

## **Análise quantitativa de fases minerais pelo método de Rietveld**

*Gabriella Fazio<sup>1</sup>; Edi Mendes Guimarães<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>UnB; <sup>2</sup>UnB

**RESUMO:** A análise qualitativa de fases minerais por difração de raios x (DRX) é uma rotina laboratorial, no entanto, a análise quantitativa ainda constitui um obstáculo. Dentre a grande variedade de métodos para tal análise, o método de Rietveld garante maior precisão. Trata-se de um método de refinamento que utiliza os dados da DRX combinados com informações cristalográficas e químicas para definição quantitativa das fases cristalinas, bem como de parâmetros de rede e distribuição de átomos e íons. O método de Rietveld se baseia no método de mínimos quadrados, arquiteta um espectro similar ao do adquirido no DRX e utiliza, como ajuste, os parâmetros cristaloquímicos. Técnicas diversas de quantificação utilizam somente os picos dos planos reticulares dos minerais, mas o programa de Rietveld possui a vantagem de considerar todo o espectro de difração. O programa utilizado para o refinamento, neste projeto, é o GSAS-EXPGUI (General Structure Analysis System). Esse trabalho tem como finalidade a quantificação das fases minerais constituintes de rochas carbonáticas pelo método de Rietveld. Foram selecionadas amostras de carbonatos coletadas no Morro da Pedreira, norte do DF. As amostras pertencem a um nível estromatolítico e foram extraídas respectivamente no biolito (amostra C2), abaixo (amostra C3) e acima (amostra C1) dele. Foram, então, moídas por um moinho de bolas e reduzidas à fração menor que 1/256 mm em gral de ágata. A preparação das lâminas é feita pela técnica de back loading, em lâmina de alumínio vazada, com finalidade de reduzir efeitos de orientação preferencial. As análises foram realizadas no laboratório de difração de raios-X do IG-UnB em difratômetro Rigaku modelo Ultima IV, equipado com tubo de cobre e filtro de níquel sob 35Kv e 15Ma. A varredura foi realizada no intervalo 2 $\theta$  de 3 a 120 graus, passo 0,05, velocidade 0,5. ). Pela interpretação dos difratogramas, as amostras c1, c2 e c3 consistem principalmente de calcita, com baixas porcentagens de quartzo, dolomita e minerais de alteração. As porcentagens das fases minerais foram, então, verificadas pelo método de Rietveld.

**PALAVRAS CHAVE:** MÉTODO DE RIETVELD, MORRO DA PEDREIRA-DF, CARBONATOS.