

2018 - 2023

DIPLÔME D'UNIVERSITÉ DE GEMMOLOGIE

**présenté
devant l'Université de Nantes
U.F.R. des Sciences et des Techniques**

**par
Melle. Marine BOUVIER**

**MÉTHODES DE CALCUL DES FORMULES
STRUCTURALES DES GEMMES**

**soutenu publiquement le 18/01/2023
au Département des Sciences de la Terre et de l'Univers
devant la commission d'examen composée de :**

**M. E. FRITSCH
M. C. LATOUCHE
M. C. EWELS
M. S. KARAMELAS
M. F. NOTARI
M. B. LASNIER**

*Professeur
Maître de Conférences
Directeur de recherche
Chef gemmologue, LFG, Paris
Directeur, GGTL, Genève
Professeur émérite*

Président
Vice-Président
Examineur
Examineur
Examineur
Invité

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier toutes les personnes qui m'ont accompagnées tout au long de ce diplôme et de ce mémoire.

En premier lieu, le **Pr. Emmanuel Fritsch** pour son enseignement bienveillant et son dévouement à notre égard tout au long de ce DUG malgré les nombreuses difficultés dues au contexte actuel.

Les membres de l'équipe pédagogique – **le Dr. Éloïse Gaillou, Dr. Stephanos Karampelas, Pr. Camille Latouche et le Pr. Franck Notari** – pour leurs enseignements, et qui sont parfois venus de (très) loin pour nous enseigner leur savoir.

Les **membres du jury** qui ont acceptés d'évaluer ce travail et de s'adapter pour permettre nos soutenances en ces temps particuliers.

Tous les ingénieurs qui nous ont aidé à maintes reprises sur les différentes machines, et en particulier **Nicolas Stephant**, ingénieur du MEB, pour son infinie patience et son aide précieuse.

Dr Féodor Blumentritt, qui, malgré sa thèse, a su trouver le temps de venir nous aider sur les instruments. Je le remercie tout particulièrement d'avoir travaillé avec moi en binôme lors de la dernière séance de MEB afin de me permettre d'obtenir des résultats fiables et utilisables pour ce mémoire.

Mes camarades et amis géo-gemmologues du DUG, **Léonard et Florine**, pour leur aide très précieuse et pour toutes nos soirées révisions à distance, de Nice au Groenland en passant par Paris.

M. **Jean-Marie Arlabosse** pour m'avoir permis de découvrir pour la première fois le monde de la gemmologie de laboratoire, ainsi que pour ses conseils avisés bien avant le début de cette aventure.

M. **Sylvain Bensa**, négociant en pierres précieuses et ami de confiance, qui n'a eu de cesse de croire en moi et de me motiver depuis le début. Merci aussi pour le temps pris du Sri Lanka pour relire ce travail.

M. **Thierry Pradat** pour m'avoir permis de trouver certains échantillons utiles à ce mémoire.

A tou.te.s mes **ami.e.s gemmologues et passionné.e.s**, en particulier ceux et celles du **groupe de Nice et Lyon**, que je remercie pour leur précieuse amitié, leur bienveillance et leur soutien depuis de nombreuses années.

A toutes **les autres personnes** présent.e.s au quotidien, avec qui la vie est toujours plus belle et passionnante.

En dernier lieu je remercie ma famille dont **mes parents** qui me soutiennent jour après jour et qui supportent mon amour des pierres au point de bien vouloir le partager avec moi. Je vous dédie ce mémoire.

*« En plein cœur de toute difficulté se cache une possibilité »
Albert Einstein*

SOMMAIRE

REMERCIEMENTS	2
SOMMAIRE	3
INTRODUCTION	6
CHAPITRE I : ÉTAT DE L'ART	7
I. CHOIX DES MÉTHODES	7
II. DÉFINITION D'UNE SÉRIE CONTINUE	7
CHAPITRE II : MATÉRIELS & ÉCHANTILLONS	8
I. ÉCHANTILLONS	8
II. MATÉRIEL	9
1. GEMMOLOGIE CLASSIQUE	9
2. MICROSCOPE ÉLECTRONIQUE À BALAYAGE (MEB)	9
CHAPITRE III : RÉSULTATS	10
I. MÉTHODES DE CALCUL ADAPTÉES À LA FAMILLE DES GRENATS	10
1. GÉNÉRALITÉS SUR LA FAMILLE DES GRENATS	10
2. ÉCHANTILLON MB03	11
A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER »	11
a. Détails des calculs	11
b. Tableau récapitulatif	14
B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN »	14
a. Détails des calculs	14
b. Tableau récapitulatif	15
C. « Méthode GABBROSOFT »	16
3. ÉCHANTILLON MB04	17
A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER »	17
a. Détails des calculs	17
b. Tableau récapitulatif	20
B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN »	20
a. Détails des calculs	20
b. Tableau récapitulatif	21
C. « Méthode GABBROSOFT »	22
4. ÉCHANTILLON MB05	23
A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER »	23
a. Détails des calculs	23
b. Tableau récapitulatif	26
B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN »	26
a. Détails des calculs	26
b. Tableau récapitulatif	27
C. « Méthode GABBROSOFT »	28
5. ÉCHANTILLON MB15	29
A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER »	29
a. Détails des calculs	29
b. Tableau récapitulatif	31
B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN »	32
a. Détails des calculs	32
b. Tableau récapitulatif	33
C. « Méthode GABBROSOFT »	33
D. Méthode de calculs « VIA POTHION »	35
II. MÉTHODES DE CALCUL ADAPTÉES À LA FAMILLE DES OLIVINES	37
1. GÉNÉRALITÉS SUR LA FAMILLE DES OLIVINES	37
2. ÉCHANTILLON MB14	37
A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER »	37
a. Détails des calculs	37
b. Tableau récapitulatif	39
B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN »	39

a. Détails des calculs.....	39
b. Tableau récapitulatif	40
C. « Méthode GABBROSOFT ».....	41

III. MÉTHODES DE CALCUL ADAPTÉES À LA FAMILLE DES FELDSPATHS 43

1. GÉNÉRALITÉS SUR LA FAMILLE DES FELDSPATHS 43

2. ÉCHANTILLON MB09 44

A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER ».....44

a. Détails des calculs.....44

b. Tableau récapitulatif46

B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN ».....46

a. Détails des calculs.....46

b. Tableau récapitulatif47

C. « Méthode GABBROSOFT ».....48

3. ÉCHANTILLON MB07 49

A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER ».....49

a. Détails des calculs.....49

b. Tableau récapitulatif51

B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN ».....51

a. Détails des calculs.....51

b. Tableau récapitulatif52

C. « Méthode GABBROSOFT ».....53

IV. MÉTHODES DE CALCUL ADAPTÉES AU GROUPE DES SPINELLES 55

1. GÉNÉRALITÉS SUR LE GROUPE DES SPINELLES 55

2. ÉCHANTILLON MB10 56

A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER ».....56

a. Détails des calculs.....56

b. Tableau récapitulatif58

B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN ».....58

a. Détails des calculs.....58

b. Tableau récapitulatif59

C. « Méthode GABBROSOFT ».....60

V. MÉTHODES DE CALCUL ADAPTÉES À LA FAMILLE DES PYROXÈNES 61

1. GÉNÉRALITÉS SUR LA FAMILLE DES PYROXÈNES 61

2. ÉCHANTILLON MB16 63

A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER ».....63

a. Détails des calculs.....63

b. Tableau récapitulatif65

B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN ».....66

a. Détails des calculs.....66

b. Tableau récapitulatif67

C. « Méthode GABBROSOFT ».....68

CHAPITRE IV : DISCUSSION 70

I. PERTINENCE DES RÉSULTATS ET COMPARAISON À LA LITTÉRATURE 70

1. TABLEAUX RÉCAPITULATIFS DES RÉSULTATS DES TROIS MÉTHODES PAR ÉCHANTILLON 70

2. CONCLUSION DES RÉSULTATS ET DE LA COMPARAISON À LA LITTÉRATURE 74

II. PROBLÈMES RENCONTRÉS LORS DES CALCULS 74

1. L'ANALYSE DU FER : DIFFÉRENCIATION ENTRE FER FERRUUX ET FER FERRIQUE 74

2. DIFFÉRENCE ENTRE FORMULE THÉORIQUE ET RÉSULTATS OBTENUS 75

III. COMPARAISON DES MÉTHODES ENTRE ELLES 75

1. « MÉTHODE LASNIER » 75

2. « MÉTHODE HANNEMAN » 76

3. « MÉTHODE GABBROSOFT » 76

CONCLUSION 77

I. PROPOSITION SUR LE CHOIX DE LA MÉTHODE LA PLUS APPROPRIÉE EN FONCTION DE L'OBJECTIF À ATTEINDRE 77

II. FICHES DE TRAVAIL : TABLEAUX À COMPLÉTER 77

ANNEXES 87

Annexe 1 : RÉSULTATS DES ANALYSES CHIMIQUES 87

Annexe 1.1 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon **MB03** 87

Annexe 1.2 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon **MB04** 87

Annexe 1.3 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon **MB05** 87

Annexe 1.4 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon **MB15** 88

Annexe 1.5 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon **MB14** 88

Annexe 1.6 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon **MB09** 89

Annexe 1.7 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon **MB07** 89

Annexe 1.8 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon **MB10** 89

Annexe 1.9 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon **MB16** 90

Annexe 2 : SCHÉMA DES SÉRIES CONTINUES DES GRENATS 91

Annexe 3 : TABLEAU DE MENDELEÏEV ET SON APPLICATION 92

Annexe 4 : FICHES RÉCAPITULATIVES DES MÉTHODES EN FONCTION DES FAMILLES DE GEMMES 92

INTRODUCTION

Ce travail original me fut proposé par le Pr. Emmanuel Fritsch dans le cadre d'un mémoire expérimental à soutenir devant un jury pour permettre l'obtention du Diplôme Universitaire de Gemmologie de Nantes en 2023. L'objectif premier proposé par le Pr. Fritsch était d'expliquer et de moderniser la méthode de calculs de la formule structurale expliquée dans le livret du cours de physique-chimie dispensé par le Pr Bernard Lasnier en 1968. J'ai par la suite souhaité développer cet objectif afin de permettre à mon travail une utilité tangible pour toutes personnes souhaitant calculer la formule structurale d'une gemme de façon claire et compréhensible, notamment les gemmologues, moins initiés à ce type de calculs.

Mais qu'est-ce qu'une formule structurale ?

La formule structurale d'un minéral correspond à la **formule chimique permettant de connaître la composition exacte pour chaque élément composant ledit minéral**. On peut ainsi déterminer la quantité exacte de chaque élément ou oxyde ou occupants des différents sites du minéral. Par extension, le calcul de la **formule structurale** permet généralement de connaître la **teneur en pôles purs** des minéraux qui correspondent à des **solutions solides**.

En gemmologie, de nombreuses variétés de gemmes correspondent en réalité à des minéraux qui sont des solutions solides. On notera, par exemple, les familles des grenats, des feldspaths, des pyroxènes, des spinelles, les olivines, les scapolites mais encore les séries très complexes des tourmalines ou des amphiboles.

Quelles sont les applications du calcul de la formule structurale en gemmologie ?

C'est en *géologie* que l'on retrouvera le plus souvent l'application et le développement de ces méthodes de calcul compte tenu du nombre très vaste de minéraux correspondant à des solutions solides. Cependant, ces calculs sont souvent peu adaptés à la gemmologie car les minéraux auxquels s'intéressent les géologues sont rarement des variétés de qualité « gemme » (transparentes) auxquelles s'intéressent les gemmologues.

En *gemmologie*, ces méthodes de calcul sont utilisées depuis des décennies, notamment dans le cadre d'**articles scientifiques** (Stockwell, 1927). En effet, connaître la composition exacte d'un minéral par le biais d'un calcul de la formule structurale et de la teneur en pôles purs d'un minéral est fortement utile et même incontournable dans de nombreuses démarches scientifiques, par exemple : pour **déterminer la nature d'un échantillon de référence** provenant d'un nouveau gisement ; permettre à des **laboratoires de gemmologie de différencier plusieurs gisements** (à des fins d'authentification d'origines) ; pour **comparer** la composition chimique d'échantillons provenant de différentes mines ; pour permettre la procédure de **validation d'un nouveau minéral auprès de l'IMA** (International Mineralogical Association, 2020) ; définir le **nom d'une variété** ; mais encore pour s'assurer de la **nature exacte d'une gemme** afin de s'assurer de sa valeur exacte notamment si la gemme est rare et recherchée et/ou si elle doit être vendue. Ces démarches ne sont qu'une partie des exemples d'applications possibles de ces méthodes de calcul en gemmologie. Cependant, leurs **longueurs et le fait** que leurs **méthodes de calcul soient rarement détaillées** (en général seuls les résultats finaux sont partagés) rend leur utilisation complexe. Enfin, ce type de calculs fait appel à des **notions de gemmologie avancée** car ils ne sont pas enseignés en gemmologie classique, d'où l'intérêt de les présenter à travers ce mémoire.

Quels est l'objectif principal de ce mémoire ?

L'objectif principal de ce mémoire pourrait se résumer comme suit :

« Quelles sont les différentes méthodes pour calculer la formule structure et la teneur en pôle purs d'une gemme qui est une solution solide ? Comment et dans quels cas les utiliser ? »

Ce travail est réalisé dans un **but gemmologique pédagogique** afin que les calculs proposés puissent être reproduits le plus facilement possible par tout gemmologue souhaitant étudier une gemme qui est une solution solide, incluant les futurs étudiants du DUG du Nantes. Les calculs seront donc **entièrement détaillés, expliqués puis résumés** sous forme de tableaux. Dans ce but, nous avons également choisi d'appliquer nos calculs à des minéraux faisant partie de cinq séries continues très souvent rencontrées en gemmologie, c'est-à-dire **les grenats, les olivines, les feldspaths, les pyroxènes et les spinelles**. A noter que les « super-groupes » très représentés en gemmologie, tels que les tourmalines et amphiboles, n'ont pas été abordés dans ce mémoire à cause de la trop grande complexité des calculs qu'ils auraient engendrés (beaucoup de variétés, nombreux sites vacants etc.).

Compte tenu de cet objectif et du long travail de détails qu'il génère, il a été convenu avec le Pr. Emmanuel Fritsch de pouvoir dépasser le nombre de pages initialement fixé pour ce mémoire (qui était de 30 pages) afin de pouvoir pleinement répondre à l'objectif pédagogique fixé.

Dans un **premier temps** nous expliquerons l'état de l'Art actuel avec les trois méthodes que nous avons décidé d'utiliser dans ce mémoire et les raisons qui nous ont poussé à les choisir.

Une **seconde partie** expliquera le matériel utilisé et les échantillons sélectionnés.

Une **troisième partie**, celle des résultats, détaillera l'ensemble des calculs réalisés pour les trois méthodes choisies et appliqués à chaque échantillon. Chaque calcul étant récapitulé sous forme de tableaux pour permettre une lecture simple et compréhensible.

Une **quatrième partie**, la discussion, permettra de comparer les méthodes de calcul choisies à la fois entre elles, puis aux données de la littérature. Cette partie détaillera également les points forts et les difficultés de chaque méthode.

Enfin, la **conclusion** s'efforcera de proposer une façon de choisir la méthode la plus appropriée en fonction de l'objectif que la personne souhaite atteindre. Des feuilles de travail sous forme de tableaux « à compléter » seront proposées afin de permettre de réaliser facilement et rapidement les calculs de la méthode choisie pour chacune des 5 séries continues étudiée dans ce mémoire.

Suivront les **références bibliographiques** et les **annexes** qui regrouperont, entre autres, les résultats des analyses chimiques ainsi que les tableaux des feuilles de travail en format agrandi.

CHAPITRE I : ÉTAT DE L'ART

I. CHOIX DES METHODES

La première référence de ce mémoire, et celle sur laquelle je me suis initialement basée, correspond à un livret regroupant des cours de physique-chimie dispensés par le Pr. Bernard Lasnier en 1968. Ce travail dactylographié de 20 pages intitulé « Mode de calcul des formules structurales des ... Grenats, Pyroxènes, Amphiboles, à partir de données pondérales de l'analyse chimique », détaille une méthode permettant de calculer les formules structurales et des teneurs en pôles purs des phases solides des familles des grenats, des pyroxènes et des amphiboles. Me basant sur la méthode qui y été décrite, j'ai choisi de l'utiliser pour mes échantillons faisant partie des familles des grenats et des pyroxènes, et de m'en inspirer afin d'utiliser le même modèle pour les calculs des échantillons provenant des familles des olivines, des feldspaths et des spinelles. Cette première méthode sera, tout au long de ce mémoire, nommée sous le nom de « **Méthode Lasnier** » (Lasnier, 1968).

J'ai par la suite recherché des méthodes de calcul d'apparence plus simples qui pourraient me permettre d'obtenir les mêmes résultats mais avec moins d'étapes de calculs. Mes recherches m'ont conduite vers le travail du Dr W. W. Hanneman, qui détaille dans son livre datant de 2000 et intitulé « Naming Gem Garnets » une méthode rapide pour le calcul des formules structurales et des teneurs en pôles purs des variétés composant la famille des grenats. J'ai donc décidé d'utiliser cette base de calcul pour mes échantillons faisant partie de la famille des grenats et d'adapter la méthode pour les autres échantillons. Cette deuxième méthode sera ici nommée « **Méthode Hanneman** » (Hanneman, 2000).

Enfin, mes recherches se sont tournées vers internet, plateforme sur laquelle j'ai pu trouver de très nombreux travaux expliquant les méthodes de calcul des formules structurales et ce pour de nombreux minéraux et dans divers formats (site internet, PDF, vidéos etc.). Pour cette dernière méthode, j'ai donc choisi de sélectionner un site internet de géologie nommé Gabbrosoft, proposant depuis 2020, des feuilles de calculs utilisables en format Excel, où il semble suffire de rentrer les données de l'analyse chimique pour obtenir une formule structurale et une teneur en pôles purs pour l'échantillon étudié. Cette troisième et dernière méthode est définie sous le nom de « **Méthode Gabbrosoft** » (Gabbrosoft, 2011).

Mon choix s'est donc porté vers ces trois méthodes car elles étaient manifestement bien différentes en termes d'années de production, du nombre d'étapes de calculs ainsi que de supports, et qui pourtant semblaient toutes permettre d'obtenir un résultat semblable. Il a donc été choisi de les étudier afin de détailler leurs étapes de calcul pour chaque échantillon puis de les comparer entre elles ainsi qu'avec la littérature, le but étant de proposer des méthodes de calcul reproductibles et adaptées en fonction des objectifs que l'on souhaite atteindre.

II. DÉFINITION D'UNE SÉRIE CONTINUE

Par définition, **deux ou plusieurs phases minérales forment une solution solide lorsqu'on passe progressivement de l'une à l'autre par des substitutions de leurs éléments chimiques**. Autrement dit, les minéraux correspondant à des **solutions solides** correspondent au **mélange entre un ou plusieurs pôles dits « purs »** pour former un minéral solide, c'est ce que l'on appelle en gemmologie des « **séries continues** » (Bour, 2019). Le mélange entre les différents pôles purs est possible grâce au **remplacement isomorphique**, c'est-à-dire au remplacement d'un ou plusieurs élément(s) d'un pôle par un élément de même valence, tout en conservant la même forme et la même structure cristalline, jusqu'à former une nouvelle variété correspondant à un nouveau pôle. Ce remplacement isomorphique courant est possible selon la loi de Goldschmidt qui dit qu'il y a possibilité de remplacement ou de substitution isomorphique d'un ion par un autre si leurs valences formelles sont identiques et si les rayons ioniques de ces ions ne diffèrent pas de plus de 15% (Abreal, 2018). Ces remplacements isomorphiques sont à l'origine des grandes variations des propriétés physiques et optiques des différentes variétés de gemmes au sein d'une même famille. De plus, on appellera « **membre intermédiaire** » les variétés de gemmes correspondant aux mélanges entre deux ou plusieurs de ces pôles purs.

En gemmologie, de nombreuses variétés de gemmes correspondent en réalité à des minéraux qui sont des solutions solides. Pour ce mémoire nous avons sélectionné des gemmes correspondant aux principales séries continues rencontrées dans ce domaine : les grenats, les feldspaths, les pyroxènes, les olivines et les spinelles.

Les solutions solides correspondant donc à une miscibilité entre différents pôles purs, il n'est pas possible de déterminer une séparation structurale ou chimique précise entre ces pôles purs, et les membres intermédiaires. Dans la littérature, une limite arbitraire a été proposée par Stockton et Manson lors de leurs travaux précurseurs sur la famille des grenats. Ils proposent de considérer deux hypothèses : (Stockton et Manson, 1985 ; Hanneman, 1997 ; Deer et al., 1992)

1. Si un grenat contient **70% ou plus d'un des pôles purs** formant le mélange, alors **il sera considéré comme un « pôle pur » et portera son nom**.

2. Si un grenat contient **plus de 30% mais moins de 70% de chacun des pôles purs** constituant le mélange, alors **il sera considéré comme « membre intermédiaire »** et portera le nom des deux pôles purs le composant (l'ordre des noms étant arbitraire et ne reflète pas nécessairement le rapport des deux composants). S'il est composé de plusieurs pôles purs mais aucun supérieur à 70%, il prendra le nom des deux pôles purs majoritaires.

Ces limites de 70% - 30%, sont de nos jours devenues une généralité et sont couramment admises dans la littérature et ce, pour toutes les séries continues. Nous les utiliserons également tout le long de ce mémoire.

CHAPITRE II : MATÉRIELS ET ÉCHANTILLONS

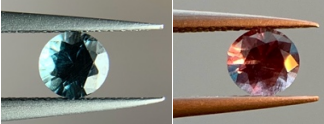




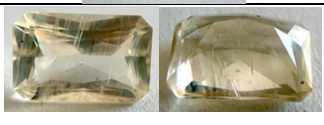



I. ÉCHANTILLONS :

Le choix des échantillons s'est porté sur les principales séries continues rencontrées en gemmologie, c'est-à-dire :

- Les **Grenats** : 4 échantillons (MB03, MB04, MB05 et MB15)
- Les **Feldspaths** : 2 échantillons (MB07, MB09)
- Les **Spinelles** : 1 échantillon (MB10)
- Les **Olivines** : 1 échantillon (MB14)
- Les **Pyroxènes** : 1 échantillon (MB16)

Initialement, plusieurs autres échantillons dont deux tourmalines avaient été sélectionnées. Cependant, après discussion et en accord avec le Pr E. Fritsch, il a été décidé de réduire les variétés d'échantillons à ceux de la liste susnommée.

Le tableau ci-dessous résume les principales caractéristiques des échantillons étudiés provenant tous de ma collection personnelle. Les familles, variétés et provenances mentionnées sont celles données lors de l'achat. Le travail de ce mémoire permettra, entre autres, d'affirmer ou non la variété de chaque échantillon.

Références	Photos (table et culasse)	Noms donnés lors de l'achat	Provenances données lors de l'achat	Couleur(s)*	Masse (en cts)	Densités	Indices de Réfraction
MB03	 <small>*A gauche photo prise à la lumière du jour, A droite, photo prise sous lumière incandescente</small>	grenat « bleu » à changement de couleur	Bekily, Madagascar	bleu-vert (lumière naturelle) à pourpre (lumière incandescente)	0,18	3,16	1,770
MB04		grenat pourpre	Mozambique	pourpre	0,92	3,83	1,777
MB05		grenat rhodolite	Mozambique	Pourpre-rosé	1,02	3,75	1,761
MB15		grenat menthe	Province de Merelani, Tanzanie	Vert-jaunâtre clair	1,68	3,62	1,732
MB07		pierre de lune	Inde	blanc grisâtre translucide	3,62	2,57	1,50 (lecture cabochon)
MB09		labradorite gemme	Etat de Jalisco, Mexique	Jaune pâle	2,87	2,69	Np = 1,554 Nm = 1,558 Ng = 1,564 (biréfringence = 0,010)
MB10		Spinnelle	Sri Lanka	Bleu-grisâtre	0,84	3,58	1,721
MB14		péridot	Jiaohé peridot deposit, Chine	Vert-jaune	1,73	3,31	Np = 1,650 Nm = 1,661 Ng = 1,687 (biréfringence : 0,37)
MB16		Diopside chromifère	Inde	Vert foncé	0,87	3,21	Np = 1,669 Nm = 1,679 Ng = 1,700 (biréfringence : 0,31)

*Les couleurs peuvent être légèrement différentes entre la photo et la réalité. Les couleurs ont été déterminées visuellement mais sans se baser sur un système de gradation spécifique.

II. MATERIEL :

1. GEMMOLOGIE CLASSIQUE

Le matériel suivant a simplement été utilisé pour la description initiale des échantillons (reportée dans le tableau ci-dessus).

BALANCE :

Balance à carat Tanita, modèle KP-601, Capacité : 100 g (500 ct), Sensibilité : 0,002 g (0,01 ct).

KIT DE DENSITÉ :

Kit de densité AGE, GEM-MASTER Specific Gravity Test Kit.

REFRACTOMÈTRE :

Réfractomètre pour la gemmologie, ayant un index de réfraction de 1.35 à 1.85 et un prisme de mesure en CZ. L'oculaire extra large de 33 mm est ajustable avec filtre de polarisation.

2. MICROSCOPE ÉLECTRONIQUE A BALAYAGE (MEB)

Le microscope électronique à balayage (MEB) est une technique de microscopie électronique permettant de produire des images à forte résolution et à fort grossissement de la surface d'un échantillon grâce, via l'utilisation d'un faisceau d'électron ainsi que des imageries de cathodoluminescence (CL). Cette technique permet aussi de réaliser des analyses chimiques qualitatives (ou semi-quantitatives) par spectrométrie à dispersion d'énergie (EDS) grâce à un détecteur ajouté sur la colonne. Pour cette étude, seule la technique de micro-analyse chimique a été utilisée.

Le MEB utilisé à la Faculté des matériaux Jean Rouxel de l'Université de Nantes (*figure 1*) est un MEB JEOL-5800 LV de marque JEOL SCANNING MICROSCOPE. Il est équipé d'un détecteur à dispersion d'énergie de marque PGT IMIX. L'angle d'émergence des photons X est 37.00 degrés. Le détecteur est PGT IMIX PTS travaillant en dispersion d'énergie. La teneur en oxygène est calculée par stœchiométrie, méthode qui permet de mesurer les proportions qualitatives des éléments chimiques détectés.

Les conditions de mesure étaient :

Une distance de travail (WD) de 15 mm

Un courant (E) de 0,5 nA

Un voltage de 15 kV

Une tension d'accélération de 20 kV

Un angle de vue du détecteur à 37°

Nombre de scans par échantillon : 60



Figure 1 : MEB de la Faculté Jean Rouxel, Nantes.

Conditions de préparation :

Les échantillons sélectionnés sont tous des gemmes taillées ayant une surface plane (sauf l'échantillon MB07 taillé en cabochon, il a tout de même été possible de prendre les mesures sur la base plate) il n'a donc pas été utile de les retailler ou de les polir pour faire les mesures. Tous les échantillons ont été préalablement nettoyés à l'alcool avec des gants, puis montés sur des plots avec écrous (pour assurer la planéité) et fixés à l'aide d'une laque d'argent qui a séché pendant une nuit. (*figure 2*).

Les échantillons montés sur plots ont ensuite été métallisés par vaporisation d'une fine couche de carbone (environ 15 µm) dans une chambre à vide, et ce afin de permettre la conduction électrique et d'éviter aux échantillons d'accumuler de la charge, ce qui pourrait fausser les résultats. Ils ont par la suite été disposés et identifiés sur un plateau, avant d'être introduits dans le MEB. Un vide préalable a été fait avant la réalisation de l'analyse chimique grâce aux rayons X détectés.



Figure 2 : Échantillons montés sur plots à l'aide de laque d'argent puis métallisés.

Problèmes rencontrés :

Il est à préciser que les analyses ont dû être refaites de nombreuses fois pour tous les échantillons et ce à cause d'un problème sur le filament du MEB (le remplacement ayant interrompu une séance de travail) et d'accumulation de charge (dus à l'oxydation des plots - Comm. pers. Fritsch, 2022, et à un problème de qualité de la laque d'argent). Ces problèmes ont alors faussé les résultats à de nombreuses reprises. Les résultats sélectionnés ont été ceux réalisés lors de la toute dernière séance d'analyse et qui ont été jugés les plus acceptables, c'est-à-dire ceux qui bouclaient au plus proche de 100%.

De plus, on remarquera que l'analyse MEB n'est pas capable de mesurer les différents états d'oxydation du fer, à savoir le fer ferreux Fe^{2+} et le fer ferrique Fe^{3+} , ce qui aura un impact non négligeable sur le travail effectué dans ce mémoire. L'analyse du FeO correspondra donc aux deux états d'oxydation confondus.

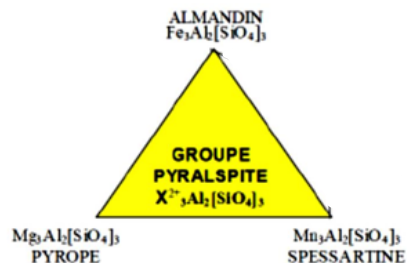
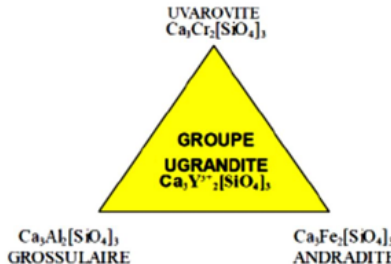
CHAPITRE III : RÉSULTATS

I. MÉTHODES DE CALCUL ADAPTÉES À LA FAMILLE DES GRENATS

1. GÉNÉRALITÉS SUR LA FAMILLE DES GRENATS

La famille des grenats est l'une des familles les plus souvent rencontrées en gemmologie de par sa grande diversité de couleurs, de valeurs et de localités. D'un point de vue structural, elle représente une famille complexe composée de multiples séries continues et discontinues (ces derniers correspondant à des mélanges non totalement miscibles entre différents pôles purs) qui sont résumées dans le schéma reporté à l'annexe n°2.1. (Abreal, 2018)

Dans ce mémoire nous nous intéresseront principalement aux six principales variétés de grenats couramment rencontrées en gemmologie et correspondant à deux séries continues nommées d'après les noms des variétés de grenats qui les composent : la série des « **pyralspites** » (regroupant le PYrope, ALmandin et SPessartite, *figure 3*) et la série des « **ugrandites** » (regroupant Uvarovite, GROSSulaire et ANDradite, *figure 4*) résumées dans le tableau ci-dessous : (Abreal, 2018 ; Deer et al., 1992 ; Grew et al., 2013 ; Hodgkison, 2015 ; Hanneman, 1983 ; Hanneman, 2000 ; Hoover, 2011 ; Mindat, 2020 ; Novak et Gibbs, 1971).

Séries continues	Variétés correspondantes aux pôles purs	Formules chimiques			Diagrammes des différentes séries continues :
		Site X	Site Y	Site (Z + O ₄) ₃	
Pyralspite	pyrope	Mg ₃	Al ₂	(SiO ₄) ₃	 <p>Figure 3 : Série « pyralspite » (Abreal, 2018)</p>
	almandin	Fe ²⁺ ₃	Al ₂	(SiO ₄) ₃	
	spessartite	Mn ₃	Al ₂	(SiO ₄) ₃	
Ugrandite	grossulaire (leucogrenat, tsavorite, hessonite)	Ca ₃	Al ₂	(SiO ₄) ₃	 <p>Figure 4 : Série « ugrandite » (Abreal, 2018)</p>
	andradite (démantoïde, topazolite, mélanite)	Ca ₃	Fe ³⁺ ₂	(SiO ₄) ₃	
	uvarovite	Ca ₃	Cr ³⁺ ₂	(SiO ₄) ₃	

Les grenats ont donc pour formule structurale générale : X₃ Y₂ (Z O₄)₃ qui correspond à 8 cations associés à 12 oxygènes, où les sites X, Y et Z peuvent correspondre aux éléments suivants en fonction du remplacement isomorphique : (Hodgkison, 2015)

- Site X = site dodécaédrique = Fe²⁺, Mg²⁺, Mn²⁺, Ca²⁺, (Y²⁺, Na²⁺)
- Site Y = site octaédrique = Al³⁺, Fe³⁺, Cr³⁺, (Zr³⁺, Sn³⁺, Ti³⁺, Sc³⁺, Si⁴⁺, V³⁺)
- Site Z = site tétraédrique = Si⁴⁺ (Fe³⁺, Al³⁺, H⁺)

A chaque série continue correspond un ou plusieurs membres intermédiaires résultant du mélange de pôles purs dont voici les principaux rencontrés en gemmologie (certains noms sont des noms commerciaux*) : (Johnson et al., 1995 ; Manson et Stockton, 1981 ; Sangsawong et al., 2016 ; Sun et al., 2017).

- Entre les pôles pyrope et almandin : le pyrope-almandin (aussi connu sous le nom de rhodolite*) et le grenat pourpre.
- Entre les pôles pyrope et spessartite : le malaya*, le litchi*, l'impérial* et les variétés à changement de couleur dont le grenat dit « bleu* ».
- Entre les pôles grossulaire et andradite : le grossulaire-andradite, ou grandite aussi connu sous le nom de grenat du Mali*.

Quatre échantillons ont donc été sélectionnés afin de détailler les méthodes de calcul correspondant aux deux séries *pyralspite* et *ugrandite*, mais également afin de vérifier si certaines appellations commerciales pour lesquelles les échantillons avaient été acheté correspondaient bien aux données de la littérature :

- **Échantillon MB03** sensé correspondre à un grenat « bleu » à changement de couleur (bleu-violet), et donc de la série *pyralspite* (ici pyrope-spessartite). Il fut vendu comme venant de la localité de Bekily à Madagascar.
- **Échantillon MB04** sensé correspondre à un grenat « pourpre » du Mozambique coloré par le fer, et donc être un grenat rhodolite de la série *pyralspite* (ici pyrope-almandin).
- **Échantillon MB05** sensé correspondre à un grenat rhodolite, et donc de la série *pyralspite* (ici pyrope-almandin) provenant du Mozambique.
- **Échantillon MB15** sensé correspondre à un grenat « menthe » (ou « Mint Merelani ») (Pay, 2015) de Tanzanie, et donc être un grenat tsavorite peu saturé faisant partie de la série des *ugrandites*.

Nous avons donc choisi de détailler pour chacun des quatre échantillons, les calculs des trois méthodes, suivis à chaque fois d'un tableau récapitulatif.

Chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau récapitulatif final à laquelle il correspond.

2. ÉCHANTILLON MB03

A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER »

a. Détails des calculs

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique du MEB :

Le total de la somme de tous les pourcentages d'oxydes (noté Ox% dans le tableau) des différents éléments (noté Elt) pour chaque échantillon est reporté dans la case rouge de chaque tableau, en bas à droite, ici égal à 96,65%. Les résultats complets de l'analyse MEB ont été reporté à *l'annexe n°I.I.*

Elt	Formule	Ox%
O		0,00
Si	SiO ₂	37,18
Al	Al ₂ O ₃	19,74
Mg	MgO	9,51
Mn	MnO ₂	25,20
Fe	FeO	1,88
Ca	CaO	2,13
V	V ₂ O ₃	1,02
		96,65

C2) Calculer l'équivalent moléculaire à un cation (en utilisant les masses atomiques relative de chaque élément de chaque oxyde, données par le tableau de Mendeleïev, voir l'annexe 3). Les résultats ont été arrondis comme dans la méthode originelle (car calculés à la main) :

- SiO₂ = 28,086 (Si) + 15,999 (O) x 2 = 60,08 → Arrondis à 60
- Al₂O₃ = 26,98 (Al) x 2 + 15,999 (O) x 3 = 101,957 → Arrondis à 102, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Al. Donc résultat = 51
- MgO = 24,305 (Mg) + 15,999 (O) = 40
- MnO = 54,938 (Mn) + 15,999 (O) = 71
- CaO = 40,078 (Ca) + 15,999 (O) = 56
- FeO = 55,945 (Fe) + 15,999 (O) = 72
- V₂O₃ = 50,9415 (V) x 2 + 15,999 (O) x 3 = 149,88 → Arrondis à 150, divisé par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à 1 V = 75.

C3) Calculer le nombre de cations en divisant les pourcentages pondéraux d'oxydes (C1) par le poids moléculaire (C2) => (C1/C2) x 1000 :

- SiO₂ = (37,18 / 60) x 1000 = 619,667
- Al₂O₃ = (19,74 / 51) x 1000 = 387,059
- MgO = (9,51 / 40) x 1000 = 237,750
- MnO = (25,20 / 71) x 1000 = 354,930
- CaO = (2,13 / 56) x 1000 = 38,036
- FeO = (1,88 / 72) x 1000 = 26,111
- V₂O₃ = (1,02 / 75) x 1000 = 13,600

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associé(s) à chacun des cations en multipliant le nombre de cations par les oxygènes associés à chaque cation, soit $C3 \times nO$:

- Pour Si il faut 2 oxygènes, soit $619,667 \times 2 = 1239,334$
- Pour Al il faut 3/2 oxygènes, soit $387,059 \times (3/2) = 580,589$
- Pour Mg il faut 1 oxygène, soit $237,750 \times 1 = 237,750$
- Pour Mn il faut 1 oxygène, soit $354,930 \times 1 = 354,930$
- Pour Ca il faut 1 oxygène, soit $38,036 \times 1 = 38,036$
- Pour Fe il faut 1 oxygène, soit $26,111 \times 1 = 26,111$
- Pour V il faut 3/2 oxygènes, soit $13,600 \times 3/2 = 20,400$

C5) Premièrement, calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (qui ont été calculés à l'étape précédente C4) :

- La somme des oxygènes ici : $\Sigma = 1239,334_{(Si)} + 580,589_{(Al)} + 26,111_{(Fe)} + 354,930_{(Mn)} + 237,750_{(Mg)} + 38,036_{(Ca)} + 20,400_{(V)} = 2497,15$

Deuxièmement, calculer le nombre de cations associés à 12 oxygènes par règle de 3, en utilisant la formule suivante : nombre cation ($C3$) x nombre d'oxygène (12) / Somme des oxygènes (résultat arrondis au centième) :

- Pour Si = $(619,667 \times 12) / 2497,15 = 2,978$
- Pour Al = $(387,059 \times 12) / 2497,15 = 1,860$
- Pour Mg = $(237,750 \times 12) / 2497,15 = 1,143$
- Pour Mn = $(354,930 \times 12) / 2497,15 = 1,701$
- Pour Ca = $(38,036 \times 12) / 2497,15 = 0,183$
- Pour Fe = $(26,111 \times 12) / 2497,15 = 0,125$
- Pour V = $(13,600 \times 12) / 2497,15 = 0,065$

Total de la somme de tous les cations associés à 12 oxygènes devrait être égale à 8, ici $S = 8,055$.

A partir de cette étape, il est possible de calculer la formule structurale de l'échantillon (**Option 1**) mais aussi de calculer la teneur en pôles purs (**Option 2**).

OPTION 1 : ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE

Pour cela, il faut se référer à la formule générale du minéral étudié et, pour chaque élément, récupérer le nombre de cation, ici 8, associés à 12 oxygènes calculé à l'étape **C5**. Puis il faut l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale. (Il est cependant à noter que selon la qualité de l'analyse chimique - les biais dus aux erreurs ou imprécisions inhérentes à la technique - la somme des coefficients peut ne pas être exactement égale à ce qu'elle devrait être).

Dans l'exemple du cours du Pr Lasnier, le minéral étudié est un grenat de formule structurale : $X_3Y_2(ZO_4)_3$; où $Z = Si + Al^{IV}$ (en site tétraédrique) ; $Y = Fe^{3+} + Al^{VI}$ (en site octaédrique) ; $X = Fe^{2+} + Mn + Mg + Ca$.

L'établissement de la formule structurale se fait donc en 3 étapes :

On détermine d'abord les éléments correspondants au site Z, puis le site Y et pour terminer le site X. Concernant l'aluminium, il faut savoir que dans le grenat il peut à la fois être associé au site tétraédrique (noté Al^{IV}) dans le site Z, et en site octaédrique (noté Al^{VI}) dans le site Y.

- 1) **Concernant le site Z :** Dans la formule structurale idéale le site tétraédrique Z est occupé par le silicium (Si) mais également par une partie de l'aluminium (noté Al^{IV}) (le reste de l'aluminium occupera le site octaédrique Y (noté Al^{VI}) et sera calculé à l'étape 2). Ici l'ensemble des cations occupant le site Z est censé être égal à 3, alors pour calculer l' Al^{IV} il suffit d'appliquer la formule suivante : $Al^{IV} = 3 - Si$; soit $Al^{IV} = 3 - 2,978 = 0,022$

- Ainsi, $Z = Si_{2,978} + Al^{IV}_{0,022}$
 → Où la somme des cations est égale à 3 ($2,978 (Si) + 0,022 (Al^{IV})$).

- 2) **Concernant le site Y :** Il faut normalement tout d'abord récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes du Fe^{3+} .

Le problème étant qu'ici l'analyse MEB ne permet pas de différencier les deux états d'oxydation du fer, c'est-à-dire le fer ferreux Fe^{2+} et le fer ferrique Fe^{3+} , dans son analyse. Ainsi, si l'on souhaite calculer la part de Fe^{3+} contenue dans la gemme il faudra refaire l'analyse au moyen d'une technique permettant de différencier le Fe^{2+} et le Fe^{3+} par exemple à l'aide d'une microsonde électronique. Dans cet exemple, nous considéreront que tout le fer présent est du fer ferreux (Fe^{2+}) car l'échantillon est sensé faire partie de la série pyrospite, ainsi cela permettra de détailler la fin de la formule afin d'expliquer le principe et de permettre son application ultérieure.

Ainsi pour connaître la formule structurale de l'aluminium en site octaédrique (Al^{VI}), il suffit simplement de récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes de l'aluminium et y soustraire celui de l'aluminium en site tétraédrique (Al^{IV}) calculé précédemment pour le site Z, ce qui donne pour cet échantillon : $Al^{VI} = Al - Al^{IV}$; soit : $Al^{VI} = 1,860 - 0,022 = 1,838$.

- Ainsi, $Y = Fe^{3+}_0 + Al^{VI}_{1,838} + V_{0,065}$
 → le site Y devrait être égal à 2 si la formule est équilibrée, ici égal à 1,903

- 3) **Concernant le site X** : Il suffit de récupérer les nombres de cations associés à 12 oxygènes du Fe^{2+} , du Mn, du Mg et du Ca, calculé à l'étape C5, ici respectivement égaux à 0,125 ; 1,701 ; 1,143 et 0,183.

- Ainsi, $X = \text{Fe}^{2+}_{0,125} + \text{Mn}_{1,701} + \text{Mg}_{1,143} + \text{Ca}_{0,183}$
 → le tout devrait être égal à 3 si la formule est bien équilibrée, ici il est égal à 3,152

Ainsi selon la formule générale des grenats, la formule structurale de l'échantillon étudié est :

→ $(\text{Mg}_{1,143} \text{ Mn}_{1,701} \text{ Fe}^{2+}_{0,125} \text{ Ca}_{0,183}) (\text{V}_{0,065} \text{ Al}^{\text{VI}}_{1,838}) (\text{Si}_{2,978} \text{ Al}^{\text{IV}}_{0,022} \text{ O}_{12})$

OPTION 2 : MÉTHODE POUR CALCULER LA TENEUR DES PÔLES PURS :

→ PÔLES PURS : PYROPE + ALMANDIN + SPESSARTITE & GROSSULAIRE-ANDRADITE (sans les différencier) :

Afin de calculer les pourcentages de chaque pôle pur présent dans la formule chimique du minéral étudié on récupérera les nombres de cations associés à 12 oxygènes correspondant aux pôles purs suivants : Mg (pôle pyrope), Fe^{2+} (pôle almandin), Mn (pôle spessartite), Ca (pôle grossulaire et andradite) obtenus à l'étape C5, que l'on multipliera par 100 (pour obtenir un pourcentage), le tout divisé par la somme du nombre de cations des 4 éléments qui ici est égale à $\Sigma = 1,143 (\text{Mg}) + 0,125 (\text{Fe}) + 1,701 (\text{Mn}) + 0,183 (\text{Ca}) = 3,152$. Ainsi on obtient :

- $\text{Mg} = (1,143 \times 100) / 3,152 = 36,263 \%$ de Mg (pyrope)
 - $\text{Fe}^{2+} = (0,125 \times 100) / 3,152 = 3,966 \%$ de Fe^{2+} (almandin)
 - $\text{Mn} = (1,701 \times 100) / 3,152 = 53,966 \%$ de Mn (spessartite)
 - $\text{Ca} = (0,183 \times 100) / 3,152 = 5,806 \%$ de Ca (grossulaire + andradite)
- ⇒ Leur somme étant égale à 100,001 % ce qui est acceptable compte tenu de la marge d'erreur des analyses et calculs.

→ DIFFÉRENTIATION DES PÔLES PURS GROSSULAIRE ET ANDRADITE :

Ici encore, comme l'analyse MEB ne permet pas de différencier les deux états d'oxydation du fer, nous considéreront que tout le fer présent est du fer ferreux (Fe^{2+}).

- 1) **Pour calculer le nombre de cations « unitaires » nécessaires à la répartition du Fe^{3+} occupant le site Y dans l'andradite (noté $\text{Fe}^{3+}_{\text{And}}$), il faut diviser le nombre de cations associés à 12 oxygènes du Fe^{3+} calculé en C5, par le nombre d'atomes du site (2) soit :**

- $\text{Fe}^{3+}_{\text{And}} = \text{Fe}^{3+}_{\text{C5}} / 2 = 0 / 2 = 0$

- 2) **Ce nombre de cations unitaires est associé dans l'andradite à 3 fois plus de calcium. Ainsi le nombre de cation de calcium dans l'andradite (noté Ca_{And}) équivaut à :**

- $\text{Ca}_{\text{And}} = \text{Fe}^{3+}_{\text{And}} \times 3 = 0 \times 3 = 0$

- 3) **Ce nombre de cation est à soustraire du nombre de cation de calcium total (noté Ca_{C5}) calculé en C5 pour avoir le nombre de cation de calcium du grossulaire (noté Ca_{Gros}), soit :**

- $\text{Ca}_{\text{Gros}} = \text{Ca}_{\text{C5}} - \text{Ca}_{\text{And}} = 0,183 - 0 = 0,183$

- 4) **Calcul des pourcentages de pôles purs de grossulaire et d'andradite grâce aux calculs ci-dessous :**

- % grossulaire = $(\text{Ca}_{\text{Gros}} / S_x) \times 100 = (0,183 / 3,152) \times 100 = 5,806 \%$
- % andradite = $(\text{Fe}^{3+}_{\text{And}} / S_y) \times 100 = (0 / 0,183) \times 100 = 0 \%$

Avec :

- $S_x = \text{Somme des cations du site X} = 1,143_{(\text{Mg})} + 0,125_{(\text{Fe}^{2+})} + 1,701_{(\text{Mn})} + 0,183_{(\text{Ca})} = 3,152$
- $S_y = \text{Somme des cations du site Y} = 0,183_{(\text{Ca})} + 0_{(\text{Fe}^{3+})} = 0,183$

TABLEAU RÉCAPITULATIF DE LA MÉTHODE POUR CALCULER LA TENEUR DES 5 PÔLES PURS D'UN GRENAT :

	Pyrope	Almandin	Spessartite	Grossulaire	Andradite
Formule générale	$(\text{Mg}_{\text{C5}} \times 100) / S_x$	$(\text{Fe}^{2+}_{\text{C5}} \times 100) / S_x$	$(\text{Mn}_{\text{C5}} \times 100) / S_x$	$((\text{Ca}_{\text{C5}} - ((\text{Fe}^{3+}_{\text{C5}} / 2) \times 3)) / S_x) \times 100$	$((\text{Fe}^{3+}_{\text{C5}} / 2) / S_y) \times 100$
Formule appliquée	$(1,143 \times 100) / 3,152$	$(0,125 \times 100) / 3,152$	$(1,701 \times 100) / 3,152$	$((0,183 - ((0 / 2) \times 3)) / 3,152) \times 100$	$((0 / 2) / 0,183) \times 100$
% en pôle pur	= 36,263 %	= 3,996 %	= 54,966 %	= 5,806 %	= 0%

b. Tableau récapitulatif

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique						
C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev						
C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 $\Leftrightarrow (C1/C2) \times 1000$						
C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associé(s) à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation $\Leftrightarrow C3 \times nO$.						
C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (Σ oxygènes) Puis, calculer le nombre de cations associés à 12 oxygènes : nombre de cations x nombre d'oxygènes (12) / Σ oxygènes $\Leftrightarrow (C3 \times 12) / \Sigma$ oxygènes						
	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	37,18 %	60	619,667	1239,334	2,978	Si _{2,978}
Al ₂ O ₃	19,74 %	51	387,059	580,589	1,860	Al ^{IV} _{0,022} Al ^{VI} _{1,838}
V ₂ O ₅	1,02 %	75	13,600	20,400	0,065	V _{0,065}
MgO	9,51 %	40	237,750	237,750	1,143	Mg _{1,143}
MnO	25,20 %	71	354,930	354,930	1,701	Mn _{1,701}
CaO	2,13 %	56	38,036	38,036	0,183	Ca _{0,183}
FeO	1,88 %	72	26,111	26,111	0,125	Fe ²⁺ _{0,125}
	= 96,65			Σ oxygènes = 2497,15		

OPTION 1) ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE : récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule selon les trois étapes ci-dessous :

1) **Site Z (tétraédrique)** = il est occupé par le silicium (Si) et l'aluminium (Al^{IV})
Le nombre de cations du site Z étant égal à 3, l'Al^{IV} viendra combler le site Z. Ainsi Al^{IV} = 3 – Si = 3 – 2,978 = 0,022
Ici, Z = Si_{2,978} + Al^{IV}_{0,022}

2) **Site Y (octaédrique)** = Il est occupé principalement par Al, Fe³⁺, Cr³⁺ et V³⁺.
Le nombre de cations du site Y étant égal à 3, l'Al^{VI} correspondra à la part d'aluminium qui n'occupe pas le site Z, autrement dit : Al^{VI} = Al – Al^{IV} = 1,860 – 0,022 = 1,838
Ici, Y = Fe³⁺₀ + Al^{VI}_{1,838} + V_{0,065}

3) **Site X (dodécédrique)** = Il est principalement occupé par Fe²⁺, Mg, Mn et Ca.
Il suffit de récupérer les nombres de cations associés à 12 oxygènes calculés à l'étape C5, et les intégrer dans la formule comme ci-dessous.
Ici, X = Fe²⁺_{0,125} + Mn_{1,701} + Mg_{1,143} + Ca_{0,183}

**Il suffit à présent d'intégrer les résultats ci-dessus dans la formule générale des grenats : X₃Y₂(Z₂O₁₂).
Ainsi la formule structurale de l'échantillon est :**

→ (Mg_{1,143} Mn_{1,701} Fe²⁺_{0,125} Ca_{0,183}) (V_{0,065} Al^{VI}_{1,838}) (Si_{2,978} Al^{IV}_{0,022} O₁₂)

OPTION 2) CALCUL DES PÔLES PURS : PYROPE, ALMANDIN, SPESSARTITE, GROSSULAIRE et ANDRADITE
Calculs des 5 pôles purs grâce aux formules ci-dessous. Avec :
- S_x = Somme des cations du site X (calculé à l'étape C5) = 1,143 (Mg) + 0,125 (Fe²⁺) + 1,701 (Mn) + 0,183 (Ca) = 3,152
- S_y = Somme des cations du site Y (calculé à l'étape C5) = 0,183 (Ca) + 0 (Fe³⁺) = 0,183

	Pyrope	Almandin	Spessartite	Grossulaire	Andradite
Formule générale	(Mg _{CS} x 100) / S _x	(Fe ²⁺ _{CS} x 100) / S _x	(Mn _{CS} x 100) / S _x	((Ca _{CS} - ((Fe ³⁺ _{CS} / 2) x 3)) / S _x) x 100	((Fe ³⁺ _{CS} / 2) / S _y) x 100
Formule appliquée	(1,143 x 100) / 3,152	(0,125 x 100) / 3,152	(1,701 x 100) / 3,152	((0,183 - ((0 / 2) x 3)) / 3,152) x 100	((0 / 2) / 0,183) x 100
% en pôle pur	= 36,263 %	= 3,996 %	= 54,966 %	= 5,806 %	= 0 %

Selon les résultats de l'option 2, la teneur en pôles purs du grenat étudié est :
→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN »

a. Détails des calculs

Dans son livre « Naming Gem Garnets », Hanneman propose une méthode de calcul simplifiée permettant de connaître la teneur en pôles purs d'un grenat ainsi que sa formule structurale (Hanneman, 2000).

Sachant que la formule des variétés du groupe pyrope est : X₃ Al₂ (SiO₄)₃ ; avec X = Ca, Mg, Mn, Fe²⁺ ; le calcul sera basé sur les cations Fe, Mn, Mg et Ca correspondant respectivement aux pôles almandin, spessartite, pyrope et grossulaire-andradite.

Note : chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau récapitulatif, à la page suivante, à laquelle il correspond.

1) Au préalable, récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (notés Ox%) donnés par l'analyse chimique :

Elt	Formule	Ox%
O		0,00
Mg	MgO	9,51
Mn	MnO ₂	25,20
Fe	FeO	1,88
Ca	CaO	2,13

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour référence les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev) :

- MgO = 24,305 (Mg) + 15,999 (O) = 40,304
- MnO = 54,938 (Mn) + 15,999 (O) = 70,937
- CaO = 40,078 (Ca) + 15,999 (O) = 56,077
- FeO = 55,945 (Fe) + 15,999 (O) = 71,944

3) Diviser chaque pourcentage d'oxyde par son poids moléculaire (calculé à l'étape 2). Les résultats sont arrondis au millièmes supérieur.

- FeO : 1,88 / 71,85 = 0,026
- MgO : 9,51 / 40,31 = 0,236
- CaO : 2,13 / 56,08 = 0,038
- MnO : 25,20 / 70,93 = 0,355

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.

- $S = 0,026 + 0,236 + 0,038 + 0,355 = 0,655$

5) Multiplier par (100/S) les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde.

- Ici, $100 / S = 100 / 0,655 = 152,672$

- Ainsi :

- $\text{FeO} : 0,026 \times 152,672 = 3,969$
- $\text{MgO} : 0,236 \times 152,672 = 36,031$
- $\text{CaO} : 0,038 \times 152,672 = 5,801$
- $\text{MnO} : 0,355 \times 152,672 = 54,199$

OPTION 1 : Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est $> 70\%$ alors l'échantillon prend le nom du membre final. S'il est $< 70\%$ alors c'est un mélange entre deux phases solides.

→ normalement la somme des pourcentages des pôles devrait être égale à 100%, ici elle est égale à 100%

La teneur en pôles purs est donc :

- Pourcentage du pôle almandin = 3,969 %
- Pourcentage du pôle pyrope = 36,031 %
- Pourcentage du pôle spessartite = 54,199 %
- Pourcentage du pôle grossulaire-andradite = 5,801 %

OPTION 2 : Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus en 3 pour chaque oxyde par $3/S$ (3 correspondant au nombre de cations du site X).

- Ici $3/S = 3 / 0,655 = 4,580$

- Ainsi :

- $\text{FeO} : 0,026 \times 4,580 = 0,199$
- $\text{MgO} : 0,236 \times 4,580 = 1,081$
- $\text{CaO} : 0,038 \times 4,580 = 0,174$
- $\text{MnO} : 0,355 \times 4,580 = 1,626$

→ normalement la somme des cations représentant les pôles purs doit être égale à 3, ici elle est égale à 3,08

La formule structurale calculée est donc :

→ $(\text{Mg}_{1,081} \text{Mn}_{1,626} \text{Fe}_{0,199} \text{Ca}_{0,174}) \text{Al}_2 (\text{SiO}_4)_3$

(ps : à noter qu'avec cette méthode seuls les cations Fe, Mg, Ca et Mn peuvent ici être calculés, les valeurs pour Al et Si sont les valeurs théoriques)

b. Tableau récapitulatif

	1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique	2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleiev)	3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).	4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés en 3.	5) Multiplier les valeurs obtenues à l'étape 3 par 100/S pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux. Ici $100/S = 100 / 0,655 = 152,672$	OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est $> 70\%$ alors l'échantillon prend le nom du membre final. Si il est $< 70\%$ alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.	OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par $3/S$ (3 correspondant au nombre de cations du site X), avec ici $3/S = 3 / 0,655 = 4,580$
FeO (pôle almandin)	1,88 %	71,944	0,026	3,969	3,969 %	Fe _{0,199}	
MgO (pôle pyrope)	9,51 %	40,304	0,236	36,031	36,031 %	Mg _{1,081}	
MnO (pôle spessartite)	25,20 %	70,937	0,355	54,199	54,199 %	Mn _{1,626}	
CaO (pôle grossulaire-andradite)	2,13 %	56,077	0,038	5,801	5,801 %	Ca _{0,174}	
			4) S = 0,655		Total = 100 %		

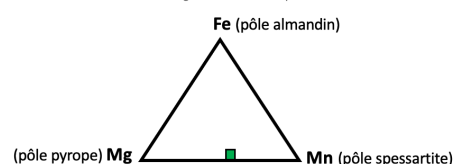
En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des grenats de la série pyrospite:
 $X_3 Y_2 (Z_4 O_{12})$, la formule structurale du grenat étudié est donc :

(Les valeurs de Al et Si ne sont pas calculables par cette méthode et correspondent à leurs valeurs théoriques. V n'est pas calculable ici)

→ $(\text{Mg}_{1,081} \text{Mn}_{1,626} \text{Fe}_{0,199} \text{Ca}_{0,174}) \text{Al}_2 (\text{SiO}_4)_3$

Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du grenat étudié est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon



C. « Méthode GABBROSOFT »

Le site internet Gabbrosoft (Gabbrosoft, 2011) propose des feuilles de calcul Excel permettant de calculer les pourcentages des pôles purs simplement en entrant les pourcentages d'oxydes de chaque élément donnés par l'analyse chimique.

Dans la feuille de calcul correspondant à la famille des grenats, appelée GNTCALC, les résultats de l'analyse chimique sont à entrer dans les colonnes B5 à B11.

	A	B	C	D	E	F	G	H
1		GARNET CALCULATION SHEET						
2		MB03 : CC						
3								
4		Wt%	Mol Prop	At Prop O	No anions	Formula		
5	SiO2	37,180	0,619	1,238	12,007	Si	6,004	
6	TiO2	0,000	0,000	0,000	0,000	Ti	0,000	
7	Al2O3	19,740	0,194	0,581	5,635	Al	3,757	
8	FeO	1,880	0,026	0,026	0,254	Fe	0,254	
9	MnO	25,200	0,355	0,355	3,446	Mn	3,446	
10	MgO	9,510	0,236	0,236	2,289	Mg	2,289	
11	CaO	2,130	0,038	0,038	0,368	Ca	0,368	
12	TOTAL	95,640		2,474		TOTAL	16,118	
13								
14								
15								
16								
17	SiO2	60,08		No Oxyg	24		Endmembers	
18	TiO2	79,88		T2	9,701		Py	36,008
19	Al2O3	101,96					Alm	3,993
20	FeO	71,85					Gro	5,796
21	MnO	70,94					Sp	54,204
22	MgO	40,3						
23	CaO	56,08						
24								

Voici l'explication des résultats des différentes colonnes de la méthode Gabbrosoft :

Note : chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau ci-dessus à laquelle il correspond.

Colonne A5 à A11 et A17 à A23 = Cations détectés dans l'analyse MEB

Colonne B5 à B11 = Pourcentages pondéraux d'oxydes

B12 = Total des pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse

→ Données de l'analyse chimique

Colonne B17 à B23 = Calculer le poids moléculaire pour chaque cation

→ Données par la masse atomique relative de chaque élément donné dans le tableau de Mendeleïev :

Colonne C5 à C11 = Nombre de cations

→ Pourcentages pondéraux d'oxydes divisés par le poids moléculaire calculé pour chaque cation

Colonne D5 à D11 = Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations

→ Nombre de cations (colonne C) multiplié par le nombre d'oxygènes associés à chaque oxyde

D12 = Somme des oxygènes associés à chacun des cations

Colonne E5 à E11 = Nombre d'anions

→ Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations (colonne E) / T2 (E18)

E17 = Nombre d'oxygènes dans la formule structurale de base

→ Le calcul de Gabbrosoft est basé sur 24 oxygènes

E18 = T2 = Nombre d'oxygènes (E17) 24 / Somme des oxygènes (D5 à D11)

Colonne G5 à G11 = Nombre de cations associés à 24 oxygènes

→ Nombre d'anions (colonne E) divisé par le nombre d'oxygènes associés à chaque cation

G12 = Somme des nombres de cations associés à 24 oxygènes

G/H18 à G/H21 = Pourcentages en pôles purs pyrope (Py), almandin (Alm), grossulaire (Gro) et spessartite (Sp)

→ Nombre de cations associés à 24 oxygènes (colonne G) divisés par la somme des cations associés à 24 oxygènes (G12) multipliés par 100

LA TENEUR EN PÔLES PURS : Elle est directement obtenue dans la colonne G/H18 à G/H11 :

- Pôle pyrope = 36,008 %
- Pôle almandin = 3,993 %
- Pôle spessartite = 54,204 %
- Pôle grossulaire et andradite = 5,796 %
→ Leur somme est égale à 100,001%.

LA FORMULE STRUCTURALE : La colonne G5 à G11 donne le nombre de chaque cation associé à 24 oxygènes. Cependant comme le calcul est ici basé sur 24 oxygènes, les résultats doivent être divisé par 2 afin d'être comparables aux deux méthodes précédentes qui elles calculent la formule structurale sur la base de 12 oxygènes.

Cations	Nombres de cations associés à 24 oxygènes	Nombres de cations recalculés associés à 12 oxygènes
Si	6,004	3,002
Al	3,757	1,879
Fe	0,254	0,127
Mn	3,446	1,723
Mg	2,289	1,144
Ca	0,368	0,184

La formule structurale calculée est donc :

→ (Mg_{1,144} Mn_{1,723} Fe_{0,127} Ca_{0,184}) Al_{1,879} (Si_{3,002} O₁₂)

3. ECHANTILLON MB04 :

A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER »

a. Détails des calculs

Chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau récapitulatif à laquelle il correspond.

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (notés Ox%) donnés par l'analyse chimique du MEB :

Le total de la somme de tous les pourcentages d'oxydes des différents éléments pour chaque échantillon est reporté dans la case rouge de chaque tableau, en bas à droite, ici égal à 96,83%. Les résultats complets de l'analyse MEB ont été reporté à l'*annexe n°1.2.*

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Mg	MgO	11.57
Al	Al ₂ O ₃	21.53
Si	SiO ₂	39.73
Ca	CaO	0.49
V	V ₂ O ₃	0.00
Mn	MnO ₂	0.00
Fe	FeO	23.52
		96.83

C2) Calculer l'équivalent moléculaire à un cation (en utilisant les masses atomiques relative de chaque élément de chaque oxyde, données par le tableau de Mendeleïev, voir l'annexe 3). Les résultats ont été arrondis comme dans la méthode originelle (car calculés à la main) :

- SiO₂ = 28,086 (Si) + 15,999 (O) x 2 = 60,08 → Arrondis à 60
- Al₂O₃ = 26,98 (Al) x 2 + 15,999 (O) x 3 = 101,957 → Arrondis à 102, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Al. Donc résultat = 51
- MgO = 24,305 (Mg) + 15,999 (O) = 40
- MnO = 54,938 (Mn) + 15,999 (O) = 71
- CaO = 40,078 (Ca) + 15,999 (O) = 56
- FeO = 55,945 (Fe) + 15,999 (O) = 72
- V₂O₃ = 50,9415 x 2 + 15,999 (O) x 3 = 149,88 → Arrondis à 150, divisé par 2 = 75.

C3) Calculer le nombre de cations en divisant les pourcentages pondéraux d'oxydes (C1) par le poids moléculaire (C2) => (C1/C2) x 1000 :

- SiO₂ = (39,73 / 60) x 1000 = 662,167
- Al₂O₃ = (21,53 / 51) x 1000 = 422,157
- MgO = (11,57 / 40) x 1000 = 289,250

- $\text{MnO} = (0 / 71) \times 1000 = 0$
- $\text{CaO} = (0,49 / 56) \times 1000 = 8,750$
- $\text{FeO} = (23,52 / 72) \times 1000 = 326,667$
- $\text{V}_2\text{O}_3 = (0 / 75) \times 1000 = 0$

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations en multipliant le nombre de cations par les oxygènes associés à chaque cation, soit $\text{C3} \times n\text{O}$:

- Pour Si il faut 2 oxygènes, soit $662,167 \times 2 = 1324,334$
- Pour Al il faut 3/2 oxygènes, soit $422,157 \times (3/2) = 633,236$
- Pour Mg il faut 1 oxygène, soit $289,250 \times 1 = 289,250$
- Pour Mn il faut 1 oxygène, soit $0 \times 1 = 0$
- Pour Ca il faut 1 oxygène, soit $8,750 \times 1 = 8,750$
- Pour Fe il faut 1 oxygène, soit $326,667 \times 1 = 326,667$
- Pour V il faut 3/2 oxygènes, soit $0 \times 3/2 = 0$

C5) Premièrement, calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (qui ont été calculés à l'étape précédente C4) :

- La somme des oxygènes ici : $\Sigma = 1324,334_{(\text{Si})} + 633,236_{(\text{Al})} + 326,667_{(\text{Fe})} + 0_{(\text{Mn})} + 289,250_{(\text{Mg})} + 8,750_{(\text{Ca})} + 0_{(\text{V})} = 2582,237$

Deuxièmement, calculer le nombre de cations associés à 12 oxygènes par règle de 3 en utilisant la formule suivante : nombre de cations (C3) x nombre d'oxygènes (12) / somme des oxygènes (résultat arrondis au millième) :

- Pour Si = $(662,167 \times 12) / 2582,237 = 3,077$
- Pour Al = $(422,157 \times 12) / 2582,237 = 1,962$
- Pour Mg = $(289,250 \times 12) / 2582,237 = 1,344$
- Pour Mn = $(0 \times 12) / 2582,237 = 0$
- Pour Ca = $(8,750 \times 12) / 2582,237 = 0,041$
- Pour Fe = $(326,667 \times 12) / 2582,237 = 1,518$
- Pour V = $(0 \times 12) / 2582,237 = 0$

Total de la somme de tous les cations associés à 12 oxygènes, $S = 7,942$.

A partir de cette étape, il est possible de calculer la formule structurale de l'échantillon (**Option 1**) mais aussi de calculer la teneur en pôles purs (**Option 2**).

OPTION 1 : ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE

Pour cela, il faut se référer à la formule générale du minéral étudié et pour chaque élément récupérer le nombre de cation, ici 8, associés à 12 oxygènes calculé à l'étape **C5**. Puis il faut l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale. (Il est cependant à noter que selon la qualité de l'analyse chimique - les biais dus aux erreurs ou imprécisions inhérentes à la technique - la somme des coefficients peut ne pas être exactement égale à ce qu'elle devrait être).

Dans l'exemple du cours du Pr Lasnier, le minéral étudié est un grenat de formule structurale : $\text{X}_3\text{Y}_2(\text{Z}_3\text{O}_{12})$; où $\text{Z} = \text{Si} + \text{Al}^{\text{IV}}$ (en site tétraédrique) ; $\text{Y} = \text{Fe}^{3+} + \text{Al}^{\text{VI}}$ (en site octaédrique) ; $\text{X} = \text{Fe}^{2+} + \text{Mn} + \text{Mg} + \text{Ca}$.

L'établissement de la formule structurale se fait donc en 3 étapes :

On détermine d'abord les éléments correspondant au site Z, puis le site Y et pour terminer le site X. Concernant l'aluminium, il faut savoir que dans le grenat il peut à la fois être associé au site tétraédrique (noté Al^{IV}) dans le site Z, et en site octaédrique (noté Al^{VI}) dans le site Y.

- 1) Concernant le site Z :** Dans la formule structurale idéale le site tétraédrique Z est occupé par le silicium (Si) mais également par une partie de l'aluminium (noté Al^{IV}) (le reste de l'aluminium occupera le site octaédrique Y (noté Al^{VI}) et sera calculé à l'étape 2). Ici l'ensemble des cations occupant le site Z est censé être égal à 3, alors pour calculer l' Al^{IV} il suffit d'appliquer la formule suivante : $\text{Al}^{\text{IV}} = 3 - \text{Si}$; soit $\text{Al}^{\text{IV}} = 3 - 3,077 = 0$

- Ainsi, $\text{Z} = \text{Si}_{3,077} + \text{Al}^{\text{IV}}_0$
 → Où la somme des cations est égale à $3,077 + 0 = 3,077$

- 2) Concernant le site Y :** Il faut tout d'abord de récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes du Fe^{3+} .

Le problème étant qu'ici l'analyse MEB ne permet pas de différencier les deux états d'oxydation du fer, c'est-à-dire le fer ferreux Fe^{2+} et le fer ferrique Fe^{3+} , dans son analyse. Ainsi, si l'on souhaite calculer la part de Fe^{3+} contenue dans la gemme il faudra refaire l'analyse au moyen d'une technique permettant de différencier le Fe^{2+} et le Fe^{3+} par exemple au moyen d'une microsonde électronique. Dans cet exemple, nous considérerons que tout le fer présent est du fer ferreux (Fe^{2+}), car l'échantillon est sensé faire partie de la série pyrospite, ainsi cela permettra de détailler la fin de la formule afin d'expliquer le principe et de permettre son application ultérieure.

Ainsi pour connaître la formule structurale de l'aluminium en site octaédrique (Al^{VI}), il suffit simplement de récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes de l'aluminium et y soustraire celui de l'aluminium en site tétraédrique (Al^{IV}) calculé précédemment pour le site Z, ce qui donne pour cet échantillon : $\text{Al}^{\text{VI}} = \text{Al} - \text{Al}^{\text{IV}} = 1,962 - 0 = 1,962$

- Ainsi, $Y = Fe^{3+}_0 + Al^{VI}_{1,962} + V_0$
 \rightarrow le site Y devrait être égal à 2 si la formule est équilibrée, ici il est égal à 1,962.
- 3) **Concernant le site X** : Il suffit de récupérer les nombres de cations associés à 12 oxygènes du Fe^{2+} , du Mn, du Mg et du Ca, calculé à l'étape C5, ici respectivement égaux à 1,518 ; 0 ; 1,344 et 0,041.
- Ainsi, $X = Fe^{2+}_{1,518} + Mn_0 + Mg_{1,344} + Ca_{0,041}$
 \rightarrow le tout devrait être égal à 3 si la formule est bien équilibrée, ici il est égal à 2,903.

Ainsi selon la formule générale des grenats, la formule structurale de l'échantillon étudié est :

$\rightarrow (Mg_{1,344} Fe^{2+}_{1,518} Ca_{0,041}) Al^{VI}_{1,962} (Si_{3,077} O_{12})$

OPTION 2 : MÉTHODE POUR CALCULER LA TENEUR DES PÔLES PURS :

\rightarrow PÔLES PURS : PYROPE + ALMANDIN + SPESSARTITE & GROSSULAIRE-ANDRADITE (sans les différencier) :

Afin de calculer les pourcentages de chaque pôle pur présent dans la formule chimique du minéral étudié on récupérera les nombres de cations associés à 12 oxygènes correspondant aux pôles purs suivants : Mg (pôle pyrope), Fe^{2+} (pôle Almandin), Mn (pôle Spessartite), Ca (pôle grossulaire et andradite) obtenus dans la C5, que l'on multipliera par 100 (pour obtenir un pourcentage), le tout divisé par la Somme du nombre de cations des 4 éléments qui ici est égale à $\Sigma = 1,344(Mg) + 1,518(Fe^{2+}) + 0(Mn) + 0,041(Ca) = 2,903$. Ainsi on obtient :

- $Mg = (1,344 \times 100) / 2,903 = 46,297 \%$ de pôle pyrope
- $Fe^{2+} = (1,518 \times 100) / 2,903 = 52,291 \%$ de pôle almandin
- $Mn = (0 \times 100) / 2,903 = 0 \%$ de pôle spessartite
- $Ca = (0,041 \times 100) / 2,903 = 1,412 \%$ de pôles grossulaire + andradite
 \rightarrow Leur somme étant égale à 100 % ce qui est acceptable compte tenu de la marge d'erreur des analyses et calculs.

\rightarrow DIFFÉRENTIATION DES PÔLE PURS GROSSULAIRE ET ANDRADITE :

Ici encore comme l'analyse MEB ne permet pas de différencier les deux états d'oxydation du fer, nous considéreront que tout le fer présent est du fer ferreux (Fe^{2+}).

1) Pour calculer le nombre de cations « unitaires » nécessaires à la répartition du Fe^{3+} occupant le site Y dans l'andradite (noté Fe^{3+}_{And}), il faut diviser le nombre de cations associés à 12 oxygènes du Fe^{3+} calculé en C5, par le nombre d'atomes du site (2) soit :

$$Fe^{3+}_{And} = Fe^{3+}_{C5} / 2 = 0 / 2 = 0$$

2) Ce nombre de cations unitaires est associé dans l'andradite à 3 fois plus de calcium. Ainsi le nombre de cation de calcium dans l'andradite (noté Ca_{And}) équivaut à :

$$Ca_{And} = Fe^{3+}_{And} \times 3 = 0 \times 3 = 0$$

3) Ce nombre de cation est à soustraire du nombre de cation calcium total (noté Ca_{C5}) calculé en C5 pour avoir le nombre de cation de calcium du grossulaire (noté Ca_{Gros}), soit :

$$Ca_{Gros} = Ca_{C5} - Ca_{And} = 0,041 - 0 = 0,041$$

4) Calcul des pourcentages de pôles purs de grossulaire et d'andradite grâce aux calculs ci-dessous :

$$\begin{aligned} \% \text{ Grossulaire} &= (Ca_{Gros} / Sx) \times 100 = (0,041 / 2,903) \times 100 = 1,412 \% \\ \% \text{ Andradite} &= (Fe^{3+}_{And} / Sy) \times 100 = (0 / 0,183) \times 100 = 0 \% \end{aligned}$$

Avec :

- $Sx = \text{Somme des cations du site X} = 1,344_{(Mg)} + 1,518_{(Fe^{2+})} + 0_{(Mn)} + 0,041_{(Ca)} = 2,903$
- $Sy = \text{Somme des cations du site Y} = 0,041_{(Ca)} + 0_{(Fe^{3+})} = 0,183$

TABEAU RÉCAPITULATIF DE LA MÉTHODE POUR CALCULER LA TENEUR DES 5 PÔLES PURS D'UN GRENAT :

	Pyrope	Almandin	Spessartite	Grossulaire	Andradite
Formule générale	$(Mg_{C5} \times 100) / Sx$	$(Fe^{2+}_{C5} \times 100) / Sx$	$(Mn_{C5} \times 100) / Sx$	$((Ca_{C5} - ((Fe^{3+}_{C5} / 2) \times 3)) / Sx) \times 100$	$((Fe^{3+}_{C5} / 2) / Sy) \times 100$
Formule appliquée	$(1,344 \times 100) / 2,903$	$(1,518 \times 100) / 2,903$	$(0 \times 100) / 2,903$	$((0,041 - ((0 / 2) \times 3)) / 2,903) \times 100$	$((0 / 2) / 0,183) \times 100$
% en pôle pur	= 46,297 %	= 52,291 %	= 0 %	= 1,412 %	= 0 %

b. Tableau récapitulatif

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique						
C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev						
C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 ⇔ (C1/C2) x 1000						
C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associé(s) à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation ⇔ C3 x nO.						
C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (Σ oxygènes). Puis, calculer le nombre de cations associés à 12 oxygènes : nombre de cations x nombre d'oxygènes (12) / Σ oxygènes ⇔ (C3 x 12) / Σ oxygènes						
	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	39,73 %	60	662,167	1324,334	3,077	Si _{3,077}
Al ₂ O ₃	21,53 %	51	422,157	633,236	1,962	Al ^{IV} _{1,962}
V ₂ O ₃	0 %	75	0	0	0	V ₀
MgO	11,57 %	40	289,250	289,250	1,344	Mg _{1,344}
MnO	0 %	71	0	0	0	Mn ₀
CaO	0,49 %	56	8,750	8,750	0,041	Ca _{0,041}
FeO	23,52 %	72	326,667	326,667	1,518	Fe ²⁺ _{1,518}
	= 96,83			Σ oxygènes = 2582,237		

OPTION 1) ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE : récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule selon les trois étapes ci-dessous :

1) **Site Z (tétraédrique)** = il est occupé par le silicium (Si) et l'aluminium (Al^{IV}). Le nombre de cations du site Z étant égal à 3, l'Al^{IV} viendra combler le site Z. Ainsi Al^{IV} = 3 - Si = 3 - 3,077 = 0. Ici, Z = Si_{3,077} + Al^{IV}₀.

2) **Site Y (octaédrique)** = Il est occupé principalement par Al, Fe³⁺, Cr³⁺ et V³⁺. L'Al^{VI} correspondra à la part d'aluminium qui n'occupe pas le site Z, autrement dit : Al^{VI} = Al - Al^{IV} = 1,962 - 0 = 1,962. Ici, Y = Fe³⁺₀ + Al^{VI}_{1,962} + V₀.

3) **Site X (dodécaédrique)** = Il est principalement occupé par Fe²⁺, Mg, Mn et Ca. Il suffit de récupérer les nombres de cations associés à 12 oxygènes calculés à l'étape C5, et les intégrer dans la formule comme ci-dessous. Ici, X = Fe²⁺_{1,518} + Mn₀ + Mg_{1,344} + Ca_{0,041}.

Il suffit à présent d'intégrer les résultats ci-dessus dans la formule générale des grenats : X₃Y₂(Z₃O₁₂). Ainsi la formule structurale de l'échantillon est : **→ (Mg_{1,344} Fe²⁺_{1,518} Ca_{0,041}) (Al^{VI}_{1,962}) (Si_{3,077} O₁₂)**

OPTION 2) CALCUL DES PÔLES PURS : PYROPE, ALMANDIN, SPESSARTITE, GROSSULAIRE et ANDRADITE

Calculs des 5 pôles purs grâce aux formules ci-dessous. Avec :

- Sx = Somme des cations du site X (calculé à l'étape C5) = 1,344 (Mg) + 1,518 (Fe²⁺) + 0 (Mn) + 0,041 (Ca) = **2,903**
- Sy = Somme des cations du site Y (calculé à l'étape C5) = 0,041 (Ca) + 0 (Fe³⁺) = **0,041**

	Pyrope	Almandin	Spessartite	Grossulaire	Andradite
Formule générale	(Mg _{CS} x 100) / Sx	(Fe ²⁺ _{CS} x 100) / Sx	(Mn _{CS} x 100) / Sx	((Ca _{CS} - ((Fe ²⁺ _{CS} / 2) x 3)) / Sx) x 100	((Fe ³⁺ _{CS} / 2) / Sy) x 100
Formule appliquée	(1,344 x 100) / 2,903	(1,518 x 100) / 2,903	(0 x 100) / 2,903	((0,041 - ((0 / 2) x 3)) / 2,903) x 100	((0 / 2) / 0,041) x 100
% en pôle pur	= 46,297 %	= 52,291 %	= 0 %	= 1,412 %	= 0 %

Selon les résultats de l'option 2, la teneur en pôles purs du grenat étudié est :
→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

(pôle pyrope) **Mg** (pôle almandin) **Fe** (pôle spessartite) **Mn**

B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN »

a. Détails des calculs

Dans son livre « Naming Gem Garnets », Hanneman propose une méthode de calcul simplifiée permettant de connaître la teneur en pôles purs d'un grenat ainsi que sa formule structurale (Hanneman, 2000).

Sachant que la formule des variétés du groupe pyrope est : X₃Al₂(SiO₄)₃ ; avec X = Ca, Mg, Mn, Fe²⁺ ; le calcul sera basé sur les cations Fe, Mn, Mg et Ca correspondant respectivement aux pôles almandin, spessartite, pyrope et grossulaire-andradite.

Note : chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau ci-dessous à laquelle il correspond.

1) Au préalable, récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (notés Ox%) donnés par l'analyse chimique

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Mg	MgO	11.57
Ca	CaO	0.49
Mn	MnO ₂	0.00
Fe	FeO	23.52

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev)

- MgO = 24,305 (Mg) + 15,999 (O) = 40
- MnO = 54,938 (Mn) + 15,999 (O) = 71
- CaO = 40,078 (Ca) + 15,999 (O) = 56
- FeO = 55,945 (Fe) + 15,999 (O) = 72

3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (calculé à l'étape 2) Les résultats sont arrondis au millièmes.

- FeO = 23,52 / 71,85 = 0,327
- MgO = 11,57 / 40,31 = 0,287
- CaO = 0,49 / 56,08 = 0,009
- MnO = 0 / 70,93 = 0

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.

- $S = 0,327 + 0,287 + 0,009 + 0 = 0,623$

5) Multiplier par (100/S) les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde.

- Ici, $100 / S = 100 / 0,623 = 160,514$

- Ainsi :

- FeO : $0,327 \times 160,514 = 52,488$
- MgO : $0,287 \times 160,514 = 46,068$
- CaO : $0,009 \times 160,514 = 1,445$
- MnO : $0 \times 160,514 = 0$

OPTION 1 : Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est $> 70\%$ alors l'échantillon prend le nom du membre final. S'il est $< 70\%$ alors c'est un mélange entre deux phases solides.

→ normalement la somme des pourcentages des pôles devrait être égale à 100%, ici elle est égale à 100,001 %

La teneur en pôles purs est donc :

- Pourcentage du pôle almandin = 52,488 %
- Pourcentage du pôle pyrope = 46,068 %
- Pourcentage du pôle spessartite = 0 %
- Pourcentage du pôle grossulaire-andradite = 1,445 %

OPTION 2 : Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus en 3 pour chaque oxyde par 3/S (3 correspondant au nombre de cations du site X).

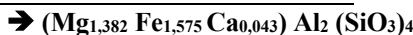
- Ici $3/S = 3 / 0,623 = 4,815$

- Ainsi :

- FeO : $0,327 \times 4,815 = 1,575$
- MgO : $0,287 \times 4,815 = 1,382$
- CaO : $0,009 \times 4,815 = 0,043$
- MnO : $0 \times 4,815 = 0$

→ normalement la somme des cations représentant les pôles purs doit être égale à 3, ici elle est égale à 3

La formule structurale calculée est donc :

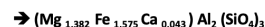


(ps : à noter qu'avec cette méthode seuls les cations Fe, Mg, Ca et Mn peuvent ici être calculés, les valeurs pour Al et Si sont les valeurs théoriques)

b. Tableau récapitulatif

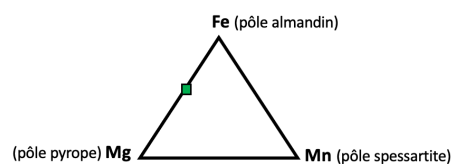
1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique						
2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleiev)						
3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).						
4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés en 3.						
5) Multiplier les valeurs obtenues à l'étape 3 par 100/S pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux. Ici $100/S = 100 / 0,623 = 160,514$						
OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est $> 70\%$ alors l'échantillon prend le nom du membre final. Si il est $< 70\%$ alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.						
OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 3/S (3 correspondant au nombre de cations du site X), avec ici $3/S = 3 / 0,623 = 4,815$						
	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
FeO (pôle almandin)	23,52 %	71,944	0,327	52,488	52,488 %	Fe _{1,575}
MgO (pôle pyrope)	11,57 %	40,304	0,287	46,068	46,068 %	Mg _{1,382}
MnO (pôle spessartite)	0 %	70,937	0	0	0 %	Mn ₀
CaO (pôle grossulaire-andradite)	0,49 %	56,077	0,009	1,445	1,445 %	Ca _{0,043}
			4) S = 0,623		Total = 100,001 %	

En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des grenats de la série pyrospite:
 $X_3 Y_2 (Z_3 \text{O}_{12})$, la formule structurale du grenat étudié est donc :
(Les valeurs de Al et Si ne sont pas calculables par cette méthode et correspondent à leurs valeurs théoriques)



Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du grenat étudié est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon



C. « Méthode GABBROSOFT »

Le site internet Gabbrosoft (Gabbrosoft, 2011) propose des feuilles de calcul Excel permettant de calculer les pourcentages des pôles purs simplement en entrant les pourcentages d'oxydes de chaque élément donné par l'analyse chimique, ici dans la colonne L5 à L11.

	K	L	M	N	O	P	Q	R
1		GARNET CALCULATION SHEET						
2		MB04 : Violet						
3								
4		Wt%	Mol Prop	At Prop O	No anions	Formula		
5	SiO2	39,730	0,661	1,323	12,831	Si	6,415	
6	TiO2	0,000	0,000	0,000	0,000	Ti	0,000	
7	Al2O3	21,530	0,211	0,633	6,146	Al	4,097	
8	FeO	23,520	0,327	0,327	3,176	Fe	3,176	
9	MnO	0,000	0,000	0,000	0,000	Mn	0,000	
10	MgO	11,570	0,287	0,287	2,785	Mg	2,785	
11	CaO	0,490	0,009	0,009	0,085	Ca	0,085	
12	TOTAL	96,840		2,579		TOTAL	16,558	
13								
14								
15								
16								
17	SiO2	60,08		No Oxyg	24	Endmembers		
18	TiO2	79,88		T2	9,305	Py	46,069	
19	Al2O3	101,96				Alm	52,528	
20	FeO	71,85				Gro	1,402	
21	MnO	70,94				Sp	0,000	
22	MgO	40,3						
23	CaO	56,08						
24								

Voici l'explication des résultats des différentes colonnes de la méthode Gabbrosoft :

Note : chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau ci-dessus à laquelle il correspond.

Colonne K5 à K11 et K17 à K23 = Cations détectés dans l'analyse MEB

Colonne L5 à L11 = Pourcentages pondéraux d'oxydes

B12 = Total des pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse

→ Données de l'analyse chimique

Colonne L17 à L23 = Calculer le poids moléculaire pour chaque cation

→ Données par la masse atomique relative de chaque élément donné dans le tableau de Mendeleïev) :

Colonne M5 à M11 = Nombre de cations

→ Pourcentages pondéraux d'oxydes divisés par le poids moléculaire calculé pour chaque cation

Colonne N5 à N11 = Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations

→ Nombre de cations (colonne M) multiplié par le nombre d'oxygènes associé à chaque oxyde

N12 = Somme des oxygènes associés à chacun des cations

Colonne O5 à O11 = Nombre d'anions

→ Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations (colonne O) / T2 (O18)

O17 = Nombre d'oxygènes dans la formule structurale de base

→ Le calcul de Gabbrosoft est basé sur 24 oxygènes

O18 = T2 = Nombre d'oxygènes 24 (O17) / somme des oxygènes (N5 à N11)

Colonne Q5 à Q11 = Nombre de cations associés à 24 oxygènes

→ Nombre d'anions (colonne O) divisé par le nombre par le nombre d'oxygènes associés à chaque cation

Q12 = Somme des nombres de cations associés à 24 oxygènes

Q/R18 à Q/R21 = Pourcentages en pôles purs pyrope (Py), almandin (Alm), grossulaire (Gro) et spessartite (Sp)

→ Nombre de cations associés à 24 oxygènes (colonne Q) divisés par la somme des cations associés à 24 oxygènes (Q12) multipliés par 100

LA TENEUR EN PÔLES PURS : Elle est directement obtenue dans la colonne Q/R18 à Q/R11 :

- Pôle Pyrope = 46,069 %
- Pôle Almandin = 52,528 %
- Pôle Spessartite = 0%
- Pôle Grossulaire et Andradite = 1,402 %
→ Leur somme est égale à 99,999 %

LA FORMULE STRUCTURALE : La colonne Q5 à Q11 donne le nombre de chaque cation associé à 24 oxygènes.

Cependant comme le calcul est ici basé sur 24 oxygènes, les résultats doivent être divisés par 2 afin d'être comparables aux deux méthodes précédentes qui elles calculent la formule structurale sur la base de 12 oxygènes.

Cations	Nombres de cations associés à 24 oxygènes	Nombres de cations recalculés associés à 12 oxygènes
Si	6,415	3,208
Al	4,097	2,048
Fe	3,176	1,588
Mn	0,000	0
Mg	2,785	1,393
Ca	0,085	0,043

La formule structurale calculée est donc :

→ (Mg_{1,393} Fe_{1,588} Ca_{0,043}) Al_{2,048} (Si_{3,208} O₁₂)

4. ÉCHANTILLON MB05 :

A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER »

a. Détails des calculs

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (noté Ox%) donnés par l'analyse chimique du MEB :

Le total de la somme de tous les pourcentages d'oxydes des différents éléments pour chaque échantillon est reporté dans la case rouge de chaque tableau, en bas à droite, ici égal à 92,19 %. Les résultats complets de l'analyse MEB ont été reporté à l'annexe n°1.3.

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Mg	MgO	14.66
Al	Al ₂ O ₃	21.26
Si	SiO ₂	39.04
Ca	CaO	1.33
V	V ₂ O ₃	0.00
Mn	MnO ₂	1.63
Fe	FeO	14.27
		92.19

C2) Calculer l'équivalent moléculaire à un cation (en utilisant les masses atomiques relative de chaque élément de chaque oxyde, données par le tableau de Mendeleïev, voir l'annexe 3). Les résultats ont été arrondis comme dans la méthode originelle (car calculés à la main) :

- SiO₂ = 28,086 (Si) + 15,999 (O) x 2 = 60,08 → Arrondis à 60
- Al₂O₃ = 26,98 (Al) x 2 + 15,999 (O) x 3 = 101,957 → Arrondis à 102, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Al. Donc résultat = 51
- MgO = 24,305 (Mg) + 15,999 (O) = 40
- MnO = 54,938 (Mn) + 15,999 (O) = 71
- CaO = 40,078 (Ca) + 15,999 (O) = 56
- FeO = 55,945 (Fe) + 15,999 (O) = 72
- V₂O₃ = 50,9415 x 2 + 15,999 (O) x 3 = 149,88 → Arrondis à 150, divisé par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul vanadium = 75.

C3) Calculer le nombre de cations en divisant les pourcentages pondéraux (C1) par le poids moléculaire (C2) => (C1/C2) x 1000 :

- $\text{SiO}_2 = (39,04 / 60) \times 1000 = 650,660$
- $\text{Al}_2\text{O}_3 = (21,26 / 51) \times 1000 = 416,862$
- $\text{MgO} = (14,66 / 40) \times 1000 = 366,500$
- $\text{MnO} = (1,63 / 71) \times 1000 = 22,957$
- $\text{CaO} = (1,33 / 56) \times 1000 = 23,750$
- $\text{FeO} = (14,27 / 72) \times 1000 = 198,194$
- $\text{V}_2\text{O}_3 = (0 / 75) \times 1000 = 0$

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations en multipliant le nombre de cations par les oxygènes associés à chaque cation, soit C3 x nO :

- Pour Si il faut 2 oxygènes, soit $650,660 \times 2 = 1301,320$
- Pour Al il faut 3/2 oxygènes, soit $416,862 \times (3/2) = 625,293$
- Pour Mg il faut 1 oxygène, soit $366,500 \times 1 = 366,500$
- Pour Mn il faut 1 oxygène, soit $22,957 \times 1 = 22,957$
- Pour Ca il faut 1 oxygène, soit $23,750 \times 1 = 23,750$
- Pour Fe il faut 1 oxygène, soit $198,194 \times 1 = 198,194$
- Pour V il faut 3/2 oxygènes, soit $0 \times (3/2) = 0$

C5) Premièrement, calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (qui ont été calculés à l'étape précédente C4) :

- La somme des oxygènes ici : $\Sigma = 1301,320_{(\text{Si})} + 625,293_{(\text{Al})} + 198,194_{(\text{Fe})} + 22,957_{(\text{Mn})} + 366,500_{(\text{Mg})} + 23,750_{(\text{Ca})} + 0_{(\text{V})} = 2538,014$

Deuxièmement, calculer le nombre de cations associés à 12 oxygènes par règle de 3, soit en utilisant la formule suivante : nombre cation (C3) x nombre d'oxygène (12) / somme des oxygènes (résultat arrondis au millième) :

- Pour Si $= (650,320 \times 12) / 2538,014 = 3,075$
- Pour Al $= (416,862 \times 12) / 2538,014 = 1,971$
- Pour Mg $= (366,500 \times 12) / 2538,014 = 1,733$
- Pour Mn $= (22,957 \times 12) / 2538,014 = 0,109$
- Pour Ca $= (23,750 \times 12) / 2538,014 = 0,112$
- Pour Fe $= (198,194 \times 12) / 2538,014 = 0,937$
- Pour V $= (0 \times 12) / 2538,014 = 0$

Total de la somme de tous les cations associés à 12 oxygènes, $S = 7,937$

A partir de cette étape, il est possible de calculer la formule structurale de l'échantillon (**Option 1**) mais aussi de calculer la teneur en pôles purs (**Option 2**).

OPTION 1 : ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE

Pour cela, il faut se référer à la formule générale du minéral étudié et pour chaque élément récupérer le nombre de cation, ici 8, associés à 12 oxygènes calculé à l'étape **C5**. Puis il faut l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale. (Il est cependant à noter que selon la qualité de l'analyse chimique - les biais dus aux erreurs ou imprécisions inhérentes à la technique - la somme des coefficients peut ne pas être exactement égale à ce qu'elle devrait être).

Dans l'exemple du cours du Pr Lasnier, le minéral étudié est un grenat de formule structurale : $\text{X}_3\text{Y}_2(\text{Z}_3\text{O}_{12})$; où Z = Si + Al (en site tétraédrique) ; Y = Fe^{3+} + Al (en site octaédrique) ; X = Fe^{2+} + Mn + Mg + Ca.

L'établissement de la formule structurale se fait donc en 3 étapes :

On détermine d'abord les éléments correspondants au site Z, puis le site Y et pour terminer le site X. Concernant l'aluminium, il faut savoir que dans le grenat il peut à la fois être associé au site tétraédrique (noté Al^{IV}) dans le site Z, et en site octaédrique (noté Al^{VI}) dans le site Y.

- 1) **Concernant le site Z :** Dans la formule structurale idéale le site tétraédrique Z est occupé par le silicium (Si) mais également par une partie de l'aluminium (noté Al^{IV}) (le reste de l'aluminium occupera le site octaédrique Y (noté Al^{VI}) et sera calculé à l'étape 2). Ici l'ensemble des cations occupant le site Z est censé être égal à 3, alors pour calculer l' Al^{IV} il suffit d'appliquer la formule suivante : $\text{Al}^{\text{IV}} = 3 - \text{Si}$; soit $\text{Al}^{\text{IV}} = 3 - 3,075 = 0$.
 - Ainsi, $\text{Z} = \text{Si}_{3,075} + \text{Al}^{\text{IV}}_0 = 0$
 → Où la somme des cations est égale à $3,075 + 0 = 3,075$
- 2) **Concernant le site Y :** Il faut tout d'abord de récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes du Fe^{3+} .

Le problème étant qu'ici l'analyse MEB ne permet pas de différencier les deux états d'oxydation du fer, c'est-à-dire le fer ferreux Fe^{2+} et le fer ferrique Fe^{3+} , dans son analyse. Ainsi, si l'on souhaite calculer la part de Fe^{3+} contenue dans la gemme il faudra refaire l'analyse au moyen d'une technique permettant de différencier le Fe^{2+} et le Fe^{3+} par exemple au moyen d'une microsonde électronique. Dans cet exemple, nous considérerons que tout le fer présent est du fer ferreux (Fe^{2+}), car l'échantillon est sensé faire partie de la série pyrospite, ainsi cela permettra de détailler la fin de la formule afin d'expliquer le principe et de permettre son application ultérieure.

Ainsi pour connaître la formule structurale de l'aluminium en site octaédrique (Al^{VI}), il suffit simplement de récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes de l'aluminium et y soustraire celui de l'aluminium en site tétraédrique (Al^{IV}) calculé précédemment pour le site Z, ce qui donne pour cet échantillon : $Al^{VI} = Al - Al^{IV} = 1,971 - 0 = 1,971$

- Ainsi, $Y = Fe^{3+}_0 + Al^{VI}_{1,971} + V_0$
 \rightarrow le site Y devrait être égal à 2 si la formule est équilibrée, ici égal à 1,971
- 3) **Concernant le site X** : Il suffit de récupérer les nombres de cations associés à 12 oxygènes du Fe^{2+} , du Mn, du Mg et du Ca, calculé à l'étape **C5**, ici respectivement égaux à 0,937 ; 0,109 ; 1,733 et 0,112. Leur somme devrait être égale à 3 si la formule est bien équilibrée.
- Ainsi, $X = Fe^{2+}_{0,937} + Mn_{0,109} + Mg_{1,733} + Ca_{0,112}$
 \rightarrow le tout devrait être égal à 3 si la formule est bien équilibrée, ici il est égal à 2,891.

Ainsi selon la formule générale des grenats, la formule structurale de l'échantillon étudié est :

$\rightarrow (Mg_{1,733} Mn_{0,109} Fe^{2+}_{0,937} Ca_{0,112}) Al^{VI}_{1,971} Si_{3,075} O_{12}$

OPTION 2 : MÉTHODE POUR CALCULER LA TENEUR DES PÔLES PURS :

\rightarrow PÔLES PURS : PYROPE + ALMANDIN + SPESSARTITE & GROSSULAIRE-ANDRADITE (sans les différencier) :

Afin de calculer les pourcentages de chaque pôle pur présent dans la formule chimique du minéral étudié on récupérera les nombres de cations associés à 12 oxygènes correspondant aux pôles purs suivants : Mg (pôle pyrope), Fe^{2+} (pôle almandin), Mn (pôle spessartite), Ca (pôle grossulaire et andradite) obtenus dans la **C5**, que l'on multipliera par 100 (pour obtenir un pourcentage), le tout divisé par la somme du nombre de cations des 4 éléments qui ici est égale à $\Sigma = 1,733(Mg) + 0,937(Fe^{2+}) + 0,109(Mn) + 0,112(Ca) = 2,891$. Ainsi on obtient :

- $Mg = (1,733 \times 100) / 2,891 = 59,945 \%$ de Mg (pyrope)
- $Fe^{2+} = (0,937 \times 100) / 2,891 = 32,411 \%$ de Fe^{2+} (almandin)
- $Mn = (0,109 \times 100) / 2,891 = 3,770 \%$ de Mn (spessartite)
- $Ca = (0,112 \times 100) / 2,891 = 3,874 \%$ de Ca (grossulaire + andradite)
- \Rightarrow Leur somme étant égale à 100 %.

\rightarrow DIFFÉRENTIATION DES PÔLES PURS GROSSULAIRE & ANDRADITE :

Ici encore comme l'analyse MEB ne permet pas de différencier les deux états d'oxydation du fer, nous considéreront que tout le fer présent est du fer ferreux (Fe^{2+}).

- 1) **Pour calculer le nombre de cations « unitaires » nécessaires à la répartition du Fe^{3+} occupant le site Y dans l'andradite (noté Fe^{3+}_{And}), il faut diviser le nombre de cations associés à 12 oxygènes du Fe^{3+} calculé en **C5** (noté Fe^{3+}_{C5}), par le nombre d'atomes du site (2) soit :**
 $Fe^{3+}_{And} = Fe^{3+}_{C5} / 2 = 0 / 2 = 0$
- 2) **Ce nombre de cations unitaire est associé dans l'andradite à 3 fois plus de calcium. Ainsi le nombre de cation de calcium dans l'andradite (noté Ca_{And}) équivaut à :**
 $Ca_{And} = Fe^{3+}_{And} \times 3 = 0 \times 3 = 0$
- 3) **Ce nombre de cation est à soustraire du nombre de cation calcium (noté Ca_{C5}) total calculé en **C5** pour avoir le nombre de cation de calcium du grossulaire (noté Ca_{Gros}), soit :**
 $Ca_{Gros} = Ca_{C5} - Ca_{And} = 0,112 - 0 = 0,112$
- 4) **Calcul des pourcentages de pôles purs de grossulaire et d'andradite grâce aux calculs ci-dessous :**
 - % grossulaire = $(Ca_{Gros} / S_x) \times 100 = (0,112 / 2,891) \times 100 = 3,874 \%$
 - % andradite = $(Fe^{3+}_{And} / S_y) \times 100 = (0 / 0,112) \times 100 = 0 \%$

Avec :

- $S_x = \text{Somme des cations du site X} = 1,733(Mg) + 0,937(Fe^{2+}) + 0,109(Mn) + 0,112(Ca) = 2,891$
- $S_y = \text{Somme des cations du site Y} = 0,112(Ca) + 0(Fe^{3+}) = 0,112$

TABLEAU RÉCAPITULATIF DE LA MÉTHODE POUR CALCULER LA TENEUR DES 5 PÔLES PURS D'UN GRENAT :

	Pyrope	Almandin	Spessartite	Grossulaire	Andradite
Formule générale	$(Mg_{C5} \times 100) / S_x$	$(Fe^{2+}_{C5} \times 100) / S_x$	$(Mn_{C5} \times 100) / S_x$	$((Ca_{C5} - ((Fe^{3+}_{C5} / 2) \times 3)) / S_x) \times 100$	$((Fe^{3+}_{C5} / 2) / S_y) \times 100$
Formule appliquée	$(1,733 \times 100) / 2,891$	$(0,937 \times 100) / 2,891$	$(0,109 \times 100) / 2,891$	$((0,112 - ((0 / 2) \times 3)) / 2,891) \times 100$	$((0 / 2) / 0,112) \times 100$
% en pôle pur	= 59,945 %	= 32,411 %	= 3,770 %	= 3,874 %	= 0 %

b. Tableau récapitulatif

Tableau récapitulatif de la méthode de calculs et des résultats appliquée à l'échantillon MB05 :

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique					
C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleiev					
C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 ⇔ (C1/C2) x 1000					
C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associé(s) à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation ⇔ C3 x nO.					
C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (Σ oxygènes) Puis, calculer le nombre de cations associés à 12 oxygènes : nombre de cations x nombre d'oxygènes (12) / Σ oxygènes ⇔ (C3 x 12) / Σ oxygènes					
	C1	C2	C3	C4	C5
SiO ₂	39,04 %	60	650,660	1301,320	3,075
Al ₂ O ₃	21,26 %	51	416,862	625,293	1,971
V ₂ O ₃	0 %	75	0	0	0
MgO	14,66 %	40	366,500	366,500	1,733
MnO	1,63 %	71	22,957	22,957	0,109
CaO	1,33 %	56	23,750	23,750	0,112
FeO	14,27 %	72	198,194	198,194	0,937
=	92,19			Σ oxygènes = 2538,014	
OPTION 1					
OPTION 1) ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE : récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule selon les trois étapes ci-dessous : 1) Site Z (tétraédrique) : Il est occupé par le silicium (Si) et l'aluminium (Al ^{IV}). Le nombre de cations du site Z étant égal à 3, l'Al ^{IV} viendra combler le site Z. Ainsi Al ^{IV} = 3 - Si = 3 - 3,075 = 0 Ici, Z = Si _{3,075} + Al ^{IV} ₀ 2) Site Y (octaédrique) : Il est occupé principalement par Al, Fe ³⁺ , Cr ³⁺ et V ³⁺ . L'Al ^{IV} correspondra à la part d'aluminium qui n'occupe pas le site Z, autrement dit : Al ^{IV} = Al - Al ^{IV} = 1,971 - 0 = 1,971 Ici, Y = Fe ³⁺ _{0,937} + Al ^{IV} _{1,971} + V ₀ 3) Site X (dodécacaédrique) : Il est principalement occupé par Fe ²⁺ , Mg, Mn et Ca. Il suffit de récupérer les nombres de cations associés à 12 oxygènes calculés à l'étape C5, et les intégrer dans la formule comme ci-dessous. Ici, X = Fe ²⁺ _{0,937} + Mn _{0,109} + Mg _{1,733} + Ca _{0,112} Il suffit à présent d'intégrer les résultats ci-dessus dans la formule générale des grenats : X ₃ Y ₂ Z ₃ O ₁₂ . Ainsi la formule structurale de l'échantillon est : → (Mg _{1,733} Mn _{0,109} Fe ²⁺ _{0,937} Ca _{0,112}) Al ^{IV} _{1,971} (Si _{3,075} O ₁₂)					
OPTION 2) CALCUL DES PÔLES PURS : PYROPE, ALMANDIN, SPESSARTITE, GROSSULAIRE et ANDRADITE					
Calculs des 5 pôles purs grâce aux formules ci-dessous. Avec : - S _X = Somme des cations du site X (calculé à l'étape C5) = 1,977 (Mg) + 0,937 (Fe ²⁺) + 0,109 (Mn) + 0,112 (Ca) = 3,135 - S _Y = Somme des cations du site Y (calculé à l'étape C5) = 0,112 (Ca) + 0 (Fe ³⁺) = 0,112					
	Pyrope	Almandin	Spessartite	Grossulaire	Andradite
Formule générale	(Mg _{CS} x 100) / S _X	(Fe ²⁺ _{CS} x 100) / S _X	(Mn _{CS} x 100) / S _X	((Ca _{CS} - ((Fe ³⁺ _{CS} / 2) x 3)) / S _X) x 100	((Fe ³⁺ _{CS} / 2) / S _Y) x 100
Formule appliquée	(1,737 x 100) / 3,135	(0,937 x 100) / 3,135	(0,109 x 100) / 3,135	((0,112 - ((0 / 2) x 3)) / 3,135) x 100	((0 / 2) / 0,112) x 100
% en pôle pur	= 59,945 %	= 32,411 %	= 3,770 %	= 3,874 %	= 0 %

B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN »

a. Détails des calculs

Dans son livre « Naming Gem Garnets », Hanneman propose une méthode de calcul simplifiée permettant de connaître la teneur en pôles purs d'un grenat ainsi que sa formule structurale (Hanneman, 2000).

Sachant que la formule des variétés du groupe pyrope est : X₃Al₂(SiO₄)₃ ; avec X = Ca, Mg, Mn, Fe²⁺ ; le calcul sera basé sur les cations Fe, Mn, Mg et Ca correspondant respectivement aux pôles almandin, spessartite, pyrope et grossulaire-andradite.

Note : chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau suivant à laquelle il correspond.

1) Au préalable, récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (noté Ox%) donnés par l'analyse chimique.

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Mg	MgO	14.66
Ca	CaO	1.33
Mn	MnO ₂	1.63
Fe	FeO	14.27

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément, données par le tableau de Mendeleiev)

- MgO = 24,305 (Mg) + 15,999 (O) = 40,31
- MnO = 54,938 (Mn) + 15,999 (O) = 70,93
- CaO = 40,078 (Ca) + 15,999 (O) = 56,08
- FeO = 55,945 (Fe) + 15,999 (O) = 71,94

3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (calculé à l'étape 2). Les résultats sont arrondis au millièmes.

- FeO : 14,27 / 71,85 = 0,199
- MgO : 14,66 / 40,31 = 0,363
- CaO : 1,33 / 56,08 = 0,024
- MnO : 1,63 / 70,93 = 0,023

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.

- $S = 0,199 + 0,363 + 0,009 + 0 = 0,609$

5) Multiplier par (100/S) les valeurs obtenues en 3 pour chaque oxyde.

- Ici, $100 / S = 100 / 0,609 = 164,204$
- Ainsi :
 - o $\text{FeO} : 0,199 \times 164,204 = 32,677$
 - o $\text{MgO} : 0,363 \times 164,204 = 59,606$
 - o $\text{CaO} : 0,024 \times 164,204 = 3,941$
 - o $\text{MnO} : 0,023 \times 164,204 = 3,777$

OPTION 1 : Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est $> 70\%$ alors l'échantillon prend le nom du membre final. S'il est $< 70\%$ alors c'est un mélange entre deux phases solides.

→ normalement la somme des pourcentages des pôles devrait être égale à 100%, ici elle est égale à 100,001%.

La teneur en pôles purs est donc :

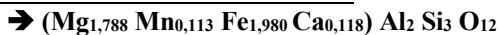
- Pourcentage du pôle almandin = 32,677 %
- Pourcentage du pôle pyrope = 59,606 %
- Pourcentage du pôle spessartite = 3,777 %
- Pourcentage du pôle grossulaire-andradite = 3,941 %

OPTION 2 : Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus en 3 pour chaque oxyde par 3/S (3 correspondant au nombre de cations du site X).

- Ici $3 / S = 3 / 0,609 = 4,926$
- Ainsi :
 - o $\text{FeO} : 0,199 \times 4,926 = 0,980$
 - o $\text{MgO} : 0,363 \times 4,926 = 1,788$
 - o $\text{CaO} : 0,024 \times 4,926 = 0,118$
 - o $\text{MnO} : 0,023 \times 4,926 = 0,113$

→ normalement la somme des cations représentant les pôles purs doit être égale à 3, ici elle est égale à 2,999

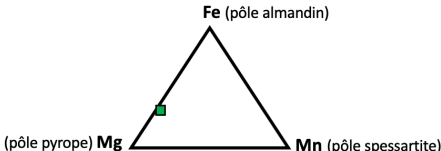
La formule structurale calculée est donc :



(ps : à noter qu'avec cette méthode seuls les cations Fe, Mg, Ca et Mn peuvent ici être calculés, les valeurs pour Al et Si sont les valeurs théoriques)

b. Tableau récapitulatif

Tableau récapitulatif de la méthode de calculs et des résultats appliquée à l'échantillon MB05 :

	1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique	2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleiev)	3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).	4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés en 3.	5) Multiplier les valeurs obtenues à l'étape 3 par 100/S pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux. Ici $100/S = 100 / 0,609 = 164,204$	OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est $> 70\%$ alors l'échantillon prend le nom du membre final. Si il est $< 70\%$ alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.	OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 3/S (3 correspondant au nombre de cations du site X), avec ici $3/S = 3 / 0,609 = 4,926$
	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2	
FeO (pôle almandin)	14,27 %	71,94	0,199	32,677	32,677 %	Fe _{0,980}	<p>En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des grenats de la série pyrospite: $X_3 Y_2 (Z_2 O_{12})$, la formule structurale du grenat étudié est donc :</p> <p>(Les valeurs de Al et Si ne sont pas calculables par cette méthode et correspondent à leurs valeurs théoriques)</p> <p>→ $(\text{Mg}_{1,788} \text{Mn}_{0,113} \text{Fe}_{1,980} \text{Ca}_{0,118}) \text{Al}_2 (\text{SiO}_4)_3$</p> <p>Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du grenat étudié est :</p> <p>→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon</p> 
MgO (pôle pyrope)	14,66 %	40,31	0,363	59,606	59,606 %	Mg _{1,788}	
MnO (pôle spessartite)	1,63 %	70,93	0,023	3,777	3,777 %	Mn _{0,113}	
CaO (pôle grossulaire-andradite)	1,33 %	56,08	0,024	3,941	3,941 %	Ca _{0,118}	
			4) S = 0,609		Total = 100,001 %		

C. « Méthode GABBROSOFT »

Le site internet Gabbrosoft propose des feuilles de calcul Excel permettant de calculer les pourcentages des pôles purs simplement en entrant les pourcentages d'oxydes de chaque élément donné par l'analyse chimique, ici dans la colonne B34 à B40 (Gabbrosoft, 2011).

	A	B	C	D	E	F	G	H
30		GARNET CALCULATION SHEET						
31		MB05 : Rhodolite						
32								
33		Wt%	Mol Prop	At Prop O	No anions	Formula		
34	SiO2	39,040	0,650	1,300	12,608	Si	6,304	
35	TiO2	0,000	0,000	0,000	0,000	Ti	0,000	
36	Al2O3	21,260	0,209	0,626	6,069	Al	4,046	
37	FeO	14,270	0,199	0,199	1,927	Fe	1,927	
38	MnO	1,630	0,023	0,023	0,223	Mn	0,223	
39	MgO	14,660	0,364	0,364	3,529	Mg	3,529	
40	CaO	1,330	0,024	0,024	0,230	Ca	0,230	
41	TOTAL	92,190		2,534		TOTAL	16,259	
42								
43								
44								
45								
46	SiO2	60,08		No Oxyg	24	Endmembers		
47	TiO2	79,88		T2	9,470	Py	59,725	
48	Al2O3	101,96				Alm	32,608	
49	FeO	71,85				Gro	3,894	
50	MnO	70,94				Sp	3,772	
51	MgO	40,3						
52	CaO	56,08						
53								

Voici l'explication des résultats des différentes colonnes de la méthode Gabbrosoft :

Note : chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau ci-dessus à laquelle il correspond.

Colonne A34 à A40 et A46 à A52 = Cations détectés dans l'analyse MEB

Colonne B34 à B40 = Pourcentages pondéraux d'oxydes

B41 = Total des pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse

→ Données de l'analyse chimique

Colonne B46 à B52 = Calculer le poids moléculaire pour chaque cation

→ Données par la masse atomique relative de chaque élément donné dans le tableau de Mendeleïev) :

Colonne C34 à C40 = Nombre de cations

→ Pourcentages pondéraux d'oxydes divisés par le poids moléculaire calculé pour chaque cation

Colonne D34 à D40 = Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations

→ Nombre de cations (colonne C) multiplié par le nombre d'oxygènes associés à chaque oxyde

D41 = Somme des oxygènes associés à chacun des cations

Colonne E34 à E40 = Nombre d'anions

→ Nombre d'oxygènes associé à chacun des cations (colonne E) / T2 (E47)

E46 = Nombre d'oxygènes dans la formule structurale de base

→ Le calcul de Gabbrosoft est basé sur 24 oxygènes

E47 = T2 = Nombre d'oxygènes 24 (E46) / Somme des oxygènes (D34 à D40)

Colonne G34 à G40 = Nombre de cations associés à 24 oxygènes

→ Nombre d'anions (colonne E) divisé par le nombre d'oxygènes associés à chaque cation

G41 = Somme des nombres de cations associés à 24 oxygènes

G/H47 à G/H50 = Pourcentages en pôles purs pyrope (Py), almandin (Alm), grossulaire (Gro) et spessartite (Sp)
 → Nombre de cations associés à 24 oxygènes (colonne G) divisés par la somme des cations associés à 24 oxygènes (G41) multipliés par 100

LA TENEUR EN PÔLES PURS : Elle est directement obtenue dans la colonne G/H47 à G/H50 :

- Pôle pyrope = 59,725 %
 - Pôle almandin = 32,608 %
 - Pôle spessartite = 3,772 %
 - Pôle grossulaire (Gro) comprenant le pôle andradite = 3,894 %
- Leur somme est égale à 99,999 %

LA FORMULE STRUCTURALE : La colonne G34 à G40 donne le nombre de chaque cation associé à 24 oxygènes. Cependant comme le calcul est ici basé sur 24 oxygènes, les résultats doivent être divisés par 2 afin d'être comparables aux deux méthodes précédentes qui elles calculent la formule structurale sur la base de 12 oxygènes.

Cations	Nombres de cations associés à 24 oxygènes	Nombres de cations recalculés associés à 12 oxygènes
Si	6,304	3,152
Al	4,046	2,023
Fe	1,927	0,964
Mn	0,223	0,112
Mg	3,529	1,765
Ca	0,230	0,115

La formule structurale calculée est donc :

→ **(Mg_{1,765} Mn_{0,112} Fe_{0,964} Ca_{0,115}) Al_{2,023} Si_{3,152} O₁₂**

5. ÉCHANTILLON MB15 :

A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER »

a. Détails des calculs

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique du MEB :

Le total de la somme de tous les pourcentages d'oxydes des différents éléments pour chaque échantillon est reporté dans la case rouge de chaque tableau, en bas à droite, ici égal à 92,92%. Les résultats complets de l'analyse MEB ont été reporté à l'annexe n°1.4.

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Mg	MgO	0.00
Al	Al ₂ O ₃	21.30
Si	SiO ₂	39.21
Ca	CaO	32.16
V	V ₂ O ₃	0.06
Cr	Cr ₂ O ₃	0.08
Fe	Fe ₂ O ₃	0.11
		92.92

C2) Calculer l'équivalent moléculaire à un cation (en utilisant les masses atomiques relative de chaque élément de chaque oxyde, données par le tableau de Mendeleïev, voir l'annexe 3). Les résultats ont été arrondis comme dans la méthode originelle (car calculés à la main) :

- SiO₂ = 28,086 (Si) + 15,999 (O) x 2 = 60,08 → Arrondis à 60
- Al₂O₃ = 26,98 (Al) x 2 + 15,999 (O) x 3 = 101,957 → Arrondis à 102, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique à un seul Al. Donc résultat = 51
- MgO = 24,305 (Mg) + 15,999 (O) = 40
- MnO = 54,938 (Mn) + 15,999 (O) = 71
- CaO = 40,078 (Ca) + 15,999 (O) = 56
- Fe₂O₃ = 55,845 (Fe) x 2 + 15,999 (O) x 3 = 159,687 → Arrondis à 160, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Al. Donc résultat = 80
- V₂O₃ = 50,9415 x 2 + 15,999 (O) x 3 = 149,88 → Arrondis à 150, divisé par 2 = 75.
- Cr₂O₃ = 51,996 (Cr) + 15,999 (O) x 3 = 151,95 → Arrondis à 152, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Al. Donc résultat = 76

C3) Calculer le nombre de cations en divisant les pourcentages pondéraux (C1) par le poids moléculaire (C2) => (C1/C2) x 1000 :

- SiO₂ : (39,21 / 60) x 1000 = 653,500
- Al₂O₃ : (21,30 / 51) x 1000 = 417,647
- MgO : (0 / 40) x 1000 = 0
- MnO : (0 / 71) x 1000 = 0
- CaO : (32,16 / 56) x 1000 = 574,285
- Fe₂O₃ : (0,11 / 80) x 1000 = 1,383
- V₂O₃ : (0,06 / 75) x 1000 = 0,800
- Cr₂O₃ : (0,08 / 76) x 1000 = 1,052

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations en multipliant le nombre de cations par les oxygènes associés à chaque cation, soit C3 x nO :

- Pour Si il faut 2 oxygènes, soit 653,500 x 2 = 1307,000
- Pour Al il faut 3/2 oxygènes, soit 417,647 x (3/2) = 626,460
- Pour Mg il faut 1 oxygène, soit 0 x 1 = 0
- Pour Mn il faut 1 oxygène, soit 0 x 1 = 0
- Pour Ca il faut 1 oxygène, soit 574,285 x 1 = 574,285
- Pour Fe³⁺ il faut 3/2 oxygènes, soit 1,383 x (3/2) = 2,074
- Pour V il faut 3/2 oxygènes, soit 0,800 x (3/2) = 1,200
- Pour Cr il faut 3/2 oxygènes, soit 1,05 x (3/2) = 1,575

C5) Premièrement, calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (qui ont été calculés à l'étape précédente C4) :

- La somme des oxygènes ici : $\Sigma = 1307_{(Si)} + 626,46_{(Al)} + 2,074_{(Fe)} + 0_{(Mn)} + 0_{(Mg)} + 574,285_{(Ca)} + 0_{(V)} + 1,575_{(Cr)} = 2511,394$

Deuxièmement, calculer le nombre de cations associés à 12 oxygènes par règle de 3, soit en utilisant la formule suivante : nombre cation (C3) x nombre d'oxygène (12) / somme des oxygènes (résultat arrondis au millième) :

- Pour Si = (653,5 x 12) / 2511,394 = 3,122
- Pour Al = (417,647 x 12) / 2511,394 = 1,995
- Pour Mg = (0 x 12) / 2511,394 = 0
- Pour Mn = (0 x 12) / 2511,394 = 0
- Pour Ca = (574,285 x 12) / 2511,394 = 2,744
- Pour Fe³⁺ = (1,383 x 12) / 2511,394 = 0,007
- Pour V = (0,8 x 12) / 2511,394 = 0,004
- Pour Cr = (1,052 x 12) / 2511,394 = 0,005

Total de la somme de tous les cations associés à 12 oxygènes, S = 7,877.

A partir de cette étape, il est possible de calculer la formule structurale de l'échantillon (**Option 1**) mais aussi de calculer la teneur en pôles purs (**Option 2**).

OPTION 1 : ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE :

Pour cela, il faut se référer à la formule générale du minéral étudié et pour chaque élément récupérer le nombre de cation, ici 8, associés à 12 oxygènes calculé à l'étape C5. Puis il faut l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale. (Il est cependant à noter que selon la qualité de l'analyse chimique - les biais dus aux erreurs ou imprécisions inhérentes à la technique - la somme des coefficients peut ne pas être exactement égale à ce qu'elle devrait être).

Dans l'exemple du cours du Pr Lasnier, le minéral étudié est un grenat de formule structurale : $X_3Y_2(Z_3O_{12})$; où Z = Si + Al^{IV} (en site tétraédrique) ; Y = Fe³⁺ + Al^{VI} (en site octaédrique) et X = Fe²⁺ + Mn + Mg + Ca.

L'établissement de la formule structurale se fait donc en 3 étapes :

On détermine d'abord les éléments correspondant au site Z, puis le site Y et pour terminer le site X. Concernant l'aluminium, il faut savoir que dans le grenat il peut à la fois être associé au site tétraédrique (noté Al^{IV}) dans le site Z, et en site octaédrique (noté Al^{VI}) dans le site Y.

- 1) **Concernant le site Z :** Dans la formule structurale idéale le site tétraédrique Z est occupé par le silicium (Si) mais également par une partie de l'aluminium (noté Al^{IV}) (le reste de l'aluminium occupera le site octaédrique Y (noté Al^{VI}) et sera calculé à l'étape 2). Ici l'ensemble des cations occupant le site Z est censé être égal à 3, alors pour calculer l'Al^{IV} il suffit d'appliquer la formule suivante : $Al^{IV} = 3 - Si$; soit $Al^{IV} = 3 - 3,122 = 0$

- Ainsi, **Z = Si_{3,122} + Al^{IV}₀**
 ➔ Où la somme des cations est égale à 3,122 + 0 = 3,122

- 2) **Concernant le site Y :** Il faut normalement tout d'abord de récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes du Fe³⁺.

Le problème étant qu'ici l'analyse MEB ne permet pas de différencier les deux états d'oxydation du fer, c'est-à-dire le fer ferreux Fe^{2+} et le fer ferrique Fe^{3+} , dans son analyse. Ainsi, si l'on souhaite calculer la part de Fe^{2+} contenue dans la gemme il faudra refaire l'analyse au moyen d'une technique permettant de différencier le Fe^{2+} et le Fe^{3+} par exemple au moyen d'une microsonde électronique. Dans cet exemple, nous considérerons que tout le fer présent est du fer ferrique (Fe^{3+}), car l'échantillon est sensé faire partie de la série ugrandites, ainsi cela permettra de détailler la fin de la formule afin d'expliquer le principe et de permettre son application ultérieure.

Ainsi pour connaître la formule structurale de l'aluminium en site octaédrique (Al^{VI}), il suffit simplement de récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes de l'aluminium et y soustraire celui de l'aluminium en site tétraédrique (Al^{IV}) calculé précédemment pour le site Z, ce qui donne pour cet échantillon : $Al^{VI} = Al - Al^{IV} = 1,995 - 0 = 1,995$

- Ainsi, $Y = Fe^{3+}_{0,007} + Al^{VI}_{1,995} + Cr_{0,005} + V_{0,004}$
→ le site Y devrait être égal à 2 si la formule est équilibrée

- 3) **Concernant le site X** : Il suffit de récupérer les nombres de cations associés à 12 oxygènes du Fe^{2+} , du Mn, du Mg et du Ca, calculé à l'étape C5, ici respectivement égaux à 0 ; 0 ; 0 et 2,744. Leur somme devrait être égale à 3 si la formule est bien équilibrée.

- Ainsi, $X = Fe^{2+}_0 + Mn_0 + Mg_0 + Ca_{2,744}$
→ le tout devrait être égal à 3 si la formule est bien équilibrée, ici elle est égale à 2,744

Ainsi selon la formule générale des grenats, la formule structurale de l'échantillon étudié est :

→ $Ca_{2,744} (V_{0,004} Fe^{3+}_{0,007} Cr_{0,005} Al^{VI}_{1,995}) Si_{3,122} O_{12}$

OPTION 2 : MÉTHODE POUR CALCULER LA TENEUR DES PÔLES PURS GROSSULAIRE, ANDRADITE ET UVAROVITE.

Afin de calculer les pourcentages de chaque pôle pur présent dans la formule chimique du minéral on récupérera les nombres de cations associés à 12 oxygènes correspondant aux pôles purs suivants : Cr (pôle uvarovite), Fe^{3+} (pôle andradite), Al (pôle grossulaire), obtenus C5, que l'on multipliera par 100 (pour obtenir un pourcentage), le tout divisé par la somme du nombre de cations des 4 éléments qui ici est égale à $\Sigma = 0,007(Fe^{3+}) + 0,005(Cr) + 1,995(Al^{VI}) = 2,007$. Ainsi on obtient :

- **Pôle uvarovite** = $(Cr \times 100) / \Sigma = (0,005 \times 100) / 2,007 = 0,249 \%$
- **Pôle andradite** = $(Fe^{3+} \times 100) / \Sigma = (0,007 \times 100) / 2,007 = 0,349 \%$
- **Pôle grossulaire** = $(Al^{VI} \times 100) / \Sigma = (1,995 \times 100) / 2,007 = 99,402 \%$
→ Leur somme est égale à 100 %.

b. Tableau récapitulatif

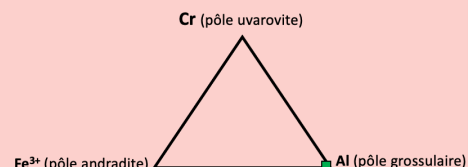
C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique						
C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev						
C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 ⇔ (C1/C2) x 1000						
C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associé(s) à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation ⇔ C3 x nO.						
C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (Σ oxygènes) Puis, calculer le nombre de cations associés à 12 oxygènes : nombre de cations x nombre d'oxygènes (12) / Σ oxygènes ⇔ (C3 x 12) / Σ oxygènes						
	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	39,21 %	60	653,5	1307	3,122	Si _{3,122}
Al ₂ O ₃	21,30 %	51	417,647	626,46	1,995	Al ^{IV} ₀ Al ^{VI} _{1,995}
Cr ₂ O ₃	0,08 %	76	1,052	1,575	0,005	Cr ³⁺ _{0,005}
V ₂ O ₃	0,06 %	75	0,8	1,2	0,004	V _{0,004}
Fe ₂ O ₃	0,11 %	80	1,383	2,074	0,007	Fe ³⁺ _{0,007}
MnO	0 %	71	0	0	0	Mn ₀
CaO	32,16 %	56	574,285	574,285	2,744	Ca _{2,744}
MgO	0 %	40	0	0	0	Mg ₀
	= 92,92 %			Σ oxygènes = 2511,394		
<p>OPTION 1) ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE : récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule selon les trois étapes ci-dessous :</p> <p>1) Site Z (tétraédrique) = Il est occupé par le silicium (Si) et l'aluminium (Al^{IV}) Le nombre de cations du site Z étant égal à 3, l'Al^{IV} viendra combler le site Z. Ainsi Al^{IV} = 3 – Si = 3 – 3,122 = 0 Ici, Z = Si_{3,122} + Al^{IV}₀</p> <p>2) Site Y (octaédrique) = Il est occupé principalement par Al, Fe³⁺, Cr³⁺ et V³⁺. L'Al^{VI} correspondra à la part d'aluminium qui n'occupe pas le site Z, autrement dit : Al^{VI} = Al – Al^{IV} = 1,995 – 0 = 1,995 Ici, Y = Fe³⁺_{0,007} + Al^{VI}_{1,995} + Cr_{0,005} + V_{0,004}</p> <p>3) Site X (dodécaédrique) = il est principalement occupé par Fe²⁺, Mg, Mn et Ca. Il suffit de récupérer les nombres de cations associés à 12 oxygènes calculés à l'étape C5, et les intégrer dans la formule comme ci-dessous. Ici, X = Fe²⁺₀ + Mn₀ + Mg₀ + Ca_{2,744}</p> <p>Il suffit à présent d'intégrer les résultats ci-dessus dans la formule générale des grenats : X₃ Y₂ (Z₃ O₁₂). Ainsi la formule structurale de l'échantillon est : → Ca_{2,744} (V_{0,004} Cr_{0,005} Fe³⁺_{0,007} Al^{VI}_{1,995}) (Si_{3,122} O₁₂)</p>						
<p>Selon les résultats de l'option 2, la teneur en pôles purs du grenat étudié est : → dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon</p>						

OPTION 2) CALCUL DES PÔLES PURS : PYROPE, ALMANDIN, SPESSARTITE, GROSSULAIRE et ANDRADITE

Calculs des 5 pôles purs grâce aux formules ci-dessous. Avec :

- Sx = Somme des cations du site X (calculé à l'étape C5) = 0 (Mg) + 0 (Fe2+) + 0 (Mn) + 2,744 (Ca) = 2,744
- Sy = Somme des cations du site Y (calculé à l'étape C5) = 1,995 (Al VI) + 0,007 (Fe3+) + 0,005 (Cr3+)= 2,007

	Pyrope	Almandin	Spessartite	Grossulaire	Andradite	Uvarovite
Formule générale	(Mg ₁₂ x 100) / Sx	(Fe ²⁺ ₁₂ x 100) / Sx	(Mn ₁₂ x 100) / Sx	(Al ^{VI} ₁₂ x 100) / Sy	(Fe ³⁺ ₁₂ x100) / Sy	(Cr ³⁺ ₁₂ x 100) / Sy
Formule appliquée	(0 x 100) / 2,744	(0 x 100) / 2,744	(0 x 100) / 2,744	(1,995 x 100) / 2,007	(0,007 x 100) / 2,007	(0,005 x 100) / 2,007
% en pôle pur	= 0 %	= 0 %	= 0 %	= 99,402 %	= 0,349 %	= 0,249 %



B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN »

a. Détails des calculs

Dans son livre « Naming Gem Garnets », Hanneman propose une méthode de calcul simplifiée permettant de connaître la teneur en pôles purs d'un grenat ainsi que sa formule structurale (Hanneman., 2000).

Sachant que la formule des variétés du groupe ugrandite est : $\text{Ca}_3 \text{Y}_2 (\text{Si}_3\text{O}_{12})$ avec $\text{Y} = \text{Fe}^{3+}, \text{Al}^{3+}$ et Cr^{3+} ; le calcul sera basé sur les cations Fe^{3+} , Al et Cr correspondant respectivement aux pôles grossulaire, andradite et uvarovite.

Note : chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau ci-dessous à laquelle il correspond.

1) Au préalable, récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (notés Ox%) donnés par l'analyse chimique

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Al	Al_2O_3	21.30
Cr	Cr_2O_3	0.08
Fe	Fe_2O_3	0.11

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev)

- $\text{Al}_2\text{O}_3 = 26,98 (\text{Al}) \times 2 + 15,999 (\text{O}) \times 3 = 101,957 \rightarrow$ Arrondis à 102, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Al. Donc résultat = 50,978
- $\text{Fe}_2\text{O}_3 = 55,845 (\text{Fe}) \times 2 + 15,999 (\text{O}) \times 3 = 159,687 \rightarrow$ Arrondis à 160, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Al. Donc résultat = 79,843
- $\text{Cr}_2\text{O}_3 = 51,996 (\text{Cr}) + 15,999 (\text{O}) \times 3 = 151,950 \rightarrow$ Arrondis à 152, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Al. Donc résultat = 75,975

3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire. Les résultats sont arrondis au millièmes supérieur.

- $\text{Fe}_2\text{O}_3 : 0,11 / 79,843 = 0,001$
- $\text{Al}_2\text{O}_3 : 21,30 / 50,978 = 0,418$
- $\text{Cr}_2\text{O}_3 : 0,08 / 75,975 = 0,001$

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.

- $S = 0,001 + 0,418 + 0,001 = 0,420$

5) Multiplier par (100/S) les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde.

- Ici, $100 / S = 100 / 0,420 = 238,095$
- Ainsi :
 - o $\text{Fe}_2\text{O}_3 = 0,001 \times 238,095 = 0,238$
 - o $\text{Al}_2\text{O}_3 = 0,418 \times 238,095 = 99,524$
 - o $\text{Cr}_2\text{O}_3 = 0,001 \times 238,095 = 0,238$

OPTION 1 : Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est > 70% alors l'échantillon prend le nom du membre final. S'il est < 70% alors c'est un mélange entre deux phases solides.

\rightarrow normalement la somme des pourcentages des pôles devrait être égale à 100 %, ici elle est égale à 100 %

La teneur en pôles purs est donc :

- Pourcentage du pôle andradite = 0,238 %
- Pourcentage du pôle grossulaire = 99,524 %
- Pourcentage du pôle uvarovite = 0,238 %

OPTION 2 : Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus en 3 pour chaque oxyde par 2/S (2 correspondant au nombres de cations du site X).

- Ici $2 / S = 2 / 0,420 = 4,762$
- Ainsi :
 - o $\text{Fe}_2\text{O}_3 : 0,001 \times 4,762 = 0,005$
 - o $\text{Al}_2\text{O}_3 : 0,418 \times 4,762 = 1,991$
 - o $\text{Cr}_2\text{O}_3 : 0,001 \times 4,762 = 0,005$

\rightarrow normalement la somme des cations représentant les pôles purs doit être égale à 2, ici elle est égale à 2,001

La formule structurale calculée est donc :

$\rightarrow \text{Ca}_3 (\text{Fe}^{3+}_{0,005} \text{Cr}_{0,005} \text{Al}_{1,991}) (\text{SiO}_4)_3$

(ps : à noter qu'avec cette méthode les cations Fe, Mg, Ca et Mn ne sont pas calculés, les valeurs pour Ca et Si sont les valeurs théoriques)

b. Tableau récapitulatif

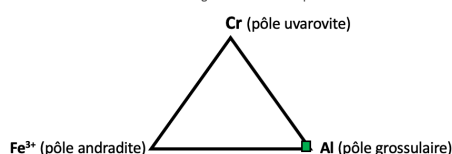
Tableau récapitulatif de la méthode de calculs et des résultats appliquée à l'échantillon MB15 :

1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique						
2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleiev)						
3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).						
4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés en 3.						
5) Multiplier les valeurs obtenues à l'étape 3 par 100/S pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux. Ici $100/S = 100 / 0,420 = 238,095$						
OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final. Si il est <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.						
OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale , il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 2/S (2 correspondant au nombre de cations du site X), avec ici $2/S = 2 / 0,420 = 4,762$						

	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
Fe ₂ O ₃ (pôle andradite)	0,11 %	79,843	0,001	0,238	0,238 %	Fe _{0,005}
Al ₂ O ₃ (pôle grossulaire)	21,30 %	50,978	0,418	99,524	99,524 %	Al _{1,991}
Cr ₂ O ₃ (pôle uvarovite)	0,08 %	75,975	0,001	0,238	0,238 %	Cr _{0,005}
			4) S = 0,420		Total = 100 %	

En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des grenats de la série ugrandite :
 $X_3 Y_2 (Z_3 O_{12})$, la formule structurale du grenat étudié est :
 (La valeur de Si n'est pas calculable par cette méthode et correspond à la valeur théorique)
→ Ca₃ (Fe³⁺_{0,005} Cr_{0,005} Al_{1,991}) (SiO₄)₃

Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du grenat étudié est :
 → dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon



C. « Méthode GABBROSOFT »

Le site internet Gabbrosoft (Gabbrosoft, 2011) propose des feuilles de calcul Excel permettant de calculer les pourcentages des pôles purs simplement en entrant les pourcentages d'oxydes de chaque élément donné par l'analyse chimique, ici dans la colonne L34 à L40.

	K	L	M	N	O	P	Q	R
30		GARNET CALCULATION SHEET						
31		MB15 : Menthe						
32								
33		Wt%	Mol Prop	At Prop O	No anions	Formula		
34	SiO2	39,210	0,653	1,305	12,663	Si	6,331	
35	TiO2	0,000	0,000	0,000	0,000	Ti	0,000	
36	Al2O3	21,300	0,209	0,627	6,080	Al	4,053	
37	FeO	0,110	0,002	0,002	0,015	Fe	0,015	
38	MnO	0,000	0,000	0,000	0,000	Mn	0,000	
39	MgO	0,000	0,000	0,000	0,000	Mg	0,000	
40	CaO	32,160	0,573	0,573	5,563	Ca	5,563	
41	TOTAL	92,780		2,507		TOTAL	15,963	
42								
43								
44								
45								
46	SiO2	60,08		No Oxyg	24		Endmembers	
47	TiO2	79,88		T2	9,573		Py	0,000
48	Al2O3	101,96					Alm	0,266
49	FeO	71,85					Gro	99,734
50	MnO	70,94					Sp	0,000
51	MgO	40,3						
52	CaO	56,08						
53								

Voici l'explication des résultats des différentes colonnes de la méthode Gabbrosoft :

Note : chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau ci-dessus à laquelle il correspond.

Colonne K34 à K40 = Cations détectés dans l'analyse MEB

Colonne L34 à L40 = Pourcentages pondéraux d'oxydes

B41 = Total des pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse

→ Données de l'analyse chimique

Colonne L46 à L52 = Calculer le poids moléculaire pour chaque cation

→ Données par la masse atomique relative de chaque élément donné dans le tableau de Mendeleïev :

Colonne M34 à M40 = Nombre de cations

→ Pourcentages pondéraux d'oxydes divisés par le poids moléculaire calculé pour chaque cation

Colonne N34 à N40 = Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations

→ Nombre de cations (colonne C) multiplié par le nombre d'oxygènes associés à chaque oxyde

N41 = Somme des oxygènes associés à chacun des cations

Colonne O34 à O40 = Nombre d'anions

→ Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations (colonne O) / T2 (O47)

O46 = Nombre d'oxygènes dans la formule structurale de base

→ Le calcul de Gabbrosoft est basé sur 24 oxygènes

O47 = T2 = Nombre d'oxygènes 24 (O46) / somme des oxygènes (N34 à N40)

Colonne Q34 à Q40 = Nombre de cations associés à 24 oxygènes

→ Nombre d'anions divisé par le nombre par le nombre d'oxygènes associés à chaque cation

Q41 = Somme des nombres de cations associés à 24 oxygènes

Q/R47 à Q/R50 = Pourcentages en pôles purs pyrope (Py), almandin (Alm), grossulaire (Gro) et spessartite (Sp)

→ Nombre de cations associés à 24 oxygènes (colonne Q) divisés par la somme des cations associés à 24 oxygènes (Q41) multipliés par 100

LA TENEUR EN PÔLES PURS : Elle est directement obtenue dans la colonne Q/R47 à Q/R50 :

- Pôle pyrope = 0 %
 - Pôle almandin = 0,266 %
 - Pôle spessartite = 0 %
 - Pôle grossulaire et andradite = 99,734 %
- Leur somme est égale à 99,999 %

LA FORMULE STRUCTURALE : La colonne Q34 à Q40 donne le nombre de chaque cation associé à 24 oxygènes.

Cependant comme le calcul est ici basé sur 24 oxygènes, les résultats doivent être divisés par 2 afin d'être comparables aux deux méthodes précédentes qui elles calculent la formule structurale sur la base de 12 oxygènes.

Cations	Nombres de cations associés à 24 oxygènes	Nombres de cations recalculés associés à 12 oxygènes
Si	6,331	3,166
Al	4,053	2,037
Fe	0,015	0,008
Mn	0	0
Mg	0	0
Ca	5,563	2,782

La formule structurale calculée selon cette méthode serait donc :

→ $\text{Ca}_{2,782} (\text{Fe}^{2+}_{0,008} \text{Al}_{2,037}) \text{Si}_{3,166} \text{O}_{12}$

Cependant la méthode Gabbrosoft ne permet pas de vraiment calculer les pôles purs grossulaire et andradite. De plus il considère que tout le fer est du fer ferreux alors qu'ici il est fort probable qu'une partie voire la totalité du fer soit du fer ferrique.

Ainsi nous proposons ici une 4^{ème} méthode correspondant à une feuille de calcul Excel téléchargeable sur internet.

D. Méthode de calculs « VIA POTION »

La méthode Pothion propose des feuilles de calcul internet permettant de calculer les pourcentages des pôles purs simplement en entrant les pourcentages d'oxydes de chaque élément donné par l'analyse chimique, ici dans la colonne B2 à B10.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
	Molécule	Pourcentage pondéral en oxyde	Masse molaire	Nombre de millimol	Nombre de millications	Nombre de millioxygènes	Formule structurale	Uvarovite	Goldmanite	Grossulaire	Pyrope	Almandin	Spessartine	
1														
2	SiO ₂	39,21	60	654	1308	3,122		3,11	3,1	1,29	1,29	1,28	1,28	
3	TiO ₂	0	80	0	0	0								
4	Al ₂ O ₃	21,3	102	209	418	627	1,995			0,18	0,18	0,17	0,17	
5	Cr ₂ O ₃	0,08	152	0,53	1,06	1,59	0,005	0						
6	V ₂ O ₃	0,06	150	0,4	0,8	1,2	0,004		0					
7	FeO	0,11	72	2	2	2	0,01					0		
8	MnO	0	71	0	0	0	0						0	
9	MgO	0	40	0	0	0	0			0				
10	CaO	32,16	56	574	574	574	2,74	2,73	2,72	0				Total
11					Σ=	2514	Pourcentage des pôles purs	0,3	0,2	90,7	0	0,3	0	91,5
12							Pourcentage des pôles purs (corrigé)	0,3	0,2	99,1	0	0,3	0	99,9
13														

Voici l'explication des résultats des différentes colonnes de la méthode Pothion :

Note : chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau ci-dessus à laquelle il correspond.

Colonne A2 à A10 = Cations détectés dans l'analyse MEB

Colonne B2 à B10 = Pourcentages pondéraux d'oxydes

→ Données de l'analyse chimique

Colonne C2 à C10 = Calculer le poids moléculaire pour chaque cation

→ Données par la masse atomique relative de chaque élément donné dans le tableau de Mendeleïev

Colonne D2 à D10 = Nombre de millimole

→ Pourcentages pondéraux (colonne B) divisés par le poids moléculaire pour chaque cation (colonne C) x 1000

Colonne E2 à E10 = Nombre de millications

→ Nombre de millimole (colonne D) multiplié par le nombre de cation de la molécule

Colonne F2 à F10 = Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations

→ Nombre de millimole (colonne D) multiplié par le nombre d'oxygènes de la molécule

F11 = Somme des millioxygènes associés à chacun des cations

Colonne G2 à G10 = Formule structurale

→ Nombre de milimol (colonne D) multiplié par le nombre d'oxygène total (12) et divisé par la somme du nombre de millioxygènes (F11)

H11 à M11 = Pourcentages en pôles purs

- Uvarovite : Formule structurale du Cr (G5) divisé par 2 (qui est le nombre de cations dédiés au site Y) et multiplié par 100
- Goldmanite : Formule structurale du V (G6) divisé par 2 (qui est le nombre de cations dédiés au site Y) et multiplié par 100
- Grossulaire : Formule structurale du Ca (I10) divisé par 3 (qui est le nombre de cations dédiés au site Y) et multiplié par 100
- Pyrope : Formule structurale du Mg (G9) divisé par 3 (qui est le nombre de cations dédiés au site Y) et multiplié par 100
- Almandin : Formule structurale du Fe (G7) divisé par 3 (qui est le nombre de cations dédiés au site Y) et multiplié par 100
- Spessartine (autre nom du grenat spessartite) : Formule structurale du Mn (G8) divisé par 3 (qui est le nombre de cations dédiés au site Y) et multiplié par 100

N11 = somme des pourcentages en pôles purs

H12 à M12 = Pourcentages en pôles purs corrigé uvarovite, goldmanite, grossulaire, pyrope, almandin et spessartine (autre nom de la spessartite)

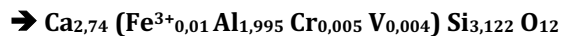
N11 = somme des Pourcentages en pôles purs corrigés

LA TENEUR EN PÔLES PURS : Elle est directement obtenue dans la colonne **12H à 12M**. Leur somme est égale à 99,999 %

- Pôle uvarovite = 0,3 %
- Pôle goldmanite* = 0,2 %
- Pôle grossulaire = 99,1 %
- Pôle pyrope = 0 %
- Pôle almandin = 0,3 %
- Pôle spessartite. = 0 %

*Rappel : La golmanite est un grenat rare de formule $\text{Ca}_3\text{V}^{3+}_2(\text{SiO}_4)_3$ qui correspond donc au pôle pur vanadifère des ugrandites (Mindat, 2020).

LA FORMULE STRUCTURALE : La colonne G2 à G10 donne le nombre de chaque cation associé à 12 oxygènes. La formule structurale calculée selon cette méthode serait donc :



Ici le fer correspond à la colonne almandin donc au fer ferreux (Fe^{2+}).

1. GÉNÉRALITÉS SUR LA FAMILLE DES OLIVINES

La famille des olivines est un groupe où la composition chimique des principales variétés est regroupée autour d'un tétraèdre composé des pôles purs suivants : fayalite ($\text{Fe}^{2+}_2 \text{SiO}_4$), forstérite ($\text{Mg}_2 \text{SiO}_4$), larnite ($\text{Ca}_2 \text{SiO}_4$), téphroïte ($\text{Mn}_2 \text{SiO}_4$) (figure 5) ainsi que quatre autres variétés aux compositions intermédiaires. Cependant, leur miscibilité n'est pas totale hormis pour la solution solide entre le pôle magnésien, la forstérite et le pôle ferreux, la fayalite.

En gemmologie classique, ce sont justement les variétés composant cette série continue qui sont le plus souvent rencontrées. Elles sont communément appelées « péricot » (Back et Mandarino, 2008 ; Deer et al, 1992 ; Gübelin et Koivula, 2005 ; Koivula, 1981 ; Mindat, 2020 ; Tilley et Simmons., 2020).

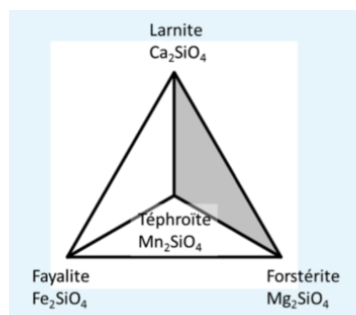


Figure 5 : Tétraèdre des pôles purs principaux composant le groupe des olivines. (Pairform, 2020)

Dans ce mémoire, nous nous intéresserons donc seulement à la série continue composée des deux pôles purs suivant (Back et Mandarino, 2008 ; Mindat, 2020) :

- Le pôle forstérite correspondant au pôle magnésien (Mg^{2+}) de formule $\text{Mg}_2 \text{SiO}_4$
- Le pôle fayalite correspondant au pôle ferreux (Fe^{2+}) de formule $\text{Fe}^{2+}_2 \text{SiO}_4$

Le mélange de ces deux pôles donne un composé intermédiaire généralement connu sous le nom de péricot, de formule $(\text{Mg}^{2+}, \text{Fe}^{2+})_2 \text{SiO}_4$.

La formule générale des variétés composant cette série continue est donc : $\text{X}_2 \text{SiO}_4$; où $\text{X} = \text{Mg}^{2+}$ ou Fe^{2+}

Les trois méthodes de calcul détaillées ci-dessous permettent de déterminer la formule structurale d'un échantillon gemme faisant partie de la famille des olivines communément vendu sur les marchés de gemmes ainsi que sa teneur des pôles purs fayalite et forstérite.

Ces calculs se font donc sur la base de cette formule chimique des membres de la série continue fayalite-forstérite $\text{X}_2 \text{SiO}_4$; où $\text{X} = \text{Mg}^{2+}$ ou Fe^{2+} .

La formule de base comprend donc 3 cations associés à 4 oxygènes.

Nous avons donc ici sélectionné un échantillon classiquement vendu comme « péricot » (possédant également la couleur « vert tilleul » généralement associée à cette gemme), membre intermédiaire de la série fayalite-forstérite.

2. ÉCHANTILLON MB14

A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER »

a. Détails des calculs

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (notés Ox%) donnés par l'analyse chimique du MEB :

Le total de la somme de tous les pourcentages d'oxydes des différents éléments pour chaque échantillon est reporté dans la case rouge de chaque tableau, en bas à droite, ici égal à 101,19%. Les résultats complets de l'analyse MEB ont été reporté à l'annexe n°1.5.

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Mg	MgO	49.37
Si	SiO2	43.50
Fe	FeO	8.32
		101.19

C2) Calculer l'équivalent moléculaire à un cation (en utilisant les masses atomiques relative de chaque élément de chaque oxyde, données par le tableau de Mendeleïev, voir l'annexe 3). Les résultats ont été arrondis comme dans la méthode originelle (car calculés à la main) :

- $\text{SiO}_2 = 28,08 \text{ (Si)} + 15,999 \text{ (O)} \times 2 = 60,08 \rightarrow$ Arrondis à 60
- $\text{MgO} = 24,305 \text{ (Mg)} + 15,999 \text{ (O)} = 40$
- $\text{FeO} = 55,945 \text{ (Fe)} + 15,999 \text{ (O)} = 72$

C3) Calculer le nombre de cations en divisant les pourcentages pondéraux (C1) par le poids moléculaire (C2) => (C1/C2) x 1000:

- $\text{SiO}_2 = (43,50 / 60) \times 1000 = 725$
- $\text{MgO} = (49,37 / 40) \times 1000 = 1234,25$
- $\text{FeO} = (8,32 / 72) \times 1000 = 115,56$

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations en multipliant le nombre de cations par les oxygènes associés à chaque cation, soit C3 x nO :

- Pour Si il faut 2 oxygènes, soit $725 \times 2 = 1450$
- Pour Mg il faut 1 oxygène, soit $1234,25 \times 1 = 1234,25$
- Pour Fe il faut 1 oxygène, soit $115,56 \times 1 = 115,56$

C5) Premièrement, calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (qui ont été calculés à l'étape précédente C4) :

- La somme des oxygènes ici : $\Sigma = 1450_{\text{(Si)}} + 1234,25_{\text{(Mg)}} + 115,56_{\text{(Fe)}} = 2799,81$

Deuxièmement, calculer le nombre de cations associés à 4 oxygènes par règle de 3, soit en utilisant la formule suivante : nombre cation (C3) x nombre d'oxygène (4) / Somme des oxygènes (résultat arrondis au millième) :

- Pour Si = $(725 \times 4) / 2799,81 = 1,036$
- Pour Mg = $(1234,25 \times 4) / 2799,81 = 1,763$
- Pour Fe = $(115,56 \times 4) / 2799,81 = 0,165$

Le total de la somme de tous les cations associés à 4 oxygènes devrait être égal à 3, ici $S = 2,964$.

A partir de cette étape, il est possible de calculer la formule structurale de l'échantillon (**Option 1**) mais aussi de calculer la teneur en pôles purs (**Option 2**).

OPTION 1 : ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE

Pour cela, il faut se référer à la formule générale du minéral étudié et pour chaque élément récupérer le nombre de cation, ici 3, associés à 4 oxygènes calculé à l'étape C5. Puis il faut l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale. (Il est cependant à noter que selon la qualité de l'analyse chimique - les biais dus aux erreurs ou imprécisions inhérentes à la technique - la somme des coefficients peut ne pas être exactement égale à ce qu'elle devrait être).

Ainsi selon la formule générale des olivines, la formule structurale de l'échantillon étudié est :

$\rightarrow (\text{Mg}_{1,763} \text{Fe}^{2+}_{0,165}) (\text{Si}_{1,036} \text{O}_4)$

=> égal à 1,928 au lieu de 2. => Si égal à 1,036 au lieu de 1

OPTION 2 : MÉTHODE POUR CALCULER LA TENEUR EN PÔLE PURS :

Afin de calculer les pourcentages de chaque pôle pur présent dans la formule chimique du minéral étudié, on récupérera les nombres de cations associés à 4 oxygènes correspondant aux pôles purs suivants : Mg (forstérite), Fe^{2+} (pôle fayalite), obtenus à l'étape C5. Il suffira ensuite de les multiplier par 100 puis diviser le tout par la somme du nombre de cations des éléments qui ici est égale à $\Sigma = 1,763 \text{ (Mg)} + 0,165 \text{ (Fe}^{2+}) = 1,928$. Ainsi on obtient :

- $\text{Mg}^{2+} = (1,763 \times 100) / 1,928 = 91,442 \%$ de pôle forstérite
- $\text{Fe}^{2+} = (0,165 \times 100) / 1,928 = 7,780 \%$ de pôle fayalite
- \Rightarrow Leur somme étant égale à 99,222 %.

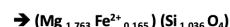
Cette olivine correspondrait à un mélange de 91,442 % de forstérite et 7,780 % de fayalite, modélisé par les diagrammes figurant dans le tableau récapitulatif suivant.

b. Tableau récapitulatif

Tableau récapitulatif de la méthode de calculs et des résultats appliqué à l'échantillon MB14 :

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique						
C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleiev						
C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 $\Leftrightarrow (C1/C2) \times 1000$						
C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associé(s) à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation $\Leftrightarrow C3 \times nO$						
C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations ($\Sigma_{\text{oxygènes}}$) Puis, calculer le nombre de cations associés à 4 oxygènes : nombre de cations x nombre d'oxygènes (4) / $\Sigma_{\text{oxygènes}}$ $\Leftrightarrow (C3 \times 4) / \Sigma_{\text{oxygènes}}$						
OPTION 1) Établissement de la formule structurale : récupérer le nombre de cations associé à 4 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale du minéral étudié.						
	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	43,50 %	60	725	1450	1,036	Si _{1,036}
MgO	49,37 %	40	1234,25	1234,25	1,763	Mg _{1,763}
FeO	8,32 %	72	115,56	115,56	0,165	Fe _{0,165}
	= 101,19			$\Sigma_{\text{oxygènes}} = 2799,81$		
OPTION 2) Calculer la teneur en pôles purs (en %) : Teneur en pourcentage du pôle pur = $(C5_{\text{du pôle pur}} / \Sigma_{\text{des C5 des pôles purs}}) \times 100$ (avec $\Sigma_{\text{des C5 de Mg + Fe}^{2+}} = 1,763 + 0,165 = 1,928$) Mg²⁺ = $C5_{\text{Mg}} / \Sigma_{\text{des C5 de Mg}^{2+} + \text{Fe}^{2+}} \times 100 = (1,763 / 1,928) \times 100 = 91,442 \%$ de forstérite Fe²⁺ = $C5_{\text{Fe}^{2+}} / \Sigma_{\text{des C5 de Mg}^{2+} + \text{Fe}^{2+}} \times 100 = (0,165 / 1,928) \times 100 = 7,780 \%$ de fayalite						

En intégrant les résultats de l'option 1 dans la formule générale des olivines :
 $X_2(\text{SiO}_4)$, la formule structurale de l'olivine étudiée est donc :



Selon les résultats de l'option 2, la teneur en pôles purs de l'olivine étudiée est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

(pôle fayalite) Fe²⁺ ● ———— ■ ● Mg (pôle forstérite)

B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN »

a. Détails des calculs

Dans son livre « Naming Gem Garnets », Hanneman propose une méthode de calcul simplifiée permettant de connaître la teneur en pôle purs d'un minéral (Hanneman, 2000).

Sachant que la formule des variétés du groupe des olivines est : $(\text{Mg}^{2+}, \text{Fe}^{2+})_2 \text{SiO}_4$, le calcul sera basé sur les cations MgO et FeO correspondant respectivement aux deux pôles purs forstérite et de la fayalite.

1) Au préalable, récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (noté Ox%) donnés par l'analyse chimique

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Mg	MgO	49.37
Fe	FeO	8.32

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément donné par le tableau de Mendeleiev)

- MgO = 24,305 (Mg) + 15,999 (O) = 40
- FeO = 55,945 (Fe) + 15,999 (O) = 72

3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire. Les résultats sont arrondis au millième supérieur.

- MgO = 49,37 / 40,30 = 1,225
- FeO = 8,32 / 71,85 = 0,116

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.

- S = 1,225 + 0,116 = 1,341

5) Multiplier par (100/S) les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde.

- Ici, $100/S = 100 / 1,341 = 74,571$
- Ainsi :
 - MgO = 74,571 x 1,225 = 91,349
 - FeO = 74,571 x 0,116 = 8,650

OPTION 1 : Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final. S'il est <70% alors c'est un mélange entre deux phases solides.

→ normalement la somme des pourcentages des pôles devrait être égale à 100%, ici elle est bien égale à 100%

- MgO = 91,35 % de pôle forstérite
- FeO = 8,65 % de pôle fayalite

La teneur en pôles purs est donc :

- Pourcentage du pôle forstérite = 91,35 %
- Pourcentage du pôle fayalite = 8,65 %

OPTION 2 : Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus en 3 pour chaque oxyde par 2/S (2 correspondant au nombre de cations du site X).

- Ici $2/S = 2/1,341 = 1,491$

Ainsi :

- o $MgO = 1,225 \times 1,491 = 1,826$
- o $FeO = 0,116 \times 1,491 = 0,173$

→ normalement la somme des cations représentant les pôles purs doit être égale à 2, ici elle est égale à 1,999.

La formule structurale calculée est donc :

→ $(Mg_{1,826} Fe^{2+}_{0,173}) (SiO_4)$

(ps : à noter qu'avec cette méthode seuls les cations Mg et Fe peuvent ici être calculés)

b. Tableau récapitulatif

Tableau récapitulatif de la méthode de calculs et des résultats appliquée à l'échantillon MB14 :

	1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique					
	2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleiev)					
	3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).					
	4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.					
	5) Multiplier par 100/S les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux. Ici $100/S = 100 / 1,341 = 74,571$					
	OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final. Si <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.					
	OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 2/S (2 correspondant nombre de cations du site X), avec ici $2/S = 2/1,341 = 1,491$					
	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
MgO (pôle forstérite)	49,37 %	40	1,225	91,349	91,35 %	Mg _{1,826}
FeO (pôle fayalite)	8,32 %	72	0,116	8,650	8,65 %	Fe _{0,173}
			4) S = 1,341		Total = 100 %	

En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des olivines : $X_2(SiO_4)$, la formule structurale de l'olivine étudiée est donc :
(La valeur de Si n'est pas calculable par cette méthode et correspond à la valeur théorique)

→ $(Mg_{1,826} Fe^{2+}_{0,173}) (SiO_4)$

Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs de l'olivine étudiée est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

(pôle fayalite) Fe²⁺ ———— Mg (pôle forstérite)

C. « Méthode GABBROSOFT »

Le site internet Gabbrosoft propose des feuilles de calcul Excel permettant de calculer les pourcentages des pôles purs simplement en entrant les pourcentages d'oxydes de chaque élément donné par l'analyse chimique.

Dans la feuille de calcul correspondant à la famille des olivines, appelée OLICALC, les résultats de l'analyse chimique sont à entrer dans les colonnes B5 à B14 (Gabbrosoft, 2011).

	A	B	C	D	E	F	G	H
1		OLIVINE CALCULATION SHEET						
2		© GabbroSoft 2011				MB14		
3								
4		Wt%	Mol Prop	At Prop O	No anions	Formula		
5	SiO ₂	43,500	0,724	1,448	2,077	Si	1,038	
6	TiO ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	Ti	0,000	
7	Al ₂ O ₃	0,000	0,000	0,000	0,000	Al	0,000	
8	Cr ₂ O ₃	0,000	0,000	0,000	0,000	Cr	0,000	
9	FeO	8,320	0,116	0,116	0,166	Fe(ii)	0,166	
10	MnO	0,000	0,000	0,000	0,000	Mn	0,000	
11	MgO	49,370	1,225	1,225	1,757	Mg	1,757	1,923
12	NiO	0,000	0,000	0,000	0,000	Ni	0,000	
13	CaO	0,000	0,000	0,000	0,000	Ca	0,000	
14	TOTAL	101,190		2,789		TOTAL	2,962	
15								
16				No Oxyg	4,000			
17				T2	1,434			
18	MOLECULAR WEIGHTS							
19	SiO ₂	60,080				Endmembers		
20	TiO ₂	79,880				Fo	91,364	
21	Al ₂ O ₃	101,960				Fa	8,636	
22	Cr ₂ O ₃	151,990				Tp	0,000	
23	FeO	71,850						
24	MnO	70,940						
25	MgO	40,300				Liquid Composition		
26	NiO	74,690						
27	CaO	56,080				XFeO(l)/XMgO(l)	0,315	
28								

Voici l'explication des résultats des différentes colonnes de la méthode Gabbrosoft :

Note : chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau ci-dessus à laquelle il correspond.

Colonne A5 à A13 à A19 à 127 = Cations détectés dans l'analyse MEB

Colonne B5 à B13 = Pourcentages pondéraux d'oxydes

B14 = Total des pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse

→ Données de l'analyse chimique

Colonne B19 à B27 = Calculer le poids moléculaire pour chaque cation

→ Données par la masse atomique relative de chaque élément donnés par le tableau de Mendeleïev

Colonne C5 à C13 = Nombre de cations

→ Pourcentages pondéraux d'oxydes divisés par le poids moléculaire calculé pour chaque cation

Colonne D5 à D13 = Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations

→ Nombre de cations (colonne C) multiplié par le nombre d'oxygènes associés à chaque oxyde

D14 = Somme des oxygènes associés à chacun des cations

Colonne E5 à E13 = Nombre d'anions

→ Nombre d'oxygènes associé à chacun des cations (colonne E) / T2 (E17)

E16 = Nombre d'oxygènes dans la formule structurale de base

→ Le calcul de Gabbrosoft est basé sur 4 oxygènes

E17 = T2 = Nombre d'oxygènes 4 (E16) / somme des oxygènes (D5 à D13)

Colonne G5 à G13 = Nombre de cations associés à 4 oxygènes

→ Nombre d'anions (colonne E) divisé par le nombre d'oxygènes associés à chaque cation

G14 = Somme des nombres de cations associés à 24 oxygènes

F/G20 à F/G22 = Pourcentages en pôles purs forstérite (Mg), fayalite (Fe) et téphroïte (Mn).

→ Nombre de cations associés à 4 oxygènes (colonne G) divisés par la somme des cations associés à 4 oxygènes (G14) multipliés par 100

LA TENEUR EN PÔLES PURS : Elle est directement obtenue dans la colonne F/G20 à F/G22 :

- Pôle forstérite = 91,364 %
 - Pôle fayalite = 8,636 %
 - Pôle téphroïte = 0%
- Leur somme est égale à 100 %

LA FORMULE STRUCTURALE : La colonne G5 à G14 donne le nombre de chaque cation associé à 4 oxygènes.

La formule structurale calculée est donc :

→ $(\text{Mg}_{1,757} \text{Fe}^{2+}_{0,166}) (\text{Si}_{1,038} \text{O}_4)$

III. MÉTHODES DE CALCUL ADAPTÉES AU GROUPE DES FELDSPATHS

1. GÉNÉRALITÉS SUR LE GROUPE DES FELDSPATHS

Les feldspaths font partie des minéraux communément rencontrés en géologie, notamment parce qu'ils sont des composants essentiels d'une grande partie des roches dites ignées comme les pegmatites et le granite, ainsi que de roches métamorphiques comme les gneiss, les schistes etc. (Deer et al, 1992). En gemmologie aussi de nombreuses variétés de feldspaths de qualité gemme et ornementale sont très souvent rencontrées sur le marché.

Pour comprendre complètement les feldspaths, il faut avant tout tenir compte de leurs états structuraux qui dépendent essentiellement de leur température de formation et de leur cristallisation. C'est ainsi que l'on distingue les feldspaths désordonnés homogènes de haute température et les feldspaths ordonnés dans lequel il y a une séparation des phases (K, Na et Ca) à échelle macro, micro ou sub-microscopique.

- Ce premier groupe correspond aux feldspaths tels qu'on les décrit en général, c'est-à-dire un classement selon un système ternaire continu entre les trois pôles suivants (*Figure 6.a*) : pôle potassique (variété orthoclase), le pôle sodique (variété albite) et le pôle calcique (variété anorthite). On y différencie deux familles qui constituent également **des séries continues** : les **feldspaths alcalins** qui regroupent les feldspaths de composition potassique et sodique, et les **feldspaths plagioclases** qui regroupent les feldspaths de compositions sodique à calcique (les deux séries continues sont divisées arbitrairement et selon les pourcentages en pôles purs qu'ils contiennent choisi par convenance et non par différence structurale). Cependant il n'est pas rare de rencontrer des feldspaths étant composés des trois pôles, en effet les feldspaths alcalins peuvent contenir 5% à 10% de calcium et les feldspaths plagioclases ont moins de 5% à 10% de composant potassique. (Deer et al, 1992 ; Hodgkinson, 2015).

- Le deuxième groupe, moins souvent décrit, correspond aux feldspaths ayant cristallisés à basse température et présentant une séparation de phases généralement sous formes de lamelles pouvant être décrites à l'échelle macro, micro ou sub-microscopique (*Figure 6.b*). On y décrit les structures suivantes : les perthites (orthoclase à plus de 85%, correspondant à des lamelles d'albite ou d'oligoclase dans un hôte microcline ou orthoclase), les cryptoperthites (perthites à échelle sub-microscopique), les mésoperthites (perthites ayant des quantités égales de feldspaths alcalins et plagioclases) ainsi que les antiperthites (lamelles d'orthoclase dans un hôte de plagioclase) (Deer et al, 1992 ; Hodgkinson, 2015).

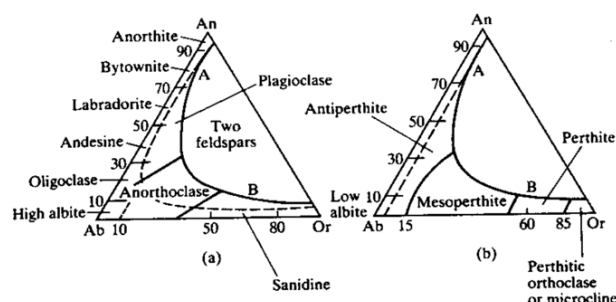


Figure 6 : (a) Diagramme ternaire classique représentant les feldspaths haute-température désordonnés homogènes et (b) diagramme représentant les feldspaths ordonnés basse température montrant une séparation de phases. (An = Anorthite, Ab = albite, Or = orthoclase)

En gemmologie classique on décrit généralement les feldspaths selon les deux séries continues du diagramme ternaire (a). Le tableau ci-dessous décrit les variétés des deux séries continues ainsi que celles le plus souvent rencontrées en gemmologie (G = qualité gemme ; O = qualité ornementale ; les noms en gras correspondent aux pôles purs, les autres sont les membres intermédiaires) : (Deer et al, 1992 ; Mindat, 2020 ; Hodgkinson, 2015 ; Bour, 2019)

FELDSPATHS ALCALINS (ou POTASSIQUES) X (AlSi ₃ O ₈) (où X = K ⁺ et/ou Na ⁺)			
Variétés	Formules chimiques	Teneurs en pôles purs et systèmes cristallins	Variétés communément rencontrées en gemmologie classique
Orthoclase / Orthose	K(AlSi ₃ O ₈)	Pôle pur potassique, système monoclinique	Orthose (G) Pierre de Lune* (O/G)
Microcline	K(AlSi ₃ O ₈)	Même composition chimique que l'orthoclase mais appartenant au système triclinique	Amazonite (O) Pierre de lune* (O/G)
Sanidine	K(AlSi ₃ O ₈)	Composé de 50 à 80% d'orthoclase, système monoclinique	(G) Pierre de collection
Anorthoclase	(K,Na) (AlSi ₃ O ₈)	Mélange pôle potassique et sodique, système triclinique	Rarement rencontré
Albite	Na(AlSi ₃ O ₈)	Pôle pur sodique, système triclinique	Rarement rencontré

***Pierre de lune** : Variété de microcline ou d'orthoclase qui présente un effet « Schiller » (aussi appelé adularescence, c-a-d un effet lumineux blanchâtre ou bleuté en surface). Il est à noter que ce terme est même généralement donné à tous les feldspaths présentant les mêmes effets lumineux incluant certaines variétés d'anorthoclases ou de plagioclases (par exemple la « rainbow moonstone », ou pierre de lune arc-en-ciel, qui est une variété de labradorite). (Deer et al, 1992 ; Mindat, 2020 ; Ralph et Ralph, 2020 ; Arlabosse, 2020 ; GIA, 2021)

FELDSPATHS PLAGIOCLASES X (Al Si ₃ O ₈) (où X = K ⁺ et/ou Na ⁺)			
Variétés	Formules chimiques	Teneurs en pôles purs et systèmes cristallins	Variétés communément rencontrées en gemmologie classique
Albite	Na(AlSi ₃ O ₈)	An ₁₀ Ab ₉₀ à AnAb ₁₀₀	Rarement rencontré
Oligoclase	(Na,Ca)[Al(Si,Al)Si ₂ O ₈]	An ₃₀ Ab ₇₀ à An ₁₀ Ab ₉₀	Oligoclase (G) et pierre de soleil* (O)
Andésine	(Na,Ca)[Al(Si,Al)Si ₂ O ₈]	An ₅₀ Ab ₅₀ à An ₃₀ Ab ₇₀	Andésine (G)
Labradorite	(Ca,Na)[Al(Al,Si)Si ₂ O ₈]	An ₇₀ Ab ₃₀ à An ₅₀ Ab ₅₀	Labradorite noire (O), labradorite blanche (O) Labradorite (G) collection Oregon sunstone** (O)
Bytownite	(Ca,Na)[Al(Al,Si)Si ₂ O ₈]	An ₉₀ Ab ₁₀ à An ₇₀ Ab ₃₀	Pierre de collection (G)
Anorthite	Ca(Al ₂ Si ₂ O ₈)	An ₁₀₀ Ab to An ₉₀ Ab ₁₀	Rarement rencontré

* **Pierre de soleil** = Variété de feldspath oligoclase (plus rarement labradorite) avec des inclusions d'hématite et d'ilménite lui donnant une couleur orangée et un effet d'aventurescence (Deer et al., 1992 ; Gübelin et Koivula, 2005)

** **Oregon sunstone** = Variété de labradorite avec des inclusions de nanocristaux de cuivre, des nanocristaux cristallins de protoenstatite et clinoenstatite (mais pas d'hématite) qui lui donnent sa couleur verte et orangée caractéristique. (Deer et al, 1992)

FELDSPATHS PLAGIOCLASES X (Al Si ₃ O ₈) (où X = K ⁺ et/ou Na ⁺)			
Variétés	Formules chimiques	Teneurs en pôles purs et systèmes cristallins	Variétés communément rencontrées en gemmologie classique
Celsiane	Ba (Al ₂ Si ₂ O ₈)	Composé de plus de 90% de Ba Al Si ₂ O ₈	Rarement rencontré
Hyalophane	(K,Ba)[Al(Si,Al)Si ₂ O ₈]	Entre 2 à 30% de Ba Al Si ₂ O ₈	Rarement rencontré

Dans ce mémoire, au travers des **échantillons MB09 et MB07**, nous nous intéresserons donc seulement aux deux séries continues des feldspaths alcalins et plagioclases, composées des trois pôles purs suivants :

- Le pôle orthoclase correspondant au pôle potassique (K⁺) de formule K(AlSi₃O₈)
- Le pôle albite correspondant au pôle sodique (Na⁺) de formule Na(AlSi₃O₈)
- Le pôle anorthite correspondant au pôle calcique (Ca⁺) de formule Ca(Al₂Si₂O₈)

La formule générale des variétés composants ces séries continues est donc : X Al Si₃ O₈ ; où X = K⁺, Na⁺ ou Ca⁺.

La formule de base comprend donc 5 cations associés à 8 oxygènes.

2. ÉCHANTILLON MB09

A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER »

a. Détails des calculs

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (noté Ox%) donnés par l'analyse chimique du MEB :

Le total de la somme de tous les pourcentages d'oxydes des différents éléments pour chaque échantillon est reporté dans la case rouge de chaque tableau, en bas à droite, ici égal à 95,15%. Les résultats complets de l'analyse MEB ont été reporté à l'annexe n°1.6.

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Na	Na ₂ O	4.26
Al	Al ₂ O ₃	27.43
Si	SiO ₂	51.78
K	K ₂ O	0.19
Ca	CaO	11.49
		95.15

C2) Calculer l'équivalent moléculaire à un cation (en utilisant les masses atomiques relative de chaque élément de chaque oxyde, données par le tableau de Mendeleïev, voir l'annexe 3). Les résultats ont été arrondis comme dans la méthode originelle (car calculés à la main) :

- SiO₂ = 28,08 (Si) + 15,999 (O) x 2 = 60,08 → Arrondis à 60
- Al₂O₃ = 26,98 (Al) x 2 + 15,999 (O) x 3 = 101,957 → Arrondis à 102, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalence monocationique relatif à un seul Al. Donc résultat = 51
- Na₂O = 22,98 (Na) x 2 + 15,999 (O) = 61,95 → Arrondis à 62, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalence monocationique relatif à un seul Na. Donc résultat = 31
- CaO = 40,078 (Ca) + 15,999 (O) = 56
- K₂O = 39,09 (K) x 2 + 15,999 (O) = 94,17 → Arrondis à 94, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalence monocationique relatif à un seul Na. Donc résultat = 47

C3) Calculer le nombre de cations en divisant les pourcentages pondéraux (C1) par le poids moléculaire (C2) => (C1/C2) x 1000 :

- $\text{SiO}_2 = (51,78 / 60) \times 1000 = 863,000$
- $\text{Al}_2\text{O}_3 = (27,43 / 51) \times 1000 = 537,843$
- $\text{Na}_2\text{O} = (4,26 / 31) \times 1000 = 137,419$
- $\text{CaO} = (11,49 / 56) \times 1000 = 205,179$
- $\text{K}_2\text{O} = (0,19 / 47) \times 1000 = 4,043$

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations en multipliant le nombre de cations par les oxygènes associés à chaque cation, soit C3 x nO :

- Pour Si il faut 2 oxygènes, soit $863,000 \times 2 = 1726$
- Pour Al il faut 3/2 oxygène, soit $537,843 \times 3/2 = 806,765$
- Pour Na il faut 1/2 oxygène, soit $137,419 \times 1/2 = 68,710$
- Pour Ca il faut 1 oxygène, soit $205,179 \times 1 = 205,179$
- Pour K il faut 1/2 oxygène, soit $4,043 \times 1/2 = 2,021$

C5) Premièrement, calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (qui ont été calculés à l'étape précédente C4) :

- La somme des oxygènes ici : $\Sigma = 1726_{(\text{Si})} + 806,765_{(\text{Al})} + 68,710_{(\text{Na})} + 205,179_{(\text{Ca})} + 2,021_{(\text{K})} = 2808,675$

Deuxièmement, calculer le nombre de cations associés à 8 oxygènes par règle de 3, soit en utilisant la formule suivante : nombre cation (C3) x nombre d'oxygène (8) / somme des oxygènes (résultat arrondis au millième) :

- Pour Si = $(863,000 \times 8) / 2808,675 = 2,458$
- Pour Al = $(537,843 \times 8) / 2808,675 = 1,532$
- Pour Na = $(137,419 \times 8) / 2808,675 = 0,391$
- Pour Ca = $(205,179 \times 8) / 2808,675 = 0,584$
- Pour K = $(4,043 \times 8) / 2808,675 = 0,012$

Total de la somme de tous les cations associés à 8 oxygènes, $S = 4,977$ ce qui est une valeur correcte car elle devrait être dans l'idéal égale à 5.

A partir de cette étape, il est possible de calculer la formule structurale de l'échantillon (**Option 1**) mais aussi de calculer la teneur en pôles purs (**Option 2**).

OPTION 1 : ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE

Pour cela, il faut se référer à la formule générale du minéral étudié et pour chaque élément récupérer le nombre de cation, ici 5, associés à 8 oxygènes calculé à l'étape C5. Puis il faut l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale. (Il est cependant à noter que selon la qualité de l'analyse chimique - les biais dus aux erreurs ou imprécisions inhérentes à la technique - la somme des coefficients peut ne pas être exactement égale à ce qu'elle devrait être).

Ainsi selon la formule générale des feldspaths, la formule structurale de l'échantillon étudié est :

→ $(\text{K}_{0,012} \text{Na}_{0,391} \text{Ca}_{0,584}) [\text{Al}_{1,532} \text{Si}_{2,458} \text{O}_8]$
=> égal à 0,987 au lieu de 1. => égal à 1,532 au lieu de 1 => Si égal à 2,458 au lieu de 3

OPTION 2 : MÉTHODE POUR CALCULER LA TENEUR EN PÔLE PURS :

Afin de calculer les pourcentages de chaque pôle pur présent dans la formule chimique du minéral on récupérera les nombres de cations associés à 8 oxygènes correspondant aux pôles purs suivants : K (pôle orthoclase), Na (pôle albite) et Ca (pôle anorthite) calculé à l'étape C5, que l'on multipliera par 100 (pour obtenir un pourcentage), le tout divisé par la somme du nombre de cations des éléments qui ici est égale à $\Sigma = 0,012 (\text{K}) + 0,391 (\text{Na}) + 0,584 (\text{Ca}) = 0,987$.

Ainsi on obtient :

- $\text{K} = (0,012 \times 100) / 0,987 = 1,216 \% \text{ de pôle orthoclase}$
 - $\text{Na} = (0,391 \times 100) / 0,987 = 39,615 \% \text{ de pôle albite}$
 - $\text{Ca} = (0,584 \times 100) / 0,987 = 59,169 \% \text{ de pôle anorthite}$
- ⇒ Leur somme devrait être égale à 100 %, ici elle est bien égale à 100 %.

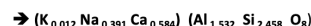
Ce feldspath correspondrait à un mélange de 1,216 % d'orthoclase, 39,615 % d'albite et 59,169 % d'anorthite modélisé par les diagrammes figurant dans le tableau récapitulatif suivant.

b. Tableau récapitulatif

Tableau récapitulatif de la méthode de calculs et des résultats appliquée à l'échantillon MB09 :

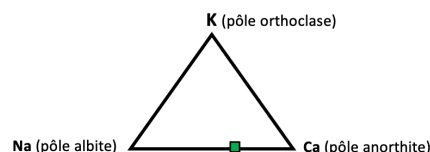
C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique						
C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev						
C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 $\Leftrightarrow (C1/C2) \times 1000$						
C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation $\Leftrightarrow C3 \times nO$						
C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (Σ oxygènes) Puis, calculer le nombre de cations associés à 8 oxygènes : nombre de cations x nombre d'oxygènes (8) / Σ oxygènes $\Leftrightarrow (C3 \times 8) / \Sigma$ oxygènes						
OPTION 1) Établissement de la formule structurale : récupérer le nombre de cations associés à 8 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale du minéral étudié.						
	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	51,78 %	60	863	1726	2,458	Si _{2,458}
Al ₂ O ₃	27,43 %	51	537,843	806,765	1,532	Al _{1,532}
Na ₂ O	4,26 %	31	137,419	68,71	0,391	Na _{0,391}
CaO	11,49 %	56	205,179	205,179	0,584	Ca _{0,584}
K ₂ O	0,19 %	47	4,043	2,021	0,012	K _{0,012}
	= 95,15 %			Σ oxygènes = 2808,675		
OPTION 2) Calculer la teneur en pôles purs (en %) : Teneur en pourcentage du pôle pur = $(C5 \text{ du pôle pur} / \Sigma \text{ des C5 des pôles purs}) \times 100$ (avec Σ des C5 de K + Na + Ca = 0,012 + 0,391 + 0,584 = 0,987) K = $C5_K / \Sigma C5 (K + Na + Ca) \times 100 = (0,012 / 0,987) \times 100 = 1,216 \%$ d'orthoclase Na = $C5_{Na} / \Sigma C5 (K + Na + Ca) \times 100 = (0,391 / 0,987) \times 100 = 39,615 \%$ d'albite Ca = $C5_{Ca} / \Sigma C5 (K + Na + Ca) \times 100 = (0,584 / 0,987) \times 100 = 59,169 \%$ d'anorthite						

En intégrant les résultats de l'option 1 dans la formule générale des feldspaths :
X (Al Si₃ O₈), la formule structurale du feldspath étudié est donc :



Selon les résultats de l'option 2, la teneur en pôles purs du feldspath étudié est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon



B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN »

a. Détails des calculs

Dans son livre « Naming Gem Garnets », Hanneman propose une méthode de calcul simplifiée permettant de connaître la teneur en pôle purs d'un minéral (Hanneman, 2000).

Sachant que la formule des variétés du groupe des feldspaths plagioclases est : X [Al Si₃ O₈] ; le calcul sera basé sur les cations K₂O, Na₂O et CaO correspondant respectivement aux deux pôles purs orthoclase, albite et anorthite.

1) Au préalable, récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (noté Ox%) donnés par l'analyse chimique

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Na	Na ₂ O	4.26
Al	Al ₂ O ₃	27.43
Si	SiO ₂	51.78
K	K ₂ O	0.19
Ca	CaO	11.49
		95.15

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev)

- K₂O = 39,09 (K) x 2 + 15,999 (O) = 94,17 → Arrondis à 94, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Na. Donc résultat = 47
- Na₂O = 22,98 (Na) x 2 + 15,999 (O) = 61,95 → Arrondis à 62, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Na. Donc résultat = 31
- CaO = 40,078 (Ca) + 15,999 (O) = 56

3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire. Les résultats sont arrondis au millièmes supérieur.

- K₂O : 0,19 / 47 = 0,004
- Na₂O : 4,26 / 31 = 0,137
- CaO : 11,49 / 56 = 0,205

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.

- $S = 0,004 + 0,137 + 0,205 = 0,346$

5) Multiplier par (100/S) les valeurs obtenues en 3 pour chaque oxyde.

- Ici, $100/S = 100 / 0,346 = 289,017$

- Ainsi :

- $K_2O = 289,017 \times 0,004 = 1,156$
- $Na_2O = 289,017 \times 0,137 = 39,595$
- $CaO = 289,017 \times 0,205 = 59,248$

OPTION 1 : Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final. S'il est <70% alors c'est un mélange entre deux phases solides.

→ normalement la somme des pourcentages des pôles devrait être égale à 100%, ici elle est égale à 99,999 %

La teneur en pôles purs est donc :

- Pourcentage du pôle orthoclase = 1,156%
- Pourcentage du pôle albite = 39,595 %
- Pourcentage du pôle anorthite = 59,248 %

OPTION 2 : Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 1/S (1 correspondant au nombre de cation du site X).

- Ici $1/S = 1 / 0,346 = 2,890$

- Ainsi :

- $K_2O = 0,004 \times 2,890 = 0,012$
- $Na_2O = 0,137 \times 2,890 = 0,396$
- $CaO = 0,205 \times 2,890 = 0,592$

→ normalement la somme des cations représentant les pôles purs doit être égale à 1, ici elle est égale à 1

La formule structurale calculée est donc :

→ $(K_{0,012} Na_{0,396} Ca_{0,592}) [Al Si_3 O_8]$

(ps : à noter qu'avec cette méthode seuls les cations K, Na et Ca peuvent ici être calculés)

b. Tableau récapitulatif

Tableau récapitulatif de la méthode de calculs et des résultats appliquée à l'échantillon MB09 :

	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
K_2O (pôle orthoclase)	0,19 %	47	0,004	1,156	1,156 %	$K_{0,012}$
Na_2O (pôle albite)	4,26 %	31	0,137	39,595	39,595 %	$Na_{0,396}$
CaO (pôle anorthite)	11,749 %	56	0,205	59,248	59,248 %	$Ca_{0,592}$
			4) $S = 0,346$		Total = 100 %	

En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des feldspaths :

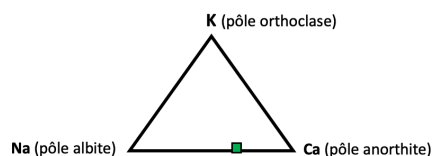
$X (Al Si_3 O_8)$, la formule structurale du feldspath étudié est donc :

(Les valeurs de Al et Si ne sont pas calculables par cette méthode et correspondent à leurs valeurs théoriques)

→ $(K_{0,012} Na_{0,396} Ca_{0,592}) (Al Si_3 O_8)$

Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du feldspath étudié est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon



C. « Méthode GABBROSOFT »

Le site internet Gabbrosoft (Gabbrosoft, 2011) propose des feuilles de calcul Excel permettant de calculer les pourcentages des pôles purs simplement en entrant les pourcentages d'oxydes de chaque élément donné par l'analyse chimique.

Dans la feuille de calcul correspondant à la famille des feldspaths, appelée PLAGCALC, les résultats de l'analyse chimique sont à entrer dans les colonnes M5 à M12.

	L	M	N	O	P	Q	R	S
1		PLAGIOCLASE CALCULATION SHEET						
2		MB09 : Labradorite						
3								
4		Wt%	Mol Prop	At Prop O	No anions	Formula		
5	SiO ₂	51,780	0,862	1,724	19,408	Si	9,704	
6	TiO ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	Ti	0,000	
7	Al ₂ O ₃	27,430	0,269	0,807	9,087	Al	6,058	
8	FeO	0,000	0,000	0,000	0,000	Fe(ii)	0,000	
9	CaO	11,490	0,205	0,205	2,307	Ca	2,307	
10	Na ₂ O	4,260	0,069	0,069	0,774	Na	1,548	
11	K ₂ O	0,190	0,002	0,002	0,023	K	0,045	
12	TOTAL	95,150		2,806		TOTAL	19,662	
13								
14				No Oxyg	32			
15				T2	11,402			
16	MOLECULAR WEIGHTS							
17	SiO ₂	60,08				An	59,15	
18	TiO ₂	79,88				Ab	39,69	
19	Al ₂ O ₃	101,96				Or	1,16	
20	FeO	71,85						
21	CaO	56,08						
22	Na ₂ O	61,98						
23	K ₂ O	94,2						
24								

Voici l'explication des résultats des différentes colonnes de la méthode Gabbrosoft :

Note : chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau ci-dessus à laquelle il correspond.

Colonne L5 à L11 à L17 à L23 = Cations détectés dans l'analyse MEB

Colonne M5 à M11 = Pourcentages pondéraux d'oxydes

M12 = Total des pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse

→ Données de l'analyse chimique

Colonne M17 M23 = Calculer le poids moléculaire pour chaque cation

→ Données par la masse atomique relative de chaque élément donné dans le tableau de Mendeleïev

Colonne N5 à N11 = Nombre de cations

→ Pourcentages pondéraux d'oxydes divisés par le poids moléculaire calculé pour chaque cation

Colonne O5 à O11 = Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations

→ Nombre de cations (colonne N) multiplié par le nombre d'oxygènes associés à chaque oxyde

O12 = Somme des oxygènes associés à chacun des cations

Colonne P5 à P11 = Nombre d'anions

→ Nombre d'oxygènes associé à chacun des cations (colonne O) / T2 (P15)

P14 = Nombre d'oxygènes dans la formule structurale de base

→ Le calcul de Gabbrosoft est basé sur 32 oxygènes

P15 = T2 = Nombre d'oxygènes 32 (P14) / somme des oxygènes (O12)

Colonne R5 à R11 = Nombre de cations associés à 32 oxygènes

→ Nombre d'anions (colonne P) divisé par le nombre d'oxygènes associés à chaque cation

R12 = somme des nombres de cations associés à 32 oxygènes

Q/R17 à Q/R19 = Pourcentages en pôles purs anorthite (Ca), albite (Al) et orthoclase (Or).

→ Nombre de cations associés à 32 oxygènes (colonne R) divisé par la somme des cations associés à 32 oxygènes (R12) multiplié par 100

LA TENEUR EN PÔLES PURS : Elle est directement obtenue dans la colonne Q/R17 à Q/R19 :

- Pourcentage du pôle orthoclase = 1,16 %
 - Pourcentage du pôle albite = 39,69 %
 - Pourcentage du pôle anorthite = 59,15 %
- Leur somme est égale à 100 %

LA FORMULE STRUCTURALE : La colonne R5 à R11 donne le nombre de chaque cation associé à 32 oxygènes.

Les résultats obtenus par la méthode Gabbrosoft sont les suivants calculés sur la base de 32 oxygènes, donc la 3^{ème} colonne (rapportant ici la Formule structurale basée sur 32 oxygènes) est à diviser par 4 pour avoir les résultats équivalents aux deux premières méthodes qui elles calculaient la formule structurale à partir des cations associés à 4 oxygènes.

Les résultats obtenus pour la formule structurale pour la méthode Gabbrosoft sont les suivants :

Cations	Nombre de cations associés à 32 oxygènes	Nombre recalculé de cations associés à 8 oxygènes
Si	9,704	2,426
Ti	0,000	0
Al	6,058	1,515
Fe ²⁺	0,000	0
Ca	2,307	0,577
Na	1,548	0,387
K	0,045	0,011

La somme de tous les cations est égale à 4,916 et dans l'idéal elle devrait être égale à 5.

La formule structurale de cet échantillon est donc :

→ (K_{0,011} Na_{0,387} Ca_{0,577}) [Al_{1,515} Si_{2,426} O₈]

3. ÉCHANTILLON MB07

Les calculs suivants se font donc sur la base de la formule chimique suivante des membres de la série continue des feldspaths alcalins de formule X (Al Si₃ O₈) ; où X = K, Na ou Ca.

La formule de base comprend donc 5 cations associés à 8 oxygènes. (Deer et al, 1992 ; Hodgkinson, 2015 ; Mindat, 2020).

A. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode LASNIER »

a. Détails des calculs

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (noté Ox%) donnés par l'analyse chimique du MEB :

Le total de la somme de tous les pourcentages d'oxydes des différents éléments pour chaque échantillon est reporté dans la case rouge de chaque tableau, en bas à droite, ici égal à 97,85%. Les résultats complets de l'analyse MEB ont été reportés à l'annexe n°1.7.

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Na	Na ₂ O	1.23
Al	Al ₂ O ₃	18.08
Si	SiO ₂	64.20
K	K ₂ O	14.20
Ca	CaO	0.13
		97.85

C2) Calculer l'équivalent moléculaire à un cation (en utilisant les masses atomiques relative de chaque élément de chaque oxyde, données par le tableau de Mendeleïev, voir l'annexe 3). Les résultats ont été arrondis comme dans la méthode originelle (car calculés à la main) :

- $\text{SiO}_2 = 28,08 (\text{Si}) + 15,999 (\text{O}) \times 2 = 60,08 \rightarrow$ Arrondis à 60
- $\text{Al}_2\text{O}_3 = 26,98 (\text{Al}) \times 2 + 15,999 (\text{O}) \times 3 = 101,957 \rightarrow$ Arrondis à 102, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Al. Donc résultat = 51
- $\text{Na}_2\text{O} = 22,98 (\text{Na}) \times 2 + 15,999 (\text{O}) = 61,95 \rightarrow$ Arrondis à 62, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Na. Donc résultat = 31
- $\text{CaO} = 40,078 (\text{Ca}) + 15,999 (\text{O}) = 56$
- $\text{K}_2\text{O} = 39,09 (\text{K}) \times 2 + 15,999 (\text{O}) = 94,17 \rightarrow$ Arrondis à 94, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Na. Donc résultat = 47

C3) Calculer le nombre de cations en divisant les pourcentages pondéraux (C1) par le poids moléculaire (C2) => $(\text{C1}/\text{C2}) \times 1000$:

- $\text{SiO}_2 = (64,20 / 60) \times 1000 = 1070$
- $\text{Al}_2\text{O}_3 = (18,08 / 51) \times 1000 = 354,510$
- $\text{Na}_2\text{O} = (1,23 / 31) \times 1000 = 39,677$
- $\text{CaO} = (0,13 / 56) \times 1000 = 2,321$
- $\text{K}_2\text{O} = (14,20 / 47) \times 1000 = 302,128$

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations en multipliant le nombre de cations par les oxygènes associés à chaque cation, soit $\text{C3} \times \text{nO}$:

- Pour Si il faut 2 oxygènes, soit $1070 \times 2 = 2140$
- Pour Al il faut 3/2 oxygènes, soit $354,51 \times 3/2 = 531,765$
- Pour Na il faut 1/2 oxygène, soit $39,677 \times 1/2 = 19,839$
- Pour Ca il faut 1 oxygène, soit $2,321 \times 1 = 2,321$
- Pour K il faut 1/2 oxygène, soit $302,128 \times 1/2 = 151,064$

C5) Premièrement, calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (qui ont été calculés à l'étape précédente C4) :

- La somme des oxygènes ici : $\Sigma = 2140_{(\text{Si})} + 531,765_{(\text{Al})} + 19,839_{(\text{Na})} + 2,321_{(\text{Ca})} + 151,064_{(\text{K})} = 2844,989$

Deuxièmement, calculer le nombre de cations associés à 8 oxygènes par règle de 3, soit en utilisant la formule suivante :
nombre cation (C3) x nombre d'oxygène (8) / Somme des oxygènes (résultat arrondis au millième) :

- Pour Si = $(1070 \times 8) / 2844,989 = 3,009$
- Pour Al = $(354,51 \times 8) / 2844,989 = 0,997$
- Pour Na = $(39,677 \times 8) / 2844,989 = 0,112$
- Pour Ca = $(2,321 \times 8) / 2844,989 = 0,007$
- Pour K = $(302,128 \times 8) / 2844,989 = 0,850$

Total de la somme de tous les cations associés à 8 oxygènes, $S = 4,975$ qui car devrait être dans l'idéal égale à 5.

A partir de cette étape, il est possible de calculer la formule structurale de l'échantillon (**Option 1**) mais aussi de calculer la teneur en pôles purs (**Option 2**).

OPTION 1 : ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE

Pour cela, il faut se référer à la formule générale du minéral étudié et pour chaque élément récupérer le nombre de cation, ici 5, associés à 8 oxygènes calculé à l'étape C5. Puis il faut l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale. (Il est cependant à noter que selon la qualité de l'analyse chimique - les biais dus aux erreurs ou imprécisions inhérentes à la technique - la somme des coefficients peut ne pas être exactement égale à ce qu'elle devrait être).

Ainsi selon la formule générale des feldspaths, la formule structurale de l'échantillon étudié est :

$\rightarrow (\text{K}_{0,850} \text{Na}_{0,112} \text{Ca}_{0,007}) (\text{Al}_{0,997} \text{Si}_{3,009} \text{O}_8)$
=> égal à 0,969 au lieu de 1. => égal à 0,997 au lieu de 1 => égal à 3,102 au lieu de 3

OPTION 2 : MÉTHODE POUR CALCULER LA TENEUR EN PÔLE PURS :

Afin de calculer les pourcentages de chaque pôle pur présent dans la formule chimique du minéral on récupérera les nombres de cations associés à 8 oxygènes correspondant aux pôles purs suivants : K (pôle orthoclase), Na (pôle albite) et Ca (pôle anorthite) calculé à l'étape C5, que l'on multipliera par 100 (pour obtenir un pourcentage), le tout divisé par la somme du nombre de cations des éléments qui ici est égale à $\Sigma = 0,850 (\text{K}) + 0,112 (\text{Na}) + 0,007 (\text{Ca}) = 0,969$. Ainsi on obtient :

- $\text{K} = (0,850 \times 100) / 0,969 = 87,719 \%$ de pôle orthoclase
- $\text{Na} = (0,112 \times 100) / 0,969 = 11,558 \%$ de pôle albite
- $\text{Ca} = (0,007 \times 100) / 0,969 = 0,722 \%$ de pôle anorthite
 \Rightarrow Leur somme est égale à 99,999 %.

Ce feldspath correspond à un mélange de 87,722 % d'orthoclase, 11,558 % d'albite et 0,722% d'anorthite modélisé par les diagrammes figurant dans le tableau récapitulatif.

b. Tableau récapitulatif

Tableau récapitulatif de la méthode de calculs et des résultats appliquée à l'échantillon MB07 :

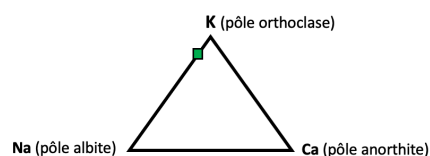
C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique						
C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev						
C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 $\Leftrightarrow (C1/C2) \times 1000$						
C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation $\Leftrightarrow C3 \times nO$						
C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations ($\Sigma_{\text{oxygènes}}$) Puis, calculer le nombre de cations associés à 8 oxygènes : nombre de cations x nombre d'oxygènes (8) / $\Sigma_{\text{oxygènes}} \Leftrightarrow (C3 \times 8) / \Sigma_{\text{oxygènes}}$						
OPTION 1) Établissement de la formule structurale : récupérer le nombre de cations associés à 8 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale du minéral étudié.						
	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	64,20 %	60	1070	2140	3,009	Si _{3,009}
Al ₂ O ₃	18,08 %	51	354,510	531,765	0,997	Al _{0,997}
Na ₂ O	1,23 %	31	39,677	19,839	0,112	Na _{0,112}
CaO	0,13 %	56	2,321	2,321	0,007	Ca _{0,007}
K ₂ O	14,20 %	47	302,128	151,064	0,850	K _{0,850}
	= 97,85 %			$\Sigma_{\text{oxygènes}} = 2844,989$		
OPTION 2) Calculer la teneur en pôles purs (en %) : Teneur en pourcentage du pôle pur = $(C5_{\text{du pôle pur}} / \Sigma_{\text{des C5 des pôles purs}}) \times 100$ (avec $\Sigma_{\text{des C5 des pôles purs}} = 0,850 + 0,112 + 0,007 = 0,969$) $K = C5_K / \Sigma_{\text{des C5 des pôles purs}} \times 100 = (0,850 / 0,969) \times 100 = 87,719 \%$ d'orthoclase $Na = C5_{Na} / \Sigma_{\text{des C5 des pôles purs}} \times 100 = (0,112 / 0,969) \times 100 = 11,558 \%$ d'albite $Ca = C5_{Ca} / \Sigma_{\text{des C5 des pôles purs}} \times 100 = (0,007 / 0,969) \times 100 = 0,722 \%$ d'anorthite						

En intégrant les résultats de l'option 1 dans la formule générale des feldspaths :
X (Al Si₃ O₈), la formule structurale du feldspath étudié est donc :



Selon les résultats de l'option 2, la teneur en pôles purs du feldspath étudié est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon



B. Méthode de calculs inspirée de la « Méthode HANNEMAN »

a. Détails des calculs

Dans son livre « Naming Gem Garnets », Hanneman propose une méthode de calcul simplifiée permettant de connaître la teneur en pôle purs d'un minéral (Hanneman, 2000).

Sachant que la formule des variétés du groupe des feldspaths plagioclases est : X (Al Si₃ O₈) ; le calcul sera basé sur les cations K₂O, Na₂O et CaO correspondant respectivement aux deux pôles purs orthoclase, albite et anorthite.

1) Au préalable, récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (noté Ox%) donnés par l'analyse chimique

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Na	Na ₂ O	1.23
Al	Al ₂ O ₃	18.08
Si	SiO ₂	64.20
K	K ₂ O	14.20
Ca	CaO	0.13
		97.85

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour référence les masses atomiques relatives de chaque élément donné par le tableau de Mendeleïev)

- K₂O = 39,09 (K) x 2 + 15,999 (O) = 94,17 → Arrondis à 94, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Na. Donc résultat = 47
- Na₂O = 22,98 (Na) x 2 + 15,999 (O) = 61,95 → Arrondis à 62, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Na. Donc résultat = 31
- CaO = 40,078 (Ca) + 15,999 (O) = 56

3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire. Les résultats sont arrondis au millièmes supérieur.

- K₂O : 14,20 / 47 = 0,302
- Na₂O : 1,23 / 31 = 0,040
- CaO : 0,13 / 56 = 0,002

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.

- $S = 0,302 + 0,040 + 0,002 = 0,344$

5) Multiplier par (100/S) les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde.

- Ici, $100 / S = 100 / 0,344 = 290,698$

- Ainsi :

- $K_2O = 290,698 \times 0,302 = 87,791$
- $Na_2O = 290,698 \times 0,040 = 11,628$
- $CaO = 290,698 \times 0,002 = 0,581$

OPTION 1 : Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final. S'il est < 70% alors c'est un mélange entre deux phases solides.

→ normalement la somme des pourcentages des pôles devrait être égale à 100%, ici elle est égale à 100%

Les résultats du calcul sont les suivants :

- **Pourcentage du pôle orthoclase = 87,791 %**
- **Pourcentage du pôle albite = 11,628 %**
- **Pourcentage du pôle anorthite = 0,581 %**

OPTION 2 : Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus en 3 pour chaque oxyde par 1/S (1 correspondant au nombre de cations du site X).

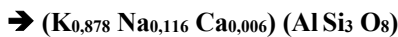
- Ici $1 / S = 1 / 0,344 = 2,907$

- Ainsi :

- $K_2O = 0,302 \times 2,907 = 0,878$
- $Na_2O = 0,040 \times 2,907 = 0,116$
- $CaO = 0,002 \times 2,907 = 0,006$

→ normalement la somme des cations représentant les pôles purs doit être égale à 1, ici elle est égale à 1

La formule structurale calculée est :



(ps : à noter qu'avec cette méthode seuls les cations K, Na et Ca peuvent ici être calculés, les valeurs de Al et Si sont « théoriques »)

b. Tableau récapitulatif

Tableau récapitulatif de la méthode de calculs et des résultats appliqués à l'échantillon MB07 :

	1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique	2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev)	3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).	4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.	5) Multiplier par 100/S les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux. Ici $100/S = 100 / 0,344 = 290,698$	OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final. Si <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.	OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 1/S (1 correspondant nombre de cations du site X), avec ici $1/S = 1 / 0,344 = 2,907$
	1)	2)	3)	4)	5)	OPTION 1	OPTION 2
K_2O (pôle orthoclase)	14,20 %	47	0,302	87,791	87,791 %	$K_{0,878}$	
Na_2O (pôle albite)	1,23 %	31	0,040	11,628	11,628 %	$Na_{0,116}$	
CaO (pôle anorthite)	0,13 %	56	0,002	0,581	0,581 %	$Ca_{0,006}$	
			4) $S = 0,344$		Total = 100 %		

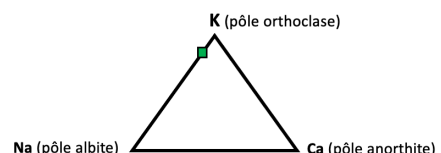
En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des feldspaths :

$X (AlSi_3 O_8)$, la formule structurale du feldspath étudié est donc :
(Les valeurs de Al et Si ne sont pas calculables par cette méthode et correspondent à leurs valeurs théoriques)



Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du feldspath étudié est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon



C. « Méthode GABBROSOFT »

Le site internet Gabbrosoft (Gabbrosoft, 2011) propose des feuilles de calcul Excel permettant de calculer les pourcentages des pôles purs simplement en entrant les pourcentages d'oxydes de chaque élément donné par l'analyse chimique. Dans la feuille de calcul correspondant à la famille des feldspaths, appelée ALKFELDCALC, les résultats de l'analyse chimique sont à entrer dans les colonnes B5 à B13.

	A	B	C	D	E	F	G	H
1		ALKALI-FELDSPAR CALCULATION SHEET						
2		MB07 : Pierre Lune						
3								
4		Wt%	Mol Prop	At Prop O	No anions	Formula		
5	SiO ₂	64,2	1,069	2,137	24,063	Si	12,032	
6	TiO ₂	0	0,000	0,000	0,000	Ti	0,000	
7	Al ₂ O ₃	18,08	0,177	0,532	5,990	Al	3,993	
8	FeO	0	0,000	0,000	0,000	Fe(ii)	0,000	
9	CaO	0,13	0,002	0,002	0,026	Ca	0,026	
10	Na ₂ O	1,23	0,020	0,020	0,223	Na	0,447	
11	K ₂ O	14,2	0,151	0,151	1,697	K	3,395	
12	BaO	0,000	0,000	0,000	0,000	Ba	0,000	
13	TOTAL	97,840		2,842		TOTAL	19,892	
14								
15				No Oxyg	32			
16				T2	11,260			
17	MOLECULAR WEIGHTS							
18	SiO ₂	60,08				An	0,67	
19	TiO ₂	79,88				Ab	11,55	
20	Al ₂ O ₃	101,96				Or	87,77	
21	FeO	71,85						
22	CaO	56,08						
23	Na ₂ O	61,98						
24	K ₂ O	94,2						
25	BaO	153,33						
26								
27								

Voici l'explication des résultats des différentes colonnes de la méthode Gabbrosoft :

Note : chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau ci-dessus à laquelle il correspond.

Colonne A5 à A12 et A18 à A25 = Cations détectés dans l'analyse MEB

Colonne B5 à B11 = Pourcentages pondéraux d'oxydes

B13 = Total des pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse

→ Données de l'analyse chimique

Colonne B18 à B25 = Calculer le poids moléculaire pour chaque cation

→ Données par la masse atomique relative de chaque élément donné dans le tableau de Mendeleïev

Colonne C5 à C12 = Nombre de cations

→ Pourcentages pondéraux d'oxydes divisés par le poids moléculaire calculé pour chaque cation

Colonne D5 à D12 = Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations

→ Nombre de cations (colonne C) multiplié par le nombre d'oxygènes associés à chaque oxyde

D13 = Somme des oxygènes associés à chacun des cations

Colonne E5 à E12 = Nombre d'anions

→ Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations (colonne D) / T2 (E16)

E15 = Nombre d'oxygènes dans la formule structurale de base

→ Le calcul de Gabbrosoft est basé sur 32 oxygènes

E16 = T2 = Nombre d'oxygènes 32 (E15) / somme des oxygènes (D13)

Colonne G5 à G12 = Nombre de cations associés à 32 oxygènes

→ Nombre d'anions (colonne E) divisé par le nombre d'oxygènes associés à chaque cation

G13 = Somme des nombres de cations associés à 32 oxygènes

F/G18 à F/G20 = Pourcentages en pôles purs anorthite (Ca), albite (Al) et orthoclase (Or).

→ Nombre de cations associés à 32 oxygènes (colonne G) divisé par la somme des cations associés à 32 oxygènes (G13) multiplié par 100

LA TENEUR EN PÔLES PURS : Elle est directement obtenue dans la colonne F/G18 à F/G20 :

- Pourcentage du pôle orthoclase = 87,77 %
 - Pourcentage du pôle albite = 11,55 %
 - Pourcentage du pôle anorthite = 0,67 %
- Le total des pourcentages des deux pôles est égal à 100 %

LA FORMULE STRUCTURALE : La colonne G5 à G12 donne le nombre de chaque cation associé à 32 oxygènes.

Les résultats obtenus par la méthode Gabbrosoft sont calculés sur la base de 32 oxygènes, donc la colonne **G5 à G12** (rapportant ici la formule structurale basée sur 32 oxygènes) est à diviser par 4 pour avoir les résultats équivalents aux deux premières méthodes qui elles calculaient la formule structurale à partir des cations associés à 4 oxygènes.

Les résultats obtenus pour la formule structurale pour la méthode Gabbrosoft sont les suivants :

Cations	Nombre de cations associés à 32 oxygènes	Nombre recalculé de cations associés 8 oxygènes
Si	12,032	3,008
Ti	0,000	0
Al	3,993	0,998
Fe(ii)	0,000	0
Ca	0,026	0,007
Na	0,447	0,112
K	3,395	0,849
Ba	0,000	0

La somme de tous les cations est égale à 4,974 et dans l'idéal elle devrait être égale à 5.

La somme des pôles purs K(0,849), Na(0,112), Ca(0,007) est égale à 0,968 et devrait être égale à 1 dans l'idéal.

La formule structurale de cet échantillon est donc :

⇒ (**K**_{0,849} **Na**_{0,112} **Ca**_{0,007}) (**Al**_{0,998} **Si**_{3,008} **O**₈)

1. GÉNÉRALITÉS SUR LE GROUPE DU SPINELLE

Le groupe du spinelle est composé de 22 variétés différentes réparties en 5 sous-groupes : le sous-groupe du spinelle (magnésio-alumineux), le sous-groupe de la magnétite (ferreux), le sous-groupe de la chromite (chromifère), le sous-groupe de la coulsonite (vanadifère) et le sous-groupe de l'ulvöspinelle (titanifère) (Munsch, 2017). En gemmologie classique seul le sous-groupe du spinelle et la variété magnétite sont généralement rencontrés. Si la magnétite fait partie du sous-groupe ferreux portant le même nom, le sous-groupe magnésio-alumineux du spinelle lui est composé de quatre pôles purs :

- Spinelle s.s. (*stricto sensu*) = pôle magnésio-alumineux, de composition : $MgAl_2O_4$
- Gahnite = pôle zincifère, de composition : $ZnAl_2O_4$
- Hercynite = pôle ferreux, de composition : $FeAl_2O_4$
- Galaxite = pôle manganifère, de composition : $MnAl_2O_4$

Entre ces pôles purs existent deux séries continues, une première entre le spinelle s.s. et la gahnite dont le membre intermédiaire est le gahnospinelle, une deuxième entre le spinelle s.s. et l'hercynite dont le membre intermédiaire s'appelle la ceylanite (dont la variété noire est nommée pléonaste). Une troisième série continue existe entre le spinelle s.s. et la magnésiochromite (*Figure 7*) (Mindat, 2020 ; Munsch, 2017).

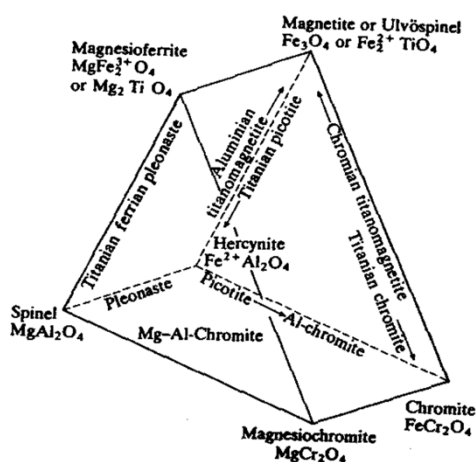


Figure 7 : Prisme représentant les séries continues présentes dans le groupe du spinelle. A la base sont représentés les pôles dits « normaux » et aux sommets les pôles dits « inverses » (Deer, 1992)*

*Cristallographiquement, les spinelles correspondent à une famille d'oxyde où les oxygènes forment une structure cubique compacte avec 8 sites tétraédriques et 16 sites octaédriques occupés respectivement par les cations Mg^{2+} et Al^{3+} pour le spinelle *ss* direct en coordination « normale » et non « inversé ». La coordination inverse correspond aux sites tétraédriques et octaédriques occupés par les cations Al et Mg respectivement, elle est plus rarement retrouvée dans la nature car elle correspond à un désordre cristallin du spinelle (Munsch, 2017).

Les caractéristiques des variétés du sous-groupe des spinelles sont résumées dans le tableau suivant (les noms en gras correspondent aux pôles purs, les autres sont les membres intermédiaires) : (Mindat, 2020 ; Deer et al., 1992 ; Hodgkinson, 2015).

SOUS-GROUPE DU SPINELLE $X Al_2 O_4$ (où $X = Mg^{2+}, Zn^{2+}, Fe^{2+}$ et/ou Mn^{2+})			
Variétés	Formules chimiques	Teneurs en pôles purs et systèmes cristallins	Variétés communément rencontrées en gemmologie classique
Spinelle s.s.	$Mg Al_2 O_4$	Pôle pur magnésien	Variété la plus commune
Gahnite	$Zn Al_2 O_4$	Pôle pur zincifère	Variété commune
Gahnospinelle	$(Mg,Zn)Al_2O_4$	Mélange des pôles purs magnésien et zincifère	Variété commune
Hercynite	$Fe Al_2 O_4$	Pôle pur ferrière	Variété commune
Ceylanite	$(Mg,Fe^{2+})Al_2O_4$	Mélange des pôles purs magnésien et ferrière	Variété pléonaste (noire) commune
Galaxite	$Mn Al_2 O_4$	Variété manganifère	Rarement rencontré

La formule de base comprend donc 3 cations associés à 4 oxygènes.

A noter que le spinelle comporte de nombreux éléments traces donc certains éléments se substituent couramment :

- Mg^{2+} substitué par Fe^{2+} , Ni et Zn (plus rarement Mn , Co , Cr , V et Ti).
- Al^{3+} substitué par Fe^{3+} , Cr .

Dans ce mémoire, nous nous intéresserons exclusivement au sous-groupe des magnésio-alumineux d'autant plus quand l'analyse chimique montre une dominance d'aluminium sur les autres éléments. L'échantillon MB10 choisi est sensé correspondre à un spinelle s.s. bleu provenant du Sri Lanka.

2. ÉCHANTILLON MB10

A. Méthode de calcul inspirée de la « Méthode LASNIER »

a. Détails des calculs

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (notés Ox%) donnés par l'analyse chimique du MEB :

Le total de la somme de tous les pourcentages d'oxydes des différents éléments pour chaque échantillon est reporté dans la case rouge de chaque tableau, en bas à droite, ici égal à **102,33%**. Les résultats complets de l'analyse MEB ont été reporté à l'annexe n°1.8.

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Na	Na ₂ O	1.37
Mg	MgO	27.85
Al	Al ₂ O ₃	68.98
Si	SiO ₂	0.59
S*		0.25
K	K ₂ O	0.26
Ca	CaO	0.25
Ti	TiO ₂	0.00
V	V ₂ O ₃	0.15
Cr	Cr ₂ O ₃	0.16
Mn	MnO	0.32
Fe	FeO	1.49
Ba	BaO	0.64
		102.33

* le soufre (noté S) ne peut pas être mis sous forme d'oxyde

C2) Calculer l'équivalent moléculaire à un cation (en utilisant les masses atomiques relative de chaque élément de chaque oxyde, données par le tableau de Mendeleïev, voir l'annexe 3). Les résultats ont été arrondis comme dans la méthode originelle (car calculés à la main) :

- Na₂O = 62 → que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalence monocationique relatif à un seul Na. Donc résultat = 31
- MgO = 24,305 (Mg) + 15,999 (O) = 40
- Al₂O₃ = 26,98 (Al) x 2 + 15,999 (O) x 3 = 101,957 → Arrondis à 102, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalence monocationique relatif à un seul Al. Donc résultat = 51
- SiO₂ = 28,08 (Si) + 15,999 (O) x 2 = 60,08 → Arrondis à 60
- S = 32,008 → Arrondis à 32
- K₂O = 94 → que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalence monocationique relatif à un seul Na. Donc résultat = 47
- CaO = 40,078 (Ca) + 15,999 (O) = 56
- TiO₂ = 47,867 (Ti) + 15,999 x 2 (O) = 79,865 → Arrondis à 80
- V₂O₃ = 50,9415 (V) x 2 + 15,999 (O) x 3 = 149,88 → Arrondis à 150, divisé par 2 = 75
- Cr₂O₃ = 51,996 (Cr) + 15,999 (O) x 3 = 151,95 → Arrondis à 152, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalence monocationique relatif à un seul Al. Donc résultat = 76
- MnO = 54,938 (Mn) + 15,999 (O) = 71
- FeO = 55,945 (Fe) + 15,999 (O) = 72
- BaO = 137,327 (Ba) + 15,000 (O) = 153

C3) Calculer le nombre de cations en divisant les pourcentages pondéraux (C1) par le poids moléculaire (C2) => (C1/C2) x 1000 :

- Na₂O = (1,37 / 31) x 1000 = 44,194
- MgO = (27,85 / 40) x 1000 = 696,250
- Al₂O₃ = (68,98 / 51) x 1000 = 1352,549
- SiO₂ = (0,59 / 60) x 1000 = 9,833
- S = (0,25 / 32) x 1000 = 7,813
- K₂O = (0,26 / 47) x 1000 = 5,532
- CaO = (0,25 / 56) x 1000 = 4,464
- TiO = (0 / 80) x 1000 = 0
- V₂O₃ = (0,15 / 75) x 1000 = 2,000
- Cr₂O₃ = (0,16 / 76) x 1000 = 2,105
- MnO = (0,32 / 71) x 1000 = 4,507
- FeO = (1,49 / 72) x 1000 = 20,694
- BaO = (0,64 / 153) x 1000 = 4,183

associés à chaque cation, soit **C3** x **n0** :

- S n'est associé à aucun oxygène

précédente C4) :

- $$4,507_{(\text{Mn})} + 20,694_{(\text{Fe})} + 4,183_{(\text{Ba})} = 2809,609$$

nombre de cations (**C3**) x nombre d'oxygènes (4) / somme des oxygènes (résultat arrondis au millième) :

- Pour S = $(7,813 \times 4) / 2809,609 = 0,111$

Total de la somme de tous les cations associés à 3 oxygènes, $S = 3,165$ ce qui est une valeur correcte car devrait être dans l'idéal égale à 3.

A partir de cette étape, il est possible de calculer la formule structurale de l'échantillon (**Option 1**) mais aussi de calculer la teneur en pôles purs (**Option 2**).

OPTION 1 : ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE

Pour cela, il faut se référer à la formule générale du minéral étudié et pour chaque élément récupérer le nombre de cation, ici 3, associés à 4 oxygènes calculé à l'étape C5. Puis il faut l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale. (Il est cependant à noter que selon la qualité de l'analyse chimique - les biais dus aux erreurs ou imprécisions inhérentes à la technique - la somme des coefficients peut ne pas être exactement égale à ce qu'elle devrait être).

Ainsi selon la formule générale des spinelles, la formule structurale de l'échantillon étudié est :

→ (K_{0,008} Na_{0,062} Ba_{0,006} Ca_{0,004} Mg_{0,991} Mn_{0,006} Fe_{0,029} Si_{0,014} S_{0,111}) (V_{0,003} Cr_{0,003} Al_{1,926}) O₄
=> égal à 1,231 au lieu de 1. => égal à 1,932 au lieu de 2

OPTION 2 : MÉTHODE POUR CALCULER LA TENEUR EN PÔLE PURS :

Afin de calculer les pourcentages de chaque pôle pur présent dans la formule chimique du minéral étudié on récupérera les nombres de cations associés à 4 oxygènes correspondant aux pôles purs suivants : (Mg) spinelle s.s., (Fe) hercynite et (Zn) gahnite calculé à l'étape C5, que l'on multipliera par 100 (pour obtenir un pourcentage), le tout divisé par la Somme du nombre de cations des éléments qui ici est égale à $\Sigma = 0,991 \text{ (Mg)} + 0,029 \text{ (Fe)} + 0 \text{ (Zn)} = 1,02$. Ainsi on obtient :

- $Z_n = (0 \times 100) / 1,02 = 0 \%$ **de pôle gahnite**
 \Rightarrow Leur somme étant égale à 100 % ce qui est correct compte tenu de la marge d'erreur des analyses et calculs.

Le spinelle correspondrait à un mélange de 97,157 % de spinelle s.s., 2,843 % d'hercynite et 0 % de gahnite modélisé par les diagrammes figurant dans le tableau récapitulatif suivant.

b. Tableau récapitulatif

Tableau récapitulatif de la méthode de calculs et des résultats appliquée à l'échantillon MB10 :

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique						
C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev						
C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le Poids Moléculaire (C2) x 1000 $\Leftrightarrow (C1/C2) \times 1000$						
C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation $\Leftrightarrow C3 \times nO$						
C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations ($\Sigma_{oxygènes}$). Puis, calculer le nombre de cations associés à 4 oxygènes : nombre de cations x nombre d'oxygènes (4) / $\Sigma_{oxygènes} \Leftrightarrow (C3 \times 4) / \Sigma_{oxygènes}$						
OPTION 1) Établissement de la formule structurale : récupérer le nombre de cations associés à 4 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale du minéral étudié.						
	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
Na ₂ O	1,37	31	44,194	22,097	0,062	Na _{0,062}
MgO	27,85	40	696,250	696,25	0,991	Mg _{0,991}
Al ₂ O ₃	68,98	51	1252,549	2028,824	1,926	Al _{1,926}
SiO ₂	0,59	60	9,833	19,666	0,014	Si _{0,014}
S	0,25	32	7,813	Non associé	0,111	S _{0,111}
K ₂ O	0,26	47	5,532	2,766	0,008	K _{0,008}
CaO	0,25	56	4,464	4,464	0,006	Ca _{0,006}
TiO ₂	0	80	0	0	0	Ti ₀
V ₂ O ₃	0,15	149,88	2,0	3,0	0,003	V _{0,003}
Cr ₂ O ₃	0,16	76	2,105	3,158	0,003	Cr _{0,003}
MnO	0,32	71	4,507	4,507	0,006	Mn _{0,006}
FeO	1,49	72	20,694	20,694	0,029	Fe _{0,029}
BaO	0,64	153	4,183	4,183	0,006	Ba _{0,006}
	= 102,33			$\Sigma_{oxygènes} = 2809,609$		
OPTION 2 Calculer la teneur en pôles purs (en %) : Teneur en pourcentage du pôle pur = $(C5_{du\ pôle\ pur} / \Sigma_{des\ C5\ des\ pôles\ purs}) \times 100$ (avec Σ des C5 de Mg + Fe + Zn = 0,991 + 0,029 + 0 = 1,02) Mg = $C5_{Mg} / \Sigma_{C5\ (Mg + Fe + Zn)} \times 100 = (0,991 / 1,02) \times 100 = 97,157\ \% \text{ de spinelle s. s.}$ Fe = $C5_{Fe} / \Sigma_{C5\ (Mg + Fe + Zn)} \times 100 = (0,029 / 1,02) \times 100 = 2,843\ \% \text{ d' hercynite}$ Zn = $C5_{Zn} / \Sigma_{C5\ (Mg + Fe + Zn)} \times 100 = (0 / 1,02) \times 100 = 0\ \% \text{ de gahnite}$						

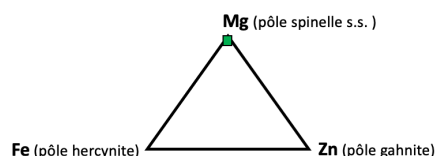
En intégrant les résultats de l'option 1 dans la formule générale des spinelles :

X Al₂ O₄, la formule structurale du spinelle étudié est donc :



Selon les résultats de l'option 2, la teneur en pôles purs du spinelle étudié est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon



B. Méthode de calcul inspirée de la « Méthode HANNEMAN »

a. Détails des calculs

Dans son livre « Naming Gem Garnets », Hanneman propose une méthode de calcul simplifiée permettant de connaître la teneur en pôle purs d'un minéral (Hanneman, 2000).

Sachant que la formule des variétés du groupe des spinelles est : X Al₃ O₄ ; le calcul sera basé sur les cations MgO, FeO et ZnO correspondant respectivement aux trois pôles purs spinelle s.s., hercynite et gahnite.

1) Au préalable, récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (notés % Ox) donnés par l'analyse chimique :

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Mg	MgO	27.85
Fe	FeO	1.49

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour référence les masses atomiques relatives de chaque élément donné par le tableau de Mendeleïev) (arrondis) :

- MgO = 24,305 (Mg) + 15,999 (O) = 40
- FeO = 55,945 (Fe) + 15,999 (O) = 72
- ZnO = 65,38 (Zn) + 15,999 (O) = 81

3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire. Les résultats sont arrondis au millièmes supérieur.

- MgO : 27,85 / 40 = 0,696
- FeO : 1,49 / 72 = 0,021
- ZnO : 0 / 81 = 0

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.

- $S = 0,696 + 0,021 + 0 = 0,717$

5) Multiplier par (100/S) les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde.

- Ici, $100/S = 100 / 0,717 = 139,470$

- Ainsi :

- o $MgO : 0,696 \times 139,470 = 97,071$
- o $FeO : 0,021 \times 139,470 = 2,929$
- o $ZnO : 0 \times 139,470 = 0$

OPTION 1 : Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final. S'il est <70% alors c'est un mélange entre deux phases solides.

→ normalement la somme des pourcentages des pôles devrait être égale à 100%, ici elle est bien égale à 100%

La teneur en pôles purs est donc :

- **Pourcentage du pôle spinelle s.s. = 97,071 %**
- **Pourcentage du pôle hercynite = 2,929 %**
- **Pourcentage du pôle gahnite = 0 %**

OPTION 2 : Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 1/S (1 correspondant au nombre de cations du site X).

- Ici $1/S = 1 / 0,717 = 1,398$

- Ainsi :

- o $MgO : 0,696 \times 1,398 = 0,973$
- o $FeO : 0,021 \times 1,398 = 0,029$
- o $ZnO : 0 \times 1,398 = 0$

→ normalement la somme des cations représentant les pôles purs doit être égale à 1, ici elle est égale à 1,002

La formule structurale calculée est donc :



(ps : à noter qu'avec cette méthode seuls les cations Mg, Fe et Zn peuvent ici être calculés, les valeurs de Al et O sont théoriques.):

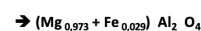
b. Tableau récapitulatif

Tableau récapitulatif de la méthode de calculs et des résultats appliquée à l'échantillon MB10 :

	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
MgO (pôle spinelle s.s.)	27,85 %	40	0,696	97,071	97,071 %	$Mg_{0,973}$
FeO (pôle hercynite)	1,49 %	72	0,021	2,929	2,929 %	$Fe_{0,029}$
ZnO (pôle gahnite)	0	81	0	0	0 %	Zn_0
			4) $S = 0,717$		Total = 100 %	

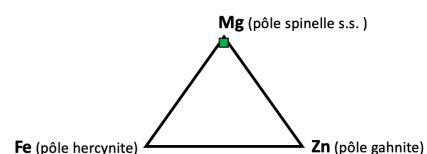
En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des spinelles :

$X Al_2 O_4$, la formule structurale du spinelle étudié est donc :
(La valeur de Al n'est pas calculable par cette méthode et correspond à la valeur théorique)



Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du spinelle étudié est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon



C. « Méthode GABBROSOFT »

Le site internet Gabbrosoft propose des feuilles de calcul Excel permettant de calculer les pourcentages des pôles purs simplement en entrant les pourcentages d'oxydes de chaque élément donné par l'analyse chimique.

Dans la feuille de calcul correspondant à la famille des spinelles, appelée SPINCALC, les résultats de l'analyse chimique sont à entrer dans les colonnes B5 à B15 (Gabbrosoft, 2011).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	SPINEL CALCULATION SHEET										
2	© GabbroSoft 2011										
3											
4		Wt%	Mol Prop	At Prop O	No anions	Formula		Norm			
5	SiO2	0,590	0,010	0,020	0,226	Si	0,113	0,113			
6	TiO2	0,000	0,000	0,000	0,000	Ti	0,000	0,000			
7	Al2O3	68,980	0,677	2,030	23,395	Al	15,596	15,554			
8	Cr2O3	0,160	0,001	0,003	0,036	Cr	0,024	0,024			
9	V2O3	0,150	0,001	0,003	0,035	V	0,023	0,023			
10	FeO	1,490	0,021	0,021	0,239	Fe(ii)	0,239	0,238			
11	MnO	0,320	0,005	0,005	0,052	Mn	0,052	0,052			
12	MgO	27,850	0,691	0,691	7,966	Mg	7,966	7,944			
13	CaO	0,250	0,004	0,004	0,051	Ca	0,051	0,051			
14	ZnO	0,000	0,000	0,000	0,000	Zn	0,000	0,000			
15	TOTAL	99,790		2,776		TOTAL	24,065	24,000			
16											
17				No Oxyg	32	Fe/Fe+Mg	0,03		T/S	0,997301	
18				T2	11,527	Cr/Cr+Al	0,00				
19											
20	SiO2	0,590		Si	0,113	Fe(ii)	0,066				
21	TiO2	0,000		Ti	0,000	Fe(iii)	0,17274				
22	Al2O3	68,980		Al	15,554	Fe2/(Fe2+Fe3)	0,275				
23	Cr2O3	0,160		Cr	0,024	Fe3/(Fe3+Fe2)	0,725				
24	V2O3	0,150		V	0,023						
25	Fe2O3	1,200		Fe(iii)	0,173						
26	FeO	0,410		Fe(ii)	0,066						
27	MnO	0,320		Mn	0,052						
28	MgO	27,850		Mg	7,944						
29	CaO	0,250		Ca	0,051						
30	ZnO	0,000		Zn	0,000						
31	TOTAL	99,910		TOTAL	24,000						
32											
33											
34	MOLECULAR WEIGHTS										
35	SiO2	60,08									
36	TiO2	79,88									
37	Al2O3	101,96									
38	Cr2O3	151,99									
39	V2O3	149,88									
40	Fe2O3	159,69									
41	FeO	71,85									
42	MnO	70,94									
43	MgO	40,3									
44	CaO	56,08									
45	ZnO	81,38									
46											
47	This spreadsheet is free to use, edit and distribute. All we ask in return if you end										
48	up using the spreadsheet for a thesis or published work, is that you find some way										
49	of referencing our hard work, and providing a link to the GabbroSoft website at										
50	http://www.gabbrosoft.org										
51											

Voici l'explication des résultats des différentes colonnes de la méthode Gabbrosoft :

Note : chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau ci-dessus à laquelle il correspond.

Colonne A5 à A14 = Cations détectés dans l'analyse MEB

Colonne B5 à B14 = Pourcentages pondéraux d'oxydes

B15 = Total des pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse

→ Données de l'analyse chimique

Colonne B35 à B44 = Calculer le poids moléculaire pour chaque cation

→ Donné par la masse atomique relative de chaque élément donné dans le tableau de Mendeleïev

Colonne C5 à C14 = Nombre de cations

→ Pourcentages pondéraux d'oxydes divisés par les poids moléculaires calculés pour chaque cation

Colonne D5 à D14 = Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations

→ Nombre de cations (colonne C) multiplié par le nombre d'oxygènes associés à chaque oxyde

D15 = Somme des oxygènes associés à chacun des cations

Colonne E5 à E14 = Nombre d'anions

→ Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations (colonne D) / T2 (E18)

E17 = Nombre d'oxygènes dans la formule structurale de base

→ Le calcul de Gabbrosoft est basé sur 32 oxygènes

E18 = T2 = Nombre d'oxygènes 32 (E17) / somme des oxygènes (D5 à D14)

Colonne G5 à G14 = Nombre de cations associés à 32 oxygènes

→ Nombre d'anions (colonne E) divisé par le nombre d'oxygènes associés à chaque cation

G15 = Somme des nombres de cations associés à 32 oxygènes

Colonne H5 à H14 = Nombre de cations associés à 32 oxygènes

→ Résultats de la colonne G5 à G14 normalisés à 24 (nombre de cations associés à 32 oxygènes chez les pyroxènes.

H15 = Somme des nombres de cations associés à 32 oxygènes

Colonne B20 à B31 : Recalcule des pourcentages d'oxydes avec la proportion de Fe²⁺ et de Fe³⁺. Ici tout le fer est du fer ferreux (Fe²⁺) car le fer ferrique Fe³⁺ est égal à 0.

Colonne E20 à E33 : Recalcule de la formule structurale à partir des pourcentages d'oxydes de la colonne B20 à B31.

LA TENEUR EN PÔLES PURS : La méthode Gabbrosoft ne donne pas la teneur en pôles purs pour le spinelle mais seulement la formule structurale de l'échantillon étudié.

LA FORMULE STRUCTURALE : La colonne H5 à H14 donne le nombre de chaque cation associé à 4 oxygènes.

Les résultats obtenus par la méthode Gabbrosoft (colonne H5 à H14) sont calculés sur la base de 32 oxygènes, donc la 3^{ème} colonne (rapportant ici la formule structurale basée sur 32 oxygènes) est à diviser par 8 pour avoir les résultats équivalents aux deux premières méthodes qui, elles, calculaient la formule structurale à partir des cations associés à 4 oxygènes.

Les résultats obtenus pour la formule structurale pour la méthode Gabbrosoft sont les suivants :

Cations	Nombre de cations associés à 32 oxygènes	Nombre de cations recalculés associés à 4 oxygènes
Si	0,113	0,014
Ti	0,000	0
Al	15,554	1,944
Cr	0,024	0,003
V	0,023	0,003
Fe(ii)	0,238	0,030
Mn	0,052	0,007
Mg	7,944	0,993
Ca	0,051	0,006
Zn	0,000	0

Leur somme est égale à 3 comme elle devrait l'être dans l'idéal.

La formule structurale calculée est donc (on ne peut distinguer les sites W, X et Y avec cette méthode de calcul) :

(Ca_{0,006} Mg_{0,993} Mn_{0,007} Si_{0,014} Fe_{0,030}) (V_{0,003} Cr_{0,003} Al_{1,944}) O₄

→ Zn + Fe + Mg = 0 + 0,03 + 0,993 = 1,023, devrait être égale à 1 dans l'idéal.

1. GÉNÉRALITÉS SUR LE GROUPE DES PYROXÈNES

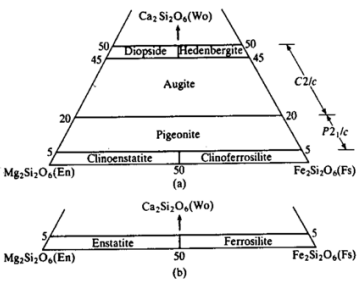
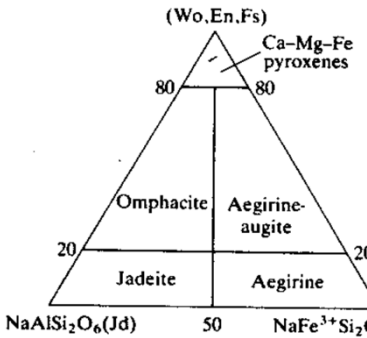
Les pyroxènes font certainement partie d'une des familles les plus souvent rencontrées en géologie car ils sont des composants essentiels d'une grande partie des roches ignées et de certaines roches métamorphiques (Deer et al., 1992 ; Tahiri-Jouti, 2008). Cependant en gemmologie peu de ces variétés sont réellement employées et nous noterons principalement l'utilisation du diopside vert en qualité gemme, du diopside noir étoilé, de l'enstatite, de la jadéite et plus rarement l'hédenbergite et l'aéirine (principalement sous forme brute). Les autres variétés ne sont quasiment pas rencontrées en gemmologie classique (Pradat, 2020).

La formule générale des pyroxènes est : $W(X,Y)Z_2O_6$; Avec :

W = Na, Ca, Fe^{2+} , (Mg)
X = Fe^{2+} , Mg, Mn, Ca, Ni
Y = Al^{VI} , Cr^{3+} , Fe^{3+} , Ti^{4+}
Z = Al^{IV} , Fe^{3+} , Si^{4+}

La formule de base comprend donc 4 cations associés à 6 oxygènes.

La famille des pyroxènes peut se diviser en 2 sous familles en fonction de leurs systèmes cristallins : les orthopyroxènes (système orthorhombique, *figure 8*) et les clinopyroxènes (système monoclinique). Cette dernière sous-famille est à nouveau divisée en deux selon, cette fois, leurs compositions chimiques : les clinopyroxènes ferromagnésiens et calciques (à base de fer, magnésium et calcium, *figure 9*) et les clinopyroxènes alcalins (à base de sodium, *figure 10*). Le tableau suivant résume la famille des pyroxènes ainsi que ses sous-familles (les noms en gras correspondent aux pôles purs, les autres sont les membres intermédiaires) : (Mindat, 2020 ; Deer et al., 1992)

ORTHOPYROXÈNES *		CLINOPYROXÈNES FERROMAGNÉSIENS ET CALCIQUES		CLINOPYROXÈNES ALCALINS	
Enstatite	$Mg_2Si_2O_6$	Wollastonite	Ca Ca (Si_2O_6)	Jadéite	Na Al (Si_2O_6)
Protoenstatite	$Mg_2Si_2O_6$	Clinoferrosilite	$Fe^{2+} Fe^{2+} (Si_2O_6)$	Aéirine / Acmite	Na Fe^{3+} (Si_2O_6)
Donpeacorite	(Mn,Mg) $MgSi_2O_6$	Clinoenstatite	Mg Mg (Si_2O_6)	Omphacite	(Na Ca Fe^{2+} Mg)(Al Fe^{3+} Fe^{2+} Mg) (Si_2O_6)
Ferrosilite	$FeSiO_3$	Diopside	Ca Mg (Si_2O_6)	Aéirine-Augite	(Na Ca Fe^{2+} Mg) (Fe^{3+} Al Fe^{2+} Mg) (Si_2O_6)
 <p><i>Figure 8 : Diagramme ternaire des clinopyroxènes ferromagnésiens et calciques (a) et orthopyroxènes (b) (Deer et al., 1992)</i></p>		Hédenbergite	Ca Fe (Si_2O_6)	 <p><i>Figure 10 : Diagramme ternaire représentant la famille des clinopyroxènes avec à sa base les pôles sodiques représentés par la jadéite et l'aéirine, et à son sommet les clinopyroxènes ferromagnésiens et calciques (représentés par les pôles wollastonite, clinoenstatite et ferrosilite) (Deer et al. 1992)</i></p>	
		Augite	(Ca Mg Fe)(Mg Fe) (Si_2O_6)		
		Pigeonite	(Ca Mg Fe)(Mg Fe) (Si_2O_6)		

Autres noms de variétés parfois utilisés en gemmologie :

* Hyperstène : Nom non officiel mais souvent usité pour décrire la série enstatite-ferrosilite, plus précisément les variétés intermédiaires proche du pôle orthoferrosilite.

* Bronzite : Variété d'enstatite avec une composante de fer. Membre faisant partie de la série continue enstatite-orthoferrosilite.

Dans ce mémoire nous détaillerons les méthodes de calcul de la formule structurale pour les pyroxènes monocliniques, autrement dit les clinopyroxènes, au moyen de l'échantillon MB16 qui fut acheté en tant que diopside vert provenant d'Inde.

2. ÉCHANTILLON MB16

A. Méthode de calcul inspirée de la « Méthode LASNIER »

a. Détails des calculs

Ici l'analyse structurale de départ montre un pourcentage prépondérant de calcium et magnésium et une faible part de sodium. Nous partirons donc sur un calcul de la famille des clinopyroxènes ferromagnésiens et calciques avec les pôles purs suivants : wollastonite (Ca), ferrosilite (Fe^{2+}) et clinoenstatite (Mg), et avec les membres intermédiaires diopside (entre les pôles Ca et Mg) et hédénbergite (entre les pôles Ca et Fe^{2+}).

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (noté Ox%) donnés par l'analyse chimique du MEB :

Le total de la somme de tous les pourcentages d'oxydes des différents éléments pour chaque échantillon est reporté dans la case rouge de chaque tableau, en bas à droite, ici égal à 85,15%. Les résultats complets de l'analyse MEB ont été reporté à l'annexe n°1.9.

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Na	Na2O	0.47
Mg	MgO	14.30
Al	Al2O3	0.41
Si	SiO2	47.25
Ca	CaO	21.34
Cr	Cr2O3	0.50
Fe	FeO	0.87
		85.15

C2) Calculer l'équivalent moléculaire à un cation (en utilisant les masses atomiques relative de chaque élément de chaque oxyde, données par le tableau de Mendeleïev, voir l'annexe 3). Les résultats ont été arrondis comme dans la méthode originelle (car calculés à la main) :

- $\text{SiO}_2 = 28,08 (\text{Si}) + 15,999 (\text{O}) \times 2 = 60,08 \rightarrow$ Arrondis à 60
- $\text{Al}_2\text{O}_3 = 26,98 (\text{Al}) \times 2 + 15,999 (\text{O}) \times 3 = 101,957 \rightarrow$ Arrondis à 102, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Al. Donc résultat = 51
- $\text{MgO} = 24,305 (\text{Mg}) + 15,999 (\text{O}) = 40$
- $\text{Na}_2\text{O} = 22,990 (\text{Na}) \times 2 + 15,999 (\text{O}) = 62 \rightarrow$ que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Na. Donc résultat = 31
- $\text{CaO} = 40,078 (\text{Ca}) + 15,999 (\text{O}) = 56$
- $\text{Cr}_2\text{O}_3 = 51,996 (\text{Cr}) + 15,999 (\text{O}) \times 3 = 151,95 \rightarrow$ Arrondis à 152, que l'on divise par 2 pour obtenir l'équivalent monocationique relatif à un seul Al. Donc résultat = 76
- $\text{FeO} = 55,945 (\text{Fe}) + 15,999 (\text{O}) = 72$

C3) Calculer le nombre de cations en divisant les pourcentages pondéraux (C1) par le poids moléculaire (C2) => (C1/C2) x 1000 :

- $\text{SiO}_2 = (47,25 / 60) \times 1000 = 787,500$
- $\text{Al}_2\text{O}_3 = (0,41 / 51) \times 1000 = 8,039$
- $\text{MgO} = (14,30 / 40) \times 1000 = 357,500$
- $\text{Na}_2\text{O} = (0,47 / 31) \times 1000 = 15,161$
- $\text{CaO} = (21,34 / 56) \times 1000 = 381,071$
- $\text{Cr}_2\text{O}_3 = (0,50 / 76) \times 1000 = 6,579$
- $\text{FeO} = (0,87 / 72) \times 1000 = 12,083$

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations en multipliant le nombre de cations par les oxygènes associés à chaque cation, soit C3 x nO :

- Pour Si il faut 2 oxygènes, soit $787,500 \times 2 = 1575$
- Pour Al il faut 3/2 oxygènes, soit $8,039 \times (3/2) = 12,059$
- Pour Mg il faut 1 oxygène, soit $357,500 \times 1 = 357,500$
- Pour Na il faut 1/2 oxygène, soit $15,161 \times 1/2 = 7,581$
- Pour Ca il faut 1 oxygène, soit $381,071 \times 1 = 381,071$
- Pour Cr il faut 3/2 oxygènes, soit $6,579 \times 3/2 = 9,869$
- Pour Fe il faut 1 oxygène, soit $12,083 \times 1 = 12,083$

C5) Premièrement, calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (qui ont été calculés à l'étape précédente C4) :

- La somme des oxygènes ici : $\Sigma = 1575_{(\text{Si})} + 12,059_{(\text{Al})} + 357,5_{(\text{Mg})} + 7,851_{(\text{Na})} + 381,071_{(\text{Ca})} + 9,869_{(\text{Cr})} + 12,083_{(\text{Fe})} = 2355,433$

nombre de cations (C3) x nombre d'oxygènes (6) / somme des oxygènes (résultat arrondis au millième) :

- Pour Si = $(787,500 \times 6) / 2355,433 = 2,006$
- Pour Al = $(8,039 \times 6) / 2355,433 = 0,020$
- Pour Mg = $(357,500 \times 6) / 2355,433 = 0,911$
- Pour Na = $(15,161 \times 6) / 2355,433 = 0,039$
- Pour Ca = $(381,071 \times 6) / 2355,433 = 0,971$
- Pour Cr = $(6,579 \times 6) / 2355,433 = 0,017$
- Pour Fe = $(12,083 \times 6) / 2355,433 = 0,031$

Le total de la somme de tous les cations associés à 6 oxygènes devrait être dans l'idéal égal à 4, ici elle est égale à $S = 3,995$.

A partir de cette étape, il est possible de calculer la formule structurale de l'échantillon (**Option 1**) mais aussi de calculer la teneur en pôles purs (**Option 2**).

OPTION 1 : ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE

On détermine d'abord les éléments correspondant au site Z en récupérant tout d'abord le nombre de cations associés à 6 oxygènes du silicium, ici égal à 2,006. Concernant l'aluminium, il faut savoir que dans le clinopyroxène il peut à la fois être associé au site tétragonal (noté Al^{IV}) dans le site Z, et au site octaédrique (noté Al^{VI}) dans le site Y.

Ici, pour calculer la quantité d'Al^{IV} en site Z il suffit d'appliquer la formule suivante (sachant que le total de cation du site Z = 2) : Al^{IV} = 2 - Si

Ainsi : $Al^{IV} = 2 - Si_{2,002} = Al^{IV}_0$

On en déduit alors Al^{VI} en faisant le calcul suivant = $Al^{total} - Al^{IV} = 0,020 - 0 = Al^{VI}_{0,020}$

Ainsi on peut en déduire la formule générale du clinopyroxène étudié :

→ (Na_{0,039} Ca_{0,971} Mg_{0,911} Fe²⁺_{0,031} Cr_{0,017} Al^{VI}_{0,020}) Si_{2,006} O₆

=> égal à 1,969 au lieu de 2

=> Si égal à 2,006 au lieu de 2

OPTION 2 : MÉTHODES POUR CALCULER LES COMPOSANTS PRINCIPAUX LA TENEUR EN PÔLES PURS PRINCIPAUX (A) & LA TENEUR EN PÔLES PURS DE LA SÉRIE DES CLINOPYROXÈNES FERROMÉGNÉSIENS ET CALCIFIQUES (B) :

A) A partir de la formule structurale ainsi établie, il est possible de calculer **les composants principaux** de ce pyroxène moyennant quoi on suppose celui-ci formé uniquement de diopside-hédénbergite, jadéite et acmite (ou aegirine).

1) Calcul du diopside et de l'hédenbergite :

Il est possible de créer 0,911 molécule de diopside (car $Mg_{Tot} = 0,911$) qui mobilise la même quantité de calcium (noté Ca_{Dio}). Ainsi on peut calculer la quantité de calcium qui va rester pour s'associer au Fe^{2+} afin de former la molécule d'hédenbergite (noté Ca_{Hed}).

Pour résumer :

- **Quantité de diopside** = $Mg_{Tot} = 0,911$ molécule. Donc 0,911 Ca_{Diop} est associé au magnésium dans le diopside.
- **Quantité d'hédenbergite** = $Ca_{Hed} = Ca_{Tot} - Ca_{Diop} = 0,971 - 0,911 = 0,060$ molécule.

2) Calcul de la jadéite :

Au 0,039 Na de la formule structurale (noté Na_{Tot}) ne peut être associé que 0,020 Al (noté Al_{Tot}) (car il n'y en a pas plus ici, voir les résultats de l'étape C5). Il ne peut donc se former que cette dernière quantité de Jadéite, autrement dit :

- **Quantité de jadéite** = $Al_{Tot} = Na_{jad} = 0,020$ molécule.

A cette 0,20 quantité d'Al sera associée 0,20 Na pour former la jadéite (notée Na_{jad}).

3) Calcul de l'acmite (aegirine) :

Le calcul de la jadéite nous permet de savoir qu'il y a 0,20 Na associé au 0,20 Al (car la formule de la jadéite est $\text{NaAl}(\text{SiO}_3)_2$). La quantité de Na restante (notée Na_{Ac}) sera celle susceptible de s'associer à autant de Fe^{3+} pour donner l'acmite. Ainsi :

- **Quantité d'acmite** = $\text{Na}_{\text{Ac}} = \text{Na}_{\text{Tot}} - \text{Na}_{\text{jad}} = 0,039 - 0,020 = \mathbf{0,019}$ molécule.

4) Teneur en pôles purs :

A partir des calculs précédents on pourra **calculer la teneur en pôles purs principaux** de l'échantillon. Il faudra avant tout calculer la somme (Σ) des quantités de diopside, hédénbergite, jadéite et acmite précédemment calculées. Ensuite il sera possible de calculer le pourcentage de la teneur en pôles purs en faisant une règle de 3. Le résultat est présenté sous forme de diagramme ternaire à la *figure 11*.

$$\Sigma = \text{diopside} + \text{h  denbergite} + \text{jad  ite} + \text{acmite} = 0,911 + 0,060 + 0,020 + 0,019 = 1,01$$

Ainsi :

- **Teneur en diopside** = (Quantité de diopside / Σ) \times 100 \Leftrightarrow (0,911/1,01) \times 100 = **90,198 %**
 - **Teneur en hédénbergite** = (Quantité d'hédénbergite / Σ) \times 100 \Leftrightarrow (0,060/1,01) \times 100 = **5,941 %**
 - **Teneur en jadéite** = (Quantité de jadéite / Σ) \times 100 \Leftrightarrow (0,020/1,01) \times 100 = **1,980 %**
 - **Teneur en acmite** = (Quantité de acmite / Σ) \times 100 \Leftrightarrow (0,019/1,01) \times 100 = **1,881 %**
- => le tout devant être égale à 100%, ici la somme est égale à 99,999%

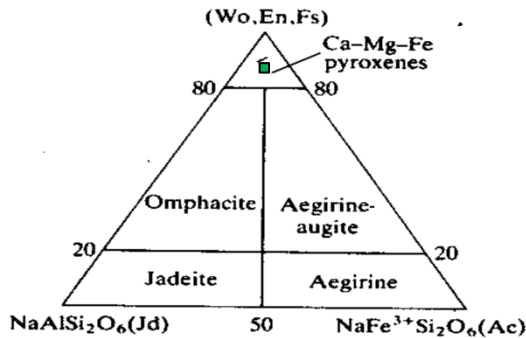


Figure 11 : Diagramme ternaire des clinopyroxènes avec les clinopyroxènes sodiques à la base et les clinopyroxènes ferromagnésiens et calciques au sommet (avec Wo pour Wollastonite, En pour Enstatite et Fs pour Ferrosilite). Le carré vert représente l'échantillon MB16. (Deer et al., 1992)

- B)** Si on le souhaite, on peut également **calculer la teneur en pôles purs de la série des clinopyroxènes ferromagnésiens et calciques** en utilisant la méthode générale du calcul de la teneur en pôles purs expliquée dans la méthode du Pr. Lasnier (et qui est expliquée dans ce mémoire pour les autres échantillons).

Pour cela il suffit de récupérer les nombres de cations associés à 6 oxygènes correspondant aux différents pôles purs du minéral étudié, ici : Ca (wollastonite), Fe²⁺ (clinoferrosilite) et Mg (clinoenstatite) calculés à l'étape 5, puis les multiplier par 100 (pour obtenir un pourcentage), puis diviser le tout par la somme du nombre de cations de tous les pôles purs (Σ). Cette formule permettra de calculer les pourcentages de chaque pôle pur présent dans la formule chimique du minéral étudié. Les résultats sont présentés sous forme de diagramme ternaire (figure 10. a) et sous forme de diagramme à secteurs (figure 10. b).

Ici $\Sigma = 0,971(\text{Ca}) + 0,031(\text{Fe}^{2+}) + 0,911(\text{Mg}) = 1,913$.

Ainsi on obtient :

- Ca = (0,971 \times 100) / 1,913 = **50,758 % du pôle wollastonite.**
- Fe²⁺ = (0,031 \times 100) / 1,913 = **1,620 % du pôle clinoferrosilite.**
- Mg = (0,911 \times 100) / 1,913 = **47,622 % du pôle clinoenstatite.**

b. Tableau récapitulatif

Dans son cours, le Pr. Lasnier explique deux méthodes pour calculer la formule structurale des pyroxènes. La première méthode simplifiée quasiment semblable à celle réalisée pour la famille des grenats, et une deuxième méthode plus complexe tendant à calculer tous les composants des pyroxènes, y compris certains membres des pyroxènes sodiques.

Dans le cadre de ce mémoire nous nous bornerons à suivre la méthode simplifiée permettant ainsi un calcul simple mais correct dans le cadre d'étude de formules structurales adaptées à la gemmologie.

Tableau récapitulatif de la méthode de calculs et des résultats appliquée à l'échantillon MB16 (page suivante) :

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev

C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 \Leftrightarrow (C1/C2) x 1000

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation \Leftrightarrow C3 x nO

C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (Σ oxygènes)
Puis, calculer le nombre de cations associés à 6 oxygènes : nombre de cations x nombre d'oxygènes (6) / Σ oxygènes \Leftrightarrow (C3 x 6) / Σ oxygènes

OPTION 1) Établissement de la formule structurale : récupérer le nombre de cations associés à 6 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale du minéral étudié.

	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	47,25 %	60	787,5	1575	2,006	Si _{2,006}
Al ₂ O ₃	0,41 %	51	8,039	12,059	0,020	Al ^{IV} ₀ Al ^{VI} _{0,02}
MgO	14,30 %	40	357,5	357,5	0,911	Mg _{0,911}
Na ₂ O	0,47 %	31	15,161	15,161	0,039	Na _{0,039}
CaO	21,34 %	56	381,071	381,071	0,971	Ca _{0,971}
Cr ₂ O ₃	0,50 %	76	6,579	9,869	0,017	Cr _{0,017}
FeO	0,87 %	72	12,083	12,083	0,031	Fe _{0,031}
	= 85,15 %			Σ oxygènes = 2355,433		

OPTION 2)

A) Calcul de la teneur des principaux pôles purs des pyroxènes :

a) Calcul des quantités de composants principaux :

Diopside = Mg_{C5} = 0,911 molécule ; Hédenbergite = (Ca_{C5} - Mg_{C5}) = 0,971 - 0,911 = 0,6 molécule
Jadéite = Al_{C5} = 0,020 molécule ; Acmite (aegirine) = (Na_{C5} - Al_{C5}) = 0,039 - 0,020 = 0,019 molécule

b) Calcul de la teneur en pôles purs :

Teneur pour chaque pôle pur = (C5 du pôle pur / Σ des quantités des composants principaux) x 100.

(avec Σ des composants principaux [diopside + hédenbergite + jadéite + acmite] = 0,911 + 0,060 + 0,020 + 0,019 = 1,01)

(quantité de diopside / Σ) x 100 \Leftrightarrow (0,911/1,01) x 100 = **90,198 % de diopside**
(quantité d' hédenbergite / Σ) x 100 \Leftrightarrow (0,060/1,01) x 100 = **5,941 % d' hédenbergite**
(quantité de jadéite / Σ) x 100 \Leftrightarrow (0,020/1,01) x 100 = **1,980 % de jadéite**
(quantité de acmite / Σ) x 100 \Leftrightarrow (0,019/1,01) x 100 = **1,881 % d'acmite (ou aegirine)**

B) Calcul de la teneur en pôles purs de la série des clinopyroxènes ferromagnésiens et calciques :

Teneur pour chaque pôle pur = (C5 du pôle pur / Σ des C5 des pôles purs) x 100.

(avec Σ des C5 de Ca + Fe²⁺ + Mg = 0,971 + 0,031 + 0,911 = 1,013)

Ca = (C5_{Ca} / Σ C5) x 100 = (0,971 / 1,013) x 100 = **50,758 % de wollastonite**
Fe²⁺ = (C5_{Fe2+} / Σ C5) x 100 = (0,031 / 1,013) x 100 = **1,620 % de clinoferrrosilite**
Mg = (C5_{Mg} / Σ C5) x 100 = (0,911 / 1,013) x 100 = **47,622 % de clinoenstatite**

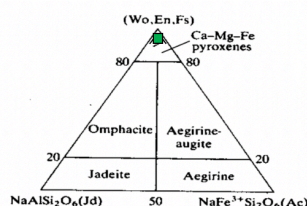
En intégrant les résultats de l'option 1 dans la formule générale des pyroxènes :

W (X, Y) Z₂ O₆, la formule structurale du pyroxène étudié est donc :

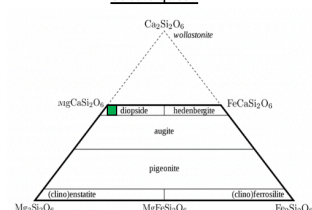
\rightarrow (Na_{0,039} Ca_{0,971} Mg_{0,911} Fe²⁺_{0,031} Cr_{0,017} Al^{VI}_{0,02}) Si_{2,006} O₆

Selon les résultats de l'option 2 :

A) Les teneurs en pôles purs principaux du pyroxène :



B) Les teneurs en pôles purs de la série des clinopyroxènes ferromagnésiens et calciques :



\rightarrow dessiner un carré sur les diagrammes ci-contre représentant l'échantillon

B. Méthode de calcul inspirée de la « Méthode HANNEMAN »

a. Détails des calculs

Dans son livre « Naming Gem Garnets », Hanneman propose une méthode de calcul simplifiée permettant de connaître la teneur en pôle pur d'un minéral (Hanneman, 2000).

Sachant que la formule des variétés du groupe des clino-pyroxènes est : X Y (Si₂O₆) ; le calcul sera basé sur les cations CaO, MgO et FeO correspondant respectivement aux trois pôles purs wollastonite, clinoenstatite et clinoferrrosilite.

1) Au préalable, récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes (notés Ox%) donnés par l'analyse chimique

Elt	Formule	Ox%
O		0.00
Mg	MgO	14.30
Ca	CaO	21.34
Fe	FeO	0.87

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev)

- CaO = 40,078 (Ca) + 15,999 (O) = 56
- MgO = 24,305 (Mg) + 15,999 (O) = 40
- FeO = 55,945 (Fe) + 15,999 (O) = 72

3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire. Les résultats sont arrondis au millièmes supérieur.

- CaO : 21,34 / 56,08 = 0,381
- MgO : 14,30 / 40,30 = 0,355
- FeO : 0,87 / 71,94 = 0,012

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.

- $S = 0,381 + 0,355 + 0,012 = 0,748$

5) Multiplier par (100/S) les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde.

- Ici, $100 / S = 100 / 0,748 = 133,690$
- Ainsi :
 - o $\text{CaO} : 0,381 \times 133,690 = 50,936$
 - o $\text{MgO} : 0,355 \times 133,690 = 47,459$
 - o $\text{FeO} : 0,012 \times 133,690 = 1,604$

OPTION 1 : Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final. S'il est <70% alors c'est un mélange entre deux phases solides.

→ normalement la somme des pourcentages des pôles devrait être égale à 100%, ici elle est égale à 100%

La teneur en pôles purs est donc :

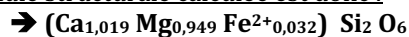
- Pourcentage du pôle wollastonite = 50,94 %
- Pourcentage du pôle clinoenstatite = 47,46 %
- Pourcentage du pôle clino ferrosilite = 1,60 %

OPTION 2 : Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier par 2/S les résultats obtenus en 3 pour chaque oxyde (2 correspondant au nombre de cations des sites W, X et Y).

- Ici $2 / S = 2 / 0,748 = 2,674$
- Ainsi :
 - o $\text{CaO} : 0,381 \times 2,674 = 1,019$
 - o $\text{MgO} : 0,355 \times 2,674 = 0,949$
 - o $\text{FeO} : 0,012 \times 2,674 = 0,032$

→ normalement la somme des cations représentant les pôles purs doit être égale à 2, ici elle est égale à 2

La formule structurale calculée est donc :



(ps : à noter qu'avec cette méthode seuls les cations K, Na et Ca peuvent ici être calculés)

b. Tableau récapitulatif

Tableau récapitulatif de la méthode de calculs et des résultats appliquée à l'échantillon MB16 :

	1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique	2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleiev)	3) Diviser le pourcentage de chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).	4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.	5) Multiplier par 100/S les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux. Ici $100/S = 100 / 0,748 = 133,690$	OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final. Si il est <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.	OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 2/S (2 correspondant au nombre de cations des sites W, X et Y), avec ici $2/S = 2 / 0,748 = 2,674$
CaO (pôle wollastonite)	21,34 %	56	0,381	50,936	50,94 %	Ca _{1,019}	
MgO (pôle clino-enstatite)	14,30 %	40	0,355	47,459	47,46 %	Mg _{0,949}	
FeO (pôle clino-ferrosilite)	0,87 %	72	0,012	1,604	1,60 %	Fe _{0,032}	
			4) S = 0,748		Total = 100 %		

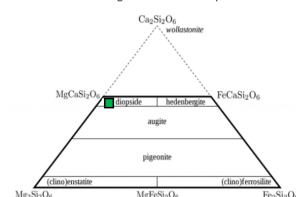
En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des pyroxènes :

$W(X,Y)Z_2O_6$, la formule structurale du pyroxène étudié est donc :
(La valeur de Si n'est pas calculable par cette méthode et correspond à la valeur théorique)



Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du pyroxène étudié est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon



C. « Méthode GABBROSOFT »

Le site internet Gabbrosoft (Gabbrosoft, 2011) propose des feuilles de calcul Excel permettant de calculer les pourcentages des pôles purs simplement en entrant les pourcentages d'oxydes de chaque élément donné par l'analyse chimique.

Dans la feuille de calcul correspondant à la famille des pyroxènes, appelée PYXCALC, les résultats de l'analyse chimique sont à entrer dans les colonnes B5 à B15.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	PYROXENE CALCULATION SHEET											
2	© GabbroSoft 2011											
3												
4		Wt%	Mol Prop	At Prop O	No anions	Formula		Normalised				
5	SiO2	47,250	0,786	1,573	4,016	Si	2,008	2,012				
6	TiO2	0,000	0,000	0,000	0,000	Ti	0,000	0,000				
7	Al2O3	0,410	0,004	0,012	0,031	Al	0,021	0,021				
8	Cr2O3	0,500	0,003	0,010	0,025	Cr	0,017	0,017				
9	FeO	0,870	0,012	0,012	0,031	Fe(II)	0,031	0,031				
10	MnO	0,000	0,000	0,000	0,000	Mn	0,000	0,000				
11	MgO	14,300	0,355	0,355	0,906	Mg	0,906	0,908				
12	CaO	21,340	0,381	0,381	0,972	Ca	0,972	0,973				
13	Na2O	0,470	0,008	0,008	0,019	Na	0,039	0,039				
14	K2O	0,000	0,000	0,000	0,000	K	0,000	0,000				
15	TOTAL	85,140		2,350		TOTAL	3,993	4,000		T/S	1,002	
16												
17				No Oxyg	6,000							
18				T2	2,553							
19												
20	SiO2	47,250		Si	2,008	Fe(II)		0,053				
21	TiO2	0,000		Al	-0,008	Fe(III)		-0,022				
22	Al2O3	0,410				Fe2/(Fe2+Fe3)		1,714				
23	Cr2O3	0,500		Al	0,029	Fe3/(Fe3+Fe2)		-0,714				
24	Fe2O3	0,000		Fe(III)	0,000							
25	FeO	0,870		Cr	0,017							
26	MnO	0,000		Ti	0,000							
27	MgO	14,300		Fe(II)	0,031	Wo		49,89		Wo		50,91
28	CaO	21,340		Mn	0,000	En		46,53		En		47,47
29	Na2O	0,470		Mg	0,906	Fs		1,59		Fs		1,62
30	K2O	0,000		Ca	0,972	Ac		1,99				
31	TOTAL	85,140		Na	0,039							
32				K	0,000							
33				TOTAL	3,993							
34	MOLECULAR WEIGHTS											
35	SiO2	60,08										
36	TiO2	79,88										
37	Al2O3	101,96										
38	Cr2O3	151,99										
39	FeO	71,85										
40	MnO	70,94										
41	MgO	40,30										
42	CaO	56,08										
43	Na2O	61,98										
44	K2O	94,20										
45												

Voici l'explication des résultats des différentes colonnes de la méthode Gabbrosoft :

Note : chaque calcul détaillé ci-dessous possède la même couleur que la colonne du tableau ci-dessus à laquelle il correspond.

Colonne A5 à A14 = Cations détectés dans l'analyse MEB

Colonne B5 à B14 = Pourcentages pondéraux d'oxydes

B15 = Total des pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse

→ Données de l'analyse chimique

Colonne B35 à B44 = Calculer le poids moléculaire pour chaque cation

→ Données par la masse atomique relative de chaque élément données dans le tableau de Mendeleïev

Colonne C5 à C14 = Nombre de cations

→ Pourcentages pondéraux d'oxydes divisé par le poids moléculaire calculé pour chaque cation

Colonne D5 à D14 = Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations

→ Nombre de cations (colonne C) multiplié par le nombre d'oxygènes associés à chaque oxyde

D15 = somme des oxygènes associés à chacun des cations

Colonne E5 à E14 = Nombre d'anions

→ Nombre d'oxygènes associés à chacun des cations (colonne D) / T2 (E18)

E17 = Nombre d'oxygènes dans la formule structurale de base

→ Le calcul de Gabbrosoft est basé sur 6 oxygènes

E18 = T2 = Nombre d'oxygènes 6 (E17) / somme des oxygènes (D5 à D14)

Colonne G5 à G14= Nombre de cations associés à 6 oxygènes

→ Nombre d'anions (colonne E) divisé par le nombre d'oxygènes associés à chaque cation

G15 = Somme des nombres de cations associés à 24 oxygènes

Colonne H5 à H14= Nombre de cations associés à 6 oxygènes

→ Résultats de la colonne G5 à G14 normalisés à 4 (nombre de cations associés à 6 oxygènes chez les pyroxènes).

H15 = Somme des nombres de cations associés à 6 oxygènes

Colonne B20 à B31 : Recalcule des pourcentages d'oxydes avec la proportion de Fe²⁺ et de Fe³⁺. Ici tout le fer est du fer ferreux (Fe²⁺) car le fer ferrique Fe³⁺ est égal à 0.

Colonne E20 à E33 : Recalcule de la formule structurale à partir des pourcentages d'oxydes de la colonne B20 à B31.

G/H27 à G/H30 = Pourcentages en pôles purs :

- **Wollastonite, Wo** (Ca) : Nombre de Ca(E30) divisé par la somme des cations Ca(E30), Mg(E29), Mn(E28), Fe²⁺(0,027), Fe³⁺(E24), Na(E31), puis multiplié par 100
- **Clinoferrosilite, Fs** (Fe) : Somme des cations Fe²⁺(E27), Mn(E28) et Fe³⁺(E24) divisé par la somme des cations Mg(E29), Mn(E28) Fe²⁺(27), Fe³⁺(E24), Ca(E30) et Na(E31).
- **Clinoenstatite, En** (Mg) : Nombre de Mg(E29), divisé par la somme des cations Ca(E30), Mg(E29), Mn(E28), Fe²⁺(0,027), Fe³⁺(E24), Na(E31), puis multiplié par 100
- **Acmite, Ac** (Na) : Nombre de Na(E31), divisé par la somme des cations Ca(E30), Mg(E29), Mn(E28), Fe²⁺(0,027), Fe³⁺(E24), Na(E31), puis multiplié par 100

J/K27 à J/K29 = Pourcentages en pôles purs (sans prendre en compte l'Acmite) :

- **Wollastonite, Wo** (Ca) : Nombre de Ca (E30) divisé par la somme des cations Ca(E30), Mg(E29), Mn(E28), Fe²⁺(0,027) et Fe³⁺(E24), puis multiplié par 100
- **Clinoferrosilite, Fs** (Fe) : Somme des cations Fe²⁺(E27), Mn(E28) et Fe³⁺(E24) divisé par la somme des cations Mg(E29), Mn(E28) Fe²⁺(27), Fe³⁺(E24) et Ca(E30).
- **Clinoenstatite, En** (Mg) : Nombre de Mg(E29), divisé par la somme des cations Ca(E30), Mg(E29), Mn(E28), Fe²⁺(0,027) et Fe³⁺(E24), puis multiplié par 100

LA TENEUR EN PÔLES PURS : Elle est directement obtenue grâce aux colonnes G/H27 à 3G/H30 si l'on souhaite la teneur en acmite ou à partir des colonnes J/K27 à J/K29 sans la teneur en acmite.

Pôles purs	Sans l'Acmite	Avec l'Acmite
Pôle Wollastonite	49,89 %	50,91%
Pôle Clino-Ferrosilite	1,59%	1,62 %
Pôle Clino-Enstatite	46,53%	147,47 %
Pôle Acmite	1,99 %	<i>Non calculé</i>

→ Leur somme est égale à 100 %

LA FORMULE STRUCTURALE : La colonne H5 à H14 (recalculée) donne le nombre de chaque cation associé à 6 oxygènes.

La formule structurale calculée est donc (on ne peut distinguer les sites W, X et Y avec cette méthode de calcul) :

→ **(Ca_{0,973} Fe²⁺_{0,031} Na_{0,039} Mg_{0,908} Cr_{0,017} Al_{0,021}) Si_{2,012} O₆**

CHAPITRE IV : DISCUSSION

Dans ce chapitre nous nous efforcerons de répondre aux problématiques énoncées en début de ce mémoire.

Une **première partie** de cette discussion sera faite sur la **comparaison des résultats** entre les trois méthodes de calcul, que ce soit au niveau des formules structurales mais également des teneurs en pôles purs. Puis une **comparaison aux résultats retrouvés dans la littérature** sera faite, et lorsque ce sera possible, en les comparant à des échantillons provenant des mêmes localités que les localités données lors de l'achat.

Une **seconde partie** détaillera et analysera les causes des problèmes rencontrés pour le calcul de chaque méthode.

Une **dernière partie** comparera les prérequis et limites rencontrées pour chaque méthode, et récapitulera sous forme de **tableau** simple et clair les avantages et inconvénients de chaque méthode.

I. PERTINENCES DES RÉSULTATS ET COMPARAISON À LA LITTÉRATURE

1. Tableaux récapitulatifs des résultats des trois méthodes par échantillon

		LASNIER	HANNEMAN	GABBROSOFT
	Teneur en pôles purs	Pôle pyrope = 36,263 % Pôle almandin = 3,996 % Pôle spessartite = 54,966 % Pôle grossulaire = 5,806 % Pôle andradite = 0%	Pôle pyrope = 36,031 % Pôle almandin = 3,969 % Pôle spessartite = 54,199 % Pôle grossulaire-andradite = 5,801 %	Pôle pyrope = 36,008 % Pôle almandin = 3,993 % Pôle spessartite = 54,204 % Pôle grossulaire-andradite = 5,796 %
	Formules Structurales	$(\text{Mn}_{1,701} \text{Mg}_{1,143} \text{Ca}_{0,183} \text{Fe}^{2+}_{0,125}) (\text{V}_{0,065} \text{Al}^{\text{VI}}_{1,838}) (\text{Si}_{2,978} \text{Al}^{\text{IV}}_{0,022} \text{O}_{12})$	$(\text{Mn}_{1,626} \text{Mg}_{1,081} \text{Fe}_{0,199} \text{Ca}_{0,174}) \text{Al}_2 (\text{SiO}_4)_3$	$(\text{Mn}_{1,723} \text{Mg}_{1,144} \text{Fe}_{0,127} \text{Ca}_{0,184}) \text{Al}_{1,879} (\text{Si}_{3,002} \text{O}_{12})$
MB03	Résultats	<p>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA TENEUR EN PÔLE PURS :</p> <ul style="list-style-type: none"> - Pour les trois méthodes de calcul, l'échantillon est considéré comme un pyrope-spessartite à majorité spessartite avec une faible composante grossulaire et almandin. - Seule la méthode Lasnier permet de calculer séparément les pôles grossulaire et andradite, cependant leur somme correspond au résultat du calcul du pôle grossulaire-andradite calculé par les deux autres méthodes. <p>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA FORMULE STRUCTURALE :</p> <ul style="list-style-type: none"> - Les résultats des formules structurales sont semblables à l'unité près et parfois à la dixième près, concernant les cations Mn, Mg, Ca et Fe calculés dans les trois méthodes ou pour les cations Al et Si entre les méthodes Lasnier et Gabbrosoft. - Seule la méthode Lasnier permet de calculer la formule structurale du Vanadium de l'échantillon. - La méthode Lasnier permet de calculer la formule structurale de l'Al et du Si, la méthode Gabbrosoft le peut aussi mais indirectement (après une petite conversion). La méthode Hanneman ne le permet pas, il faudra utiliser les valeurs théoriques de Al et Si. <p>COMPARAISON À LA LITTÉRATURE :</p> <p>Dans la littérature plusieurs grenats à changement de couleur (de couleur bleu ou approchante) ont été étudié provenant de trois localités différentes, à Bekily (au sud de Madagascar), à Tranoroa (au nord de Madagascar) et dans une région à la frontière Tanzanienne et Kenyane.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Les grenats tanzaniens montrent un faible degré de changement de couleur allant du bleu au bleu-vert, plus ou moins prononcée en fonction de la teneur en vanadium qui est considérée comme élevée (1,63 à 2,27% d'oxyde). Selon l'étude, ces grenats correspondent à une composition de pyrope-spessartite majoritairement spessartite (environ 41,03 à 43,50%) par rapport au pyrope (36,51 à 40,23%) avec une faible composante de grossulaire (8,38 à 9,65%), de goldmanite (4,99 à 7,04%) et d'uvarovite 0,87 à 1,25%) (Sun et al., 2017). - Les grenats malgaches de la région de Bekily montrent un degré de changement de couleur prononcé allant du bleu au pourpre due à une teneur importante en vanadium (0,89% à 1,25). Ces grenats correspondent à une composition de pyrope-spessartite généralement majoritairement pyrope (43 à 51%) par rapport au spessartite (36 à 44%) ainsi qu'une faible composante d'almandin (5,5 à 7%) et de grossulaire (1,6 à 3%). (Schmetzer et Bernhardt., 1999). - Les grenats malgaches de Tranoroa montrent eux un changement de couleur allant du rouge-pourpre brunâtre au rouge-pourpre dû à une teneur en chrome (0,67 à 0,75% d'oxyde) plus élevée qu'en vanadium (0,35 à 0,58% d'oxyde). Ils correspondent à pyrope-spessartite avec une majorité spessartite (50,99 à 55,26 %) par rapport au pyrope (32,68 à 39,46%) ainsi qu'une faible composante grossulaire (0,59 à 2,92%), goldmanite (1,07 à 1,81%) et uvarovite (2 à 2,25%). (Schmetzer et al., 2002) <p>La littérature semble donc confirmer que le grenat à changement de couleur étudié est bien un membre intermédiaire de la série pyrope-spessartite et que sa propriété de changement de couleur pourrait être due à sa teneur en vanadium élevée (2,13% d'oxyde). Cependant le grenat étudié correspond à une majorité spessartite (54%) par rapport au pyrope (36%) ce qui ne correspond pas aux résultats rapportés dans la littérature aux grenats de Bekily qui eux ont une composante majoritairement pyrope (43 à 51%). Cependant, la couleur et l'intensité du changement de couleur semblent correspondre. Comparé aux grenats tanzaniens, la teneur en spessartite bien que majoritaire elle aussi semble être moins élevée que celle de l'échantillon. De plus la couleur du changement de couleur ne semble pas le même que celui du grenat étudié. Comparé aux grenats provenant de Tranoroa, les teneurs en spessartite et pyrope semblent concorder avec celles l'échantillon. Cependant l'analyse de l'échantillon n'a pas présenté de trace de chrome qui est une cause majoritaire de la couleur et du degré de changement de couleur.</p> <p>CONCLUSION :</p> <p>Les résultats de l'analyse semblent bien se conformer à la littérature dans le sens qu'ils correspondent bien à un grenat de la série pyrope-spessartite. La teneur en vanadium pourrait corrélérer avec l'hypothèse qu'il soit à l'origine du phénomène de changement de couleur. Cependant on ne peut conclure sur la seule base de cette analyse, au fait que le grenat étudié corresponde bien à la localité de Bekily pour laquelle il a été acheté.</p>		

		LASNIER	HANNEMAN	GABBROSOFT
MB04	Teneur en pôles purs	Pôle pyrope = 46,297 % Pôle almandin = 52,291 % Pôle spessartite = 0 % Pôle grossulaire = 1,412 % Pôle andradite = 0 %	Pôle pyrope = 46,068 % Pôle almandin = 52,488 % Pôle spessartite = 0 % Pôle grossulaire-andradite = 1,445 %	Pôle pyrope. = 46,069 % Pôle almandin = 52,528 % Pôle spessartite = 0 % Pôle grossulaire-andradite = 1,402 %
	Formules Structurales	(Mg _{1,344} Ca _{0,041} Fe ²⁺ _{1,518} Al ^{VI} _{1,962} (Si _{3,077} O ₁₂))	(Mg _{1,382} Fe _{1,575} Ca _{0,043}) Al ₂ (SiO ₃) ₄	(Mg _{1,393} Fe _{1,588} Ca _{0,043}) Al _{2,048} (Si _{3,208} O ₁₂)
	Résultats	<p>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA TENEUR EN PÔLE PURS :</p> <p>- Pour les trois méthodes de calcul, l'échantillon est considéré comme un pyrope-almandin à majorité almandin avec une faible composante grossulaire-andradite. Les résultats sont semblables à l'unité près.</p> <p>- La méthode Lasnier permet de calculer séparément les teneurs en pôles grossulaire et andradite, contrairement aux méthodes Hanneman et Gabbrosoft qui ne les différencient pas. Cependant leur somme sont semblables.</p> <p>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA FORMULE STRUCTURALE :</p> <p>- Les formules structurales peuvent être considérées comme semblables car égales au dixième près pour les cations du site X et à l'unité pour les cations du site Y, lorsqu'il a été possible de les calculer.</p> <p>- La méthode Lasnier permet de calculer la formule structurale de l'Al et du Si, la méthode Gabbrosoft le peut aussi mais indirectement (après une petite conversion). La méthode Hanneman ne le permet pas, il faudra utiliser les valeurs théoriques de Al et Si.</p> <p>COMPARAISON À LA LITTÉRATURE :</p> <p>- La littérature rapporte que les grenats pourpres correspondent à des grenats de la série pyrope-almandin. Plusieurs études ont été faites sur des grenats pourpres provenant de différentes localités. Ainsi ceux provenant de la province Manica au centre du Mozambique ont été étudié et montrent une teneur en pyrope allant de 48.8 à 59.5%, en almandin allant de 37.9 à 47.6%, en spessartite allant de 0.5–0.6% et en grossulaire allant de 2.0 à 3.5%. Ces données semblent légèrement être différentes des résultats retrouvés pour cet échantillon. L'étude révèle aussi que la cause de la couleur serait due au Fe²⁺, Fe³⁺ et Mn²⁺ (Hanneman, 1983 ; Hanneman, 2000 ; Sangsawong et al., 2016).</p> <p>- Cependant d'autres études ont été faites sur des grenats pourpres provenant de Tanga en Tanzanie et Catandica au Mozambique (Rossman et al., 2015). Ils montrent les teneurs en pôles purs suivant : pyrope 49.00%, almandin 44.29%, grossulaire 5.10%, spessartite 0.52% et andradite 0.48% pour l'échantillon provenant de Tanzanie, et almandin 48.49%, pyrope 46.81%, grossulaire 3.57% et spessartite 0.44% pour ceux provenant du Mozambique. Même si ces résultats ne sont pas exactement les mêmes, ils restent tout de même semblables sachant que le nombre d'échantillons est restreint.</p> <p>- Ainsi si les résultats de l'analyse semblent bien correspondre à la littérature dans le sens qu'il correspond bien à un grenat de la série pyrope-spessartite, la teneur en pôle purs n'est pas exactement semblable et ne permet pas de donner un avis sur la provenance donnée lors de l'achat.</p>		
		<p>CONCLUSION :</p> <p>Les résultats de la littérature permettent donc de confirmer que l'échantillon correspond à l'analyse chimique d'un grenat pyrope-almandin, également appelé « rhodolite ». Le fer qu'il contient, bien qu'on ne puisse pas déterminer la quantité exacte de fer ferreux et ferrique, serait probablement la cause de la couleur pourpre. On ne peut néanmoins pas affirmer le lieu de la provenance exacte.</p>		

		LASNIER	HANNEMAN	GABBROSOFT
MB05	Teneur en pôles purs	Pôle pyrope = 59,945 % Pôle almandin = 32,411 % Pôle spessartite = 3,770 % Pôle grossulaire = 3,874 % Pôle andradite = 0 %	Pôle pyrope = 59,606 % Pôle almandin = 32,677 % Pôle spessartite = 3,777 % Pôle grossulaire-andradite = 3,941 %	Pôle pyrope = 59,725 % Pôle almandin = 32,608 % Pôle spessartite = 3,772 % Pôle grossulaire-andradite = 3,894 %
	Formules Structurales	(Fe ²⁺ _{0,937} Mn _{0,109} Mg _{1,733} Ca _{0,112}) Al ^{VI} _{1,971} Si _{3,075} O ₁₂	(Mg _{1,788} Mn _{0,113} Fe _{1,980} Ca _{0,118}) Al ₂ Si ₃ O ₁₂	(Mg _{1,765} Mn _{0,112} Fe _{0,964} Ca _{0,115}) Al _{2,023} Si _{3,152} O ₁₂
	Résultats	<p>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA TENEUR EN PÔLE PURS :</p> <p>- Pour les trois méthodes de calcul, l'échantillon est considéré comme un pyrope-almandin (ou rhodolite) à majorité pyrope avec une faible composante spessartite et grossulaire. Les résultats sont semblables à l'unité près.</p> <p>- La méthode Lasnier permet de calculer précisément les teneurs en pôles grossulaire et andradite, contrairement aux méthodes Hanneman et Gabbrosoft qui ne les différencient pas, cependant la somme de leurs résultats sont semblables.</p> <p>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA FORMULE STRUCTURALE :</p> <p>- Les formules structurales des trois méthodes semblent semblables car égales au dixième près, hormis pour la méthode Hanneman ou l'analyse du fer est bien plus haute que celle des deux autres méthodes. Cela peut être dû au fait que l'analyse chimique du MEB ne différencie pas le fer ferreux du fer ferrique. Dans les calculs développés dans cette méthode, on a d'emblée dû considérer que tout le fer était du fer ferreux (Fe²⁺).</p> <p>- La méthode Lasnier permet de calculer la formule structurale de l'Al et du Si, la méthode Gabbrosoft le peut aussi mais indirectement (après une petite conversion). La méthode Hanneman ne le permet pas, il faudra utiliser les valeurs théoriques de Al et Si.</p> <p>COMPARAISON À LA LITTÉRATURE :</p> <p>Selon la littérature, un grenat correspondant à une teneur allant de 70% de pyrope / 30% d'almandin à 70% d'almandin / 30 % de pyrope correspond à un membre intermédiaire de la série pyrope-almandin communément appelé rhodolite. (Stockton et Manson, 1985).</p>		
		<p>CONCLUSION :</p> <p>Les résultats de la littérature permettent de confirmer que l'échantillon correspond à l'analyse chimique d'un grenat pyrope-almandin, également appelé rhodolite.</p>		

		LASNIER	HANNEMAN	GABBROSOFT	Méthode Pothion
MB15	Teneur en pôles purs	Pôle grossulaire = 99,402 % Pôle andradite = 0,349 % Pôle uvarovite = 0,249 %	Pôle grossulaire = 99,524 % Pôle andradite = 0,238 % Pôle uvarovite = 0,238 %	Pôle grossulaire-andradite = 99,734 % Pôle pyrope = 0 % Pôle almandin = 0,266 % Pôle spessartite = 0 %	Pôle uvarovite = 0,3 % Pôle goldmanite = 0,2 % Pôle grossulaire = 99,1 % Pôle pyrope = 0 % Pôle almandin = 0,3 % Pôle spessartite = 0 %
	Formules Structurales	Ca_{2,744} (Fe³⁺_{0,007} Al^{VI}_{1,995} Cr_{0,005} V_{0,004}) Si_{3,122} O₁₂	Ca₃ (Fe³⁺_{0,005} Cr_{0,005} Al_{1,991}) Si₃ O₁₂	Ca_{2,782} (Fe³⁺_{0,008} Al_{2,037}) Si_{3,166} O₁₂	Ca_{2,74} (Fe³⁺_{0,01} Al_{1,995} Cr_{0,005} V_{0,004}) Si_{3,122} O₁₂
	Résultats	<p>Rappel : Pour cet échantillon, une quatrième méthode a été utilisée. Elle correspond à un calcul donné directement par un fichier Excel téléchargeable sur internet, car le site internet d'où a été téléchargé la feuille de calcul Gabbrosoft ne propose pas de fichier permettant de calculer les pôles de la série ugrandite séparément.</p> <p>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA TENEUR EN PÔLE PURS :</p> <ul style="list-style-type: none"> - Pour les méthodes Lasnier et Hanneman, l'échantillon est considéré comme grossulaire car sa teneur est supérieure à 70% avec une très faible composante andradite et uvarovite. - La méthode Gabbrosoft, elle, calcule les pôles pyrope, almandin et spessartite mais ne calcule pas séparément les pôles grossulaire, andradite et uvarovite (seulement les pôles grossulaire et andradite). Néanmoins son résultat considère l'échantillon comme étant un grenat faisant partie de la série des ugrandites. - La méthode Pothion, elle, calcule le pôle pur vanadifère golmanite et non le pôle ferreux andradite comme les deux autres méthodes. <p>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA FORMULE STRUCTURALE :</p> <ul style="list-style-type: none"> - Les formules structurales peuvent être considérées comme semblables car égales au centième près pour les cations lorsqu'il a été possible de les calculer. - La méthode Lasnier permet de calculer la formule structurale de l'Al et du Si, la méthode Gabbrosoft le peut aussi mais indirectement (après une petite conversion). La méthode Hanneman ne le permet pas, il faudra utiliser les valeurs théoriques de Al et Si. - Seule la méthode Lasnier permet de calculer la formule structurale du Vanadium de l'échantillon. <p>COMPARAISON À LA LITTÉRATURE :</p> <p>Les grenats dits « menthe » (nom commercial) correspondent à des grenats tsavorites, autrement dit des grenats grossulaires vanadifères verts mais ayant une faible teneur en chrome et ou vanadium ce qui leur donnent une couleur vert clair contrairement aux grenats tsavorites qui sont bien plus foncés (Manson et Stockton, 1982).</p> <p>Une étude chimique faite sur 105 grenats grossulaires révèle une teneur en grossulaire contenue entre 77,71 et 97,91% avec des teneurs plus faibles voire nulles dans le pôle pyrope mais également des pôles plus rares tel que la shorlomite et la knorringite (Manson et Stockton, 1982). Notre échantillon présente une teneur légèrement plus haute que la moyenne haute de l'article, cependant notre calcul n'est basé que sur 3 pôles contrairement à celui de l'article qui se base sur 9 pôles, ceci peut expliquer la légère différence dans les résultats finaux.</p>			
		<p>CONCLUSION :</p> <p>Les résultats retrouvés dans la littérature permettent donc de confirmer que l'échantillon correspond bien à l'analyse chimique d'un grossulaire et que le vanadium présent en trace pourrait être la cause de la couleur. Il est donc possible de le qualifier de grossulaire vert, et même de « grenat menthe » même si celle-ci correspond à une dénomination commerciale.</p>			

		LASNIER	HANNEMAN	GABBROSOFT
MB14	Teneur en pôles purs	Pôle forstérite = 91,442 % Pôle fayalite = 7,780 %	Pôle forstérite = 91,35 % Pôle fayalite = 8,65 %	Pôle forstérite = 91,364 % Pôle fayalite = 8,636 % Pôle téphroïte = 0%
	Formules Structurales	(Mg_{1,763} Fe²⁺_{0,165}) (Si_{1,036} O₄)	(Mg_{1,826} Fe²⁺_{0,173}) (SiO₄)	(Mg_{1,757} Fe²⁺_{0,166}) (Si_{1,038} O₄)
	Résultats	<p>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA TENEUR EN PÔLE PURS :</p> <ul style="list-style-type: none"> - Pour les trois méthodes de calcul, l'échantillon est considéré comme une forstérite car sa teneur en ce pôle est supérieure à 70%. - La méthode Gabbrosoft calcule en plus le pôle téphroïte (qui aurait par ailleurs pu être calculé avec les deux premières méthodes). <p>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA FORMULE STRUCTURALE :</p> <ul style="list-style-type: none"> - Les formules structurales peuvent être considérées comme semblables car égales à l'unité près pour les cations lorsqu'il a été possible de les calculer. - La méthode Lasnier permet de calculer la formule structurale du Si, la méthode Gabbrosoft le peut aussi mais indirectement (après une petite conversion). La méthode Hanneman ne le permet pas, il faudra utiliser les valeurs théoriques du Si. <p>COMPARAISON À LA LITTÉRATURE :</p> <p>L'olivine généralement connue sous le nom de « périclase » est en réalité une forstérite (Koivula, 1981).</p> <p>Ici les analyses montrent que l'échantillon est une forstérite car sa teneur en pôle magnésien est supérieure à 70%.</p> <p>Cependant, il est à noter que même si tous les composés intermédiaires de cette série sont appelés périclases, dans la littérature la majorité des périclases recensés ont généralement pour pourcentages de pôles purs : 85 à 95% de forstérite pour 5 à 15% de fayalite, et c'est bien le cas pour cet échantillon (Deer W. A. 1992 ; Koivula, 1981 ; Mindat, 2000).</p>		
		<p>CONCLUSION :</p> <p>La littérature permet donc de confirmer que la nature de l'échantillon correspond bien à l'analyse chimique d'une forstérite. Sa composition chimique et sa couleur verte caractéristique permettent de le qualifier de « périclase » (Deer, 1992 ; Koivula, 1981 ; Mindat, 2020).</p>		

		LASNIER	HANNEMAN	GABBROSOFT
MB07	Teneur en pôles purs	Pôle orthoclase = 87,719 % Pôle albite = 11,558 % Pôle anorthite = 0,722 %	Pôle orthoclase = 87,791 % Pôle albite = 11,628 % Pôle anorthite = 0,581 %	Pôle orthoclase = 87,77 % Pôle albite = 11,55 % Pôle anorthite = 0,67 %
	Formules Structurales	(K _{0,850} Na _{0,112} Ca _{0,007}) (Al _{0,997} Si _{3,009} O ₈)	(K _{0,878} Na _{0,116} Ca _{0,006}) (Al Si ₃ O ₈)	(K _{0,850} Na _{0,112} Ca _{0,007}) (Al _{0,997} Si _{3,008} O ₈)
	Résultats	<u>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA TENEUR EN PÔLE PURS :</u> - Pour les trois méthodes de calcul, l'échantillon est considéré comme une orthoclase car sa teneur est supérieure à 70%. - Par ailleurs, leurs résultats sont semblables au dixième près.		
		<u>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA FORMULE STRUCTURALE :</u> - Les formules structurales peuvent être considérées comme semblables car égales au dixième près pour les cations lorsqu'il a été possible de les calculer. - La méthode Lasnier permet de calculer la formule structurale de l'Al et du Si, la méthode Gabbrosoft le peut aussi mais indirectement (après une petite conversion). La méthode Hanneman ne le permet pas, il faudra utiliser les valeurs théoriques de Al et Si.		
		<u>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA FORMULE STRUCTURALE :</u> - La famille des feldspaths est composée de deux séries continues : les feldspaths alcalins (ou potassique) et les feldspaths plagioclases. Ici l'échantillon correspond à un feldspath potassique, plus précisément au pôle orthoclase, car la teneur dans ce pôle est supérieure à 70%. (Deer et al., 1992). Cela correspond à la littérature qui décrit les pierres de lune comme étant généralement des variétés de microclines ou d'orthoclases qui présentent un effet « Schiller » et une adularescence (Deer et al, 1992 ; Mindat, 2020 ; Ralph et Ralph, 2020 ; Arlabosse, 2020).		
		<u>CONCLUSION :</u> La littérature permet donc de confirmer que la nature de l'échantillon pourrait correspondre à l'analyse chimique d'un feldspath orthoclase. De plus, comme il possède une adularescence, il peut alors être appelé « pierre de lune ». (Arlabosse, 2020 ; Deer et al, 1992 ; Mindat, 2020 ; Ralph et Ralph, 2020)		

		LASNIER	HANNEMAN	GABBROSOFT
MB09	Teneur en pôles purs	Pôle orthoclase = 1,216 % Pôle albite = 39,615 % Pôle anorthite = 59,169 %	Pôle orthoclase = 1,156% Pôle albite = 39,595 % Pôle anorthite = 59,248 %	Pôle orthoclase = 1,16 % Pôle albite = 39,69 % Pôle anorthite = 59,15 %
	Formules Structurales	(K _{0,012} Na _{0,391} Ca _{0,584}) [Al _{1,532} Si _{2,458} O ₈]	(K _{0,012} Na _{0,396} Ca _{0,592}) [Al Si ₃ O ₈]	(K _{0,011} Na _{0,387} Ca _{0,577}) [Al _{1,515} Si _{2,426} O ₈]
	Résultats	<p><u>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA TENEUR EN PÔLE PURS :</u></p> <p>- Pour les trois méthodes de calcul, l'échantillon est considéré un membre intermédiaire de la série albite-anorthite, autrement dit un feldspath plagioclase avec une composition majoritaire d'anorthite, environ 60%, pour 40% d'albite.</p> <p><u>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA FORMULE STRUCTURALE :</u></p> <p>- Les formules structurales peuvent être considérées comme égales car les résultats pour chaque cation sont semblables au centième près, lorsqu'il a été possible de les calculer.</p> <p>- La méthode Lasnier permet de calculer la formule structurale de l'Al et du Si, la méthode Gabbrosoft le peut aussi mais indirectement (après une petite conversion). La méthode Hanneman ne le permet pas, il faudra utiliser les valeurs théoriques de Al et Si.</p> <p><u>COMPARAISON À LA LITTÉRATURE :</u></p> <p>- La famille des feldspaths est composée de deux séries continues : les feldspaths alcalins (ou potassique) et les feldspaths plagioclases. Ici l'échantillon correspond à un feldspath plagioclase, autrement dit à un mélange entre les pôles albite et anorthite. La littérature confirme également qu'une teneur contenue allant de 70% d'anorthite / 30% d'albite à 50% d'albite / 50% d'anorthite correspond à la variété de la labradorite (Deer et al, 1992 ; Mindat, 2020 ; Ralph et Ralph, 2020).</p>		
	<p><u>CONCLUSION :</u></p> <p>La littérature permet donc de confirmer que la nature de l'échantillon correspond bien à l'analyse chimique d'une labradorite gemme (variété de feldspath plagioclase).</p>			

		LASNIER	HANNEMAN	GABBROSOFT
MB10	Teneur en pôles purs	Pôle spinelle s.s. = 97,157 % Pôle hercynite = 2,843 % Pôle gahnite = 0 %	Pôle spinelle s.s. = 97,071 % Pôle hercynite = 2,929 % Pôle gahnite = 0 %	Non calculé
	Formules Structurales	(K _{0,008} Na _{0,062} Ba _{0,006} Ca _{0,004} Mg _{0,991} Mn _{0,006} Fe _{0,029} Si _{0,014} S _{0,111}) (V _{0,003} Cr _{0,003} Al _{1,926}) O ₄	(Mg _{0,973} Fe _{0,029}) Al ₂ O ₄	(Ca _{0,006} Mg _{0,993} Mn _{0,007} Si _{0,014} Fe _{0,030}) (V _{0,003} Cr _{0,003} Al _{1,944}) O ₄
	Résultats	<u>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA TENEUR EN PÔLE PURS :</u> - Pour les trois méthodes de calcul, l'échantillon est considéré un spinelle <i>stricto sensus</i> (car la teneur en pôle spinelle s.s. est supérieure à 70%) ayant une faible composante hercynite. - La méthode Gabbrosoft ne calcule pas la teneur en pôles purs mais donne néanmoins une formule structurale plus complète que la méthode Hanneman - mais moins que la méthode Lasnier - qui elle permet de calculer tous les cations détectés.		
		<u>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA FORMULE STRUCTURALE :</u> - Les formules structurales peuvent être considérées comme égales car les résultats pour chaque cation sont semblables au dixième près, lorsqu'il a été possible de les calculer. - La méthode Lasnier permet de calculer la formule structurale de l'Al, la méthode Gabbrosoft le peut aussi mais indirectement (après une petite conversion). La méthode Hanneman ne le permet pas, il faudra utiliser les valeurs théoriques de l'Al.		
		<u>COMPARAISON À LA LITTÉRATURE :</u> - En gemmologie, le « spinelle » au sens large correspond à la variété du spinelle s.s. Ici l'échantillon correspond également à un spinelle s.s. étant donné qu'il possède une teneur en spinelle s.s. supérieure à 70%. (Barthelmy, 2020 ; Deer et al, 1992 ; Munsch, 2017 ; Mindat, 2020).		
<u>CONCLUSION :</u> La littérature permet donc de confirmer que la nature de l'échantillon correspond bien à l'analyse chimique d'un spinelle s.s..				

		LASNIER	HANNEMAN	GABBROSOFT		
	Teneur en pôles purs	Pôle wollastonite = 50,758 % Pôle clinoférosilite = 1,620 % Pôle clinoenstatite = 47,622 % & Teneur en diopside = 90,198 % Teneur en hédénbergite = 5,941 % Teneur en jadéite = 1,980 % Teneur en acmite = 1,881 %	Pôle wollastonite = 50,94 % Pôle clinoférosilite = 1,60 % Pôle clinoenstatite = 47,46 %	Pôles purs	Avec l'acmite	Sans l'acmite
				Pôle wollastonite	49,89 %	50,91 %
				Pôle clinoférosilite	1,59 %	1,62 %
				Pôle clinoenstatite	46,53 %	47,47 %
				Pôle acmite	1,99 %	/
	Formules Structurales	(Na _{0,039} Ca _{0,971} Mg _{0,911} Fe ²⁺ _{0,031} Cr _{0,017} Al ^{VI} _{0,020} Si _{2,006} O ₆	(Ca _{1,019} Mg _{0,949} Fe ²⁺ _{0,032}) Si ₂ O ₆	(Ca _{0,973} Fe ²⁺ _{0,031} Na _{0,039} Mg _{0,908} Cr _{0,017} Al _{0,021}) Si _{2,012} O ₆		
MB16	Résultats	<u>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA TENEUR EN PÔLE PURS :</u> - Pour les trois méthodes de calcul, l'échantillon est considéré comme un clinopyroxène ferromagnésien et calcique car ayant une composition majoritairement composée de wollastonite et de (clino)enstatite avec une faible teneur en Na. - La méthode Lasnier permet en plus de calculer la teneur en composants principaux qui permet de classer l'échantillon en tant que diopside avec une faible composante d'hédénbergite et de clinopyroxène alcalin en tant que jadéite et d'acmite. - La méthode Gabbrosoft permet de calculer la teneur en pôles purs avec ou sans Acmite.				
		<u>RÉSULTATS & COMPARAISON DES MÉTHODES POUR LA FORMULE STRUCTURALE :</u> - Lorsqu'il a été possible de les calculer, les éléments calculés dans la formule structurale sont semblables car égaux au dixième près. - Concernant la formule structurale, les méthodes Lasnier et Gabbrosoft permettent de calculer la formule de tous les cations détectés lors de l'analyse. La méthode Hanneman ne calcule que les cations correspondant aux pôles principaux.				
		<u>COMPARAISON À LA LITTÉRATURE :</u> - Dans la littérature la composition du diopside a été rapportée comme telle : 50% pôle Mg, 1% pôle (Fe ²⁺ , Fe ³ , Mn), 49% pôle Ca ce qui correspond respectivement au pôles suivants : wollastonite, ferrosilite et enstatite. Cela correspond aux résultats des méthodes (Deer et al., 1992).				
<u>CONCLUSION :</u> La littérature permet donc de confirmer que la nature de l'échantillon correspond bien à l'analyse chimique d'un diopside.						

2. Conclusion des résultats et de la comparaison à la littérature

On remarquera que les trois méthodes donnent des résultats très similaires que ce soit pour les teneurs en pôles purs et pour les formules structurales, on peut conclure qu'elles sont raisonnablement comparables. La seule différence notable a été celle du calcul du fer dans la formule de l'échantillon **MB05** correspondant à un grenat rhodolite.

Toutes les méthodes ont permis pour chaque échantillon de confirmer la variété pour laquelle la gemme a été achetée, et parfois même donner une hypothèse quant à la cause de la couleur de la gemme étudiée (le vanadium pour MB03 et MB15, le fer pour MB04).

Cependant, concernant les localités, les données recueillies ne sont pas assez nombreuses pour pouvoir les comparer à des échantillons de localités semblables et avoir un résultat concluant.

II. PROBLEMES RENCONTRÉS LORS DES CALCULS

1. L'analyse du fer : différenciation entre fer ferreux et fer ferrique

La méthode d'analyse du MEB ne fait pas la différence d'analyse entre l'analyse du fer ferreux (Fe²⁺) et du fer ferrique (Fe³⁺), ainsi le fer total calculé correspond soit à l'un, soit à l'autre, sans que nous puissions directement les séparer.

Pour pallier à ce problème, il existe 3 solutions :

- Estimer que le fer total correspond soit entièrement à du fer ferreux ou soit au contraire, à du fer ferrique. Ce choix peut être orienté en regardant la formule théorique quand on a une idée de la nature de l'échantillon. Cette technique n'est pas idéale car pas vraiment exacte, mais elle permet d'obtenir une estimation proche de la formule structurale lorsqu'on ne peut pas utiliser les deux méthodes suivantes.
- Estimer via un calcul complexe la quantité de fer ferreux et ferrique en fonction de l'analyse du fer total. Plusieurs méthodes ont été proposées dans la littérature, la première par Droop (Droop, 1987) toutefois jugée complexe par Quinn qui en propose une seconde (Quinn et al., 2016). De nos jours sur internet, de nombreux sites proposent différentes méthodes pour recalculer les fers ferreux et ferriques à partir du fer total et ce, en fonction du minéral étudié (Masaki et al., 1995).
- Estimation la quantité de fer ferreux et ferrique à l'aide de l'absorption optique réalisé avec un spectromètre UV-Visible (Comm. pers. Fritsch, 2022).
- Calculer la quantité de fer ferreux et ferrique à l'aide d'un calcul complexe basé sur l'analyse de spectrométrie électronique. En effet, plusieurs auteurs proposent des méthodes de calcul basées sur l'analyse précise des pics du fer (intensité et position de la raie L du fer) détectés par cette méthode (Grant et Collerson, 1974 ; Zhang et al., 2018 ;

Schumacher, 2018 ; Lamb et al., 2012).

Dans ce mémoire, nous avons décidé d'utiliser la **première technique** parce que nous n'avions pas accès à une autre méthode d'analyse chimique permettant de différencier les deux états d'oxydation du fer mais également par soucis de simplicité (pour que la complexité de ces calculs « secondaires » n'interfère pas avec l'essentiel des méthodes que nous souhaitons expliquer ici).

Ainsi :

- Pour l'échantillon **MB05** : nous avons choisi de considérer que tout le fer était ferreux. Au vu de la formule finale et de son écart avec la formule théorique, il est probable qu'une partie non négligeable du fer corresponde en réalité à du fer ferrique.
- Pour les échantillons **MB03, MB04 et MB16** : le fer a été considéré comme du fer ferreux et il n'a pas été noté de différence notable entre les résultats des différentes méthodes.
- Pour l'échantillon **MB15** : supposé être un grenat « menthe » (un grossulaire), il a été choisi de considérer que tout le fer était du fer ferrique par rapport aux données de la littérature. La différence entre les résultats est tellement faible qu'ils peuvent être considérés comme semblables.
- Pour l'échantillon **MB14** : correspondant à un probable péridot (olivine), seul le fer ferreux entre dans la constitution.
- Pour les échantillons **MB07, MB09 et MB10** : aucune trace de fer n'a été détectée, ils ne sont donc pas concernés.

2. Différence entre formule théorique et résultats obtenus

Généralement la **somme de tous les cations d'un site est censée être égale ou fortement s'approcher de la valeur « théorique »** du site donnée par la formule théorique. Dans de rares cas lors de nos calculs, la **somme n'était pas égale** sans que ce ne soit dû à une erreur de calcul (la différence étant > 0,5).

Plusieurs causes ont été identifiées :

- *Le calcul du fer* : lorsqu'il est estimé approximativement par les deux premières méthodes expliquées au paragraphe précédent, il peut amener les résultats à être plus ou moins éloignés des valeurs théoriques. C'est le cas en particulier pour les calculs des sites X des grenats, qui sont calculés après les sites Z et Y (exemple : les sites X et Y de l'échantillon MB03 et le site X des échantillons MB04, MB05 et MB15).
- *Les arrondis* : dans ce travail nous avons arrondi au troisième chiffre supérieur après la virgule (contrairement par exemple à la méthode Lasnier qui arrondit au deuxième chiffre après la virgule étant donné que les calculs étaient faits à la main). Cependant, nous avons pu constater à de nombreuses reprises qu'une différence très petites (de l'ordre du dixième) pouvait amener à une différence importante dans les résultats finaux. Cela pourrait expliquer en partie les faibles différences retrouvées au niveau des résultats par rapport aux valeurs « théoriques ». C'est le cas par exemple pour le site Z de l'échantillon MB15 dont le résultat est égal à 3,122 au lieu de 3.
- *Marge d'erreur due à l'analyse chimique* : problèmes intrinsèques à la méthode d'analyse elle-même, au « bouclage » et autres (expliqués au chapitre II). Pour le vérifier il faudrait refaire l'analyse avec une méthode d'analyse chimique plus précise ou alors effectuer une moyenne sur plusieurs analyses réalisées sur l'échantillon. C'est peut-être le cas pour l'échantillon MB09 qui correspond à une Labradorite et dont la formule structurale de l'aluminium est égale à 1,532 au lieu de 1 et le silicium égal à 2,458 au lieu de 3, résultats similaires retrouvés par la méthode de calcul Gabbrosoft.

Deux calculs présentent des formules structurales non équilibrées, c'est-à-dire dont la somme des cations est éloignée de la somme « théorique ». C'est le cas pour l'échantillon MB04 dont le total de la somme de tous les cations associés à 12 oxygènes est égal à 7,942 au lieu de 8, ainsi que de l'échantillon MB15 dont le total de la somme est égal à 7,877 au lieu de 8. Peut-être est-ce dû aux problèmes évoqués dans les paragraphes ci-dessus. Dans nos calculs nous avons fait le choix de ne pas normaliser les résultats.

III. COMPARAISON DES MÉTHODES ENTRE ELLES

Après avoir comparé les résultats entre eux et à la littérature, nous allons nous intéresser aux méthodes mêmes. Nous allons les comparer en discutant des prérequis nécessaires et des limites rencontrées. Nous résumerons cela par un tableau récapitulatif des « plus » et des « moins » de chaque méthode afin de mieux comprendre les différences.

1. « Méthode LASNIER »

Pour cette méthode il est nécessaire de **comprendre les sites cristallographiques** de la gemme étudiée (pour savoir dans quels sites se placent chaque cations), mais aussi **les nombres de cations et d'oxygènes associés**, notions obligatoires pour réaliser les calculs.

Il faut également **savoir calculer le poids moléculaire des oxydes** à partir du tableau de Mendeleïev.

2. « Méthode HANNEMAN »

Tout comme pour la méthode de calcul du Pr. Lasnier, il faut connaître la **formule de base de l'échantillon** présumé ce qui permet de connaître les **nombre de cations et d'oxygènes** ainsi que les **pôles purs** qui entrent en jeu. Il faut également comprendre comment **calculer le poids moléculaire des molécules détectées**.

Une des limites principales de cette méthode est que **seules les formules structurales des pôles purs sont calculées**, pour les autres cations on doit s'en tenir aux formules structurales « théoriques ».

3. « Méthode GABBROSOFT »

Il n'y a **aucun prérequis**, il suffit simplement de récupérer les résultats de l'analyse chimique.

Cependant, des limites apparaissent rapidement :

- **Il n'a pas été possible de rajouter les éléments détectés dans l'analyse chimique et qui n'étaient pas déjà présents dans la fiche de calcul Excel** : comme par exemple pour l'échantillon MB10 correspondant à un spinelle s.s. où il n'a pas été possible de calculer pour la formule structurale les éléments Na, S, K et Ba.
- **Il n'a pas été possible de choisir les pôles purs à analyser** : ce qui, par exemple, nous a amenés à rechercher une autre méthode utilisant le programme Excel (Pothion) en plus de la méthode Gabbrosoft pour l'échantillon MB15 qui correspond à un grenat grossulaire. En effet la méthode Gabbrosoft ne calcule que les pôles purs pyrope, almandin, spessartite et grossulaire-andradite (sans faire la distinction). La méthode Pothion, elle, calcule les formules structurales et teneurs pour les pôles purs uvarovite, goldmanite, grossulaire, pyrope, almandin et spessartite.
- Pour certains minéraux, le calcul de la feuille Excel **recalcule directement les formules structurales des fers ferreux et ferriques** : c'est le cas par exemple pour l'échantillon MB10 qui correspond à un spinelle s.s.. Cependant pour certains minéraux comme les grenats (échantillons MB03, MB04, MB05 et MB15) aucun **recalcul du fer** n'est proposé, et pour le faire il faudrait modifier la feuille de calcul ce qui serait fastidieux à effectuer.
- Même s'il est facile d'obtenir les résultats, il est en réalité **difficile de les détailler**. Pour cela il faut être **familier du logiciel Excel** et savoir décrypter les formules dans les différentes cellules.

4. Tableau récapitulatif des points positifs et négatifs des différentes méthodes

Méthode « Lasnier »	Plus	- Méthode très détaillée - Donne la formule structurale complète de l'échantillon & la teneur en pôles purs - Choix possible des pôles purs que l'on souhaite calculer - Précision égale aux autres méthodes
	Moins	- Méthode très longue - Nombreux calculs induisant plus d'erreurs - Besoin de bien comprendre la nature de l'échantillon (sites cristallographiques, formule de base...) afin de connaître les sites, les nombres de cations et d'oxygènes associés etc. pour pouvoir faire les calculs - Savoir calculer les poids moléculaires des éléments détectés - Besoin d'avoir correctement calculé le Fe^{2+} et Fe^{3+} afin d'avoir une formule structurale la plus correcte possible
Méthode « Hanneman »	Plus	- Méthode rapide - Calculs peu compliqués - Choix des pôles purs que l'on souhaite calculer - Précision égale aux autres méthodes
	Moins	- Ne donne que la formule structurale des cations correspondant aux pôles purs choisis - Savoir calculer les poids moléculaires des éléments détectés - Besoin d'avoir correctement calculé le Fe^{2+} et Fe^{3+} afin d'avoir une formule structurale la plus correcte possible
Méthode « Gabbrosoft »	Plus	- Méthode très rapide - Donne la formule structurale complète de l'échantillon & la teneur en pôles purs (quand les cations calculés sont les mêmes que ceux détectés par l'analyse chimique). - Méthode efficace (précision égale aux autres méthodes) - Nul besoin de connaître la cristallographie ni de savoir calculer les poids moléculaires
	Moins	- Compliqué de comprendre les détails des calculs et de les retrouver - Les feuilles de calculs n'existent que pour certaines familles de gemmes - Il est très compliqué de modifier des paramètres (comme rajouter des oxydes détectés dans l'analyse chimique mais pas comptabilisés dans le calcul) - Pas de possibilité de choisir les pôles purs

CONCLUSION

En regard du travail effectué tout au long de ce mémoire, nous pouvons alors énoncer les conclusions suivantes :

- ⇒ Les 3 méthodes produisent des **résultats similaires** (au dixième près).
- ⇒ Elles **confirment les variétés** des gemmes achetées par rapport à la littérature mais pas forcément la provenance (quand cela a été possible de les comparer).
- ⇒ Chacune comporte **des points de facilités et de difficultés** quant à la longueur, la difficulté des calculs ou la maîtrise des calculs, mais aussi les connaissances de bases à avoir pour les utiliser (voir tableau Chapitre IV, III, 4.)

Au vu des conclusions précédemment citées, nous souhaitons répondre à la problématique de ce mémoire en proposant ci-dessous une manière de **choisir la méthode la plus appropriée** en fonction de l'objectif à atteindre, ainsi que des **fiches de travail sous forme de tableaux à compléter** pour guider les futurs gemmologues ayant besoin de calculer une formule structurale.

I. PROPOSITION SUR LE CHOIX DE LA MÉTHODE LA PLUS APPROPRIÉE EN FONCTION DE L'OBJECTIF À ATTEINDRE

Choix de la méthode dépend des objectifs à atteindre :

- Si on souhaite des résultats **très rapides** calculant la teneur en pôles purs & la formule structurale (après une petite conversion), sans besoin de connaître le détail du calcul, de le reproduire ou le modifier
⇒ Méthode *Gabbrosoft*
- Si on souhaite des résultats **rapides** pour savoir les teneurs en pôles purs et la formule structurale mais avec la **possibilité de choisir les pôles purs** à calculer et maîtriser son calcul
⇒ Méthode *Hanneman*
- Si on souhaite une **méthode précise, maîtrisée et scientifiquement acceptée** (article scientifique, publications ...) pour connaître la teneur en pôle pur & la **formule structurale complète** (calculée pour tous les oxydes), et si on a besoin de **connaître et comprendre les détails du calcul ou de l'adapter** :
⇒ Méthode *Lasnier*

II. FICHES DE TRAVAIL : TABLEAUX « À COMPLÉTER »

Les tableaux « à compléter » suivants ont été conçues pour que le gemmologue puisse réaliser les 3 méthodes de calcul pour chacune des 5 familles de gemmes étudiées dans ce mémoire.

Si un doute ou une difficulté apparaît lors de l'utilisation de l'une des fiches suivantes, il pourra se référer au chapitre approprié de ce mémoire.

Les fiches à compliquer sont également disponibles en versions agrandies à *l'annexe 4*.

FICHE RÉCAPITULATIVE : GRENAT (SÉRIE PYRALSPITE)

© Marine Bouvier – DUG de Nantes (2022)

FICHE RÉCAPITULATIVE DES GRENATS (SÉRIE PYRALSPITE) : Méthode Lasnier

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev

C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 $\Leftrightarrow (C1/C2) \times 1000$

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associé(s) à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation $\Leftrightarrow C3 \times nO$

C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations ($\Sigma_{oxygènes}$)
Puis, calculer le **nombre de cations associés à 12 oxygènes** : nombre de cations x nombre d'oxygènes (12) / $\Sigma_{oxygènes} \Leftrightarrow (C3 \times 12) / \Sigma_{oxygènes}$

	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	----	----	----	----	----	Si
Al ₂ O ₃	----	----	----	----	----	Al ^{IV} Al ^{VI}
V ₂ O ₃	----	----	----	----	----	V
MgO	----	----	----	----	----	Mg
MnO	----	----	----	----	----	Mn
CaO	----	----	----	----	----	Ca
FeO	----	----	----	----	----	Fe ²⁺
				$\Sigma_{oxygènes} =$		

OPTION 1) ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE : récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule selon les trois étapes ci-dessous :

1) Site Z (tétraédrique) = Il est occupé par le silicium (Si) et l'aluminium (Al^{IV})
Le nombre de cations du site Z étant égal à 3, l'Al^{IV} viendra combler le site Z. Ainsi Al^{IV} = 3 - Si = 3 - ----
Ici, Z = Si ---- + Al^{IV} ----

2) Site Y (octaédrique) = Il est occupé principalement par Al, Fe³⁺, Cr³⁺ et V³⁺.
L'Al^{VI} correspondra à la part d'aluminium qui n'occupe pas le site Z, autrement dit : Al^{VI} = Al - Al^{IV} = ---- - ---- = ----
Ici, Y = Fe³⁺ ---- + Al^{VI} ---- + V ----

3) Site X (dodécaédrique) = Il est principalement occupé par Fe²⁺, Mg, Mn et Ca.
Il suffit de récupérer les nombres de cations associés à 12 oxygènes calculés à l'étape C5, et les intégrer dans la formule ci-dessous.
Ici, X = Fe²⁺ ---- + Mn ---- + Mg ---- + Ca ----

Il suffit de présent d'intégrer les résultats ci-dessus dans la formule générale des grenats : X₃ Y₂ (Z₃ O₁₂).
Ainsi la formule structurale de l'échantillon est :
 $\rightarrow (Mg \text{ ---- } Mn \text{ ---- } Fe^{2+} \text{ ---- } Ca \text{ ---- }) (V \text{ ---- } Al^{VI} \text{ ---- }) (Si \text{ ---- } Al^{IV} \text{ ---- } O_{12})$

OPTION 2) CALCUL DES PÔLES PURS : PYROPE, ALMANDIN, SPESSARTITE, GROSSULAIRE et ANDRADITE
Calculs des 5 pôles purs grâce aux formules ci-dessous. Avec :
- Sx = Somme des cations du site X (calculé à l'étape C5) = ---- (Mg) + ---- (Fe²⁺) + ---- (Mn) + ---- (Ca) = ----
- Sy = Somme des cations du site Y (calculé à l'étape C5) = ---- (Ca) + ---- (Fe³⁺) = ----

	Pyrope	Almandin	Spessartite	Grossulaire	Andradite
Formule générale	(Mg _{C5} x 100) / Sx	(Fe ²⁺ _{C5} x 100) / Sx	(Mn _{C5} x 100) / Sx	((Ca _{C5} - ((Fe ³⁺ _{C5} / 2) x 3)) / Sx) x 100	((Fe ³⁺ _{C5} / 2) / Sy) x 100
Formule appliquée	(---- x 100) / ----	(---- x 100) / ----	(---- x 100) / ----	((---- - ((---- / 2) x 3)) / ----) x 100	((---- / 2) / ----) x 100
% en pôle pur	= ---- %	= ---- %	= ---- %	= ---- %	= ---- %

En intégrant les résultats de l'option 2, la teneur en pôles purs du grenat étudié est :
 \rightarrow dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

© Marine Bouvier – DUG de Nantes (2022)

FICHE RÉCAPITULATIVE DES GRENATS (SÉRIE PYRALSPITE) : Méthode Hanneman

1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev)

3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés en 3.

5) Multiplier les valeurs obtenues à l'étape 3 par 100/S pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux.
Ici $100 / S = 100 / \text{----} = \text{----}$

OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur.
Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final.
Si il est <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.

OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 3/5 (3 correspondant au nombre de cations du site X), avec ici $3/S = 3 / \text{----} = \text{----}$

	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
FeO (pôle almandin)	----	----	----	----	----	Fe
MgO (pôle pyrope)	----	----	----	----	----	Mg
MnO (pôle spessartite)	----	----	----	----	----	Mn
CaO (pôle grossulaire-andradite)	----	----	----	----	----	Ca
			4) S =		Total =	

En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des grenats de la série pyralspite : X₃ Y₂ (Z₃ O₁₂), la formule structurale du grenat étudié est donc :
(Les valeurs de Al et Si ne sont pas calculables par cette méthode et correspondent à leurs valeurs théoriques. V n'est pas calculable ici)
 $\rightarrow (Mg \text{ ---- } Mn \text{ ---- } Fe \text{ ---- } Ca \text{ ---- }) Al_2 (SiO_4)_3$

En intégrant les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du grenat étudié est :
 \rightarrow dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

GRENATS (SÉRIE PYRALSPITE) : Méthode Gabbrosoft

Ci-contre le lien conduisant au fichier Excel des grenats de la série pyralspite de la méthode Gabbrosoft.

\rightarrow <http://www.gabbrosoft.org/spreadsheets/>

FICHE RÉCAPITULATIVE : GRENAT (SÉRIE UGRANDITE)

© Marine Bouvier – DUG de Nantes (2022)

FICHE RÉCAPITULATIVE DES GRENATS (SÉRIE UGRANDITE) : Méthode Lasnier

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev

C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 $\Leftrightarrow (C1/C2) \times 1000$

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associé(s) à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation $\Leftrightarrow C3 \times nO$

C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations ($\Sigma_{oxygènes}$)
Puis, calculer le **nombre de cations associés à 12 oxygènes** : nombre de cations x nombre d'oxygènes (12) / $\Sigma_{oxygènes} \Leftrightarrow (C3 \times 12) / \Sigma_{oxygènes}$

	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	----	----	----	----	----	Si ----
Al ₂ O ₃	----	----	----	----	----	Al ^{IV} ---- Al ----
Cr ₂ O ₃	----	----	----	----	----	Cr ³⁺ ----
V ₂ O ₅	----	----	----	----	----	V ----
Fe ₂ O ₃	----	----	----	----	----	Fe ³⁺ ----
MnO	----	----	----	----	----	Mn ----
CaO	----	----	----	----	----	Ca ----
MgO	----	----	----	----	----	Mg ----
	= ----			$\Sigma_{oxygènes} =$ ----		

OPTION 1) ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE : récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule selon les trois étapes ci-dessous :

1) **Site Z (tétraédrique)** = Il est occupé par le silicium (Si) et l'aluminium (Al^{IV})
Le nombre de cations du site Z étant égal à 3, l'Al^{IV} viendra combler le site Z. Ainsi Al^{IV} = 3 - Si = 3 - ----
Ici, Z = Si ---- + Al^{IV} ----

2) **Site Y (octaédrique)** = Il est occupé principalement par Al, Fe³⁺, Cr³⁺ et V³⁺.
L'Al^{IV} correspondra à la part d'aluminium qui n'occupe pas le site Z, autrement dit : Al^{IV} = Al - Al^{IV} = ---- = ----
Ici, Y = Fe³⁺ ---- + Al^{IV} ---- + Cr ---- + V ----

3) **Site X (dodécédrique)** = il est principalement occupé par Fe²⁺, Mg, Mn et Ca.
Il suffit de récupérer les nombres de cations associés à 12 oxygènes calculés à l'étape C5, et les intégrer dans la formule comme ci-dessous.
Ici, X = Fe²⁺ ---- + Mn ---- + Mg ---- + Ca ----

Il suffit à présent d'intégrer les résultats ci-dessus dans la **formule générale des grenats** : X₃Y₂(Z₃O₁₂).
Ainsi la formule structurale de l'échantillon est :
 $\rightarrow Ca_{2,744} (V_{0,004} Cr_{0,005} Fe^{3+}_{0,007} Al^{IV}_{1,995}) (Si_{3,122} O_{12})$

OPTION 2) CALCUL DES PÔLES PURS : PYROPE, ALMANDIN, SPESSARTITE, GROSSULAIRE et ANDRADITE
Calculs des 5 pôles purs grâce aux formules ci-dessous. Avec :

- Sx = Somme des cations du site X (calculé à l'étape C5) = ---- (Mg) + ---- (Fe²⁺) + ---- (Mn) + ---- (Ca) = ----
- Sy = Somme des cations du site Y (calculé à l'étape C5) = ---- (Al^{IV}) + ---- (Fe³⁺) + ---- (Cr³⁺) = ----

	Pyrope	Almandin	Spessartite	Grossulaire	Andradite	Uvarovite
Formule générale	(Mg _{C5} x 100) / Sx	(Fe ²⁺ _{C5} x 100) / Sx	(Mn _{C5} x 100) / Sx	(Al ^{IV} _{C5} x 100) / Sy	(Fe ³⁺ _{C5} x 100) / Sy	(Cr ³⁺ _{C5} x 100) / Sy
Formule appliquée	(---- x 100) / ----	(---- x 100) / ----	(---- x 100) / ----	(---- x 100) / ----	(---- x 100) / ----	(---- x 100) / ----
% en pôle pur	= ---- %	= ---- %	= ---- %	= ---- %	= ---- %	= ---- %

Cr (pôle uvarovite)
Fe³⁺ (pôle andradite) Al (pôle grossulaire)

© Marine Bouvier – DUG de Nantes (2022)

FICHE RÉCAPITULATIVE DES GRENATS (SÉRIE UGRANDITE) : Méthode Hanneman

1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev)

3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.

5) Multiplier par 100/S les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages de membres finaux.
Ici $100 / S = 100 / ---- = ----$

OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur.
Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final.
Si il est <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.

OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 2/S (2 correspondant au nombre de cations du site X), avec ici $2/S = 2 / ---- = ----$

	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
Fe ₂ O ₃ (pôle andradite)	----	----	----	----	----	Fe ----
Al ₂ O ₃ (pôle grossulaire)	----	----	----	----	----	Al ----
Cr ₂ O ₃ (pôle uvarovite)	----	----	----	----	----	Cr ----
			4) S = ----		Total = ---- %	

En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des grenats de la série ugrandite :
X₃Y₂(Z₃O₁₂), la formule structurale du grenat étudié est donc :
(La valeur de Si n'est pas calculable par cette méthode et correspond à la valeur théorique)
 $\rightarrow Ca_{----} (Fe^{3+}_{----} Cr_{----} Al_{----}) (SiO_4)_3$

Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du grenat étudié est :
 \rightarrow dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

Cr (pôle uvarovite)
Fe³⁺ (pôle andradite) Al (pôle grossulaire)

GRENATS (SÉRIE UGRANDITE) : Méthode Gabbrosoft

Ci-contre le lien conduisant au fichier Excel des grenats de la série ugrandite de la méthode Gabbrosoft.

\rightarrow <http://www.gabbrosoft.org/spreadsheets/>

FICHE RÉCAPITULATIVE : OLIVINE

© Marine Bouvier – DUG de Nantes (2022)

FICHE RÉCAPITULATIVE DES OLIVINES : Méthode Lasnier

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleiev

C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 $\Leftrightarrow (C1/C2) \times 1000$

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associé(s) à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation $\Leftrightarrow C3 \times nO$

C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (Σ oxygènes)
Puis, calculer le **nombre de cations associés à 4 oxygènes** : nombre de cations x nombre d'oxygènes (4) / Σ oxygènes $\Leftrightarrow (C3 \times 4) / \Sigma$ oxygènes

OPTION 1) Établissement de la formule structurale : récupérer le nombre de cations associé à 4 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale du minéral étudié.

	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	----	----	----	----	----	Si ----
MgO	----	----	----	----	----	Mg ----
FeO	----	----	----	----	----	Fe ----
=	----	----	----	Σ oxygènes = ----	----	

OPTION 2 Calculer la teneur en pôles purs (en %) :
Teneur en pourcentage du pôle pur = $(C5 \text{ du pôle pur} / \Sigma \text{ des C5 des pôles purs}) \times 100$
(avec Σ des C5 de Mg + Fe²⁺ = ----)

Mg = $C5_{Mg} / \Sigma C5 (Mg + Fe^{2+}) \times 100 = (---- / ----) \times 100 = \text{----} \% \text{ de forstérite}$
Fe²⁺ = $C5_{Fe^{2+}} / \Sigma C5 (Mg + Fe^{2+}) \times 100 = (---- / ----) \times 100 = \text{----} \% \text{ de fayalite}$

En intégrant les résultats de l'option 1 dans la formule générale des olivines : $X_2(SiO_4)$, la formule structurale de l'olivine étudiée est :

$\rightarrow (Mg_{----} Fe^{2+}_{----}) (Si O_4)$

Selon les résultats de l'option 2, la teneur en pôles purs de l'olivine étudiée est :

\rightarrow dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

(pôle fayalite) Fe²⁺ ● ————— ● Mg (pôle forstérite)

© Marine Bouvier – DUG de Nantes (2022)

FICHE RÉCAPITULATIVE DES OLIVINES : Méthode Hanneman

1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleiev)

3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.

5) Multiplier par 100/S les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux.
Ici $100 / S = 100 / ---- = ----$

OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur.
Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final.
Si <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.

OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 2/S (2 correspondant nombre de cations du site X), avec ici $2/S = 2 / ---- = ----$

	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
MgO (pôle forstérite)	----	----	----	----	----	Mg ----
FeO (pôle fayalite)	----	----	----	----	----	Fe ----
			4) S = ----		Total = ---- %	

En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des olivines : $X_2(SiO_4)$, la formule structurale de l'olivine étudiée est donc :
(La valeur de Si n'est pas calculable par cette méthode et correspond à la valeur théorique)

$\rightarrow (Mg_{----} Fe^{2+}_{----}) (Si O_4)$

Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs de l'olivine étudiée est :

\rightarrow dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

(pôle fayalite) Fe²⁺ ● ————— ● Mg (pôle forstérite)

OLIVINES : Méthode Gabbrosoft

Ci-contre le lien conduisant au fichier Excel des olivines de la méthode Gabbrosoft.

\rightarrow <http://www.gabbrosoft.org/spreadsheets/>

FICHE RÉCAPITULATIVE : FELDSPATHS

© Marine Bouvier – DUG de Nantes (2022)

FICHE RÉCAPITULATIVE DES FELDSPATHS : Méthode Lasnier

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev

C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 $\Leftrightarrow (C1/C2) \times 1000$

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation $\Leftrightarrow C3 \times nO$

C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations ($\Sigma_{oxygènes}$)
 Puis, calculer le **nombre de cations associés à 8 oxygènes** : nombre de cations x nombre d'oxygènes (8) / $\Sigma_{oxygènes} \Leftrightarrow (C3 \times 8) / \Sigma_{oxygènes}$

OPTION 1) Établissement de la formule structurale : récupérer le nombre de cations associés à 8 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale du minéral étudié.

	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	___ %	---	---	---	---	Si ___
Al ₂ O ₃	___ %	---	---	---	---	Al ___
Na ₂ O	___ %	---	---	---	---	Na ___
CaO	___ %	---	---	---	---	Ca ___
K ₂ O	___ %	---	---	---	---	K ___
=				$\Sigma_{oxygènes} =$ ---		

OPTION 2) Calculer la teneur en pôles purs (en %) :
 Teneur en pourcentage du pôle pur = $(C5_{\text{du pôle pur}} / \Sigma \text{ des } C5 \text{ des pôles purs}) \times 100$
 (avec $\Sigma \text{ des } C5 \text{ de } K + Na + Ca =$ --- + --- = ---)

$K = C5_K / \Sigma C5 (K + Na + Ca) \times 100 = (\quad / \quad) \times 100 =$ --- % d'orthoclase
 $Na = C5_{Na} / \Sigma C5 (K + Na + Ca) \times 100 = (\quad / \quad) \times 100 =$ --- % d'albite
 $Ca = C5_{Ca} / \Sigma C5 (K + Na + Ca) \times 100 = (\quad / \quad) \times 100 =$ --- % d'anorthite

En intégrant les résultats de l'option 1 dans la formule générale des feldspaths :
 $X (Al Si_3 O_8)$, la formule structurale du feldspath étudié est donc :
 $\rightarrow (K \text{ --- } Na \text{ --- } Ca \text{ ---}) (Al \text{ --- } Si \text{ --- } O_8)$

Selon les résultats de l'option 2, la teneur en pôles purs du feldspath étudié est :
 \rightarrow dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

© Marine Bouvier – DUG de Nantes (2022)

FICHE RÉCAPITULATIVE DES FELDSPATHS : Méthode Hanneman

1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev)

3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.

5) Multiplier par 100/S les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux.
 Ici $100 / S = 100 / \text{---} = \text{---}$

OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur.
 Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final.
 Si <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.

OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 1/S (1 correspondant nombre de cations du site X), avec ici $1/S = 1/ \text{---} = \text{---}$

	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
K ₂ O (pôle orthoclase)	___ %	---	---	---	___ %	K ___
Na ₂ O (pôle albite)	___ %	---	---	---	___ %	Na ___
CaO (pôle anorthite)	___ %	---	---	---	___ %	Ca ___
			4) S = ---		Total = --- %	

En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des feldspaths :
 $X (Al Si_3 O_8)$, la formule structurale du feldspath étudié est donc :
 (Les valeurs de Al et Si ne sont pas calculables par cette méthode et correspondent à leurs valeurs théoriques)
 $\rightarrow (K \text{ --- } Na \text{ --- } Ca \text{ ---}) (Al Si_3 O_8)$

Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du feldspath étudié est :
 \rightarrow dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

FELDSPATHS : Méthode Gabbrosoft

Ci-contre le lien conduisant au fichier Excel des feldspaths de la méthode Gabbrosoft.

\rightarrow <http://www.gabbrosoft.org/spreadsheets/>

FICHE RÉCAPITULATIVE : SPINELLES

© Marine Bouvier – DUG de Nantes (2022)

FICHE RÉCAPITULATIVE DES SPINELLES : Méthode Lasnier

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev

C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le Poids Moléculaire (C2) x 1000 $\Leftrightarrow (C1/C2) \times 1000$

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation $\Leftrightarrow C3 \times nO_{oxy}$

C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations ($\Sigma_{oxygènes}$)
Puis, calculer le nombre de cations associés à 4 oxygènes : nombre de cations x nombre d'oxygènes (4) / $\Sigma_{oxygènes} \Leftrightarrow (C3 \times 4) / \Sigma_{oxygènes}$

OPTION 1) Établissement de la formule structurale : récupérer le nombre de cations associés à 4 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale du minéral étudié.

	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
Na ₂ O	___%	___	___	___	___	Na ___
MgO	___%	___	___	___	___	Mg ___
Al ₂ O ₃	___%	___	___	___	___	Al ___
SiO ₂	___%	___	___	___	___	Si ___
S	___%	___	___	___	___	S ___
K ₂ O	___%	___	___	___	___	K ___
CaO	___%	___	___	___	___	Ca ___
TiO ₂	___%	___	___	___	___	Ti ___
V ₂ O ₃	___%	___	___	___	___	V ___
Cr ₂ O ₃	___%	___	___	___	___	Cr ___
MnO	___%	___	___	___	___	Mn ___
FeO	___%	___	___	___	___	Fe ___
BaO	___%	___	___	___	___	Ba ___
=	___	___	___	$\Sigma_{oxygènes} =$ ___	___	___

OPTION 2 Calculer la teneur en pôles purs (en %) :

Teneur en pourcentage du pôle pur = $(C5_{du\ pôle\ pur} / \Sigma_{des\ C5\ des\ pôles\ purs}) \times 100$
(avec Σ des C5 de Mg + Fe + Zn = ___)

Mg = $C5_{Mg} / \Sigma_{C5\ (Mg + Fe + Zn)} \times 100 = (\quad / \quad) \times 100 =$ ___ % de spinelle s.s.
Fe = $C5_{Fe} / \Sigma_{C5\ (Mg + Fe + Zn)} \times 100 = (\quad / \quad) \times 100 =$ ___ % d'hercynite
Zn = $C5_{Zn} / \Sigma_{C5\ (Mg + Fe + Zn)} \times 100 = (\quad / \quad) \times 100 =$ ___ % de gahnite

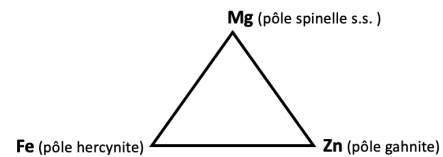
En intégrant les résultats de l'option 1 dans la formule générale des spinelles :

X Al₂ O₄, la formule structurale du spinelle étudié est donc :

$\rightarrow (K \quad Na \quad Ba \quad Ca \quad Mg \quad Mn \quad Fe \quad Si \quad S \quad) (V \quad Cr \quad Al \quad) O_4$

Selon les résultats de l'option 2, la teneur en pôles purs du spinelle étudié est :

\rightarrow dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon



© Marine Bouvier – DUG de Nantes (2022)

FICHE RÉCAPITULATIVE DES SPINELLES : Méthode Hanneman

1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev)

3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.

5) Multiplier par 100/S les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux.
Ici $100 / S = 100 /$ ___ = ___

OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur.
Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final.
Si il est <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.

OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 1/S (1 correspondant nombre de cation du site X), avec $1/S = 1/$ ___ = ___

	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
MgO (pôle spinelle s.s.)	___%	___	___	___	___%	Mg ___
FeO (pôle hercynite)	___%	___	___	___	___%	Fe ___
ZnO (pôle gahnite)	___%	___	___	___	___%	Zn ___
			4) S = ___		Total = ___%	

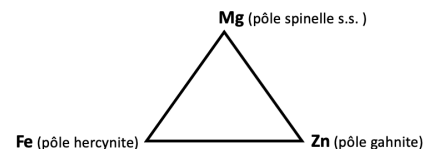
En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des spinelles :

X Al₂ O₄, la formule structurale du spinelle étudié est donc :
(La valeur de Al n'est pas calculable par cette méthode et correspond à la valeur théorique)

$\rightarrow (Mg \quad + \quad Fe \quad) Al_2 O_4$

Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du spinelle étudié est :

\rightarrow dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon



SPINELLES : Méthode Gabbrosoft

Ci-contre le lien conduisant au fichier Excel des spinelles de la méthode Gabbrosoft.

\rightarrow <http://www.gabbrosoft.org/spreadsheets/>

FICHE RÉCAPITULATIVE : PYROXÈNES

© Marine Bouvier – DUG de Nantes (2022)

FICHE RÉCAPITULATIVE DES PYROXÈNES : Méthode Lasnier

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev

C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 $\Leftrightarrow (C1/C2) \times 1000$

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation $\Leftrightarrow C3 \times nO$

C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (Σ oxygènes).
Puis, calculer le nombre de cations associés à 6 oxygènes : nombre de cations x nombre d'oxygènes (6) / Σ oxygènes $\Leftrightarrow (C3 \times 6) / \Sigma$ oxygènes

OPTION 1) Établissement de la formule structurale : récupérer le nombre de cations associés à 6 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale du minéral étudié.

	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	----	----	----	----	----	Si
Al ₂ O ₃	----	----	----	----	----	Al ^{IV} Al ^{VI}
MgO	----	----	----	----	----	Mg
Na ₂ O	----	----	----	----	----	Na
CaO	----	----	----	----	----	Ca
Cr ₂ O ₃	----	----	----	----	----	Cr
FeO	----	----	----	----	----	Fe
=	----	----	----	Σ oxygènes =	----	

OPTION 2)

A) Calcul de la teneur des principaux pôles purs des pyroxènes :
a) Calcul des quantités de composants principaux :
Diopside = $Mg_{C5} =$ molécule(s) ; Hédenbergite = $(Ca_{C5} - Mg_{C5}) =$ molécule(s)
Jadéite = $Al_{C5} =$ molécule(s) ; Acmite (aegirine) = $(Na_{C5} - Al_{C5}) =$ molécule(s)
b) Calcul de la teneur en pôles purs :
Teneur pour chaque pôle pur = $(C5 \text{ du pôle pur} / \Sigma \text{ des quantités des composants principaux}) \times 100$.
(avec Σ des composants principaux (diopside + hédenbergite + jadéite + acmite) = ----)

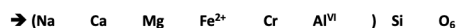
(quantité de diopside / Σ) x 100 \Leftrightarrow (---- / ----) x 100 = ---- % de diopside
(quantité d'hédenbergite / Σ) x 100 \Leftrightarrow (---- / ----) x 100 = ---- % d' hédenbergite
(quantité de jadéite / Σ) x 100 \Leftrightarrow (---- / ----) x 100 = ---- % de jadéite
(quantité de acmite / Σ) x 100 \Leftrightarrow (---- / ----) x 100 = ---- % d'acmite (ou aegirine)

B) Calcul de la teneur en pôles purs de la série des clinopyroxènes ferromagnésiens et calciques :
Teneur pour chaque pôle pur = $(C5 \text{ du pôle pur} / \Sigma \text{ des C5 des pôles purs}) \times 100$.
(avec Σ des C5 de Ca + Fe²⁺ + Mg = ----)

Ca = $(C5_{Ca} / \Sigma C5) \times 100 =$ (---- / ----) x 100 = ---- % de wollastonite
Fe²⁺ = $(C5_{Fe^{2+}} / \Sigma C5) \times 100 =$ (---- / ----) x 100 = ---- % de clinoferrosillite
Mg = $(C5_{Mg} / \Sigma C5) \times 100 =$ (---- / ----) x 100 = ---- % de clinoenstatite

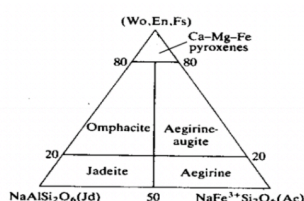
En intégrant les résultats de l'option 1 dans la formule générale des pyroxènes :

W (X, Y) Z₂ O₆, la formule structurale du pyroxène étudié est donc :



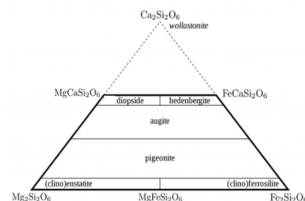
Selon les résultats de l'option 2 :

A) Les teneurs en pôles purs principaux du pyroxène :



\rightarrow dessiner un carré sur les diagrammes ci-contre représentant l'échantillon

B) Les teneurs en pôles purs de la série des clinopyroxènes ferromagnésiens et calciques :



© Marine Bouvier – DUG de Nantes (2022)

FICHE RÉCAPITULATIVE DES PYROXÈNES : Méthode Hanneman

1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev)

3) Diviser le pourcentage de chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.

5) Multiplier par 100/S les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux.
Ici $100 / S = 100 / \text{----} = \text{----}$

OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur.
Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final.
Si il est <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.

OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 2/S (2 correspondant au nombre de cations des sites W, X et Y), avec ici $2/S = 2 / \text{----} = \text{----}$

	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
CaO (pôle wollastonite)	----	----	----	----	----	Ca
MgO (pôle clino-enstatite)	----	----	----	----	----	Mg
FeO (pôle clino-ferrosillite)	----	----	----	----	----	Fe
			4) S =		Total =	

En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des pyroxènes :

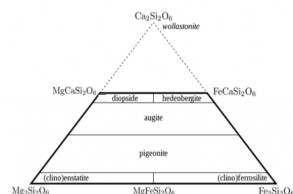
W (X, Y) Z₂ O₆, la formule structurale du pyroxène étudié est donc :

(La valeur de Si n'est pas calculable par cette méthode et correspond à la valeur théorique)



Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du pyroxène étudié est :

\rightarrow dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon



PYROXÈNES : Méthode Gabbrosoft

Ci-contre le lien conduisant au fichier Excel des pyroxènes de la méthode Gabbrosoft.

\rightarrow <http://www.gabbrosoft.org/spreadsheets/>

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- **Abreal A.** (2018) Les Grenats – Nature, Structure et Propriétés, *J. of Pers. Mineralogist*, vol. 11, pp. 151-227
- **Abreal A.** (2010) La Couleur des Grenats, *J. of Pers. Mineralogist*, vol.11, pp. 21-63
- **Arlabosse J-M.** (2004) Identification des grenats gemmes par une méthode dite « méthode limite » issue de la classification de Stockton et Manson, www.geminterest.com Consulté le 10/01/2020
- **Arlabosse J-M.** (2000-2015) Pierre de lune, Adulaire (variété d'orthose, labradorite, albite-oligoclase, albite, perthite) <https://www.geminterest.com/gemlist.php> , Consulté le 21/01/2020
- **Arlabosse J-M.** (2000-2015) Spinelle*, Gahnospinelle et Ceylanite : Spinelle cobaltifère, Pleonaste <https://www.geminterest.com/gemlistpop.php?ID=23> Consulté le 17/02/2020
- **Back M.E., Mandarino J.A.** (2008) Fayalite, Forsterite. *Fleischer's Glossary of Mineral Species*, The Mineralogical Record, Tucson, pp. 69, 79
- **Barthelmy D.** (1997-2014) Spinel Mineral Data, *Webmineral.com* <http://webmineral.com/data/Spinel.shtml#Xmla1i17Tyg> Consulté le 13/03/2020
- **Bour I.** TP Cristallographie et minéralogie UFR Sci. Terre, Orsay <https://ivanbour.files.wordpress.com/2013/06/tp-formules-structurales.pdf> Consulté le 15/12/2019
- **Deer W.A., Howie R.A., Zussman J.** (1992) An Introduction to the Rock-Forming Minerals, Garnet group, ELBS edition, 2ème édition, pp. 31-46
- **Deer W. A., Howie R.A., Zussman J.** (1992) An Introduction to the Rock-Forming Minerals, Olivine group, ELBS edition, 2ème édition, pp. 3-15
- **Deer W.A., Howie R.A., Zussman J.** (1992) An Introduction to the Rock-Forming Minerals, Pyroxene group, ELBS edition, 2ème édition, pp. 143-154
- **Deer W.A., Howie R.A., Zussman J.** (1992) An Introduction to the Rock-Forming Minerals, Feldspar group, ELBS edition, 2ème édition, pp. 391-395
- **Deer W.A., Howie R.A., Zussman J.** (1992) An Introduction to the Rock-Forming Minerals, Spinel group, ELBS edition, 2ème édition, pp. 558-564
- **Droop G.T.R.** (1987) A general equation for estimating Fe 3+ concentrations in ferromagnesian silicates and oxides from microprobe analyses, using stoichiometric criteria, *Mineralogical Magazine*, Vol.51, pp. 431-435
- **Flies D.** (2008) La couleur des grenats, *DUG de Nantes*, 147 pages.
- **Gabbrosoft** (2011) Spreadsheets GNTCALC For garnets. Calculates Py-Alm-Gro-Sp endmembers, <http://www.gabbrosoft.org/spreadsheets/> Consulté le 20/11/2019
- **Gabbrosoft** (2011) Spreadsheets ALKFELDCALC For alkali feldspars. Includes BaO and calculates An-Ab-Or endmembers., <http://www.gabbrosoft.org/spreadsheets/> Consulté le 20/11/2019
- **Gabbrosoft** (2011) Spreadsheets PLAGCALC For plagioclase feldspars. Includes SrO and calculates An-Ab-Or endmembers., <http://www.gabbrosoft.org/spreadsheets/> Consulté le 20/11/2019
- **Gabbrosoft** (2011) Spreadsheets OLICALC For olivine. Calculates Fo-Fa-Tp endmembers, along with the FeO/MgO ratio of the liquid in equilibrium with an olivine of that composition., <http://www.gabbrosoft.org/spreadsheets/> Consulté le 20/11/2019
- **Gabbrosoft** (2011) Spreadsheets SPINCALC For spinels. Calculates FeO and Fe2O3 from FeO*, <http://www.gabbrosoft.org/spreadsheets/> Consulté le 20/11/2019
- **Gabbrosoft** (2011) Spreadsheets PYXCALC For pyroxenes. Calculates Wo-En-Fs endmembers, and FeO and Fe2O3 from FeO*, <http://www.gabbrosoft.org/spreadsheets/> Consulté le 20/11/2019
- **GIA.** Moonstone Description. <https://www.gia.edu/moonstone-description> , Consulté le 21/04/2021.
- **Grew E.S., Locock A.J., Mills S. J., Galuskin I.O., Galuskin E.V., Hålenius U.** (2013). Nomenclature of the garnet supergroup. *American Mineralogist*, Vol. 98, pp. 785-811

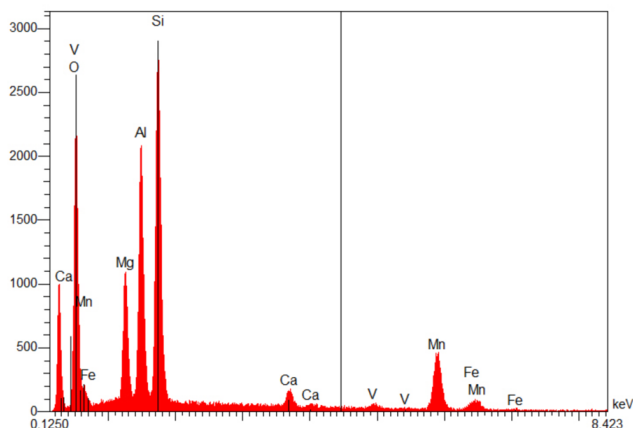
- **Gübelin E.J., Koivula J.I.** (2005) Inclusions in Feldspars. *Photoatlas of Inclusions in Gemstones*, Opinio Publishers, Vol. 2, pp. 413-414
- **Gübelin E.J., Koivula J.I.** (2005) Inclusions in Peridot. *Photoatlas of Inclusions in Gemstones*, Opinio Publishers, Vol. 2, pp. 511-540
- **Hanneman W. W.** (1983) Notes and new techniques: A new classification for red-to-violet garnets, *Gems & Gemmology*, Vol. 19, N°1, pp. 37-40
- **Hanneman W.W.** (1997). A unified system for classifying garnets. *The Journal of Gemmology*, Vol. 25, No. 7, pp. 471-473.
- **Hanneman W. W.** (2000) Naming gem garnets. *Hanneman Gemological Instruments*, pp. 33-35
- **Hodgkinson A.** (2015) Gem Testing Techniques, Appendix A, B et C, *publié par Valerie Hodgkinson*, pp. 381-421 pp. 381-421
- **Hoover D.B.** (2011). Determining garnet composition from magnetic susceptibility and other properties. *Gems & Gemology*, Vol. 47, No. 4 (Winter), pp. 272-285.
- **International Mineralogical Association** (2020) Commission on new minerals, nomenclature and classification: The new IMA list of minerals – A work in progress. <http://cnmnc.main.jp> Consulté le 11/02/2020
- **Johnson M.L., Boehm E., Krupp H., Zang J.W., Kammerling R.C.** (1995) Gem-Quality Grossular-Andradite: A New Garnet from Mali, *Gems & Gemology*, Vol. 31, No. 3, pp. 152-166
- **Koivula J.I.** (1981) San Carlos Peridot, *Gems & Gemology*, Vol. 17, N°4, pp 205-214
- **Lasnier B.** (1968) Mode de calculs des formules structurales des Grenats, Pyroxènes, Amphiboles, à partir des données pondérales de l'analyse chimique. *A l'usage des élèves de C1 et du 3^e cycle des Sciences de la Terre*, pp. 1-12
- **Locock A.J.** (2007) An Excel spreadsheet to recast analyses of garnet into end-member components, and a synopsis of the crystal chemistry of natural silicate garnets, Department of Earth and Atmospheric Sciences, University of Alberta, 1-26 Earth Sciences Building, Edmonton, Alberta, Canada T6G 2E3
- **Manson, D.V., Stockton, C.M.** (1981). Gem garnets in the red-to-violet color range. *Gems & Gemology*, Vol. 17. No. 4, pp. 191-204.
- **Manson V., Stockton C.M.** (1982) Gem-Quality Grossular Garnets, *Gems & Gemology*, pp. 204-213
- **Masaki E., Bolin C., Takeyoshi Y., Iwao K.** (1995) Calculate garnet mineral chemistry from electron microprobe data how the FeO is recalculated as Fe²⁺ and Fe³⁺. A mechanism for Na incorporation in garnet: An example for garnet in orthogneiss from Su-Lu terrane, eastern China.
<http://fac.ksu.edu.sa/sites/default/files/Calculate%20garnet%20mineral%20chemistry%20from.pdf>
- **Mindat** (1993-2020) Albite-Anorthite Series: About Albite-Anorthite Series, *Mindat.org* <https://www.mindat.org/min-3231.html> Consulté le 21/01/2020
- **Mindat** (1993-2020) Alkali Feldspar, *Mindat.org* <https://www.mindat.org/min-118.html> Consulté le 22/01/2020
- **Mindat** (1993-2020) Albite-Anorthite Series, *Mindat.org* <https://www.mindat.org/min-3231.html> Consulté le 22/01/2020
- **Mindat** (1993-2020) Anorthoclase, *Mindat.org* <https://www.mindat.org/min-248.html> Consulté le 22/01/2020
- **Mindat** (1993-2020) Clinopyroxene sous-groupe, *Mindat.org* <https://www.mindat.org/min-7630.html> Consulté le 20/03/2020
- **Mindat** (1993-2020) Garnet group, *Mindat.org* <https://www.mindat.org/min-10272.html> Consulté le 12/01/2020
- **Mindat** (1993-2020) Goldmanite, *Mindat.org* <https://www.mindat.org/min-1723.html> Consulté le 17/03/2020
- **Mindat** (1993-2020) Microcline, *Mindat.org* <https://www.mindat.org/min-2704.html> Consulté le 22/01/2020
- **Mindat** (1993-2020) Moonstone, *Mindat.org* <https://www.mindat.org/min-2774.html> Consulté le 22/01/2020
- **Mindat** (1993-2020) Olivine Group: About Olivine Group, *Mindat.org* <https://www.mindat.org/min-7710.html> Consulté le 19/01/2020
- **Mindat** (1993-2020) Orthoclase, *Mindat.org*, <https://www.mindat.org/min-3026.html> Consulté le 22/01/2020
- **Mindat** (1993-2020) Orthopyroxene sous-groupe, *Mindat.org*, <https://www.mindat.org/min-10967.html> Consulté le 20/03/2020

- **Mindat** (1993-2020) Perthite, *Mindat.org*, <https://www.mindat.org/min-6683.html> Consulté le 22/01/2020
- **Mindat** (1993-2020) Peridot: About Peridot, *Mindat.org*, <https://www.mindat.org/min-7710.html> Consulté le 19/01/2020
- **Mindat** (1993-2020) Sanidine, *Mindat.org*, <https://www.mindat.org/min-3521.html> Consulté le 22/01/2020
- **Mindat** (1993-2020) Spinel, *Mindat.org*, <https://www.mindat.org/min-3729.html> Consulté le 22/01/2020
- **Munsch B.** (2017) Spinelles naturels traités thermiquement Intérêts Conséquences, *DUG de Nantes*, p 9
- **Novak G.A., Gibbs G.V.** (1971). The crystal chemistry of the silicate garnets. *American Mineralogist*, Vol. 56, pp. 791-825
- **Pairform** (2018) Les nésosilicates « monomères », https://www.pairform.fr/doc/17/138/439/web/co/2_2_6_2.html Consulté le 09/04/2020
- **Pradat T.** (2006-2020) Diopside, *Gemmo.eu* <https://www.gemmo.eu/fr/resultat.php> Consulté le 23/02/2020
- **Pradat T.** (2006-2020) Pigeonite, *Gemmo.eu* <https://www.gemmo.eu/fr/resultat.php> Consulté le 23/02/2020
- **Pradat T.** (2006-2020) Augite, *Gemmo.eu* <https://www.gemmo.eu/fr/resultat.php> Consulté le 23/02/2020
- **Pay D.** (2015) Gems News International: Colorchange garnets from Tanzania, *Gems & Gemology*, Vol. 51, No. 1, pp. 88-99
- **Quinn R.J., Valley J.W., Page F.Z., Fournelle J.H.** (2016) Revision 1: Accurate Determination of Ferric Iron in Garnets, <https://par.nsf.gov/servlets/purl/10098047> Consulté le 22/02/2020
- **Ralph J., Ralph K.** (1993-2022) Moonstone, *gemdat.org*, <https://www.gemdat.org/gem-2774.html> Consulté le 22/01/2020
- **Rossmann G., Brendan M.L., Hoover D.** (2015) Gem Notes: Purple Garnets from East Africa, *Journal of Gemmology*, Volume 34, N°8, pp 656-658
- **Sangsawong S., Raynaud V., Pardieu V.** (2016) Gem News International: Purple Pyrope-Almandine Garnet From Mozambique, *Gems & Gemology*, Volume 52, No. 3, pp 321-323
- **Scaler** (2010) Tableau périodique des éléments noir et blanc, *Wikipédia* https://fr.wikipedia.org/wiki/Fichier:Tableau_périodique_des_éléments_noir_et_blanc.svg Consulté le 19/09/2021
- **Schmetzer K., Bernhardt H.-J.** (1999) Garnets from Madagascar with a Color Change of Blue-Green to Purple, *Gems & Gemology*, Volume 35, No. 4, pp 196-201
- **Schmetzer K., Hainschwang T., Bernhardt H.-J., Kiefert L.** (2002) Notes & News Techniques: New chromium- and vanadium-bearing garnets from Tranoroa, Madagascar, *Gems & Gemology*, Volume 38, No. 2, pp 148-155
- **Stockton C.M., Manson V.** (1985) A proposed new classification for gem-quality garnets, *Gems & Gemology*, pp. 205-218
- **Stockwell C.H.** (1927). An X-ray study of the garnet group. *American Mineralogist*, Vol. 12, pp. 327-344.
- **Sun Z., Renfro N.D., Palke A.** (2017) Gems News International: Blue-Green Pyrope-Spessartine Garnet with High Vanadium, *Gems & Gemology*, Vol. 53, No. 3, pp 373-376.
- **Tahiri-Jouti P.** (2008) Le Diopside, *DUG de Nantes*, 45 pages.
- **Tilley C.E., Simmons W.B.** (2020) Olivine mineral, *Encyclopaedia Britannica Inc*, Britannica.com <https://www.britannica.com/science/planet> Consulté le 19/01/2020

ANNEXES 1 : RÉSULTATS DES ANALYSES CHIMIQUES

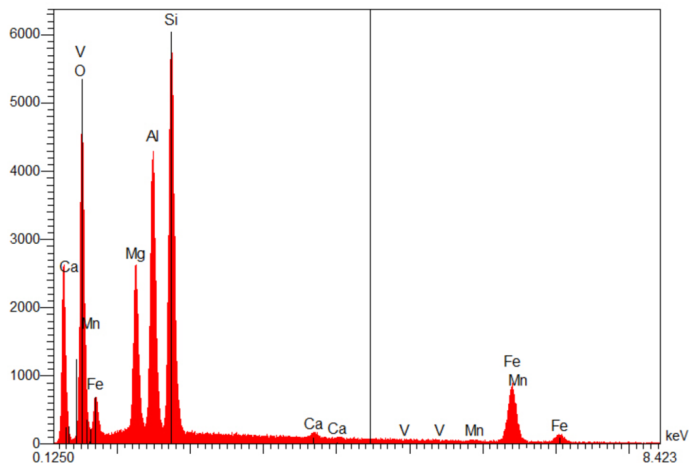
Annexe n°1.1 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon MB03

Elt	Ligne	Int	Erreur	K	Kr	P%	A%	ZAF	Formule	Ox%	Pk/Bg	Class	LConf	HConf	Cat#
O						43.49	62.81	0.0000		0.00	0.00	X	1415206398983335600000000000000000	1401985973076292300000000000000000	0.00
Mg	Ka	571.2	4.1946	0.0745	0.0336	5.73	5.45	0.5870	MgO	9.51	12.17	A	5.65	5.82	0.00
Al	Ka	1158.9	4.1946	0.1632	0.0679	10.45	8.95	0.6514	Al2O3	19.74	20.50	A	10.33	10.56	0.00
Si	Ka	1736.2	4.1946	0.6186	0.1216	17.38	14.30	0.6987	SiO2	37.18	32.80	A	17.23	17.53	0.00
Ca	Ka	94.4	0.6063	0.0444	0.0139	1.52	0.88	0.9103	CaO	2.13	4.55	A	1.47	1.58	0.00
V	Ka	25.9	0.4244	0.0060	0.0060	0.69	0.32	0.8596	V2O3	1.02	2.91	B	0.64	0.74	0.00
Mn	Ka	411.5	0.4244	0.1309	0.1309	15.92	6.70	0.8231	MnO2	25.20	18.96	A	15.64	16.21	0.00
Fe	Ka	31.3	0.4244	0.0289	0.0122	1.46	0.60	0.8364	FeO	1.88	0.00	X	1.37	1.56	0.00
				1.0665	0.3861	96.65	100.00			96.65					0.00



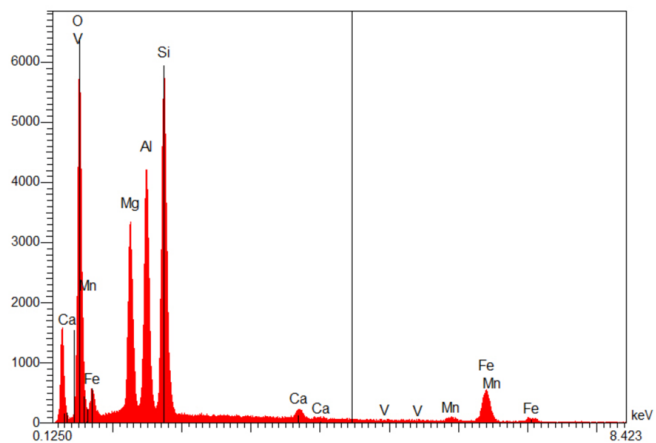
Annexe n°1.2 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon MB04

Elt	Ligne	Int	Erreur	K	Kr	P%	A%	ZAF	Formule	Ox%	Pk/Bg	Class	LConf	HConf	Cat#
O						41.26	60.18	0.0000		0.00	0.00	X	1415206398983335600000000000000000	1401985973076292300000000000000000	0.00
Mg	Ka	686.4	7.4558	0.0896	0.0404	6.98	6.70	0.5796	MgO	11.57	13.25	A	6.91	7.05	0.00
Al	Ka	1235.0	7.4558	0.1739	0.0724	11.40	9.86	0.6364	Al2O3	21.53	20.53	A	11.31	11.48	0.00
Si	Ka	1809.5	7.4558	0.6448	0.1267	18.57	15.43	0.6816	SiO2	39.73	32.43	A	18.46	18.68	0.00
Ca	Ka	21.4	0.2468	0.0101	0.0031	0.35	0.20	0.9024	CaO	0.49	2.56	B	0.33	0.37	0.00
V	Ka	0.0	0.0000	0.0000	0.0000	0.00	0.00	0.0000	V2O3	0.00	0.00	X	0.00	0.00	0.00
Mn	Ka	0.0	0.0000	0.0000	0.0000	0.00	0.00	0.0000	MnO2	0.00	0.00	X	0.00	0.00	0.00
Fe	Ka	391.2	0.6962	0.3614	0.1528	18.28	7.64	0.8369	FeO	23.52	0.00	X	18.04	18.52	0.00
				1.2796	0.3955	96.83	100.00			96.83					0.00



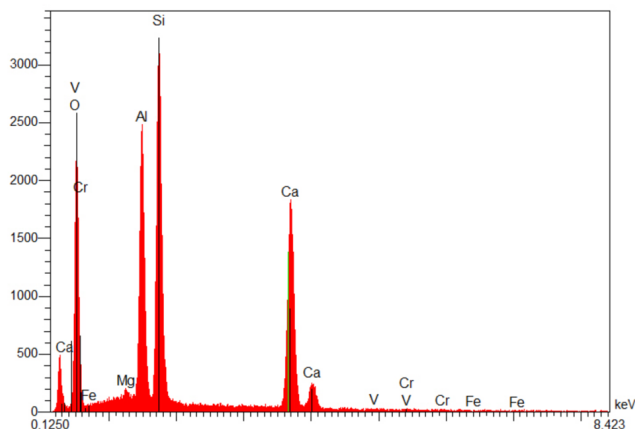
Annexe n°1.3 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon MB05

Elt	Ligne	Int	Erreur	K	Kr	P%	A%	ZAF	Formule	Ox%	Pk/Bg	Class	LConf	HConf	Cat#
O						40.77	60.39	0.0000		0.00	0.00	X	1415206398983335600000000000000000	1401985973076292300000000000000000	0.00
Mg	Ka	913.4	9.7056	0.1192	0.0538	8.84	8.62	0.6101	MgO	14.66	18.61	A	8.77	8.92	0.00
Al	Ka	1225.9	9.7056	0.1726	0.0719	11.25	9.88	0.6414	Al2O3	21.26	23.30	A	11.17	11.33	0.00
Si	Ka	1768.7	9.7056	0.6302	0.1239	18.25	15.40	0.6805	SiO2	39.04	35.79	A	18.14	18.36	0.00
Ca	Ka	57.6	0.5714	0.0271	0.0085	0.95	0.56	0.8922	CaO	1.33	3.63	B	0.92	0.98	0.00
V	Ka	0.0	0.0000	0.0000	0.0000	0.00	0.00	0.0000	V2O3	0.00	0.00	X	0.00	0.00	0.00
Mn	Ka	26.6	0.6418	0.0085	0.0085	1.03	0.44	0.8194	MnO2	1.63	3.26	B	0.98	1.08	0.00
Fe	Ka	234.6	0.6418	0.2167	0.0916	11.09	4.71	0.8278	FeO	14.27	0.00	X	10.90	11.28	0.00
				1.1743	0.3581	92.19	100.00			92.19					0.00



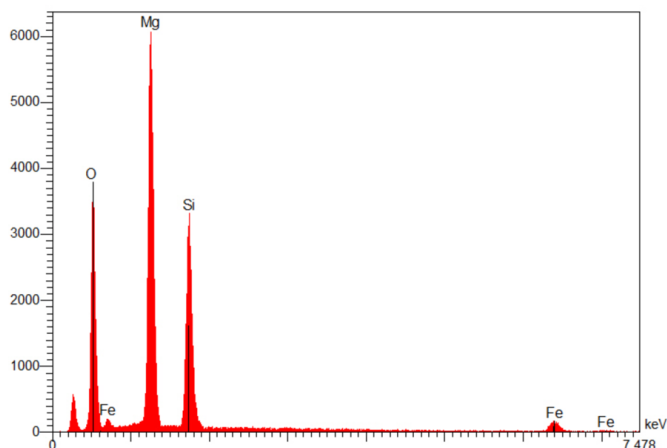
Annexe n°1.4 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon MB15

Elt	Ligne	Int	Erreur	K	Kr	P%	A%	ZAF	Formule	Ox%	Pk/Bg	Class	LConf	HConf	Cat#
O						40.16	60.38	0.0000		0.00	0.00	X	1415206398983335600000000000000000	140198597307629230000000000000000000.00	0.00
Mg	Ka	0.0	0.0000	0.0000	0.0000	0.00	0.00	0.0000	MgO	0.00	0.00	X	0.00	0.00	0.00
Al	Ka	1404.2	6.0210	0.1977	0.0823	11.27	10.05	0.7322	Al2O3	21.30	24.66	A	11.16	11.38	0.00
Si	Ka	1951.4	6.0210	0.6953	0.1367	18.33	15.70	0.7463	SiO2	39.21	37.98	A	18.18	18.48	0.00
Ca	Ka	1398.7	0.9013	0.6581	0.2055	22.99	13.79	0.8961	CaO	32.16	38.66	A	22.76	23.21	0.00
V	Ka	1.3	0.0857	0.0003	0.0003	0.04	0.02	0.7860	V2O3	0.06	2.05	B	0.03	0.05	0.00
Cr	Ka	1.6	0.0857	0.0004	0.0004	0.05	0.03	0.8072	Cr2O3	0.08	2.07	B	0.04	0.07	0.00
Fe	Ka	1.6	0.0857	0.0015	0.0006	0.08	0.03	0.8125	Fe2O3	0.11	0.00	X	0.05	0.10	0.00
				1.5533	0.4258	92.92	100.00			92.92					0.00



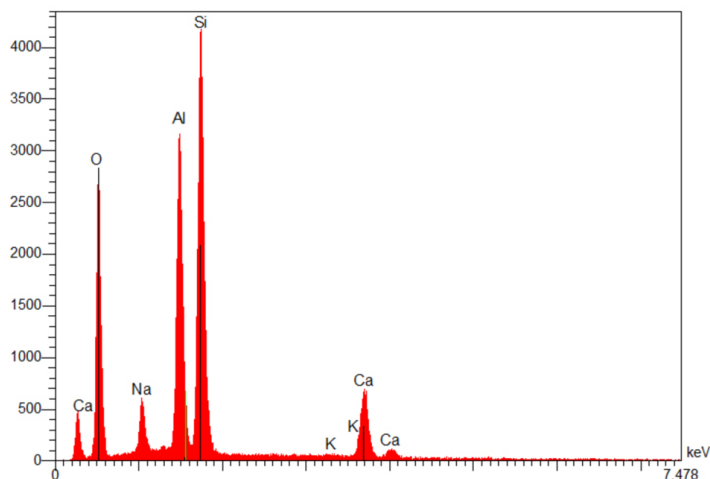
Annexe n°1.5 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon MB14

Elt	Ligne	Int	Erreur	K	Kr	P%	A%	ZAF	Formule	Ox%	Pk/Bg	Class	LConf	HConf	Cat#
O						44.61	57.46	0.0000		0.00	0.00	X	14152063989833356000000000	140198597307629230000000000000000000.00	0.00
Mg	Ka	3352.2	32.3900	0.4374	0.1973	29.78	25.24	0.6615	MgO	49.37	71.02	A	29.59	29.96	0.00
Si	Ka	1958.2	5.4897	0.6977	0.1371	20.33	14.92	0.6714	SiO2	43.50	46.07	A	20.17	20.50	0.00
Fe	Ka	134.9	0.6775	0.1246	0.0527	6.47	2.39	0.8146	FeO	8.32	0.00	X	6.27	6.67	0.00
				1.2598	0.3872	101.19	100.00			101.19					0.00



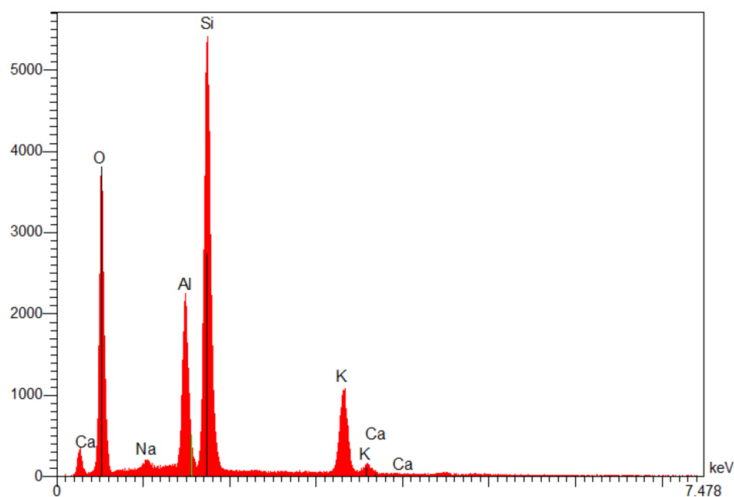
Annexe n°1.6 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon MB09

Elt	Ligne	Int	Erreur	K	Kr	P%	A%	ZAF	Formule	Ox%	Pk/Bg	Class	LConf	HConf	Cat#
O						44.90	61.64	0.0000		0.00	0.00	X	14152063989833356000000000000000	1401985973076292300000000000000000.00	0.00
Na	Ka	263.4	6.7978	0.0562	0.0159	3.16	3.02	0.5039	Na2O	4.26	9.03	A	3.09	3.23	0.00
Al	Ka	1819.9	6.6431	0.2563	0.1067	14.52	11.82	0.7367	Al2O3	27.43	32.44	A	14.39	14.64	0.00
Si	Ka	2497.0	6.6431	0.8897	0.1749	24.20	18.93	0.7232	SiO2	51.78	50.47	A	24.03	24.38	0.00
K	Ka	10.8	0.7923	0.0030	0.0014	0.16	0.09	0.8471	K2O	0.19	2.26	B	0.14	0.18	0.00
Ca	Ka	488.7	0.7923	0.2299	0.0718	8.21	4.50	0.8750	CaO	11.49	0.00	X	8.07	8.35	0.00
				1.4351	0.3707	95.15	100.00			95.15					0.00



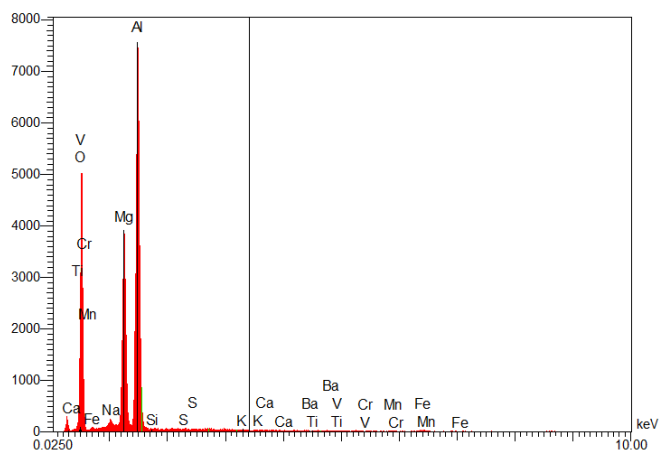
Annexe n°1.7 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon MB07

Elt	Ligne	Int	Erreur	K	Kr	P%	A%	ZAF	Formule	Ox%	Pk/Bg	Class	LConf	HConf	Cat#
O						45.47	61.67	0.0000		0.00	0.00	X	14152063989833356000000000000000	1401985973076292300000000000000000.00	0.00
Na	Ka	75.9	7.2589	0.0162	0.0046	0.91	0.86	0.5022	Na2O	1.23	3.86	B	0.87	0.95	0.00
Al	Ka	1233.0	6.6436	0.1736	0.0723	9.57	7.70	0.7559	Al2O3	18.08	21.35	A	9.47	9.67	0.00
Si	Ka	3315.4	6.6436	1.1813	0.2322	30.01	23.19	0.7726	SiO2	64.20	60.49	A	29.82	30.20	0.00
K	Ka	781.2	0.6835	0.2182	0.0990	11.79	6.54	0.8404	K2O	14.20	21.93	A	11.64	11.95	0.00
Ca	Ka	5.3	0.6835	0.0025	0.0008	0.09	0.05	0.8472	CaO	0.13	0.00	X	0.08	0.11	0.00
				1.5919	0.4089	97.85	100.00			97.85					0.00



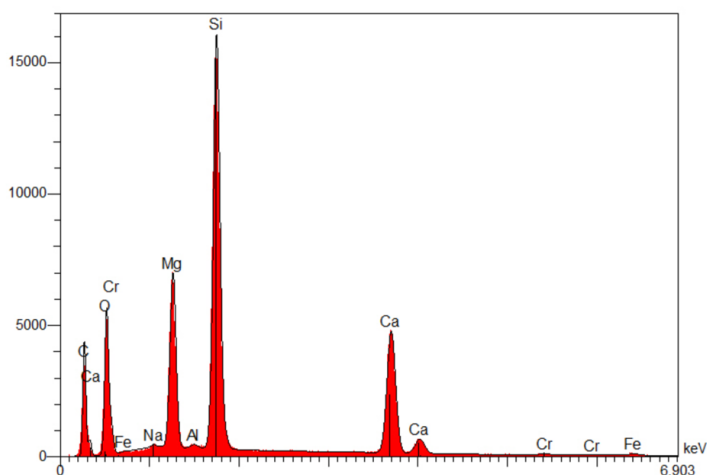
Annexe n°1.8 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon MB10

Elt	Ligne	Int	Erreur	K	Kr	P%	A%	ZAF	Formule	Ox%	Pk/Bg	Class	LConf	HConf	Cat#
O						44.88	56.62	0.0000		0.00	0.00	X	337803785726526620000.00	3351597005451179600000000000	0.00
Na	Ka	92.7	17.6798	0.0198	0.0056	1.02	0.89	0.5510	Na2O	1.37	5.99	A	0.98	1.05	0.00
Mg	Ka	2000.4	17.6798	0.2610	0.1177	16.80	13.94	0.7000	MgO	27.85	70.22	A	16.66	16.93	0.00
Al	Ka	4023.5	17.6798	0.5666	0.2359	36.51	27.31	0.6432	Al2O3	68.98	145.73	A	36.30	36.72	0.00
Si	Ka	22.3	17.6798	0.0079	0.0016	0.28	0.20	0.5603	SiO2	0.59	2.95	B	0.26	0.30	0.00
S	Ka	21.8	6.1060	0.0038	0.0019	0.25	0.16	0.7395		0.25	2.73	B	0.23	0.27	0.00
K	Ka	14.1	1.2416	0.0039	0.0018	0.21	0.11	0.8415	K2O	0.26	2.66	B	0.19	0.23	0.00
Ca	Ka	10.8	1.2416	0.0051	0.0016	0.18	0.09	0.8799	CaO	0.25	2.52	B	0.16	0.20	0.00
Ti	Ka	0.0	0.0000	0.0000	0.0000	0.00	0.00	0.8216	TiO2	0.00	2.38	B	-0.00	0.00	0.00
V	Ka	3.7	1.2416	0.0008	0.0008	0.10	0.04	0.8082	V2O3	0.15	2.26	B	0.08	0.12	0.00
Cr	Ka	3.2	1.2416	0.0009	0.0009	0.11	0.04	0.8239	Cr2O3	0.16	2.21	B	0.09	0.13	0.00
Mn	Ka	6.3	1.2416	0.0020	0.0020	0.25	0.09	0.8050	MnO	0.32	2.35	B	0.21	0.29	0.00
Fe	Ka	24.2	1.2416	0.0224	0.0095	1.16	0.42	0.8173	FeO	1.49	3.37	B	1.07	1.24	0.00
Ba	La	9.5	1.2416	0.0055	0.0039	0.58	0.08	0.6841	BaO	0.64	0.00	X	0.51	0.64	0.00
				0.8997	0.3832	102.33	100.00			102.33					0.00



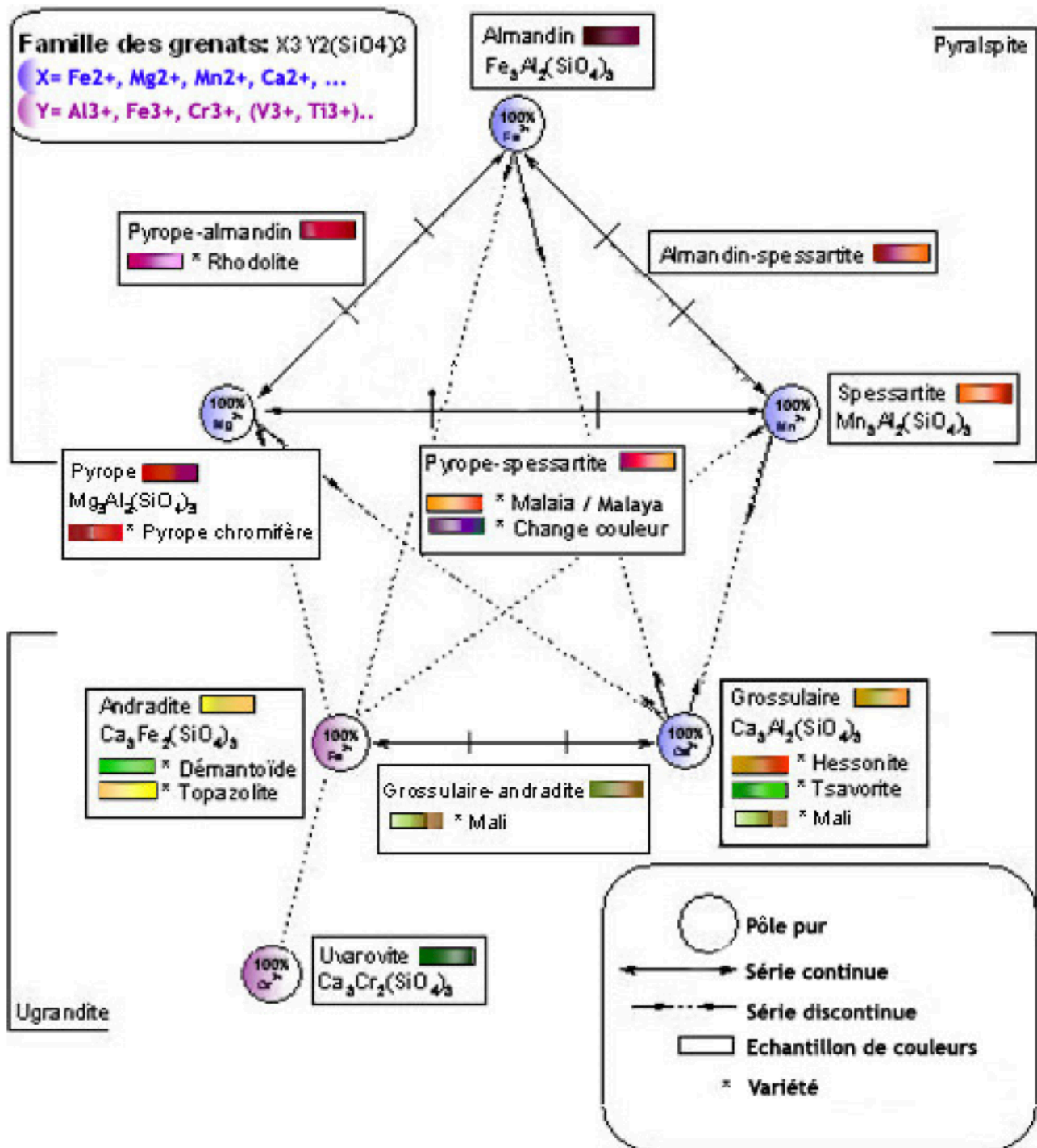
Annexe n°1.9 : Résultats de l'analyse chimique réalisée au MEB, pour l'échantillon MB16

El	Ligne	Int	Erreur	K	Kr	P%	A%	ZAF	Formule	Ox%	Pk/Bg	Class	LConf	HConf	Cat#
O						37.60	60.04	0.0000		0.00	0.00	X	141520639898333560000000000000	140198597307629230000000000000000000	0.00
Na	Ka	27.4	13.1657	0.0059	0.0017	0.35	0.39	0.4766	Na2O	0.47	2.76	B	0.34	0.36	0.00
Mg	Ka	927.5	13.1657	0.1210	0.0546	8.63	9.07	0.6368	MgO	14.30	21.77	A	8.57	8.68	0.00
Al	Ka	24.5	13.1657	0.0035	0.0014	0.22	0.21	0.6588	Al2O3	0.41	2.49	B	0.21	0.23	0.00
Si	Ka	2398.5	13.1657	0.8546	0.1680	22.09	20.09	0.7669	SiO2	47.25	49.05	A	22.00	22.17	0.00
Ca	Ka	917.1	1.5071	0.4315	0.1347	15.25	9.73	0.8864	CaO	21.34	30.95	A	15.16	15.35	0.00
Cr	Ka	10.1	0.4117	0.0028	0.0028	0.34	0.17	0.8080	Cr2O3	0.50	2.49	B	0.32	0.36	0.00
Fe	Ka	14.1	0.4117	0.0130	0.0055	0.68	0.31	0.8096	FeO	0.87	0.00	X	0.65	0.71	0.00
				1.4321	0.3687	85.15	100.00			85.15					0.00



ANNEXES 2 : SCHÉMA DES SÉRIES CONTINUES DES GRENATS

Annexe 2.1 : Schéma des séries continues et discontinues de la famille des Grenats, adapté du schéma de Mackowsky (Arlabosse J-M., 2004)



ANNEXES 3 : TABLEAU DE MANDELÉÏEV ET SON APPLICATION

Tableau périodique des éléments

Groupe → 1 2 13 14 15 16 17 18
 IA IIA IIIA IVA VA VIA VIIA VIIIA
 Période ↓

← nom de l'élément
 ← numéro atomique
 ← symbole chimique
 ← masse atomique relative ou (celle de l'isotope le plus stable)

primordial désintégration d'autres éléments synthétique

1	hydrogène 1 H 1,00794																	hélium 2 He 4,002602
2	lithium 3 Li 6,941	beryllium 4 Be 9,012182																
3	sodium 11 Na 22,98976928	magnésium 12 Mg 24,3050																
4	potassium 19 K 39,0983	calcium 20 Ca 40,078	scandium 21 Sc 44,955912	titane 22 Ti 47,867	vanadium 23 V 50,9415	chrome 24 Cr 51,9961	manganèse 25 Mn 54,938045	fer 26 Fe 55,845	cobalt 27 Co 58,933195	nickel 28 Ni 58,6934	cuivre 29 Cu 63,546	zinc 30 Zn 65,39	gallium 31 Ga 69,723	germanium 32 Ge 72,61	arsenic 33 As 74,92160	sélénium 34 Se 78,96	brome 35 Br 79,904	krypton 36 Kr 83,80
5	rubidium 37 Rb 85,4678	strontium 38 Sr 87,62	yttrium 39 Y 88,90585	zirconium 40 Zr 91,224	niobium 41 Nb 92,90638	molybdène 42 Mo 95,94	technétium 43 Tc 97,9072	ruthénium 44 Ru 101,07	rhodium 45 Rh 102,90550	palladium 46 Pd 106,42	argent 47 Ag 107,8682	cadmium 48 Cd 112,411	indium 49 In 114,818	étain 50 Sn 118,710	antimoine 51 Sb 121,760	tellure 52 Te 127,60	iode 53 I 126,90447	xénon 54 Xe 131,29
6	césium 55 Cs 132,9054519	baryum 56 Ba 137,327	lanthanides 57-71	hafnium 72 Hf 178,49	tantale 73 Ta 180,94788	tungstène 74 W 183,84	rhenium 75 Re 186,207	osmium 76 Os 190,23	iridium 77 Ir 194,217	platine 78 Pt 195,084	or 79 Au 196,966569	mercure 80 Hg 200,59	thallium 81 Tl 204,3833	plomb 82 Pb 207,2	bismuth 83 Bi 208,98040	polonium 84 Po [209,9824]	astate 85 At [209,98711]	radon 86 Rn [222,0176]
7	francium 87 Fr [223,0197]	radium 88 Ra [226,0254]	actinides 89-103	rutherfordium 104 Rf [261,1032]	dubnium 105 Db [262,1144]	seaborgium 106 Sg [266,1219]	bohrium 107 Bh [264,1247]	hassium 108 Hs [269,1341]	meitnerium 109 Mt [268,1388]	darmstadtium 110 Ds [272,1463]	roentgenium 111 Rg [272,1535]	copernicium 112 Cn [277]	ununtrium 113 Uut [284]	ununquadium 114 Uuq [289]	unupentium 115 Uup [288]	ununhexium 116 Uuh [292]	ununseptium 117 Uus [292]	ununoctium 118 Uuo [294]
				lanthane 57 La 138,90547	cérium 58 Ce 140,116	praseodyme 59 Pr 140,90765	néodyme 60 Nd 144,242	prométhium 61 Pm [144,9127]	samarium 62 Sm 150,36	europium 63 Eu 151,964	gadolinium 64 Gd 157,25	terbium 65 Tb 158,92535	dysprosium 66 Dy 162,500	holmium 67 Ho 164,93032	erbium 68 Er 167,259	thulium 69 Tm 168,93421	ytterbium 70 Yb 173,04	lutécium 71 Lu 174,967
				actinium 89 Ac [227,0277]	thorium 90 Th 232,03806	protactinium 91 Pa 231,03588	uranium 92 U 238,02891	neptunium 93 Np [237,0482]	plutonium 94 Pu [244,0642]	américium 95 Am [243,0614]	curium 96 Cm [247,0703]	berkélium 97 Bk [247,0703]	californium 98 Cf [251,0796]	einsteinium 99 Es [252,0830]	fermium 100 Fm [257,0951]	mendélévium 101 Md [258,0984]	nobelium 102 No [259,1011]	lawrencium 103 Lr [262,110]

Dans les méthodes de calcul Lasnier et Hanneman il est nécessaire de comprendre comment calculer les poids moléculaires des différentes molécules détectées et leurs équivalents monocationiques.

Pour cela il suffit de récupérer les masses atomiques relatives de chaque élément des molécules détectées. Ces masses atomiques sont données par le tableau de Mendeleïev.

Exemple de la molécule **SiO₂**, oxyde de silicium : (en vert sur le tableau ci-dessus)

La **molécule SiO₂** est composée d'un atome de 1 silicium (**Si**) et de 2 molécules d'oxygènes (**O**).

Grâce au tableau de Mendeleïev, nous pouvons trouver que :

- la masse atomique du silicium est égale à 28,0855
- la masse atomique d'un oxygène est égale à 15,9994

Cet oxyde possède donc une masse moléculaire de **60,0843**, c'est également l'équivalent monocationique pour 1 seul silicium.

➔ Détails : $28,0855 (\text{Si}) + 15,9994 (\text{O}) + 15,9994 (\text{O}) = 60,0843$

Exemple de la molécule **Al₂O₃**, oxyde d'aluminium : (en orange sur le tableau ci-contre)

La **molécule Al₂O₃** est composée d'un atome de 2 aluminiums (**Al**) et de 3 molécules d'oxygènes (**O**).

Grâce au tableau de Mendeleïev, nous pouvons trouver que :

- la masse atomique de l'aluminium est égale à 26,9815386
- la masse atomique d'un oxygène est égale à 15,9994

Cet oxyde possède donc une masse atomique de : 101,9612772.

➔ Détails $26,9815386 (\text{Al}) + 26,9815386 (\text{Al}) + 15,9994 (\text{O}) + 15,9994 (\text{O}) + 15,9994 (\text{O}) = 101,9612772$

Pour obtenir l'équivalent monocationique pour 1 seul aluminium (comme il est nécessaire pour les méthodes Lasnier et Hanneman), il faudra diviser ce résultat par deux, ce qui est égal à $101,9612772 / 2 = 50,9806386$

ANNEXES 4 : FICHES RÉCAPITULATIVES DES MÉTHODES EN FONCTION DES FAMILLES DE GEMMES

FICHE RÉCAPITULATIVE DES GRENATS (SÉRIE PYRALSPITE) : Méthode Lasnier

© Marine Bouvier – DUG de Nantes (2022)

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev

C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 ⇔ (C1/C2) x 1000

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associé(s) à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation ⇔ C3 x nO.

C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (Σ oxygènes)

Puis, calculer le nombre de cations x nombre d'oxygènes (12) / Σ oxygènes ⇔ (C3 x 12) / Σ oxygènes

OPTION 1) ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE : récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule selon les trois étapes ci-dessous :

1) Site Z (tétraédrique) = il est occupé par le silicium (Si) et l'aluminium (Al^{IV})

Le nombre de cations du site Z étant égal à 3, l'Al^{IV} viendra combler le site Z. Ainsi Al^{IV} = 3 - Si = 3 - ----

Ici, Z = Si ---- + Al^{IV} ----

2) Site Y (octaédrique) = Il est occupé principalement par Al, Fe³⁺, Cr³⁺ et V³⁺.

L'Al^{IV} correspondra à la part d'aluminium qui n'occupe pas le site Z, autrement dit : Al^{IV} = Al - Al^{IV} = ----

Ici, Y = Fe³⁺ ---- + Al^{IV} ---- + V ----

3) Site X (dodécacaédrique) = Il est principalement occupé par Fe²⁺, Mg, Mn et Ca.

Il suffit de récupérer les nombres de cations associés à 12 oxygènes calculés à l'étape C5, et les intégrer dans la formule comme ci-dessous.

Ici, X = Fe²⁺ ---- + Mn ---- + Mg ---- + Ca ----

Il suffit à présent d'intégrer les résultats ci-dessus dans la formule générale des grenats : X₃ Y₂ Z₃ O₁₂.

Ainsi la formule structurale de l'échantillon est :

→ (Mg ---- Mn ---- Fe²⁺ ---- Ca ----) (V ---- Al^{IV} ----) (Si ---- Al^{IV} ---- O₁₂)

OPTION 2) CALCUL DES PÔLES PURS : PYROPE, ALMANDIN, SPRESSARTITE, GROSSULAIRE ET ANDRADITE

Calculs des 5 pôles purs grâce aux formules ci-dessous. Avec :

- Sx = Somme des cations du site X (calculé à l'étape C5) = (Mg) + (Fe²⁺) + (Mn) + (Ca) = ----
- Sy = Somme des cations du site Y (calculé à l'étape C5) = (Ca) + (Fe³⁺) = ----

	Pyrope	Almandin	Spessartite	Grossulaire	Andradite
Formule générale	(Mg _{CS} x 100) / Sx	(Fe ²⁺ _{CS} x 100) / Sx	(Mn _{CS} x 100) / Sx	((Ca _{CS} - ((Fe ³⁺ _{CS} / 2) x 3)) / Sx) x 100	((Fe ³⁺ _{CS} / 2) / Sy) x 100
Formule appliquée	(---- x 100) / ----	(---- x 100) / ----	(---- x 100) / ----	((---- - ((---- / 2) x 3)) / ----) x 100	((---- / 2) / ----) x 100
% en pôle pur	= ---- %	= ---- %	= ---- %	= ---- %	= ---- %

(pôle pyrope) Mg (pôle almandin) Fe (pôle almandin) Mn (pôle spessartite)

1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleiev)

3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).

4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés en 3.

5) Multiplier les valeurs obtenues à l'étape 3 par 100/S pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux.

OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur.

Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final.

Si il est <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.

OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 3/5 (3 correspondant au nombre de cations du site X), avec ici 3/5 = 3/ ---- = ----

	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
FeO (pôle almandin)	% ----	----	----	----	% ----	Fe ----
MgO (pôle pyrope)	% ----	----	----	----	% ----	Mg ----
MnO (pôle spessartite)	% ----	----	----	----	% ----	Mn ----
CaO (pôle grossulaire-andradite)	% ----	----	----	----	% ----	Ca ----
			4) S = ----		Total = ----- %	

En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des grenats de la série pyralspite:
X₃ Y₂ (Z₃ O₁₂), la formule structurale du grenat étudié est donc :

(Les valeurs de Al et Si ne sont pas calculables par cette méthode et correspondent à leurs valeurs théoriques. V n'est pas calculable ici)

→ (Mg ---- Mn ---- Fe ---- Ca ----) Al₂ (SiO₄)₃

Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du grenat étudié est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

Fe (pôle almandin)

(pôle pyrope) Mg

Mn (pôle spessartite)

94

MÉTHODES DE CALCUL DES FORMULES STRUCTURALES APPLIQUÉES À LA GEMMOLOGIE
MARINE BOUVIER (18/01/2023) – DIPLÔME UNIVERSITAIRE DE GEMMOLOGIE DE NANTES (DUG)

FICHE RÉCAPITULATIVE DES GRENATS (SÉRIE UGRANDITE) : Méthode Lasnier

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev

C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 ⇔ $(C1/C2) \times 1000$

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associé(s) à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation ⇔ $C3 \times nO$.

C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (Σ oxygènes.)

Puis, calculer le nombre de cations x nombre d'oxygènes (12) / Σ oxygènes ⇔ $(C3 \times 12) / \Sigma$ oxygènes

	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	-----%	-----	-----	-----	-----	Si -----
Al ₂ O ₃	-----%	-----	-----	-----	-----	Al ^{IV} ----- Al -----
Cr ₂ O ₃	-----%	-----	-----	-----	-----	Cr ³⁺ -----
V ₂ O ₃	-----%	-----	-----	-----	-----	V -----
Fe ₂ O ₃	-----%	-----	-----	-----	-----	Fe ³⁺ -----
MnO	-----%	-----	-----	-----	-----	Mn -----
CaO	-----%	-----	-----	-----	-----	Ca -----
MgO	-----%	-----	-----	-----	-----	Mg -----
	= -----			Σ oxygènes = -----		

OPTION 1) ÉTABLISSEMENT DE LA FORMULE STRUCTURALE : récupérer le nombre de cations associés à 12 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule selon les trois étapes ci-dessous :

1) Site Z (tétraédrique) = Il est occupé par le silicium (Si) et l'aluminium (Al^{IV})

Le nombre de cations du site Z étant égal à 3, l'Al^{IV} viendra combler le site Z. Ainsi Al^{IV} = 3 - Si = 3 - -----
Ici, Z = Si ----- + Al^{IV} -----

2) Site Y (octaédrique) = Il est occupé principalement par Al, Fe³⁺, Cr³⁺ et V³⁺.

L'Al^{IV} correspondra à la part d'aluminium qui n'occupe pas le site Z, autrement dit : Al^{IV} = Al - Al^{IV} = -----
Ici, Y = Fe³⁺ ----- + Al^{IV} ----- + Cr ----- + V -----

3) Site X (dodécaédrique) = Il est principalement occupé par Fe²⁺, Mg, Mn et Ca.

Il suffit de récupérer les nombres de cations associés à 12 oxygènes calculés à l'étape C5, et les intégrer dans la formule comme ci-dessous.

Ici, X = Fe²⁺ ----- + Mn ----- + Mg ----- + Ca -----

Il suffit à présent d'intégrer les résultats ci-dessus dans la formule générale des grenats : X₃ Y₂ (Z₃O₁₂).

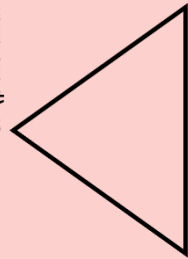
Ainsi la formule structurale de l'échantillon est :

→ Ca_{2,744} (V_{0,004} Cr_{0,005} Fe³⁺_{0,007} Al^{IV}_{1,995}) (Si_{3,122} O₁₂)

Selon les résultats de l'option 2, la teneur en pôles purs du grenat étudié est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

Cr (pôle uvarovite)



OPTION 2) CALCUL DES PÔLES PURS : PYROPE, ALMANDIN, SPESPARTITE, GROSSULAIRE et ANDRADITE

Calculs des 5 pôles purs grâce aux formules ci-dessous. Avec :

- Sx = Somme des cations du site X (calculé à l'étape C5) = $\frac{(Mg)}{(Al)} + \frac{(Fe^{2+})}{(Fe^{3+})} + \frac{(Mn)}{(Cr^{3+})} + \frac{(Ca)}{(Ca)} = \text{-----}$

- Sy = Somme des cations du site Y (calculé à l'étape C5) = $\frac{(Mg)}{(Al)} + \frac{(Fe^{2+})}{(Fe^{3+})} + \frac{(Mn)}{(Cr^{3+})} + \frac{(Ca)}{(Ca)} = \text{-----}$

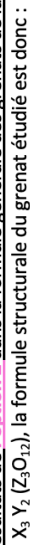
	Pyrope	Almandin	Spessartite	Grossulaire	Andradite	Uvarovite
Formule générale	$(Mg_{CS} \times 100) / Sx$	$(Fe^{2+}_{CS} \times 100) / Sx$	$(Mn_{CS} \times 100) / Sx$	$(Al^{IV}_{CS} \times 100) / Sy$	$(Fe^{3+}_{CS} \times 100) / Sy$	$(Cr^{3+}_{CS} \times 100) / Sy$
Formule appliquée	$(\text{-----} \times 100) / \text{-----}$	$(\text{-----} \times 100) / \text{-----}$	$(\text{-----} \times 100) / \text{-----}$	$(\text{-----} \times 100) / \text{-----}$	$(\text{-----} \times 100) / \text{-----}$	$(\text{-----} \times 100) / \text{-----}$
% en pôle pur	= ----- %	= ----- %	= ----- %	= ----- %	= ----- %	= ----- %

FICHE RÉCAPITULATIVE DES GRENATS (SÉRIE UGRANDITE) : Méthode Hanneman

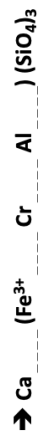
1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique				
2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev)				
3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).				
4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.				
5) Multiplier par 100/S les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages de membres finaux. Ici $100 / S = 100 / \text{---} = \text{---}$				
OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final. Si il est <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.				
OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 2/S (2 correspondant au nombre de cations du site X), avec ici $2/S = 2 / \text{---} = \text{---}$				

	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
Fe₂O₃ (pôle andradite)	% ----	----	----	----	% ----	Fe ----
Al₂O₃ (pôle grossulaire)	% ----	----	----	----	% ----	Al ----
Cr₂O₃ (pôle uvarovite)	% ----	----	----	----	% ----	Cr ----
			4) S = ----		Total = ---- %	

En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des grenats de la série ugrandite :

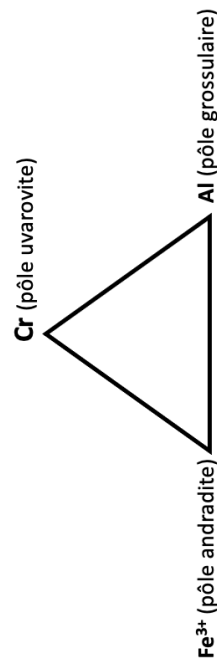


(La valeur de Si n'est pas calculable par cette méthode et correspond à la valeur théorique)



Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du grenat étudié est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon



FICHE RÉCAPITULATIVE DES OLIVINES : Méthode Lasnier

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique					
C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev					
C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 ⇔ (C1/C2) x 1000					
C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associé(s) à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation ⇔ C3 x nO					
C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (Σ oxygènes) Puis, calculer le nombre de cations associés à 4 oxygènes : nombre de cations x nombre d'oxygènes (4) / Σ oxygènes ⇔ (C3 x 4) / Σ oxygènes					
OPTION 1) Établissement de la formule structurale : récupérer le nombre de cations associé à 4 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale du minéral étudié.					

	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	----- %	-----	-----	-----	-----	Si -----
MgO	----- %	-----	-----	-----	-----	Mg -----
FeO	----- %	-----	-----	-----	-----	Fe -----
	= -----			Σ oxygènes = -----		

En intégrant les résultats de l'option 1 dans la formule générale des olivines : X₂(SiO₄)₂
la formule structurale de l'olivine étudiée est :

→ (Mg ----- Fe²⁺ -----) (Si O₄)

Selon les résultats de l'option 2, la teneur en pôles purs de l'olivine étudiée est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

(pôle fayalite) Fe²⁺ ● ----- ● Mg (pôle forstérite)

OPTION 2 Calculer la teneur en pôles purs (en %) :			
Teneur en pourcentage du pôle pur = (C5 du pôle pur / Σ des C5 des pôles purs) x 100 (avec Σ des C5 de Mg + Fe ²⁺ = ----- + ----- = -----)			
Mg = C5 _{Mg} / Σ C5 (Mg + Fe ²⁺) x 100 = (----- / -----) x 100 = ----- % de forstérite			
Fe ²⁺ = C5 _{Fe2+} / Σ C5 (Mg + Fe ²⁺) x 100 = (----- / -----) x 100 = ----- % de fayalite			

FICHE RÉCAPITULATIVE DES OLIVINES : Méthode Hanneman

1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique				
2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev)				
3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).				
4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.				
5) Multiplier par 100/S les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux.				
OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final. Si <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.				
OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 2/S (2 correspondant nombre de cations du site X), avec ici 2/S = 2/_____ = _____				

	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
MgO (pôle forstérite)	% -----	-----	-----	-----	% -----	Mg -----
FeO (pôle fayalite)	% -----	-----	-----	-----	% -----	Fe -----
			4) S = -----		Total = ----- %	

En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des olivines :
 $X_2(\text{SiO}_4)_2$ la formule structurale de l'olivine étudiée est donc :
 (la valeur de Si n'est pas calculable par cette méthode et correspond à la valeur théorique)

→ (Mg _____ Fe²⁺ _____) (Si O₄)

Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs de l'olivine étudiée est :
 → dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

(pôle fayalite) Fe²⁺ ● ----- ● Mg (pôle forstérite)

FICHE RÉCAPITULATIVE DES FELDSPATHS : Méthode Lasnier

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev

C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 ⇔ $(C1/C2) \times 1000$

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation ⇔ $C3 \times nO_{\text{cations}}$

C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations ($\Sigma \text{ oxygènes}$)
 Puis, calculer le nombre de cations associés à 8 oxygènes : nombre de cations x nombre d'oxygènes (8) / $\Sigma \text{ oxygènes}$ ⇔ $(C3 \times 8) / \Sigma \text{ oxygènes}$

OPTION 1) Établissement de la formule structurale : récupérer le nombre de cations associés à 8 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale du minéral étudié.

En intégrant les résultats de l'option 1 dans la formule générale des feldspaths :
 $X (Al Si_3 O_8)$, la formule structurale du feldspath étudié est donc :

→ (K ____ Na ____ Ca ____) (Al ____ Si ____ O₈)

Selon les résultats de l'option 2, la teneur en pôles purs du feldspath étudié est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	_____ %	_____	_____	_____	_____	Si _____
Al ₂ O ₃	_____ %	_____	_____	_____	_____	Al _____
Na ₂ O	_____ %	_____	_____	_____	_____	Na _____
CaO	_____ %	_____	_____	_____	_____	Ca _____
K ₂ O	_____ %	_____	_____	_____	_____	K _____
	= _____			$\Sigma \text{ oxygènes} = \text{_____}$		

OPTION 2) Calculer la teneur en pôles purs (en %) :

Teneur en pourcentage du pôle pur = $(C5_{\text{du pôle pur}} / \Sigma \text{ des } C5 \text{ des pôles purs}) \times 100$
 (avec Σ des C5 de K + Na + Ca = _____ + _____ = _____)

$K = C5_K / \Sigma C5 (K + Na + Ca) \times 100 = (\quad / \quad) \times 100 = \quad \%$
 $Na = C5_{Na} / \Sigma C5 (K + Na + Ca) \times 100 = (\quad / \quad) \times 100 = \quad \%$
 $Ca = C5_{Ca} / \Sigma C5 (K + Na + Ca) \times 100 = (\quad / \quad) \times 100 = \quad \%$

$\quad \%$ d'orthoclase
 $\quad \%$ d'albite
 $\quad \%$ d'anorthite

FICHE RÉCAPITULATIVE DES FELDSPATHS : Méthode Hanneman

1) Récupérer au préalable les **pourcentages pondéraux d'oxydes** donnés par l'analyse chimique

2) Calculer les **poids moléculaires** pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev)

3) Diviser chaque **pourcentage d'oxydes** par son **poids moléculaire (1/2)**.

4) Faire la somme « S » des **résultats précédemment calculés**.

5) Multiplier par 100/S les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde afin de les convertir en **pourcentages des membres finaux**.

OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux **pourcentages pour chaque pôle pur**.
Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final.
Si <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.

OPTION 2) Pour obtenir la **formule structurale**, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 1/S (1 correspondant nombre de cations du site X), avec ici 1/S = 1/ ---- = ----

	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
K ₂ O (pôle orthoclase)	----- %	-----	-----	-----	----- %	K -----
Na ₂ O (pôle albite)	----- %	-----	-----	-----	----- %	Na -----
CaO (pôle anorthite)	----- %	-----	-----	-----	----- %	Ca -----
			4) S = -----		Total = ----- %	

En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des feldspaths :
X (Al Si₃ O₈), la formule structurale du feldspath étudié est donc :
(Les valeurs de Al et Si ne sont pas calculables par cette méthode et correspondent à leurs valeurs théoriques)

→ (K ----- Na ----- Ca -----) (Al Si₃ O₈)

Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du feldspath étudié est :
→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

Na (pôle albite)

K (pôle orthoclase)

Ca (pôle anorthite)

100

MÉTHODES DE CALCUL DES FORMULES STRUCTURALES APPLIQUÉES À LA GEMMOLOGIE
MARINE BOUVIER (18/01/2023) – DIPLÔME UNIVERSITAIRE DE GEMMOLOGIE DE NANTES (DUG)

FICHE RÉCAPITULATIVE DES SPINELLES : Méthode Lasnier

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev

C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le Poids Moléculaire (C2) x 1000 ⇔ (C1/C2) x 1000

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation ⇔ C3 x nO

C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (Σ oxygènes)
Puis, calculer le nombre de cations associés à 4 oxygènes : nombre de cations x nombre d'oxygènes (4) / Σ oxygènes ⇔ (C3 x 4) / Σ oxygènes

OPTION 1) Établissement de la formule structurale : récupérer le nombre de cations associés à 4 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale du minéral étudié.

En intégrant les résultats de l'option 1 dans la formule générale des spinelles :
 $X Al_2 O_4$, la formule structurale du spinelle étudié est donc :

→ (K Na Ba Ca Mg Mn Fe Si S) (V Cr Al) O₄

Selon les résultats de l'option 2, la teneur en pôles purs du spinelle étudié est :
 → dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
Na ₂ O	----- %	-----	-----	-----	-----	Na -----
MgO	----- %	-----	-----	-----	-----	Mg -----
Al ₂ O ₃	----- %	-----	-----	-----	-----	Al -----
SiO ₂	----- %	-----	-----	-----	-----	Si -----
S	----- %	-----	-----	-----	-----	S -----
K ₂ O	----- %	-----	-----	-----	-----	K -----
CaO	----- %	-----	-----	-----	-----	Ca -----
TiO ₂	----- %	-----	-----	-----	-----	Ti -----
V ₂ O ₃	----- %	-----	-----	-----	-----	V -----
Cr ₂ O ₃	----- %	-----	-----	-----	-----	Cr -----
MnO	----- %	-----	-----	-----	-----	Mn -----
FeO	----- %	-----	-----	-----	-----	Fe -----
BaO	----- %	-----	-----	-----	-----	Ba -----
	= -----			Σ oxygènes = -----		

OPTION 2) Calculer la teneur en pôles purs (en %) :

Teneur en pourcentage du pôle pur = (C5 du pôle pur / Σ des C5 des pôles purs) x 100
 (avec Σ des C5 de Mg + Fe + Zn = -----)

Mg = C5_{Mg} / Σ C5 (Mg + Fe + Zn) x 100 = (/) x 100 = ----- % de spinelle s. s.

Fe = C5_{Fe} / Σ C5 (Mg + Fe + Zn) x 100 = (/) x 100 = ----- % d'hercynite

Zn = C5_{Zn} / Σ C5 (Mg + Fe + Zn) x 100 = (/) x 100 = ----- % de gahnite

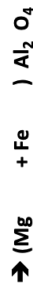
FICHE RÉCAPITULATIVE DES SPINELLES : Méthode Hanneman

1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique				
2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev)				
3) Diviser chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2).				
4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.				
5) Multiplier par 100/S les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux.				
OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final. Si il est <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.				
OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 1/S (1 correspondant nombre de cation du site X), avec ici 1/S = 1/_____ = _____				

	1)	2)	3)	5)	OPTION 1	OPTION 2
MgO (pôle spinelle s.s.)	_____ %	_____	_____	_____	_____ %	Mg _____
FeO (pôle hercynite)	_____ %	_____	_____	_____	_____ %	Fe _____
ZnO (pôle gahnite)	_____ %	_____	_____	_____	_____ %	Zn _____
			4) S = _____		Total = _____ %	

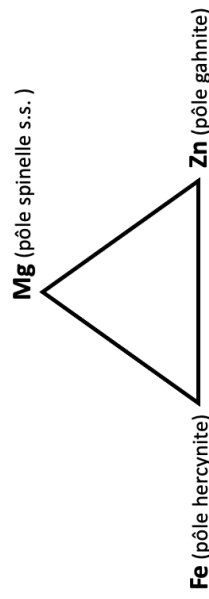
En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des spinelles :

X Al₂ O₄, la formule structurale du spinelle étudié est donc :
(La valeur de Al n'est pas calculable par cette méthode et correspond à la valeur théorique)



Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du spinelle étudié est :

→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon



FICHE RÉCAPITULATIVE DES PYROXÈNES : Méthode Lasnier

C1) Récupérer les pourcentages pondéraux d'oxydes donnés par l'analyse chimique

C2) Calculer le poids moléculaire pour chaque cation en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleïev

C3) Calculer le nombre de cations : pourcentages pondéraux (C1) / le poids moléculaire (C2) x 1000 ⇔ (C1 / C2) x 1000

C4) Calculer le nombre d'oxygène(s) associés à chacun des cations : nombre de cations x nombre d'oxygènes associés à chaque cation ⇔ C3 x nO

C5) Calculer la somme des nombres d'oxygènes associés à chacun des cations (Σ oxygènes)
Puis, calculer le nombre de cations associés à 6 oxygènes : nombre de cations x nombre d'oxygènes (6) / Σ oxygènes ⇔ (C3 x 6) / Σ oxygènes

OPTION 1) Établissement de la formule structurale : récupérer le nombre de cations associés à 6 oxygènes calculé à l'étape C5, et l'intégrer dans la formule en respectant l'équilibre de la formule structurale du minéral étudié.

	C1	C2	C3	C4	C5	OPTION 1
SiO ₂	----- %	-----	-----	-----	-----	Si -----
Al ₂ O ₃	----- %	-----	-----	-----	-----	Al ^{IV} ----- Al ^{VI} -----
MgO	----- %	-----	-----	-----	-----	Mg -----
Na ₂ O	----- %	-----	-----	-----	-----	Na -----
CaO	----- %	-----	-----	-----	-----	Ca -----
Cr ₂ O ₃	----- %	-----	-----	-----	-----	Cr -----
FeO	----- %	-----	-----	-----	-----	Fe -----
	= -----			Σ oxygènes = -----		

OPTION 2)

A) Calcul de la teneur des principaux pôles purs des pyroxènes :

a) Calcul des quantités de composants principaux :

Diopside = Mg_{C5} = ----- molécule(s) ; Hédenbergite = (Ca_{C5} - Mg_{C5}) = ----- = ----- molécule(s)
 Jadeite = Al_{C5} = ----- molécule(s) ; Acmite (aegirine) = (Na_{C5} - Al_{C5}) = ----- = ----- molécule(s)

b) Calcul de la teneur en pôles purs :

Teneur pour chaque pôle pur = (C5 du pôle pur / Σ des quantités des composants principaux) x 100.

(avec Σ des composants principaux (diopside + hédénbergite + jadeite + acmite) = ----- + ----- + ----- = -----)

(quantité de diopside / Σ) x 100 ⇔ (/) x 100 = ----- % de diopside
 (quantité d'hédénbergite / Σ) x 100 ⇔ (/) x 100 = ----- % d'hédénbergite
 (quantité de jadeite / Σ) x 100 ⇔ (/) x 100 = ----- % de jadeite
 (quantité de acmite / Σ) x 100 ⇔ (/) x 100 = ----- % d'acmite (ou aegirine)

B) Calcul de la teneur en pôles purs de la série des clinopyroxènes ferromagnésiens et calciques :

Teneur pour chaque pôle pur = (C5 du pôle pur / Σ des C5 des pôles purs) x 100.

(avec Σ des C5 de Ca + Fe²⁺ + Mg = ----- + ----- = -----)

Ca = (C5_{Ca} / Σ C5) x 100 = (/) x 100 = ----- % de wollastonite
 Fe²⁺ = (C5_{Fe2+} / Σ C5) x 100 = (/) x 100 = ----- % de clinoférosillite
 Mg = (C5_{Mg} / Σ C5) x 100 = (/) x 100 = ----- % de clinoenstatite

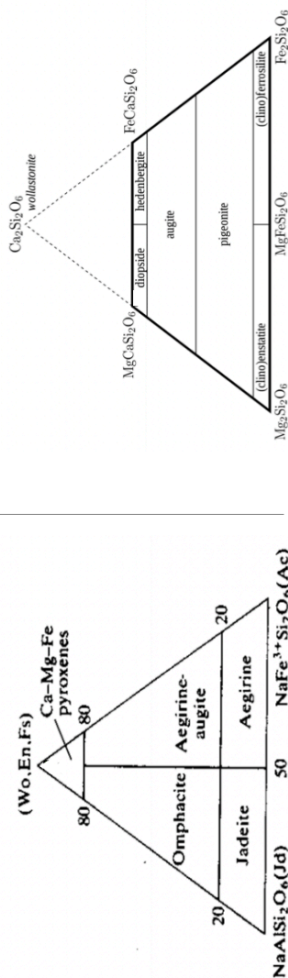
En intégrant les résultats de l'option 1 dans la formule générale des pyroxènes :

W (X, Y) Z₂ O₆, la formule structurale du pyroxène étudié est donc :→ (Na) Ca Mg Fe²⁺ Cr Al^{VI}) Si O₆

Selon les résultats de l'option 2 :

A) Les teneurs en pôles purs principaux du pyroxène :

B) Les teneurs en pôles purs de la série des clinopyroxènes ferromagnésiens et calciques :



→ dessiner un carré sur les diagrammes ci-contre représentant l'échantillon

FICHE RÉCAPITULATIVE DES PYROXÈNES : Méthode Hanneman

1) Récupérer au préalable les pourcentages pondéraux d'oxydes donné par l'analyse chimique				
2) Calculer les poids moléculaires pour chaque cation (en prenant pour références les masses atomiques relatives de chaque élément données par le tableau de Mendeleiev)				
3) Diviser le pourcentage de chaque pourcentage d'oxydes par son poids moléculaire (1/2) .				
4) Faire la somme « S » des résultats précédemment calculés.				
5) Multiplier par 100/S les valeurs obtenues à l'étape 3 pour chaque oxyde afin de les convertir en pourcentages des membres finaux. Ici $100 / S = 100 / \text{---} = \text{---}$				
OPTION 1) Les résultats de l'étape 5 correspondent aux pourcentages pour chaque pôle pur. Si un résultat est >70% alors l'échantillon prend le nom du membre final. Si il est <70% alors c'est un mélange entre deux (ou plusieurs) phases solides et prendra donc le nom des deux pôles purs principaux.				
OPTION 2) Pour obtenir la formule structurale, il faut multiplier les résultats obtenus à l'étape 3 pour chaque oxyde par 2/S (2 correspondant au nombre de cations des sites W, X et Y), avec ici $2/S = 2 / \text{---} = \text{---}$				
	1)	2)	3)	OPTION 1
CaO (pôle wollastonite)	% ----	----	----	OPTION 2
MgO (pôle clino-enstatite)	% ----	----	----	Ca ----
FeO (pôle clino-ferrosilite)	% ----	----	----	Mg ----
			4) S = ----	Fe ----
				Total = ---- %

En intégrant les résultats de l'option 2 dans la formule générale des pyroxènes :
 $W(X, Y)Z_2O_6$, la formule structurale du pyroxène étudié est donc :
(La valeur de Si n'est pas calculable par cette méthode et correspond à la valeur théorique)



Selon les résultats de l'option 1, la teneur en pôles purs du pyroxène étudié est :
→ dessiner un carré sur le diagramme ci-contre représentant l'échantillon

