

**INSTITUTO NACIONAL DE INVESTIGACIONES
GEOLOGICO-MINERAS**

Informe No. 1548

**COMPUTADORES APLICADOS A LA CLASIFICACION QUIMICA
DE LAS ROCAS IGNEAS**

METODOS C. I. P. W. y NIGGLI

Por

Humberto González Iregui
Ingeniero-Geólogo

BOGOTA, AGOSTO DE 1969

53604

CONTENIDO

	<u>Página</u>
RESUMEN	9
CALCULO DE LA NORMA Y CLASIFICACION SEGUN C.I.P.M	9
DISCUSION TEORICA	9
MOLECULAS MINERALES NORMATIVAS	10
CALCULO DE LA NORMA	12
CALCULOS	13
ENTRADA Y SALIDA DE INFORMACION	15
DISEÑO DE SALIDA DE INFORMACION DATOS PARA CLASIFI- CACION	16
DIAGRAMA DE FLUJO PARA PROGRAMA DE CALCULO DE MO- LES DE LOS MINERALES DE LA NORMA	17 a 25
DIAGRAMA DE FLUJO DE PROGRAMA DE CLASIFICACION	26 a 35
CALCULO DE LOS PARAMETROS DE NIGGLI A PARTIR DE LOS POR- CENTAJES POR PESO	36
COMPOSICION NORMATIVA SIMPLIFICADA A PARTIR DE LOS PARAMETROS DE NIGGLI	38
DIAGRAMA DE FLUJO PARA PROGRAMA DE CALCULO DE PA- RAMETROS DE NIGGLI Y NORMA SIMPLIFICADA	40 a 43
BIBLIOGRAFIA	44

RESUMEN

Existen diversos métodos para clasificar las rocas de acuerdo a su análisis químico. Uno de los más empleados ha sido el de C.I.P.W. que da una composición teórica calculada o normativa. Al contrario de la composición actual o modal de la misma.

Esta clasificación nos indicaría una composición teórica del magma que dió origen a la roca actual.

Debido a lo extenso de los cálculos necesario para determinar los constituyentes de la norma y luego los cálculos para clasificar la roca, se hizo necesario dividir en dos partes el programa. En la primera se hacen los cálculos necesarios para determinar el

número de moles de cada uno de los constituyentes de la norma y en la segunda parte, tomando como datos los resultados del primer programa, se hace la clasificación de la roca.

Con el presente trabajo se busca una aplicación más amplia de los computadores a la Geología y además, el simplificar los cálculos necesarios para la clasificación química de las rocas ígneas, hace posible un estudio más detallado de las rocas ígneas buscando las posibilidades económicas de los magmas que dieron origen a dichas rocas, separando las diversas provincias magmáticas del país.

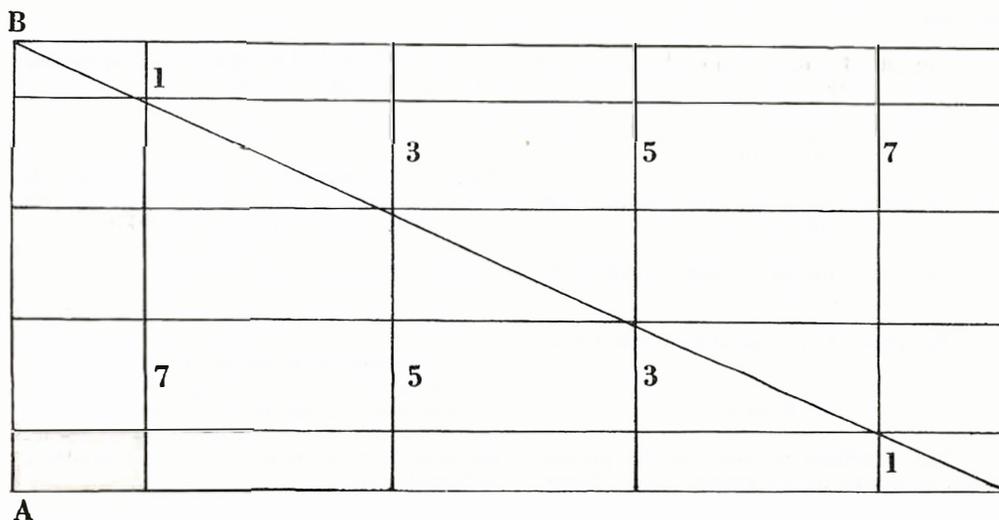
CALCULO DE LA NORMA Y CLASIFICACION SEGUN C.I.P.M.

DISCUSION TEORICA

En el sistema C.I.P.W., las moléculas de minerales hipotéticos se denominan minerales "standard" en contraste con los minerales modales que son los que actualmente se encuentran en la roca. Una lista de los minerales standard se da un poco más adelante. Debido a su composición variable y compleja los piroxenos y anfíboles alumínicos, mica, melilita y granate no se incluyen y en su lugar se usan kaliophilita, acmita, diopsido, hipersteno y otros.

La norma es la composición mineralógica calculada de la roca, en contraste con la composición actual o modo. De acuerdo a las proporciones de los minerales normativos se hacen divisiones arbitrarias. Cinco grupos diferentes (fig. 1), A - B, en los cuales los valores límites para A son: 100 - 87.5 ; 87.5 - 62.5 ; 62.5 - 37.5 ; 37.5 - 12.5 y 12.5 - 0. Las relaciones entre A y B son 7.00, 1.667, 0.600 y 0.143.

FIG. 1.- División de clases en el sistema C.I.P.W.



En todo el sistema los diferentes grupos van numerados y llevan los siguientes prefijos:

1. A extrema sobre B. Prefijo por a A
2. A dominante sobre B. Prefijo do a A
3. A aproximadamente igual a B. No tiene prefijo.

4. B dominante sobre A. Prefijo do a B
5. B extrema sobre A. Prefijo per a B

Como se indica en seguida, las moléculas minerales standard se dividen en dos grupos principales llamados salic y femic respectivamente.

MOLECULAS MINERALES NORMATIVAS

(Grupo Salic)

Cuarzo (Q)	SiO ₂								
Coridón (C)	Al ₂ O ₃								
Zircón (Z)	ZrO ₂	SiO ₂							
Ortoclasa (or)	K ₂ O	Al ₂ O ₃	6SiO ₂						
Albita (ab) F	Na ₂ O	Al ₂ O ₃	6SiO ₂						
Anortita (an)	CaO	Al ₂ O ₃	2SiO ₂						
Leucita (Lc)	K ₂ O	Al ₂ O ₃	AsiO ₂						
Nefelina (ne) L	Na ₂ O	Al ₂ O ₃	2SiO ₂						
Kaliophilite (kp)	K ₂ O	Al ₂ O ₃	2SiO ₂						
Halita (hl)	NaCl								
(Grupo Femic)									
Acrmita (ac)	Na ₂ O	Fe ₂ O ₃	4SiO ₂						
Metasilicato de Sodio (ns)	Na ₂ O	SiO ₂							
Metasilicato de Potasio (ks)	K ₂ O	SiO ₂							
Dióxido (di) P. .	CaO	(Mg,Fe)O	SiO ₂						
Wollastonita (wo)	CaO	SiO ₂							
Hipersteno (hy)	(Mg,Fe)	O	SiO ₂						
Olivino (ol)	2(Mg,Fe)	O	SiO ₂						
O									
Ortosilicato de calcio (cs)	2 (CaO		SiO ₂						
Magnetita (mt)	FeO		Fe ₂ O ₃						
Cromita (cm) H	FeO		Cr ₂ O ₃						
Hematita (hm)	Fe ₂ O ₃								
M									
Ilmenita (il)	FeO		TiO ₂						
Titanita (tn) T	CaOTiO ₂		SiO ₂						
Perovskita (pf)	CaO	TiO ₂							
Rutilo (ru)	TiO ₂								
Apatito (ap)	3(3Ca2P ₂ O ₅)		CaF ₂						
Fluorita (fr) A	CaF ₂								
Pirita (pr)	FeS ₂								

Clases

Las clases se determinan por la relación SALIC-FEMIC. Las cinco clases son las siguientes:

- I Persalic. Relación salic: femic mayor de 7.00
- II Dosalic. Relación salic: femic entre 7.00 y 1.667
- III Salfemic. Relación salic. femic entre 1.667 y 0.60
- IV Dofemic. Relación salic: femic entre 0.60 y 0.143
- V Perfemic. Relación salic: femic menor 0.143

Subclases

Las subclases se basan en las proporciones de partes de los grupos salic y femic.

La mayor parte de las rocas ígneas está dentro de la subclase I, cualquiera que sea la clase.

Salic

- Parte 1. Cuarzo, feldespato, feldespatoides
- Parte 2. Coridón, zircón.

Femic

- Parte 1. Piroxenos, olivino, ortosilicato de calcio, magnetita, hematita, ilmenita, rutilo, titanita, perovskita
- Parte 2. Apatito, fluorita, pirita

Orden

Los órdenes se basan en las proporciones de las moléculas minerales de la parte 1 de cada clase. En las tres primeras clases existen divisiones diferentes teniendo en cuenta las relaciones de cuarzo o feldespatoides a feldespatos (fig. 2).

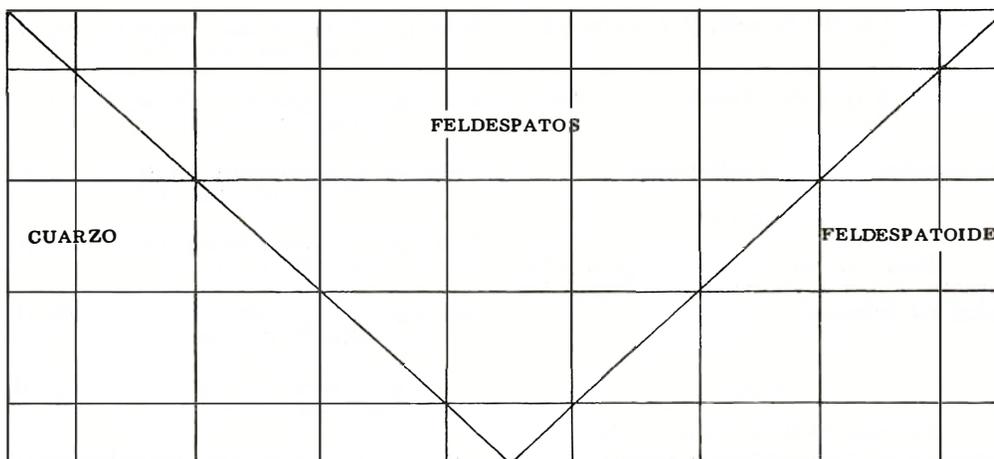


FIG. 2.- Ordenes en las clases I II III del sistema C.I.P.W.

Ordenes en las Clases I, II y III

- Orden 1 (perquaric) Relación Q: F Mayor de 10.0
- Orden 2 (feldoquaric) Relación Q: F Entre 10.0 y 1.5
- Orden 3 (quarfelic) Relación Q: F Entre 1.5 y 0.7
- Orden 4 (quardofelic) Relación Q: F Entre 0.7 y 0.1
- Orden 5 (perfelic) Relación Q: F Menor de 0.1
Relación F: L Mayor de 10
- Orden 6 (lendofelic) Relación F: L Entre 10.0 y 1.5
- Orden 7 (lendofelic) Relación F: L Entre 1.5 y 0.7
- Orden 8 (feldolenic) Relación F: L Entre 0.7 y 0.1
- Orden 9 (perlenic) Relación F: L Menor de 0.1

Ordenes en clases IV y V

- Orden 1 (perpolitic) Relación (P - O): M Mayor de 10.0
- Orden 2 (dopolitic) Relación (P - O): M Entre

10.0 y 1.5

- Orden 3 (polmitic) Relación (P - O): M Entre 1.5 y 0.7
- Orden 4 (domitic) Relación (P - O): M Entre 0.7 y 0.1
- Orden 5 (permitic) Relación (P - O): M Menor de 0.1

En las clases IV y V las órdenes se subdividen en secciones. Las secciones en los órdenes 1, 2 y 3, son:

- Sección 1 (perpiric) Relación P: O Mayor de 10.0
- Sección 2 (dopiric) Relación P: O Mayor de 10.0
- Sección 3 (pirolic) Relación P: O Entre 1.5 y 0.7
- Sección 4 (domolic) Relación P: O Entre 0.7 y 0.1
- Sección 5 (perolic) Relación P: O Menor de 0.1

En el orden 4 las secciones son:

- Sección 1-2 (prepiric) Relación P: O Mayor de 1.5

Sección 3 (pirolic) Relación P: O Entre 1.5 y 0.7

Sección 4-5 (preolic) Relación P: O Menor de 0.7

En el orden 5 no hay subdivisiones.

Sub-órdenes

Rara vez son necesarias, pero ellos pueden formarse de manera análoga a las otras subdivisiones.

Rangos

En estas divisiones las moléculas de los óxidos y las no minerales se comparan. En las clases I, II y III, los órdenes se basan en la relación de los alcalinos, en los minerales del grupo salic y el calcio del mismo grupo.

Rango 1 (peralkalic) Relación $SK_2O + SNa_2O$: $SCaO$ mayor de 10.0

Rango 2 (domalkalic) Relación $(SK_2O + SNa_2O)$: $SCaO$ entre 10.0 y 1.5

Rango 3 (alkalicalcic) Relación $(SK_2O + SNa_2O)$: $SCaO$ entre 1.5 y 0.7

Rango 4 (docalcic) Relación $(SK_2O + SNa_2O)$: $SCaO$ entre 0.7 y 0.1

Rango 5 (percalcic) Relación $(SK_2O + SNa_2O)$: $SCaO$ menor de 0.1

En las clases IV y V los rangos se basan en la relación entre el total de magnesio y hierro ferroso (No incluyendo el Fe_2O_3 calculando como FeO) más los alcalinos del grupo fémico y el calcio del mismo grupo.

Rango 1 (permiric) Relación $(MgO + FeO + FNa_2O)$: $FCaO$ mayor de 10.0

Rango 2 (domiric) Relación $(MgO + FNa_2O)$: $FCaO$ entre 1.5 y 0.7

Rango 3 (calcimintic) Relación $(MgO + FeO + FNa_2O)$: $FCaO$ entre 1.5 y 0.7

Rango 4 (docalcic) Relación $(MgO + FeO + FNa_2O)$: $FCaO$ entre 0.7 y 0.1

Rango 5 (percalcic) Relación $(MgO + FeO + FNa_2O)$: $FCaO$ menor de 0.1

Subrangos

Los subrangos en las clases I, II y III, se basan en la relación entre K_2O y Na_2O del grupo sálico. En los rangos 1, 2 y 3, los subrangos son:

Subrango 1 (perpotasic) Relación SK_2O : SNa_2O mayor de 10.0

Subrango 2 (dopotasic) Relación SK_2O : SNa_2O entre 10.0 y 1.5

Subrango 3 (sodipotasic) Relación SK_2O : SNa_2O entre 1.5 y 0.7

Subrango 4 (dosodic) Relación SK_2O : SNa_2O entre 0.7 y 0.1

Subrango 5 (persodić) Relación SK_2O : SNa_2O menor de 0.1

En el rango 4 de las clases I, II y III, los subrangos son:

Subrango 1-2 (prepotasic) Relación SK_2O : SNa_2O mayor de 1.5

Subrango 3 (sodipotasic) Relación SK_2O : SNa_2O entre 1.5 y 0.7

Subrango 4-5 (presodic) Relación SK_2O : SNa_2O menor de 0.7

En el rango 5 de las mismas clases no hay subdivisiones. En los rangos 1, 2 y 3, de las clases IV y V los subrangos se basan en la relación MgO : $(FeO + FNa_2O)$.

Subrango 1 (permagenesic) Relación MgO : $(FeO + FNa_2O)$ mayor de 10.0

Subrango 2 (domagnesic) Relación MgO : $(FeO + FNa_2O)$ entre 10.0 y 1.5

Subrango 3 (magnesiferros) Relación MgO : $(FeO + FNa_2O)$ entre 1.5 y 0.7

Subrango 4 (doferrous) Relación MgO : $(FeO + FNa_2O)$ entre 0.7 y 0.1

Subrango 5 (porferrous) Relación MgO : $(FeO + FNa_2O)$ menor de 0.1

En el rango 4 de las clases IV y V los subrangos son:

Subrango 1-2 (premagnesic) Relación MgO : $(FeO + FNa_2O)$ mayor de 1.5

Subrango 3 (magnesiferrous) Relación MgO : $(FeO + FNa_2O)$ entre 1.5 y 0.7

Subrango 4-5 (preferrous) Relación MgO : $(FeO + FNa_2O)$ menor de 0.7

CALCULO DE LA NORMA

Ciertos constituyentes entran únicamente en aquellas moléculas que no pueden cambiar. Así ZrO_2 aparece únicamente en Zircón, P_2O_5 en Apatito. Otras constituyentes pueden formar diferentes moléculas

minerales de acuerdo a la cantidad presente de otras constituyentes. Potasio puede formar ortoclasa, leucita o kaliophilita, y sodio formar albita o nefelina según la cantidad disponible de sílice.

La alúmina, siempre entra en la proporción 1: 1 con potasio, sodio y calcio en los minerales del grupo sálico: ortoclasa, leucita, kaliphilita, albita, nefelina y anortita. En estos minerales cualquier mención de potasio, sodio o calcio, indica que se emplean igual número de moléculas de alúmina. Solamente el calcio de la anortita se considera como sálico, el exceso es fémico.

CALCULOS

- 1.) Se calcula el número molecular (cantidad) de cada constituyente dividiendo el porcentaje (en peso) por su peso molecular.
- 2.) Las cantidades de MnO y NiO se suman a la de FeO y las de BaO y SrO a la de CaO.
- 3.) Se toma una cantidad de CaO igual a 3.33 la de P_2O_5 para formar apatito.
Si hay F se toma una cantidad de CaO igual a 3.00 la de P_2O_5 y 0.33 la de F para formar el apatito.
- 3b.) Se toma una cantidad de Na₂O igual a la de CL para formar halita.
- 3c.) Una cantidad de FeO igual a la de S (o del S dado como SO_3) para formar piritita.
- 3d.) Una cantidad de FeO igual a la de Cr_2O_3 para formar cromita.
- 3e.) Una cantidad de FeO igual a la de TiO_2 para formar ilmenita. Si hay exceso de TiO_2 se toma una cantidad igual de CaO para formar titanita provisional, pero solo después de haber tomado el CaO necesarios para formar anortita (regla 4d). Si aún hay exceso de TiO_2 éste se calcula como rutilo.
- 3f.) Se toma una cantidad de CaO igual a la mitad del F restante para formar fluorita.
- 3g.) Se toma todo el ZrO_2 para formar zircón.
- 4a.) Se toma una cantidad de Al_2O_3 igual a la de K_2O para formar ortoclasa provisional.
- 4b.) Si la cantidad presente de K_2O es mayor que la de Al_2O_3 (un exceso muy raro) el exceso de K_2O se calcula como metasilicato de potasio.
- 4c.) Se toma una cantidad de Na_2O igual al exceso de Al_2O_3 sobre K_2O para formar albita provisional. Si la cantidad de Al_2O_3 es insuficiente se sigue la regla 4g.
- 4d.) Si la cantidad de Al_2O_3 es mayor que la de $Na_2O + K_2O$ se toma una cantidad de Al_2O_3 igual al exceso de CaO para formar anortita.
- 4e.) Si hay exceso de Al_2O_3 sobre CaO, el exceso se calcula como coridón.
- 4f.) Si hay exceso de CaO sobre Al_2O_3 , éste se considera como fémico y se usa para formar diópsido y wollastonita (reglas 7a y 7b).
- 4g.) Si en la regla 4c hay exceso de Na_2O sobre Al_2O_3 éste se usa para formar acmita y metasilicato de sodio (reglas 5a, 5b) y en este caso no hay anortita en la norma.
- 5a.) Una cantidad de Fe_2O_3 igual al exceso de Na_2O sobre Al_2O_3 (regla 4g) para formar acmita.
- 5b.) Si hay un exceso de Na_2O sobre Fe_2O_3 (exceso raro), éste se calcula como metasilicato de sodio.
- 5c.) Si, y usualmente sucede, hay un exceso de Fe_2O_3 sobre el Na_2O remanente, el exceso se toma para formar magnetita, tomando igual cantidad del FeO sobrante después de formar piritita, cromita e ilmenita.
- 5d.) Si hay exceso de Fe_2O_3 éste se calcula como hematita.
- 6.) Todo el MgO y FeO remanente después de formar los minerales anteriores (reglas 3d, 3e, 3f y 5c) se suman y se calculan su proporción relativa.
- 7a.) La cantidad remanente de CaO después de formar la anortita (regla 4d) se toma con igual cantidad de MgO+FeO para formar diópsido. La proporción relativa de estos dos debe conservarse.
- 7b.) Si hay exceso de CaO éste se toma para formar wollastonita provisional.
- 7c.) Si hay exceso de (MgO + FeO) en 7a, se forma hipersteno provisional. En seguida se considera la distribución de la sílice.

- 8a.) Se suma la cantidad de SiO_2 usada hasta el momento de acuerdo a las siguientes relaciones: a la de ZrO_2 para zircón (1:1), a la de CaO para titanita (1:1), al exceso de Na_2O para acmita (4:1), al exceso de K_2O y Na_2O para metasilicatos de potasio y sodio (1:1), a la de K_2O para ortoclasa provisional (6:1), a la de CaO para anortita provisional (4:1), a la de $\text{CaO} + (\text{Mg Fe})\text{O}$ para wollastonita provisional (1:1) y la de $(\text{Mg Fe})\text{O}$ para hipersteno (1:1).

Las cantidades de SiO_2 así asignadas se sustentan del total de sílice.

- 8b.) Si hay exceso de SiO_2 éste se calcula como cuarzo.
- 8c.) Si hay deficiencia de sílice, el SiO_2 tomado para el hipersteno se resta de la suma de SiO_2 en 8a; el residuo anterior se resta del total de SiO_2 . Si hay un exceso de SiO_2 mayor que la mitad de $(\text{Mg Fe})\text{O}$ de la regla 7c, se forma hipersteno y olivino de acuerdo a las siguientes ecuaciones:

$$x = 2S - M \quad (1)$$

$$y = M - x \quad (2)$$

x = número de moléculas de hipersteno

y = número de moléculas de olivino

M = cantidad disponible de $(\text{Mg Fe})\text{O}$

S = Cantidad disponible de SiO_2

- 8d.) Si hay deficiencia de SiO_2 en 8c, el SiO_2 tomado para titanita se resta de la suma de SiO_2 en 8a y el CaO y TiO se calculan como perofskita (CaO TiO_2).

- 8e.) La suma de SiO_2 necesaria para formar las moléculas de 8a, se resta del total de SiO_2 , excepto que se ha sustituido hipersteno por olivino y titanita por perofskita y no se incluye albita. Si hay un residuo mayor que dos veces la cantidad de Na_2O empleada en la albita provisional el residuo se distribuye entre albita y nefelina de acuerdo a las ecuaciones 3 y 4. Si el residuo es menor se sigue 8f.

$$x = \frac{S - 2N}{4} \quad (3)$$

$$y = N - y \quad (4)$$

x = número de moléculas de albita.

y = número de moléculas de nefelina.

N = cantidad disponible de Na_2O .

S = cantidad disponible de SiO_2 .

- 8f.) Si en 8e hay déficit de SiO_2 , todo el Na_2O se toma para formar nefelina y el K_2O se distribuye entre ortoclasa y leucita como sigue: En la suma de SiO_2 de 8a se reemplaza hipersteno por olivino, titanita por perofskita y albita por nefelina y no se tiene en cuenta la ortoclasa. Esta suma se resta del SiO_2 total en la roca si hay un exceso mayor que cuatro veces la cantidad de K_2O se forman ortoclasa y leucita. Si es menor se sigue 8g.

$$x = \frac{S - 4k}{2} \quad (5)$$

$$y = k - x \quad (6)$$

x = número de moléculas de ortoclasa

y = número de moléculas de leucita

k = cantidad disponible de K_2O

S = cantidad disponible de SiO_2

- 8g.) Se distribuyen el CaO del diópsido y wollastonita entre éstos y ortosilicato de calcio, y el $(\text{Mg Fe})\text{O}$ del diópsido y olivino según la cantidad disponible de SiO_2 . Hay dos casos posibles:

En el caso más común cuando no hay wollastonita o su cantidad es insuficiente para suplir la deficiencia de SiO_2 . Se forma leucita con todo el K_2O disponible. Se suma el SiO_2 necesario para formar leucita, nefelina, anortita, acmita, olivino (de regla 8c), zircón y metasilicato de sodio, cantidad así usada se resta del total de SiO_2 y el residuo es la sílice disponible.

$$x = \frac{2S - M - C}{2} \quad (7)$$

$$Y = \frac{M - X}{2} \quad (8)$$

$$Z = \frac{C - X}{2} \quad (9)$$

X = número de nuevas moléculas de diópsido.

Y = número de moléculas de olivino.

Z = número de moléculas de ortosilicatos de calcio.

- S = cantidad disponible de SiO₂.
- M = cantidad de (MgFe)O del diópsido provisional.
- C = cantidad de CaO del diópsido y wollastonita provisional.

Si el residuo de sílice calculado es menor que la mitad de la suma de las moléculas CaO, (MgFe)O del diópsido y olivino provisionales se sigue regla 8h.

En el segundo caso, cuando hay suficiente wollastonita provisional, se suma la cantidad de SiO₂ necesario para formar leucita, nefelina, anortita, acmita, diópsido, olivino y wollastonita provisional. Se hace la diferencia entre el SiO₂ total y la suma total. El residuo es el número de moléculas de ortosilicato de calcio, y también la cantidad de SiO₂ que se le debe asignar. La cantidad de CaO que requiere es el doble del residuo. El resto de CaO se toma para formar wollastonita, y el diópsido no se cambia.

8h) Si no hay suficiente SiO₂ para formar diópsido, se forma kaliophilita distribuyendo el K₂O entre éste y leucita. En este caso no existen diópsido y wollastonita en la norma y el CaO empleado en éstos se usa para formar ortosilicato de calcio y el (MgFe)O como olivino. La suma de SiO₂ necesario para nefelina, anortita, acmita, metasilicato de sodio, olivino, ortosilicato de calcio y zircón. Esta suma se sustrae del SiO₂ total y el residuo es la cantidad de SiO₂ disponible y las cantidades de leucita y kaliophilita se calculan de acuerdo a las siguientes ecuaciones:

$$x = \frac{S - 2K}{2} \quad (10)$$

$$y = \frac{4K - S}{2} \quad (11)$$

- x = número de moléculas de leucita.
- y = número de moléculas de kaliophilita.
- S = cantidad disponible de SiO₂.
- K = cantidad de K₂O.

- 9). Habiendo ajustado las cantidades de SiO₂ y todos los otros constituyentes se calculan los porcentajes en peso.
- 10). Se determina la posición del magma en la clasificación calculando la clase, orden, sección, rango y subrango.

ENTRADA Y SALIDA DE INFORMACION

El programa tiene como únicos datos el resultado del análisis químico de la roca.

Estos resultados son los diversos óxidos dados en porcentaje por peso.

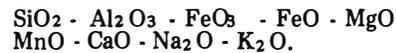
Los óxidos que entran en los cálculos son los siguientes: SiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃, FeO, MgO, MnO, CaO, Na₂O, K₂O, TiO₂, P₂O₅, SO₃, Cl, F, Cr₂O₃, BaO, SrO, ZrO₂, NiO, (en total 19 óxidos).

En la entrada de información del programa se debe seguir el orden anterior y cuando alguno (s) de los óxidos anteriores no exista, entonces se perfora como 0.00.

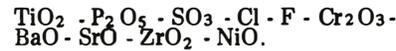
Como el análisis químico por lo general se da con dos cifras decimales como máximo, se utiliza en formato F7.2 Format (F7.2, F7.2, F7.2, F7.2, F7.2, F7.2, F7.2).

Por lo tanto en las tarjetas de datos van los en peso de:

1. Tarjeta:



2. Tarjeta:



Como resultados del primer programa se obtienen los valores moleculares de los constituyentes de la norma. Además como primeras tarjetas de resultados se obtienen dos tarjetas que son necesarias para la clasificación de la roca.

El formato de salida es F10.4 y se tienen las siguientes tarjetas Format (F10.4, F10.4, F10.4, F10.4, F10.4).

1. Tarjeta

	AMGO	CaO	Na ₂ O	FeO	FeO	
2	AMGD	FeOD	AMGH	FeOH	AMGOL	FeOO
3	Q	C	Z	OR	AB	
4	AN	LC	NE	HL	Ac	
5	NS	KS	DI	WO	HI	TN
6	OL	CS	MT	CM	HM	PF
7	IL	RU	AP	FR	PR	KP

En el segundo programa se utilizan como datos los resultados del primer programa utilizando exactamente el mismo formato.

En los resultados de este programa se obtiene primero una serie de tarjetas con los datos utilizados para la clasificación que son

los valores moleculares transformados a porcentajes por peso de los constituyentes de la norma y luego aparece la clasificación definitiva de la roca.

Los formatos de salida del segundo programa son los siguientes:

- a) Formato de impresión de los datos para la clasificación FORMAT (18X, 24H Datos para la clasificación, 1).
- b) Formato para la distribución de los datos para clasificación: FORMAT (F10.4, F10.4, F10.4, F10.4, F10.4, F10.4).
- c) Formato que deja un espacio en blanco entre los datos para la clasificación y la clasificación FORMAT (/).
- d) Formato que imprime resultados para la clasificación FORMAT (15X, 30H resultados para la clasificación, 1).

e) Formato para la clasificación: FORMAT (9X, 42H Clase, orden, sección, rango, subrango).

f) Formato para imprimir variables en punto decimal fijo: FORMAT (9X, 13, 5X, 13, 6X, 13, 6X, 13, 6X, 13, 11)

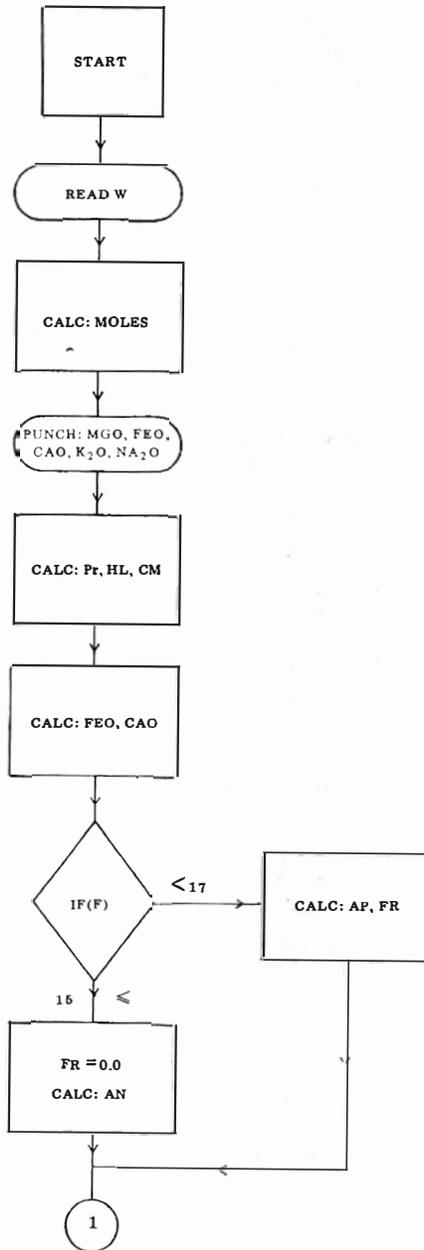
DISEÑO DE SALIDA DE INFORMACION
DATOS PARA CLASIFICACION

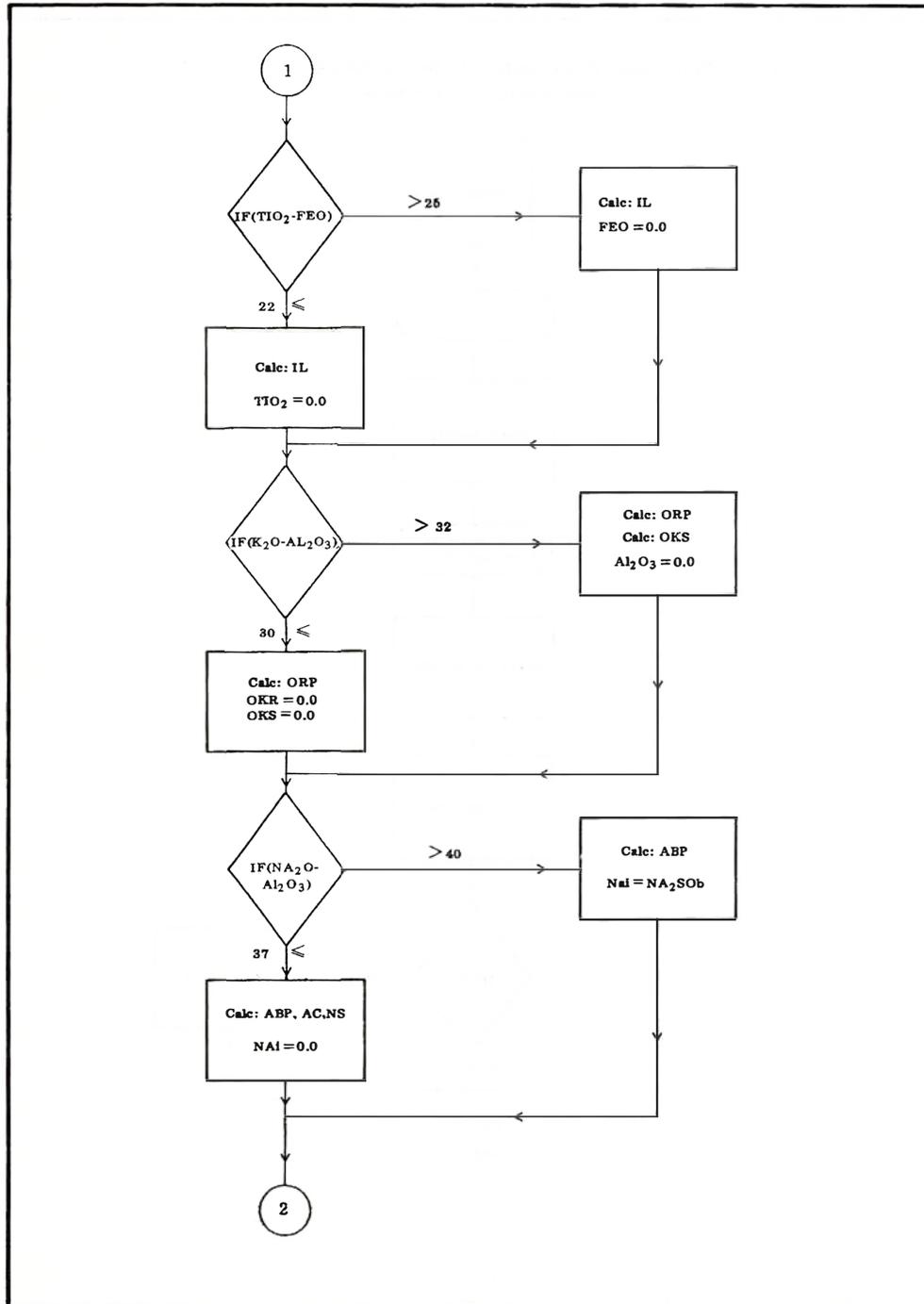
Q	C	Z	OR	AB		
AN	LC	NE	HL	AC		
NS	KS	DC	WO	HI	TN	
OL	CS	MT	CM	HM	PF	
IL	RU	AP	FR	PR	KP	

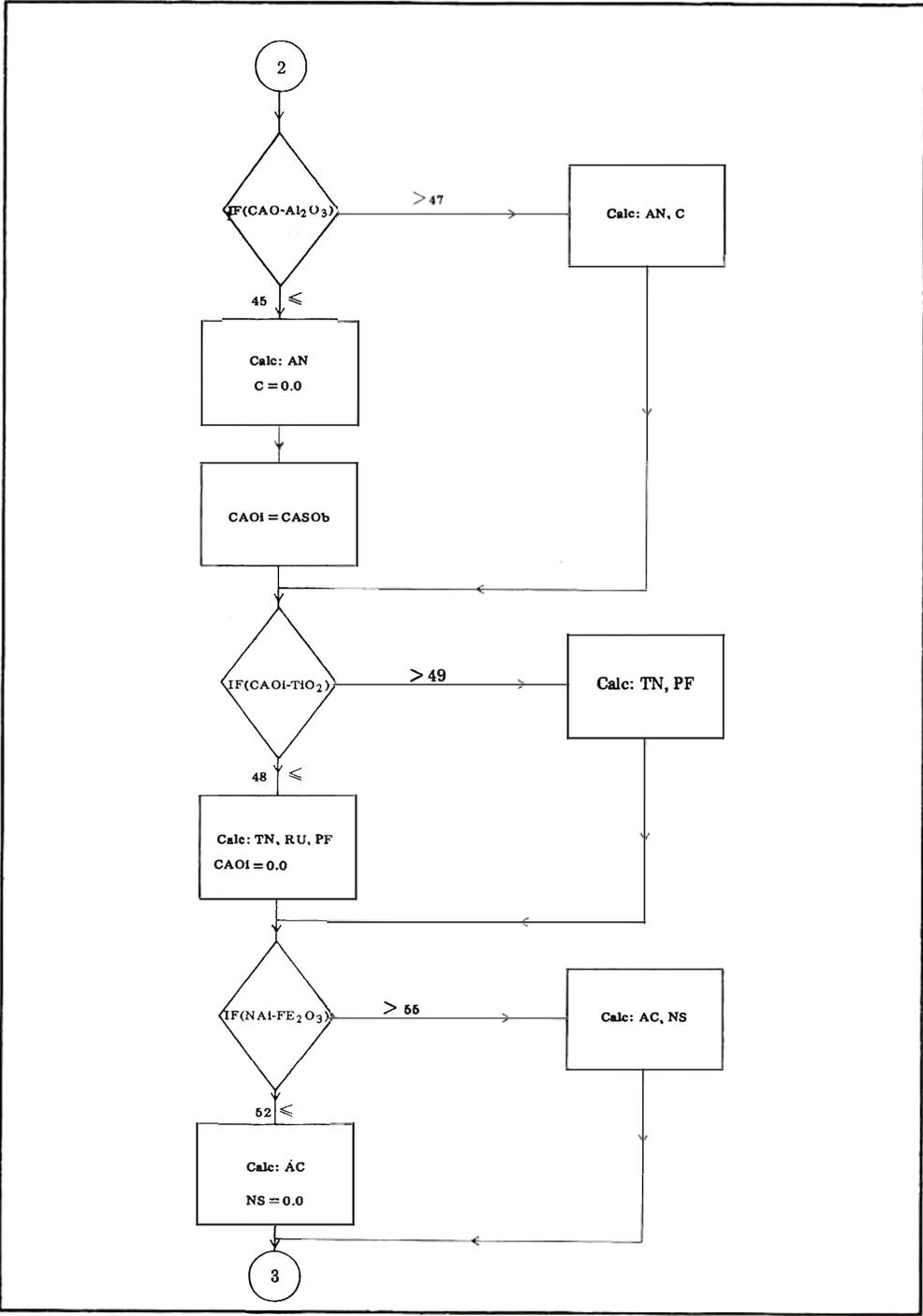
RESULTADOS DE LA CLASIFICACION

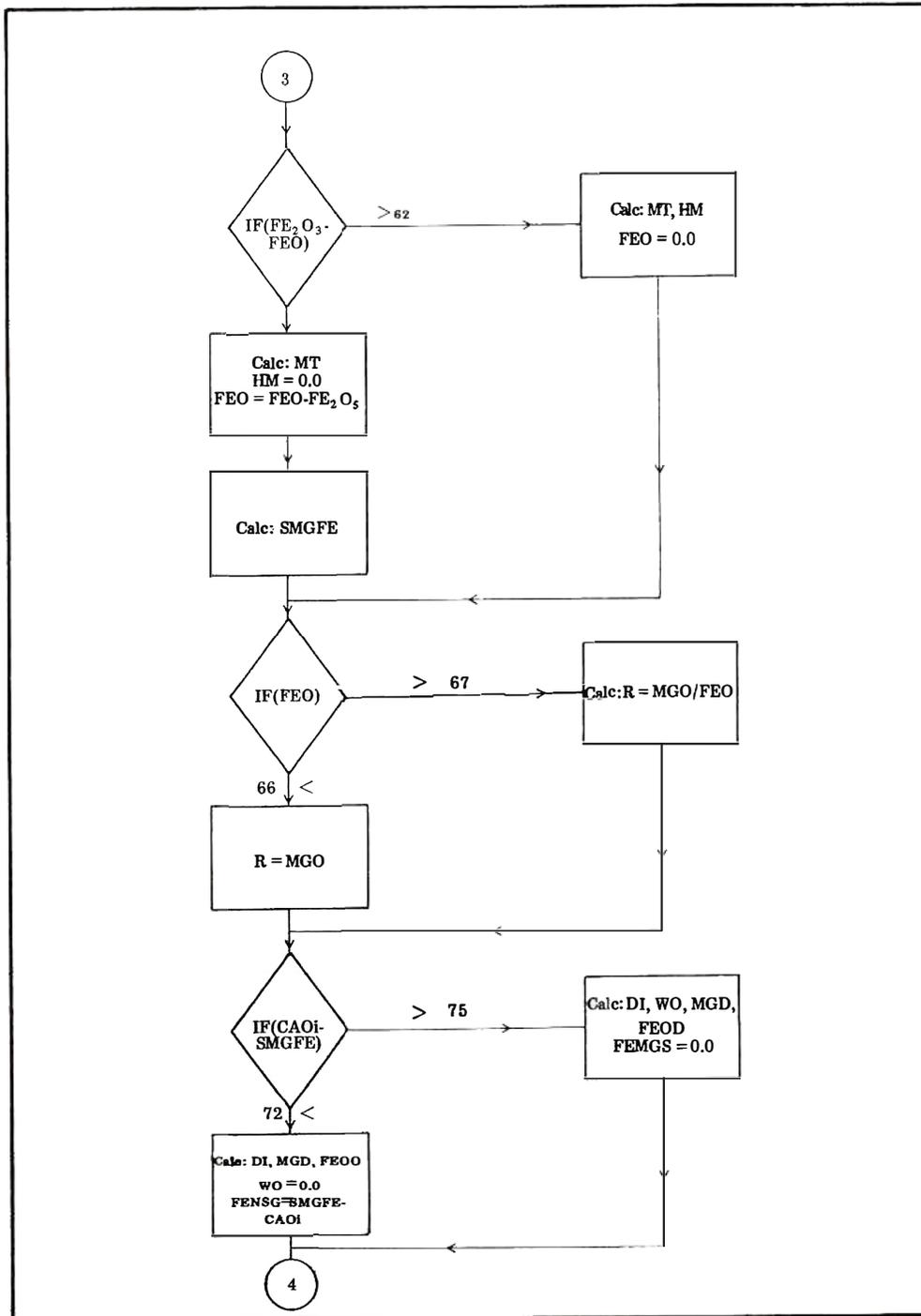
Clase	Orden	Sección	Rango	Subrango
-------	-------	---------	-------	----------

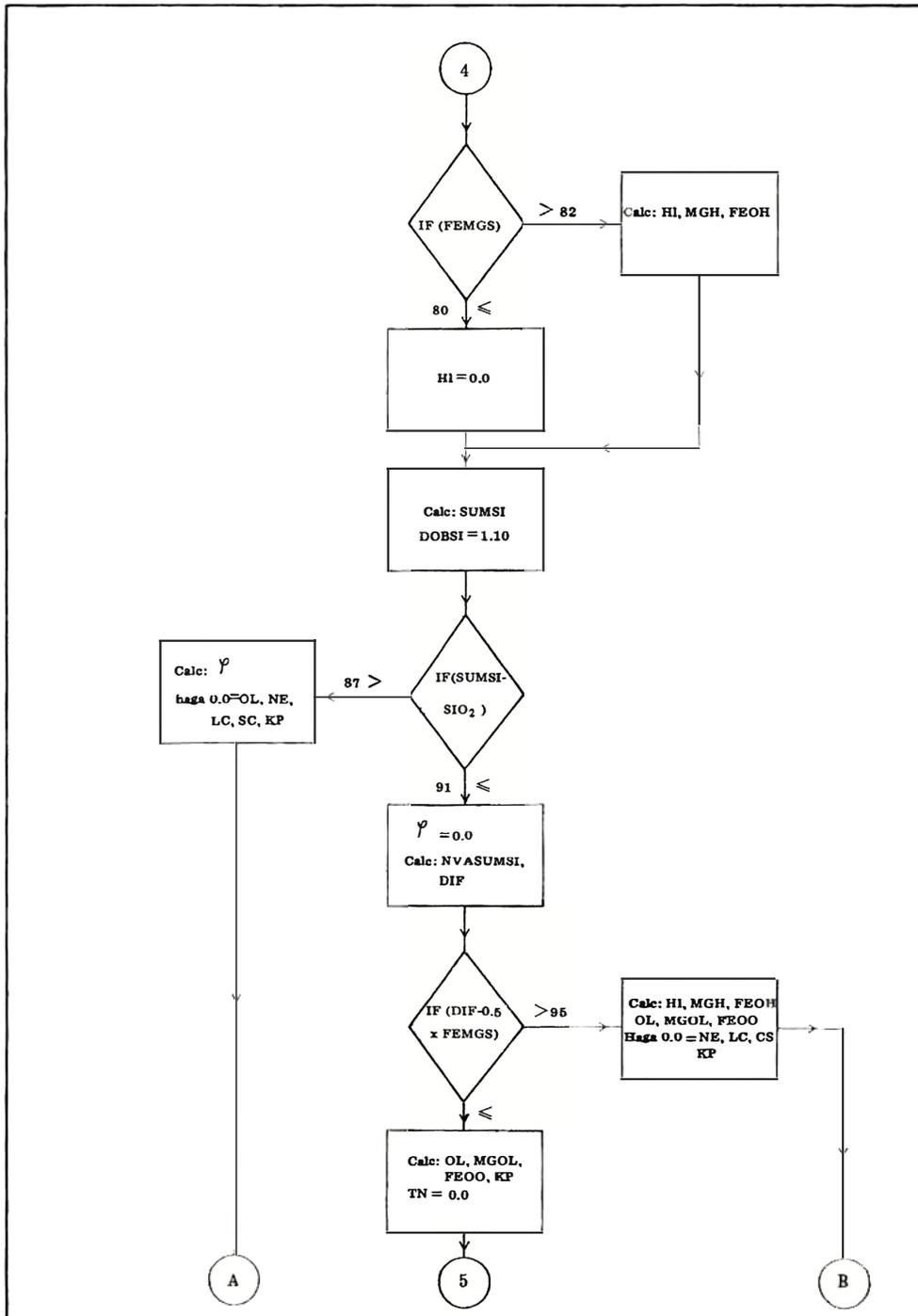
DIAGRAMA DE FLUJO PARA PROGRAMA DE CALCULO DE MOLES DE LOS
MINERALES DE LA NORMA

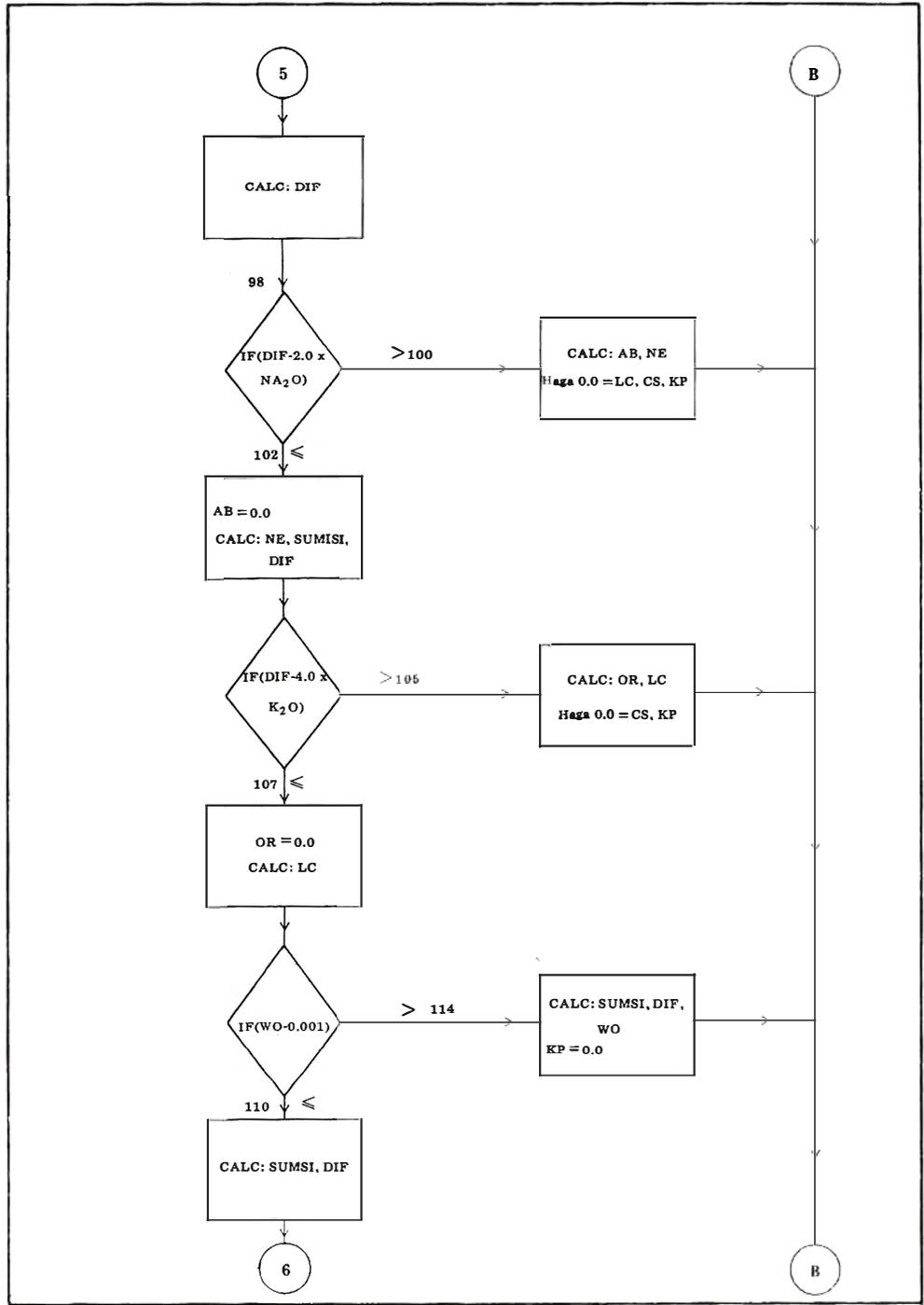


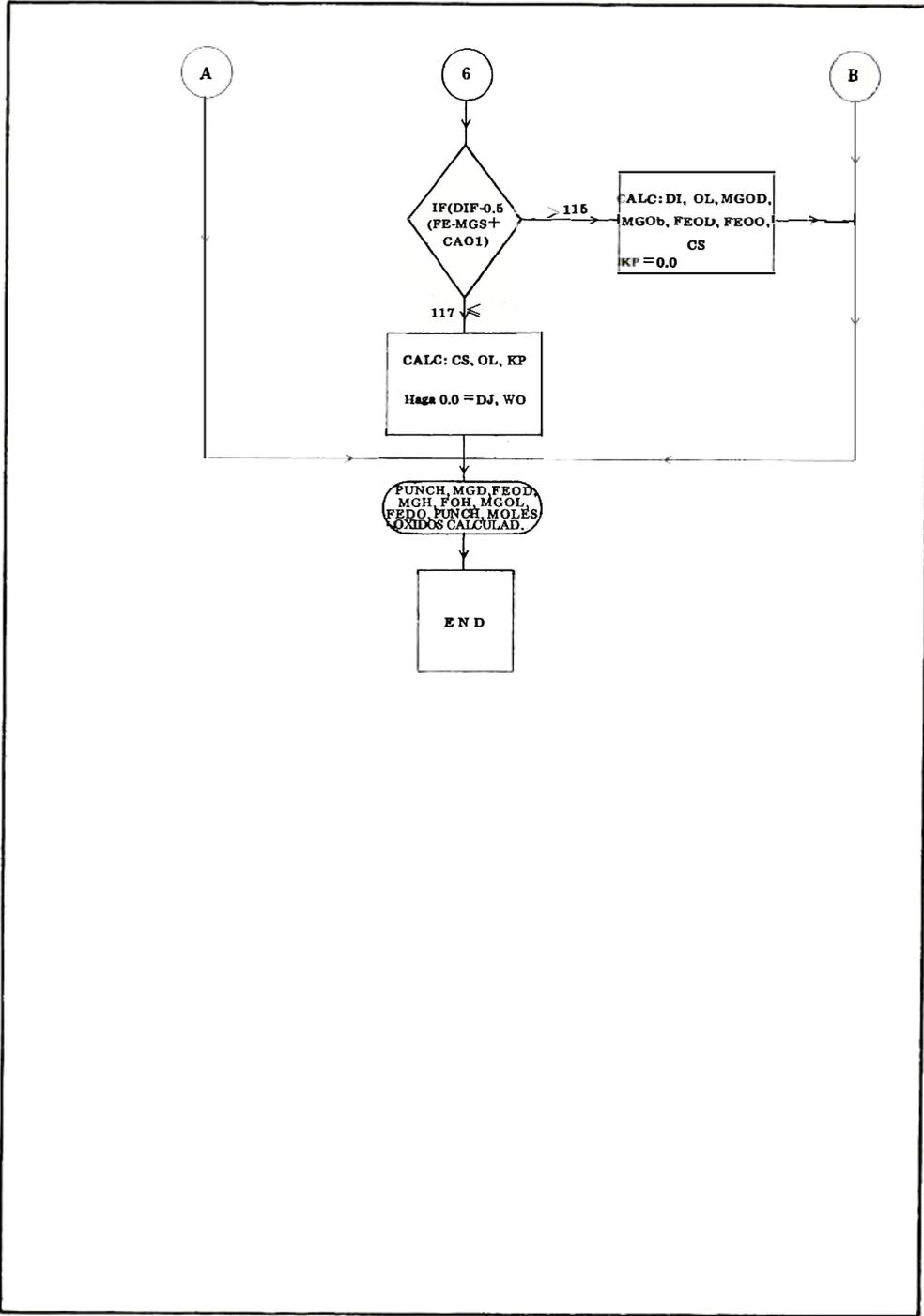












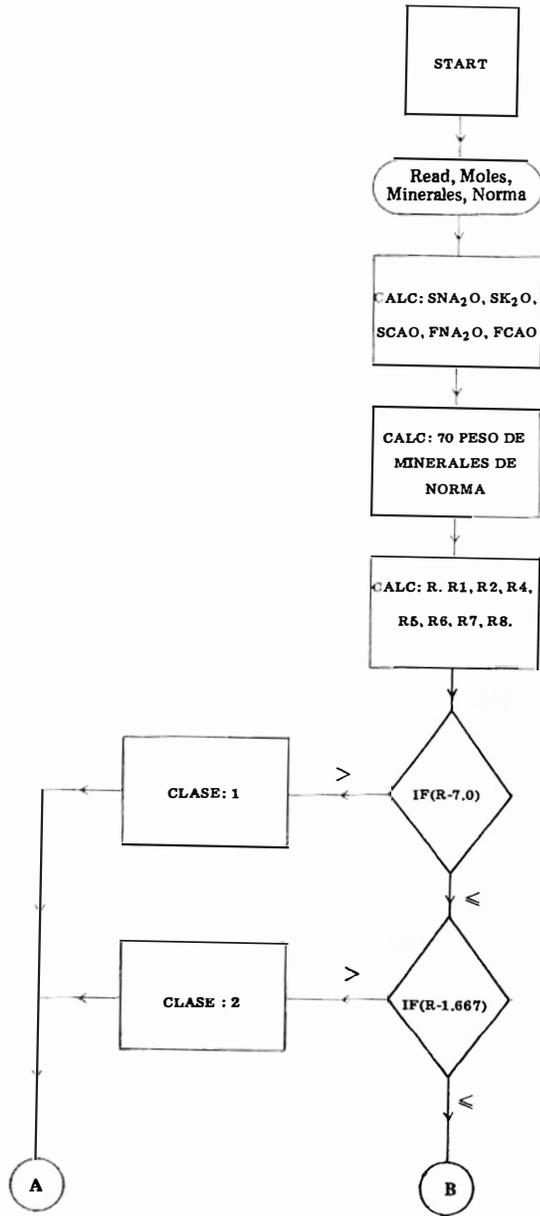
DIMENSION SI (15)

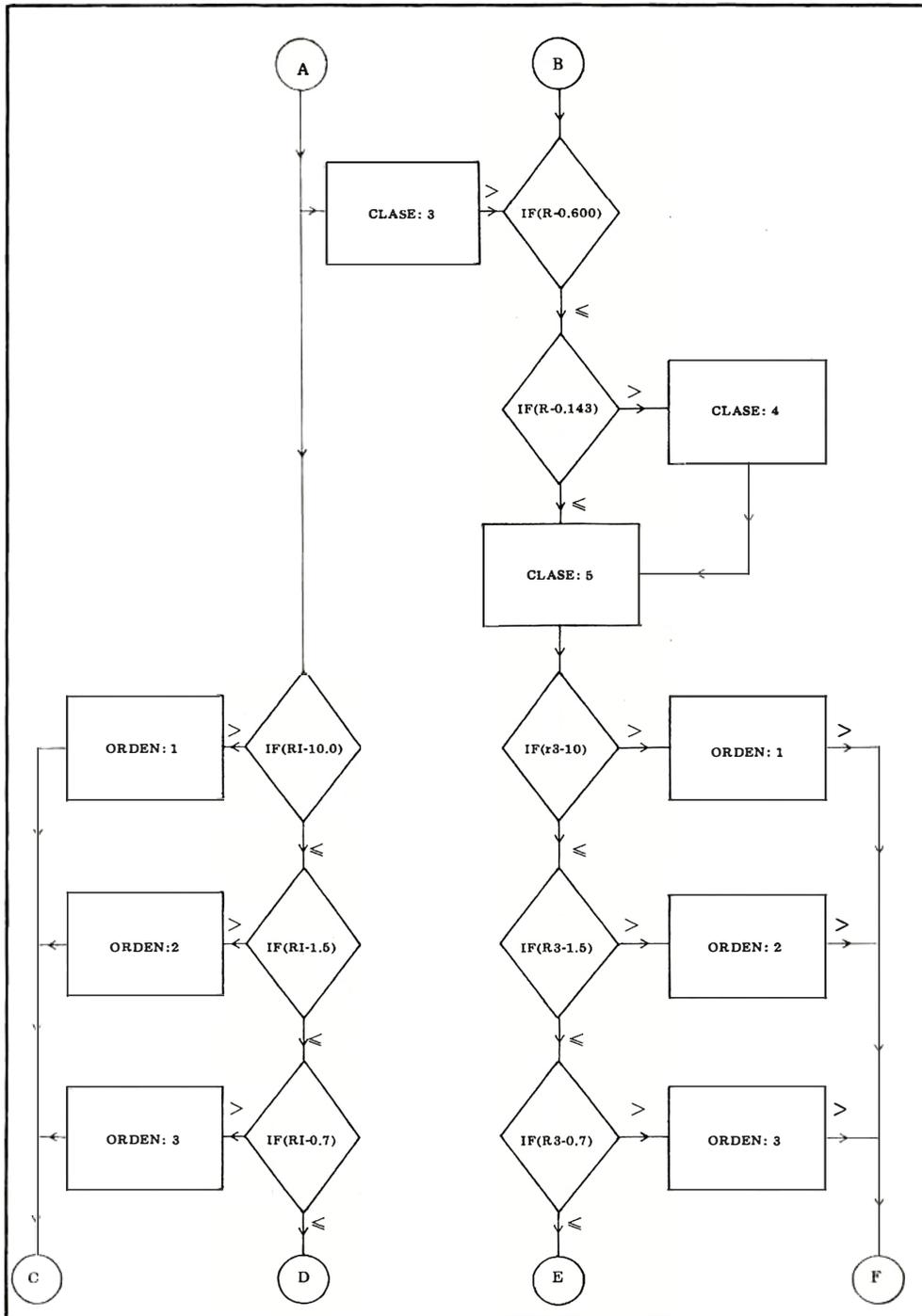
10 READ200, SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , FEO,
 ANGO, AMNO, CAO,
 ANA₂O, AK₂O.
 READ200, TiO_2 , P_2O_5 , SO_3 , CL, F,
 CR₂O₃, BAO, SRO,
 ZRO₂, ANIO
 SiO_2 = $\text{SiO}_2/60.00$
 Al_2O_3 = $\text{Al}_2\text{O}_3/102.20$
 Fe_2O_3 = $\text{Fe}_2\text{O}_3/159.70$
 FEO = $\text{FEO}/71.85$
 AMGO = $\text{AMGO}/40.32$
 CAO = $\text{CAO}/56.09$
 AMNO = $\text{AMNO}/70.93$
 ANA₂O = $\text{ANA}_2\text{O}/62.00$
 AK₂O = $\text{AK}_2\text{O}/94.20$
 PUNCH300, AMGO, CAO, ANA₂O,
 AK₂O, FEO
 TiO_2 = $\text{TiO}_2/80.10$
 P_2O_5 = $\text{P}_2\text{O}_5/142.08$
 PR = $\text{SO}_3/80.07$
 HL = $\text{CL}/35.46$
 F = $\text{F}/19.00$
 CM = $\text{CR}_2\text{O}_3/152.00$
 BAO = $\text{BAO}/153.37$
 SRO = $\text{SRO}/103.63$
 Z = $\text{ZRO}_2/183.00$
 ANIO = $\text{ANIO}/74.71$
 CAO = CAO + BAO + SRO
 FEO = FEO + ANIO + AMNO
 AP = P_2O_5
 IF (F) = 15,15,17
 15 CAO1 = $3.33*\text{P}_2\text{O}_5$
 FR = 0.0
 GO TO 20
 17 CAO1 = $3.00*\text{P}_2\text{O}_5$
 FR = $0.70*F$
 20 CAO = CAO-CAO1
 ANA₂O = ANA₂O-HL
 FEO = $\text{FEO}-0.5*\text{Pr}-\text{CM}$
 IF (TiO_2 - FEO) 22,22,25
 22 AIL = $\text{FEO}-\text{TiO}_2$
 TiO_2 = 0.0
 GO TO 27
 25 AIL = FEO
 FEO = 0.0
 27 SI (1) = Z
 RSI = $\text{SiO}_2-\text{SI} (1)$
 IF ($\text{AK}_2\text{O}-\text{AL}_2\text{O}_3$) 30,30,32
 30 OR = AK₂O
 AKOR = AK₂O
 AKR = 0.0
 Al_2O_3 = $\text{Al}_2\text{O}_3-\text{OR}$
 GO TO 35
 32 OR = Al_2O_3
 AKOR = Al_2O_3
 Al_2O_3 = 0.0
 AKR = AK₂O-OR
 35 ASK = AKR
 AKR = 0.0
 SI (2) = $6.0*\text{OR}$
 SI (3) = AKS
 IF ($\text{ANA}_2\text{O} \cdot \text{AL}_2\text{O}_3$) 37, 40,40
 37 AB = ANA₂O
 ANAR = ANA₂O
 Al_2O_3 = $\text{Al}_2\text{O}_3-\text{AB}$

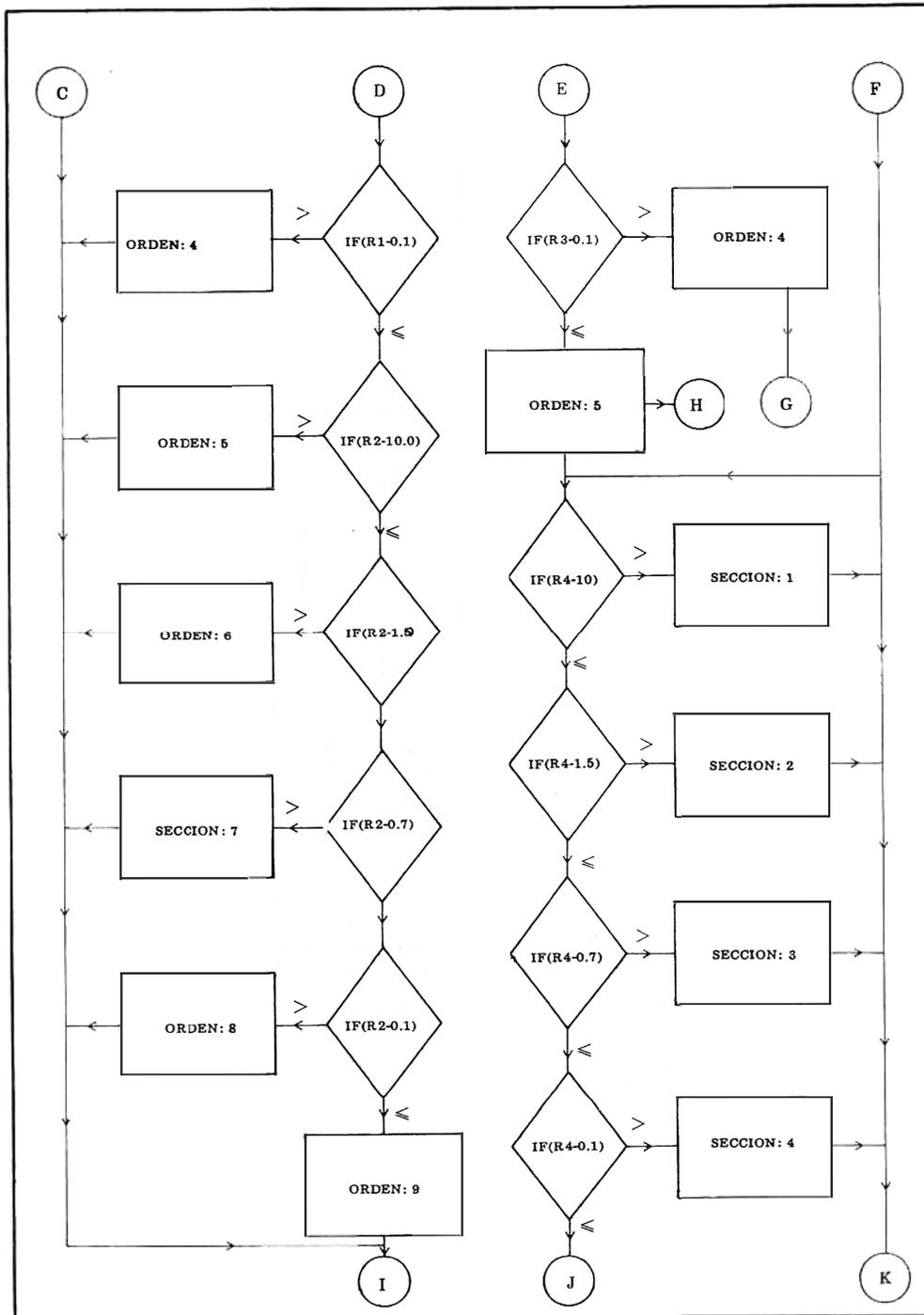
AC = 0.0
 ANS = 0.0
 ANA1 = 0.0
 GO TO 42
 40 AB = Al_2O_3
 ANAB = Al_2O_3
 Al_2O_3 = 0.0
 ANA1 = ANA₂O-AB
 42 SI (4) = $6.0*AB$
 IF ($\text{CAO} - \text{Al}_2\text{O}_3$) 45,47,47
 45 AN = CAO
 Al_2O_3 = $\text{Al}_2\text{O}_3-\text{AN}$
 C = Al_2O_3
 GO TO 50
 47 AN = Al_2O_3
 C = 0.0
 50 SI(5) = $2.0*\text{AN}$
 CAO1 = CAO-AN
 IF($\text{CAO1}-\text{TiO}_2$) 48,48,49
 48 TN = CAO1
 TiO_2 = $\text{TiO}_2-\text{CAO1}$
 CAO1 = 0.0
 RU = TiO_2
 GO TO 51
 49 TN = TiO_2
 CAO1 = $\text{CAO1} - \text{TiO}_2$
 RU = 0.0
 51 PF = 0.0
 IF (ANA1- Fe_2O_3) 52,55,55
 52 AC = ANA1
 ANS = 0.0
 GO TO 57
 55 AC = Fe_2O_3
 ANS = ANA1-AC
 57 SI(6) = $4.0*AC$
 SI(7) = ANS
 Fe_2O_3 = $\text{Fe}_2\text{O}_3-\text{AC}$
 IF($\text{FE}_2\text{O}_3-\text{FEO}$) 60,62,62
 60 AMT = Fe_2O_3
 HM = 0.0
 FEO = $\text{FEO}-\text{Fe}_2\text{O}_3$
 GO TO 65
 62 AMT = FEO
 FEO = 0.0
 HM = $\text{Fe}_2\text{O}_3-\text{AMT}$
 65 SMGFEE = AMGO X FEO
 IF (FEO) 66,66,67
 66 R = AMGO
 GO TO 70
 67 R = AMGO/FEO
 70 IF (CAO1-SMGFE) 72,75,75
 72 DI = CAO1
 WO = 0.0
 AMGI = CAO1*AMGO/SMGFEE
 FEO1 = CAO1*FEO/SMGFEE
 AMGD = AMG1
 FEOD = FEO1
 FEMGS = SMGFEE-CAO1
 GO TO 77
 75 DI = SMGFEE
 WO = CAO1-DI
 AMGD = AMGO
 FEOD = FEO
 FEMGS = 0.0
 SMF = AMGD + FEOD
 77 SI(8) = $2.0*DI$

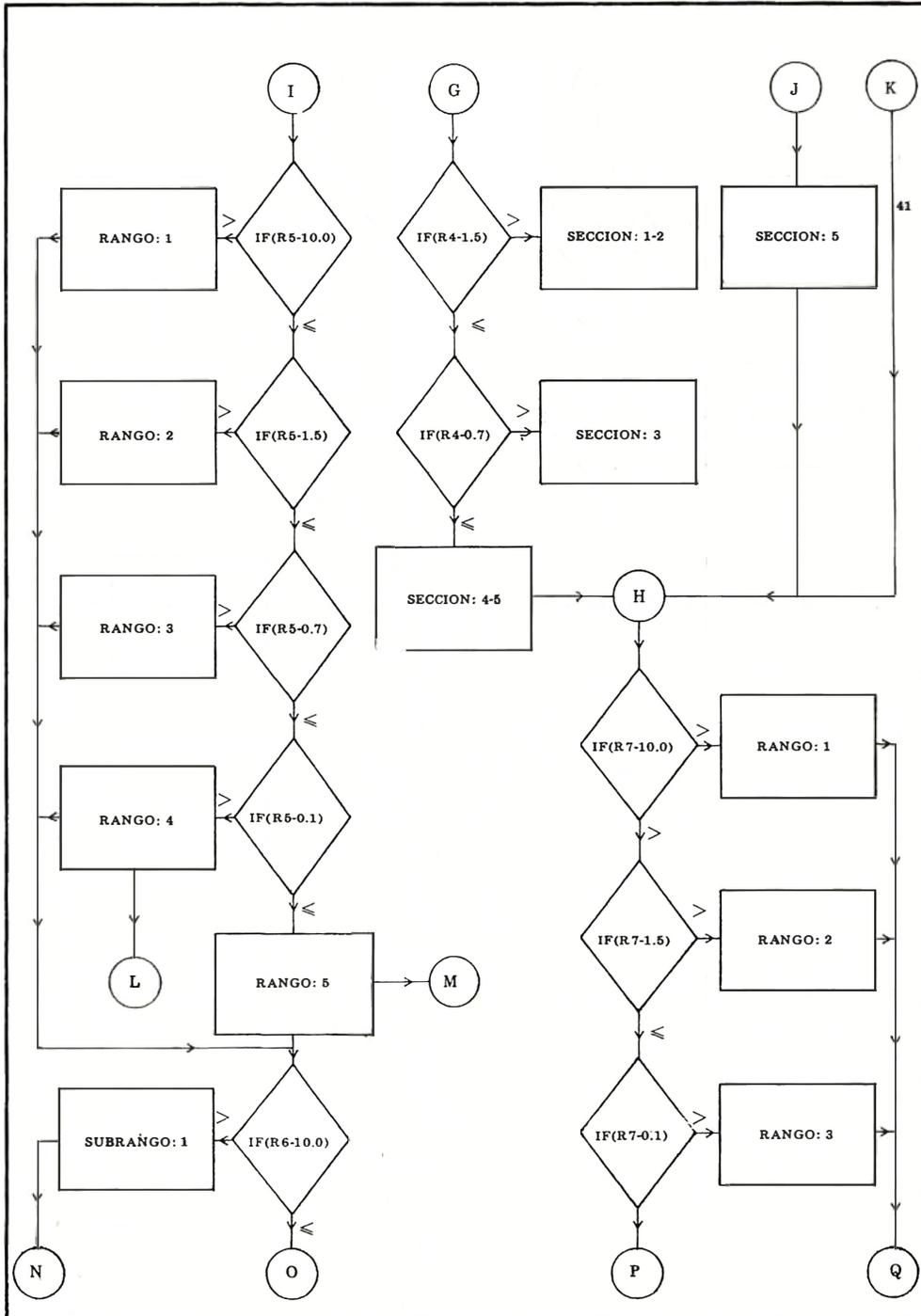
	SI(9)	=	WO		DIF	=	SIO ₂ -SUMSI	
	IF(FEMGS)	=	80.,80,82		IF (DIF-0.0* AK ₂ O)	=	107, 105, 105	
80	HI	=	0.0	105	OR	=	(DIF-4.0* AK ₂ O)* 0.5	
	AMCH	=	0.0		ALC	=	AK ₂ O-OR	
	FEOH	=	0.0		GO TO	=	30	
	SI(10)	=	0.0		OR	=	0.0	
	GO TO	=	83		ALC	=	AK ₂ O	
82	HI	=	FEMGS		SI (2)	=	0.0	
	SI (10)	=	HI		SI (13)	=	4.0* AK ₂ O	
	AMG2	=	FEO-FEO1		IF (WO-0.001)	=	110, 110, 114	
	AMGH	=	AMG2	110	SUMSI	=	SI (13)+SI (12)+SI (5) +SI (6)+SI (11)+SI (1) +SI (3).	
	FEOH	=	FEO ₂		DIFf	=	SIO ₂ -SUMSI	
	SUMSI	=	0.0		IF (DIF-0.5*FEMGS-0.5*CAO1)	=	117, 117, 113	
	DO-851	=	1,10		DI	=	(2.0*DIF-SMF-CAO1)*0.5	
85	SUMSI	=	SUMSI + SI (1)		OL	=	(SMGF-FE-DI)* 0.5	
	IF (SUMSI-SIO ₂)	=	87,87,91		CS	=	(CAO1-DI)* 0.5	
87	Q	=	SIO ₂ -SUMSI-IN		AMGD	=	DI*AMGO/SMGF	
	OL	=	0.0		FEOD	=	DI*FEO/SMGF	
	AMGOL	=	0.0		AMGOL	=	AMGO-AMGD	
	FEOD	=	0.0		FEOD	=	FEO-FEOD	
88	ANE	=	0.0		GO TO	=	901	
89	ALC	=	0.0	114	SUMSI	=	SI (13)+SI (5)+SI (6) +SI (8)+SI (9)+SI (11) +SI (12)	
90	CS	=	0.0		DIF	=	SUMSI-SIO ₂	
901	AKP	=	0.0		CS	=	2.0* DIF	
	GO TO	=	120		WO	=	WO-CS	
91	SUMSI	=	SUMSI-SI (10)		IF (WO)	=	115, 115, 901	
	Q	=	0.0	115	WO	=	0.0	
	SIF	=	SIO ₂ -SIMSI		GO TO	=	901	
	IF (DIF-0.5*FEMGS)	=	92, 92, 95	117	DI	=	0.0	
92	HI	=	0.0		AMGD	=	0.0	
	OL	=	FEMGS		FEOD	=	0.0	
	SI (1)	=	0.5* FEMGS		WO	=	0.0	
	AMGOL	=	AMGH		CS	=	CAO1	
	FEOD	=	FEOH		SI (14)	=	CS* 0.5	
	AMGH	=	0.0		OL	=	SMGF	
	FEOH	=	0.0		AMGOL	=	AMGO	
	PF	=	TN		FEOD	=	FEO	
	TN	=	0.0		SI (11)	=	0.5* SMGF	
	SUMSI	=	SUMSI + SI (11)- SI (4).		SUMSI	=	SI (1)+SI (5)+SI (6)+SI (7)+SI (11)+SI (12)+ SI (14)	
	GO TO	=	98		DIF	=	SIO ₂ -SUMSI	
95	HI	=	2.0* DIF-FEMGS		ALC	=	(DIF-2.0*AK ₂ O)*0.5	
	OL	=	FEMGS-HI		AKP	=	(4.0*AK ₂ O-DIF)* 0.5	
	IF (FEMGS-0.0001)	=	96, 96, 97	120	PUNCH300	=	AMGD,FEOD, AMGH, FEOD,AMGOL,FEOD	
96	AMGH	=	AMG ₂ *0.5		PUNCH300	=	Q, C, Z, OR, AB	
	FEOD	=	FEO ₂ *0.5		PUNCH300	=	AN, ALC, ANE, HL, AC	
	AMGOL	=	AMGH		PUNCH300	=	ANS, AKS, DI, WO, HI, TN	
	FEOD	=	FEOH		PUNCH300	=	OL, CS, AMT, CM, HM, PF	
	GO TO	=	88		PUNCH300	=	AIL, RU, AP, FR, PR, AKP	
97	AMG ₃	=	HI* AMG ₂ /FEMGS.		GO TO	=	10	
	FEOD	=	HI* FEO ₂ /FEMGS	200	FORMAT	=	(F7.2, F7.2, F7.2, F7.2, F7.2, F7.2, F7.2, F7.2, F7.2, F7.2)	
	AMG ₄	=	AMG ₂ -AMG ₃		300	FORMAT	=	(F10.4, F10.4, F10.4, F10.4, F10.4, F10.4)
	FEOD	=	FEO ₂ -FEO ₃					
	AMGH	=	AMG ₃					
	FEOH	=	FEO ₃					
	AMGOL	=	AMG ₄					
	FEOD	=	FEO ₄					
	GO TO	=	88					
98	DIF	=	SIO ₂ -SUMSI					
	IF (DIF-2.0* ANAB)	=	102, 100, 100					
100	AB	=	DIF-2.0* ANAB)* 0.25					
	ANE	=	ANAB-AB					
	GO TO	=	89					
102	AB	=	0.0					
	ANE	=	ANAB					
	SI (4)	=	0.0					
	SI (12)	=	2.0* ANAB					
	SUMSI	=	SUMSI + SI (12)-SI (2).					

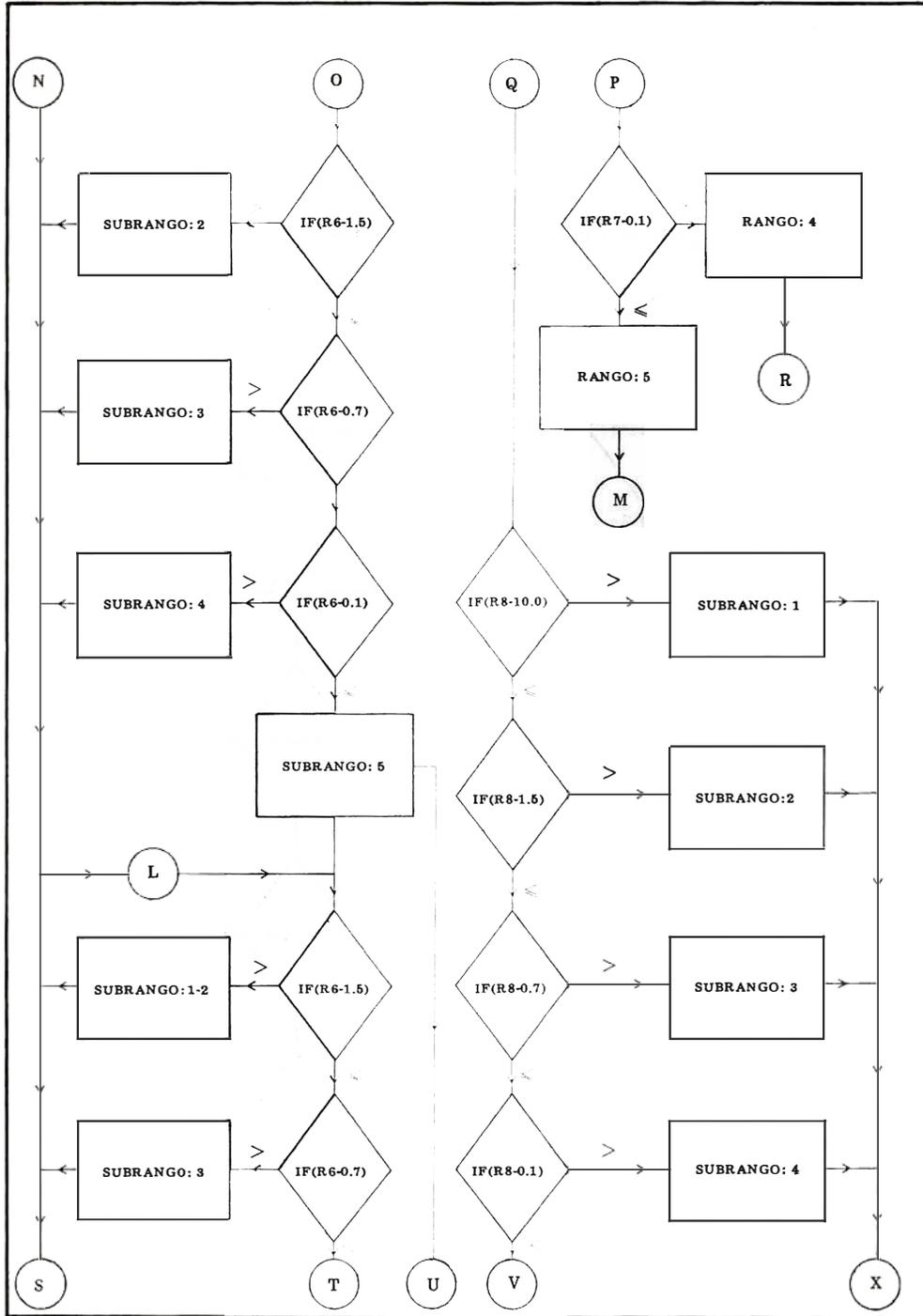
DIAGRAMA DE FLUJO DE PROGRAMA DE CLASIFICACION

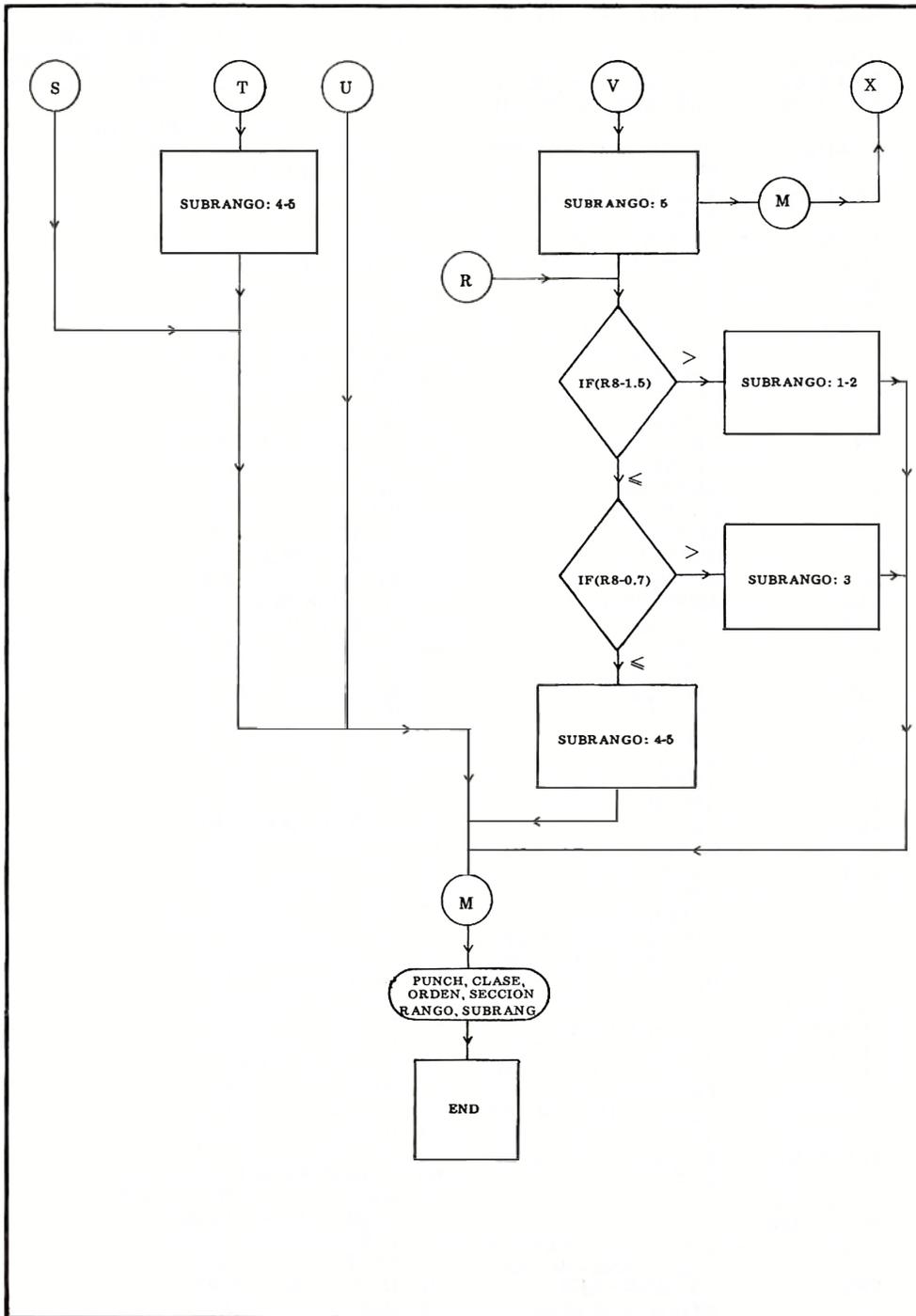












5	READ300,	AMGO, CAO, ANA20,	P	= AC+ ANS +AKS+DI+
		AK20, FEO		WO + HI
	READ300,	R1, R2, R3, R4, R5,	O	= OL + CS
		R6	H	= AMT + CM + HM
	READ300,	Q, C, Z, OR, AB	T	= AIL + RU + PF + TN
	READ300,	AN, ALC, ANE, HL, AC	AM	= CM + HM + AIL + PF
	READ300,	ANS, AKS, DI, WO, HL,		+ TN
		IN	A	= AP + FR + DR
	READ300,	OL, CS, AMT, CM, HM,	R	= SAL/FEM
		PF	IF (R-7.0) 10,10,12	
	READ300,	AIL, RU, AP, FR, PR,	12	ICK = 1
		AKP	ISL = 0	
	SNA20	= AB + HL + ANE	GO TO = 24	
	SK20	= OR + AKP + ALC	10	IF (R-1.667) 14,14,16
	SCAO	= AN	16	ICL = 2
	FNA20	= AC + ANS	ISC = 0	
	FCAO	= DI + WO + CS + 3.0*	GO TO = 24	
		AP + TN + PF	14	IF (R-0.600)20,20,18
	Q	= Q*60.0	18	ICL = 3
	C	= C*102.0	ISC = 0	
	Z	= Z*83.0	GO TO = 24	
	OR	= OR*556.0	20	IF (R-0.143)22,22,25
	AB	= AB*524.0	25	ICL = 4
	AN	= AN*278.0	GO TO = 60	
	ALC	= ALC*436.0	22	ICL = 5
	ANE	= ANE*284.0	GO TO = 60	
	HL	= HL*117.0	24	IF (F)28,28,27
	AC	= AC*462.0	27	R1 = Q/F
	ANS	= ANS*122.0	IF (RI)38,38,29	
	AKS	= AKS*154.0	29	IF (RI-10.0)26,26,28
	WO	= WO*116.0	28	IOR = 1
	CS	= CS*172.0	GO TO = 110	
	AMT	= AMT*232.0	26	IF (RI-1.5)30,30,32
	CM	= CM*224.0	32	IOR = 2
	HM	= HM*160.0	GO TO = 110	
	AIL	= AIL*152.0	30	IF (1-0.7)34,34,36
	RU	= RU*80.0	36	IOR = 3
	AP	= AP*336.0	GO TO = 110	
	FR	= FR*78.0	34	IF (RI-0.1)44,44,40
	PR	= PR*120.0	40	IOR = 4
	AKP	= AKP*317.0	GO TO = 110	
	TN	= TN*196.0	38	IF (AL)44,44,41
	PF	= PF*136.0	41	R2 = F/AL
	DI	= R1*216.0 + R2*248.0	IF (R2-10.0)42,42,44	
	HI	= R3*100.0 + R4*132.0	44	IOR = 5
	OL	= R5*66.0 + R6*114.0	GO TO = 110	
	PUNCH250		42	IF (R2-1.5)46,46,48
	PUNCH300,	Q, C, Z, OR, AB	48	IOR = 6
		AN, ALC, ANE, HL, AC	GO TO = 110	
	PUNCH300,	ANS, AKS, DI, WO, HI,	46	IF (R2-0.1)54,54,56
		TN	56	IOR = 8
	PUNCH300,	OL, CS, AMT, CM, HM,	GO TO = 110	
		PF	54	IOR = 9
	PUNCH300,	AIL, RU, AP, FR, PR,	GO TO = 110	
		AKP	60	IF (AM) 64,64,63
	PUNCH350		63	R3 = (D+0) /AM
	PUNCH350		IF (R3010.0)62,62,64	
	SAL	= Q +C+Z+OR+AB+AN	64	IOR = 1
		+ALC+ANE+HL+AKP	GO TO = 80	
	FEM	= CA+ANS+AKS+ DI +	62	IF (R3-1.5)66,66,68
		WO+MI+OL+CS+	68	IOR = 2
		AMT+HM+AIL+RU+	GO TO = 80	
		AP+FR+PR+PF+TN	66	IF (R3-0.7)70,70,72
	F	= OR+AB+AN	72	IOR = 3
	AL	= ALC+ANE+AKP	70	IF (R3-0.1) 74,74,76

```

76 IOR          = 4
   GO TO       98
74 IOR          = 5
   GO TO      128
80 IF (0)84,84,83
83 R4          = R/O
   IF (R4-10.0)82,82,84
84 ISC         = 1
   GO TO      128
82 IF (R4-1.5) 86,86,88
88 ISC         = 2
   GO TO      128
86 IF (R4-0.7) 90,90,92
92 ISC         = 3
   GO TO      128
90 IF (R4-0.1) 94,94,96
96 ISC         = 4
   GO TO      128
94 ISC         = 5
   GO TO      128
98 IF (R4-1.5) 100,100,102
102 ISC        = 12
   GO TO      128
   IF (R4-0.7) 104,104,106
106 ISC        = 3
   GO TO      128
104 ISC        = 45
   GO TO      128
110 IF (SCAO) 114,114,113
113 R5         = (SNA20+SK20)/SCAO
   IF (R5-10.0) 112,112,114
114 IRN        = 1
   GO TO      146
112 IF (R5-1.5) 116,116,118
118 IRN        = 2
   GO TO      146
116 IF (R5-0.7) 120,120,122
122 IRN        = 3
   GO TO      146
120 IF (R5-0.1) 124,124,126
126 IRN        = 4
   GO TO      170
   IRN        = 5
   GO TO      210
128 IF (FCAO) 132,132,131
131 R7         = (AMGO+FEO+FNA20)
   IF (R7-10.0) 130,130,132
132 IRN        = 1
   GO TO      180
130 IF (R7-1.5) 134,134,136
136 IRN        = 2
   GO TO      180
134 IF (R7-0.7) 138,138,140
140 IRN        = 3
   GO TO      180
138 IF (R7-0.1) 142,142,144
144 IRN        = 4
   GO TO      201
142 IRN        = 5
   GO TO      210
146 IF (SNA20) 150,150,149
149 R6         = SK20/SNA20
   IF (R6-10.0) 148,148,150
150 ISB        = 1
   GO TO      210
148 IF (R6-0.7)158,152,154
154 ISB        = 3
   GO TO      210
152 IF (R6-0.7) 156,156,158
158 ISB        = 3
   GO TO      210
156 IF (R6-0.1) 160,160,162
162 ISB        = 4
   GO TO      210
160 ISB        = 5
   GO TO      210
170 IF (R6-1.5) 172, 172,174
174 ISB        = 12
   GO TO      210
172 IF (R6-0.7) 176,176,178
178 ISB        = 3
   GO TO      210
176 ISB        = 45
   GO TO      210
   IF (FEO + FNA20) 184,184,183
183 R8         = AMGO/ (FEO + FNA20)
   IF (R8-10.0) 182,182,184
184 ISB        = 1
   GO TO      210
182 IF (R8-1.5) 186,186,188
188 ISB        = 2
   GO TO      210
186 IF (R8-0.7) 190,190,192
192 ISB        = 3
   GO TO      210
190 IF (R8-0.1) 194,194,196
196 ISB        = 4
   GO TO      210
194 ISB        = 5
   GO TO      210
201 IF (R8-1.5) 202,202,204
204 ISB        = 12
   GO TO      210
   IF (R8-0.7) 206,206,208
208 ISB        = 3
   GO TO      210
206 ISB        = 45
210 PUNCH400
   PUNCH450
   PUNCH500, ICL, IOR, ISC, IRN,ISB
   GO TO      05
250 FORMAT (18X, 24H DATOS PARA
   CLASIFICACION, /)
300 FORMAT (F10.4, F10.4, F10.4, F10.4,
   F10.4, F10.4)
350 FORMAT (/)
400 FORMAT (15X, 30H RESULTADOS DE
   LA CLASIFICACION, /)
450 FORMAT (9X, 42H CLASE ORDEN
   SECCION RANGO SUB-RANGO)
500 FORMAT (9X, 13.5X,13, 6X,13, 6X,13
   6X,13, //)

```

EJEMPLOS:

M U E S T R A S

Oxidos	1	2	3	4
SiO ₂	72.67	46.74	54.08	40.25
Al ₂ O ₃	13.44	16.63	9.49	2.74
Fe ₂ O ₃	1.06	2.17	3.19	10.83
FeO	1.56	10.60	1.03	7.38
MgO	0.23	6.11	6.74	12.04
MnO	0.00	0.26	0.05	0.16
CaO	1.15	8.66	3.55	20.21
Na ₂ O	3.08	3.81	1.39	0.42
K ₂ O	5.75	0.86	11.76	0.00
TiO ₂	Tr	2.54	2.08	4.76
P ₂ O ₅	0.12	0.33	1.35	0.45
SO ₃	0.26	0.11	0.29	0.02
Cl	0.00	0.00	0.04	0.00
F	0.00	0.00	0.49	0.00
Cr ₂ O ₃	0.00	Tr	0.07	0.00
BaO	0.00	Tr	0.67	0.03
SrO	0.00	Tr	0.20	Tr
ZrO ₂	0.00	0.00	0.00	0.00
NiO	0.00	0.03	0.00	0.00
H ₂ O	0.88	0.73	2.71	0.46

Muestra 1. Granito de Sohneeloch, Broken, Harz (Johannsen, 1939).

Muestra 2. Norita de Elizabethtown. Essex Country New York (Washington, 1917).

Muestra 3. Orendita de Fifteen Mile Spring, Leucita Hills, Wyoming (Cross, 1915).

Muestra 4. Piroxenita de Cebolla Springs, Colorado (Washington, 1917).

72.67	13.44	1.06	1.56	0.23	0.00	1.15	3.08	5.75	
0.00	0.12	0.26	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
.0057	.0205		.0496	.0610		.0217			
.0000	.0000		.0057	.0134		.0000	.0000		
.4923	.0030		.0000	.0610		.0496			
.0176	.0000		.0000	.0000		.0000			
.0000	.0000		.0000	.0000		.0191	.0000		
.0000	.0000		.0066	.0000		.0000	.0000		
.0000	.0000		.0008	.0000		.0032	.0000		
46.74	16.63	2.17	10.60	6.11	0.26	8.66	3.81	0.86	
2.54	0.33	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03
.1515	.1543		.0614	.0091		.1475			
.0321	.0223		.0000	.0000		.1194	.0832		
.0000	.0000		.0000	.0091		.0516			
.0921	.0000		.0097	.0000		.0000			
.0000	.0000		.0545	.0000		.0000	.0000		
.2026	.0000		.0135	.0000		.0000	.0000		
.0317	.0000		.0023	.0000		.0013	.0000		
54.08	9.49	3.19	1.03	6.74	0.05	3.55	1.39	11.76	
2.08	1.35	0.29	0.04	0.49	0.07	0.67	0.20	0.00	0.00
.1671	.0632		.0224	.1248		.0143			
.0278	.0000		.1392	.0000		.0000	.0000		
.0227	.0000		.0000	.0928		.0000			
.0000	.0000		.0000	.0011		.0199			
.0013	.0319		.0278	.0000		.1392	.0131		
.0000	.0000		.0000	.0004		.0000	.0000		
.0127	.0000		.0095	.0180		.0036	.0000		
40.25	2.74	10.83	7.38	12.04	0.16	20.21	0.42	0.00	
4.76	0.45	0.02	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
.2986	.3603		.0067	.0000		.1027			
.2986	.0000		.0000	.0000		.0000	.0000		
.0000	.0000		.0000	.0000		.0000			
.0200	.0000		.0067	.0000		.0000			
.0000	.0000		.2986	.0086		.0000	.0000		
.0000	.0226		.0454	.0000		.0223	.0000		
.0594	.0000		.0031	.0000		.0002	.0000		

CALCULO DE LOS PARAMETROS DE NIGGLI A PARTIR DE LOS PORCENTAJES POR PESO

De acuerdo al procedimiento seguido aquí, los porcentajes por peso obtenidos en el análisis químico se convierten a valores equivalentes, es decir a números equivalentes. Esto se hace dividiendo el valor numérico obtenido en el análisis por el peso molecular del óxido. Los valores obtenidos se denominan también: "proporciones moleculares", "número molecular", "cociente molecular" o "números moleculares equivalentes". Los números equivalentes se multiplican, por lo general, por un factor de 1.000 para no trabajar con fracciones.

Para reducir el número de componentes y poder trabajar con mayor claridad, éstos se agrupan, exceptuando SiO_2 , P_2O_5 y TiO_2 en la forma siguiente:

- I Al_2O_3
- II $\text{FeO} + \text{Fe}_2\text{O}_3$ (calculado como $\text{FeO} + \text{MnO}$)
- III CaO
- IV $\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O}$

Los óxidos poco comunes se añaden a determinados grupos de acuerdo a consideraciones puramente químicas, según su valencia o posición en la tabla periódica. De acuerdo al conocimiento actual de la cristalografía química, los requerimientos especiales son el factor primordial en la incorporación de elementos en una estructura cristalina. Estos espacios están caracterizados por el llamado radio-iónico. Así, se deben introducir cambios con respecto a las reglas inicialmente aceptadas. Debe notarse lo siguiente (C. Burri 1956): Cr_2O_3 y V_2V_3 se agregaron inicialmente a Al_2O_3 debido a su trivalencia. Sin embargo, se deben agregar a Fe_2O_3 debido a su radio iónico empírico:

$\text{Cr}^{3+} - 0.64$, $\text{V}^{3+} + 0.65$, $\text{Fe}^{3+} + 0.67$, comparados con el de aluminio $\text{Al}^{3+} + 0.57$.

MnO se agrupa con CaO ya que Mn puede reemplazar parcialmente Ca en apatito. NiO y CaO se agrupan con FeO . Los radios iónicos correspondientes son: $\text{Mn}^{2+} + 0.91$, $\text{Fe}^{2+} + 0.83$, $\text{Ni}^{2+} + 0.78$, $\text{Co}^{2+} + 0.82$, y $\text{Ca}^{2+} + 1.06$. En los últimos estudios Sr y Br se agrupan con Ca .

Ba reemplaza con más frecuencia al K que al Ca , por ejemplo en los feldespatos, y por ello algunos autores lo agrupan con K_2O . Los radios iónicos correspondientes son: $\text{Ba}^{2+} + 1.43$, $\text{Sr}^{2+} + 1.27$, $\text{K} + 1.33$ y $\text{Ca}^{2+} + 1.06$.

Cuando se determinan Rb_2O y Cs_2O se agrupan con K_2O y Na_2O ; pero cuando se ha calculado LiO_2 éste debe considerarse

como un grupo aparte, debido a su importancia en la formación de las llamadas micas de litio, radio iónico 0.78 reemplaza $\text{Mg}^{2+} + (0.78)$.

Casi todos estos elementos ocurren en pequeñas cantidades en rocas cristalinas y cualquier modificación que se haga en los procedimientos de su cálculo variará muy poco los parámetros de Niggli. Los estudios actuales indican que deben tenerse en cuenta, aunque su efecto general sea poco.

Aunque el titanio es el noveno mineral en importancia en la litósfera y constituye el 0.44 en peso de ella, la evaluación de su papel se dificulta debido a que desde el punto de vista analítico es muy difícil distinguir entre la forma trivalente y tetravalente y ello es imposible en presencia de hierro divalente o trivalente.

El titanio puede estar formando minerales independientes como ilmenita (FeTiO_3), rutilo (TiO_2) y titanita ($\text{Ca}(\text{Ti}(\text{O}, \text{CH}, \text{F})\text{SiO}_4)$), que pueden ser reemplazados por perovskita, cuando las rocas son muy pobres en Si . Además puede reemplazar Fe^{3+} , Al^{3+} o Mg^{2+} , en titanognetita o en augitas y hornblendas titaníferas. Los radios iónicos correspondientes son: $\text{Ti}^{3+} - 0.69$, $\text{Ti}^{4+} - 0.64$, $\text{Mg}^{2+} - 0.78$, $\text{Fe}^{3+} + 0.57$ y $\text{Fe}^{2+} + 0.67$. El reemplazamiento de Ti^{4+} por Si^{4+} , antiguamente considerado, es casi imposible debido a la gran diferencia de radios iónicos ($\text{Si} - 0.39$).

Actualmente se considera que el Ti debe sumarse al $\text{FeO} + \text{MgO}$. De igual manera se toma el titanio para los diagramas QLM en los llamados valores básicos. El titanio incorporado en: aniones complejos (titanita); con carácter catiónico (augita y hornblenda) o con una unión tipo óxido (rutilo, ilmenita, perovskita), tiene mucha influencia en el contenido de titanio de las rocas normales, el cual nunca es muy alto.

El aluminio es tratado de la misma manera, puesto que el Al_2O_3 de los análisis químicos incluye el Al combinado en los aniones aluminosilicatos, al igual que el Al que tiene un carácter catiónico; por ejemplo: augita, hornblenda y mica. Sin embargo, las relaciones aquí son más convenientes, puesto que la parte de Al contenido en los aniones aluminosilicatos puede ser estimada debido a su relación de 1:1 con respecto a: Na , K_2O y CaO , a los cuales el Al está unido. Estas consideraciones simples no se pueden aplicar al titanio.

Por razones prácticas el proceso previamente adoptado es el que debe seguirse especialmente porque en éste se le da mayor importancia al papel del titanio. De acuerdo a

este método el parámetro Ti se calcula de igual manera al Si. Este método tiene también la ventaja de proporcionar datos simples para la comparación de los valores de Ti característicos de las provincias petrográficas.

Los número equivalentes incluidos en los grupos I- IV se recalculan a 100 y se designan como: al, c y alk.

Los números equivalentes de SiO₂, TiO₂, P₂O₅, ZrO₂, CO₂, SO₃, Cl, Fe₂ y H₂O se recalculan de igual manera y los valores se denominan Si, Ti, P, Zr, CO₂, SO₃, F₂, y H.

Los valores si, al, fem, c y alk en la mayoría de los casos son suficientes para la caracterización química de las rocas. En otros casos en necesario tener una mayor información de los componentes alk y fm. Esta mayor información se obtiene calculando las relaciones:

$$K = \frac{K_2O}{K_2O + Na_2O} = \frac{K^*}{K^* + Na^*}$$

$$mg = \frac{MgO}{FeO+MgO+MnO} = \frac{Mg^{2*}}{Fe^{2*}+Fe^{3*}+Mg^{2*}+Mn^{2*}}$$

Si en casos especiales, es necesario determinar el grado de oxidación del Fe, se calcula por la reacción:

$$w = \frac{2 Fe_2O_3}{2 Fe_2O_3 + FeO} = \frac{Fe^{3*}}{Fe^{3*} + Fe^{2*}}$$

Antiguamente se usaba la relación:

$$o = \frac{Fe^{3*}}{Fe^{3*}+Fe^{2*}+Mn^{2*}+Mg^{2*}}$$

P Pero la relación w tiene la ventaja de que solo compara un mineral con diferentes valencias.

REPRESENTACION DE RELACIONES
PETROQUIMICAS FUNDAMENTALES
POR MEDIO DE LOS PARAMETROS
DE NIGGLI

A) El número de cuarzo qz, como indicativo de la saturación de la roca en SiO₂.

Se pueden presentar dos casos en el cálculo de la cantidad de SiO₂ requerida para la formación de minerales altamente silíceos.

1A) Cuando al < alk y al mismo tiempo al > (alk+c), o sea que no hay exceso de alumina. Después de combinar todo el (Na₂O + K₂O) con CaO en la relación 1:1 queda un

exceso de Al₂O₃, T, que se combina con CaO en la relación 1:1 para formar anortita. Cada unidad de alk se combina con 6 de SiO₂, correspondiendo a la composición de feldespatos alcalinos, 6 SiO₂ Al₂O₃ (Na, K) 20, quedando una cantidad de Al₂O₃ igual a al-alk para la formación de anortita; una cantidad de Si igual a 2 (al-alk) se combina con la anterior quedando la formula 2SiO₂. Al₂O₃. CaO. La cantidad de c disponible para la formación de wollastonita (SiO₂. CaO) es c-alk. El fm total queda disponible para la formación de nestatita o hipersteno.

La cantidad de Si necesario para la formación de minerales altos en sílice será entonces:

$$Si = 6 alk + 2 (al-alk) + (-(al - alk)) + fm$$

feld, alcalino anortita diopsido orto-augita como al fm + c + alk = 100

Entonces Si' = 100 + 4 alk.

1B). Cuando al > alk pero al mismo tiempo al > (alk + c), o sea que hay exceso de alumina sobre los alcalinos y calcio. Este caso ocurre rara vez en rocas ígneas frescas no endomórficas, pero es común en rocas ígneas meteorizadas y sedimentos arcillosos o en sus derivados metamórficos. En este caso, la ecuación Si' = 100 + 4 alk es válida únicamente cuando el Al₂O₃ en exceso sobre al (alk + c) se ha combinado con SiO₂ en la relación 1:1 para formar sillimanita - andalucita - kianita.

Es necesaria una cantidad de Si igual a 6 veces la de alk para la formación de feldespatos alcalinos. La cantidad de c disponible, y no el exceso de al, forma la anortita que necesita una cantidad de Si igual a 2 c. El al restante, igual a al (alk + c), se combina con igual cantidad de Si para formar sillimanita. En este caso no hay wollastonita y con el fm se forma orto-augita.

entonces Si' = 6 alk + 2 c + al (alk+c) + fm
feldespato alcalino anortita sillimanita
oroto-augita como

$$al + alk + c + fm = 100$$

$$Si' = 100 + 4 alk$$

Cuando se forma coridón en lugar de sillimanita

$$Si' = alk + 2c + fm \text{ sumando y restando al}$$

$$= alk + c + al + 5 alk = c = fm - al$$

$$= 100 + 5alk = c$$

2). Cuando al < alk, se combina el total de alumina con (K, Na)₂O en la relación 1:1 quedando un residuo de alk, que se denomina alk', que se usa para la formación de egrina y en este caso no se forma anortita. La composición de egrina es 4 SiO₂. Fe₂O₃. Na₂O y la cantidad necesaria de Si será:

$$Si' = 6 al + 4 (alk-al) + c + (fm-2(alk-al)).$$

Feldespato alcalino agrina diopsido + orto-augita.

$$Si' = 100 + 3 al + alk.$$

El número de cuarzo se define como:
 $qz = Si - Si'$.

$qz > 0$ SiO₂ libre, hay cuarzo en la roca.

$qz = 0$ paragénesis de compuestos cristalinos altamente silíceos.

$qz < 0$ Silicato pobre en sílice, olivino, melilita, feldespatoideos.

Otros minerales que no se han considerado en el cálculo del valor simplificado de Si pueden ocurrir en la roca; éstos pueden ser: augita, hornblenda, minerales metálicos pobres en sílice o minerales accesorios como titanita, apatita e ilmenita. En estos casos el valor de qz puede ser negativo y ocurrir algo de cuarzo en la roca. En el caso de rocas hemi-cristalinas, el cuarzo puede estar ausente y qz 0, el exceso de SiO₂ estar en forma de vidrio.

B) Exceso de alúmina.

Los siguientes puntos deben considerarse en el cálculo de la composición normativa simplificada: 2 alk es una medida de la cantidad de feldespatos alcalinos; k. 2 alk para feldespato de potasio y (1-k) para feldespato sodico.

(al-alk) = T es el exceso de alúmina sobre alcalinos e indica la cantidad de anortita, la cantidad de alúmina no correlacionada con los alcalinos se combina con calcio en la relación Al₂O₃:

$$CaO = 1 : 1.$$

La cantidad total de feldespatos es:
 $F = 2 alk + (al-alk) = al + alk$. Valores positivos de T indican la presencia de feldespato en la roca, valores negativos indican la ausencia de feldespatos.

Otro valor que se usa para la determinación de la composición mineral es:

$$t = al - (c + alk).$$

Si $t > 0$ $al > (c + alk)$, hay exceso de alúmina después de combinar alúmina con alcalinos y calcio en la relación 1:1 este valor es raro en rocas endomórficas. Si el valor es muy grande sirve como criterio para distinguir origen sedimentario en rocas metamórficas.

En la designación T y t Niggli no es uniforme. En su último trabajo ((1948) pag 336) los define así: $t = al - (alk + c)$ y $T = (al = alk)$ cuando este valor es positivo.

Si $al - (c + alk) = 0$, $al = (c + alk)$, entonces la cantidad total de calcio y alcalinos se combina con alúmina en la relación 1 : 1 (feldespatos y feldespatoideos). Entonces no hay calcio para la formación de augita u hornblenda con calcio. Sin embargo, si $al - (alk + c) < 0$ $c > (al - alk)$ esto indica que, después de la formación de los feldespatos alcalinos (y antes de su sustitución y anortita, sobre algo de calcio que no pudo combinarse con alúmina y queda incorporado en los minerales opacos. Esta parte del calcio corresponde al "chaux non feldespatisable" de los autores franceses y se denomina C'.

$$Ca = c - (al - alk).$$

COMPOSICION NORMATIVA SIMPLIFICADA A PARTIR DE LOS PARAMETROS DE NIGGLI

A menudo no es necesario determinar la composición normativa mineral a partir de los parámetros de Niggli y por lo general es preferible calcular la norma directamente de los porcentajes por peso. Sin embargo, en determinadas circunstancias es aconsejable recalcular la composición química de la roca definida por los parámetros de Niggli, a una composición mineral normativa.

Estos sucede, por ejemplo, cuando los parámetros de Niggli son determinados por interpolación a partir de un diagrama de variación.

Según lo visto en el cálculo de qz, los componentes finales en la norma son: minerales saturados en sílice, feldespatos y piroxeno. Las fórmulas isomórficas para feldespatos serían: ((SiO₂)₃ AlO₂) K para Or; ((SiO₂)₃ AlO₂) Na para Ab y (SiO₂)₃ - (AlO₂)₂ Ca para An. Estas fórmulas corresponden a la sustitución de un Na o un Ca por un K.

Si el número de átomos presentes de K se toma como base para la formación de Or entonces este número se multiplica directamente por 5 para determinar la cantidad de Or presente ya que en la fórmula $Si + al + K = 5$. Como en el cálculo de los parámetros de Niggli se toma como base un al, debe considerarse que éste es equivalente a 2 (Na + K) ya que su cálculo se basa en la suma de (Na₂O + K₂O) y el número de átomos de Na o K estará dado por la fórmula de $k.2 alk$ o $(1-k). 2 alk$ respectivamente.

La cantidad de An se puede obtener multiplicando Al por 5/2 según la fórmula $(1 SiO_2) (AlO_2)_2 Ca$, en este caso la suma de $Si + Al + Ca = 5$. Como el cálculo de F se basa en la cantidad Al₂O₃, después de formados los feldespatos alcalinos queda una

cantidad de alúmina igual a $(al - alk)$ para la formación de anortita. Entonces $5 (al - alk)$ representa la cantidad de An. La relación Or: Ab: An está dada por: $2 k, alk: 2 (1-k) alk: (al - alk)$.

La composición normativa simplificada es:

$$Or = 5 k, 2 alk = 10k alk$$

$$AB = 5 (1 - k) 2 alk = 10 (1 - k) alk$$

$$AN = 5 (al - alk)$$

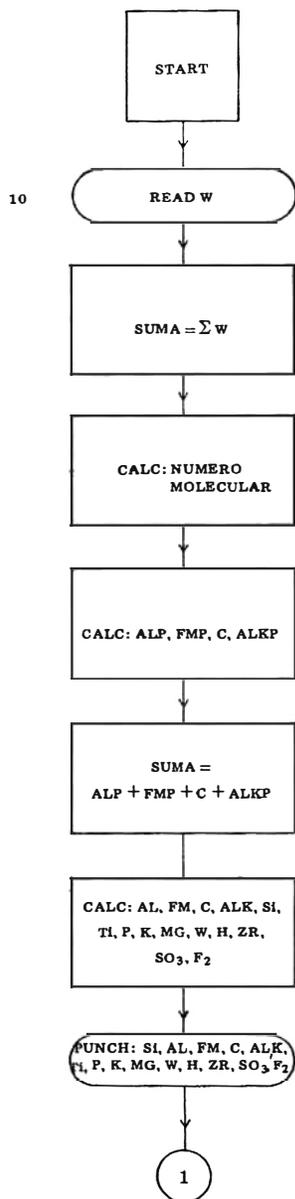
$$Wo = 2 (c - (al - alk))$$

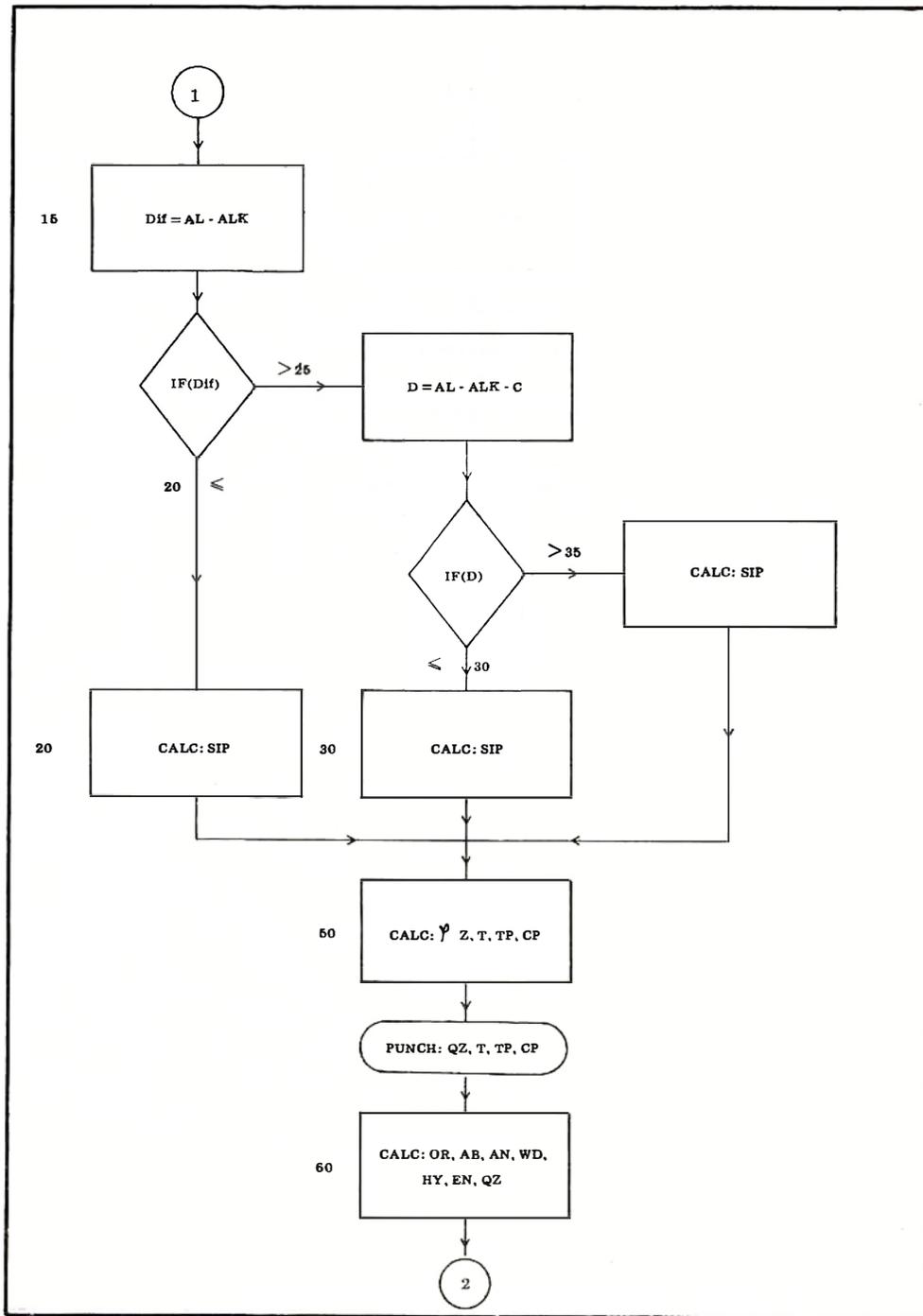
$$En = 2 mg. fm.$$

$$Hy = 2 (1 - mg) fm.$$

$$Q = Si - (100 + 4 ak) \approx qz$$

DIAGRAMA DE FLUJO PARA PROGRAMA DE CALCULO DE PARAMETROS
DE NIGGLI Y NORMA SIMPLIFICADA





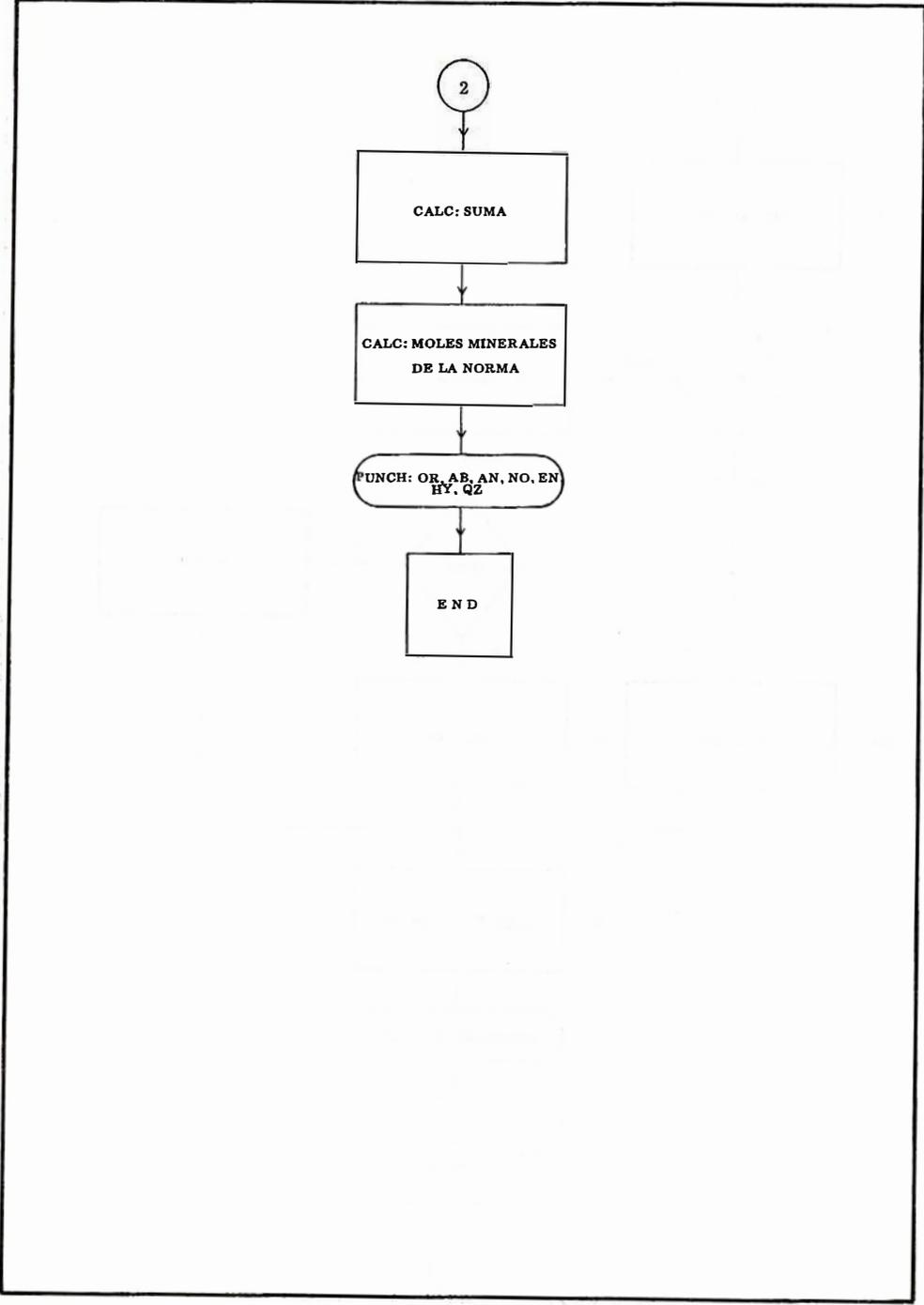
2

CALC: SUMA

CALC: MOLES MINERALES
DE LA NORMA

PUNCH: OR, AB, AN, NO, EN
HY, QZ

END



```

10  READ200, SiO2, Al2O3, Fe2O3, FEO,
      AMNO, AMGO, CAO,
      ANA20, AK20
READ200, TiO2, P2O5, SO3, CL, F,
      Cr2O3, BaO, SrO, ZrO2,
      ANIO, H2OP
SUMA  = SiO2 + Al2O3 + Fe2O3
      FeO + AMGO + AMNO
      + CaO + ANA20 + AK20
SUMA  = SUMA + TiO2 + P2O5
      + SO3 + CL + F + Cr2O3
      + BaO + ZrO2 + ANIO
      + H2OP
SIO2 = SIO2 * SUMA * 0.17
AL2O3 = AL2O3 * SUMA / 10.19
Fe2O3 = Fe2O3 * SUMA / 15.96
FEO    = FEO * SUMA / 7.18
AMGO   = AMGO * SUMA / 7.10
AMNO   = AMNO * SUMA / 4.03
CaO    = CaO * SUMA / 5.60
ANA20  = ANA20 * SUMA / 6.19
AKA20  = AKA20 * SUMA / 9.41
Ti2O  = Ti2O * SUMA / 7.99
P2O5 = P2O5 * SUMA / 14.19
SO3   = SO3 * SUMA / 8.01
CL     = CL * SUMA / 3.54
F      = F * SUMA / 1.90
Cr2O3 = Cr2O3 * SUMA / 15.20
BaO    = BaO * SUMA / 15.33
SrO    = SrO * SUMA / 10.36
ZrO2  = ZrO2 * SUMA / 12.26
ANIO   = ANIO * SUMA / 7.46
H2OP   = H2OP * SUMA / 1.81
ALP    = Al2O3 + Cr2O3
FMP    = 2.0 * Fe2O3 + FeO +
      AMG + AMNO + ANIO
C      = CaO + BaO + SrO
ALKP   = ANA20 X AK20
SUMA   = ALP + FMP + C + ALKP
AL     = 100.0 * ALP / SUMA
FMN    = 100.0 * FMN / SUMA
C      = 100.0 * C / SUMA
ALK    = 100.0 * ALKP / SUMA
SI     = 100.0 * SiO2 / SUMA
P      = 100.0 * P2O5 / SUMA
AK     = AK20 / ALKP
AMG    = AMGO / FMP
W      = 2.0 * Fe2O3 / (2.0 * FeO3
      + FeO)
H      = H2OP * 100.0 / SUMA
Zr     = 100.0 * ZrO2 / SUMA
SO3   = 100.0 * SO3 / SUMA
F2    = 100.0 * F / SUMA
PUNCH250
PUNCH300
PUNCH350, SI, AL, FM, C, ALK, TI,
      P, AK
PUNCH400
PUNCH350, AMG, W, H, Zr, SO3, F2

PUNCH450
GO TO 15
DIF-AL-ALK
15  IF (DIF) 20, 20, 25
25  D      = AL - ALK - C
      IF (D) 30, 30, 35
35  SIP   = 6.0 * ALK + 2.0 * C + FM
      GO TO 50
30  SIP   = 100.0 + 4.0 * ALK
      GO TO 50
50  QZ    = SI - SIP
      T    = AL - ALK
      TP   = AL - C - ALK
      CP   = C - AL + ALK
PUNCH500
PUNCH550
PUNCH350, QZ, T, TP, CP
PUNCH450
60  OR    = 10.0 * AK * ALK
      AB   = 10.0 * (1.0 - AK) * ALK
      AN   = 5.0 * (AL - ALK)
      WO   = 2.0 * (C - AL - ALK)
      EN   = 2.0 * AMG * FM
      HY   = 2.0 + (1.0 - AMG) * FM
      QZ   = SI - (100.0 + 4.0 * ALK)
      SUMA = OR + AB + AN + WO +
      EN + HY + QZ
      OR   = OR * 100.0 / SUMA
      AB   = AB * 100.0 / SUMA
      AN   = AN * 100.0 / SUMA
      WO   = WO * 100.0 / SUMA
      EN   = EN * 100.0 / SUMA
      HY   = HY * 100.0 / SUMA
      QZ   = QZ + 100.0 / SUMA
PUNCH600
PUNCH650
PUNCH350, OR, AB, AN, WO, EN,
      HY, QZ
GO TO 10
200 FORMAT (F7.2, F7.2, F7.2, F7.2,
      F7.2, F7.2, F7.2, F7.2,
      F7.2, F7.2)
250 FORMAT (18K, 20HPARAMETROS
      DE NIGGLI/)
300 FORMAT (9X, 22HSI AL FM C ALK
      TIP AK, /)
350 FORMAT (F10.4, F10.4, F10.4,
      F10.4, F10.4, F10.4, F10.4,
      F10.4, F10.4, F10.4)
400 FORMAT (9X, 17HAMG W H ZR
      SO3 F2, /)
450 FORMAT (/)
500 FORMAT (18X, 24HRELACIONES
      PETROQUIMICAS, /)
550 FORMAT (9X, 10HQZ T TP CP, /)
600 FORMAT (18X, 18HNORMA SIM-
      PLIFICADA, /)
650 FORMAR (9X, 20HOR AB AN WO
      EN HY QZ, /)

```

BIBLIOGRAFIA

- BARTH**, *"Theoretical Petrology"*. 1965.
- BURRI**, *Petrochemical calculations. New York. 1956*
- H. S. WASHINGTON**, *"Chemical analyses of igneous rocks"* U. S.G.S., pp.99, 1917.
- JOHANNSEN, A.**, *"A. descriptive petrography of the igneous-rocks"*. Vol. 1, pag. 83-99, 1938. *The University of Chicago Press. Chicago.*
- NIGGLI, P.**, *Rocks and Mineral Deposits. San Francisco, W. H. Freeman and Company, 1954.*

* * *