

## CUANTIFICACION DE FASES NO CRISTALINAS UTILIZANDO EL MÉTODO DE RIETVELD: COMPARACIÓN DE METODOLOGÍAS Y PROGRAMAS COMPUTACIONALES APLICADOS A MUESTRAS NATURALES

María S. Conconi<sup>1,2\*</sup>, Matias Stabile<sup>1</sup>, Matias R. Gauna<sup>1,3</sup>, Nicolás M. Rendtorff<sup>1,2</sup>, Karina Irvicelli<sup>4</sup>, Inés Loyza<sup>4</sup>, Bernarda Epele<sup>4</sup>, Mariano Cipollone<sup>4,5</sup>

<sup>1</sup> CETMIC, Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica (CONICET La Plata - CIC PBA. Camino Centenario y 506, C.C. 49, (B1897ZCA), M.B. Gonnet, Buenos Aires, Argentina.

<sup>2</sup> Depto. de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, 47 y 115, La Plata, Argentina.

<sup>3</sup> Depto. Construcciones, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, 47 y 115, La Plata, Argentina.

<sup>4</sup> Y-TEC, YPF Tecnología. Avenida del Petróleo S/N Berisso, Buenos Aires, Argentina

<sup>5</sup> UNAJ, Universidad Nacional Arturo Jauretche, Av. Calchaquí 6200, Florencio Varela, Argentina

\* [mconconi@cetmic.unlp.edu.ar](mailto:mconconi@cetmic.unlp.edu.ar)

Tanto para su utilización como materia prima industrial como por su importancia en procesos tecnológicos como la fractura hidráulica, la caracterización fisicoquímica, mecánica y estructural de las rocas es un desafío de permanente actualidad. Las mismas están compuestas por múltiples minerales, de diversa composición y estructura cristalina y su caracterización se realiza con un conjunto de técnicas que brindan información sobre un aspecto determinado de la misma (composición elemental, composición mineralógica, tamaño de partículas, etc.). La composición mineralógica en particular se aborda principalmente con la Difracción de Rayos X (DRX), en algunos casos, aplicando metodologías basadas en el Método de Rietveld (MR) [1].

Por otro lado, la presencia de una porción de material que no presenta ordenamiento cristalino (amorfo) modifica las propiedades de las rocas, lo que condiciona su uso y comportamiento. Existen diversas metodologías basadas en DRX para la caracterización y cuantificación de dichos compuestos, algunas de ellas pueden aplicarse integradas a la cuantificación por el MR [2-3].

En este trabajo se presentan los resultados de la comparación de las cuantificaciones de fases minerales cristalinas y contenido amorfo realizadas con los programas TOPAS, Siroquant (ambos comerciales) y Fullprof (libre). Se abordaron dos metodologías de cuantificación en todos los programas, con patrón interno y con patrón externo, utilizando la misma secuencia y parámetros de refinamiento. Las muestras fueron preparadas a partir de muestras naturales patrones, de composición conocida (cuarzo, microclino, albita y calcita), con agregado de silica gel en 5, 10 y 15%.

Los resultados permiten definir estrategias de abordaje e incertidumbres en la cuantificación de este tipo de muestras naturales, de interés tecnológico. Las desviaciones de las cuantificaciones en relación a los valores nominales no superaron el 5% en peso en ninguna de las metodologías utilizadas. Esto valida la Difracción de Rayos X y el Método de Rietveld como herramientas para la determinación de fases cristalinas y no cristalinas de base silícea en este tipo de muestras naturales.

Palabras clave: Cuantificación de fases; DRX; Rietveld, fases no cristalinas.

[1] Bish, DL. & JE Post. (1993). American Mineralogist 78: 932-940.

[2] M.S. Conconi, N.M. Rendtorff, E.F. Aglietti, New Journal of Glass and Ceramics, 2011, [1] 2, 21-25.

[3] N.V.Y. Scarlett and I C. Madsen (2018) Powder Diffraction 33 (1) 26-37.