Geoquímica de Rochas / Litoquímica

Aula Prática: Tratamento de dados geoquímico usando o Petrograph.

1- Reconhecendo o Petrograph

Petrograph é um programa desenvolvido por Maurizio Petrelli e procura atender boa parte das necessidades de cálculos e diagramas utilizados na petrologia de rochas ígneas. O programa de pode ser baixado de <http://accounts.unipg.it/~maurip/SOFTWARE.htm>, escolhendo o link: “click to download de latest version of Petrograph (2beta)” ou digitando: <http://accounts.unipg.it/~maurip/Data/PetroGraph2beta.msi>. A publicação original do programa é:



O programa PetroGraph2beta.msi, descompacta no HD do computador o programa petrograph.exe, legend.txt, res.txt e tutorial.pdf. Além disso, cria as pastas: Data, Examples, Icon, Symbol e Tutorial.

Portanto, antes de instalar o programa no HD, escolha uma pasta para fazer isso. Caso contrário ele usará a raiz do HD.

Antes de fazer rodar o programa, alguns ajustes no computador são necessários, entre eles, definir o ponto como sendo o separador decimal utilizado pelo Windows e Excel.

No Windows 7 e Office 2010, é assim:

1. Vá para o painel de controle,
2. Escolha “Região e Idioma”
3. Depois, “Configurações Adicionais”
4. A página “Personalizar Formato” deverá ser aberta
5. Em Símbolo Decimal escolha “.”
6. Em “Agrupamento de Dígitos” escolha “,”.
7. Clique depois em “OK”

O Petrograph usa o Excel como arquivo de entrada e saída de dados e, portanto, é necessário ajustá-lo também.

No Excel 2010:

1. Clique na aba arquivo,
2. Opções
3. Avançado
4. Em Opções de Edição, clique em “usar separadores de sistema” **ou** em:
5. Definir o separador decimal; escolha o ponto
6. Definir o separador de milhar; escolha a virgula.
7. Clique em “OK.

Agora o programa está pronto para rodar.

Clique no ícone do Petrograph criado na sua área de trabalho, ou em “Todos os Programas” e em “Petrograph”.

Para testar, clique na aba “file”, depois em “import” e em “file Excel (**xls**). Procure a pasta “Exemples” do Petrograph e escolha o arquivo “GEDE2001.xls”e clique em abrir. Se tudo estiver certo, uma janela escrito “importing file” deverá aparecer, mostrando o andamento do processo. Ao final o arquivo será exibido na tela. Salve o arquivo em formato do Petrograph que é “.peg”. Para isso vá em “File”, “Save“, data file (.peg)”.

Observe a estrutura do arquivo. As amostras estão dispostas em linhas e os óxidos, elementos químicos, símbolos e outros parâmetros nas colunas.

Observe que na 1ª coluna aparece o nome-número da amostra. Esta coluna é a única que aceita letras em células além do cabeçalho .

A 2ª coluna mostra um número que corresponde aos símbolos. Para vê-los, clique na aba “Windows” e depois em “Symbol Color Managment”.

O Petrograph aceita mudar a cor dos símbolos. Para isso clique no símbolo desejado. Aparecerá uma janela com a cor do símbolo e seu número. Clique “click to change color”e em uma nova janela aparecerá a paleta de cores. Escolha a preferida e dê um OK. Essa mudança também poderá ser feita quando se clica no penúltimo ícone da barra de ferramentas.”symbol color management”.

A última coluna do arquivo antes de começar a listagem dos dados químicos é a coluna “Plot”. Onde 1= plotar e 0= não plotar.

Pode-se ainda definir o número de casas decimais de elementos, óxidos e isótopos: vá para “Windows”, clique em “options”. Defina o número de casas decimais para os elementos maiores (oxides) e traços (elements). Há também a opção para os isótopos.

Uma das facilidades desse programa é a obtenção de diagramas de classificação e nomenclatura das rochas. Na barra de ferramentas “Classification Diagrams”, escolha “General Classification” e depois, “binary” e “[TAS Alkalies-Silica] volcanic after Le Bas et al. (1986). Copie o diagrama, clicando com o botão direito do mouse sobre a figura e depois em “copy graph”. Vá para o word e cole a figura com (CTRL+V) no espaço abaixo. Existem outras possibilidades: 1- salvar o diagrama com extensão .wmf e depois, inserir a figura com os recursos do word, 2- copiar a figura com CTRL+C e colá-la no Corel Draw com CTRL+V. A figura estará editável. Em ambos os casos é necessário “educar” o diagrama, para que ele fique no lugar desejado. Depois de colar a figura, no word, clique com o botão direito do mouse sobre a figura e vá para “tamanho e posição”, depois disposição do texto e, por fim, clique na opção na frente do texto. Arraste e deforme a figura para que ela fique com o tamanho desejado.

No Petrograph, faça agora um diagrama de classificação ternário A-F-M, da seguinte maneira: na barra de ferramentas “Classification Diagrams”, escolha “General Classification” e depois, “triangular”, AFM- after Irvine & Baragar (1971).

Cole as figuras no espaço abaixo.

O Petrograph oferece algumas outras possibilidades de cálculos para variáveis geoquímicas. Para isso, na barra de ferramentas, entre em “binary plots” e depois em “Operations”. Como exemplo, peça para ele inserir o Índice de Solidificação (SI). Clique em “OK”. (*Obs: alguns desses cálculos ele não faz, como por exemplo o Mg#)*. Insira também o índice de Larsen . Observe que esses índices aparecem na janela de X e de Y.

$SI=\frac{MgO}{MgO+Na\_{2}O+K\_{2}O+FeO\_{t}}$ e $LI=\left(\frac{1}{3}SiO\_{2}+K\_{2}O\right)-(CaO+MgO+FeO\_{t})$

Agora faça os diagramas binários de SI x MgO e LI x SiO2. Para isso vá, na barra de ferramentas para “new bnary plot” e escolha no 1º caso X como sendo o índice deSolidificção e Y como MgO. Copie e cole os diagramas no espaço abaixo.

Via de regra há uma boa correlação entre os índices dos diagramas (SiO2 com LI e SI com MgO). Por que? \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Vamos experimentar mais um pouco essas operações. Faça agora um diagrama de Zr x Ba/Zr. Para isso, vá para “binary plots”. Escolha Zr para o eixo X na caixa suspensa e para Y clique em “operations”. Na caixa suspensa A escolha Ba e na B, Zr. Clique em A/B. Clique em OK. A variável Ba/Zr estará definida. Procure-a quando for escolher a variável Y. Faça o diagrama e cole no espaço abaixo.

2- Aplicando os dados a um exemplo real.

Em [www.rc.unesp.br/igce/petrologia/nardy/pmpex.xlsx](http://www.rc.unesp.br/igce/petrologia/nardy/pmpex.xls) há um arquivo com dados referentes à Provínicia Magmática do Paraná. Os dados foram extraídos de Piccirillo & Melfi, 1988. As rochas analisadas possuem paragênese mineral simples: augitas, plagioclásio, magnetita, apatita, ±pigeonita, ±olivina, ±ilmenita, ±hiperstênio (nos termos ácidos). Mais raramente ainda, quartzo e feldspato alcalino são observados em intercrescimento micrográfico na matriz. Antes de observar os gráficos pelo Petrograph, algumas modificações e cálculos serão necessários para atingir os objetivos pretendidos. *Use o Excel para fazer isso*. Assim:

1. Como toda a mineralogia é anidra, resultados de rochas com valores de LOI≥ 2,0% deverão ser deletados.
2. Os resultados de FeO e Fe2O3 deverão ser ajustados. Recalcule esses dados admitindo para as rochas com SiO2<60% valores de Fe2O3/FeO= 0,175 e para concentrações em SiO2≥ 60%, use valores iguais a 0,150. *Se FeO= 1,50% e Fe2O3= 3,00%, então: FeO+Fe2O3= 4,50%. Porém: Fe2O3= 0,175FeO e então: FeO+0,175FeO= 4,50% e 1,175FeO=4,50% e* ***FeO= 3,83%*** *e o* ***Fe2O3=*** *4,50-3,83=* ***0,67%.***
3. Normalize todos os resultados a 100% em base anidra, usando os dados de Fe2O3 e FeO calculados anteriormente.
4. Calcule o valor de FeOt (= FeO+0,9Fe2O3), crie uma coluna para isso,
5. Como o Petrograph não calcula o valor de Mg# (*dá sempre erro!*), faça isso por conta própria:

$Mg\#= \frac{Mg}{Mg+Fe^{2+}}$\*100 onde: Mg=MgO/24,31 e Fe= FeOt/15,99

Use a “calculadora” de: <http://web.visionlearning.com/MW_calculator.shtml>, para esses cálculos.

1. Calcule os valores de R1 e R2, sendo que:

R1= [4Si-11(Na+K)-2(Fe+Ti)]\*1000 e R2= (6Ca+2Mg+Al)\*1000.

Assim no Al2O3 há dois cátions então o PM da molécula deverá ser dividido por 2.

Use a “calculadora” fornecida abaixo para os cálculos: <http://web.visionlearning.com/MW_calculator.shtml>.

1. Tendo em vista que todos os cálculos já estão feitos, é interessante salvar a planilha em outra colando os dados apenas como valores. Marque a planilha toda e copie todos os dados com “CTRL+C”. Abra uma nova planilha, e clique no ícone “colar especial”, “apenas valores”. Os formatos poderão ser mantidos. A planilha agora não tem mais fórmulas ou valores que dependam da sua posição na planilha e, assim, pode ser tratada de forma mais livre, sem haver recálculos indesejáveis.
2. Ordene o conjunto de amostras em grupos da seguinte maneira: (Use o Excel para fazer isso: escolha a aba “Dados” e em seguida “Classificar” conforme necessidades)
3. Rochas com menos de 54% de SiO2- chame-as de basalto. Atribua um mesmo símbolo a eles.
4. Separe os basaltos em 3 grupos: BTi= aqueles com TiO2<2%, ITi= 3<TiO2≤ 2% e ATi= TiO2≥ 3%. Atribua a cada um destes grupos cores diferentes.
5. As rochas com 54%≤ SiO2 < 61% chame-as de andesito. Atribua símbolo e cor própria para o grupo.
6. As rochas com 61 < SiO2 < 69% e com Ba≥ 1000 ppm, chame-as de ATC. Atribua símbolo e cor próprias.
7. As rochas com SiO2 > 61% mas com Ba < 1000 ppm, chame-as de ATP. Atribua símbolo e cor própria.
8. Lembre-se que o Petrograph, com exceção da 1ª coluna, só aceita números. Ou seja, faça uma legenda para preparar o arquivo para ser exportado. Use o espaço abaixo para isso.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Tipo | Símbolo (no) | Cor (no) |
| BTI |  |  |
| ITI |  |  |
| AND |  |  |
| ATP |  |  |
| ATC |  |  |

1. Salve o arquivo em .xls e importe-o pelo Petrograph.
2. Faça um diagrama de nomenclatura dessas rochas segundo o diagrama TAS, volcanic rocks, Le Bas et al.(1986). Copie e cole o diagrama no espaço abaixo.
3. Faça um diagrama triangular do tipo AFM, seg. Irvine & Baragar (1971). Copie e cole o diagrama no espaço abaixo.
4. Faça um diagrama binário de R1xR2. Copie o diagrame e cole na Figura petrographR1xR2.cdr ou petrographR1xR2.jpg, baixando de [http://www.rc.unesp.br/igce/petrologia/nardy/R1XR2.cdr](http://www.rc.unesp.br/igce/petrologia/nardy/R1XR2.cdr%20) .ou

<http://www.rc.unesp.br/igce/petrologia/nardy/R1XR2.jpg>

1. Cole o diagrama produzido no espaço abaixo.
2. Comente os resultados obtidos Ex.: os basaltos ATi tem valores de R1 menores do que os BTi. No diagrama TAS as rochas ácidas ATP são riolitos enquanto as ATC riodacitos, etc.
3. Qual o caráter dessas associações? Alcalina ou subalcalina? (Veja no diagrama TAS)
4. Se subalcalinas, são toléiticas ou cálcio-alcalinas? Veja no diagrama A-F-M.
5. Faça alguns diagramas de variação de elementos maiores e traços usando algum índice de evolução magmática (SiO2, MgO, SI, etc) que mostrem as principais diferenças em termos de composição para os diferentes tipos de rocha. Cole os diagramas no espaço abaixo.

4- Fazendo diagramas de elementos terras raras.

1. - Começando por um exemplo. Escolha da planilha de dados, duas ou três amostras de cada tipo de rocha BBT, BIT, BAT, AND, ATP e ATC. Para as amostras de basalto (BxT), escolha amostras entre os grupos com concentrações de MgO aproximadamente iguais e crescentes. Faça o mesmo para as rochas ATP e ATC, escolhendo de duas ou três amostras de cada grupo, baseado nas concentrações de SiO2.
2. Na barra de ferramentas do Petrograph clique no ícone “new spider plot”
3. No menu suspenso à esquerda escrito “sample” clique em uma amostra e depois em “add”. A amostra aparece no quadro da direita. Somente essas amostras é que serão plotadas nos diagramas. Adicione todas as amostas escolhidas.
4. Em “normalizing menu” escolha o “condrito de Boynton (1984) para o cálculo das concentrações relativas. A direita, aparecem retângulos amarelos com os valores das concentrações de elementos terras raras que irão normalizar as amostras.
5. Clique em plot. Veja que mesmo as amostras que não possuam algum elemento determinado, esse aparece no eixo das abcissas mas o programa une os elementos próximos a ele, ou seja, a curva não é interrompida.
6. Copie e cole o diagrama no espaço abaixo.
7. Os diagramas de elementos terras raras (ETR) são utilizados para entender processos petrogenéticos associados a uma suíte de rochas. A distribuição desses elementos pode indicar alguns dos processos envolvidos. Normalmente a interpretação leva em consideração os minerais envolvidos no processo, como na cristalização e fusão, p.ex.
8. Observe o gráfico abaixo que mostra os valores dos KD (coeficientes de distribuição) de ETR para alguns minerais, inclusive daqueles que constituem a paragênese das rochas da PMP.

Líquido basáltico

1. Assim toda vez que, durante um processo de cristalização fracionada, cristaliza-se um mineral com KD de um ETR elevado (>1), o resultado é a diminuição da concentração desse elemento no líquido residual. Se ao contrário, o valor de KD do ETR for pequeno (<1) há aumento da concentração dessse elemento no líquido residual.
2. As rochas vulcânicas da Provínicia Magmática do Paraná (PMP) são caracterizadas pelas associação de basaltos tipo BBT, andesitos (AND) e rochas ácidas do tipo (ATP), chamadas de Associação Toleíticas (TH). Essa associação ocorre na região sul da PMP (ao sul do alinhamento do Rio Uruguai). Os basaltos do tipo BIT e BAT estão associados às rochas ácidas do tipo ATC na porção centro norte da PMP.Essa associação é denominada de toléitica-transiocional (TH-TR).
3. Sendo assim, vamos tentar observar se há diferenças entre as rochas dessas duas grandes associações.
4. Para isso, clique na aba “windows” e depois em “operation” e em “REE operation” calcule o Eu/Eu\*, La/Yb, La/Sm, tb/Yb e REE total.
5. A razão Eu/Eu\* corresponde ao fracionamento do feldspato, a de La/Yb o enriquecimento ou empobrecimento dos ETR leves em relação às pesadas, La/Sm= a relação entre ETR leves e intermediárias, Tb/Yb= a relação entre ETR intermediárias e pesadas e REEtot= a concnentração total de ETR. Olhe na atabela e veja se é possível reconhecer as rochas pertencentes a cada um desses grupos. Em parte essa comparação também pode ser observada em diagramas.
6. Faça o seguinte: com as duas ou três amostras previamente escolhidas para cada grupo de basalto (BBT, BIT e BAT), faça um diagrama de “sombras”. Clique em “new spider plot”, depois em “REE”. Escolha o “condrito de Boynton (1984)” para o cálculo das concentrações relativas. Marque as amostras BBT identificando em “sample” e depois “add”. Depois de acrescentadas as amostras clique em “area1”. Uma nova janela será aberta e escolha uma cor para o sombreado e depois clique em “activate area”. Depois, escolha as amostras BIT, e clique em area 2, etc. Para facilitar a visualização escolha cores diferentes para as áreras sombreadas.
7. Depois de selecionadas as amostras de cada um dos grupos, correspondentes a três áreas” clique em “plot”.
8. Copie e cole o diagrama no espaço abaixo.
9. Faça um segundo diagrama do mesmo jeito usando os AND, e as rochas ATP e ATC, escolhendo áreas diferentes para cada uma delas
10. Copie e cole os diagramas no espaço abaixo.
11. Com os dados dos diagramas e daqueles calculados, comente os resultados. Quais as diferenças, em termos de ETR, das associações TH e TH-TR? Utilize as razões La/Ybn, Eu/Eu\*, etc, obtidos no item l.
12. Considerando a mineralogia modal observada, veja item 2 acima, o diagrama dos valores de KD para os ETR de diferentes minerais, e os cálculos efetuados no item s, e se admitido um processo de cristalização fracionada como sendo o responsável pela geração das rochas percentenes a cada um dos grupos – alto-Ti (TH-TR) e baixo-Ti (TH) é possível reconhecer nos diagramas as fases minerais fracionadas?

5- Fazendo diagramas do tipo *spider*

Diagramas do tipo *spider*, à exemplo dos diagramas de ETR, são diagramas multielementares normalizados por algum material natural, como condritos, manto primitivo,etc. São utilizados para a caracterização geoquímica de ambientes geotectônicos específicos, onde a semelhança na configuração das curvas de distribuição pode indicar uma mesma origem.

O Petrograph faz esses diagramas com muita facilidade com várias possibilidades de normalização, inclusive personalizada. Veja lá.

- Carregue o arquivo **pmpex.xls** no excel e acrescente a ele o arquivo “ocean basalts.xls” e dê símbolos diferentes a eles.

- Para fazer o diagrama escolha as mesmas amostras utilizadas no diagramas de REE além das amostras que estavam no arquivo “ocean basalts”

- Em "Plot” selecione “spider” e depois escolha “other spider”. A janela “spiders” se abrirá.

- Escolha em “select spider”, “Primordial mantle-McDonough & Sun (1995)”.

- Agora escolha as amostras que serão plotadas em “sample selection”, clicando após cada amostra escolhida o botão ‘add”. Por fim, clique em plot.

-Copie o diagrama obtido para o espaço abaixo.

- Para interpretar os resultados é importante verificar o comportamento de cada elemento e destacar aqueles que se apresentam com anomalias positivas (picos) ou negativas (vales).

- Para facilitar a comparação é importante quantificar essas anomalias, dividindo-se a concentração do elemento considerado pelo a de seu antecessor no diagrama.

- Faça esses cálculos na planilha do Excel.

- Normalmente, é preferível fazer esses cálculos usando os valores dos elementos já normalizados. Se optar por isso, será necessário fazer a normalização dos dados na planilha do Excel. Nesse caso, vá para a pasta do Petrograph e nela, selecione a pasta data e selecione o arquivo “SPIDER-PrimordialMantle-McDonough&Sun1995.txt”. O arquivo está copiado abaixo:

18

Cs

0.018

Rb

0.550

Ba

5.100

Th

0.064

U

0.018

K

180

Ta

0.040

Nb

0.560

La

0.551

Ce

1.436

Sr

17.800

Nd

1.067

Hf

0.270

Zr

8.300

Sm

0.347

Ti

960

Tb

0.087

Y

3.400

18

Cs

0.018

Rb

0.550

Ba

5.100

Th

0.064

U

0.018

K

180

Ta

0.040

Nb

0.560

La

0.551

Ce

1.436

Sr

17.800

Nd

1.067

Hf

0.270

Zr

8.300

Sm

0.347

Ti

960

Tb

0.087

Y

3.400

Onde, 18 é o número de elementos, seguidos dos símbolos dos elementos e suas concentrações.

-Comente os resultados obtidos.