

INFORMATIQUE ET STATISTIQUES 2

COURS ET TRAVAUX PRATIQUES

Présenté par: Mr Mohammed Salim Hadjidj

Objectifs du cours

- Apprendre l'Excel pour les calculs géochimiques, les études statistiques et pour traçage des graphes et courbes ...
- Initiation au logiciel de cartographie (Surfer)
- Initiation à la cartographie numérique (Système d'information géographique)

Apprendre l'Excel

Apprendre l'Excel

TP 1: Etude sur les formules structurales des minéraux

Composition fine des minéraux

Principe de la microsonde:

La microsonde est un outil qui permet de déterminer la composition d'une phase (minérale ou autre). Le principe est d'envoyer sur un échantillon un faisceau électronique. Lorsqu'un faisceau électronique bombarde une substance, de nombreux processus se déclenchent : émissions d'électrons rétrodiffusés, d'électrons secondaires par la substance, d'électrons réfractés, dégagement de chaleur, lumière, . L'un des rayonnements secondaires est alors envoyé vers un spectromètre. On obtient alors des informations sur la longueur d'onde, l'énergie, la masse des particules constituant le faisceau secondaire, informations qui permettent d'accéder à la nature des éléments de la substance.

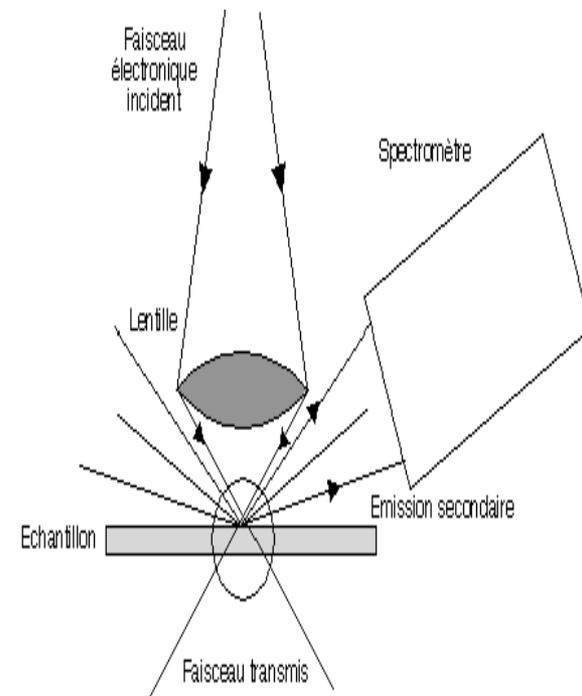


Schéma de la manipulation

Apprendre l'Excel

Analyse quantitative:

Pour passer à une analyse quantitative, il faudrait connaître tous les paramètres de l'appareillage, en l'occurrence l'intensité du faisceau initial, sa perte d'énergie lors de l'interaction avec la substance, le pourcentage de conversion du faisceau primaire en faisceau secondaire, l'effet de la matrice, l'angle du spectromètre, l'efficacité du détecteur ...

Tous ces paramètres sont très difficiles à connaître avec précision. On utilise alors un standard qui va permettre de faire une comparaison entre la concentration connue d'un élément donné dans le standard avec la concentration du même élément dans l'échantillon. Les conditions de travail pour le standard et pour l'échantillon doivent être rigoureusement les mêmes.

Résultats et avantages de l'analyse des minéraux à la microsonde:

La microsonde fournit une analyse quantitative des différents éléments de la substance. Cette analyse est exprimée en %poids d'oxyde, représentant la somme des pourcentages des éléments analysés. La microsonde permet de faire des analyses ponctuelles, de l'ordre de quelques microns carrés. On peut donc avoir une idée de la composition en fonction d'une éventuelle zonation des minéraux.

Apprendre l'Excel

Calcul des formules structurales (principe):

L'objectif du calcul des formules structurales est de passer de la composition en %poids d'oxyde donnée par la microsonde en fraction molaire, en respectant la formule de l'architecture du minéral. Par exemple, on va calculer la formule d'une olivine. Les olivines forment une solution solide entre la fayalite (pôle ferrifère) et la forstérite (pôle magnésien).

Soit une olivine dans la composition est donnée par la colonne [1] :

OLIVINE (4)	% poids d'oxyde	Masse Mol.	Prop. mol.	Cations/m ol	Nb cations/ analyse	Ox/mol	Nb oxygènes/ analyse	Nbr cations/4 oxygène
Element Majeurs	[1]	[2]	[3]	[4]	[5]	[6]	[7]	[8]
4								
SiO ₂	34,96							
Fe ₂ O	36,77							
MgO	27,04							
MnO	0,52							
Total	99,29							

Apprendre l'Excel

Colonne [1] : Composition en % poids d'oxyde

Colonne [2] : masse molaire moléculaire

Colonne [3] : proportions moléculaires. Résultat de la division de la composition par la masse molaire de l'oxyde

Colonne [4] : nombre de cations dans une mole d'oxyde

Colonne [5] : nombre de cations à partir de la composition. Multiplier [3] par [4]

Colonne [6] : nombre d'oxygène dans chaque oxyde. Comptabiliser le nombre d'oxygènes dans chaque oxyde

Colonne [7] : multiplier la proportion moléculaire par [3] le nombre d'oxygène [6].
Faire le total

Colonne [8] : diviser le résultat de l'étape [5] par le total de l'étape [7] et multiplier par le nombre d'oxygène du modèle d'architecture (attention : les oxygènes liés à l'eau ne sont pas comptabilisés). Dans le cas de l'olivine, c'est 4.

Tableau Périodique des Éléments

1 IA New Original	2 IIA											13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	18 VIIIA	
1 H Hydrogène 1.00794																	2 He Hélium 4.002602	
3 Li Lithium 6.941	4 Be Béryllium 9.012182																	
11 Na Sodium 22.989770	12 Mg Magnésium 24.3050	3 IIIB	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8	9 VIIB	10	11 IB	12 IIB	13 Al Aluminium 26.981538	14 Si Silicium 28.0855	15 P Phosphore 30.973761	16 S Soufre 32.066	17 Cl Chlore 35.453	18 Ar Argon 39.948	
19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.955910	22 Ti Titane 47.867	23 V Vanadium 50.9415	24 Cr Chrome 51.9961	25 Mn Manganèse 54.938049	26 Fe Fer 55.8457	27 Co Cobalt 58.933200	28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Cuivre 63.546	30 Zn Zinc 65.409	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.64	33 As Arsenic 74.92160	34 Se Sélénium 78.96	35 Br Brome 79.904	36 Kr Krypton 83.798	
37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.90585	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.90638	42 Mo Molybdène 95.94	43 Tc Technétium (98)	44 Ru Ruthénium 101.07	45 Rh Rhodium 102.90550	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Argent 107.8682	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn Étain 118.710	51 Sb Antimoine 121.760	52 Te Tellure 127.60	53 I Iode 126.90447	54 Xe Xénon 131.293	
55 Cs Césium 132.90545	56 Ba Baryum 137.327	57 to 71		72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantale 180.9479	74 W Tungstène 183.84	75 Re Rhénium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.217	78 Pt Platine 195.078	79 Au Or 196.96655	80 Hg Mercure 200.59	81 Tl Thallium 204.3833	82 Pb Plomb 207.2	83 Bi Bismuth 208.98038	84 Po Polonium (209)	85 At Astate (210)	86 Rn Radon (222)
87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)	89 to 103		104 Rf Rutherfordium (261)	105 Db Dubnium (262)	106 Sg Seaborgium (266)	107 Bh Bohrium (264)	108 Hs Hassium (269)	109 Mt Meitnerium (268)	110 Ds Darmstadtium (271)	111 Rg Roentgenium (272)	112 Uub Ununbium (285)	113 Uut Ununtrium (284)	114 Uuq Ununquadium (289)	115 Uup Ununpentium (288)	116 Uuh Ununhexium (292)	117 Uus Ununseptium	118 Uuo Ununoctium

- Métaux alcalins
- Métaux alcalino-terreux
- Métaux de transition
- Lanthanides
- Actinides
- Métaux pauvres
- Non-métaux
- Gaz rares
- C** Solide
- Br** Liquide
- H** Gaz
- Tc** Artificiel

Atomic masses in parentheses are those of the most stable or common isotope.

Design Copyright © 1997 Michael Dayah (michael@dayah.com), <http://www.dayah.com/periodic/>

57 La Lanthane 138.9055	58 Ce Cérium 140.116	59 Pr Praséodyme 140.90765	60 Nd Néodyme 144.24	61 Pm Prométhium (145)	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.964	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.92534	66 Dy Dysprosium 162.500	67 Ho Holmium 164.93032	68 Er Erbium 167.259	69 Tm Thulium 168.93421	70 Yb Ytterbium 173.04	71 Lu Lutécium 174.967
89 Ac Actinium (227)	90 Th Thorium 232.0381	91 Pa Protactinium 231.03688	92 U Uranium 238.02891	93 Np Neptunium (237)	94 Pu Plutonium (244)	95 Am Américium (243)	96 Cm Curium (247)	97 Bk Berkélium (247)	98 Cf Californium (251)	99 Es Einsteinium (252)	100 Fm Fermium (257)	101 Md Mendelevium (258)	102 No Nobélium (259)	103 Lr Lawrencium (262)

Note: The subgroup numbers 1-18 were adopted in 1984 by the International Union of Pure and Applied Chemistry. The names of elements 112-118 are the Latin equivalents of those numbers.

Apprendre l'Excel

Résultats :

OLIVINE (4)	% poids d'oxyde	Masse Mol.	Prop. mol.	Cations/mol	Nb cations/analyse	Ox/mol	Nb oxygènes/analyse	Nbr cations/4 oxygène
Element Majeurs	[1]	[2]	[3]	[4]	[5]	[6]	[7]	[8]
4								
SiO2	34,96	60,09	0,58179398	1	0,58179398	2	1,16358795	0,98875339
Fe2O	36,77	71,85	0,51176061	2	1,02352122	1	0,51176061	1,7394647
MgO	27,04	40,3	0,67096774	1	0,67096774	1	0,67096774	1,14030337
MnO	0,52	70,94	0,00733014	1	0,00733014	1	0,00733014	0,0124575
Total	99,29						2,35364644	

La formule structurale pour les éléments majeurs est écrite sous forme:



Le rapport Fe/(Fe+Mg) est de 0,60, soit 60% de fayalite dans cette olivine.

Apprendre l'Excel

Exercices 1: calculs des formules structurales d'un pyroxène et d'une amphibole

Soit un PYROXENE dans la composition est donnée par la colonne [1] :

PYROXENE	% poids d'oxyde	Masse Mol.	Prop. mol.	Cations/mol	Nb cations/analyse	Ox/mol	Nb oxygènes/analyse	Nbr cations/6 oxygène
6								
SiO2	50,38							
Al2O3	3,01							
TiO2	0,45							
Fe2O3	1,95							
FeO	4,53							
MgO	14,69							
MnO	0,09							
CaO	24,32							
Na2O	0,46							
K2O	0,15							
Total	100,03							

Q1: Donner la formule structurale pour les éléments majeurs sous cette forme



Q2: Calculer Le rapport $\text{Fe}/(\text{Fe}+\text{Mg})$.

Apprendre l'Excel

Exercices 1: calculs des formules structurales d'un pyroxène et d'une amphibole

Soit un AMPHIBOLE dans la composition est donnée par la colonne [1] :

AMPHIBOL E	% poids d'oxyde	Masse Mol.	Prop. mol.	Cations/mo l	Nb cations/ analyse	Ox/mol	Nb oxygènes/ analyse	Nbr cations/23 oxygène
23								
SiO2	56,16							
Al2O3	0,2							
Fe2O3	1,81							
FeO	6,32							
MgO	19,84							
MnO	2,3							
CaO	9,34							
Na2O	1,3							
K2O	0,14							
H2O+	2,16							
H2O-	0,48							
Total	100,05							

Q1: Donner la formule structurale pour les éléments majeurs sous cette forme



Q2: Calculer Le rapport $\text{Fe}/(\text{Fe}+\text{Mg})$.

Apprendre l'Excel

TP 2: Etude des roches par radiochronologie

Les données isotopiques Rb-Sr sur 3 roches totales des orthogneiss de Baltimore, formés au cours de l'orogénèse de Greenville, sont reportés dans le tableau suivant :

	Rb en ppm	Sr en ppm	$(^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr})_{\text{mes}}$
B20	159,62	127,63	0,75834
B41	203,82	90,28	0,80189
B4	106,77	1336,47	0,70840

1. Calculer le rapport $^{87}\text{Rb}/^{86}\text{Sr}$ de chaque échantillon (en prenant pour les masses atomiques 85 pour ^{85}Rb , 87 pour ^{87}Sr , etc.). On donne $(^{87}\text{Rb}/^{85}\text{Rb})_{\text{atome}} = 0,385706$; $(^{88}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}) = 8,73521$; $(^{84}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}) = 0,056584$.
2. Reporter les points correspondants dans un diagramme $(^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr})$ versus $(^{87}\text{Rb}/^{86}\text{Sr})$. Calculer l'âge de la dernière homogénéisation isotopique de ces échantillons et le rapport $(^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr})$ correspondant. Prendre $\lambda_{^{87}\text{Rb}} = 1,42 \cdot 10^{-11} \text{ an}^{-1}$.

Rappel de calcul de la masse molaire:

$$\frac{\text{poid.moléculaire.1} * \text{proportion} \frac{\text{poid.moléculaire.1}}{\text{poid.moléculaire.1}} + \text{poid.moléculaire.1} * \text{proportion} \frac{\text{poid.moléculaire.1}}{\text{poid.moléculaire.1}}}{\frac{\text{poid.moléculaire.1}}{\text{poid.moléculaire.1}} + \frac{\text{poid.moléculaire.1}}{\text{poid.moléculaire.1}}}$$

Apprendre l'Excel

Calcul d'âge:
$$T = \frac{\ln(\text{pente} + 1)}{\lambda} * 1^6 \dots \text{Million.d'années}$$

3. Le plagioclase, le feldspath K et la biotite ont été séparés et purifiés à partir de l'échantillon B20 ; analysé en Rb-Sr, ils donnent les résultats suivants :

	$^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$	$^{87}\text{Rb}/^{86}\text{Sr}$
B20 Plagioclase	0,74618	0,2965
B20 Feldspath K	0,76017	3,794
B20 Biotite	1,21029	116,45

4. Reporter si possible les points expérimentaux dans les diagrammes ($^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$) versus ($^{87}\text{Rb}/^{86}\text{Sr}$). Comparer l'âge et le rapport ($^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$) de la dernière homogénéisation isotopique pour les roches totales et les minéraux.
5. En considérant que les seules données Rb-Sr sur la biotite et en supposant un ($^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$)₀ de 0,710, calculer l'âge apparent de la biotite B20.

Note: Dans le rapport atomique les concentration sont données en (ppm) partie par millions, or il faut reporter ce rapport en micro mol par gramme au nombre d'Avogadro. $N_A 6,022\ 140\ 857(74) \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$