstehender Tabelle (Tabelle 9) zeigt, spielen Dritteilungen überhaupt die Hauptrolle. Will man statt der Basis die Elementarverteilung in Prozenten ausgedrückt angeben, so genügen sehr einfache Neuzusammenfassungen. Normalerweise sind die Gehalte an den verschiedenen Elementen gegeben durch:

Si = 1/3 (Kp + Ne + Cs + Fo + Fa + Ns + Ks + Fns) + Q + 1/2 Z
Al = 1/3 (Kp + Ne) + 2/3 (Cal + Sp + Hz) + C
Fe''' = 2/3 (Fs + Mt) + 1/3 Fns
Fe'' = 2/3 Fa + 1/3 (Mt + Cm)
Mg = 2/3 Fo + 1/3 Sp
Ca = 2/3 Cs + 1/3 Cal + 1 (Cc + Fr) + eventuell 3/5 Cp bezw. 5/8 Ap
Na = 1/3 (Ne + Fns) + 2/3 (Ns + Th) + 1 (Hl + Nc)
K = 1/3 Kp + 2/3 Ks
Ti = 1 Ru
P = 2/5 Cp bezw. 3/8 Ap
Cr = 2/3 Cm
Zr = 1/2 Z.

Dabei sind in der Zusammenstellung verschiedenorts auch Basismoleküle angegeben, die nicht nebeneinander auftreten, damit bei derartigen Umrechnungen nichts übersehen wird.

Tabelle 10.

Zum Vergleich mit atomprozentualer Gesteinszusammensetzung

Es verlangen je 100 Molekularteile:

| | |
|---|---|
| (Kp + Ne) | = 33,3 (K + Na) + 33,3 Al + 33,3 Si |
| (Or + Ab) | = 20 (K + Na) + 20 Al + 60 Si |
| An | = 20 Ca + 40 Al + 40 Si |
| (Fo + Fa) | = 66,7 (Mg + Fe) + 33,3 Si |
| (Di + En + Hy) | = 50 (Ca + Mg + Fe) + 50 Si |
| Ac | = 25 Na + 25 Fe'' + 50 Si |
| Ho (einf.) | = 46,7 (Ca + Mg + Fe) + 53,3 Si |
| Ms (ideal) | = 14,4 K + 42,8 Al + 42,8 Si |
| Bi (ideal) | = 12,5 K + 37,5 (Mg + Fe'') + 12,5 (Al + Fe''') + 37,5 Si |
| Basaltischer Augit (ungefähr) | = 1,6 Na + 20,3 Ca + 18,8 Mg + 3,1 Fe'' + 12,5 (Al + Fe''' + Ti) + 43,7 Si |
| Omphazit (ungefähr) | = 12,5 Na + 12,5 Ca + 12,5 (Mg + Fe) + 12,5 (Al + Fe''') + 50 Si |

Die Atomzahlen sind nun aber sehr wertvoll für die Berechnung auf beliebige, beispielsweise analytisch untersuchte, komplexe Mineralien. Diese werden ja durch die Aufteilung in Atome und Atom-

gruppen charakterisiert. Anderseits ist oft schon ein Vergleich der atomaren Gesteinszusammensetzung mit der entsprechenden Atomverteilung in gewöhnlichen gesteinsbildenden Mineralien von Interesse. Deshalb finden sich in einer letzten Tabelle (Tabelle 10) einige wenige Daten zusammengestellt, wobei es dem Leser überlassen bleiben muss, diese Tabelle zu ergänzen und auszunützen.

Eingegangen: 15. Oktober 1936.