

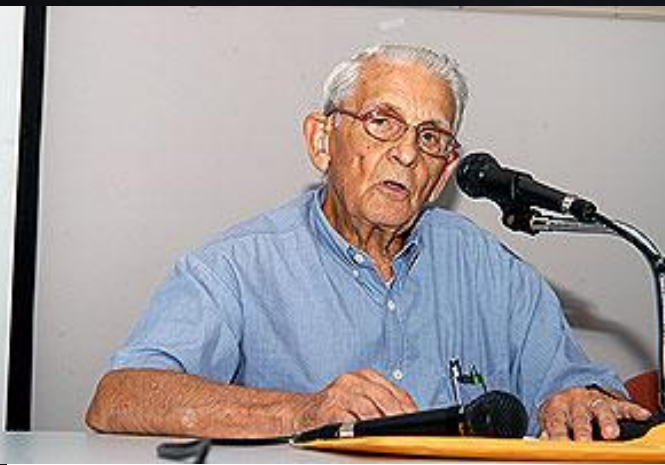
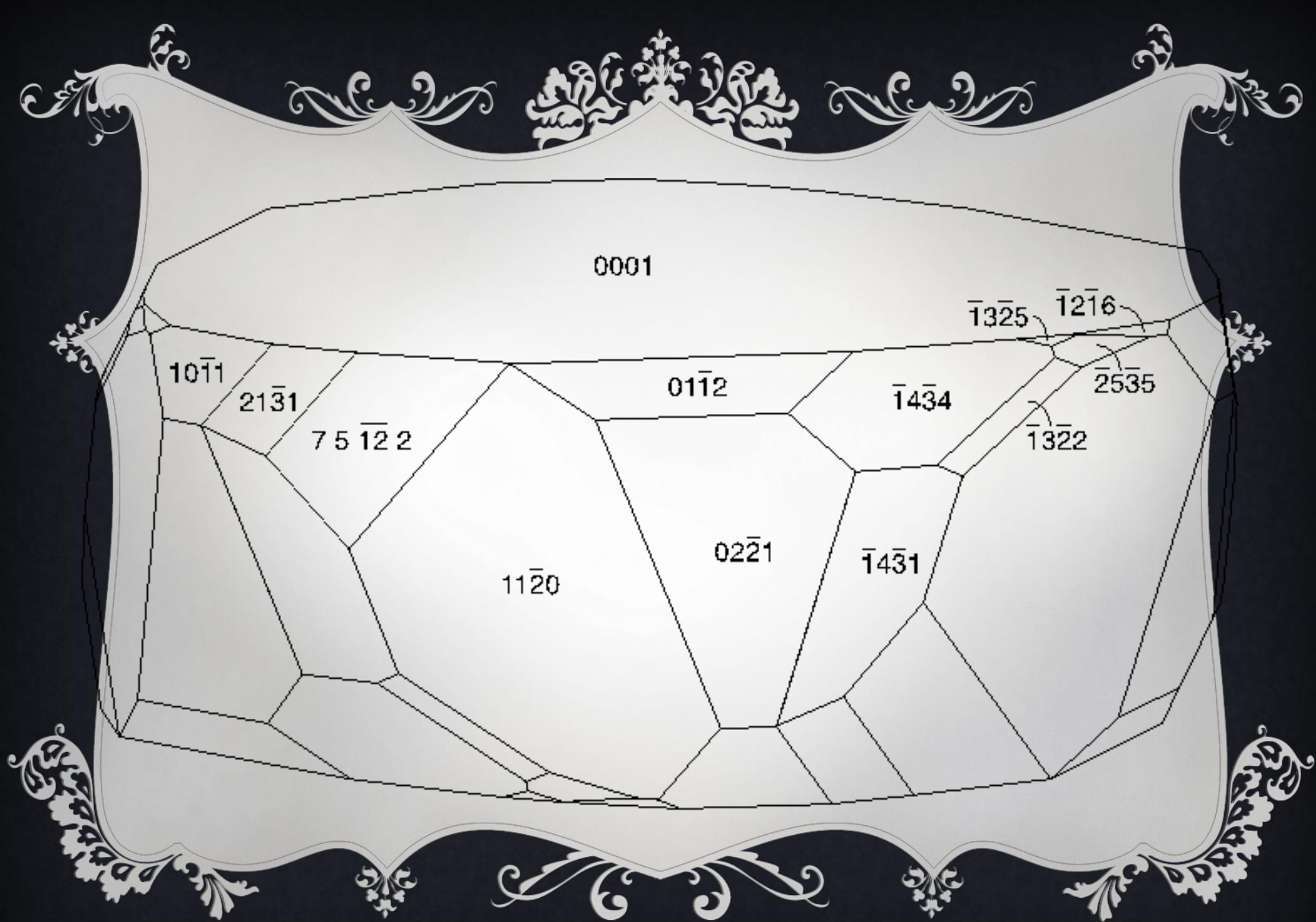
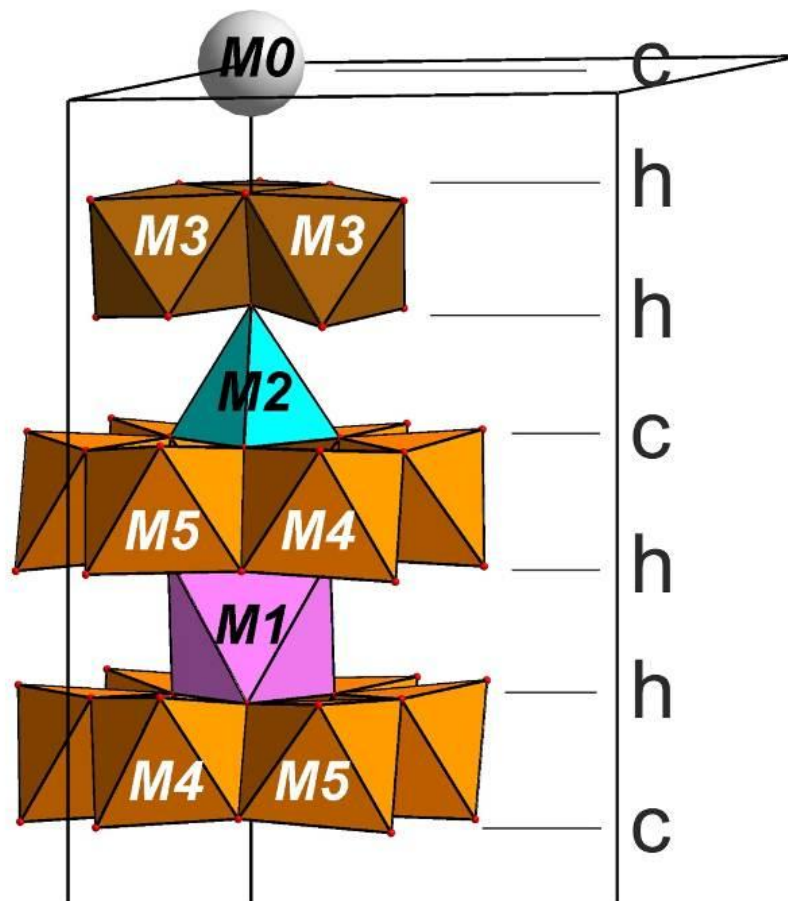
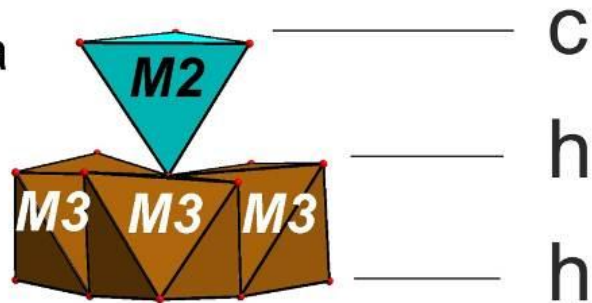
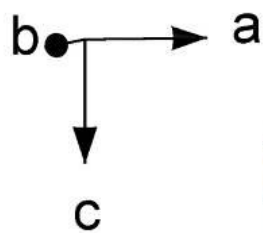
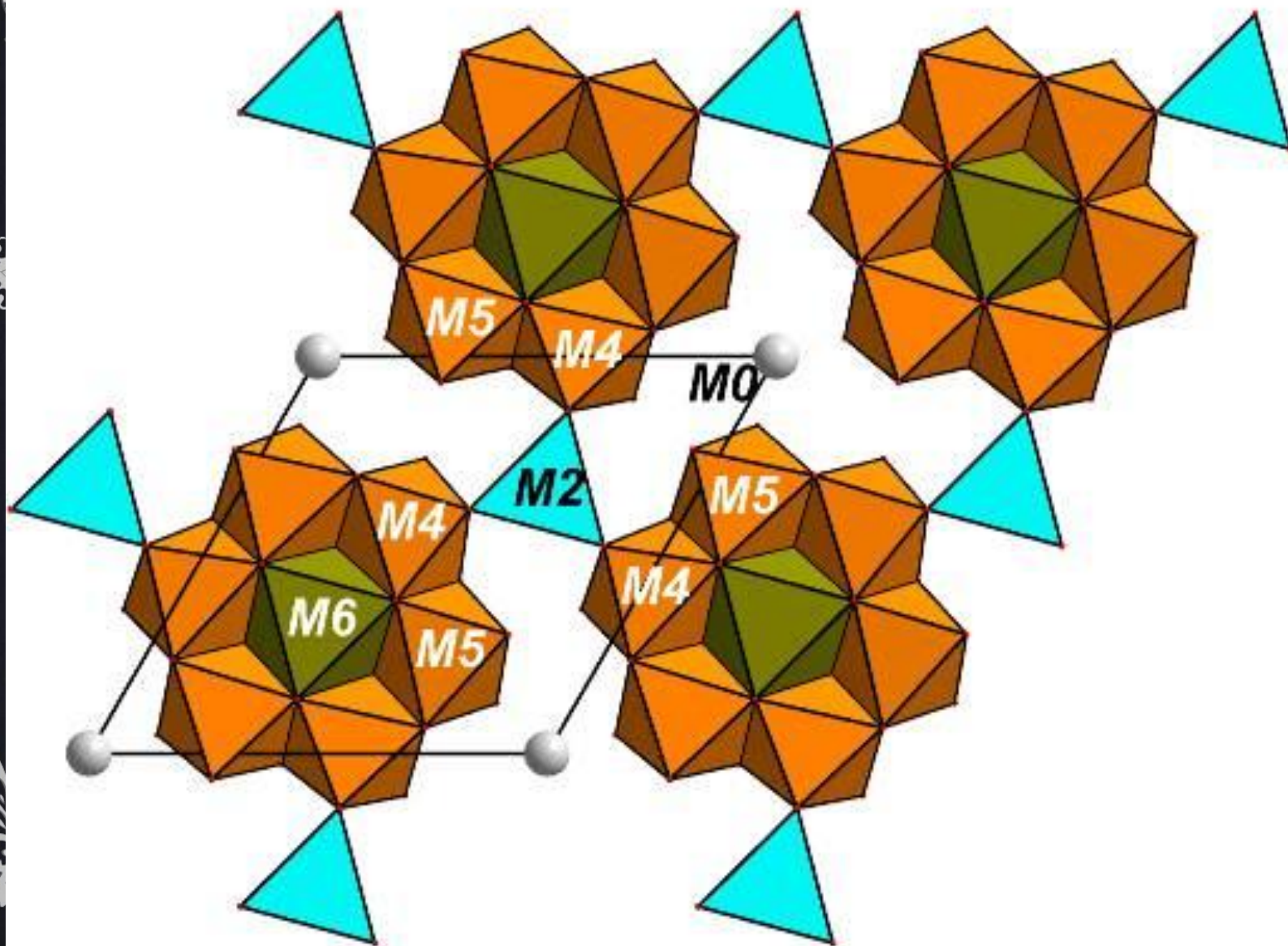


Figure 1. A crystal of almeidaite ($23 \times 22 \times 6$ mm).







2013-020 ALMEIDAITE

$\text{PbZn}_2(\text{Mn}, \text{Y})(\text{Ti}, \text{Fe}^{3+})_{18}\text{O}_{37}(\text{OH}, \text{O})$

Trigonal Space group: $R\bar{3}$

$a = 10.4359(2)$ $c = 21.0471(4) \text{ \AA}$

$V = 1985.10(7) \text{ \AA}^3$ $Z = 3$

Luiz A.D. Menezes Filho^{1*}, Nikita V. Chukanov², Ramiza K. Rastsvetaeva³, Sergey M. Aksenov³, Igor V. Pekov⁴, Mário L. S. C. Chaves¹, Ricardo Scholz⁵, Daniel Atencio⁶, Paulo R. G. Brandão⁷, Antônio W. Romano¹, Luiz C. A. de Oliveira⁸, José D. Ardisson⁹, Klaus Krambrock¹⁰, Roberto L. Moreira¹⁰, Frederico S. Guimarães¹⁰, Aba C. Persiano¹⁰ and R. Peter Richards¹¹

¹Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Instituto de Geociências, Avenida Antônio Carlos, 6627, 31270-902, Belo Horizonte, MG, Brazil

²Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Moscow region, 142432 Russia

³Institute of Crystallography, Russian Academy of Sciences, Leninskiy Prospekt 59, Moscow, 117333 Russia

⁴Faculty of Geology, Moscow State University, Vorobievsky Gory, Moscow, 119991 Russia

⁵Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), Escola de Minas, Departamento de Geologia, Campus Morro do Cruzeiro, 35400-000, Ouro Preto, MG, Brazil

⁶Universidade de São Paulo, Instituto de Geociências, Rua do Lago, 562, 05508-080, São Paulo, SP, Brazil

⁷Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Escola de Engenharia, Departamento de Engenharia de Minas, Avenida Antônio Carlos, 6627, 31270-902, Belo Horizonte, MG, Brazil

⁸Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Química, Avenida Antônio Carlos, 6627, 31270-901, Belo Horizonte, MG, Brazil

⁹CNEN/CDTN/SENAN - Laboratório de Física Aplicada, Av. Antônio Carlos 6627, 31270-901 Belo Horizonte, MG, Brasil

¹⁰Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Física, Avenida Antônio Carlos, 6627, 31270-901, Belo Horizonte, MG, Brazil

¹¹Morphogenesis Inc., 154 Morgan Street, Oberlin, Ohio 44074

*E-mail: lmenezesminerals@gmail.com

CHEMICAL DATA

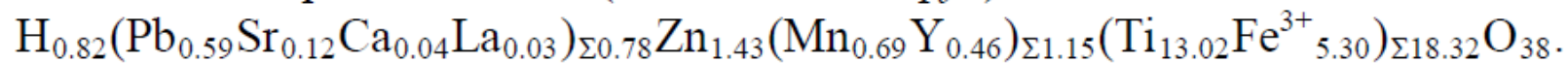
Chemical analysis (5) were carried out using an electron microprobe (EDS mode, 20 kV, 600 pA, 300 nm beam diameter). F, Na, Mg, Al, P, Cl, K, Sb and *REE* heavier than La are below detection limits. H₂O was determined by gas chromatography of products of ignition at 1200°C. CO₂ was not determined because of the absence of absorption bands corresponding to vibrations of C-O bonds in the IR spectrum. Analytical data are given in Table 1.

Table 1. Analytical data for almeidaite.

Constituent	wt%	Range	SD	Probe Standard
CaO	0.12	0-0.27	0.10	Wollastonite
SrO	0.69	0.49-0.88	0.14	SrSO ₄
PbO	7.13	6.51-7.68	0.44	PbTe
MnO	2.64	2.25-2.85	0.21	Mn
ZnO	6.26	5.93-6.43	0.18	ZnO
Fe ₂ O ₃ *	22.83	21.99-23.62	0.64	Fe
Y ₂ O ₃	2.81	2.09-3.55	0.61	YPO ₄
La ₂ O ₃	0.25	0-0.48	0.13	LaPO ₄
TiO ₂	56.10	55.33-56.80	0.64	TiO ₂
H ₂ O	0.4(1)			
Total	99.23			

*According to Mössbauer data, all iron is trivalent.

The empirical formula (based on 38 O *apfu*) is



The simplified formula is $\text{PbZn}_2(\text{Mn}, \text{Y})(\text{Ti}, \text{Fe}^{3+})_{18}\text{O}_{37}(\text{OH}, \text{O})$. The end-member formula is $\text{PbZn}_2\text{MnTi}_{13}\text{Fe}^{3+}_5\text{O}_{37}(\text{OH})$, which requires PbO 11.72, ZnO 8.55, MnO 3.73, Fe_2O_3 20.97, TiO_2 54.56, H_2O 0.47, total 100.00 wt%.

Table 6. The main components in different sites of crichtonite-group minerals.

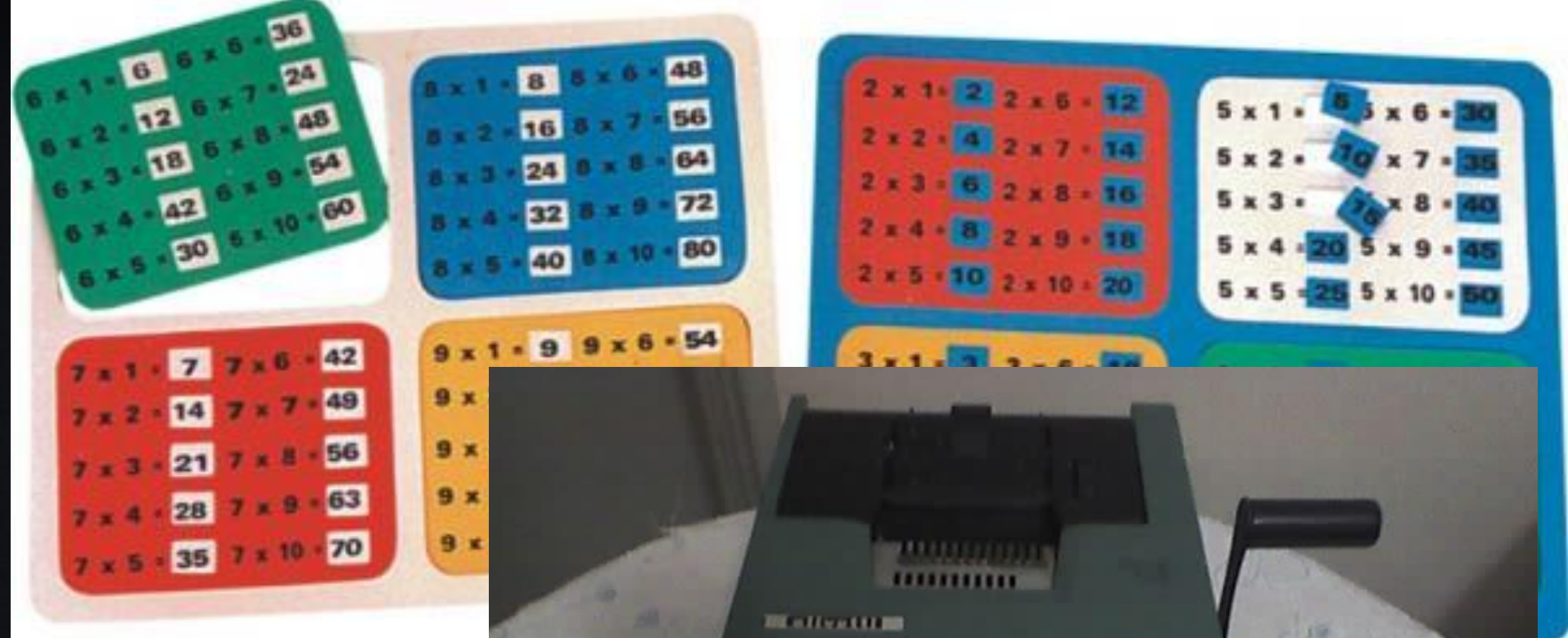
Mineral	Sites						Ref.*
	<i>M0(A)</i>	<i>M1(B)</i>	<i>M2(T)</i>	<i>M3-5(C)</i>	<i>X*</i>	<i>M6-9</i>	
Landauite	Na,Pb	Mn,Y	Zn ₂	(Ti,Fe,Nb) ₁₈	(O,OH) ₃₈		[1]
Loveringite	Ca,REE	Zr,Fe	(Mg,Fe) ₂	(Ti,Fe,Cr,Al) ₁₈	O ₃₈		[2]
Lindsleyite	Ba,K	Zr,Fe	(Mg,Fe) ₂	(Ti,Cr,Fe) ₁₈	O ₃₈		[3]
Mathiasite	K,Na,Ba,Sr	Zr,Fe	(Mg,Fe) ₂	(Ti,Cr,Fe) ₁₈	O ₃₈		[4]
Davidite-(La)	La,Ce,Ca	Y,REE,U	(Fe,Mg) ₂	(Ti,Fe,Cr,V) ₁₈	(O,OH) ₃₈		[5]
Davidite-(Ce)	Ce,La	Y,REE,U	(Fe,Mg) ₂	(Ti,Fe,Cr,V) ₁₈	(O,OH) ₃₈		[5]
Crichtonite	Sr,Ba,Pb	Mn	(Fe,Zn) ₂	(Ti,Fe) ₁₈	O ₃₈		[6]
Dessauite-(Y)	Sr,Pb	Y,U	(Fe,Zn) ₂	(Ti,Fe ³⁺) ₁₈	O ₃₈		[7]
Senaite	Pb,Sr	Mn	(Fe,Zn) ₂	(Ti,Fe) ₁₈	(O,OH) ₃₈		[8]
Gramaccioliite-(Y)	Pb,Sr	Y,Mn	(Fe,Zn) ₂	(Ti,Fe) ₁₈	O ₃₈		[9]
Cleusonite	Pb,Sr	U ⁴⁺ ,U ⁶⁺	(Fe ²⁺ ,Zn) ₂	(Ti,Fe ²⁺ ,Fe ³⁺) ₁₈	(O,OH) ₃₈		[10]
Paseroite	Pb,Sr	Mn ²⁺	(Mn,Fe ²⁺) ₂	(V,Ti,□,Fe ³⁺) ₁₈	O ₃₈		[11]
“U-senaite”	(Pb,O) _{0.25}	U _{0.47}	Met _{1.34}	(Met _{0.78} Ti _{0.93} Ti _{0.9}) ₆	O ₃₈	Met _{3.3}	[12]
Almeidaite	Pb,Sr,□	Mn _{0.6} Y _{0.4}	Zn _{1.5}	Ti _{13.4} Fe ³⁺ _{4.4} Mn ³⁺ _{0.2}	(O,OH) ₃₈	(Fe,Mn) _{0.5}	This work

*1: Grey and Gatehouse (1978); 2: Gatehouse *et al.* (1978); 3: Zhang *et al.* (1988); 4: Gatehouse *et al.* (1983); 5: Gatehouse *et al.* (1979); 6: Grey *et al.* (1976); 7: Orlandi *et al.* (1977); 8: Grey and Lloyd (1976); 9: Orlandi *et al.* (2004); 10: Wulster *et al.* (2005); 11: Mills *et al.* (2012); 12: Armbruster and Kunz (1990).



CÁLCULO DE FÓRMULA DE MINERAL

Daniel Atencio

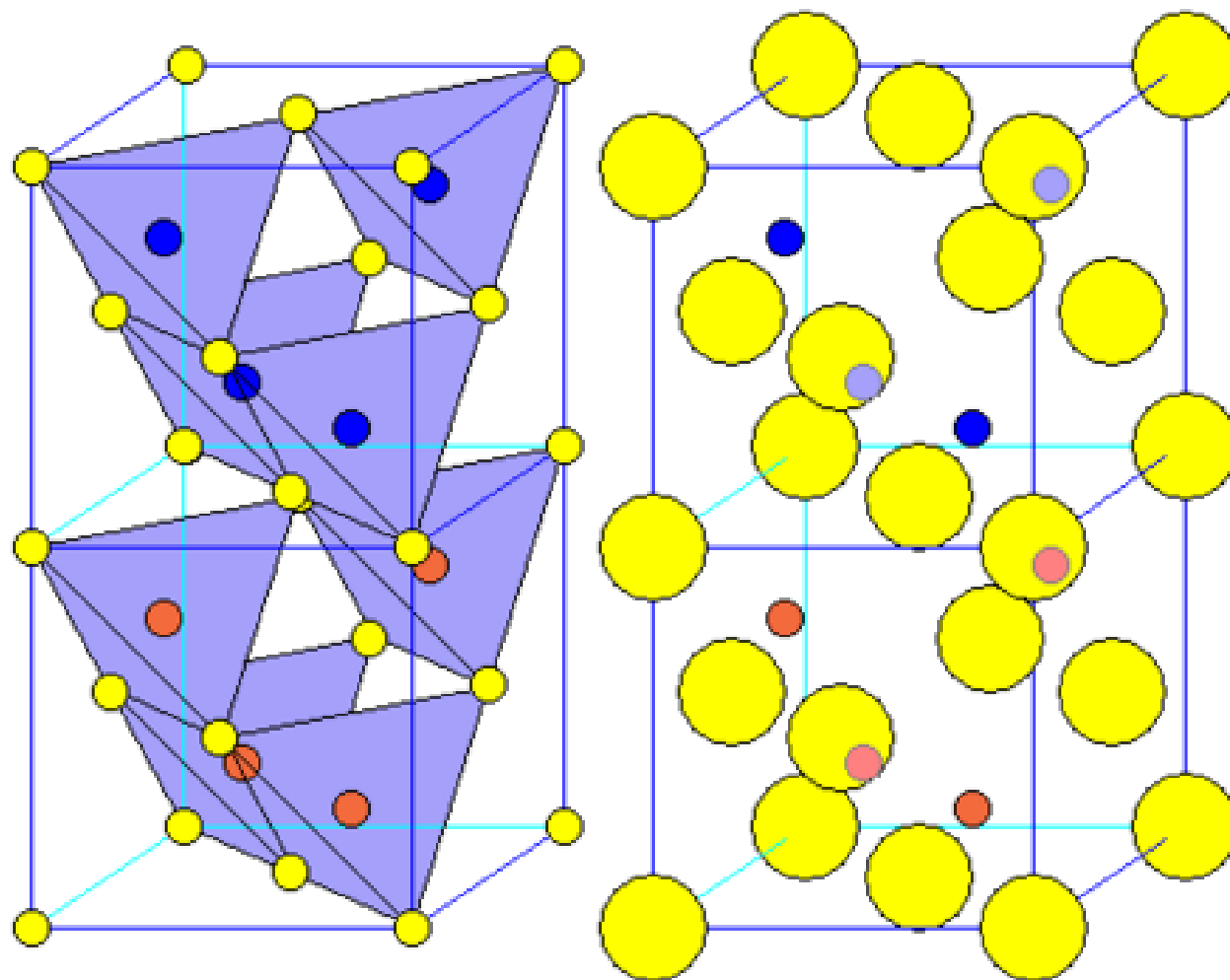


H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub						

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

calcopirita





Chalcopyrite CuFeS_2

Chalcopyrite has a very similar structure to sphalerite. Cells with iron atoms (orange) alternate with cells containing copper (blue). This double cell means chalcopyrite is tetragonal, but the fact that the unit cell consists of two cubes means chalcopyrite mimics cubic forms very often. In particular it can occur as pseudo-tetrahedra (actually tetragonal disphenoids, but they look exactly like tetrahedra.)

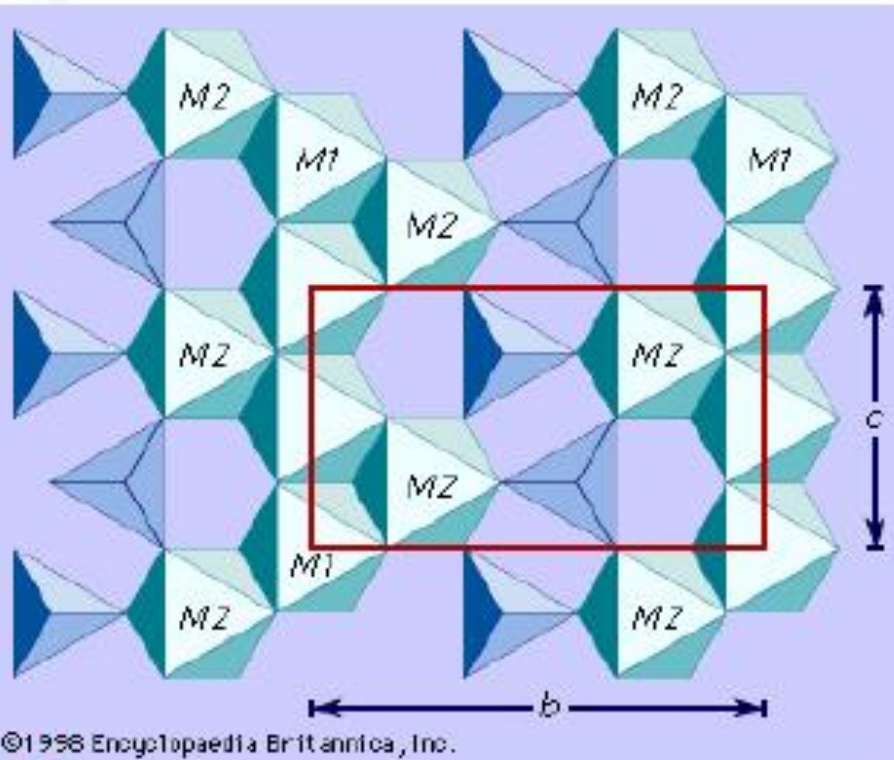
Passo 1

Cálculo da proporção atômica de cada elemento presente:

$\% \text{ elemento} / \text{peso atômico}$

Calcopirita	% em peso	Peso Atômico do elemento	Proporções Atômicas
Cu	34.3	63.55	0.53973
Fe	30.59	55.85	0.54772
S	34.82	32.06	1.08609

Estrutura da olivina



Tetraedros de SiO_4^{4-} e octaedros de Mg/Fe compartilham O

Os sítios M1 formam cadeias de octaedros distor. (compartilham uma aresta), // c. Os sítios M2 fixam-se nas laterais das cadeias de M1.

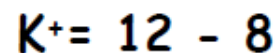
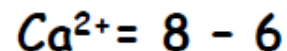
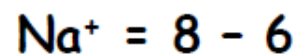
Objetivo:

- Obter a “fórmula química real” de um determinado mineral a partir de sua análise química.
- I.é., encontrar a resposta para a seguinte questão: ao obtermos uma análise química geral, expressa em porcentagem de óxidos, como escreveríamos a fórmula química desse mineral? Quantos átomos/cátions estariam, em média, associados aos átomos de O^{2-} ?

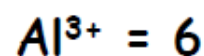
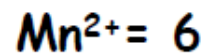
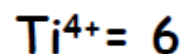
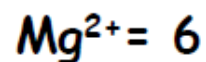
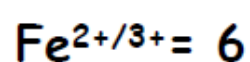
SILICATOS

FÓRMULA GERAL

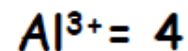
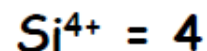
X_m



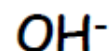
Y_n



$(Z_p \text{ O}_q)$



W_r



SILICATOS

Sub-classe	p	Z:O	Exemplo	Fórmula
Orto (neso)	4	1:4	Forsterita (olivina)	Mg_2SiO_4
soro	3	1:3,5	Melilita	$Ca_2Mg[Si_2O_7]$
ciclo	2	1:3	berilo	$Be_3Al_2Si_6O_{18}$
ino piroxênios	2	1:3	diopsídio	$CaMg[Si_2O_6]$
ino Anfibólios	1,5	1:2,75	tremolita	$Ca_2Mg_5[Si_8O_{22}](OH)_2$
Filo	1	1:2,5	muscovita	$KAl_2[AlSi_3O_{10}](OH)_2$
Tecto	0	1:2	ortoclásio	$K[AlSi_3O_8]$

p= número de vértices “livres”

Exemplo de uma análise química de um mineral

Análise química ...	... de uma olivina
Óxido	%
SiO ₂	39,41
FeO	16,46
MnO	0,21
MgO	43,27
CaO	0,23
Σ	99,58

- Trata-se de uma OLIVINA, um ORTOSSILICATO, cuja fórmula geral é Y_2ZO_4 , onde Y é o sítio cristalográfico a ser ocupado por íons de coordenação octaédrica (N.C. 6) e Z é o sítio cristalográfico a ser ocupado por íons de coordenação tetraédrica (N.C. 4).

- Então, para respondermos à questão, é necessário recalcular a análise em termos relativos de átomos, ao invés de porcentagens de massas de óxidos.
- A tabela seguinte indica, passo a passo (ou "coluna a coluna") como o cálculo dos sítios de ocupação é efetuado.

Cálculo da fórmula do mineral e sítios de ocupação para uma olivina.

Óxido	Massa molecular	1 - % óxido (resultado da análise)
SiO ₂	60,09	39,41
FeO	71,85	16,46
MnO	70,94	0,21
MgO	40,32	43,27
CaO	56,08	0,23
Σ		99,58

**Dados de
partida**

Molecular weights of some oxides and factors to convert them to elements by weight.

Oxide	Mol. Wt.	Factor
Al ₂ O ₃	101.96128	0.529251
As ₂ O ₃	197.89	0.7574
Au ₂ O	409.93	0.9610
B ₂ O ₃	69.6182	0.310551
BaO	153.3394	0.895660
BeO	25.01158	0.360320
CO ₂	44.0098	0.272916
CaO	56.0794	0.714701
CeO ₂	172.1188	0.814089
Ce ₂ O ₃	328.2382	0.853770
CoO	74.9326	0.786483
Cr ₂ O ₃	151.9902	0.684202
Cs ₂ O	281.8102	0.943226
CuO	79.5454	0.798865
Dy ₂ O ₃	372.9982	0.871318
Er ₂ O ₃	382.5182	0.874520
EuO	167.9594	0.904742
Eu ₂ O ₃	351.9182	0.863610
FeO	71.8464	0.777311
Fe ₂ O ₃	159.6922	0.699433
Ga ₂ O ₃	187.4382	0.743925
Gd ₂ O ₃	362.4982	0.867591
GeO ₂	104.5858	0.694051
H ₂ O	18.0152	0.111694
HfO ₂	210.4888	0.847979

Oxide	Mol. Wt.	Factor
MnO ₂	86.9368	0.631930
Mn ₃ O ₄	228.8116	0.720304
MoO ₃	143.94	0.6665
Na ₂ O	61.97894	0.741857
Nb ₂ O ₅	265.8098	0.699044
Nd ₂ O ₃	336.4782	0.857351
NiO	74.7094	0.785845
P ₂ O ₅	141.94452	0.436421
PbO	223.1994	0.928318
Pr ₂ O ₃	329.8136	0.854469
Rb ₂ O	186.9350	0.914412
SO ₃	80.0582	0.400459
Sb ₂ O ₃	291.4982	0.835340
Sc ₂ O ₃	137.9100	0.651960
SiO ₂	60.0848	0.467439
Sm ₂ O ₃	348.7982	0.862390
SnO ₂	150.6888	0.787650
SrO	103.6194	0.845595
Ta ₂ O ₅	441.8928	0.818967
Tb ₂ O ₃	365.8490	0.868803
ThO ₂	264.0369	0.878809
TiO ₂	79.8988	0.599508
Ti ₂ O ₃	143.7982	0.666211
Tm ₂ O ₃	385.8666	0.875609

HfO ₂	210.4888	0.847979
Ho ₂ O ₃	377.8588	0.872973
K ₂ O	94.1954	0.830147
La ₂ O ₃	325.8092	0.852680
Li ₂ O	29.8814	0.464570
Lu ₂ O ₃	397.9382	0.879383
MgO	40.3044	0.603036
MnO	70.9374	0.774457

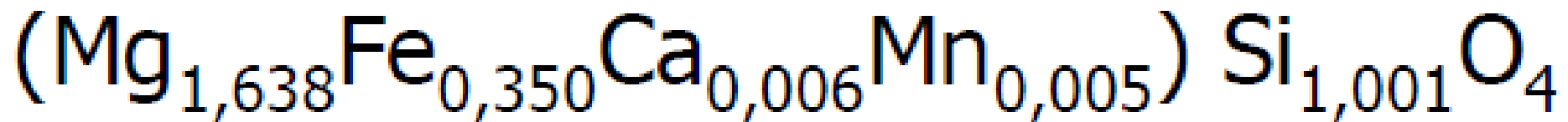
Im ₂ O ₃	385.8666	0.875609
UO ₂	270.0278	0.881498
U ₃ O ₈	842.0822	0.848002
V ₂ O ₅	181.8798	0.560166
WO ₃	231.85	0.7930
Y ₂ O ₃	255.8100	0.787440
Yb ₂ O ₃	394.0782	0.878201
ZnO	81.3794	0.803397
ZrO ₂	123.2188	0.740309

Como fazer?

- Os resultados da análise química, expressos em % de óxidos, já são conhecidos (transcritos na coluna 1).
- O primeiro passo é calcular a quantidade em mols para cada óxido presente, dividindo-se a coluna 1 pela massa molecular respectiva.
- Os resultados são escritos na coluna 2.

Óxido	Massa molecular	1 % óxido	2 Mols óxido
SiO ₂	60,09	39,41	0,6558
FeO	71,85	16,46	0,2291
MnO	70,94	0,21	0,0030
MgO	40,32	43,27	1,0732
CaO	56,08	0,23	0,0041
Σ		99,58	

Podemos escrever a fórmula química desta olivina como:



Ela é uma FORSTERITA

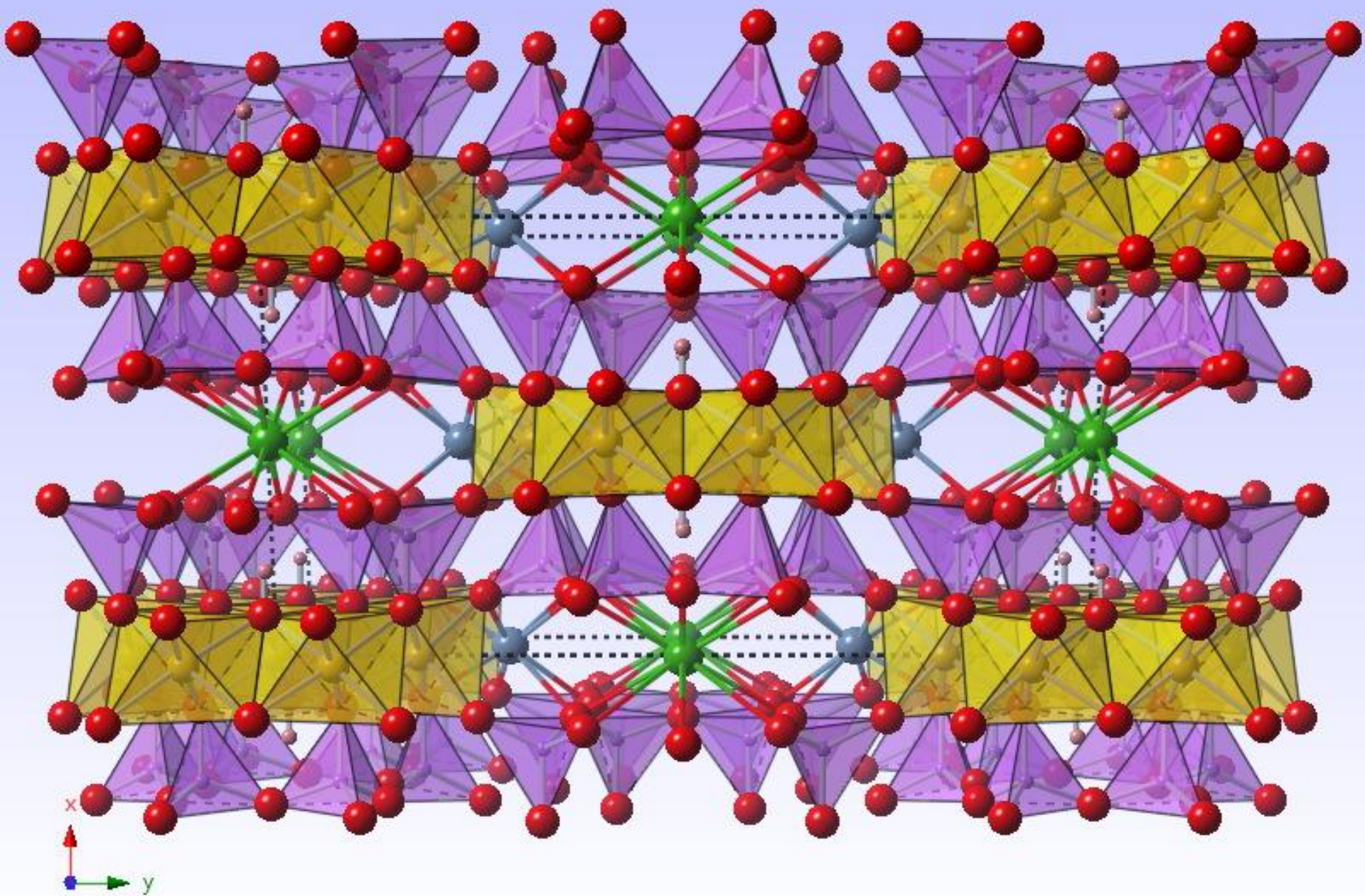
Exercício: Calcule os sítios de ocupação e forneça a fórmula química do mineral com a seguinte composição

	% (m/m)
SiO ₂	57,73
Al ₂ O ₃	12,04
Fe ₂ O ₃	1,16
FeO	5,41
MnO	0,10
MgO	13,02
CaO	1,04
Na ₂ O	6,98
K ₂ O	0,68
H ₂ O	2,27
Σ	100,43

Trata-se de um anfibólio

Fórmula geral: $AX_2Y_5Z_8O_{22}(OH)_2$

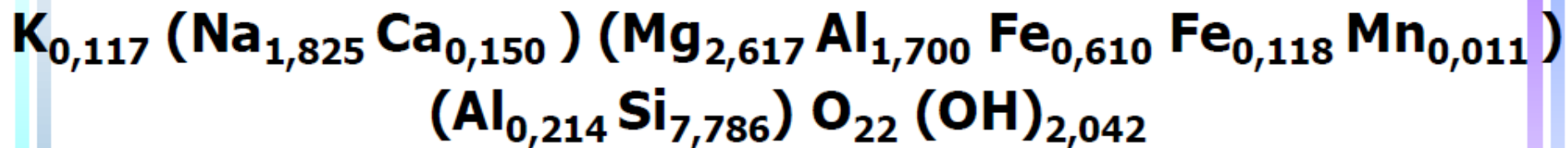
- A = sítio cristalográfico de N.C. 12
- X = sítio cristalográfico de N.C. 6-8
- Y = sítio cristalográfico de N.C. 6
- Z = sítio cristalográfico de N.C. 4



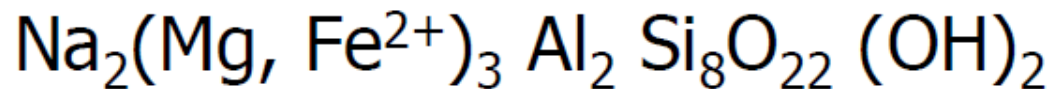
Óxido	Massa molecular	1 % óxido
SiO ₂	60,09	57,73
Al ₂ O ₃	101,94	12,04
Fe ₂ O ₃	159,70	1,16
FeO	71,85	5,41
MnO	70,94	0,10
MgO	40,32	13,02
CaO	56,08	1,04
Na ₂ O	61,98	6,98
K ₂ O	94,20	0,68
H ₂ O	18,02	2,27
Σ		100,43

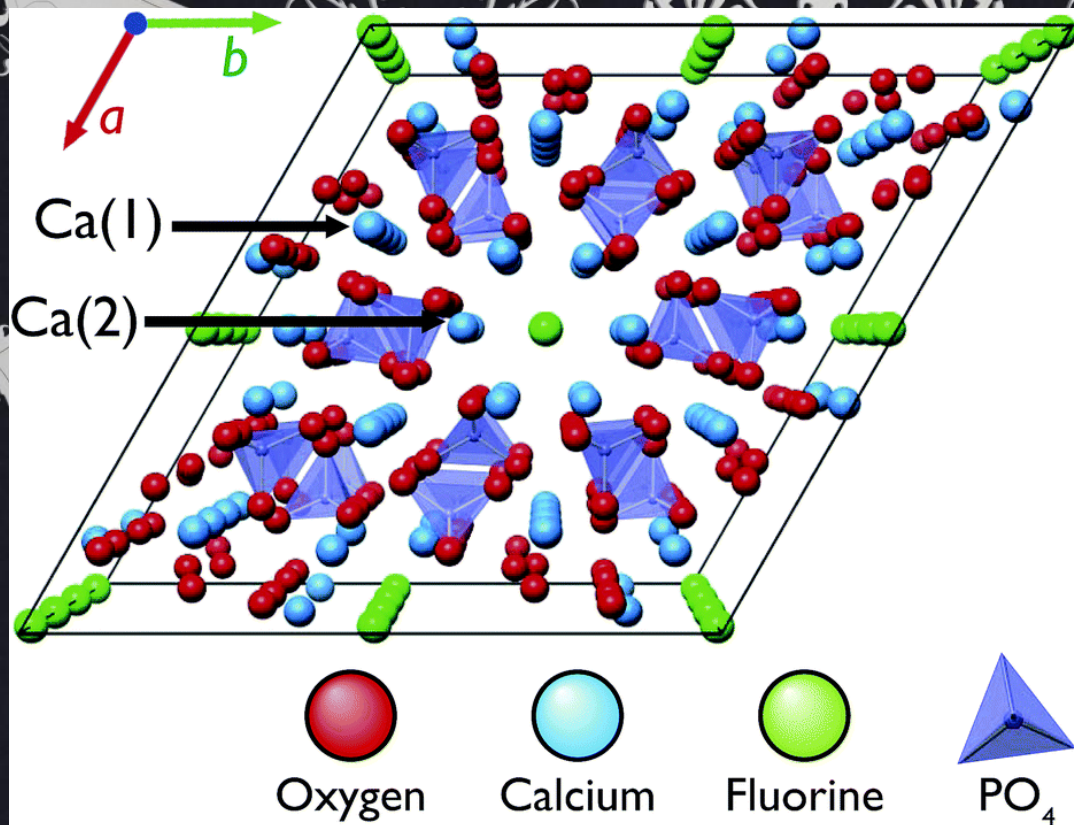
Fórmula geral de um anfibólio: $[AX_2Y_5Z_8O_{22}(OH)_2]$

Fórmula do mineral:



A fórmula é próxima à do glaucofânio:





Fluorapatita
 $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{F}$

CaO 55.60% em massa
P₂O₅ 42.22%
 F 3.77%

Massa Molecular:
CaO 56,08
P₂O₅ 141,94
 F 19,000



Fluorapatita



CaO 55.60% em massa

P_2O_5 42.22%

F 3.77%

-O=F -1,59%

Total 100,00%

Massa Molecular:

CaO 56,08

P_2O_5 141,94

F 19,000

O 16,00|



Fluorapatita



CaO 55.60% em massa

P_2O_5 42.22%

F 3.77%

-O=F -1,59%

Total 100,00%

Massa Molecular:

CaO 56,08

P_2O_5 141,94

F 19,000

O 16,00|

2F 38,00

1O 16,00

$38,00 : 16,00 = 2,375$

$3,77 : 2,375 = 1,59$

Cloroapatita



CaO 53,84% em massa

P_2O_5 40,89%

Cl 6,81%

Massa Molecular:

CaO 56,08

P_2O_5 141,94

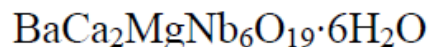
Cl 35,45

2015-018
MELCHERITE

CONFIDENTIAL INFORMATION

DEADLINE: 30 APRIL 2015

2015-018 MELCHERITE



Trigonal Space Group: $R\bar{3}$

a 9.0117(6) Å c 23.3986(16) Å

$V = 1645.64(19)$ Å³ $Z = 3$

¹Marcelo B. Andrade, ²Daniel Atencio*, ³Luiz A.D. Menezes Filho

¹Department of Physics and Interdisciplinary Science, São Carlos Institute of Physics,
University of São Paulo, Caixa Postal 369, 13560-970 São Carlos, SP, Brazil

²Departamento de Mineralogia e Geotectônica, Instituto de Geociências, Universidade de São
Paulo, Rua do Lago 562, 05508-080 São Paulo, SP, Brazil

³Deceased

*e-mail: datencio@usp.br

CHEMICAL DATA

Chemical analyses (13) were carried out by means of a Cameca SX100 electron microprobe (WDS mode, 15 kV, 2 nA, $< 1 \mu\text{m}$ beam diameter). H_2O from the crystal structure. Analytical data are given in Table 1.

Table 1. Analytical data for melcherite.

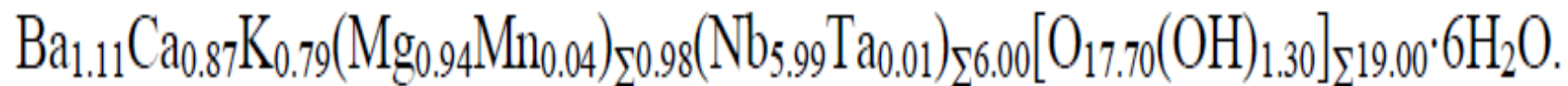
Constituent	wt%	Range	Standard deviation	Probe standard
K_2O	3.03	2.92-3.13	0.06	orthoclase
BaO	13.96	13.57-14.49	0.25	barite
CaO	4.00	3.78-4.22	0.12	wollastonite
MnO	0.22	0.14-0.33	0.05	rhodonite
MgO	3.09	3.04-3.19	0.04	forsterite
Nb_2O_5	65.04	64.21-65.92	0.51	Nb
Ta_2O_5	0.11	0.00-0.38	0.13	LiTaO_3
H_2O	9.79			
Total	99.24			

EM PROBABILIDADE E ESTATÍSTICA, O **DESVIO PADRÃO** É A MEDIDA MAIS COMUM DA DISPERSÃO ESTATÍSTICA (REPRESENTADO PELO SÍMBOLO SIGMA, Σ). ELE MOSTRA O QUANTO DE VARIAÇÃO OU "DISPERSÃO" EXISTE EM RELAÇÃO À MÉDIA (OU VALOR ESPERADO). UM BAIXO DESVIO PADRÃO INDICA QUE OS DADOS TENDEM A ESTAR PRÓXIMOS DA MÉDIA; UM DESVIO PADRÃO ALTO INDICA QUE OS DADOS ESTÃO ESPALHADOS POR UMA GAMA DE VALORES.

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}{(n - 1)}}$$



The empirical formula [based on 6 Nb+Ta] is:



The simplified formula is $\text{BaCa}_2\text{MgNb}_6\text{O}_{19} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, which requires: BaO 12.66, CaO 9.26, MgO 3.33, Nb_2O_5 65.83, H_2O 8.93, Total 100.00 wt.%.

