

OTIMIZAÇÃO DA QUANTIFICAÇÃO DE FASES MINERAIS UTILIZANDO O SOFTWARE FULLPROF 4.00 E DADOS DE DIFRAÇÃO DE RAIOS X

Julice Ferreira Santos¹; Alberto Carlos Da Paz²; Claudia Figueirero Silva³; Márcia Cristina Mello dos Santos⁴

¹ PETROBRAS; ² PETROBRAS; ³ PETROBRAS; ⁴ PETROBRAS

RESUMO: O estudo teve por objetivo otimizar e aprimorar a quantificação da mineralogia total de amostras pulverizadas de rochas (carbonáticas, siliciclásticas e evaporíticas) analisadas no Laboratório de Difração de Raios-X (DRX), da Gerência de Sedimentologia e Petrologia do Centro de Pesquisa da Petrobras (CENPES). Para tanto, foi necessário, a utilização do software de modelagem matemática e quantificação Fullprof 4.00, de domínio público, desenvolvido no Institut Laue-Langevin pelos pesquisadores Juan Rodriguez-Carvajal e Thierry Roisnel. Ao Fullprof 4.00 aplicou-se os dados de DRX de padrões (mono e poliminerálicos) gerados no laboratório do CENPES. O programa FullProf 4.00 ajusta picos/reflexões, quantifica fases minerais a partir da integração do cálculo das áreas de cada pico referente a cada fase mineral, simula e ajusta o difratograma de raios-X produzido por um conjunto de fases minerais conhecidas utilizando o Método de Rietveld. A validação desta nova metodologia de quantificação foi feita a partir de comparações de resultados obtidos por fluorescência de raios-X (FRX) e por comparação direta com amostras de composição conhecida. Para tanto, foram selecionadas amostras de rochas naturais (arenitos e evaporitos) e experimentais (cinco misturas carbonáticas), que posteriormente foram quantificadas (mineralogia total) pela aplicação do programa Fullprof 4.00, e em seguida, analisadas por FRX e quantificadas a partir dos dados desta análise química. Também foi feita uma avaliação da etapa de preparação (moagem e montagem) das amostras, pois a preparação adequada para análise por DRX é fundamental sob todos os aspectos qualitativos e quantitativos. Por isso, é necessário conhecer os efeitos que esta etapa produz no resultado final. As vantagens da utilização desta nova metodologia são: 1) minimizar os efeitos de orientação preferencial; 2) poder ser repetidamente utilizada para sistemas de composição de fases semelhantes; 3) eliminar calibração com padrões de misturas, uma vez que as fases estejam bem identificadas; 4) não ser suscetível à subjetividade do analista (escolha e separação de reflexões, linhas de base, determinação de alturas e áreas); 5) permitir extrair outras informações sobre as fases minerais, tais como evolução dos parâmetros de rede, substituições isomórficas, grau de orientação preferencial.

PALAVRAS-CHAVE: DIFRAÇÃO DE RAIOS-X; FULLPROF 4.00; SEDIMENTOLOGIA.