

ALGUMAS PROPRIEDADES ÍNDICE DOS GRANITOS DOS LOCAIS DAS BARRAGENS DE MIDDÕES E DE CASTELO DE PAIVA

M. Quinta Ferreira (Museu Lab. Min. Geol. U.C.)

Com vista à caracterização das rochas graníticas determinaram-se várias propriedades índice em amostras com diferentes graus de alteração. Verificou-se que há correlação negativa entre a porosidade e a velocidade de propagação das ondas P (Vp), bem como entre aquela e o módulo de elasticidade dinâmico. Há correlações positivas entre Vp seco e as massas volúmicas e entre Vp saturado e o valor do ensaio de desgaste em meio húmido.

Executou-se o ensaio do azul de metileno, tendo-se verificado que este se pode relacionar com o valor da expansão por embebição.

Aplicou-se a noção de índice de qualidade, o que permitiu determinar a contribuição da fracção poros e fissuras para a porosidade total das rochas graníticas estudadas.

CRISTALOQUÍMICA DAS ESTRUTURAS TETRAÉDRICAS NOS SULFURETOS NATURAIS: CALCOPIRITE E MINERAIS AFINS

Mª Ondina Figueiredo (Centro de Cristal. e Mineral., IICT, Lx.)
Mª João Basto (Laboratório de Miner. e Petrol., IST, Lisboa)

Designam-se por "tetraédricas" as estruturas cristalinas em que cada átomo se encontra rodeado por outros quatro dispostos segundo os vértices de um tetraedro regular ou apenas ligeiramente distorcido; por contraposição às estruturas "normais" pode ocorrer localmente a coordenação três (configuração piramidal) nas estruturas ditas "lacunares". Correspondem a substituições ordenadas nos tipos estruturais do diamante e da lonsdaleite e são geralmente relacionáveis com a blenda e a wurtzite por apresentarem um empacotamento compacto - cúbico, hexagonal ou mesmo misto - dos "aniões" (i.e., espécies atómicas mais electronegativas). Este grupo cristaloquímico abrange materiais tecnologicamente interessantes devido a terem propriedades ópticas não-lineares e serem semi-condutores, e minerais de grande importância metalogenética e valor económico, como a calcopirite e outros sulfuretos (s.l.) estruturalmente afins.

Apresenta-se uma sistemática cristaloquímica das estruturas tetraédricas em compostos naturais - sulfuretos (s.s.), selenetos e teluretos - correspondentes às fórmulas gerais AX, ABX₂, A₂BX₃, A₃BX₄, A₂BCX₄, A₃BX₆ e outras mais complexas, abrangendo mais de quarenta espécies minerais. Consideram-se ainda desvios do carácter rigorosamente tetraédrico, quer por alteração configuracional (cubanite, nowackite e outros), quer por inserção adicional em posições tetraédricas (e.g. bornite) ou octaédricas (e.g. haycockite). Sugerem-se relações de dependência entre os factores geométricos nas estruturas cristalinas dos minerais isotípicos da calcopirite, tendo em conta os resultados publicados para compostos sintéticos relativamente à estrutura electrónica e ao estado de ligação química.

Esboçam-se algumas interpretações paragenéticas perspectivadas pela presente síntese cristaloquímica.

CRYSTALCHEMISTRY OF 3d - TRANSITION METAL PYRITE AND MARCASITE TYPE MINERALS

M.O. Figueiredo (Centro de Crist. e Miner., IICT, Lisboa)
M.J. Basto (Lab. de Miner. e Petrol., IST, Lisboa), A. Alvarez e J.L. Briansó (Dep. Crist., Univ. Autónoma, Barcelona)

A synopsis is presented on the crystalchemistry of poly anionic compounds with the basic crystal-structure types "pyrite" and "marcasite", and corresponding derivatives by distortion and/or anionic ordering (ullmanite / cobaltite / gersdorffite and löllingite / safflorite / arsenopyrite). Minerals with general formulae MX₂ and MXY are considered, with emphasis on the chalcogenides (X = S, Se, Te) and pnictides (X, Y = As, Sb; not P, for natural compounds) of the first transition - metal series (M = Mn,

Fe, Co, Ni, Cu). Geometric and topologic features accounting for changes in the state of chemical bonding are analysed, namely, the geometry of anion and cation coordination polyhedra, interatomic distances, and unit anionic volume. Whenever data are available, these geometric crystalchemical parameters are correlated with changes in the observed physical properties of well characterized minerals as a function of the chemical nature of the anion and of the crystal-structure type assumed by the mineral. For the iron minerals with marcasite structure type and depending on the atomic number of the anion, a linear correlation is found between the anionic volume and either the interatomic distances (M-M and X-X) or the actual values of Vickers hardness and reflectivity. Similar conclusions are drawn for pyrite-type sulfides and marcasite-type arsenides of 3d-transition metals as a function of the atomic number of the metal, with the exception of manganese. Further evidence is found that löllingite structure-type contains metal-metal chains along the c axis beyond having X-X dimeric anions, being therefore simultaneously polycationic and polyanionic. The same holds for safflorite and arsenopyrite structure types where metal-metal dimers are recognizable through the geometric crystalchemical parameters.

MINDAT: UM SISTEMA INTERACTIVO PARA CONSTITUIÇÃO E GESTÃO DE UM BANCO DE DADOS MINERALÓGICOS EM MICROCOMPUTADORES

M.O. Figueiredo (Centro Crist. e Miner., IICT, Lisboa)*
R.A. David Gomes (Centro Geol., IICT, Lisboa) e M.J. Basto (Lab. Min. e Petrol., IST, e Centro Petrol. e Geoq., INIC, Lisboa).

Destinado a microcomputadores autónomos, com sistemas operativos PC/MS-DOS, o MINDAT é uma aplicação interactiva de um gestor de bases de dados do tipo relacional, que não requer do utilizador conhecimentos de programação. O sistema permite armazenar, actualizar e seleccionar dados de índole mineralógica, através de instruções simples após escolha de uma das opções constantes de um "menu" específico. Pretende-se colocar à disposição do mineralogista toda a informação relevante de índole geral sobre as várias espécies minerais, os correspondentes tipos estruturais e as respectivas ocorrências à escala mundial e em território português.

Esta informação está distribuída por três tipos de tabelas. No primeiro, correspondente à descrição mineralógica de espécies, são criadas fichas contendo o nome do mineral, os dados químicos, cristalográficos e morfológicos, as propriedades ópticas e outras propriedades físicas, dados espectroscópicos e de difracção de raios-X, e outras informações adicionais consideradas pertinentes para cada espécie mineral. As tabelas de tipos estruturais, que corresponderão a catorze conjuntos de acordo com o modo reticular das estruturas abrangidas, conterão toda a informação de índole cristaloquímica e estrutural, organizada em função dos princípios de sistematização previamente estabelecidos /1/. Do terceiro tipo de tabelas constarão dados de mineralogia regional e referências bibliográficas que encaminharão o utilizador para fontes de informação pormenorizada. A articulação entre os diferentes tipos de tabelas é feita através de códigos comuns. As fichas constantes das tabelas são criadas preenchendo "impressos" apresentados no visor, os quais são também utilizados para a saída de informação.

A estruturação deste banco de dados articula-se com os esforços desenvolvidos pela Comissão de Dados Minerais e Classificação (IMA), em cujos trabalhos Portugal está representado.

/1/ M.O. Figueiredo (1985). "The interplay of chemical and structural data in the classification of minerals" ECM-9, Torino.

SOBRE O ESTADO DO FERRO NA DOLOMITE DE CARBONATITOS DO CHÃO DE ARRUELA ILHA DE SANTIAGO, REPÚBLICA DE CABO VERDE

M.O. Figueiredo (C. Cristalografia e Mineralogia, IICT, Lisboa)
J.C. Waerenborg (Dept. Quím., ICEN-LNETI, Sacavém), L. Celestino Silva (C. Geologia, IICT, Lisboa), J.M. Peixoto Cabral (Dept. Quím., ICEN, Sacavém)

A cor das dolomites nos carbonatitos das Ilhas de Cabo Verde pode variar entre o cinzento nitidamente azulado e o ôcre carregado, apresentando também