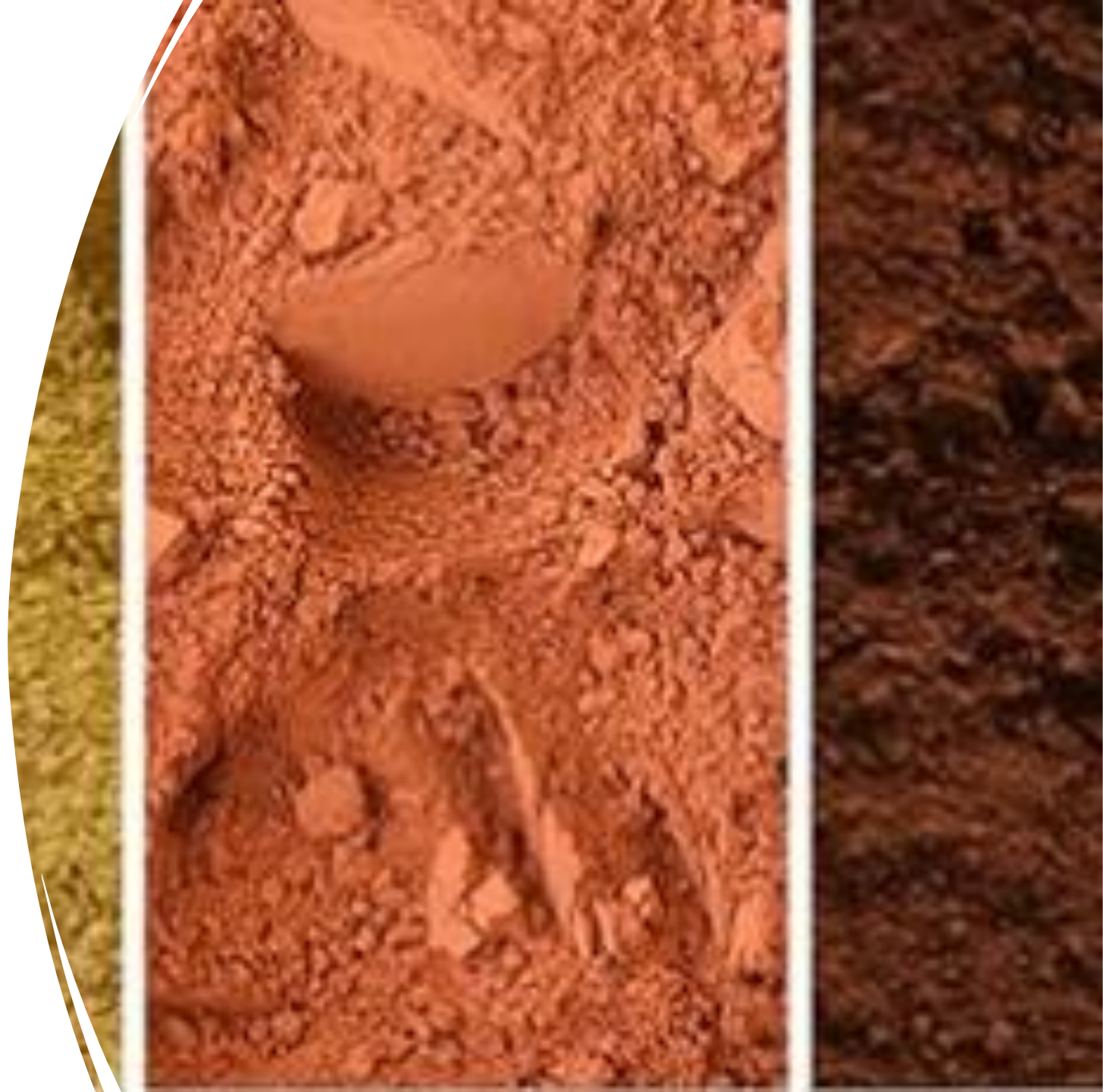


# Caracterización de dos muestras incógnita mediante Difractometría de Rayos X y espectroscopía vibracional

---

Autores:

- Alberto Martínez Álvarez
- Ariandy Vargas Jaquez
- Ginés González Guirado



# Introducción

Identificación de dos muestras  
incógnita mediante las siguientes  
técnicas de caracterización:



Difractometría de Rayos X (XRD)

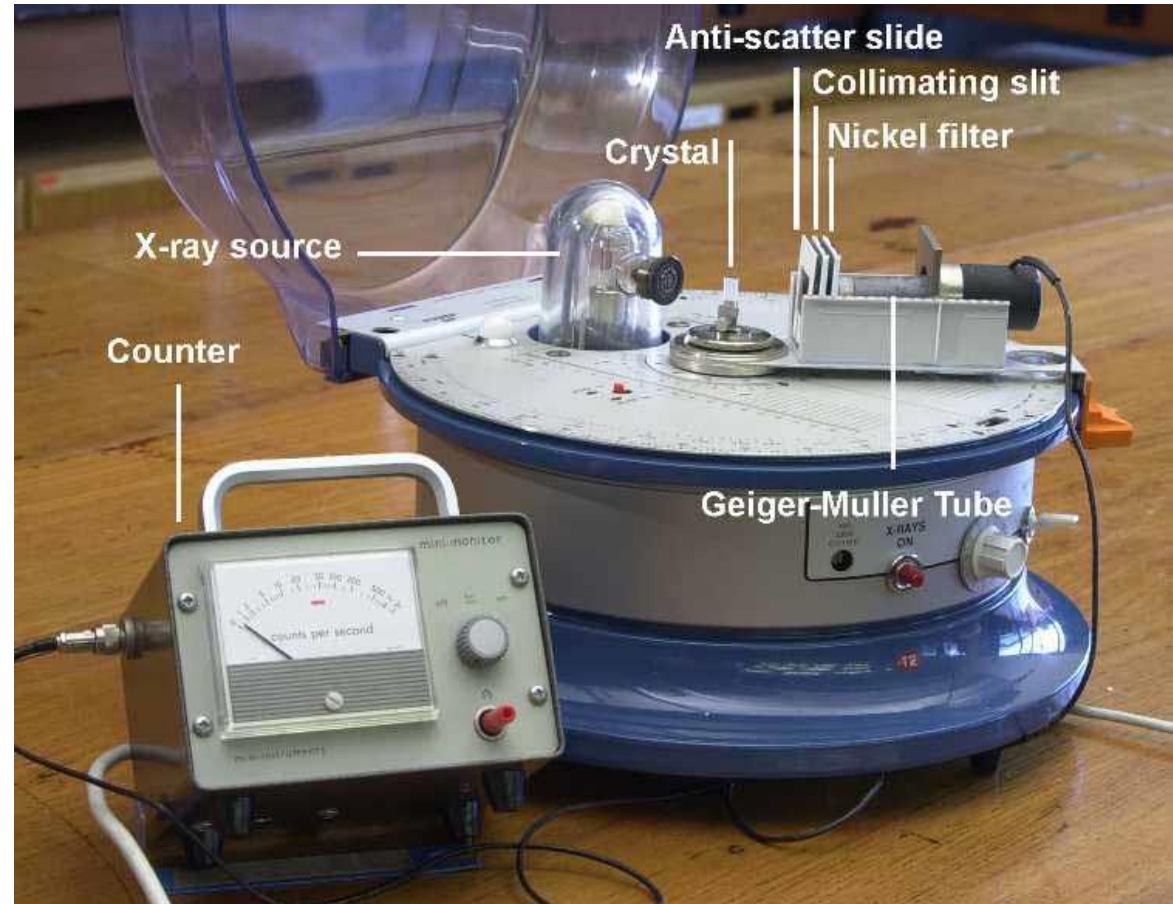
Espectroscopía Infrarroja por  
Transformada de Fourier (FTIR)

Espectroscopía Raman

# Difractometría de Rayos X (XRD)

Se basa en la dispersión coherente del haz de Rayos X por la materia y en la interferencia constructiva de las ondas que están en fase y que se dispersan en determinadas direcciones del espacio.

Nos proporciona información de la estructura cristalina de los sólidos. En el caso de materiales amorfos, los difractogramas muestran anillos difusos.

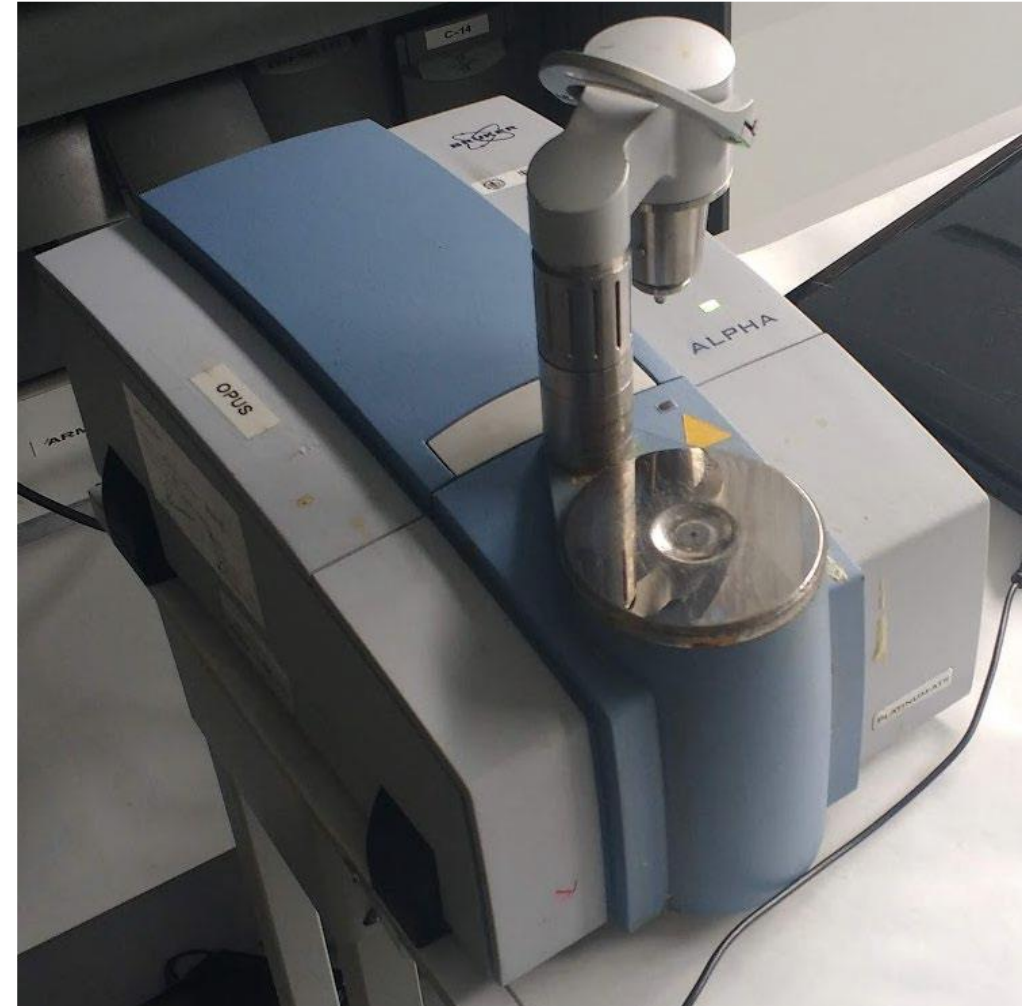
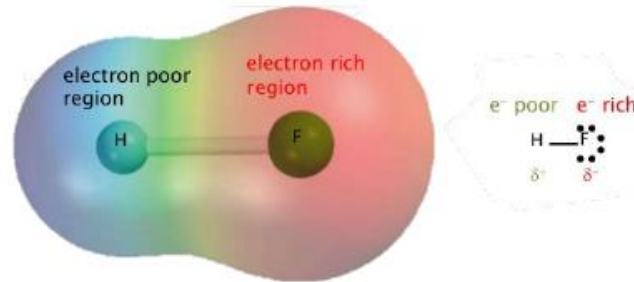




# Espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier (FTIR)

Es una técnica que se fundamenta en la absorción de la radiación infrarroja incidente, provocando una variación en el momento dipolar eléctrico de las moléculas. Las frecuencias absorbidas se corresponden con la frecuencia de vibración de los enlaces moleculares.

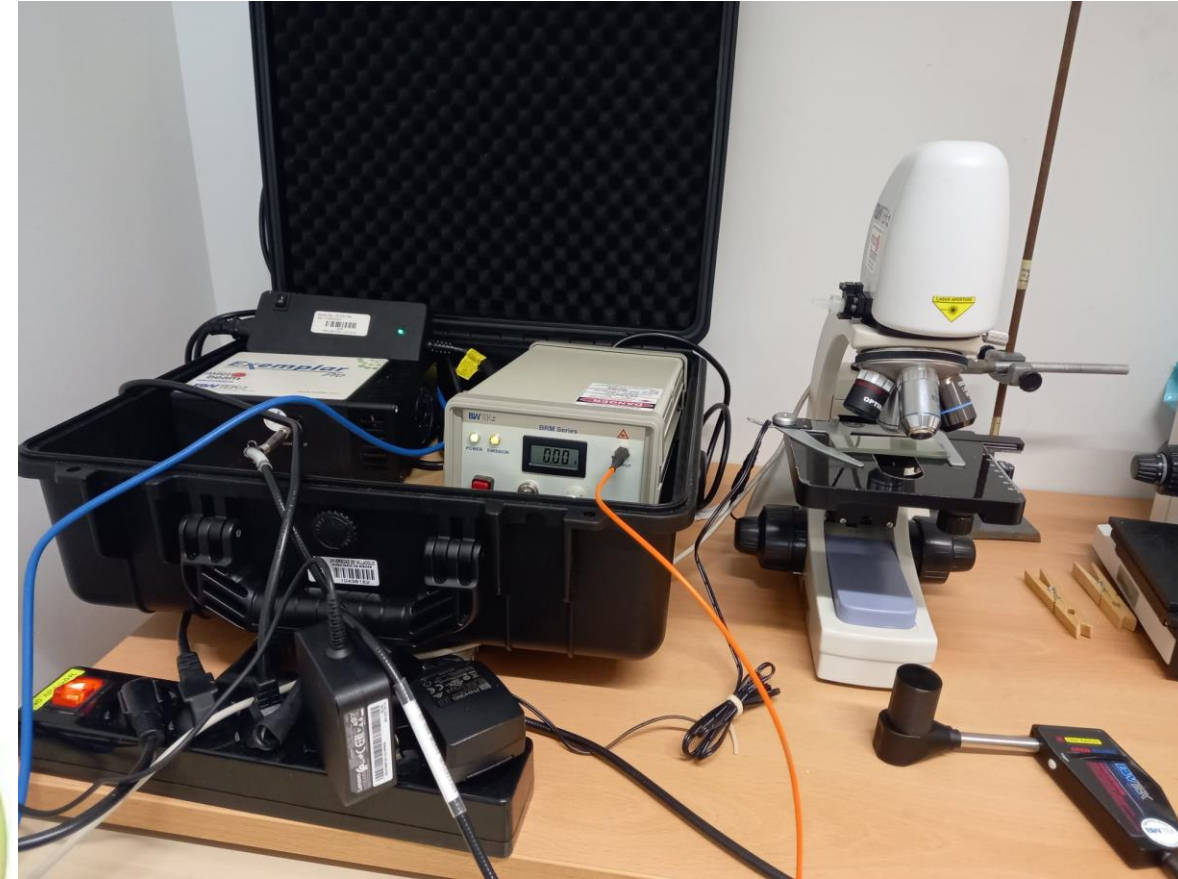
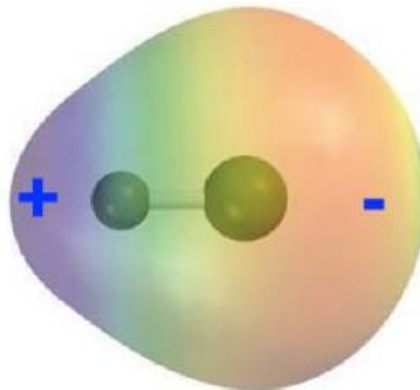
Este fenómeno proporciona información sobre los grupos funcionales de los materiales (gas, líquidos y sólidos).



# Espectroscopía Raman

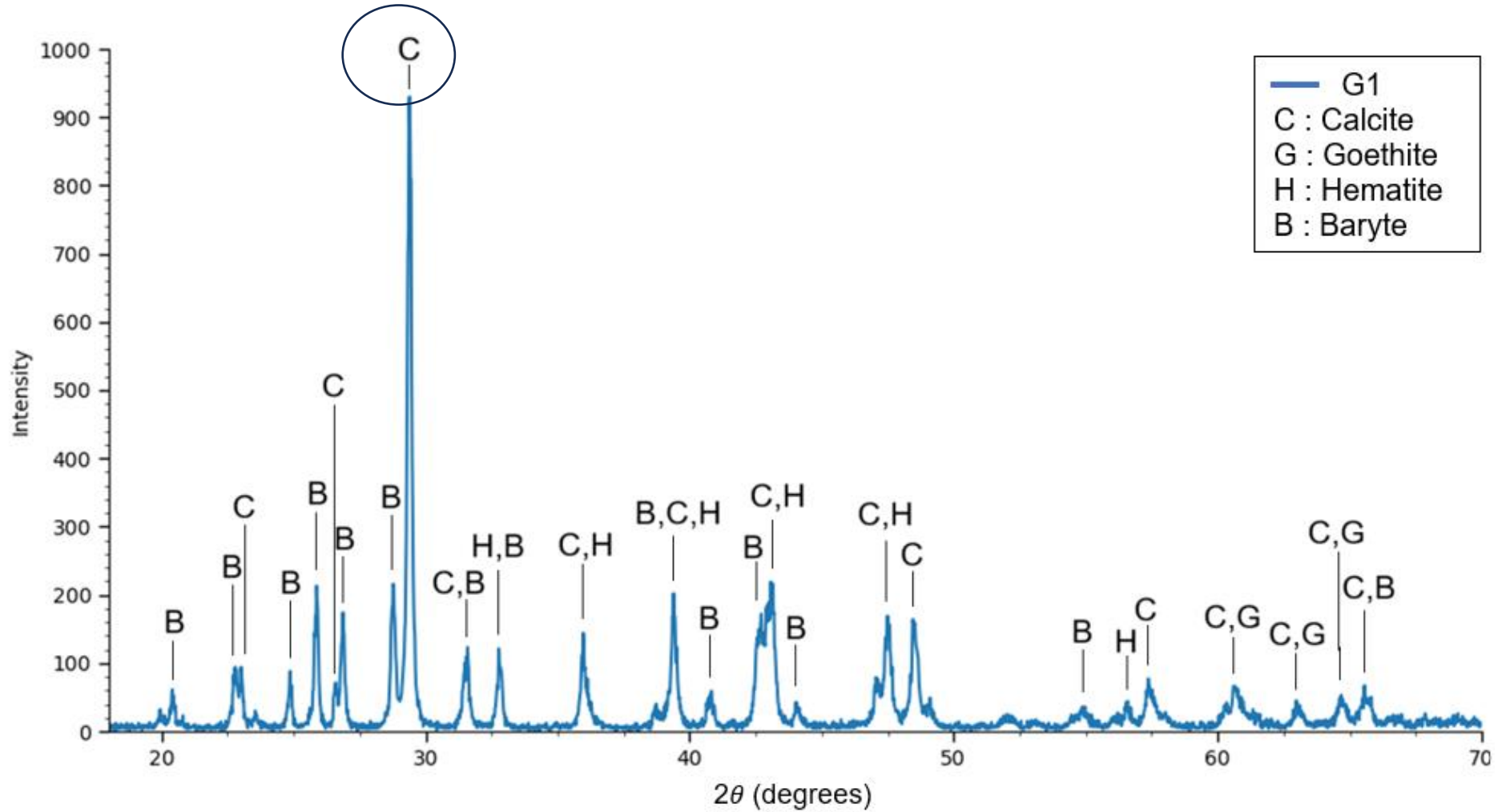
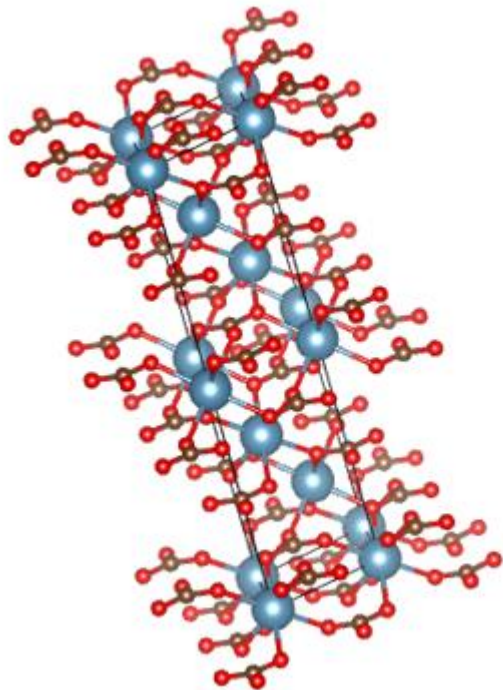
Se basa en la dispersión inelástica de la luz monocromática incidente, la cual resulta de la excitación de los modos normales de vibración de las moléculas al provocar un cambio en su polarizabilidad.

Esta técnica proporciona información variada acerca del material, en función de los picos que aparecen y su forma. La frecuencia donde aparece el pico nos da información sobre la estructura cristalina, la fuerza del enlace y su longitud.



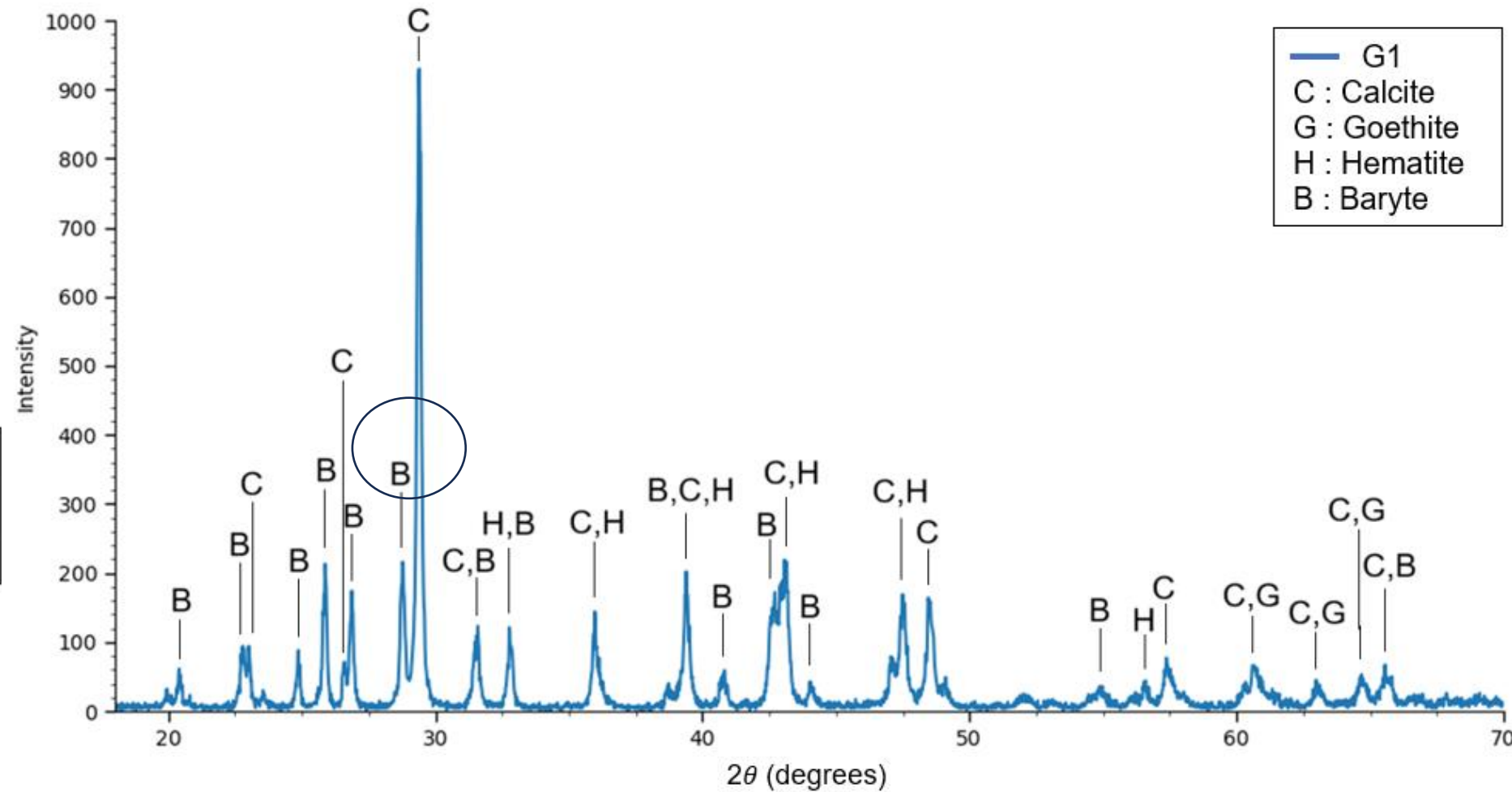
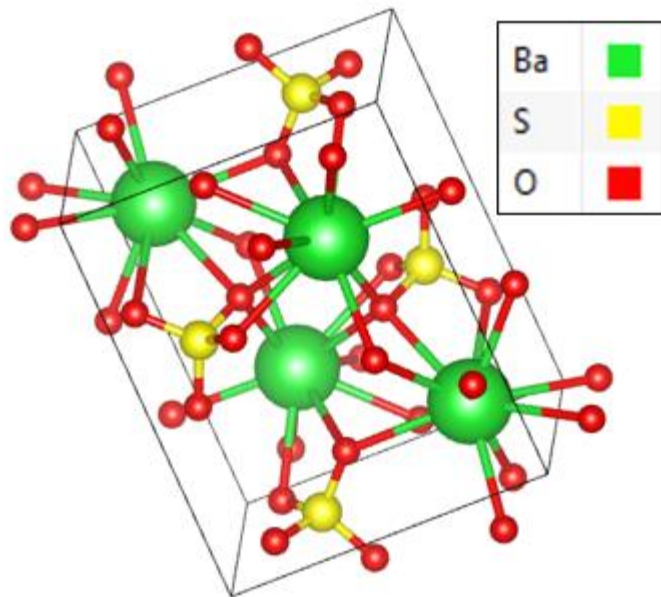
# Muestra G1. XRD

El pico de mayor intensidad situado en  $2\theta = 29,39^\circ$  corresponde con la calcita ( $\text{CaCO}_3$ ).



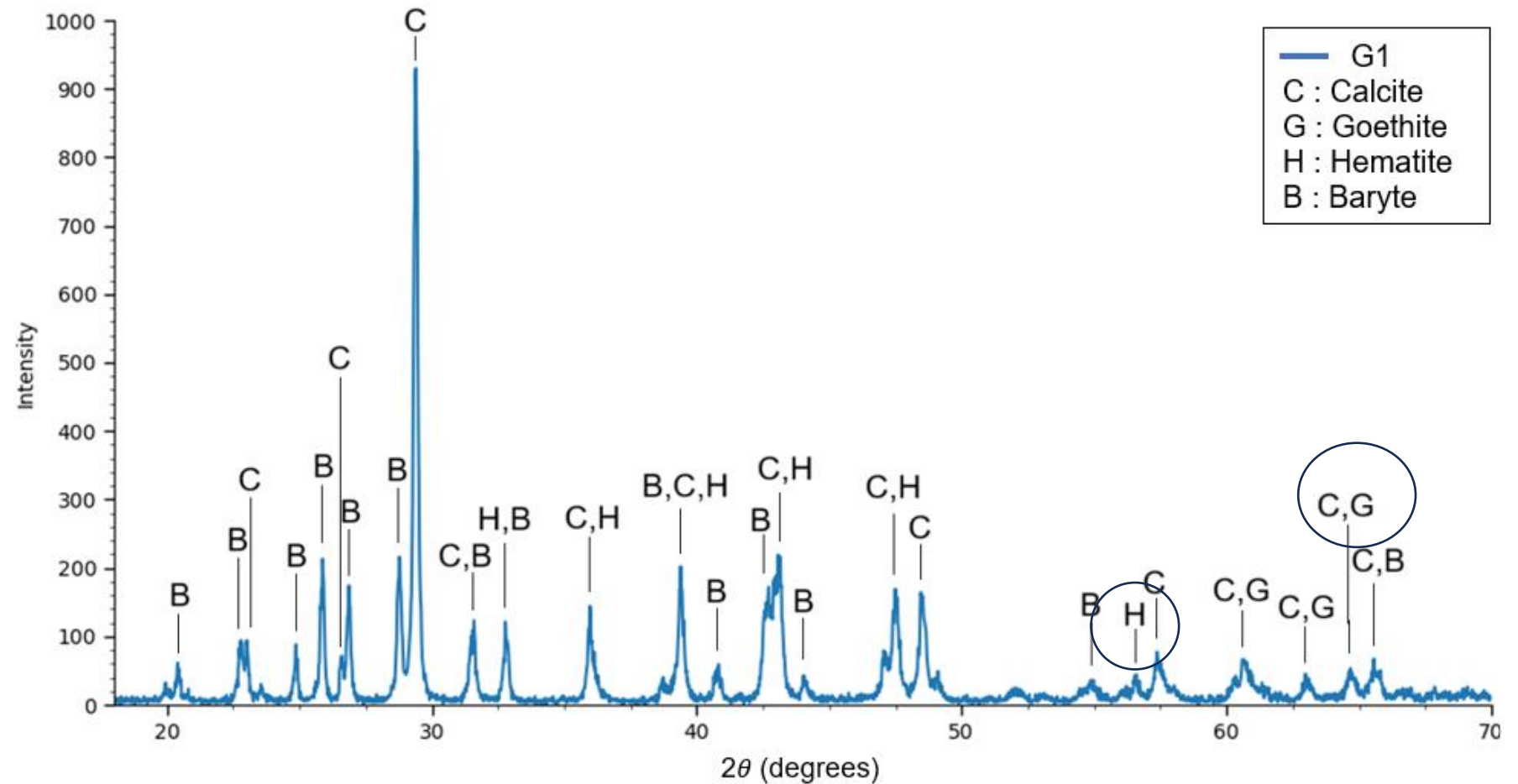
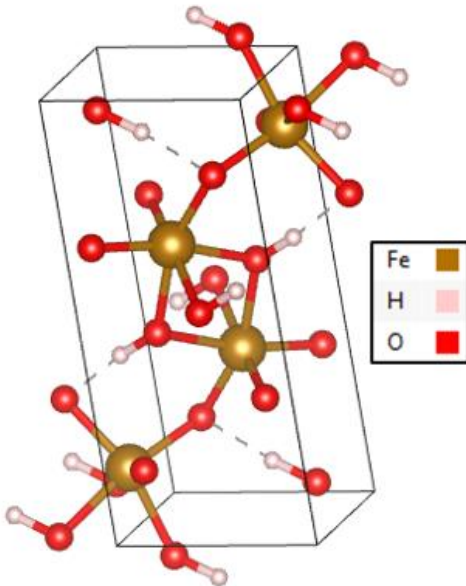
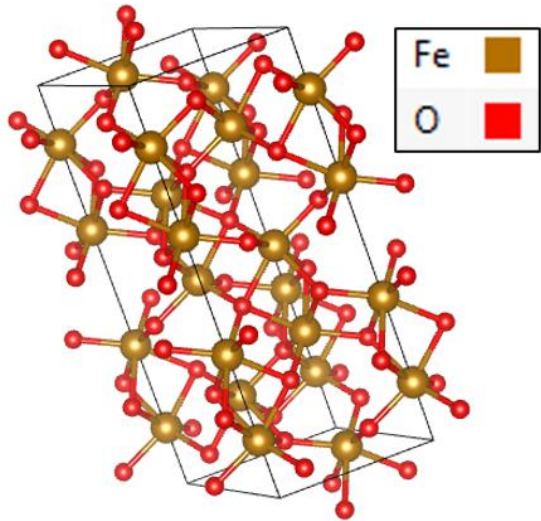
# Muestra G1. XRD

Como segundo elemento podemos identificar la barita ( $BaSO_4$ ), cuyo pico de mayor intensidad se encuentra en  $2\theta = 28,77^\circ$ .





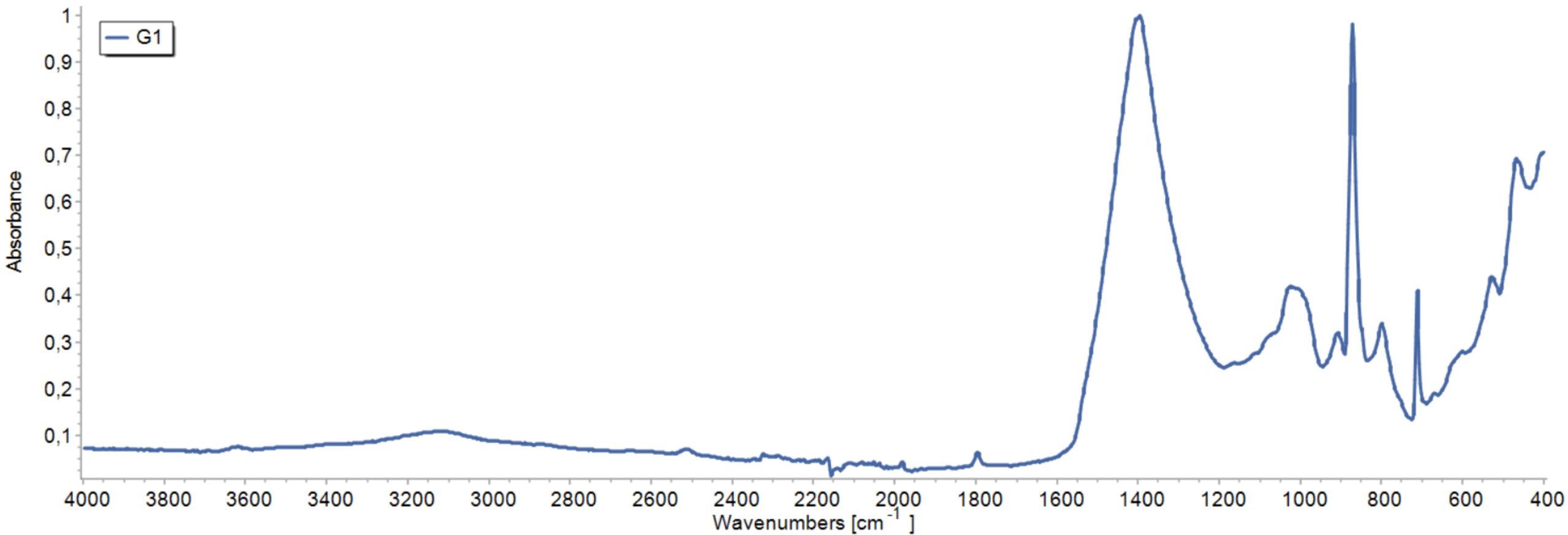
# Muestra G1. XRD



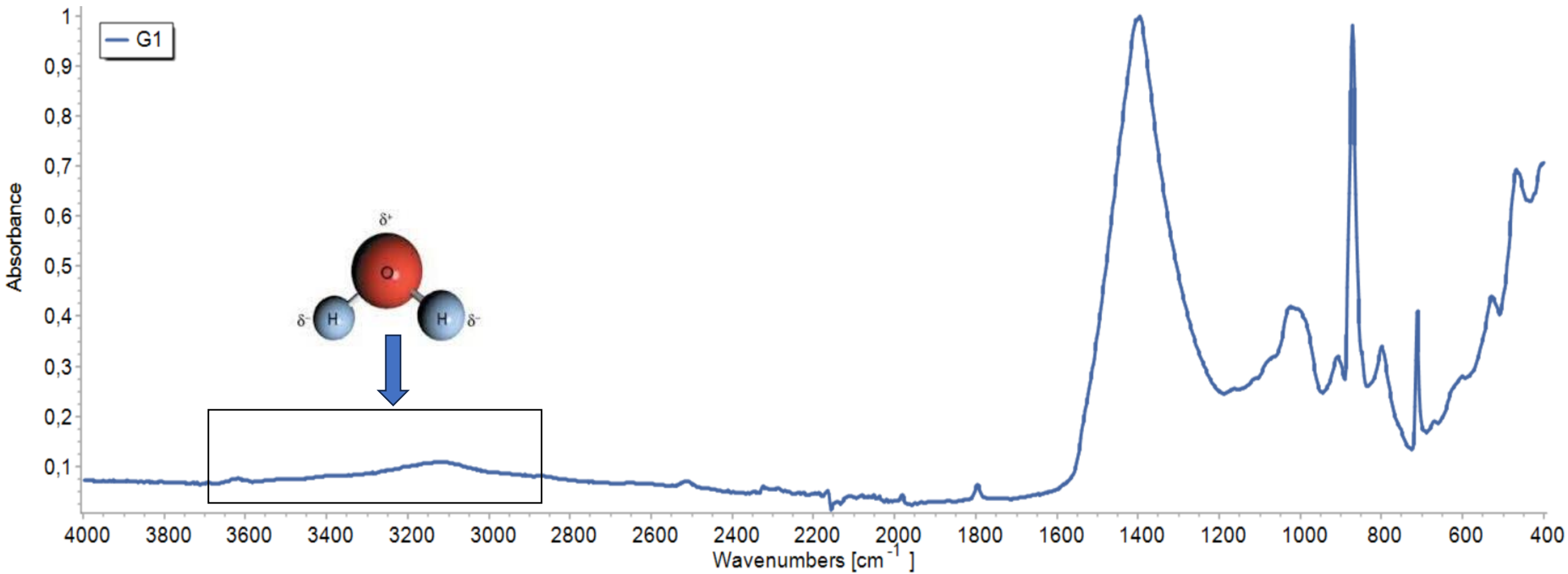
Además, podemos observar la presencia de goethita ( $\alpha - FeOOH$ ) y hematita ( $Fe_2O_3$ ), cuya contribución fue encontrada más claramente con las otras técnicas.



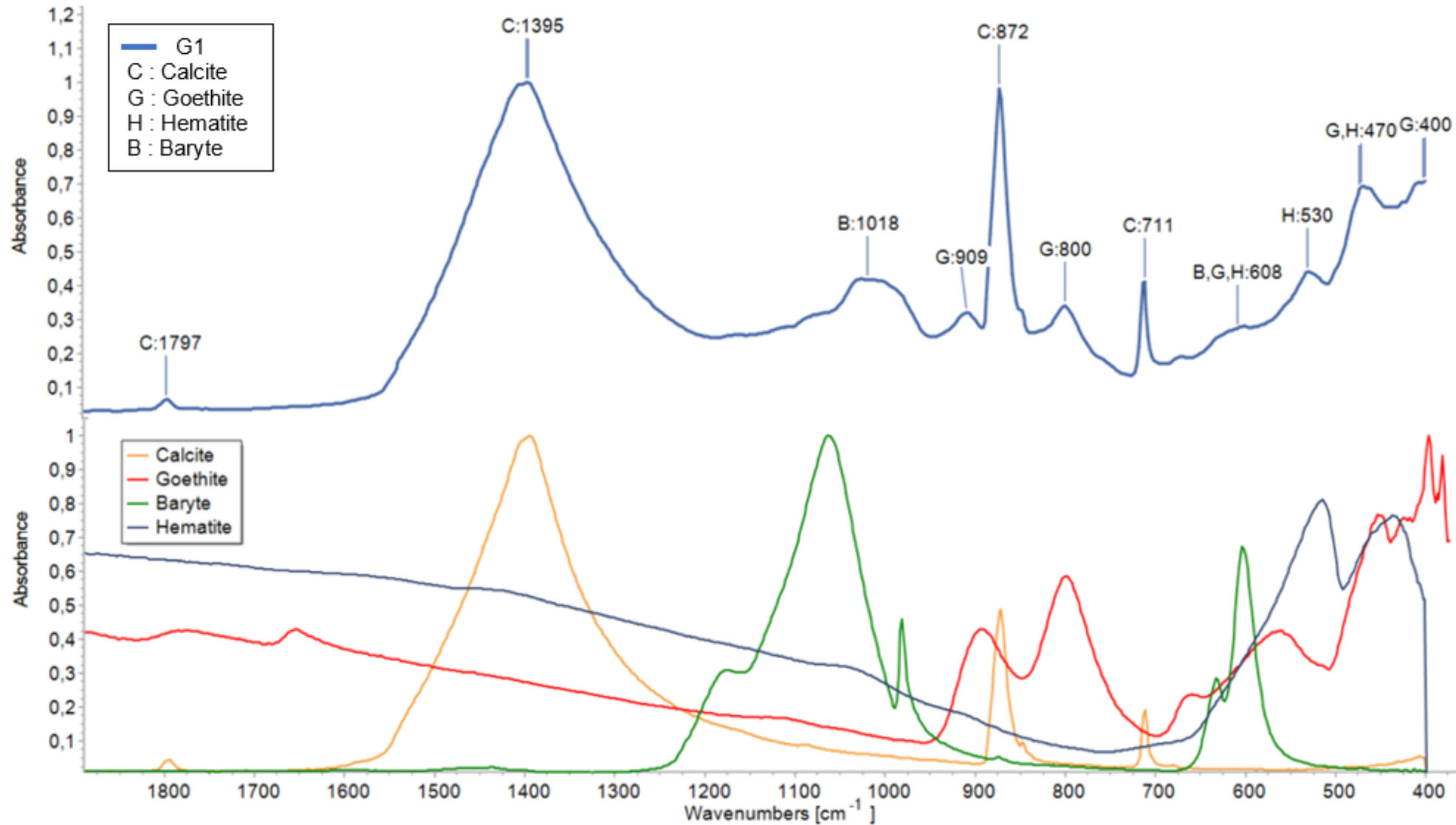
# Muestra G1. FTIR



# Muestra G1. FTIR

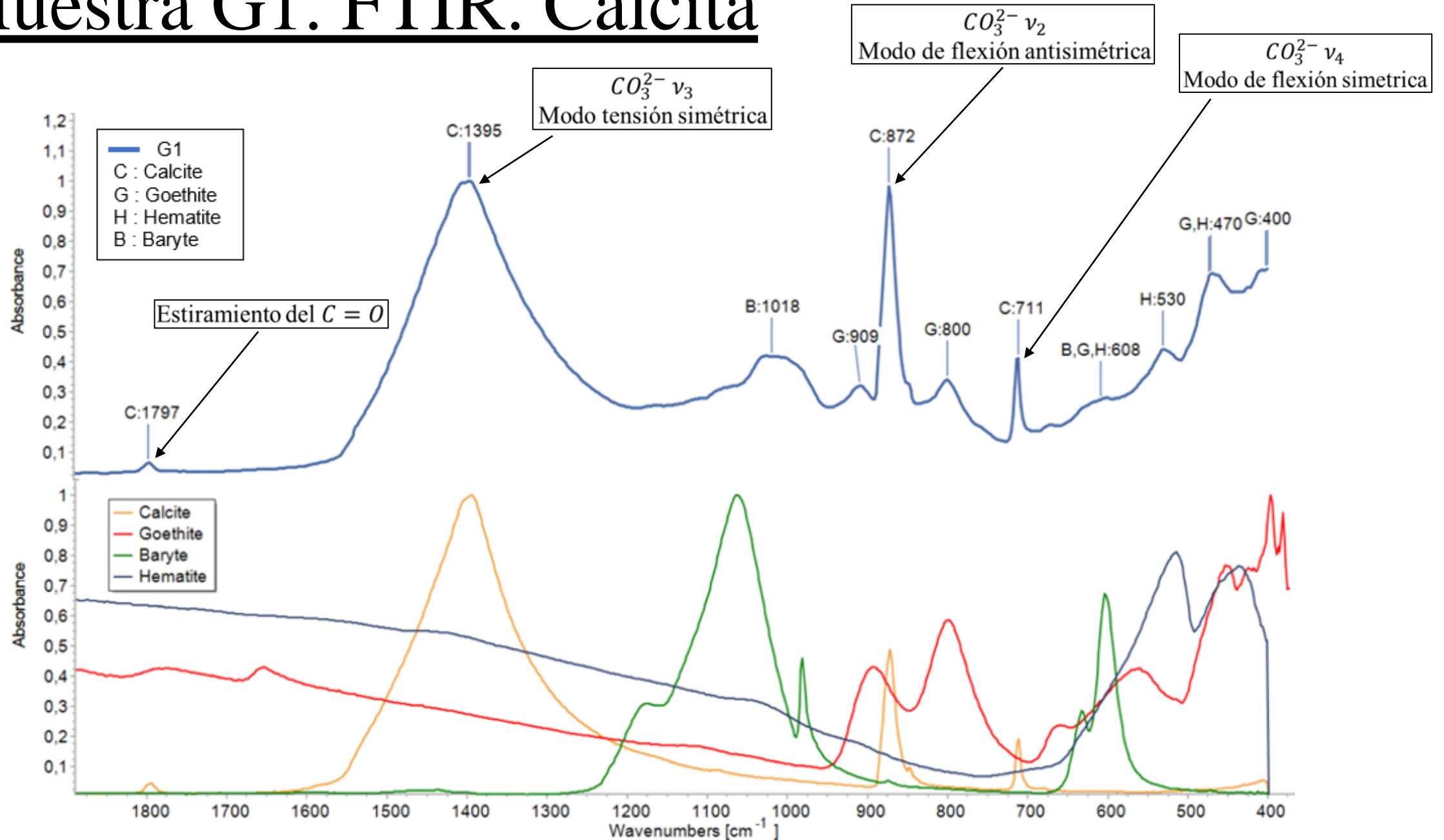


# Muestra G1. FTIR

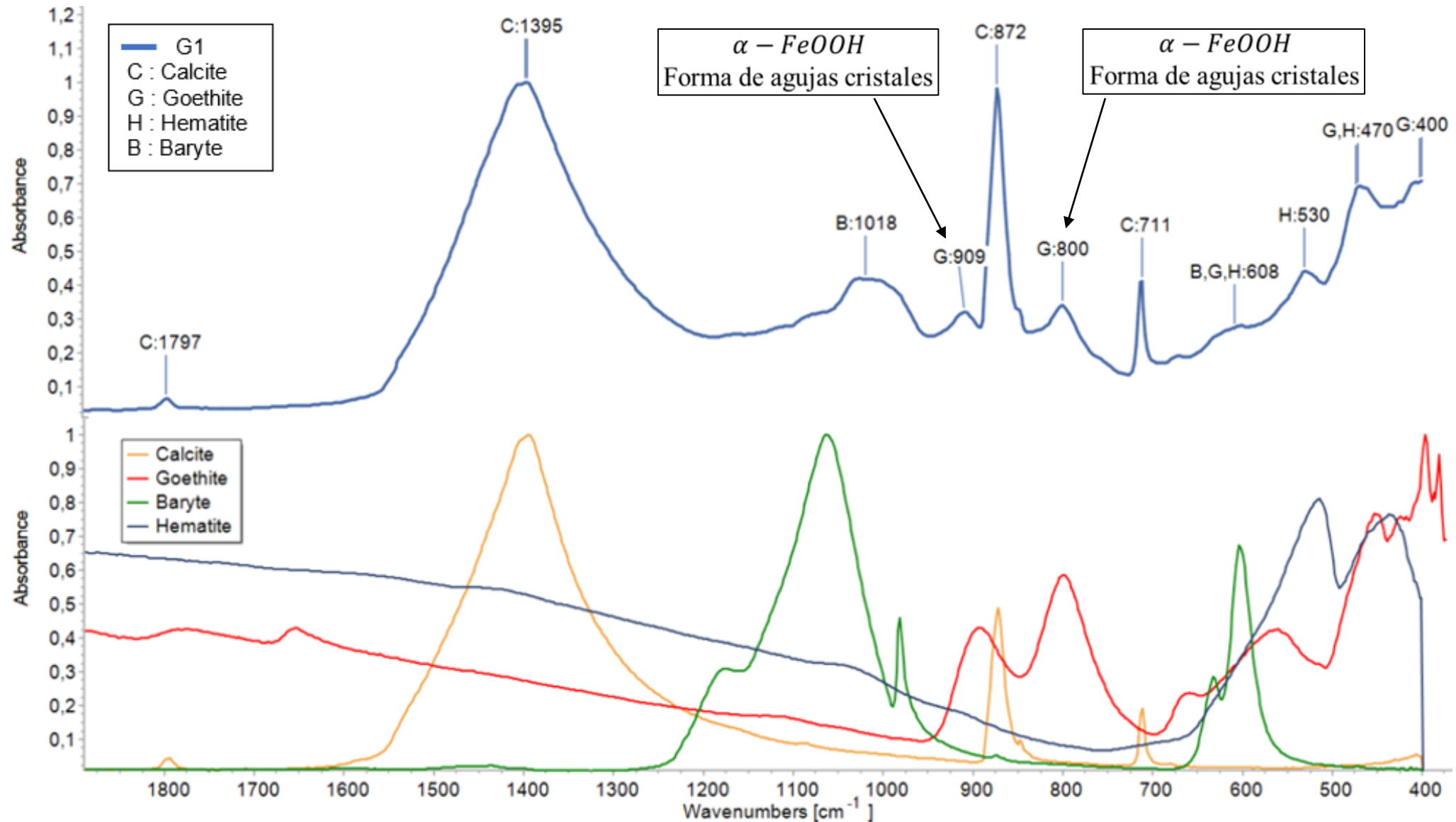




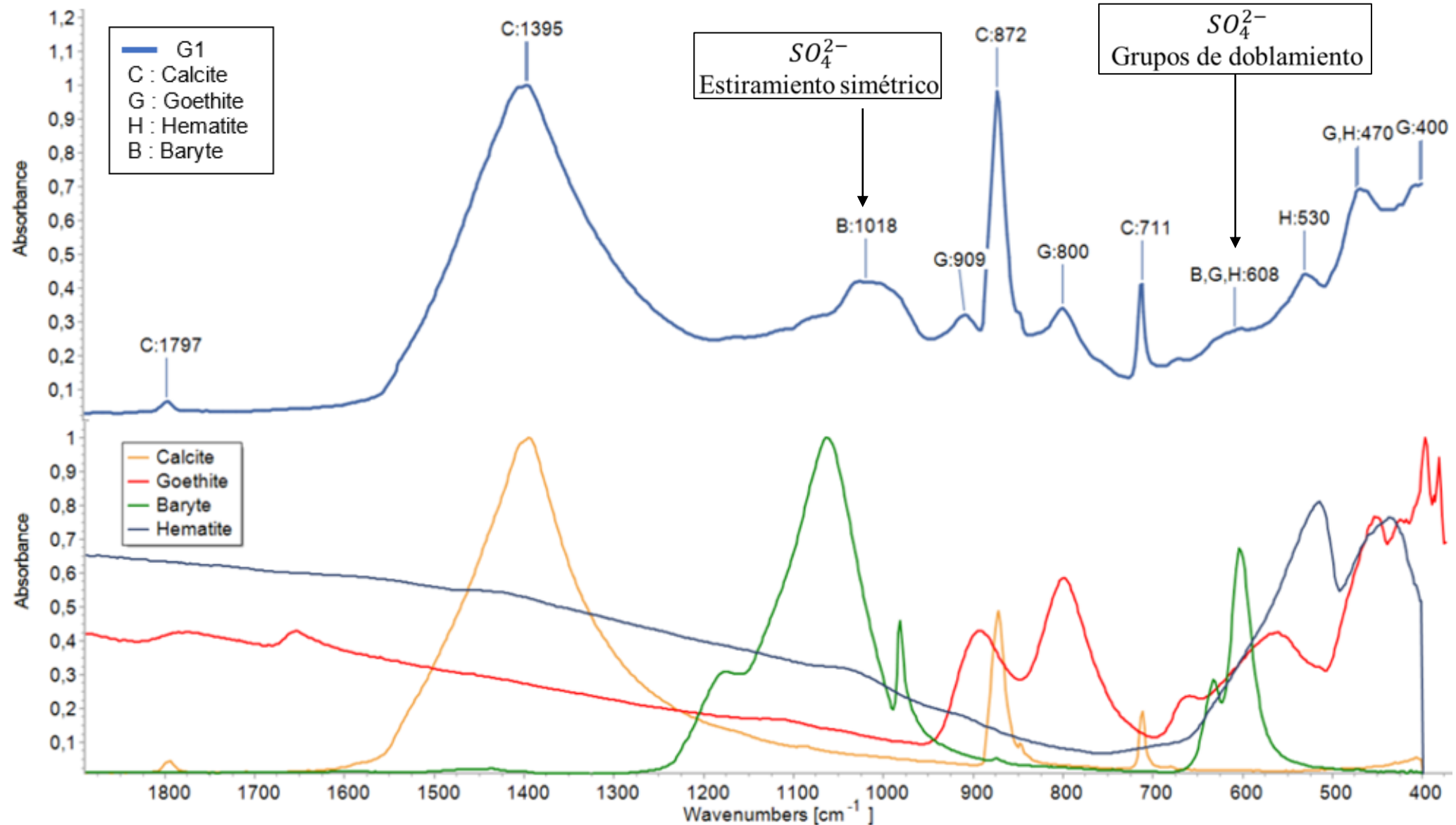
# Muestra G1. FTIR. Calcita



# Muestra G1. FTIR. Goetita-Hematita

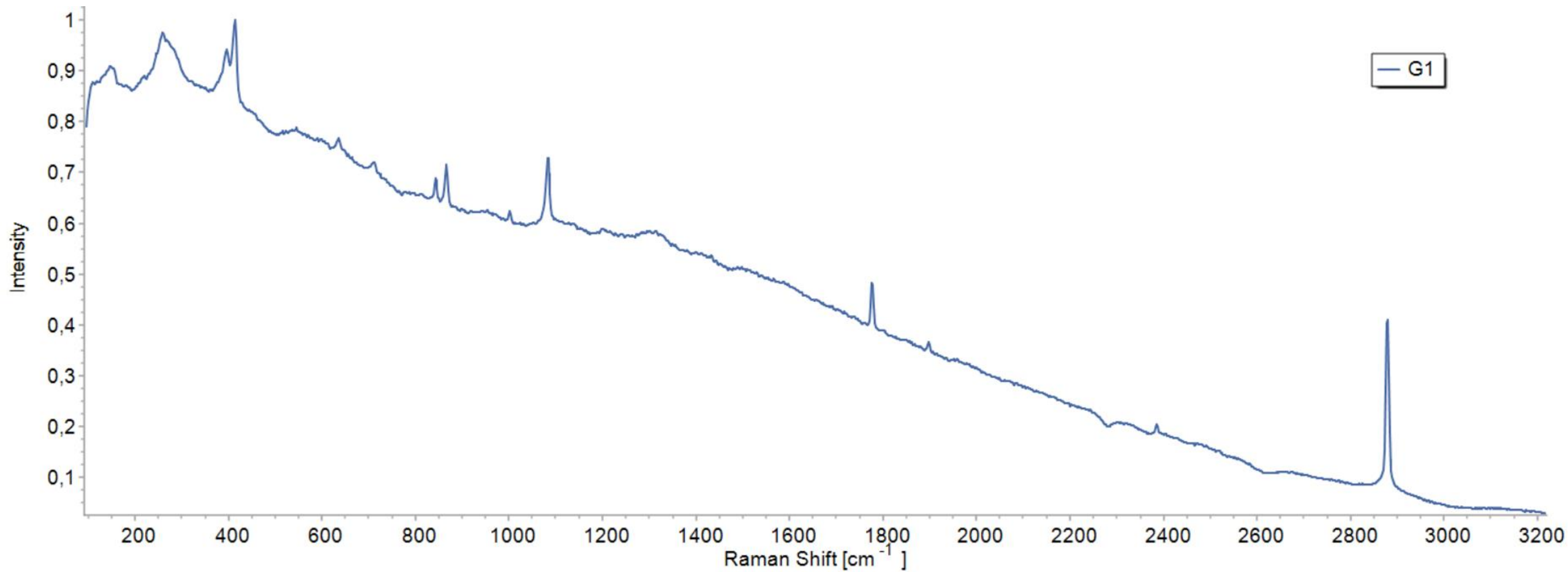


# Muestra G1. FTIR. Barita

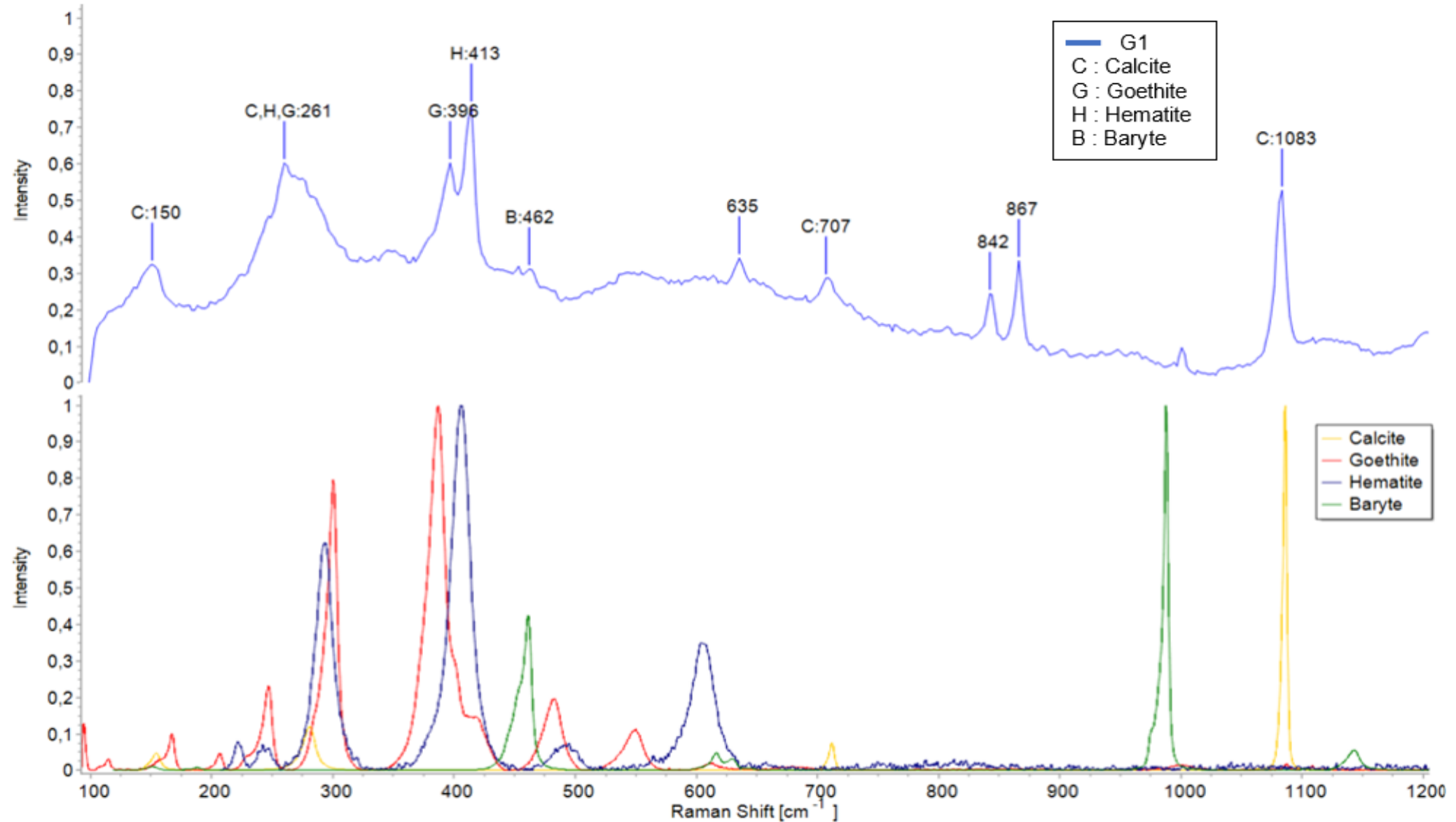




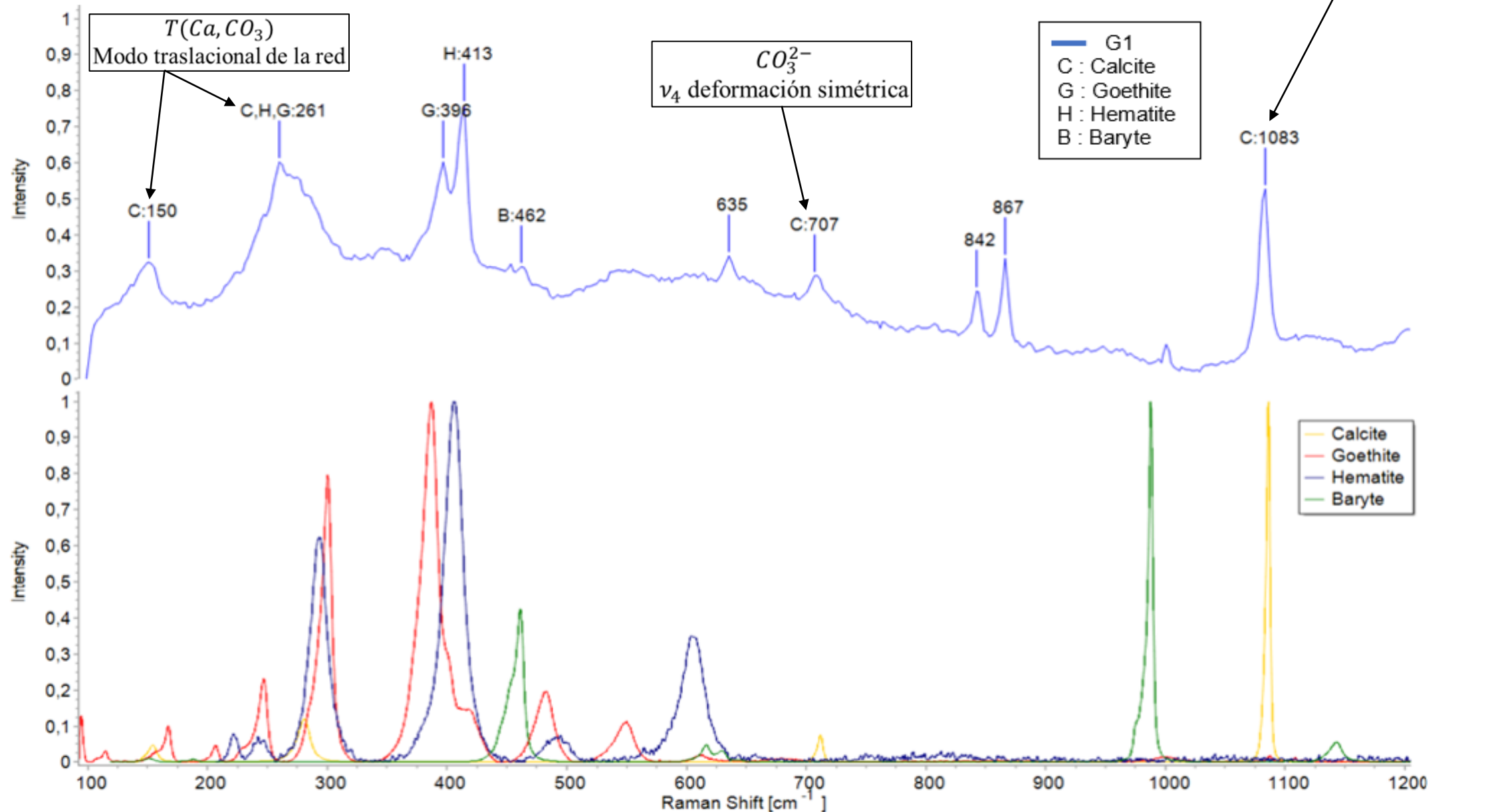
# Muestra G1. Raman



# Muestra G1. Raman

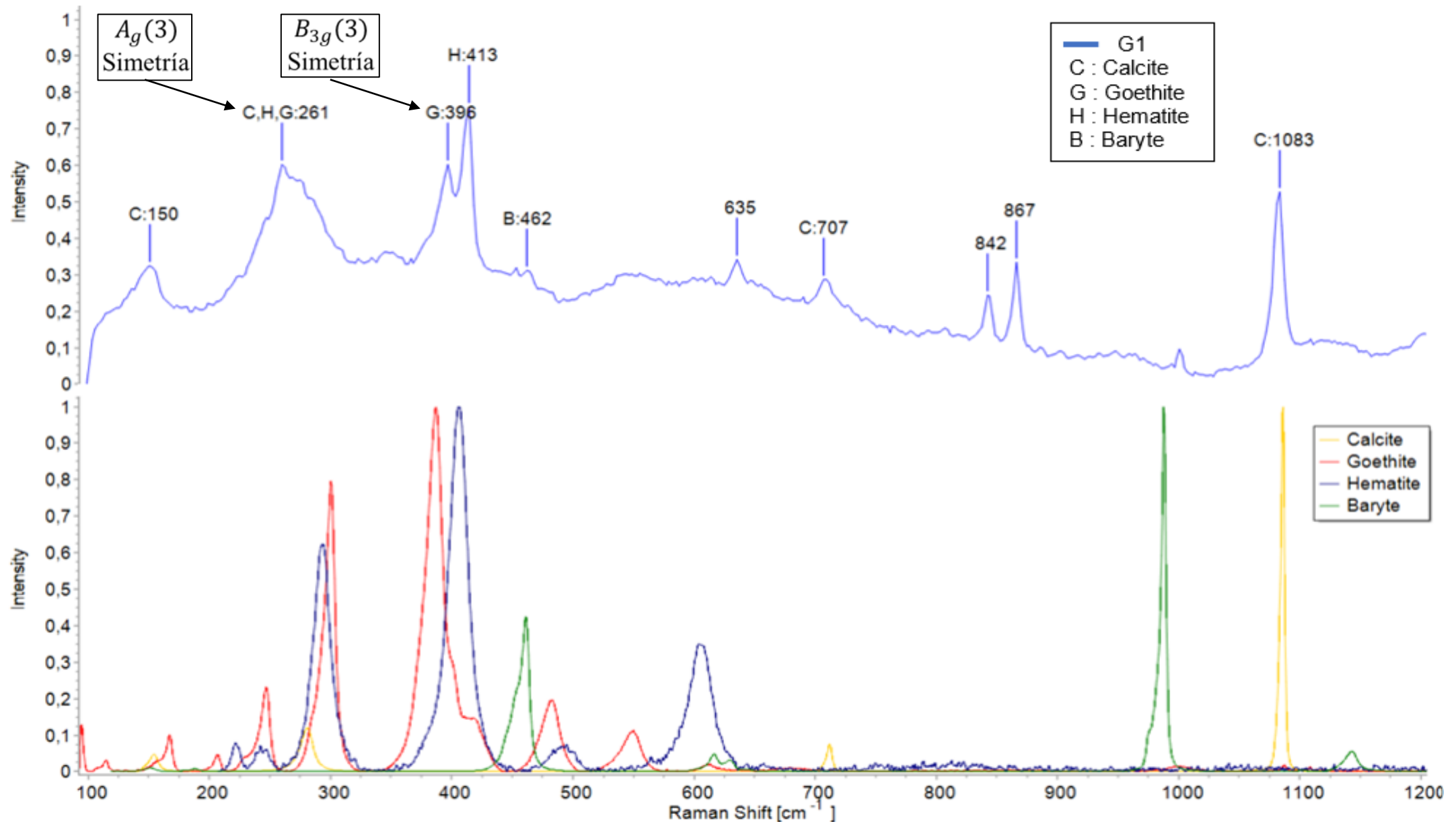


# Muestra G1. Raman. Calcita

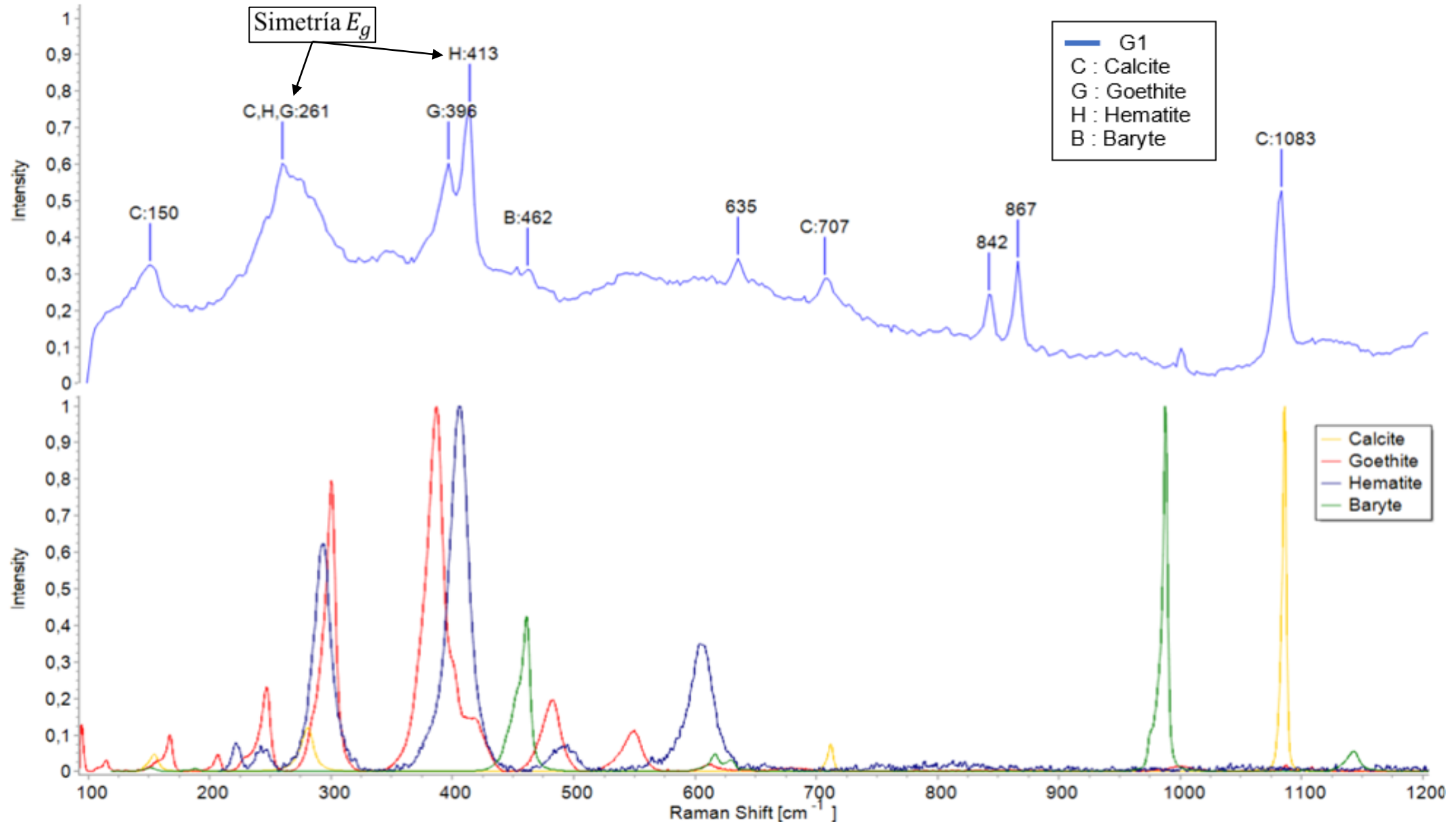




# Muestra G1. Raman. Goetita



# Muestra G1. Raman. Hematita



# Discusión de la muestra G1



La mayoría de los pigmentos marrones contienen calcita, goetita y hematita como componentes principales.



En nuestro caso, se ha encontrado barita, la cual es utilizada por sus excelentes propiedades pictóricas, que incluyen el aumento de la opacidad y una alta estabilidad química.

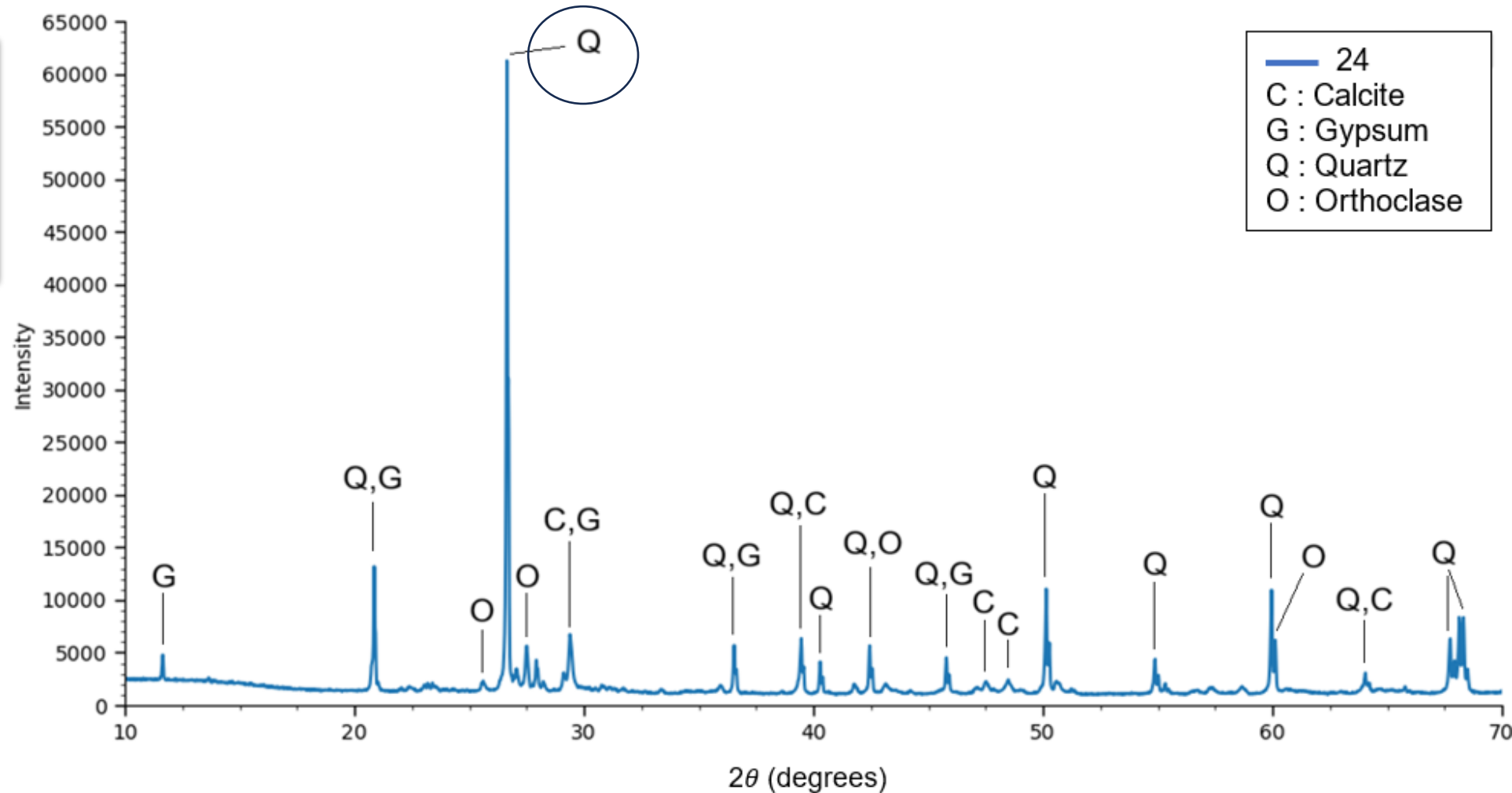
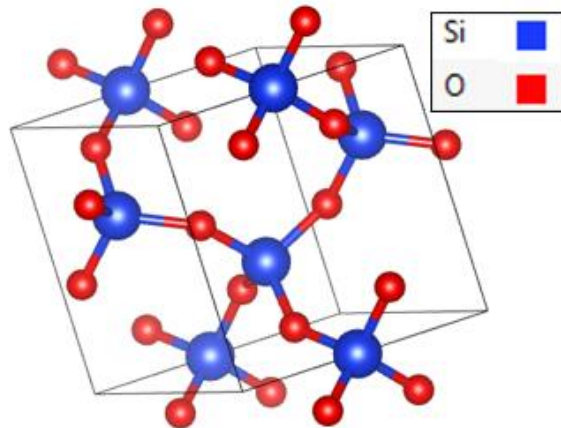


Pigmento



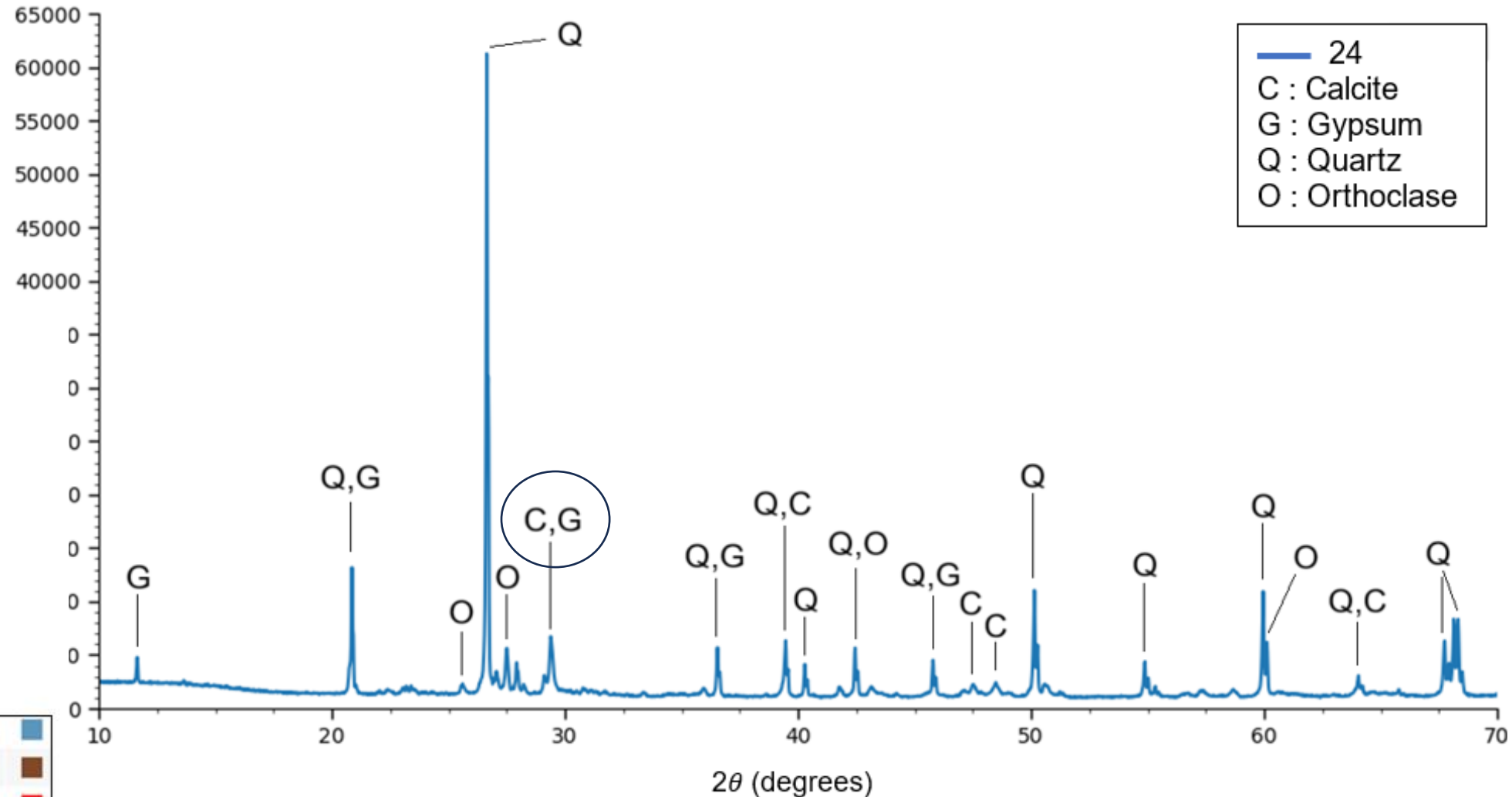
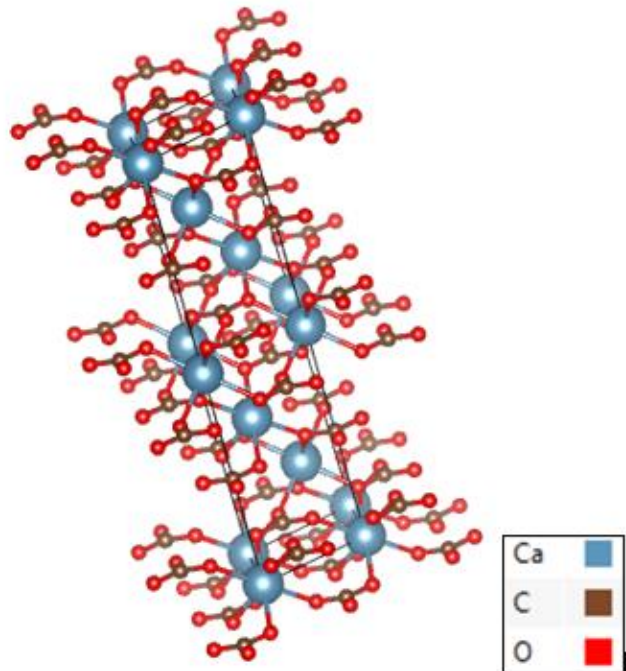
# Muestra 24. XRD

El pico con mayor intensidad situado en un ángulo  $2\theta = 26,65^\circ$  corresponde al pico principal del cuarzo ( $SiO_2$ ).



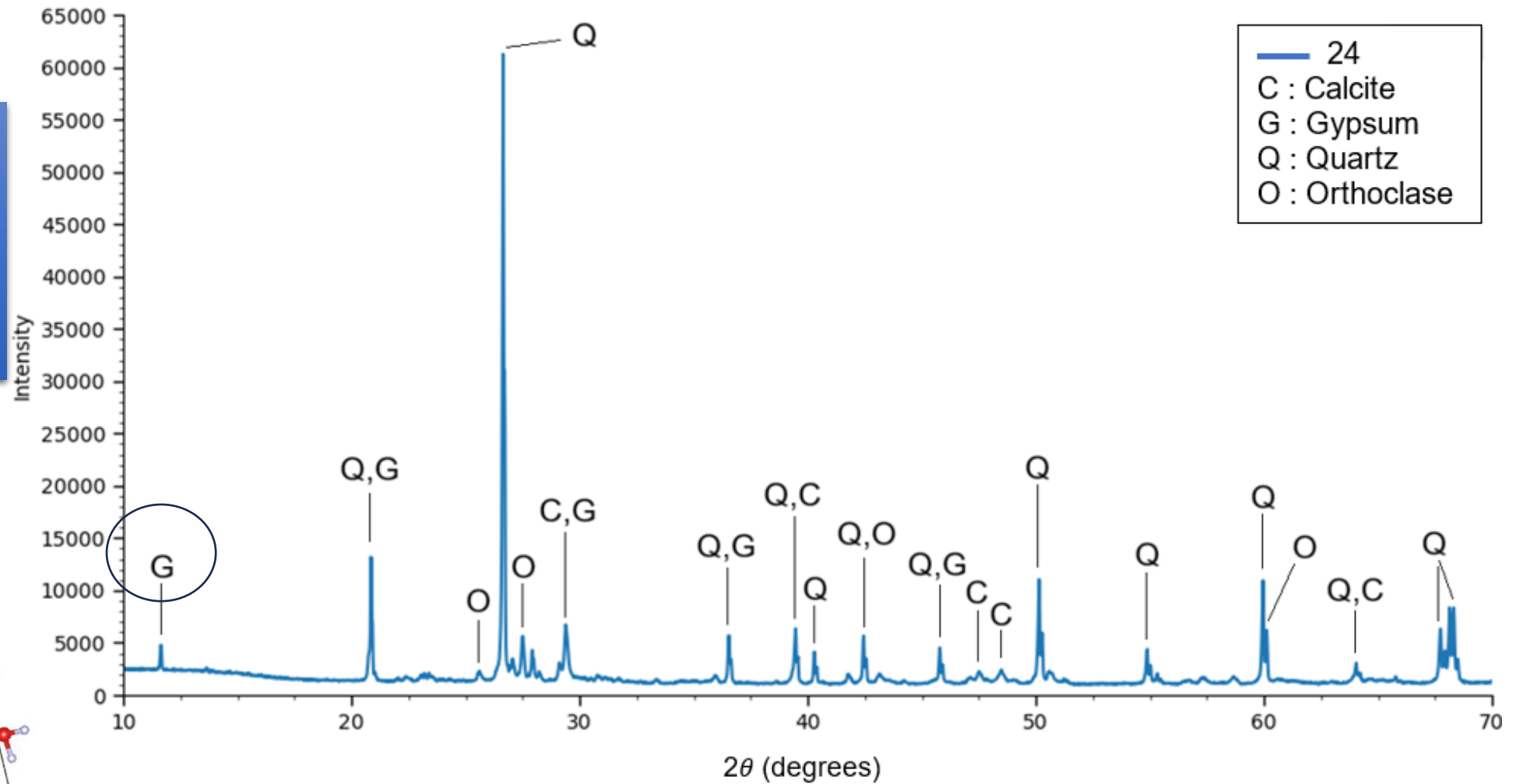
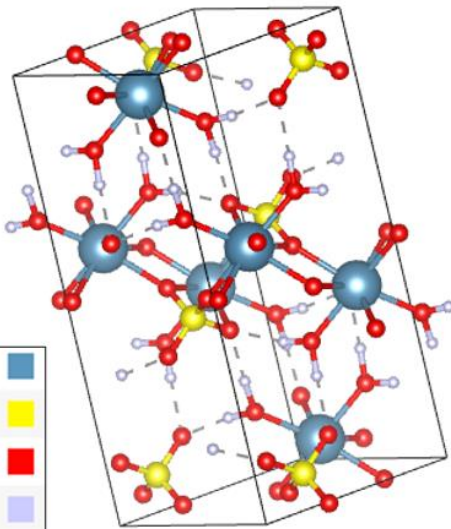
# Muestra 24. XRD

La presencia de la calcita ( $\text{CaCO}_3$ ), queda de manifiesto con el pico situado en  $2\theta = 29,39^\circ$



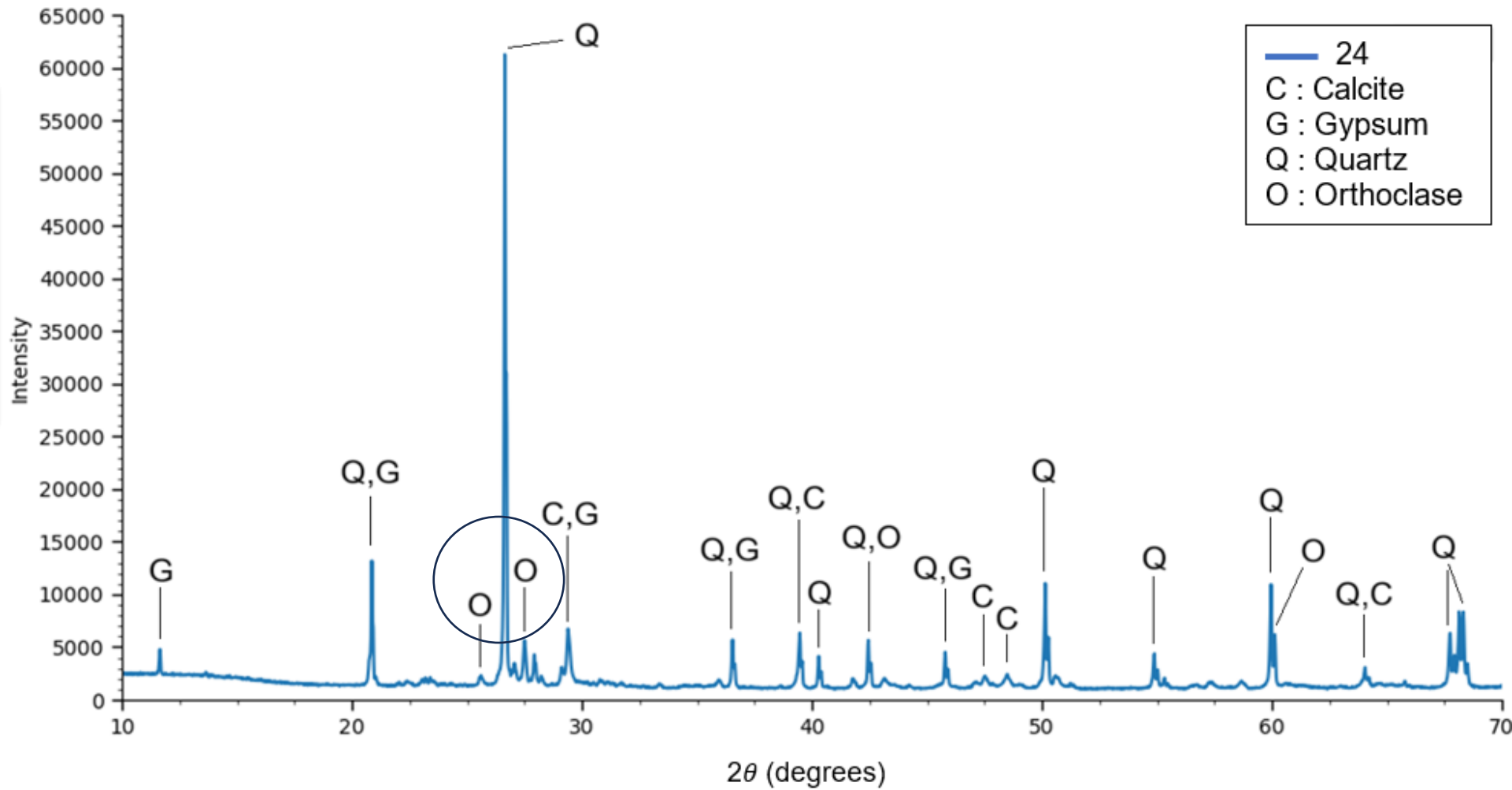
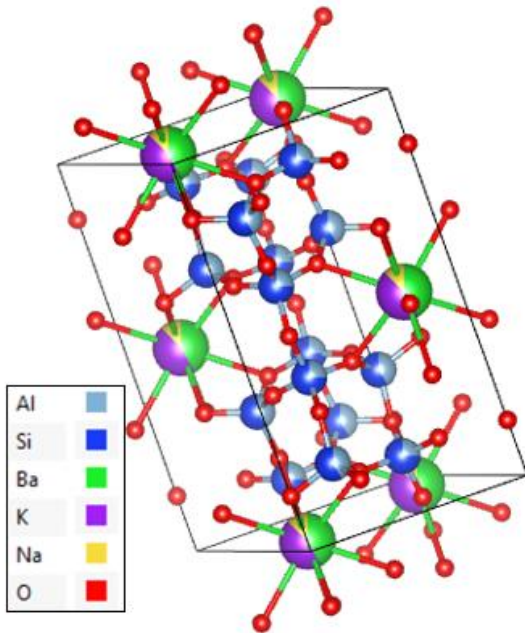
# Muestra 24. XRD

Correlacionamos la presencia del yeso ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ) con el pico  $2\theta = 11,65^\circ$  en el que no contribuye ningún otro componente.

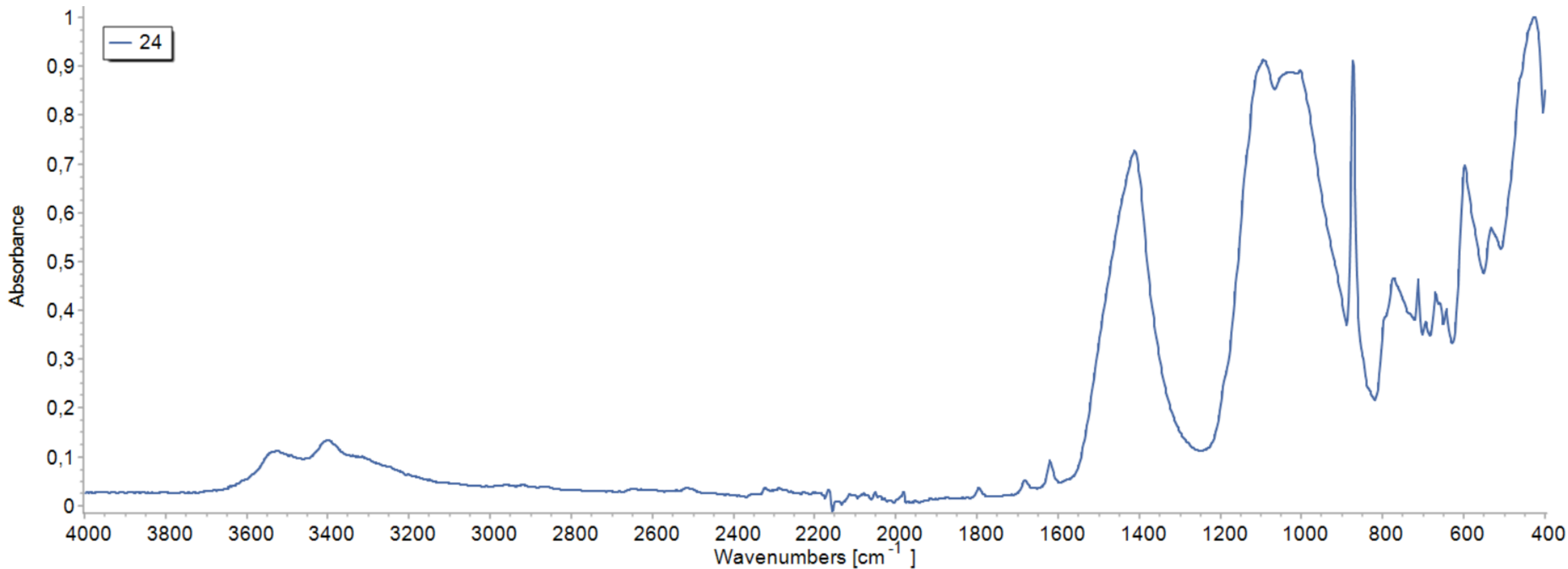


# Muestra 24. XRD

Como último elemento, se encuentra la ortoclasa ( $KAlSi_3O_8$ ), mineral perteneciente a los feldespatos, el cual explica el pico  $2\theta = 27,51^\circ$ .

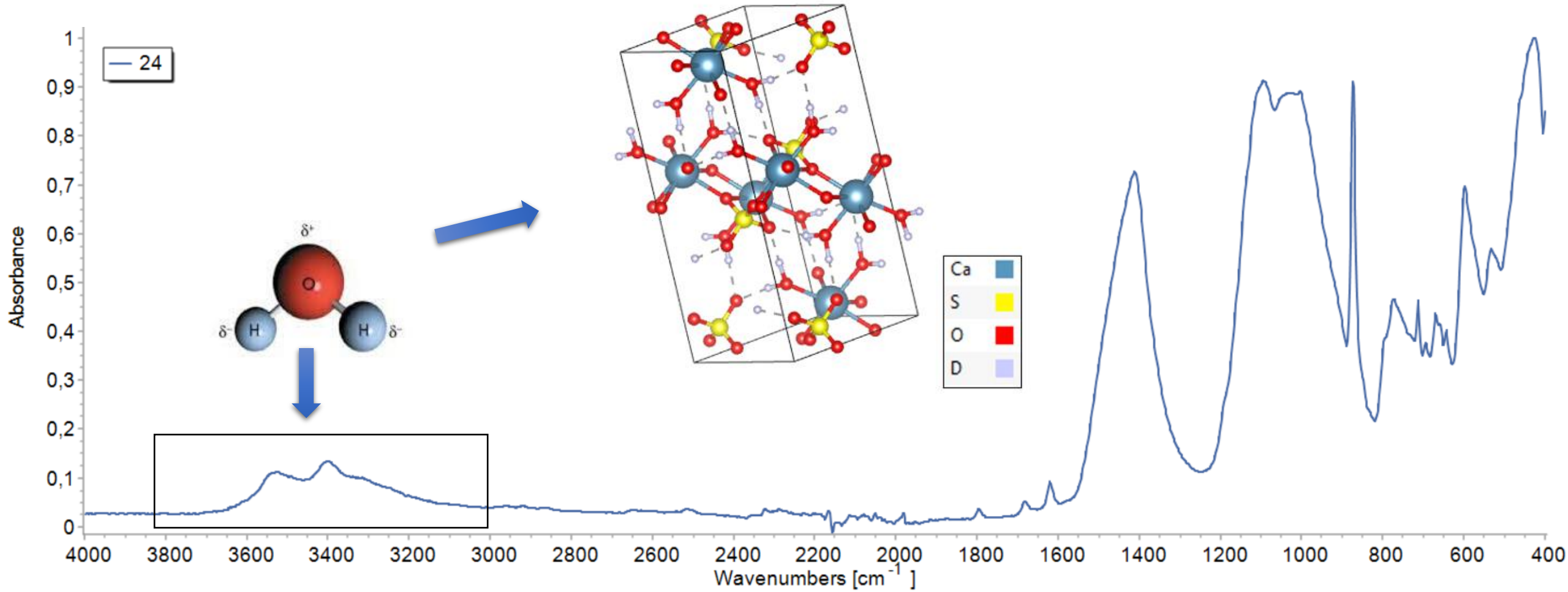


# Muestra 24. FTIR

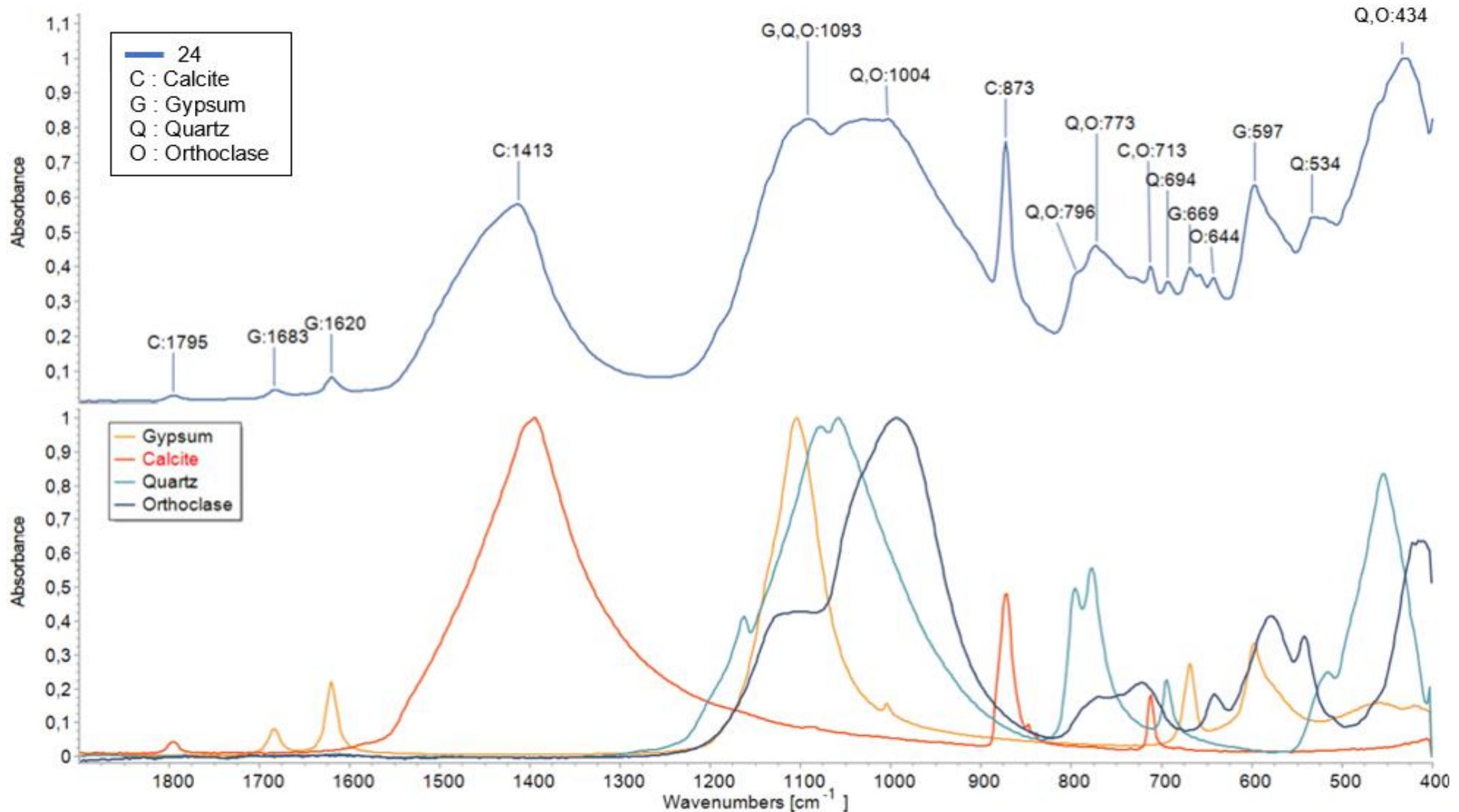




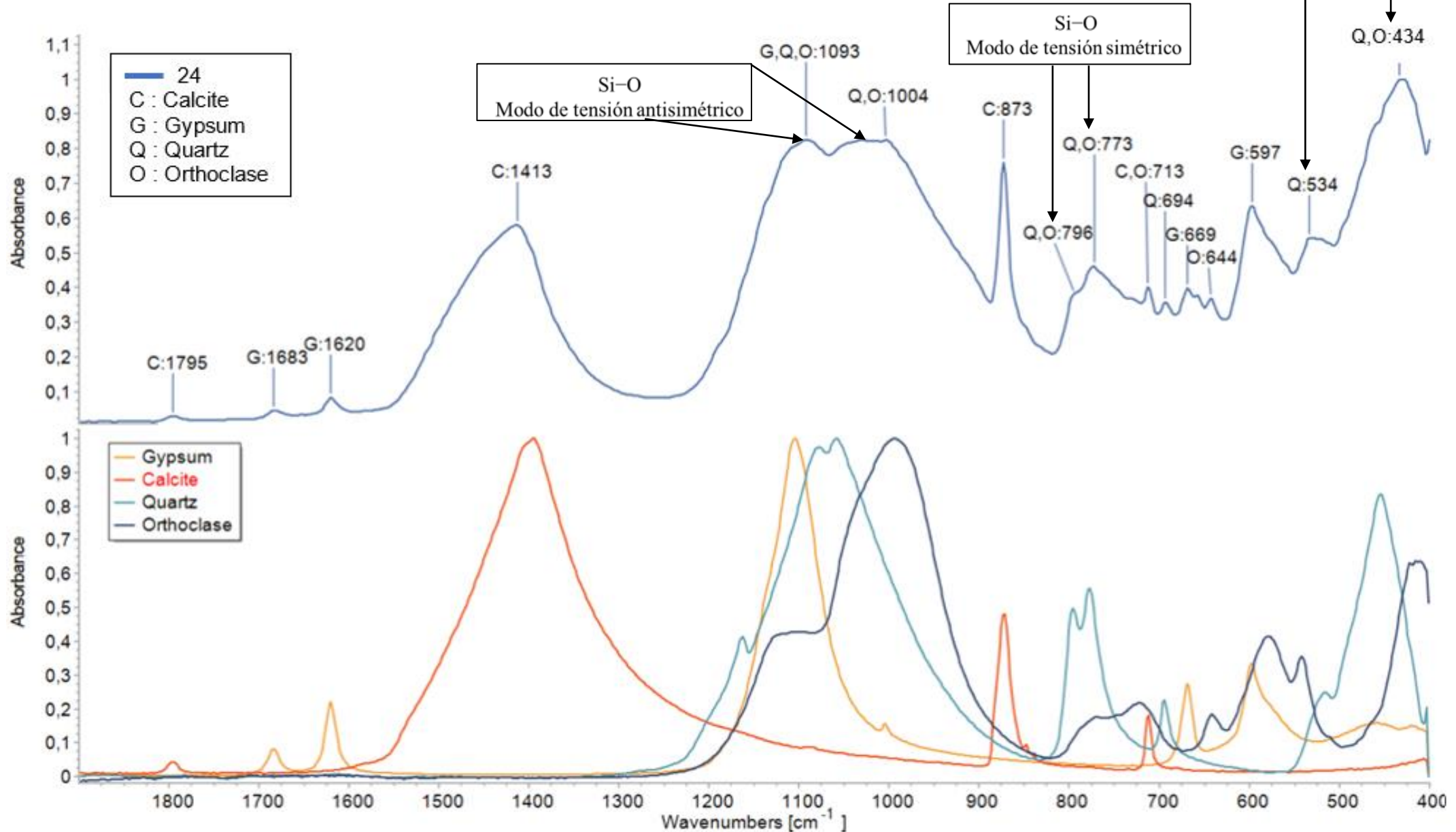
# Muestra 24. FTIR



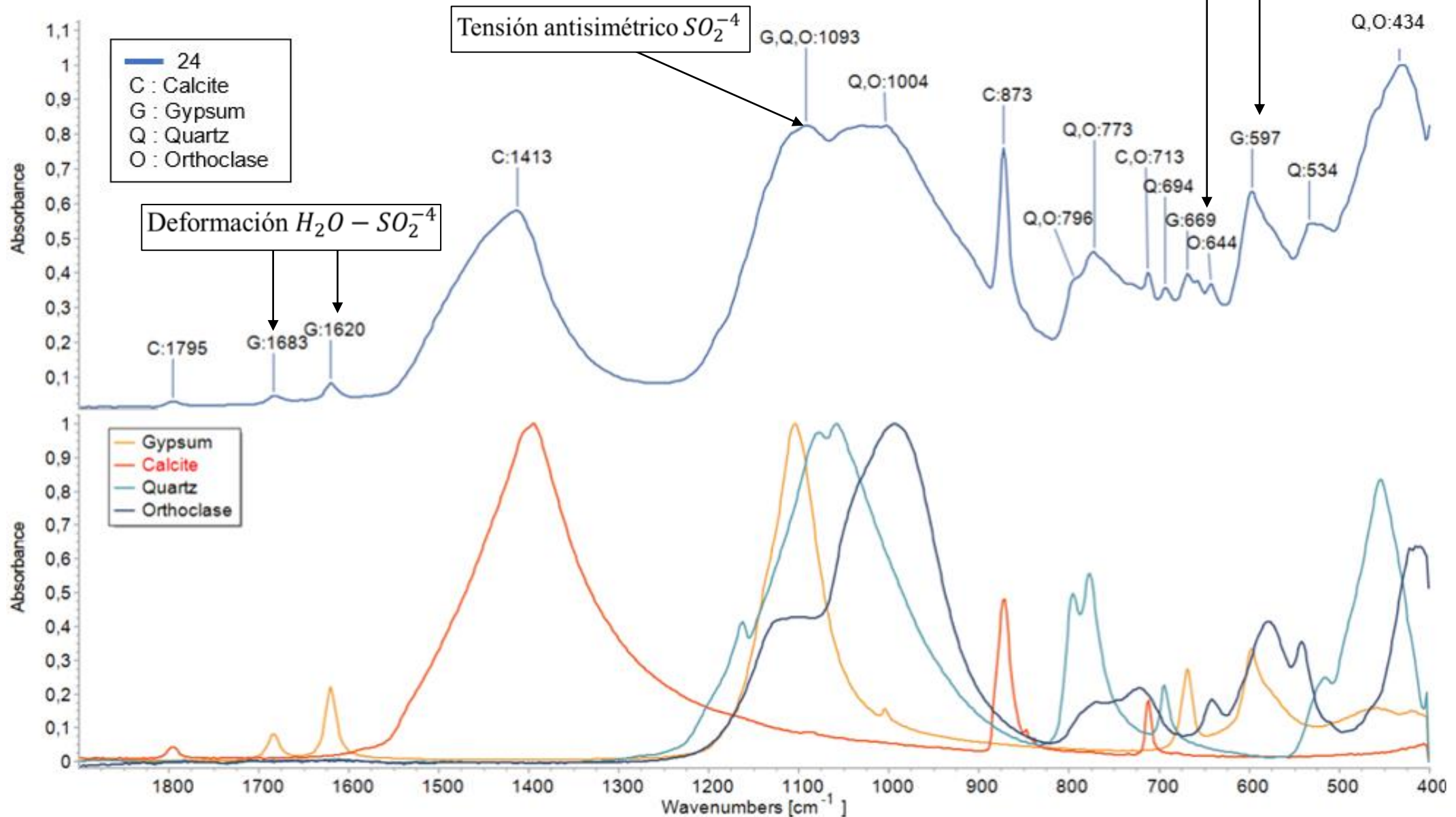
# Muestra 24. FTIR. Cuarzo



# Muestra 24. FTIR. Cuarzo

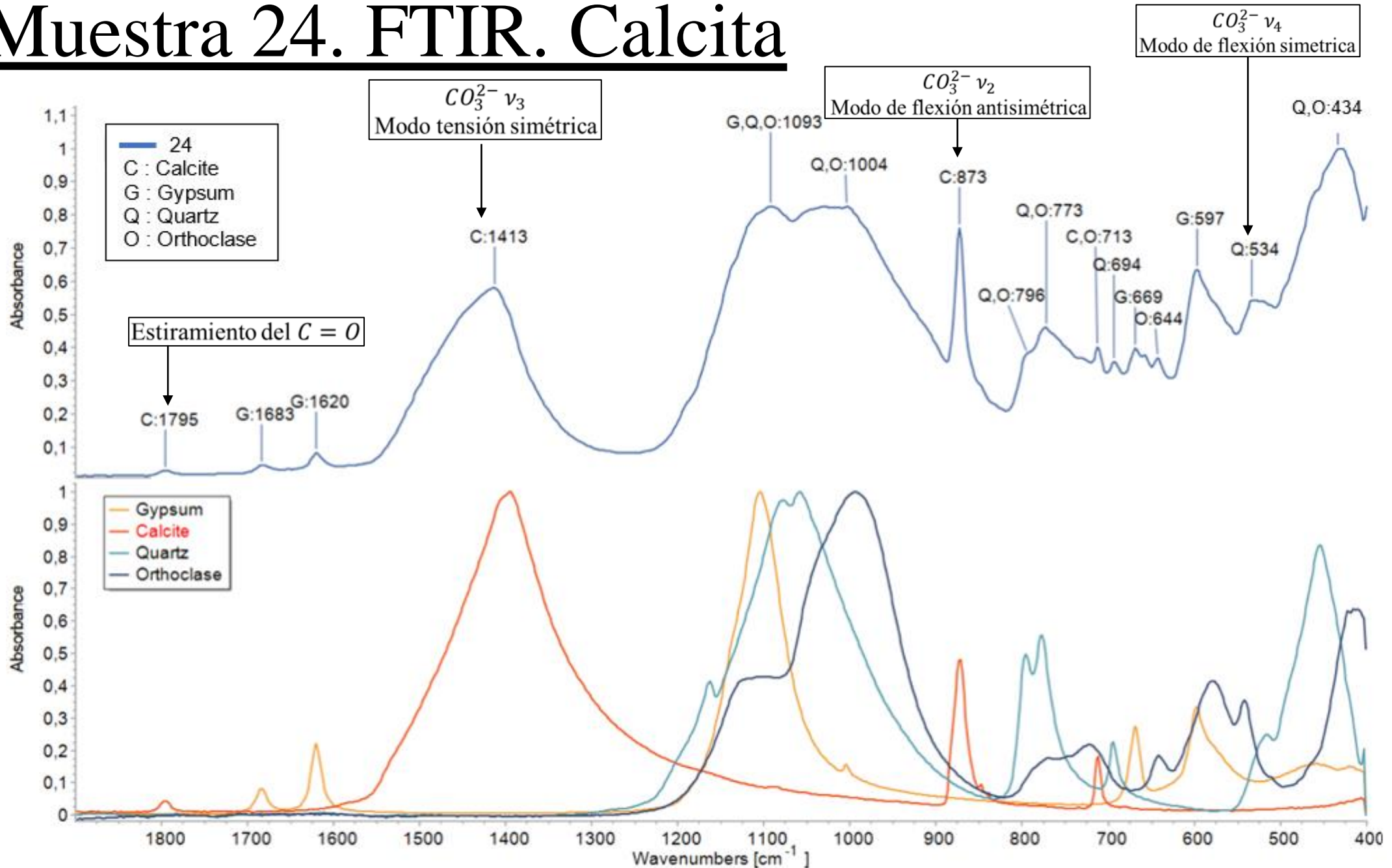


# Muestra 24. FTIR. Yeso



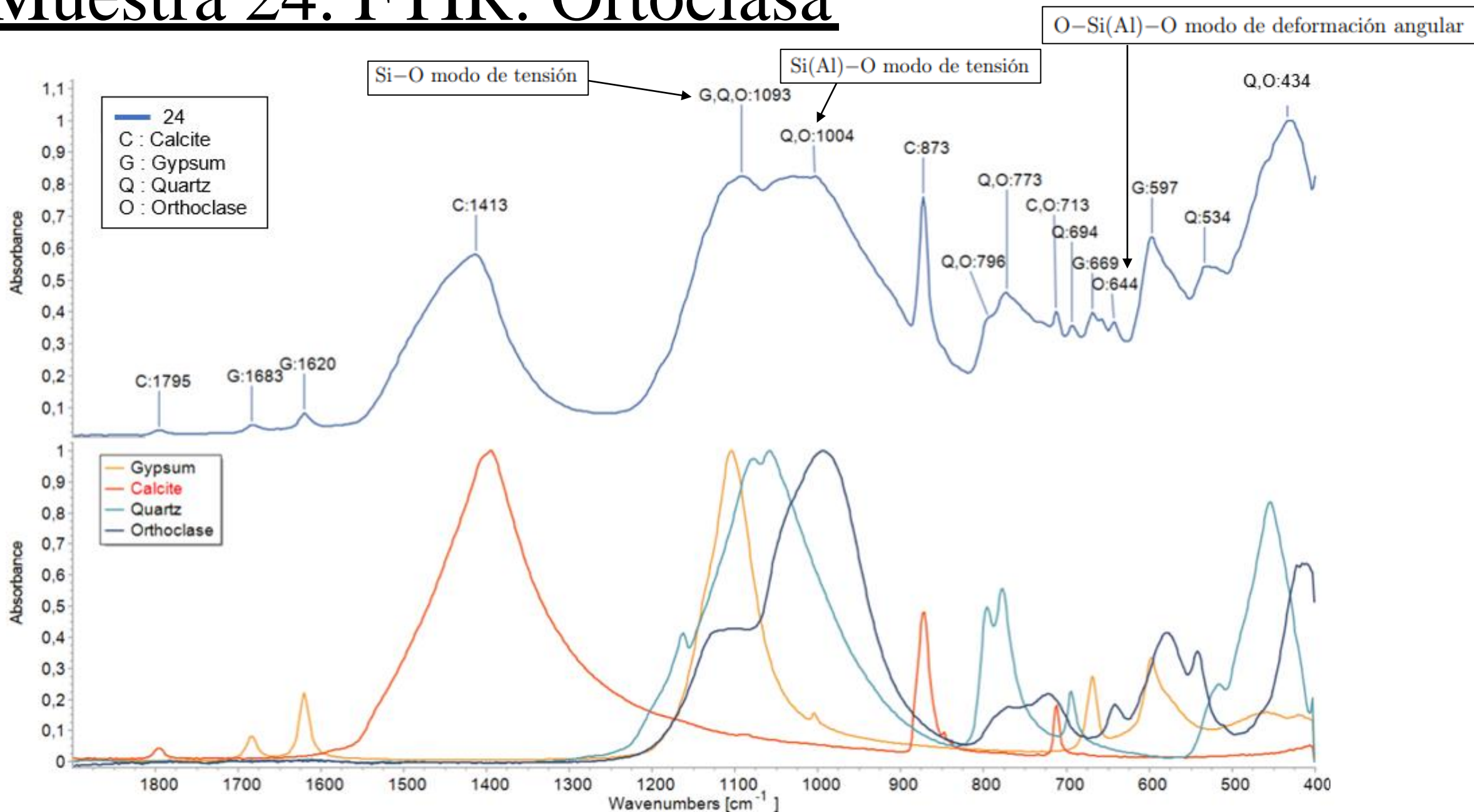


# Muestra 24. FTIR. Calcita

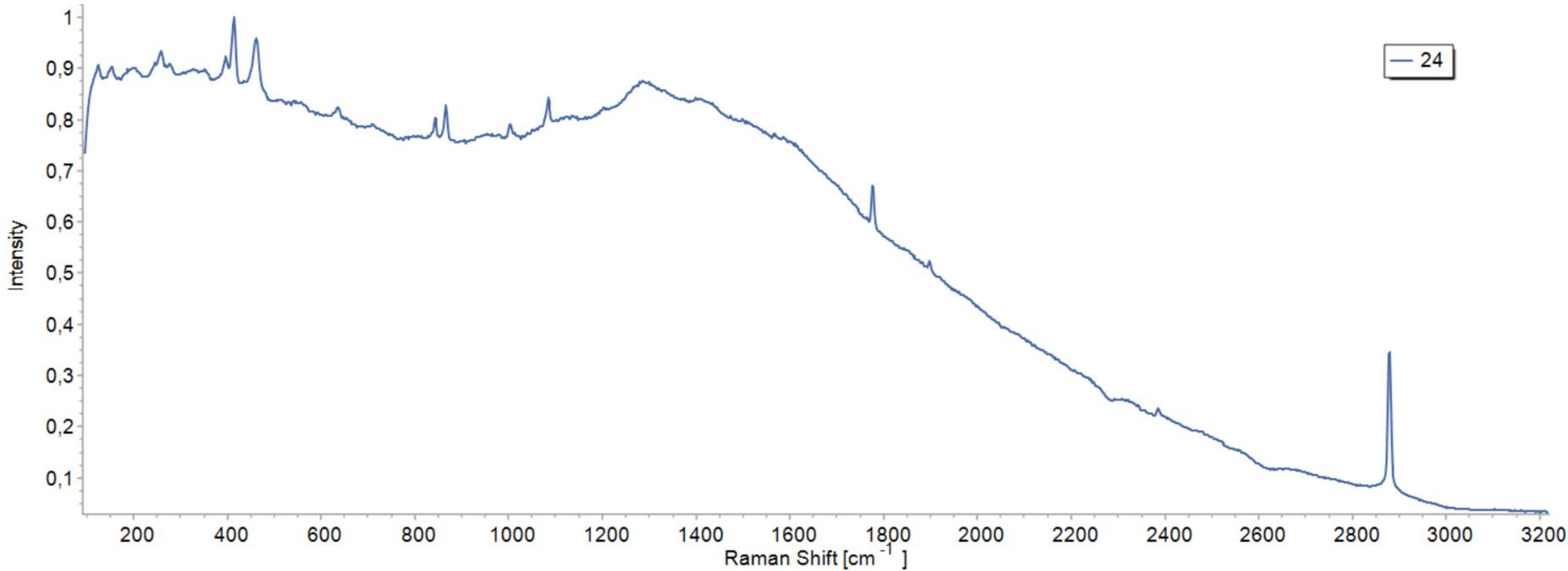




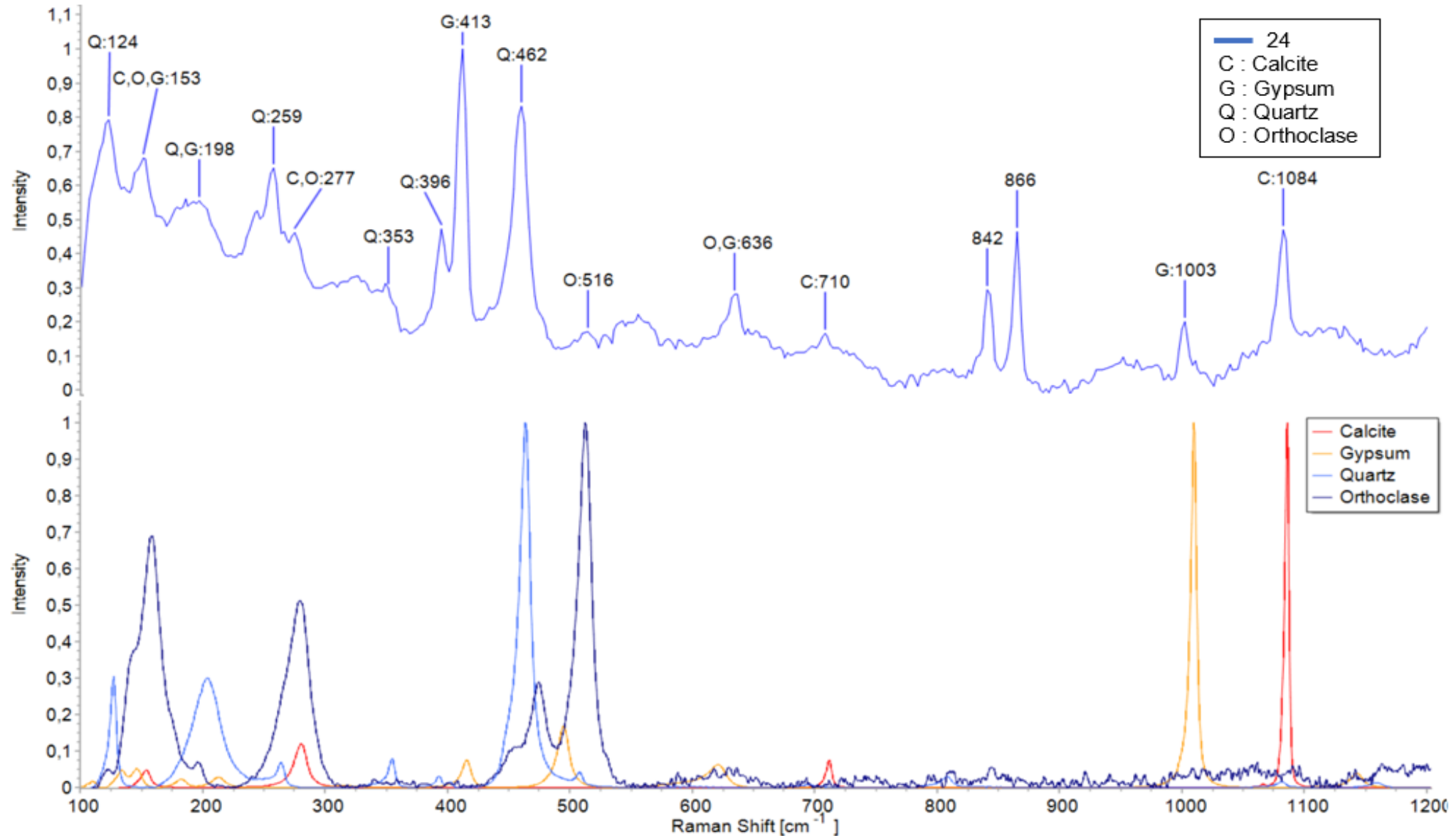
# Muestra 24. FTIR. Ortoclasa



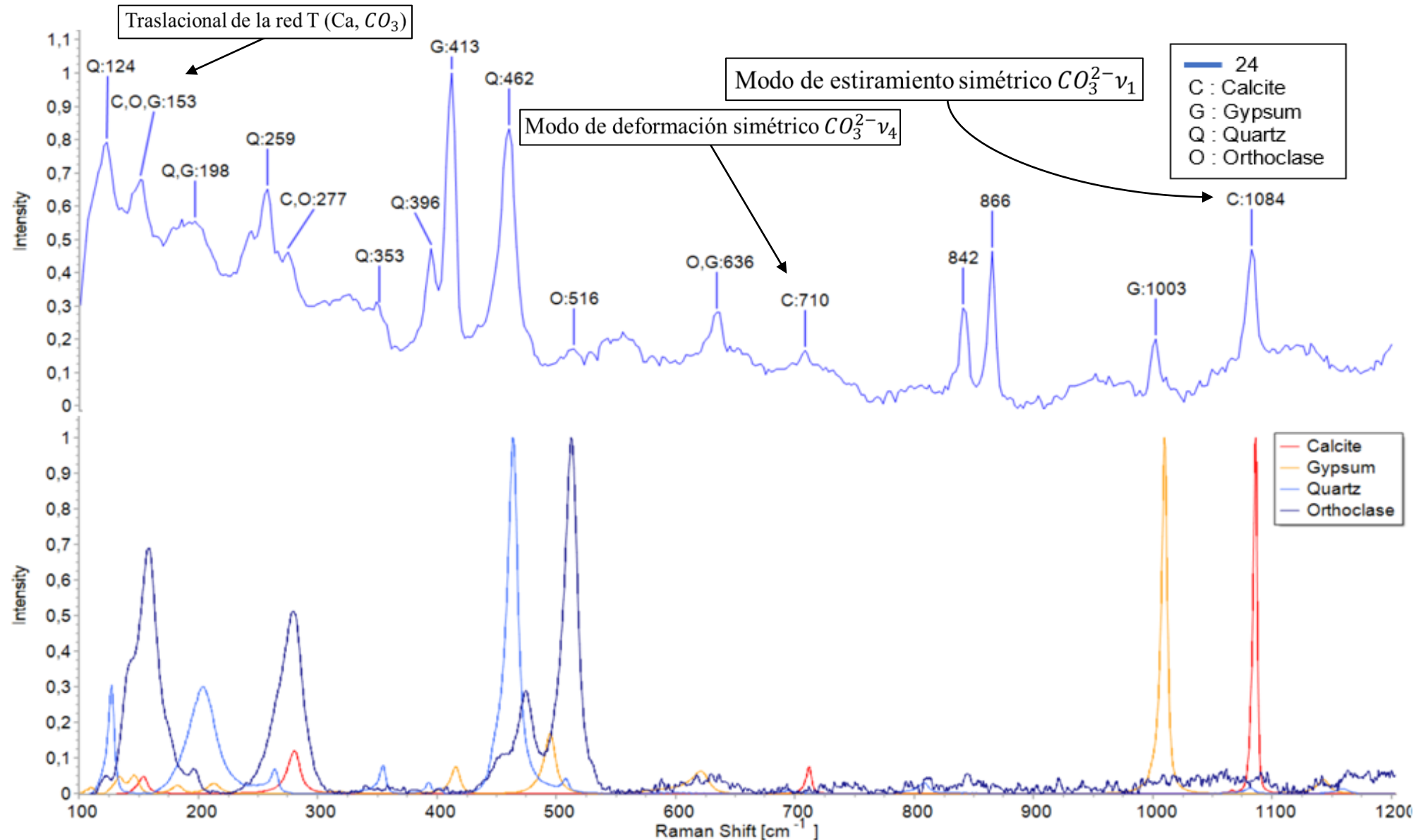
# Muestra 24. Raman



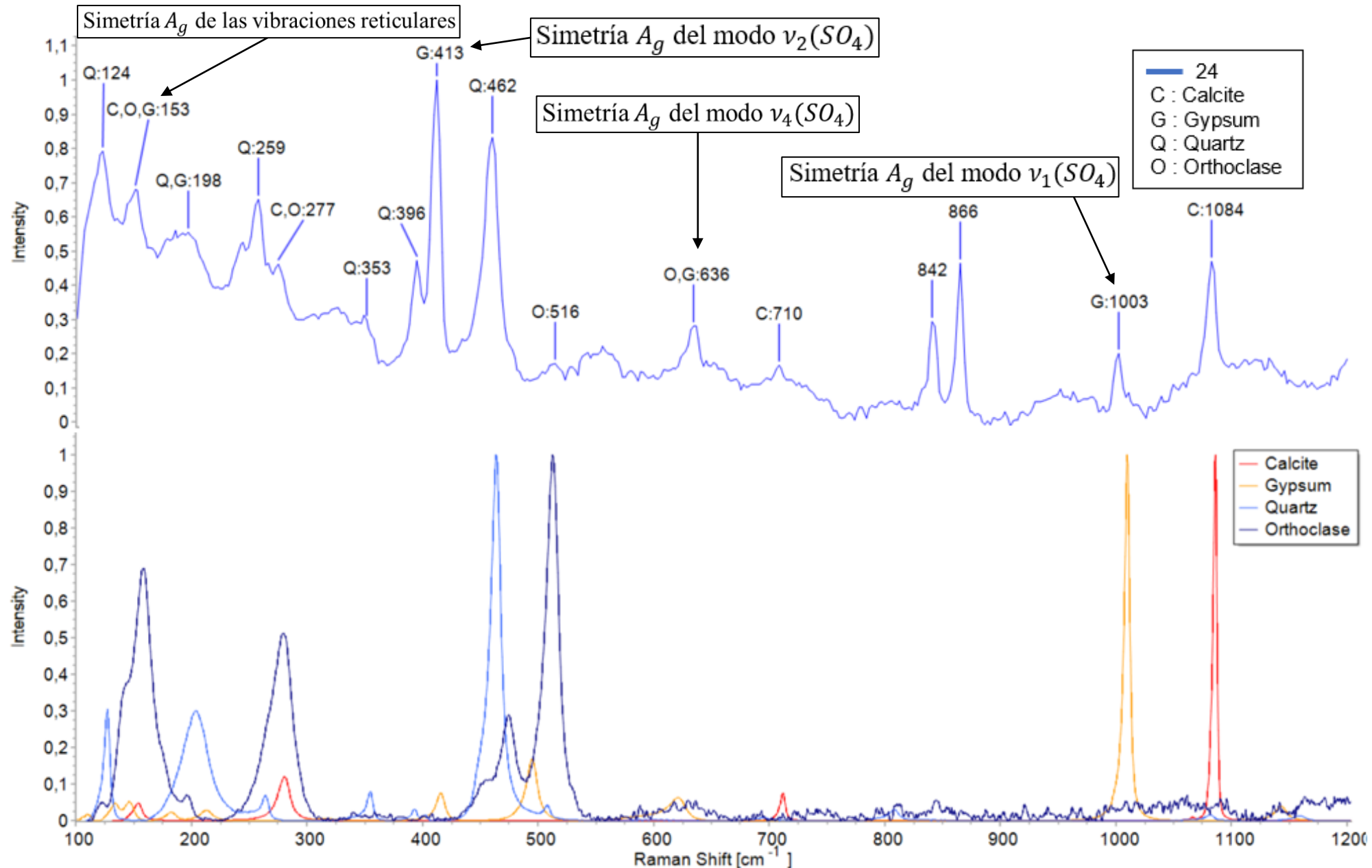
# Muestra 24. Raman



# Muestra 24. Raman. Calcita

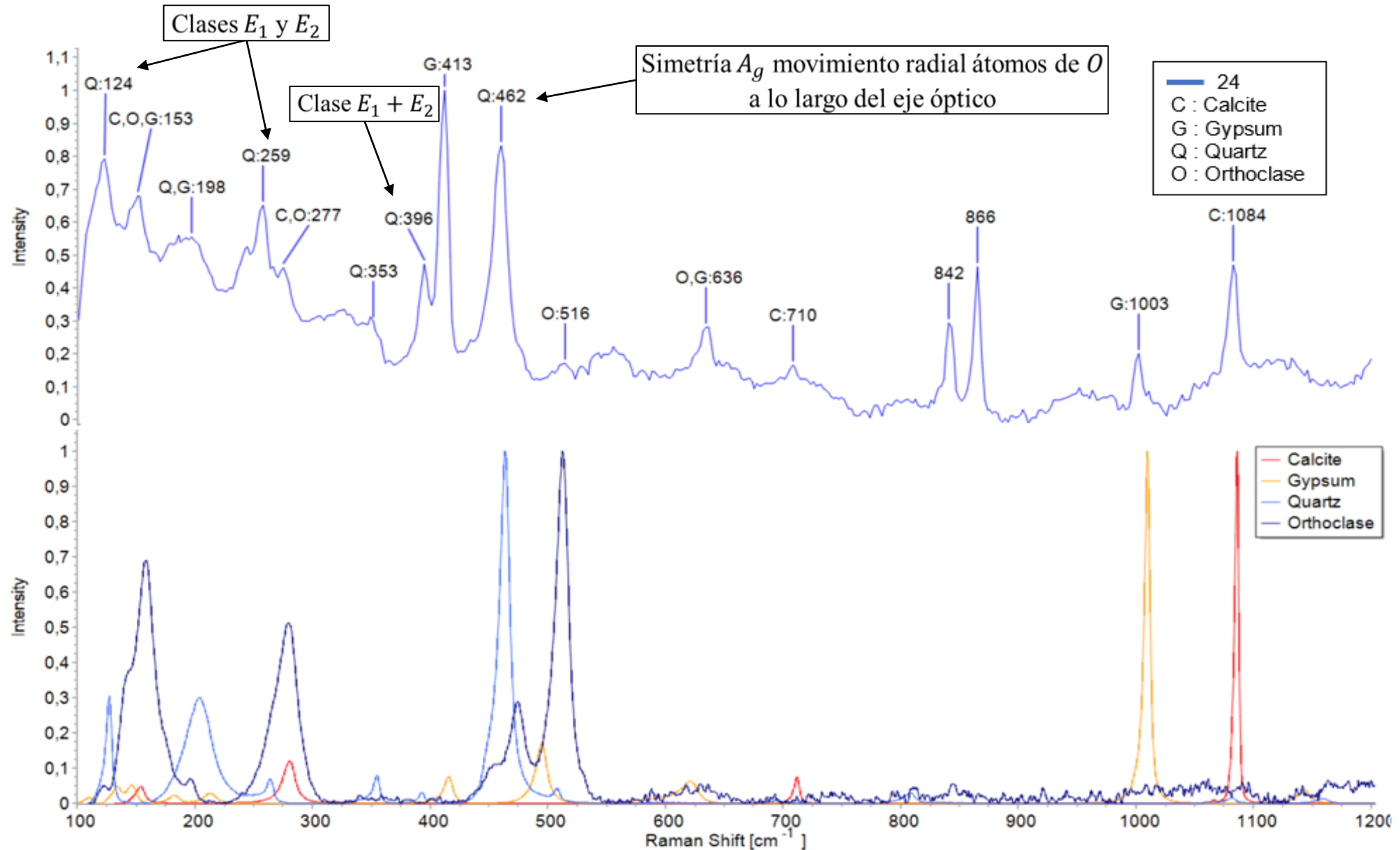


# Muestra 24. Raman. Yeso





# Muestra 24. Raman. Cuarzo



# Discusión de la muestra 24



La calcita, identificada como el material ligante principal es fundamental para la cohesión y durabilidad del material.



La ortoclase es otro agregado del mortero.



El cuarzo funciona como un agregado proporcionando consistencia al mortero.



El yeso podría haber sido añadido intencionadamente para modificar las propiedades del mortero, como mejorar la trabajabilidad o el tiempo de fraguado

Mortero de cal



# Conclusión

- Con este trabajo se ha conseguido realizar un análisis prácticamente completo de dos muestras desconocidas
- Las técnicas de XRD, FTIR y Raman han resultado ser herramientas complementarias y poderosas para la identificación de minerales en las muestras estudiadas.
- En la muestra G1 se ha hallado la presencia de calcita, goetita, hematita y barita, por tanto, se podría corresponder con un pigmento.
- En la muestra 24 se ha encontrado que está compuesta por yeso, calcita, cuarzo y ortoclasa, por lo que, se podría corresponder con un mortero de cal.
- En Espectroscopía Raman se han obtenidos picos en  $842\text{ cm}^{-1}$  y  $866\text{ cm}^{-1}$  sin identificar para ambas muestras, lo que resulta bastante extraño, aun cuando son de naturaleza distinta.