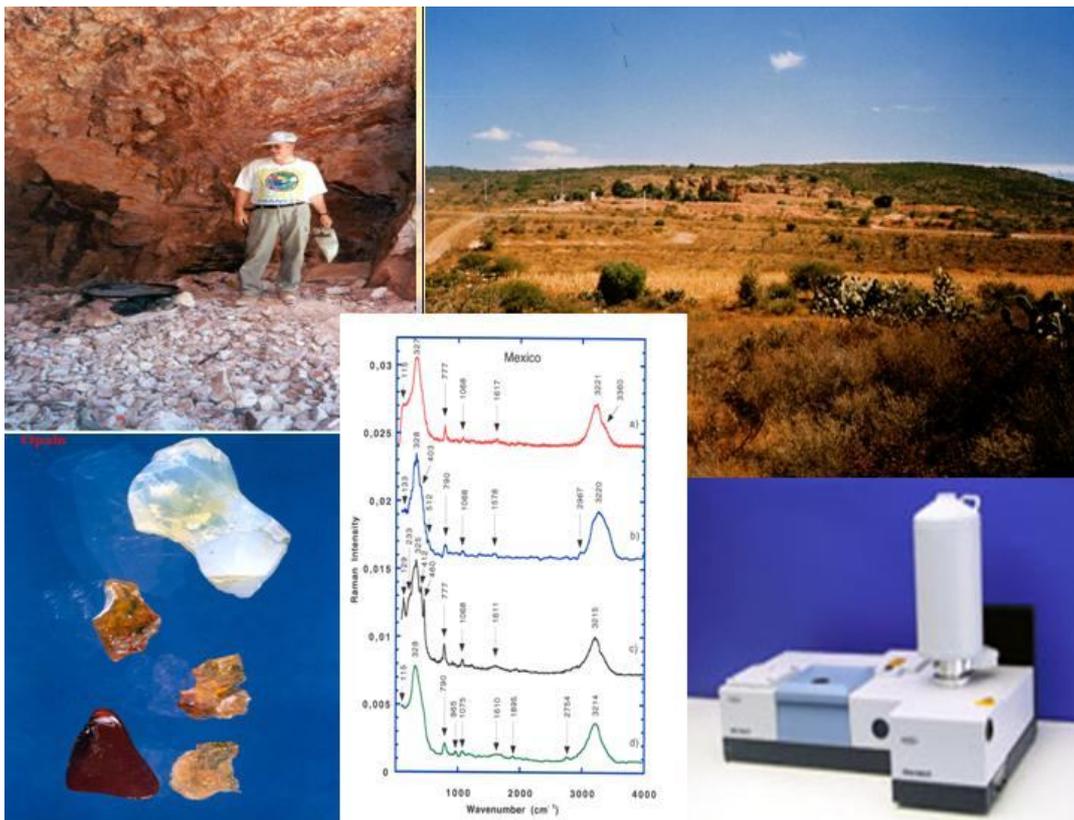


AVANCES RECIENTES DE LA ESPECTROSCOPIA RAMAN EN CIENCIAS DE LA TIERRA

Mikhail Ostrooumov



Introducción

Durante la última década la espectroscopia Raman (ER) se ha convertido en una técnica analítica importante en diversas áreas de la ciencia moderna y, en particular, en Ciencias de la Tierra. La ER debe su nombre al físico hindú Sir Chandrasekhara Venkata Raman, que en 1930 recibió el Premio Nobel de Física por su observación en 1928 del fenómeno de dispersión inelástica de la luz. Las posibilidades de la dispersión de Raman fueron consideradas durante mucho tiempo sólo desde el punto de vista teórico, como una curiosidad científica ya que sus intensidades de dispersión eran muy débiles y por lo tanto muy difíciles en la detección espectroscópica.

El descubrimiento de los láseres por dos físicos rusos Nicolás B́asov y Alejandro Pŕojorov (Premio Ńobel de Física 1964 por investigaciones fundamentales en radiofísica cuántica que permitieron crear distintos tipos de láseres y máseres) a mediados del siglo XX ha permitido de nuevo poner en marcha el estudio de este fenómeno ya que el láser, con sus propiedades de gran intensidad, monocromaticidad y elevada direccionalidad (entre otras) se iba a convertir en la fuente de excitación idónea para ER.

La invención del láser (fuentes comerciales vendidas al principio de los '70) y detectores CCD (Charged Coupled Devices) de estado sólido (comercialmente disponible a mediados de los '80), así como también la idea de acoplar ER y microscopía óptica (entre 1975 y 1983) han permitido diseñar en Francia la primera generación del instrumento Raman MOLE (Molecular Optical Laser Examiner). Con este tipo de instrumento se llevaron a cabo las primeras investigaciones de los minerales y varios materiales gemológicos (Dhamelin-court, Bisson, 1977; Dele-Dubois et al., 1980, 1986; Pinet et al., 1992).

La ER ha conseguido actualmente un lugar relevante entre las técnicas no destructivas

(Ostrooumov, 2001, 2011) para el estudio sofisticado de los minerales (sobre todo en sus aspectos cristalquímicos, geoquímicos y petrológicos), así como también de las gemas (Gemología), objetos arqueológicos y de patrimonio cultural (Arqueometría). Durante los últimos años la ER se usa ampliamente en diversas ciencias planetarias: astrobiología, estudio de meteoritos y análogos terrestres de Marte.

Las ventajas fundamentales de esta técnica son su carácter no destructivo y su alta resolución lateral espacial (cerca a $1\ \mu\text{m}$) lo que la sitúa como una poderosa herramienta para el análisis de diversos materiales y objetos en Ciencias de la Tierra.

Las otras principales ventajas de la ER son las siguientes:

- no requiere preparación de la muestra,
- no hay contacto con la muestra,
- diversidad de muestras: la muestra puede ser sólido, líquido o gas,
- las muestras pueden ser opacas o transparentes: polvo microcristalino (10^{-12} g), cristal solo (hasta de $1\ \mu\text{m}$), tableta prensada de una mezcla de polvos, formación natural en la superficie o en la profundidad de un cristal de diferente dimensión y naturaleza,
- el rango de trabajo es de 25 hasta $4000\ \text{cm}^{-1}$ en un simple registro, dentro del cual permite caracterización de compuestos inorgánicos y orgánicos,
- se pueden analizar: en la parte baja $100\ \text{cm}^{-1}$ como estándar; en medio acuoso y solvente; a través de plástico, vidrio, cuarzo, y zafiro,
- alta resolución espectral ($0.001\ \text{cm}^{-1}$),
- rapidez en la adquisición de espectros (10^{-12} seg),
- se pueden usar fibra óptica hasta 100 metros,
- posibilidad de investigación de soluciones acuosas y fusiones producidas por temperaturas altas,

- existen diversas librerías Raman en la WEB (<http://www.mineralog.net>).
- respecto a la microsonda electrónica este método tiene la ventaja de poder analizar áreas que no salen a la superficie de la muestra, como inclusiones de minerales; igualmente, se analiza en la actualidad el contenido químico de las fases líquidas, sólidas y de vapor dentro de las inclusiones fluidas, aportando una enorme cantidad de datos adicionales al estudio microtermométrico y geoquímico de las últimas.

No obstante, existe una serie de factores que pueden obstaculizar la obtención de los espectros Raman. Entre ellos se encuentran la luminiscencia, opacidad del mineral para la radiación excitada y dispersión de la radiación monocromática por las heterogeneidades. Algunas de estas desventajas (por ejemplo, la luminiscencia) fueron superadas en los últimos años, utilizando el método FT-Raman con fuente láser en la región del infrarrojo cercano.

Sería conveniente mencionar que hasta la fecha no se han creado los bancos de datos de la FT-Raman espectroscopía de minerales, materiales gemológicos y objetos arqueométricos. Considerando lo anterior, entre los objetivos de este trabajo aparece también la necesidad de creación de una nueva base de datos de la FT-Raman espectroscopía de los minerales. Esta nueva base de datos serviría como el elemento indispensable para la resolución correcta de diversos problemas pendientes en Ciencias de la Tierra y las investigaciones afines (por ejemplo, en Gemología y Arqueometría).

El presente trabajo es un texto que resultará útil a estudiantes y geocientíficos que tienen interés en conocer las nuevas técnicas analíticas, en este caso la ER, y quisieran comenzar el uso de este método en sus propias investigaciones en Ciencias de la Tierra. El carácter multifacético, diversas ventajas analíticas y las aplicaciones prácticas muestran el enorme potencial de la técnica Raman en geociencias.

APLICACIONES DE ESPECTROSCOPIA RAMAN EN CIENCIAS DE LA TIERRA

En los últimos 10 años el método de la ER ha encontrado un amplio uso en Ciencias de la Tierra, específicamente en investigaciones mineralógicas, geoquímicas y petrológicas de diversa índole. Sería conveniente subrayar una vez más que este método es no-destructivo, bastante rápido, económico (sin contar la adquisición del equipo), y no exige ninguna preparación especial de las muestras bajo análisis.

Cada vez se conocen mejor las posibilidades que presenta este método multifacético para los estudios en la mineralogía avanzada, así como también en geoquímica y petrología. En bibliografía, existen muchos ejemplos concretos de la aplicación de la ER en el estudio y la caracterización de diferentes materiales y objetos que están investigando en diversas Ciencias de la Tierra (Marfunin, 1994, 1995; Ostrooumov et al., 1999a,b; Faulques et al., 2001; Galan Huertas, 2004; Nasdala et al., 2004; Ostrooumov et al., 2002a,b, 2005, 2008, 2009; Ostrooumov, Victoria, 2011; Ostrooumov, Hernández, 2011; Ostrooumov, 2007, 2009, 2011).

Dichos ejemplos incluyen:

- identificación de minerales y sus variedades,
- análisis de fases minerales (por ejemplo, identificación de los compuestos en soluciones sólidas),
- caracterización espectroscópica de nuevas especies minerales,
- investigaciones cristal químicas: fenómeno de orden-desorden estructural e isomorfismo;
- estudio de los microcristales hasta 100 Å;
- origen del color de minerales;
- estudio de polimorfismo, politipos, transformaciones de fases;
- estudio de inclusiones (sólidas, líquidas y gaseosas),
- imágenes y mapeo Raman (distribución espacial) de las muestras heterogéneas,

- caracterización de defectos y estructura interna de minerales,
- estudio de minerales en las condiciones de altas y ultra-altas temperaturas y presiones: geobarometría (p. e., en rocas metamórficas de diferente origen),
- cálculo de las constantes termodinámicas de los minerales,
- estudios de contaminación de aguas y suelos (detección de complejos metálicos, ácidos, hidrocarburos).

En un principio, la ER se utilizó principalmente para la investigación y determinación del grado de orden-desorden estructural en sustancias poco ordenadas, como vidrios y fusiones tanto artificiales como naturales (Marfunin, 1995). Se sabe que la difracción de rayos X, electrónica o neutrónica no siempre permite determinar las características estructurales de los compuestos naturales de bajo grado de cristalinidad y amorfos. La característica esencial de estas estructuras es la ausencia del orden a largo alcance y en este caso los métodos habituales de difracción dan solo el acceso a las funciones radiales de distribución. En la actualidad se conocen cada vez mejor las posibilidades que presenta la ER en el estudio estructural de diferentes sustancias. Este método se utiliza actualmente con frecuencia para la investigación y determinación del grado de orden-desorden en la estructura de algunas sustancias minerales desordenadas, en particular, se utiliza para la determinación de las características estructurales de los minerales con diferente grado de cristalinidad. La ER comparada con otras técnicas analíticas (espectroscopía infrarroja, métodos de difracción u otros métodos físicos habituales) se muestra mucho más sensible al estado del orden y desorden estructural de los minerales y diversos materiales avanzados.

Esta sensibilidad se debe, esencialmente, al hecho de que las líneas o bandas Raman son, por su naturaleza, más estrechas que las bandas de absorción infrarroja, de tal manera que un posible ensanchamiento de estas líneas indicaría un aumento en el desorden estructural del

material en estudio. De este modo, los espectros Raman representan una valiosa información complementaria para la determinación de estructuras cristalinas de diferentes compuestos, tanto naturales como artificiales, y facilita la caracterización adecuada de las propiedades cristaloquímicas de minerales (Ostrooumov, 2002a,b; Nasdala et al., 2004).

Se puede decir que durante la última década la ER fue aplicada exitosamente en casi todas las geociencias y prácticamente todos los tipos de muestras fueron investigados con la ayuda de esta técnica lo que se explica, obviamente, por sus ventajas experimentales. En primer lugar, son ampliamente aplicados los siguientes estudios: identificación de las partículas pequeñas e inclusiones de los minerales (Bersani et al., 2009). En estos casos las técnicas analíticas comunes (por ejemplo, microsonda electrónica o difracción de rayos X) no pueden ser usados ya que es imposible de separar y/o preparar una muestra adecuada para el estudio. La identificación de los minerales principales componentes de roca, así como también de los minerales accesorios se lleva a cabo en la base de numerosas publicaciones científicas y algunos catálogos en los cuales están presentados y agrupados los espectros Raman de diversas especies minerales (<http://www.univie.ac.at/Mineralogie/MINSPEC/raman.htm>; <http://rruf.info>; www.mineralog.net).

Actualmente la ER constituye uno de los métodos más adecuados para la caracterización de las propiedades cristaloquímicas en las muestras heterogéneas. En particular, este método es muy propicio para distinguir las modificaciones polimorfas de los minerales, ya que la sensibilidad de frecuencias vibracionales y de intensidades difusas de las bandas características permite determinar los cambios débiles en la estructura cristalina (Ostrooumov, 2007). Además, con la ayuda de la ER en las investigaciones recientes se obtiene la información importante sobre la composición química e isotópica de los minerales, así como también la caracterización espectroscópica de las soluciones sólidas.

En los últimos años numerosas aplicaciones de la ER han aparecido en biomineralogía, como, por ejemplo, el estudio de los fósiles, ámbares, corales, perlas, nácares, huesos humanos, esmaltes dentales y materiales aplicados para los implantes médicos (Bersani, Lottici, 2010). La ER fue usada también para investigar los procesos medioambientales, tales como el intemperismo y la corrosión (Ostrooumov, 2009). En la cristalografía y ciencias de materiales la ER es usada rutinariamente para identificar y comprobar la calidad y la homogeneidad de los productos sintéticos (Nasdala et al., 2004).

Además, hay que subrayar una vez más, que la ER es un método no destructivo en comparación con otros métodos destructivos, resulta una indudable ventaja en el análisis de los minerales y materiales gemológicos que incluye los siguientes importantes aspectos: identificación de compuestos e inclusiones y detección de tratamientos potenciales que mejoran la calidad (por ejemplo, el color y la claridad) de los materiales gemológicos. Finalmente, la aceptación incrementada y el uso amplio del método Raman en Ciencias de la Tierra muestra el hecho de que esta técnica se ha convertido en un análisis indispensable en la descripción y redefinición de las nuevas especies minerales (Ostrooumov et al., 2009).

A continuación veamos un ejemplo concreto del uso de la ER en Ciencias de la Tierra. En este caso se trata de un estudio de las rocas y minerales del cráter Chicxulub (México) con el fenómeno de impacto por un golpe meteorítico.

Metamorfismo por impacto

Se conoce que existe una hipótesis que relaciona el origen del cráter Chicxulub (México) con el fenómeno de impacto por un golpe meteorítico. El problema es que no todos los geocientíficos están de acuerdo con esta interpretación genética. Entre los minerales característicos de Chicxulub se han identificado varios polimorfos de sílice, el estudio detallado de los cuales permitiría definir el origen de estos compuestos ya que sus particularidades cristaloquímicas son los indicadores sensibles de alta presión y de diferente grado de cristalinidad. Veamos los resultados del primer estudio por medio de la ER de los polimorfos de sílice que se han formado en las rocas del cráter Chicxulub (Ostrooumov et al., 2002b).

El gigantesco cráter de impacto Chicxulub (>200 km), se encuentra sepultado por varios centenares de metros (400-1000 m) de depósitos marinos de plataforma en el borde septentrional de la península de Yucatán, México (Fig. 1). La presencia de cuarzo de choque, vidrio diaplético de cuarzo y diversas texturas específicas, constituyen evidencias petrográfico-mineralógicas importantes del origen por impacto del cráter Chicxulub. Todos estos rasgos

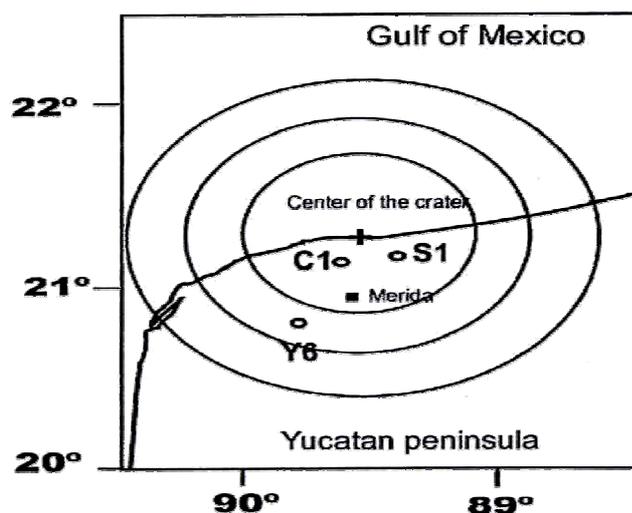


Figura 1: Cráter de impacto Chicxulub (México).

fueron determinados en láminas delgadas de rocas de Chicxulub, por medio del microscopio petrográfico. Los minerales polimorfos de alta presión, sin embargo, son considerados como la evidencia más sólida de impacto, y son de esperar en un evento de la magnitud del ocurrido en Chicxulub.

La sílice es uno de los componentes más comunes y durables de la corteza terrestre en forma del cuarzo α - trigonal. Durante un gran impacto meteorítico dos polimorfos más densos de sílice, la coesita monoclinica y el cuarzo desordenado, pueden formarse a partir de cuarzo, a presiones mayores de 3 a 10 GPa. Estos minerales son difíciles de detectar por métodos convencionales, en virtud de su escasa abundancia y desarrollo mínimo en tamaño. La necesidad de usar métodos no destructivos se hace más obvia en el caso de Chicxulub, ya que se trata de material cuya disponibilidad es sumamente limitada.

En el presente estudio la ER se aplicó a la caracterización mineralógica de las brechas de impacto del cráter Chicxulub y se examinaron en general las posibilidades del método para el estudio de las impactitas. Los espectros Raman fueron obtenidos por medio de un barrido detallado en una muestra de la brecha de impacto proveniente del núcleo del pozo Yucatán 6, de PEMEX.

Para este estudio fue utilizado el espectrómetro Raman modelo T64000 Jobin Yvon equipado con un láser de argón con longitud de onda en la región visible ($\lambda=514.5$ nm), ubicado en el Laboratorio de Física Cristalina del Instituto de Materiales, Universidad de Nantes (Francia). El montaje de las muestras permitió registrar los espectros tanto en la configuración macroscópica como en la configuración microscópica. La superficie estudiada varía entonces de 1 mm^2 en la configuración macroscópica a $10 \text{ }\mu\text{m}^2$ bajo el microscopio. Los espectros fueron comparados y presentados usando el programa GRAMS II (Galactic Corporation). Todos los

espectros se obtuvieron en condiciones analíticas semejantes, razón por la cual los parámetros de las bandas pueden ser directamente comparadas entre un espectro y otro.

Una placa de 10 x 6 cm de la brecha de impacto proveniente del núcleo 14 (1208-1211 m.b.n.m.) correspondiente al pozo de exploración Yucatán 6 de PEMEX, fue seleccionada como muestra de estudio (Fig. 2). La roca es una brecha polimíctica. La matriz de la brecha ocupa cerca del 50% en volumen y se compone principalmente de calcita micrítica, de acuerdo con estudios de catodoluminiscencia realizados con anterioridad. Los clastos llegan a medir hasta un centímetro en tamaño. Entre los clastos predominan fragmentos del basamento cristalino (ígneo y metamórfico), notablemente transformados por el impacto, y fragmentos arcillosos de forma subredondeada, los cuales representan, probablemente, material fundido por el impacto y posteriormente alterado por procesos hidrotermales. Una proporción menor de los clastos está constituida por material sedimentario, prevaleciendo los clastos ricos en calcita y anhidrita sobre los de sílice. Cabe señalar que la proporción entre los clastos de diferente litología varía significativamente de un lugar a otro en el espacio reducido comprendido por el núcleo. Cristales de cuarzo chocado con rasgos planos de deformación se encuentran esporádicamente en la roca. La inspección mineralógica preliminar de la muestra permite concluir que la roca sufrió alteración hidrotermal de baja temperatura. La muestra fue inspeccionada cuidadosamente con el microscopio estereoscópico a fin de localizar los fragmentos del basamento cristalino en los cuales era probable la presencia de polimorfos de alta presión. En consecuencia, más de 30 sitios fueron seleccionados para el análisis por ER.

Los espectros sumarios fueron obtenidos por medio de un barrido detallado en cada uno de los fragmentos de interés. En la mitad de los fragmentos analizados de esta manera fue identificada calcita como fase principal, con líneas características cercanas a 152, 278, 710 y 1084 cm^{-1} . Las fases dominantes identificadas en otros fragmentos son albita (479, 508 cm^{-1}) y

cuarzo (464 cm^{-1}).

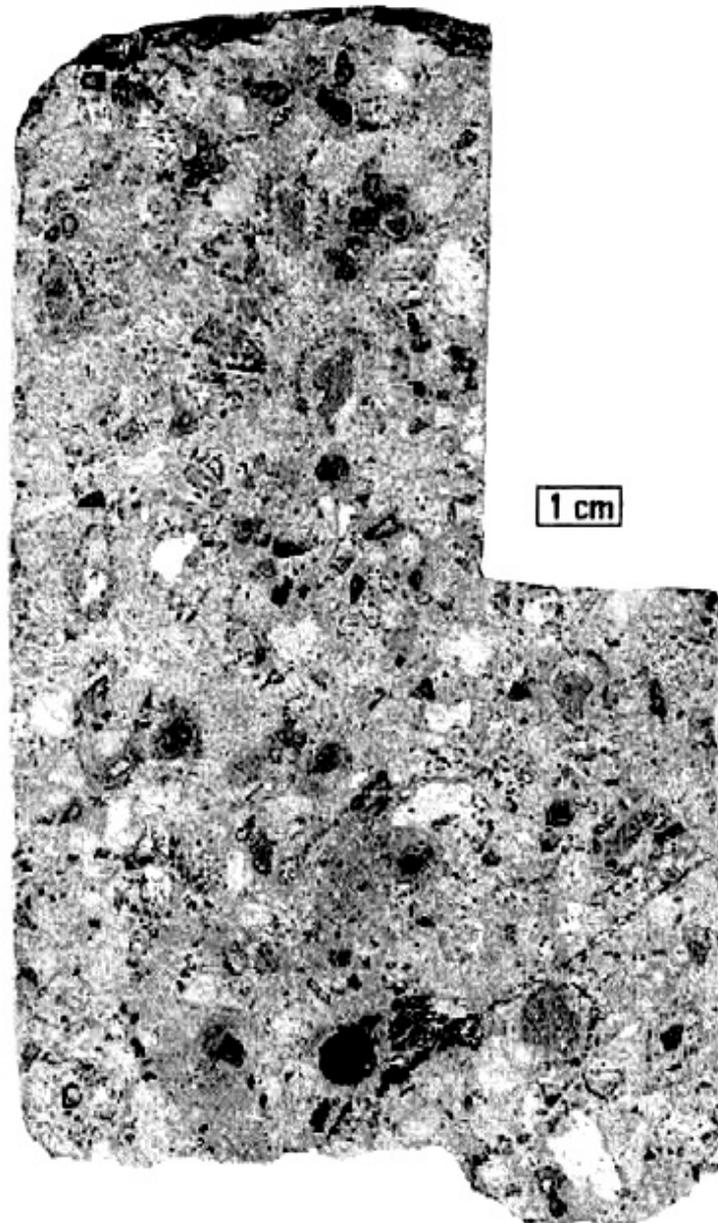


Figura 2: Muestra de la brecha de impacto proveniente del núcleo Y6N19 del pozo Yucatán 6, PEMEX (intervalo 1377-1379 m).

La figura 3a-d muestra cuatro espectros Raman típicos obtenidos de las rocas de Chicxulub que fueron registrados en el intervalo espectral 100-1300 cm^{-1} . Las frecuencias de todas las líneas observadas para cada sección estudiada se dan en la tabla 1. Esta tabla suma también los datos publicados para α - cuarzo y la coesita, así como también las líneas de Raman de la coesita sintética y de las rocas de impacto de la Arizona (USA).

Los resultados del estudio muestran que las impactitas de Chicxulub contienen principalmente tres polimorfos de sílice: el original α - cuarzo y dos variedades de alta presión - coesita y cuarzo desordenado. α - cuarzo se puede identificar inmediatamente en base de su línea Raman más intensa cerca de 464 cm^{-1} . La coesita natural se caracteriza por una línea más intensa cercana a 520 cm^{-1} y otras de menor intensidad alrededor de 425, 356 y 270 cm^{-1} (Fig. 3a). Basándose en la identificación detallada de los modos vibracionales para diferentes modificaciones de sílice (Lazarev, 1995), estas bandas fueron asignadas a los modos vibracionales conocidos bajo términos espectroscópicos B_{1g} , E_g , A_{1g} . La línea más intensa de 520 cm^{-1} se ha asignado a un modo de valencia Si-O-Si (modo vibracional A_1), que está correlacionando con el modo de 464 cm^{-1} del α -cuarzo. Estas dos líneas más intensas (520 y 464 cm^{-1}) son suficientes para distinguir correctamente las dos formas cristalinas de SiO_2 .

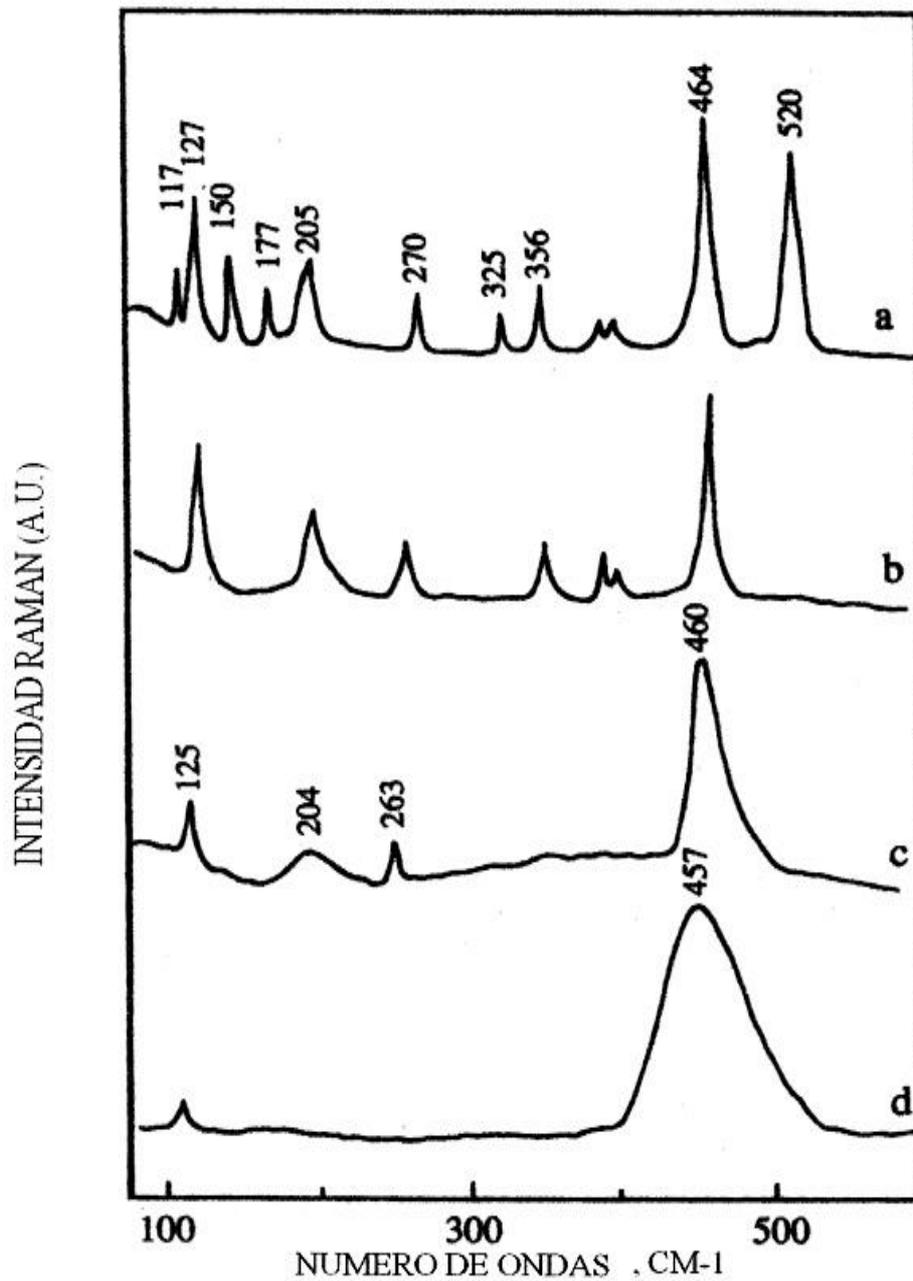


Figura 3: Espectros Raman de las impactitos provenientes del cráter Chicxulub (México): a-coesita+cuarzo, b-cuarzo con la estructura ordenada, c-cuarzo con el desorden estructural intermedio, d-cuarzo con la estructura desordenada (Ostrooumov et al., 2002b).

Tabla 1: Bandas Raman (cm^{-1}) para impactitas Chicxulub, coesita natural (CS) y cuarzo (QZ) entre 100 y 1300 cm^{-1} .

Atribución de bandas	Coesita 1 sintética	Coesita 2 natural	R79-2 Chicxulub	R77-17 Chicxulub	Coesita, Arizona 3	Cuarzo 4 natural
CS	116 f	116 f	117 f	-	115.9 m	-
QZ			127 f	127 m	127.8 m	128 f
CS	150.5 m	151 m	150 m	-	151 m	-
CS	175.5 f	176 f	177 f	-	175.7 f	-
CS+QZ	203.5 m	204 m	205 m	205 m	205 m	207 f,an
QZ	-	-	-	264 m	-	264 m
CS	268 f	269 f	270 f	-	271 f	-
CS	325.7 m	326m	325 m	-	325 m	-
CS+QZ	354.7 m	355 m	356 m	356 m	355 m	356 m
QZ	-	-	394 d	395 m	-	395 m, sp
QZ	-	-	401 d	-	-	401 d
CS	425.5 m	427 m	-	-	425 m	-
QZ	465.6 m	466 m	464 m	464 m	463 mf	464 mf
CS	520 mf	521 mf	520 f	-	521 s	-
QZ	-	-	-	695 d	-	696 d
CS	-	785 d	-	-	-	-
QZ	-	-	794 d	795 d	-	795 w,sp
QZ	-	-	804 d	806 d	-	807 d
CS	-	815 d	-	-	-	-
CS	-	837 d	834 d	-	-	-
CS	-	1036 d	-	-	-	-
CS+QZ	-	1065 d	1064 d	1065 d	-	1066 d, sp
QZ	-	-	1081 d	1082 d	-	1083 d
CS	-	1144 d	-	-	-	-
CS+QZ	-	1164 d	1160 d	1162 d	-	1161 d
QZ	-	-	1232 d	1230 d	-	1231 d

Intensidad de bandas: d, débil; m, mediana; f, fuerte; mf, muy fuerte; an, ancho; sp, superpuesto.

Los siguientes razonamientos de carácter teórico general contribuyen a nuestra interpretación de los espectros. Los espectros Raman reflejan movimientos de los átomos en su entorno químico-estructural, en este caso, de Si y O en coordinación tetraédrica en la estructura de armazón (del inglés “framework”) de diferentes fases de sílice. Las líneas superiores a 600 cm^{-1} se encuentran en correlación con los modos de las uniones Si-O intratetraédricos (modos de

valencia), mientras que la aparición de las bandas por debajo de 400 cm^{-1} se debe a los modos de los ángulos Si-O-Si intertetraédricos (modos de torsión y deformación de las cadenas). Las vibraciones responsables de una banda en la región $300\text{-}400\text{ cm}^{-1}$ se atribuyen a las vibraciones más potentes relacionadas con el número de miembros en los anillos formados por los tetraedros SiO_4 en estructuras cíclicas con base en sílice. Por ejemplo, fue establecido que las estructuras con cuatro tetraedros SiO_4 (como en coesita o feldespato) tienen varios modos T-O-T por arriba de 500 cm^{-1} , mientras que las estructuras cíclicas con seis miembros (cuarzo, cristobalita, tridimita) presentan un solo modo del mismo tipo por debajo de 400 cm^{-1} (Marfunin, 1995). De acuerdo con estos datos, los fragmentos estudiados contienen tanto las fases con unidades cíclicas de seis (cuarzo), como de cuatro (coesita) miembros.

El espectro Raman de α - cuarzo cristalino exhibe bandas cerca de 128, 206, 356, 395, 464, 696, 795, 806, 1082, 1160 cm^{-1} (Fig. 3b). La identificación detallada de los modos vibracionales de diversas formas de sílice ha sido realizada en publicaciones anteriores por varios autores que asignaron todas las bandas observadas (Lazarev, 1995). En varios fragmentos de la muestra fueron detectadas tres diferentes modificaciones de cuarzo: cristalino, de desorden intermedio y de alto desorden (Fig. 3).

El desorden estructural y el diferente grado de cristalinidad del cuarzo se reflejan en sus espectros Raman (Fig. 3:c,d). Estos dos fenómenos provocan en los espectros Raman varios cambios significativos. Entre ellos hay que destacar los siguientes: la desaparición de una serie de las bandas, su gradual ensanchamiento y, finalmente, el cambio de las frecuencias de las bandas características. En particular, este cambio de la frecuencia (se observa, como regla, el desplazamiento a los números de onda más bajos) se puede atribuir al desorden estructural de la estructura interna del cuarzo cuando ella llega a ser cada vez más desordenada (Tabla 1).

El cambio hacia números de onda más bajos fue observado especialmente para la banda alrededor de 464 cm^{-1} (modo de valencia Si-O-Si) que indica, por lo general, que las distancias medias entre los átomos llegan a ser más grandes, es decir, que la red cristalina se expande levemente. El cuarzo cristalino se caracteriza por el espectro Raman con la banda intensa y bien definida cerca de 464 cm^{-1} . En el espectro Raman del cuarzo de desorden intermedio esta banda cambia de posición hacia 461 cm^{-1} y, además, desaparecen tres bandas de baja frecuencia (401 , 392 , 354 cm^{-1}). Finalmente, en el espectro Raman de una modificación de alto desorden aparece una sola banda cerca de 455 cm^{-1} (a veces, se observa también la banda cerca de 122 cm^{-1}) que se caracteriza por el cambio de la forma (ensanchamiento) y la disminución de la intensidad. El ensanchamiento de esta banda y la disminución paralela de la intensidad puede ser interpretado de tal manera que, durante el desorden estructural, la distribución de las longitudes y los ángulos de los enlaces entre y dentro de los tetraedros SiO_4 llegue a ser cada vez más irregular.

Sería muy importante indicar por aquí los resultados de un trabajo experimental (McMillan et al., 1992) en el cual en las condiciones de laboratorio se ha simulado un fenómeno de choque de los cristales del cuarzo (con las presiones máximas entre 21.7 GPa y 31.4 GPa) y se han obtenido los espectros Raman correspondientes. De acuerdo con estos datos experimentales, la banda prominente cerca de 464 cm^{-1} en el cuarzo no chocado se desplaza a los números de onda más bajos en muestras chocadas: 463 cm^{-1} (21.7 GPa), 461 cm^{-1} (25.8 GPa), 455 cm^{-1} (31.4 GPa). En estos experimentos, solamente la muestra de 31.4 GPa muestra el cambio de frecuencias más marcado para las bandas del cuarzo cristalino (cerca de 455 , 800 y 1060 cm^{-1}), acompañados por su ensanchamiento considerable.

Por lo tanto, comparando nuestros resultados con éstos obtenidos en los experimentos de laboratorio, podemos asumir, con buena exactitud, que la formación del cuarzo desordenado en

las impactitas de Chicxulub ocurrió por lo menos en la presión de 26-31 GPa, y más probable en una presión máxima de 31 GPa.

Con el fin de medir el grado de cristalinidad en la espectroscopia se usa así llamada anchura a media altura o más corto media-anchura (Γ) de la banda principal del cuarzo (464 cm^{-1}) en el espectro Raman. Los resultados de esta medición muestran que en los espectros Raman de las tres diferentes modificaciones del cuarzo la banda fundamental se caracteriza por el ensanchamiento gradual y como la consecuencia, por el aumento del valor de la media-anchura lo que confirma la disminución de su cristalinidad.

La media anchura de la banda intensa Raman cerca de 464 cm^{-1} aparece como el mejor indicador para investigar los cambios relacionados con el orden estructural. Los valores de la media anchura alrededor de $5\text{-}7\text{ cm}^{-1}$ son característicos para el cuarzo cristalino. El cuarzo con el desorden intermedio muestra el valor Γ entre $10\text{-}15\text{ cm}^{-1}$, mientras que en muestras del cuarzo altamente desordenadas Γ es igual o más de 30 cm^{-1} (Tabla 2).

La interpretación de los resultados obtenidos permite confirmar que en la brecha polimíctica se encuentran fragmentos de basamento cristalino del Yucatán con rastros de polimorfos de SiO_2 de alta presión y especialmente de la coesita y el cuarzo desordenado. Estos estudios dan la base para creer que las fases de alta presión de sílice se encuentran presentes en la brecha polimíctica de la estructura Chicxulub, con lo cual la hipótesis de su origen por impacto meteorítico se ve favorecida. Por lo tanto, la presencia de estas fases de alta presión en las rocas del cráter Chicxulub fortalece la idea de su formación por impacto, y descarta la posibilidad de origen volcánico.

Tabla 2: Posición y medio-anchura de las bandas Raman (cm^{-1}) entre 100 y 600 cm^{-1} para el cuarzo con diferente grado de cristalinidad: cristalino, de alto orden (1), de desorden intermedio (2) y de alto desorden (3) presentes en el cráter de Chicxulub

MODOS VIBRACIONALES	1	2	3
E	128	122-125	120-123
A ₁ (ancha)	207	200-204	-
E	265	260-263	-
A ₁ (débil)	356	353	-
E	394	-	-
E	401	-	-
A ₁ (fuerte)	464	458-460	455
Medio-anchura (Γ) de la banda 464 cm^{-1}	5	10-15	>30

En suma, la coexistencia de dos formas cristalinas de SiO_2 (es decir, de la coesita y el cuarzo desordenado) en las impactitas de Chicxulub ha sido comprobado por sus Raman espectros. Mientras que estos espectros son extremadamente sensibles a la orden de corto alcance ellos también producen la información sobre el desorden total. Por lo tanto, resulta que el orden estructural del cuarzo se puede caracterizar correctamente por la ER. El cambio de la frecuencia, ensanchamiento de bandas, así como también la desaparición de algunas bandas de baja frecuencia dependen fuertemente del grado de orden estructural. Midiendo la media anchura de la banda principal Raman de Si-O cerca de 464 cm^{-1} , se puede estimar el grado de desorden de la red incluso para el cuarzo altamente desordenado. Las muestras estudiadas en el laboratorio por el choque de alta presión muestran los espectros Raman muy similares a los mismos obtenidos en este estudio de las rocas de Chicxulub. Por eso, aparece una evidencia bien definida que las rocas del cráter Chicxulub han experimentado un metamorfismo del choque. Por lo tanto, la ER es un método microanalítico de gran alcance para investigar el proceso del desorden estructural en los minerales y, en particular, en los polimorfos de sílice.

Conclusión

Las indudables ventajas analíticas de la ER y la reciente aparición en el mercado de microscopios Raman compactos han contribuido de modo decisivo a la aplicación amplia de esta técnica espectroscópica en Ciencias de la Tierra. Es muy importante subrayar que durante los últimos años la ER se ha movido afuera de los laboratorios especializados y se ha convertido en una técnica-estándar para la caracterización rápida y fácil de los materiales y objetos geológicos. Existe un consenso general de que al principio de este nuevo siglo la ER es una moderna técnica, no destructiva y no invasiva, de gran precisión y sensibilidad, fundamental para el desarrollo de análisis cualitativo y cuantitativo en geociencias. Tras haber repasado algunas aplicaciones concretas en Ciencias de la Tierra se puede concluir que es una técnica analítica que presenta un enorme potencial para llevar a cabo diversas investigaciones geológicas, sobre todo en estudios modernos en Mineralogía, Geoquímica, Petrología y ciencias planetarias. Además, la ER (conjuntamente con la espectrometría infrarroja de reflexión) es muy útil en la identificación rápida y precisa de los materiales gemológicos y gemas, sueltos o montados, así como también en el análisis no destructivo de diferentes fases minerales en los objetos de interés arqueológico, colecciones de museos y artesanías antiguas (Ostrooumov, 2011).

Por otro lado, sería conveniente comentar que en las investigaciones científicas no existe una sola técnica que permita resolver de una vez todos los problemas pendientes. Por eso, no podemos concluir que la ER proporciona más información que otras técnicas analíticas (Ostrooumov, 2009b). Esto podría ser correcto en algunos casos, pero en otros casos, otras técnicas proporcionan más datos importantes que la ER. La diferencia y una ventaja enorme de la ER en comparación con otras técnicas analíticas modernas es que la información puede ser obtenida de manera sencilla, directa y no destructiva. Mientras que la mayoría de las técnicas

analíticas proporcionan sólo la información sobre la composición química o la estructura cristalina de una muestra analizada, con la ayuda de la ER se obtienen simultáneamente estos datos cristalocquímicos.

Además, en la ciencia moderna no hay muchas técnicas analíticas que puedan analizar, al mismo tiempo, las sustancias sólidas, líquidas, gaseosas, cristalinas, desordenadas, amorfas, orgánicas o inorgánicas, así como también las mezclas de diferentes compuestos. Un aumento en velocidad de análisis y procesamiento de datos ha permitido proponer recientemente un mapeo Raman que puede proporcionar el conocimiento sobre la distribución espacial de los compuestos minerales en las muestras heterogéneas, lo que es difícil obtener con la ayuda de otras técnicas analíticas. En suma, la visión general de las aplicaciones y algunos ejemplos concretos que han sido presentados en esta monografía muestran la versatilidad, uso práctico y las ventajas analíticas de la técnica Raman en geociencias.

Referencias bibliográficas

- Anthony John W., Bideaux Richard A., Bladh Kenneth W., Nichols Monte C. 2003. Handbook of Mineralogy, Vol. V Borates, Carbonates, Sulfates. Mineral data Publishing.
- Ballirano, P., Maras, A. 2006. Mineralogical characterization of the blue pigment of Michelangelo's fresco "The Last Judgment". *American Mineralogist*, 91, 997-1005.
- Bersani, D., Salvioli-Mariani, E., Mattioli, M. 2009. Raman and micro-thermometric investigation of the fluid inclusions in quartz in a gold-rich formation from Lepaguare mining district (Honduras, Central America). *Spectrochimica Acta, Part A*, 73, 443-449.
- Bersani, D., Lottici, P. 2010. Applications of Raman spectroscopy to gemology. *Analytical Bioanalytical Chemistry*, 397, 7, 2631-2646.
- Burke, E. 2001. Raman microspectrometry of fluid inclusion. *Lithos*, 139, 139-158.
- Dele-Dubois, M., Dhamelincourt, P., Schubnel, H. 1980. Etude par spectrometrie Raman d'inclusions dans les diamants, saphirs et émeraudes. *Revue de Gemmologie*, 63, 11-14.
- Dele-Dubois, M., Dhamelincourt, P., Poirot, J., Schubnel, H. 1986. Differentiation between natural gems and synthetic minerals by laser Raman micro-spectrometry. *Journal Molecular Structure*, 143, 135-138.
- Dele-Dubois, M., Dhamelincourt, P., Poirot, J. 1997. Use of spectroscopic techniques for the study of natural and synthetic gems: application to rubies. *Journal of Raman Spectroscopy*, 28, 673-676.
- Dhamelincourt P., Bisson, P. 1977. Principe et réalisation d'un microscope optique utilisant l'effet Raman. *Microscopica Acta*, 79, 267-276.
- Domingo, C. 2011. Técnicas de espectroscopía Raman aplicadas en conservación. "La Ciencia y el Arte", M. del Egido, D. Juanes (Eds.), IPCE, MCU, Madrid.
- Dubessy, J., Poty, B., Ramboz, C., 1989. Advances in C-O-H-N-S fluid geochemistry based on micro-Raman spectrometric analysis of fluid inclusions. *European Journal of Mineralogy*, 1, 517-534.
- Edwards, H., Chalmers, J. 2005. Practical Raman spectroscopy and complementary techniques. In: Edwards H., Chalmers J. (Eds.) *Raman spectroscopy in Archaeology and Art history*. Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK.
- Faulques, E., Fritsch, E., Ostrooumov, M. 2001. Spectroscopy of natural Silica-rich glasses. *Journal of Mineralogical and Petrological Sciences*, 96, 6, 120-128.
- Galan Huertas, E. 2004. *Mineralogía Aplicada*. Editorial Síntesis. Madrid.
- Kiefert, L., Karamelas, S. 2011. Use of the Raman spectrometer in gemological laboratories: review. *Spectrochimica Acta, Part A*, 80, 119-124.
- Lazarev, A. 1995. *Vibrational spectra and structure of silicates*. Edition Science, Moscow.
- Lewis, L. 2001. *A Handbook on Raman Spectroscopy*. Marcel Dekker Inc., New York.
- Marfunin, A.S. 1994. *Advanced Mineralogy: Composition, structure and properties of mineral matter (concepts, results and problems)*. Vol. 1. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York.
- Marfunin, A.S. 1995. *Advanced Mineralogy: Methods and instrumentation (Results and recent developments)*. Vol.2. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York.
- McCreery, R. L. (2000): *Raman Spectroscopy for Chemical Analysis*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, USA.
- McMillan, P. F., Wolf, G.H., Lambert, P. 1992. A Raman spectroscopic study of shocked single crystalline quartz. *Physics and Chemistry of minerals*, 19, 71-79.

- Nakamoto, K. 2009. Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds, J. Wiley and Sons Ltd., 6 th edition, New York.
- Nasdala, L., Smith D., Kaindl, R. 2004. Raman spectroscopy: Analytical perspectives in mineralogical research. In: Spectroscopic methods in mineralogy. (Eds. Beran A, Libowitzky E.), European Mineralogical Union, Notes in Mineralogy, vol.6.
- Ostrooumov, M. 2001. Espectrometría de minerales: logros, perspectivas y problemática. III Congreso Nacional de Cristalografía, 28-43.
- Ostrooumov, M. 2007. Destabilization phenomena in volcanic opals (Mexico): Raman, IR and XRD study. *Spectrochimica Acta, Part A*, 68, 1070-1076.
- Ostrooumov, M. 2009a. A Raman, IR and XRD analysis of the deterioration on historical monuments: case study from Mexico. *Spectrochimica Acta, Part A*, 73, 498-504.
- Ostrooumov M. 2009b. *Mineralogía Analítica Avanzada*. Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo y Sociedad Mexicana de Mineralogía. ISBN 978-607-424-095-5. 275 p.
- Ostrooumov, M. 2011. FT Raman y Espectrometría infrarroja de reflexión de minerales y materiales gemológicos. *Catálogo de espectros*. <http://www.mineralog.net>
- Ostrooumov, M., Fritsch, E., Lefrant, S., Lasnier, B. 1999a. Spectres Raman des opales: aspect diagnostique et aide a la classification. *European Journal of Mineralogy*, v.11, No.5, 899-908.
- Ostrooumov, M., Fritsch, E., Lefrant, S. 1999b. Primeros datos sobre la espectrometría Raman de los ópalos. *Revista Mexicana de Ciencias Geológicas*, 16, 1, 73-80.
- Ostrooumov, M., Fritsch, E., Faulques, E. 2002a. Etude spectrometrique de la lazurite du Pamir. *Canadian Mineralogist*, 40, 3, 885-893.
- Ostrooumov, M., Faulques, E., Lounejeva, E. 2002b. Raman spectrometry of natural silica in Chicxulub impactite, Mexico. *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences*, 334, 21-26.
- Ostrooumov, M., Garduño Monroy, V.H., Carreon Nieto, H., Lozano, R. 2003. Mineralogía y geoquímica de los procesos de degradación en monumentos históricos: primer acercamiento a un caso mexicano (Morelia, Michoacán). *Revista Mexicana de Ciencias Geológicas*, 20, 3, 223-232.
- Ostrooumov, M., Platonov, A., Popov, V. 2008. Amazonstone: mineralogy, crystal chemistry, typomorphism. Edition "Polytechnics", St. Petersburg, Russia, ISBN 978-5-7325-0675-4.
- Ostrooumov, M., Taran, Yu., Reyes Gasga, J. 2009. Colimaite a new potassium vanadium sulfide mineral from the Colima volcano, State of Colima (Mexico). *Revista Mexicana de Ciencias Geológicas*, 25, 3, 600-609.
- Ostrooumov, M., Victoria, A. 2010. Mexican jadeite-bearing rock: a first mineralogical and gemmological approach. *The Journal of Gemmology*, 32, 1-4, 1-6.
- Ostrooumov, M., Bustamante, J. 2011. Yacimientos epitermales auroargentíferos. http://www.mineralog.net/Articulos_electronicos/yacimientos.pdf
- Ostrooumov, M., Hernández Bernal M. 2011. Mineralogical composition of the meteorite El Pozo (Mexico): A Raman, IR and XRD study. *Spectrochimica Acta, Part A*, 81.
- Palanza, V., Di Martino, D., Paleari, A. 2008. Micro-Raman spectroscopy applied to the study of inclusions within sapphir. *Journal Raman Spectroscopy*, 39, 1007-1011.
- Pinet, M., Smith, D., Lasnier, B. 1992. La microsonde Raman en Gemmologie. Numero hors-série de la Revue de Gemmologie. Association Française de Gemmologie.
- Smith, W. E., Dent, G. 2005. *Modern Raman Spectroscopy: A Practical Approach*. John Wiley & Sons Ltd., Chichester, UK.
- <http://www.univie.ac.at/Mineralogie/MINSPEC/raman.htm>
- <http://www.mineralog.net>
- <http://rruf.info>

**7. LISTADO DE ESPECTROS FT-RAMAN
DE MINERALES
POR TIPOS Y CLASES CRISTALOQUÍMICAS**

<p>1. ELEMENTOS NATIVOS (HOMOATOMOS) Y COMPUESTOS SIMILARES</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Azufre 2. Diamante 3. Grafito 4. Lonsdellita 5. Moissanita
<p>2. CALCOGENUROS (SULFUROS Y COMPUESTOS SIMILARES)</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Boulangerita 2. Bournonita 3. Enargita 4. Esfalerita 5. Jamesonita 6. Lellingita 7. Marcasita 8. Marmatita 9. Molibdenita 10. Oropimento 11. Proustita 12. Pirargirita 13. Pirita 14. Pirrotita 15. Rejalgar 16. Tetraedrita
<p>3. HALOGENUROS</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Boleita 2. Chiolita 3. Criolita 4. Fluorita 5. Tomsenolita
<p>4. COMPUESTOS OXIGENADOS</p> <p>4.1 ÓXIDOS E HIDRÓXIDOS</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Alexandrita 2. Anthoinita 3. Amatista 4. Anatasa 5. Badeleita 6. Bahianita 7. Brookita 8. Brucita 9. Casiterita 10. Crisoberilo 11. Crisoprasa 12. Citrina 13. Coesita 14. Corindón 15. Cristobalita 16. Cromita 17. Cuprita

18. Diasporo
19. Espinela
20. Gibbsita
21. Goethita
22. Hematita
23. Ilmenita
24. Lueshita
25. Magnetita
26. Mn-Tantalita
27. Moldavita
28. Obsidiana
29. Ópalo volcánico
30. Ópalo sedimentario
31. Cuarzo transparente (Cristal de roca)
 32. Rubí
 33. Rutilo
 34. Zafiro
35. Senarmontita
36. Stischovita
37. Tectita
38. Tridimita Po
39. Tridimita MC
40. Tridimita MX
41. Zincita

4.2. SALES OXIGENADAS

4.2.1. SILICATOS

4.2.1.1. NESOSILICATOS

1. Almandina
2. Andalusita
3. Andradita
4. Chorlomita
5. Danburita
6. Disteno
7. Espesartita
8. Euclasa
9. Fenacita
10. Grosulario
11. Kornerupina
12. Malayaita
13. Merwinita
14. Milarita
15. Olivino
16. Uvarovita
17. Tenacita
18. Peridoto
19. Piropo
20. Silimanita
21. Titanita (Esfena)
 22. Topacio
 23. Tsavorita
 24. Tugtupita
 25. Zircon

4.2.1.2. SOROSILICATOS

1. Epidota
2. Hemimorfita
3. Tanzanita
4. Tulita
5. Vesuvianita
6. Zoisita

4.2.1.3. CYCLOSILICATOS

1. Achroita
2. Aguamarina
3. Axinita
4. Berilo rojo
5. Berilo
6. Catapleita
7. Chorlo
8. Cordierita
9. Dioptasa
10. Dravita
11. Esmeralda
12. Eudialita
13. Goshenita
14. Heliodoro
15. Indigolita
16. Morganita
17. Olenita
18. Rubelita
19. Sogdianita
20. Sugilita
21. Tugtupita
22. Verdelita
23. Vorobievita

4.2.1.4. INOSILICATOS

1. Actinolita
2. Egirina
3. Arfvedsonita
4. Astrofilita
5. Augita
6. Bronzita
7. Bustamita
8. Charoita
9. Chkalovita
10. Diopsido
11. Cr-diopsido
12. Enstatita
13. Espodumena
14. Glaucofana
15. Hedenbergita
16. Hidenita
17. Hornblende
18. Jadeita
19. Kunzita
20. Lawrovita

21. Nefrita
22. Omfácita
23. Pargasita
24. Pectolita
25. Riebeckita
26. Rodonita
27. Tremolita
28. Violana
29. Wolastonita

4.2.1.5. FILOSILICATOS

1. Antigorita
2. Antofilita
3. Apofilita
4. Biotita
5. Chlorita
6. Crisocola
7. Crisotilo
8. Flogopita
9. Fuchcita
10. Lepidolita
11. Lizardita
12. Moscovita
13. Petalita
14. Prenita
15. Sepiolita
16. Serpentina
17. Talco
18. Zinwaldita

IV.2.1.6. TECTOSILICATOS

1. Adularia
2. Albita
3. Amazonita
4. Analcima
5. Andesina
6. Anortita
7. Bytownita
8. Cancrinita
9. Escapolita
10. Fe-Ortosa
11. Hackmanita
12. Hauynita
13. Labradorita
14. Lazurita
15. Leucita
16. Mesolita
17. Microclima
18. Mordenita
19. Natrolita
20. Nefelina
21. Oligoclasa
22. Ortosa
23. Polucita
24. Sanidina
25. Sodalita
26. Tompsonita

4.2.2. CARBONATOS

1. Ankerita
2. Aragonita
3. Azurita

4. Bastnaesita
5. Calcita
6. Cerusita
7. Dolomita
8. Esmitsonita
9. Estroncianita
10. Fosgenita
11. Magnesita
12. Malachita
13. Rodocrosita
14. Siderita
15. Thaumassita
16. Trona
17. Witerita

4.2.3. SULFATOS

1. Alunita
2. Anglesita
3. Anhidrita
4. Barita
5. Celestita
6. Charlesita
7. Epsomita
8. Ettringita
9. Glauberita
10. Halotrichita
11. Tenardita
12. Yeso

4.2.4. FOSFATOS, VANADATOS Y ARSENIATOS

1. Adamita
2. Ambligonita
3. Apatito
4. Augelita
5. Autunita
6. Berilonita
7. Brazilianita
8. Ceruleita
9. Descloizita
10. Diadochita
11. Eritrina
12. Escoradita
13. Estrengita
14. Estreuita
15. Herderita
16. Hurlbutita
17. Lazulita
18. Mimetita
19. Monazita
20. Montebrasita
21. Piromorfita
22. Pseudomalachita
23. Roselita
24. Torbernita
25. Triplita
26. Turquesa
27. Vanadinita
28. Variscita
29. Wavelita
30. Vivianita
31. Xenotimo

4.2.5. BORATOS

1. Borax
2. Colemanita
3. Hambergita
4. Jeremejevita

5. Meyerhofferita
6. Rodizita
7. Sinhalita
8. Ulexita

4.2.6. MOLYBDATOS

1. Scheelita
2. Wulfenita

4.2.7. CROMATOS

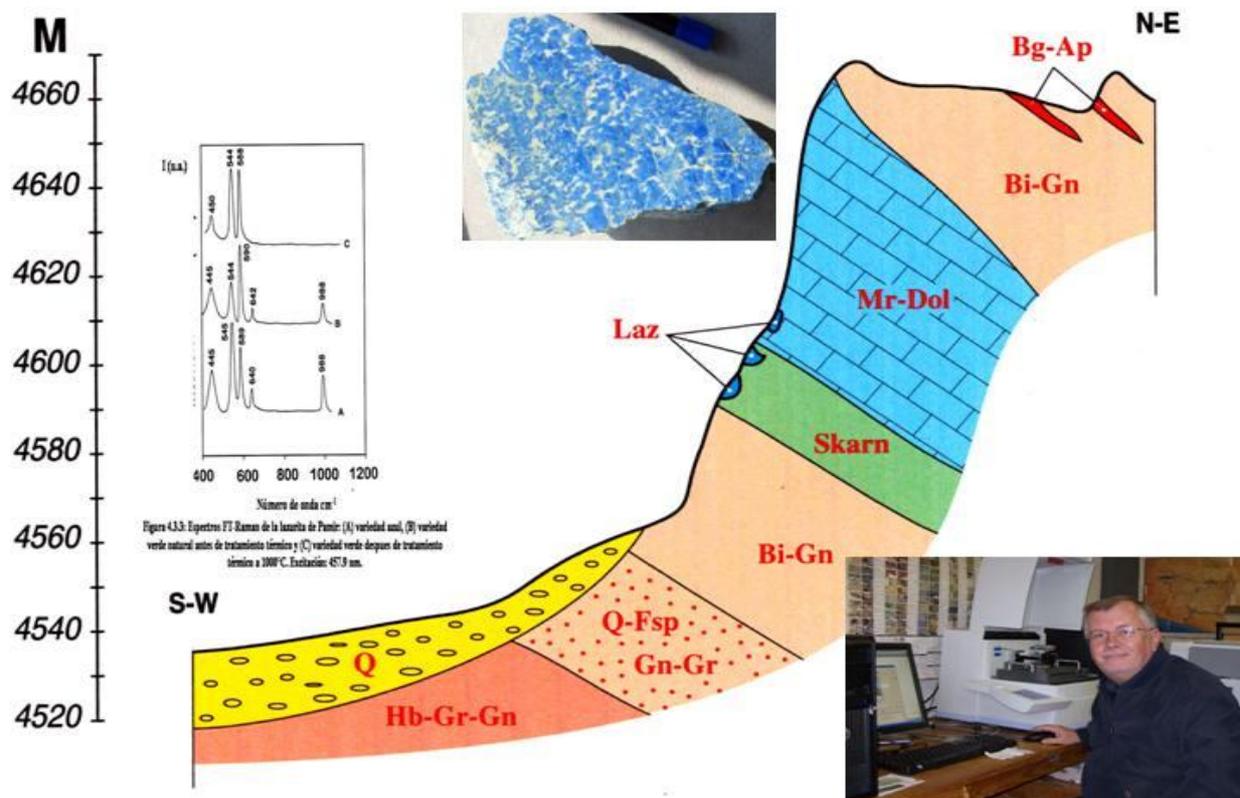
1. Crocoita

5. COMPUESTOS SINTÉTICOS

1. Alexandrita
2. Amatista
3. Berilo azul
4. Berilo rojo
5. Crisoberilo
6. Corindón Verneil
7. Corindón Chatham
8. Esmeralda Hidrotermal
9. Esmeralda Lechleitner
10. Esmeralda Chatham
11. Esmeralda fundante
12. Esmeralda Gilson
13. Espinela
14. Granate Gadolinio Galio (G.G.G.)
15. Granate Ytrio Aluminio (Y.A.G.)
16. Jadeita coat.
17. Jadeita B
18. Jadeita B roja
19. Lazurita Gilson
20. Niobato de litio
21. Opalo
22. Óxido de zirconio (Fianita)
23. Cuarzo hidrotermal
24. Rubí Verneuil.
25. Rubi Chatham
26. Rubi Ramaura
27. Zafiro
28. Silice
29. Slokum
30. Turquesa
31. Vidrio de Be
32. Vidrio de Nd
33. Vidrios sintéticos

6. COMPUESTOS ORGÁNICOS

1. Ámbar
2. Azabache
3. Coral
4. Marfil
5. Perla



Cada vez se conocen mejor las posibilidades que presenta Espectroscopía Raman - este método multifacético - para los estudios en la mineralogía avanzada, así como también en geoquímica y petrología. En bibliografía, existen muchos ejemplos concretos de la aplicación de la ER en el estudio y la caracterización de diferentes materiales y objetos que están investigando en diversas Ciencias de la Tierra. Dichos ejemplos incluyen:

- identificación de minerales y sus variedades,
- análisis de fases minerales (por ejemplo, identificación de los compuestos en soluciones sólidas),
- caracterización espectroscópica de nuevas especies minerales,
- investigaciones cristal químicas: fenómeno de orden-desorden estructural e isomorfismo;
- estudio de los microcristales hasta 100 Å;
- origen del color de minerales;
- estudio de polimorfismo, politipos, transformaciones de fases;
- estudio de inclusiones (sólidas, líquidas y gaseosas),
- imágenes y mapeo Raman (distribución espacial) de las muestras heterogéneas,
- caracterización de defectos y estructura interna de minerales,
- estudio de minerales en las condiciones de altas y ultra-altas temperaturas y presiones: geobarometría (p. e., en rocas metamórficas de diferente origen),
- cálculo de las constantes termodinámicas de los minerales,
- estudios de contaminación de aguas y suelos (detección de complejos metálicos, ácidos, hidrocarburos).

