

**UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID**  
**FACULTAD DE CIENCIAS GEOLÓGICAS**



TESIS DOCTORAL

**Ensayo de ordenación energética de algunas especies  
minerales**

MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR  
PRESENTADA POR

**Fausto A. Zamorra Pérez**

DIRECTOR:

**Enrique Mingarro**

Madrid, 2015

548

BIBLIOTECA UCM



5304759031

R.T. 669

UNIVERSIDAD DE MADRID  
FACULTAD DE CIENCIAS



ENSAYO DE ORDENACION ENERGETICA DE  
ALGUNAS ESPECIES MINERALES

Por

Fausto A. Zamorra Pérez

X- 53-149151-9



FACULTAD CC. GEOLOGICAS  
BIBLIOTECA

MEMORIA DE TESIS PARA ASPIRAR AL GRADO DE DOCTOR  
EN GEOLOGIA ECONOMICA

Madrid 1974

A MIS PADRES

El identificar el concepto de "mineral", que nos proporciona la Geología, con el de "fase", definido por la Termodinámica, nos permite considerar cada mineral como una fase de cualquiera de los sistemas termodinámicos que forman la Corteza Terrestre. Debido a esto, podemos aplicar las leyes de la Termodinámica al análisis de los parámetros energéticos, que definen la estabilidad de los minerales en el espacio geológico.

Cuando los sistemas termodinámicos están en equilibrio con el medio externo se caracterizan por ser uniformes y tener homogéneamente distribuídas cada una de las fases que los constituye. O bien sí, consideramos a estos sistemas termodinámicos formados por una sola fase, ésta debe caracterizarse por estar en equilibrio con su entorno, y tener sus componentes homogéneamente distribuídos, pues de esta manera la energía interna impartida en esta distribución alcanza el valor mínimo exigido por el segundo principio de la Termodinámica..

Entendemos que cada tipo estructural de mineral corresponde a un estado de distribución de la energía de los enlaces químicos, y es característico del estado geométrico condicionado por los radios iónicos de los componentes. En consecuencia todas las propiedades paragenéticas, fisicoquímicas y cristalofísicas deben depender de las dos funciones de estado primordiales del estado sólido; la energía reticular, o energía interna en las proximidades del cero de temperaturas absolutas, y el volumen reticular.

Quizás el mayor problema ha sido arbitrar un método de estimar la energía interna de los minerales ya que en el momento actual, en muchos casos, esta estimación no puede realizarse mediante determinaciones experimentales. El

cálculo del volumen reticular, puede realizarse fácilmente a partir de los datos obtenidos mediante la difracción por rayos X.

Determinadas estas dos funciones de estado, es posible conocer las condiciones de estabilidad de cada especie mineral y su ubicación en el espacio geológico. Al mismo tiempo estas dos funciones de estado permiten definir una nueva función de estado: la densidad de energía, que puede llegar a establecer las condiciones de equilibrio entre las distintas especies minerales.

Una vez conocidos estos tres parámetros, las distintas especies minerales se pueden representar en un espacio presión-volumen, en el cual se puede realizar una ordenación del conjunto mineralógico en función de las características energéticas.

Al analizar esta ordenación se observa, que las especies de las distintas clases minerales se asocian estadísticamente, en rectas, cuya ecuación general puede expresarse como:

$$D_E = - \mu \frac{1}{V} + P$$

donde  $\mu$  representa el potencial químico de la asociación. Estas rectas definen las condiciones de equilibrio mineralógico, de modo que las especies minerales asociadas están en equilibrio por tener el mismo potencial químico. No obstante esta condición sólo puede cumplirse para determinadas proporciones molares, por lo cual las rocas en equilibrio siempre tienen la misma composición mineralógica.

A partir de las ecuaciones de equilibrio termodinámico, obtenidas para las distintas asociaciones, parece facti

tible el estimar los principios que rigen la composición mineral de las rocas, y establecer el tipo de transformación geológica condicionante a dicha composición mineralógica.

A fin de obtener el título de Doctor en Geología Económica he realizado el presente trabajo bajo la dirección del Dr. D. Enrique Mingarro. Sus consejos y constante dedicación han hecho posible su realización.

Mi agradecimiento:

Al Excmo. Sr. D. J.M. Oterno de Navascués. Presidente de la Junta de Energía Nuclear y al Ilmo. Sr. D. J.M. Fuster. Catedrático de Petrología de la Universidad Complutense de Madrid. Por las facilidades dadas para la utilización de los ordenadores UNIVAC 1106 y 1108 de que disponen respectivamente la Junta de Energía Nuclear y el Centro de Proceso de Datos del Ministerio de Educación y Ciencia.

A D. J. Armada, D. J.R. Pascual y D. J.M. Tena por su colaboración en la elaboración de los programas utilizados en este trabajo.

A D<sup>a</sup> R. Solá y D. F. Recreo por sus valiosas sugerencias.

A D<sup>a</sup> M.V. Arranza y D<sup>a</sup> L. Martín por el mecanografiado de manuscritos y originales.



INDICE

	<u>Pág.</u>
<u>CAPITULO I</u> : <u>INTRODUCCION</u> .....	1
I.1. CONCEPTO DE MINERAL .....	1
I.2. CONCEPTO DE EQUILIBRIO MINERALOGICO .....	4
<u>CAPITULO II</u> : <u>CONCEPTO DE LA ENERGIA</u> .....	11
<u>CAPITULO III</u> : <u>CALCULO DE LA ENERGIA</u> .....	12
III.1. ESTIMACION DE LA ENERGIA MEDIANTE LOS CALORES DE FORMACION .....	12
III.1.1. Problemas en la aplicación de los ciclos energéticos a los minerales .....	15
III.2. ESTIMACION DE LA ENERGIA A PARTIR DE LA ENERGIA DE ENLACE .....	16
III.2.1. Constante reticular .....	19
III.2.1.a. Constante de Madelung para estructuras tipo ClNa .....	20
III.2.1.b. Estimación de la constante de Madelung ...	23
III.2.1.c. Constantes de Madelung para estructuras del tipo AB con redes parciales conmuta tivas según Hoppe .....	24
III.2.1.d. Correlación entre constantes de Madelung ya conocidas .....	26



---

III.2.2.	Factor de repulsión .....	27
III.2.3.	Distancia entre los iones .....	28
III.2.3.a.	Grado de covalencia .....	28
III.2.3.b.	Valores efectivos de los radios .....	32
III.2.4.	Ecuación de Kapustinsky .....	37
III.2.5.	Coefficientes energéticos .....	39
III.2.5.a.	Coefficientes energéticos de los iones complejos .....	43
III.3.	CONSIDERACIONES SOBRE EL CALCULO DE LA ENERGIA .....	46
<u>CAPITULO IV</u>	: <u>CALCULO DEL VOLUMEN RETICULAR</u> .....	49
<u>CAPITULO V</u>	: <u>DENSIDAD DE ENERGIA</u> .....	51
<u>CAPITULO VI</u>	: <u>ORDENACION DE LOS MINERALES</u> .....	53
<u>CAPITULO VII</u>	: <u>UNIDADES EQUIVALENTES</u> .....	59
VII.1.	EQUIVALENTES EMPLEADOS .....	63
VII.1.1.	Molécula ión equivalente .....	63
VII.1.2.	Molécula anión equivalente .....	64
VII.1.3.	Molécula equivalente catiónica .....	64



	<u>Pág.</u>
VII.1.4. Molécula equivalente radical .....	65
VII.2. MODELO DE CALCULO DE LAS UNIDADES EQUI- VALENTES .....	66
<u>CAPITULO VIII: METODO ESTADISTICO</u> .....	73
VIII.1. NIVEL DE SIGNIFICACION DEL COEFICIENTE DE CORRELACION .....	75
VIII.2. ECUACION DE LA REGRESION .....	76
VIII.3. CONTRASTE DE LINEABILIDAD DE LA REGRE- SION .....	77
<u>CAPITULO IX : VERIFICACION DEL MODELO DE ORDENA- CION ENERGETICA DE LOS MINERALES</u> .....	79
IX.1. DATOS EMPLEADOS .....	80
IX.2. MODELOS DE CALCULO DE LAS RECTAS DE EQUI- LIBRIO TERMODINAMICO .....	81
IX.2.1. Estructuras tipo $A_a^+ \left[ \begin{matrix} Z^+ & O^- \\ Z & O \end{matrix} \right]_x^-$ .....	82
IX.2.2. Estructuras tipo $A_a^+ \left[ \begin{matrix} (Z^+ & O^-) \\ Z & O \end{matrix} \right]_x^-   (BO_m)_c^-$ ...	92
IX.2.3. Estructuras tipo $(A_a^+ X_x^-)$ .....	104
IX.2.4. Estructuras tipo $A_a^+ \left[ (BO_m)_c \right]$ .....	106
<u>CAPITULO X : RESULTADOS OBTENIDOS</u> .....	111
X.1. CLASE DE SILICATOS .....	112

	<u>Pág.</u>
X.1.1.	Grupo del olivino ..... 115
X.1.2.	Grupo de la epidota ..... 116
X.1.3.	Grupo de los granates ..... 118
X.1.4.	Grupo de los piroxenos ..... 120
X.1.5.	Grupo de los anfíboles ..... 124
X.1.6.	Grupo de los piroxenoides ..... 128
X.1.7.	Grupo de las micas ..... 130
X.1.8.	Grupo de los feldespatos ..... 133
X.1.9.	Cálculo del potencial químico equiva- lente de las asociaciones minerales. Clase silicatos ..... 137
X.2.	CLASE OXIDOS ..... 206
X.2.1.	Grupo de los óxidos simples ..... 206
X.2.2.	Grupo de los oxidos múltiples ..... 209
X.2.3.	Grupo de los óxidos conteniendo hidro- xilos ..... 211
X.2.4.	Grupo de los hidróxidos ..... 212
X.2.5.	Cálculo del potencial químico equiva- lente de las asociaciones minerales. Clase óxidos e hidróxidos ..... 215
X.3.	CLASE FOSFATOS, ARSENIATOS, Y VANADATOS .. 240
X.3.2.	Cálculo del potencial químico equivalen- te de las asociaciones minerales. Clase fosfatos ..... 244
X.4.	CLASE SULFATOS ..... 265

X.4.2.	Cálculo del potencial químico equivalente de las asociaciones minerales. Clase sulfatos .....	269
X.5.	CLASE CARBONATOS .....	286
X.5.2.	Cálculo del potencial químico equivalente de las asociaciones minerales. Clase carbonatos .....	288
X.6.	CLASE HALUROS .....	297
X.6.2.	Cálculo del potencial químico equivalente de las asociaciones minerales. Clase haluros .....	300

<u>CAPITULO XI</u>	: <u>RELACION ENTRE LA PRESION DE CRISTALIZACION Y LA PRESION DE DISOCIACION</u> .....	310
--------------------	--	-----

<u>CAPITULO XII</u>	: <u>ECUACIONES DE EQUILIBRIO TERMODINAMICO DE LAS DISTINTAS ASOCIACIONES MINERALES</u> .....	315
---------------------	---	-----

XII.1.	CLASE SILICATOS .....	315
XII.2.	CLASE OXIDOS .....	325
XII.3.	CLASE FOSFATOS .....	330
XII.4.	CLASE SULFATOS .....	334
XII.5.	CLASE CARBONATOS .....	337
XII.6.	CLASE HALUROS .....	338

XII.7.	ESTIMACION DEL POTENCIAL QUIMICO SEGUN EL EQUIVALENTE RADICAL DE AL- GUNAS ESPECIES MINERALES QUE NO PER- TENECEN A LAS ASOCIACIONES ESTUDIA- DAS .....	341
<u>CAPITULO XIII: DISCUSION DE LOS RESULTADOS .....</u>		348
XIII.1.	PROCESOS Y TRANSFORMACIONES GEOLOGICAS ...	348
XIII.2.	TRANSFORMACIONES MINERALOGICAS .....	351
XIII.2.1.	Significado de las asociaciones (rectas $\mu = \text{constante}$ ) .....	353
XIII.2.2.	Equilibrio en las asociaciones minera- les .....	355
XIII.2.3.	Características cristaloquímicas de las asociaciones minerales .....	361
XIII.3.	ESTABILIDAD DE LOS MINERALES .....	366
XIII.3.1.	Estabilidad en función de la temperatu- ra .....	366
XIII.3.2.	Estabilidad en función del potencial quí- mico .....	368
XIII.3.3.	Estabilidad en función de la presión y el volumen .....	370
XIII.4.	EVOLUCION DE LOS SISTEMAS GEOLOGICOS .....	376
XIII.4.1.	Sistemas abiertos .....	376
XIII.4.2.	Procesos metamórficos y metasomáticos .....	378



XIII.4.3.	Procesos magmáticos .....	380
XIII.5.	EQUILIBRIO EN LAS TRANSFORMACIONES GEOLOGICAS .....	381
XIII.5.1.	Equilibrio isocórico .....	381
XIII.5.2.	Equilibrio isobárico .....	384
XIII.5.3.	Equilibrio isoquímico .....	385
XIII.6.	APLICACION DE LOS PARAMETROS TERMODINAMICOS AL ANALISIS DE LOS PROCESOS GEOLOGICOS .....	389
	CONCLUSIONES .....	399
	BIBLIOGRAFIA .....	403
	APENDICE I .....	407
	APENDICE II .....	459

## I. INTRODUCCION

### I.1. CONCEPTO DE MINERAL.

Mucho se ha discutido y se discutirá el concepto de mineral, particularmente acerca de las propiedades inherentes a las especies y variedades mineralógicas.

Si analizamos los caracteres que en las distintas épocas científicas han servido para definir a los minerales, encontramos que la idea dominante ha sido considerar como mineral a los productos homogéneos de los procesos naturales que acontecen en la Corteza de la Tierra.

Así cualquier porción homogénea, virtualmente separable del mundo inorgánico natural, debe considerarse como un mineral; es decir, en la larga evolución de los conceptos mineralógicos se ha llegado, mediante la observación de fenómenos y propiedades, a identificar la idea de "mineral" de la Geología a la de "fase" de la Termodinámica. Por tanto, un mineral será una fase de cualquiera de los sistemas termodinámicos que definen, o forman la corteza terrestre.

Los sistemas termodinámicos se caracterizan por ser homogéneos y uniformes, esto es, por estar en equilibrio con el medio externo, condiciones que deben cumplir cada una de las fases que constituyen el sistema. O bien sí, consideramos a estos sistemas termodinámicos formados por una sola fase, ésta debe caracterizarse por su homogeneidad y estabilidad.

De acuerdo con este concepto termodinámico, deben considerarse como minerales todos los sistemas sólidos, líquidos y gaseosos que constituyen la corteza terrestre. Pero como ya hemos indicado, los sistemas termodinámicos se caracterizan por estar en equilibrio con el medio externo; para alcanzar este equilibrio es necesario que su energía interna alcance un valor mínimo y constante. Los medios fluidos, gases, líquidos, coloides, etc.,

alcanzarán una estabilidad que depende en cada momento de la evolución geológica, por tratarse de sistemas abiertos, mientras que los minerales sólidos o cristalinos logran esta estabilidad independientemente de su entorno, es decir, son sistemas cerrados, por lo tanto debemos considerar que alcanzarán su máxima estabilidad y permanecerán metaestables en los estados sucesivos de la evolución. Así es fácil encontrar minerales formados en las primeras etapas de la evolución geológica.

Esto implica que han alcanzado una entropía de configuración constante, lo cual equivale a una energía interna mínima (máxima en valor absoluto). Es decir, los minerales sólidos naturales deben ser medios ordenados según un retículo o una estructura cristaloquímica acorde con su composición, que debe ser igualmente constante.

Clásicamente los mineralogistas han estudiado únicamente los minerales cristalinos, debido fundamentalmente a que las técnicas de estudio específicas de estos medios cristalinos, no son utilizables para los otros minerales.

En la realización de este trabajo hemos tenido que prescindir de ellos, ya que carecíamos de los datos necesarios para su estudio.

Una vez definido el concepto de mineral, de acuerdo con Grigor'yev (1960), es necesario establecer otros dos conceptos: especie y variedad mineral.

Especie mineral.- Es el conjunto de todos los minerales constituidos por la misma molécula cristaloquímica. El equilibrio entre las distintas especies minerales ha constituido el objeto de este Trabajo.

En realidad, aplicando estrictamente el concepto dado, no existirán "especies minerales", pues aunque la especie mineral tiene una ordenación cristalográfica, también tiene una serie de imperfecciones que las confieren una mayor estabilidad y son características de cada yacimiento.

Pero estas imperfecciones solo pueden considerarse como constituyentes de una especie mineral dentro de ciertos límites, cuando estos límites se sobrepasan tendremos que definir una "variedad mineral", que ya no forma parte de la especie.

Como ya hemos visto, la Termodinámica establece que todo cuerpo considerado como un sistema, es decir, separado del resto del universo por una superficie más o menos real, se caracteriza por una función de estado denominada energía interna, la cual, en último término, es una medida cuantitativa del conjunto de formas de movimiento de la materia integrante de dicho sistema. Los minerales cristalinos representan, idealmente, el estado opuesto al gas perfecto, donde toda la energía es cinética. En el sólido (= cristal), toda la energía es potencial, si no tenemos en cuenta la energía vibracional de las partículas, ya que, al ser un medio ordenado, el retículo es consecuencia de la energía potencial entre los iones que forman el mineral, como resultado del equilibrio entre las fuerzas de atracción y repulsión que se engendran al aproximarse los iones.

Por tanto, los minerales se caracterizan por tener una energía interna constante, que debe tomar un valor mínimo para estar en equilibrio independiente con el medio externo, y por un volumen igualmente constante definido por un retículo crystalino único para cada mineral.

Es decir, podemos caracterizar a los minerales por el valor de su energía reticular, su volumen y su composición  $\Sigma n$ , siendo  $n$  los componentes; esto es porciones de los minerales capaces de definir su composición, la cual se consigue mediante la simple adición de estas porciones (iones, átomos o moléculas).

En la realización de este Trabajo, sólo hemos considerado los minerales formados a partir de los enlaces entre iones y no los obtenidos mediante la unión de átomos o moléculas.

Partiendo del concepto de aditividad de los componentes de una fase, podemos considerar en los minerales una porción aniónica y otra catiónica. La parte aniónica puede emplearse pa



ra clasificar las distintas especies minerales, por definir tipos estructurales, organizados de acuerdo con la forma de los radicales iónicos, así tendremos silicatos, óxidos, sulfatos, fosfatos, etc., según que la parte aniónica esté constituida por carbonato  $[\text{CO}_3]^{-2}$ , silicato  $[\text{SiO}_4]^{-4}$ , etc.

## I.2. CONCEPTO DE EQUILIBRIO MINERALOGICO.

La cristalografía supone sólidos cuasi-perfectos en las proximidades del cero absoluto de temperaturas, y a este punto se refieren los cálculos de la energía reticular. Si bien, para comparar sus resultados con los datos experimentales de la Termodinámica se suelen referir las energías reticulares a 25°C, dada la poca influencia del aumento de la temperatura en el valor absoluto de la energía interna. En estas condiciones podemos suponer que:  $T \approx 0^\circ\text{K}$  y  $S \approx 0$ , lo que equivale a establecer que el equilibrio mineralógico se debe efectuar sin intercambio entrópico. Aunque en los sistemas geológicos naturales se producen intercambios térmicos, en este trabajo consideramos a los minerales como entes aislados del medio externo.

Por todo lo cual, a partir de los valores de la energía reticular, el equilibrio mineralógico únicamente se puede alcanzar mediante la ejecución de un trabajo mecánico del tipo compresión-dilatación ( $W = p \cdot V$ ) (presión y volumen reticular del medio cristalino).

Sin embargo, existen una serie de minerales formados por los mismos componentes, lo que implica que en ellos puede tener lugar una interacción química, o realizarse un trabajo químico, ( $q = \mu_1 \cdot n_1$ ), definido por los parámetros: (potencial químico y fracción molar).

El primer principio de la Termodinámica establece que la energía impartida en un sistema puede variar cuando tal sistema ejecuta un trabajo (térmico, mecánico, químico, etc.), de forma que en el caso de los minerales tendremos:

$$dV = \delta W + \delta q \quad (1)$$

donde

$$dW = (V dP + P dV) \quad \text{y} \quad dq = (n_i d\mu_i + \mu_i dn_i)$$

De acuerdo con los trabajos de Korzhinskii, D.S. (1957), de estas cuatro manifestaciones de la modificación de la energía sólo serán posibles las compatibles con los grados internos de libertad de los minerales. En el caso del trabajo mecánico, puede ejecutarse por vía isocórica o por vía isobárica, pero ambas formas contradicen la idea de especie mineral tal como la hemos definido anteriormente; esto es, con un volumen reticular específico y una energía reticular igualmente específica de cada especie, y como la presión expresa la modificación de la energía de un sistema al variar su volumen,

$$P = \frac{\partial U}{\partial V} \quad (2)$$

la presión del cristal debe ser igualmente específica para cada especie mineral.

Análogamente, tampoco puede realizarse un trabajo químico, ya que éste sólo podría realizarse mediante un intercambio de componentes móviles y el cristal tiene una composición definida, y un potencial químico constante que expresa la modificación de la energía al modificarse la composición,

$$\mu = \frac{\partial U}{\partial n}$$

El potencial químico del cristal debe ser también específico para cada mineral.

Esto nos conduce a establecer que los minerales no pueden interaccionar entre sí, debido a las constricciones impuestas por su naturaleza, u ordenación reticular.

Sin embargo, la observación geológica demuestra una con-

continua interacción mineralógica que debe ser compatible con la idea de especie mineral, ya que se observan paragénesis minerales en equilibrio frecuentes en distintos ambientes geológicos.

Este hecho obliga a aceptar que las propiedades reticulares admiten una cierta elasticidad para adaptarse al medio externo, es decir para interaccionar con otros minerales, pero no con todos, dado que los límites de variabilidad deben ser estrechos.

Si elegimos dos minerales muy próximos en sus parámetros reticulares, como pueden ser dos miembros del grupo de los feldspatos, podemos escribir la ecuación de equilibrio de Gibbs (1948) entre estos dos minerales considerados como dos fases de un sistema.

Así tenemos que entre estos minerales se cumplirá la condición general de:

$$P_{\alpha} = P_{\beta} \quad ; \quad \mu_{i\alpha} = \mu_{i\beta} \quad (3)$$

si suponemos para simplificar las ecuaciones, que estos minerales están formados por un solo componente

$$d(\Delta\Phi) = \delta(\Phi_{\alpha} - \Phi_{\beta}) \quad (4)$$

por tanto,

$$d(\Delta\Phi) = (V_{\alpha} - V_{\beta}) dP - (P_{\alpha} - P_{\beta}) dV + (\mu_{\alpha} - \mu_{\beta}) dn - (n_{\alpha} - n_{\beta}) d\mu \quad (5)$$

como acabamos de establecer, en el equilibrio deberá cumplirse que

$$(P_{\alpha} - P_{\beta}) dV = 0 \quad y \quad (\mu_{\alpha} - \mu_{\beta}) dn = 0 \quad (6)$$



y si hacemos

$$(V_{\alpha} - V_{\beta}) = \Delta V \quad \text{y} \quad (n_{\alpha} - n_{\beta}) = \Delta n$$

la ecuación (5) tendrá la forma

$$d(\Delta\phi) = \Delta V dP - \Delta n d\mu \quad (7)$$

que expresa la variación en el potencial termodinámico de equilibrio entre ambas fases minerales o capacidad del sistema ( $\alpha - \beta$ ) de modificar su energía interna.

En la ecuación del potencial termodinámico de equilibrio entre las fases minerales  $\alpha$  y  $\beta$ , se han considerado los signos de los diferentes trabajos de acuerdo al criterio general de considerar al trabajo ejecutado por el sistema como negativo, y al trabajo ejercido por el medio externo contra el sistema como positivo, ello es debido a que las fases minerales no pueden ejercer un trabajo que implique una modificación de los parámetros intensivos  $P$  o  $\mu$ . De forma que estos trabajos deben descontarse de la energía interna de mineral, pues se ejecutan sin destruir la condición de equilibrio, lo cual implica que no intervienen en la definición del estado mineralógico para la cual se ha definido esta energía.

De acuerdo con la ecuación (7), dos minerales estarán en equilibrio cuando se sitúen sobre la superficie definida por este potencial termodinámico, es decir cuando se cumpla que

$$d(\Delta\phi) = 0$$

Si suponemos que los minerales  $\alpha$  y  $\beta$  tienen la misma composición, podemos aceptar que toda la energía reticular (debida a la energía de enlace entre los componentes), puede intercambiarse de forma que  $-Er = \phi$ , con lo que la ecuación (7) puede escribirse

$$d(\Delta(-Er)) = \Delta V dP - \Delta n d\mu \quad (8)$$

en las condiciones de equilibrio y para valores constantes de P y  $\mu$  obtenemos por integración

$$-\Delta E_r = \Delta V P - \Delta n \mu \quad (9)$$

Por tanto, ambas fases minerales deben cumplir esta condición para estar en equilibrio, por lo que:

$$-E_{r_\alpha} = V_\alpha P - n_\alpha \mu = -E_{r_\beta} = V_\beta P - n_\beta \mu \quad (10)$$

Es decir, las presiones y los potenciales químicos de ambos minerales deben ser iguales y su potencial termodinámico ( $-E_{r_{\alpha\beta}}$ ) mínimo, para lo cual únicamente pueden modificar su volumen reticular o su fracción molar en el sistema.

Si ahora determinamos para todos los minerales la ecuación (10), podemos encontrar algunos que se sitúen en la superficie de equilibrio o muy próximos a ella, lo que supondría que para cualquier incremento de volumen o de composición, mantendrán la condición de equilibrio, pues se modificarían igualmente las relaciones interparamétricas previstas por esta condición.

Si comparamos esta idea de equilibrio mineral con la naturaleza potencial de la energía reticular, vemos que, efectivamente, una estructura cristalina se alcanza cuando un sistema fluido ha ejecutado la máxima cantidad de trabajo posible, por lo que para salir de su estado cristalino de equilibrio o de máxima estabilidad, además de una cierta energía de activación vibracional, necesita extraer trabajo mecánico del medio externo, para aumentar su volumen reticular, lo cual está de acuerdo con la hipótesis establecida y el signo propuesto para los trabajos adquiridos por un sistema.

De modo análogo, los componentes de un mineral se encuentran en los pozos energéticos definidos por la distribución reticular de las energías del enlace químico, por lo que no pueden salir ni entrar en ellos; es decir, que los minerales no pueden

ejecutar ningún trabajo que implique la disociación de sus enlaces, pues ello implicaría aumentar su energía reticular en contra de los postulados de la Termodinámica. Sin embargo, pueden aceptar componentes en los submínimos de las barreras de potencial o en los espacios vacantes del retículo, cuando el potencial químico de cualquier componente del medio externo es mayor que el potencial químico en la estructura reticular.

Esto equivale a aceptar la idea de que el trabajo químico condicionado por el potencial químico del medio externo puede ser ejercido por un mineral, pues ello no afecta al equilibrio de los componentes característicos que definen el retículo cristalino.

De acuerdo con estas premisas, pensamos en ordenar los minerales con cierta semejanza estructural y de composición, en función de las magnitudes reticulares de la ecuación (10) para establecer las series morfótropas que pudieran estar en equilibrio para cualquier valor de las fracciones molares de sus componentes.

Si en la ecuación (10) dividimos por el volumen reticular obtendremos la expresión:

$$\frac{-E_r}{V} = -\mu \frac{1}{V} + p \quad (11)$$

donde el término  $-E_r/V$  representa la presión que mantiene el edificio cristalino, y que es característica de cada mineral, pues, en esquema, representa la relación entre las fuerzas de enlace y el volumen reticular.

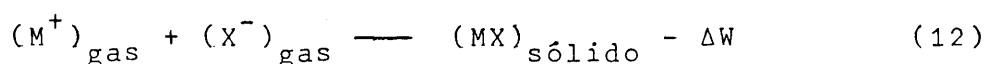
Al efectuar este cambio, aparece un término independiente de presión que, si observamos la ecuación, representa el valor de la presión de cristalización o la densidad de energía, cuando la inversa del volumen se hace igual a cero, es decir, cuando el volumen reticular tiende a infinito, por tanto podemos pensar que representa la presión del gas en equilibrio con el sólido o presión de disociación.

Pues según señala la teoría cinética, el estado cristalino es un estado de equilibrio dinámico, donde el número de partículas, iones, átomos, moléculas que caen a los mínimos de energía es igual al de los que salen de ellos por la acción vibracional del retículo.



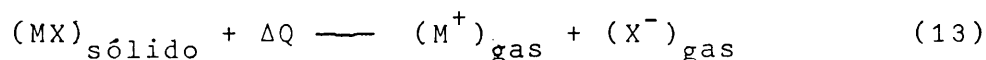
## II. CONCEPTO DE ENERGIA

La cristalografía especula con la energía reticular, o energía que mantiene el retículo de los cristales, por lo que debe considerarse igual a la energía potencial, resultado de la energía de enlace entre las partículas que lo forman. Cuantitativamente debe ser igual al trabajo mecánico que se libera cuando un gas se condensa hasta el estado cristalino. Por tanto puede expresarse mediante la ecuación



siendo la energía reticular  $E_r$  igual a  $-\Delta W$ .

Por otro lado, la Termodinámica determina la energía interna de un cristal por la cantidad de calor que debe absorber dicho cristal para disociarse hasta el estado de gas iónico, atómico o molecular. Es decir, especula con el aumento de la energía vibracional del retículo causado por el trabajo térmico, que aumenta progresivamente la energía cinética de las partículas y la entropía del cuerpo



En esta expresión, la energía interna  $U$  es igual a  $\Delta Q$ . Dado que el concepto de sólido (medio ordenado) coincide con el de cristal, el de energía interna de la Termodinámica debería coincidir con el de energía reticular de la Cristalografía, puesto que las expresiones (12) y (13) sólo se diferencian en el sentido en que se recorre el ciclo energético y como la energía es una función de estado, podemos decir que:  $\Delta Q = -\Delta W$ .

Lo que equivale a decir que la energía reticular y la energía interna coinciden en valor absoluto

$$|U| = |-E_r|$$

En estas magnitudes el signo indica únicamente el sentido en que se recorre el ciclo energético.



III. CALCULO DE LA ENERGIA.

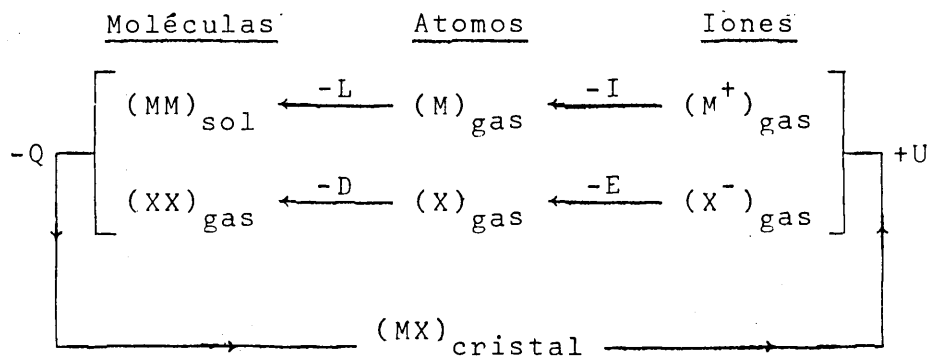
De acuerdo con este planteamiento, para estimar el valor de la energía de los minerales disponemos de dos caminos, mediante las leyes de la Termodinámica, o a partir de las leyes de la Mecánica.

III.1. ESTIMACION DE LA ENERGIA MEDIANTE LOS CALORES DE FORMACION.

En este caso, por vía experimental, sólo podemos medir el calor de formación de los cuerpos, es decir, el calor que se libera cuando los cuerpos en estado iónico, atómico o molecular, reaccionan para formar un cristal.

Si tenemos en cuenta el primer principio de la Termodinámica, según el cual la suma de los trabajos ejercidos por el sistema cuando recorre un ciclo cerrado es cero, para calcular la energía interna, podemos considerar los calores que se producen al transformarse un medio cristalino en gas iónico o atómico. Estas transformaciones pueden expresarse mediante el conocido ciclo de Born-Haber, (Born, M.; 1919), (Haber, F.; 1919).

Este ciclo para un compuesto iónico  $(MX)_s \rightarrow (M^+)_g + (X^-)_g$  toma la forma:



siendo:

$Q$  = calor de formación de  $(MX)_s$

$U$  = energía interna de  $(MX)_s$

$D$  = calor de disociación  $(XX)_g \longrightarrow (X)_g$

$L$  = calor de sublimación  $(MM)_s \longrightarrow (M)_g$

$I$  = potencial de ionización  $(M)_g \longrightarrow (M^+)_g$

$E$  = afinidad electrónica  $(X^-) \longrightarrow (X)_g$

Por lo tanto: como  $\oint U = 0$ , tendremos:

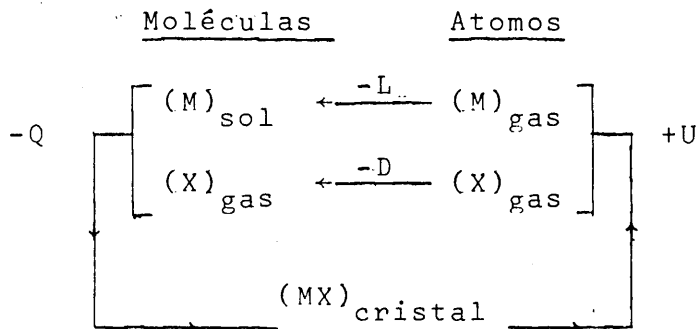
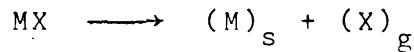
$$U + (-I) + E + (-L) + (-D) - Q = 0$$

(14)

$$U = I - E + L + D + Q = |-Er|$$

Todos los valores que intervienen en este ciclo son conocidos para los elementos químicos, excepto las afinidades electrónicas de ciertos aniones. Es decir, sólo tenemos que determinar experimentalmente el calor de formación ( $Q$ ) para conocer el valor de la energía interna.

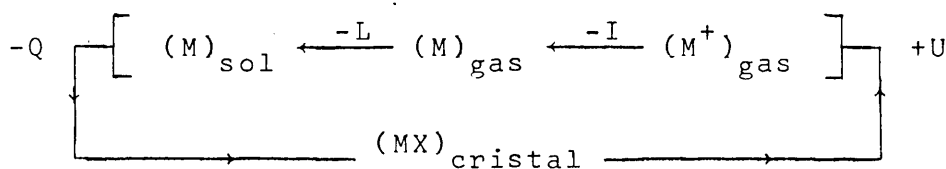
En el caso de cristales o minerales formados por enlaces covalentes el ciclo anterior se reduce a la forma siguiente: (puesto que no existen verdaderos iones independientes):



El valor de la energía interna sería igual a:

$$U = L + D + Q = |-Er| \quad (15)$$

Si el sólido está formado por enlaces metálicos podemos asimilarlo a un cristal. Habber, F. y Thonson (1919), suponen que el sólido está formado por cationes y electrones situados en el lugar de los aniones  $MM \text{ --- } M^+ + e^-$ . En este caso el ciclo energético



Por lo que la energía interna será igual a:

$$U = I + L = |-Er| \quad (16)$$

La proporción de enlace metálico llega a ser fundamental en algunos sulfuros, como indica su alta reflectividad. Como ya hemos indicado en la introducción, esta clase mineral no se estudia en el presente trabajo. Por tanto, las características de este tipo de enlace no han sido totalmente desarrolladas.

Cuando el sólido está constituido por un agregado molecular, que se une mediante enlaces de Van der Waal, según Born, F. (1922) la energía es inferior a la de todos los demás tipos de sólidos considerados hasta ahora. El ciclo energético se reduce a estimar el calor de sublimación  $L$ , pero para mayor precisión es necesario introducir un término en función de la temperatura característica de Debye

$$U = L + 9/8 R \theta = |-Er| \quad (17)$$

donde:



R = constante de los gases perfectos.

$\theta$  = temperatura característica de Debye.

### III.1.1. Problemas en la aplicación de los ciclos energéticos a los minerales.

El problema en la determinación termodinámica de la energía interna radica en dos puntos: las estructuras heterodésmicas y la diferente proporción de enlace iónico-covalente en los minerales con enlaces homodésmicos.

En el primer punto hay que tener en cuenta que frecuentemente existen fuerzas interestructurales distintas en redes con enlaces idénticos o diferentes. Por ejemplo, para el sulfato de bario, las fuerzas puramente polares en el tetraedro  $[\text{SO}_4]^{-2}$  son netamente más importantes que las del enlace catión-anión complejo  $\text{Ba}^{+2} - [\text{SO}_4]^{-2}$ . Análogamente para el  $\text{CO}_2$ , las importantes fuerzas covalentes existentes en el interior de las moléculas contrastan con la cohesión de la red que no es debida más que a las débiles fuerzas de Van der Waals.

Para el segundo punto, hay que tener en cuenta que mediante el ciclo de Born-Haber solo podemos determinar la energía interna para compuestos con enlace totalmente iónico o totalmente covalente. Pero, estudios detallados de las propiedades de los cristales han demostrado que hay una gradación en las propiedades de los cristales con enlace iónico y covalente. Estudios realizados sobre los calores de formación de los compuestos y de los potenciales de óxido reducción de los elementos, indican la existencia de tipos intermedios de enlaces en los cristales.

La transición del enlace iónico al covalente no se produce por una deformación parcial, ni por una arbitraria combinación de las diferentes estructuras, sino que tiene lugar por un gradual desplazamiento de un tipo de cualidad, enlace iónico,

por otra, enlace covalente. En la cadena de transición, cada separación representa diferencias no sólo cuantitativas, sino también cualitativas.

Es necesario, por tanto, establecer los límites para los cuales puede utilizarse el ciclo de Born-Haber en el cálculo de las energías de estructuras en las que aparecen más de un tipo de enlace. Este límite puede considerarse del 50%, ya que las distintas magnitudes utilizadas en el cálculo de la energía se modifican al variar la proporción de enlace, de forma que el resultado final obtenido pueda considerarse como válido.

Por tanto, mediante el ciclo de Born-Haber puede calcularse de forma aproximada el valor de la energía de las distintas estructuras cristalinas, pero para ello, es necesario conocer experimentalmente los valores de las magnitudes que intervienen, para cada tipo de estructura. Lo cual resulta prácticamente inviable, en nuestro caso.

### III.2. ESTIMACION DE LA ENERGIA A PARTIR DE LA ENERGIA DE ENLACE.

Para el cálculo de la energía reticular de un cristal es necesario recordar que el cristal es un medio ordenado. La energía de enlace que sostiene el edificio cristalino puede asimilarse a una energía potencial, suma de las energías que mantienen unidas las partículas del edificio. Esta energía potencial puede considerarse igual al trabajo mecánico que se libera cuando un gas iónico, atómico o molecular, se condensa hasta el estado cristalino. Por lo que se considera con signo negativo, en oposición a la energía interna de naturaleza cinética.

Si consideramos el caso de un gas iónico, dos iones que se aproximen hasta formar una estructura cristalina, estarán sometidos, como en todo estado de equilibrio, a la acción de fuerzas de igual magnitud, pero de sentido contrario, una de atrac-

ción debida al signo contrario de sus cargas, y otra de repulsión.

La expresión de la fuerza de enlace producida por estas fuerzas opuestas es según Born, M. (1919),

$$V = - \frac{Q}{r^q} + \frac{P}{r^p} \quad (18)$$

donde:

$\frac{Q}{r^q}$  : es la contribución de las fuerzas iónicas de atracción, y

$\frac{P}{r^p}$  : la correspondiente al término repulsivo debido a los núcleos atómicos.

Born y Lande consideraron que la atracción electrostática de los iones de distinto signo seguía las leyes de Coulomb, por lo que el término atractivo puede expresarse como  $\frac{Z_A \cdot Z_C \cdot e^2}{r}$ , siendo  $Z_A$  y  $Z_C$  el número de electrones de valencia del anión y del catión,  $e^2$  el producto de las cargas de ambos y  $r$  la distancia interiónica.

Hasta ahora hemos considerado únicamente el caso de la energía de enlace existente entre dos iones, pero si consideramos una estructura cristalina en la que alternan los iones positivos y los negativos, su interacción será alternativamente de atracción y de repulsión para las sucesivas esferas de coordinación, para calcular su energía debemos tener en cuenta que la acción entre los iones es, como todas las funciones físicas de un cristal considerado a escala atómica, una función periódica, y por tanto puede expresarse por medio de series de Fourier. La energía potencial expresada de esta forma depende no sólo de la distancia interiónica, sino también de la distribución geométrica de los iones constitutivos del cristal. El empleo de las series de Fourier, nos permite determinar un factor que depende exclusivamente del tipo de estructura, y que nos permite simplificar los cálculos de la energía reticular para sustancias de igual



estructura, al aparecer en todos ellos como factor común. Esta constante se conoce como constante de Madelung, A. La expresión que permite calcular la energía reticular de una estructura cristalina es:

$$E_r = - \frac{A \cdot Z_A \cdot Z_C \cdot e^2}{r} + \frac{P}{r^P} \quad (19)$$

Cuando los iones alcanzan la posición de equilibrio, la energía reticular debe tener un valor mínimo, según las leyes de la Termodinámica. Por tanto, su primera derivada tomará el valor cero, de forma que:

$$\left(\frac{d E_r}{dr}\right)_{r=r_0} = 0 = \frac{A \cdot Z_A \cdot Z_C \cdot e^2}{r^2} - \frac{P}{r^{P+1}} \quad (20)$$

De donde:

$$P = \frac{A \cdot Z_A \cdot Z_C \cdot e^2 \cdot r^{P+1}}{r^2 \cdot P} = \frac{A \cdot Z_A \cdot Z_C \cdot e^2 \cdot r^{P-1}}{P}$$

si sustituimos el valor de P en (19), tendremos:

$$E_r = - \frac{A \cdot e^2 \cdot Z_A \cdot Z_C}{r} + \frac{A \cdot Z_A \cdot Z_C \cdot e^2 \cdot r^{P-1}}{P} \quad (21)$$

y sacando factor común,

$$-E_r = + \frac{A \cdot e^2 \cdot Z_A \cdot Z_C}{r} \left(1 - \frac{1}{P}\right) \quad (22)$$

El cambio de signo se debe a que como hemos visto anteriormente la energía reticular, por convenio, se considera negativa.

La energía reticular de un mol vendrá expresada por:

$$-E_r = + \frac{A \cdot e^2 \cdot Z_A \cdot Z_C \cdot N}{r} \left(1 - \frac{1}{P}\right) \text{ ergios/mol} \quad (23)$$

o bien

$$-E_r = + \frac{A \cdot e^2 \cdot N \cdot Z_A \cdot Z_C}{r} \left(1 - \frac{1}{p}\right) \frac{1}{4,186 \times 10^{-10}} \text{ Kcal/mol}$$

(24)

donde:

N = número de iones contenido en un mol de cristal, número de Loschmidt.

p = factor de repulsión o coeficiente de Born.

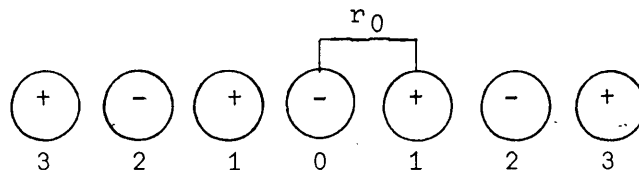
A = constante reticular de Madelung.

r = distancia interiónica media.

Por tanto, para poder conocer la energía reticular de los minerales cristalinos, será necesario saber los valores de estos parámetros para cada tipo de estructura mineralógica.

### III.2.1 Constante reticular (Madelung 1918).

Si seguimos el texto de Amoros , J.L. (1962) debemos considerar primero el valor de esta constante para una fila de iones. Esta fila estará constituida por una sucesión de iones positivos y negativos. Como origen tomamos un ión negativo.



Considerando únicamente la energía provocada por las cargas de los iones, es decir el término atractivo de la ecuación (22) y suponiendo que  $Z_A$ ,  $Z_C$  y  $e^2$  son igual a 1, podemos decir:

$$\frac{A}{r_0} = \frac{1}{r_0} - \frac{1}{2r_0} + \frac{1}{3r_0} + \dots + \frac{1}{r_0} - \frac{1}{2r_0} + \frac{1}{3r_0} + \dots$$



$$\frac{A}{r_0} = \frac{2}{r_0} - \frac{2}{2r_0} + \frac{2}{3r_0} - \dots; \quad \frac{A}{r_0} = 2\left(\frac{1}{r_0} - \frac{1}{2r_0} + \frac{1}{3r_0} - \dots\right)$$

$$A = 2\left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots\right) \tag{25}$$

La serie  $1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots$  converge rápidamente. Por tanto:  $A = 2 \ln 2$ .

Es decir, la constante de Madelung para una fila de iones es una constante fácilmente calculable.

La dificultad surge cuando se trata de calcular la constante de Madelung de una estructura cristalina.

### III.2.1.a. Constante de Madelung para estructuras tipo ClNa.

La estructura del ClNa es una red cúbica en la que alternan iones positivos y negativos en las direcciones del retículo. Si llamamos  $r$  a la distancia existente entre dos iones de distinta carga, los demás iones distarán de otro cualquiera, que consideremos como origen:

$$r_0 = r \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}$$

siendo,  $n_1$ ,  $n_2$  y  $n_3$  números enteros que representan las coordenadas del punto ocupado por el ión correspondiente. Si la suma de las coordenadas es par, el ión situado en él tiene el mismo signo que el tomado como origen, si la suma es impar, el ión tendrá signo contrario.

Para cada terna  $n_1$ ,  $n_2$ ,  $n_3$  tan sólo son posibles un número finito de combinaciones. Teniendo en cuenta la posibilidad de coordenadas positivas y negativas, si las tres son diferentes entre sí y de cero, el número total de combinaciones es 48; si los tres son diferentes de cero, pero iguales entre sí, las combinaciones son sólo 24; si todos son distintos entre sí y de

cero el número de combinaciones se reduce a 8. Además, hay que tener en cuenta que si uno de los valores de la terna es cero, desaparece la ambigüedad del signo para este valor, con lo que el número de combinaciones y por tanto de términos equivalentes se reduce a la mitad de los calculados anteriormente. Si el número de término cero es dos, los términos equivalentes serán la cuarta parte. Si los tres son cero, el número de términos es uno y corresponde al ión tomado como origen.

Si recordamos la fórmula (22):

$$-E_r = \frac{A \cdot e^2 \cdot Z_A \cdot Z_C}{r} (1 - 1/p)$$

considerando únicamente el término correspondiente a las fuerzas de las cargas iónicas tendremos, para las primeras esferas de coordinación:

$n_1$	$n_2$	$n_3$	Nº de términos equivalentes	Distancia	Energía de enlace
1	0	0	6	$r \sqrt{1}$	$(z^2 e^2 / r) (-6 / \sqrt{1})$
1	1	0	12	$r \sqrt{2}$	$(12 / \sqrt{2})$
1	1	1	8	$r \sqrt{3}$	$(-8 / \sqrt{3})$
2	0	0	6	$r \sqrt{4}$	$(6 / \sqrt{4})$
2	1	0	24	$r \sqrt{5}$	$(-24 / \sqrt{5})$
2	1	1	24	$r \sqrt{6}$	$(24 / \sqrt{6})$
2	2	0	12	$r \sqrt{8}$	$(18 / \sqrt{8})$
2	2	1	24	$r \sqrt{9}$	$(-24 / \sqrt{9})$
2	2	2	8	$r \sqrt{12}$	$(8 / \sqrt{12})$

La energía reticular de la estructura será la suma de las energías de enlace de cada par de iones definidos por las ternas  $n_1, n_2, n_3$ .

$$-E_r = \frac{z^2 \cdot e^2}{r} (-6,0 + 8,485 - 4,620 + 3,0 - 10,730 + 9,800 + 4,244 - 8,000 + 2,310) \quad (26)$$



Como puede verse, esta serie converge muy lentamente. Para hallar su límite es necesario considerar el retículo, no como un medio ilimitado, sino extendido solamente hasta cierta distancia del centro y limitado por las caras de un cubo. Los iones situados en el interior de este cubo contribuirán a la energía reticular con la totalidad de su energía de enlace. Los iones situados en las caras contribuirán solamente con la mitad de su energía de enlace, ya que están compartidos por un cubo adyacente de idénticas dimensiones al considerado como base del cálculo. Por la misma razón los iones de las aristas contribuirán tan solo con la cuarta parte de su energía de enlace y los situados en los vértices del cubo con la octava parte. Así, la energía reticular de un cubo formado por los iones contiguos al tomado como origen será:

$$-E_r = -\frac{6,0}{2} + \frac{8,485}{4} - \frac{4,620}{8} = -1,458 \quad (27)$$

si consideramos el cubo limitado por los iones situados a doble distancia su energía reticular será:

$$-6,0 + 8,485 - 4,620 + \frac{3,0}{2} - \frac{10,730}{2} + \frac{9,800}{2} + \frac{4,244}{4} - \frac{8,0}{8} + \frac{2,310}{2} = -1,750 \quad (28)$$

Si consideramos nuevos cubos situados a distancia triple, cuádruple, etc., el valor de la energía reticular oscila, pero converge rápidamente hacia el valor -1.748.

Por tanto la ecuación (26) puede expresarse:

$$-E_r = \frac{Z^2 \cdot e^2}{r} (-1,748) \quad (29)$$

Como hemos hecho los cálculos independientemente de las dimensiones reales de la estructura, al hacer  $r = 1$

$$-E_r = Z^2 \cdot e^2 \cdot (1,748) \quad (30)$$

Por tanto, la constante que hemos calculado tiene un valor general y es la constante de Madelung para los cristales con estructura tipo NaCl.

De manera análoga a la utilizada en la obtención de la constante de Madelung para la estructura del tipo ClNa, sería posible obtener los valores de esta constante para distintos tipos estructurales, pero este procedimiento es muy laborioso.

En los trabajos realizados por R. HOPPE(1956), sobre complejos fluorados, propone un método para calcular la constante de Madelung, aunque señala de antemano que no ha encontrado un nuevo método para el cálculo absoluto de las constantes de Madelung, sino que utiliza el conocimiento de constantes ya determinadas, y a partir de ellas calcula constantes de Madelung aún no conocidas.

### III.2.1.b. Estimación de la constante de Madelung.

La energía de un compuesto AB que cristaliza en el tipo ClNa con la distancia más corta  $A-B = 1/2 a^0 = r$  puede expresarse como ya hemos visto según la fórmula

$$-E_r = + \frac{\text{const. } A(\text{ClNa}) \cdot Z_A \cdot Z_C}{r} \quad (31)$$

El factor const. comprende los factores:  $e^2$ , N y p.

Según Hoppe (1956), la energía reticular puede expresarse mediante la ecuación:

$$-E_r = \frac{\text{const.}}{r} \cdot (P_A + P_B) \cdot Z_A \cdot Z_C \quad (32)$$

Donde la constante de Madelung A es sustituida por dos coeficientes estructurales  $P_A$  y  $P_B$ . De modo que si referimos  $P_A$  y  $P_B$  a la distancia normalizada  $A-B = 1$ ;  $P_A + P_B = A(\text{ClNa})$ . Dado que la estructura del ClNa es invariable frente a un intercambio

de los iones A y B, tendremos que  $P_A = P_B$ , y por tanto

$$P_A = P_B = \frac{A(ClNa)}{2} = 0,873779 \quad (33)$$

Pero  $P_A$  y  $P_B$  pueden escribirse también de la siguiente forma:

$$P_A = \left[ +S(AB) - S(AA) \right]$$

$$P_B = \left[ +S(BA) - S(BB) \right]$$

Donde  $S(AB)$  representa la mitad de la energía potencial de una partícula A entresacada del campo de todas las partículas B existentes en el cristal,  $S(AA)$  se refiere a la suma de los efectos contrarios existentes entre una partícula A con todos los demás iones A existentes en la red. La significación de  $S(BA)$  y  $S(BB)$  es análoga.

Hay que señalar que cada una de estas sumas parciales es infinita, si se ordenan, por ejemplo, todos los eslabones individuales de una de estas sumas según un denominador cada vez más grande se obtienen series infinitas que convergen hacia el infinito. Bajo este supuesto de ordenación, se puede escribir  $S(AB) = S(BA)$  y  $S(AA) = S(BB)$  ya que las series concordantes infinitas son iguales en cuanto a ordenación.

Debido al carácter especial de estas series infinitas hay que constatar, por último, lo siguiente: bajo la suma o diferencia de estas series

$$\left[ +S(AB) - S(AA) \right] \quad \text{ó} \quad \left[ +S(BA) - S(BB) \right]$$

debe entenderse siempre aquella serie infinita convergente que centra el valor límite finito de  $P_A$  y  $P_B$ , según el caso.

III.2.1.c. Constantes de Madelung para estructura de tipo AB con redes parciales conmutativas según Hoppe.

Hoppe señala que hay una serie de estructuras cristali-

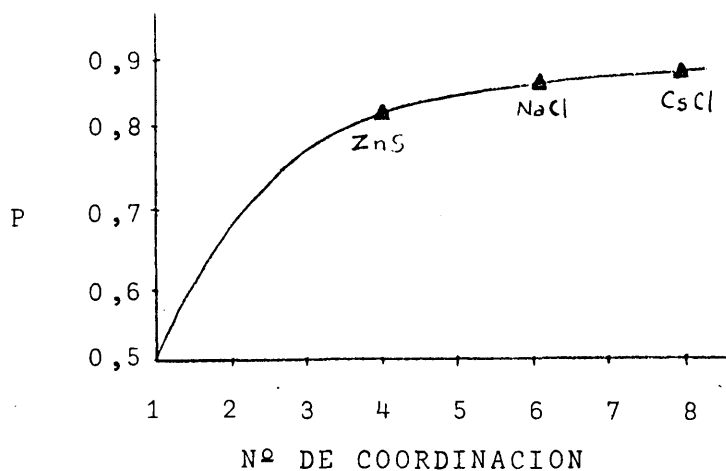
nas, que son, como en el caso del  $\text{ClNa}$ , invariables frente a un intercambio de las cuadrículas parciales A y B. Estas estructuras se denominan "Estructuras con cuadrículas parciales conmutativas". A este tipo de estructuras pertenecen, por ejemplo, las estructuras de  $\text{CsCl}$ ,  $\text{NaTl}$ , Wurtzita y Blenda, pero no la estructura del  $\text{NiAs}$ .

Por lo que podemos escribir:

$$P_A = P_B = \frac{A(\text{CsCl})}{2} \text{ en las estructuras tipo CsCl.}$$

$$P_A = P_B = \frac{A(\text{NaTl})}{2} \text{ en las estructuras tipo NaTl.}$$

Pero en estas estructuras el anión y el catión están igualmente coordinados. Diversos autores han intentado establecer una correlación entre el número de coordinación y el valor de los coeficientes estructurales  $P_A$  y  $P_B$ .



Si observamos el gráfico anterior, vemos que existe una correlación definida entre el número de coordinación y el valor de los coeficientes estructurales.

Así que el procedimiento sugerido por Templeton (1953), de calcular la constante de Madelung, teniendo en cuenta el número de coordinación puede considerarse como muy exacto.

TABLA I

Valores conocidos de la constante de Madelung  
en función del radio

Estructura Tipo	Constante de Madelung
Cloruro de cesio	1,762670
Cloruro sódico	1,747558
Blenda	1,63806
Wurtzita	1,641
Fluorita	5,03878
Cuprita	4,44247
Rutilo	4,816
Anatasa	4,800
Ioduro de cadmio	4,71
Cuarzo $\beta$	4,4394
Corindón	25,0312
Perouskita	6,18872

III.2.1.d. Correlación entre constantes de Madelung ya conocidas.

De manera empírica Hoppe comprobó la siguiente relación:

$$A(\text{CaF}_2) = 2 A(\text{ZnS}) + A(\text{CsCl}) \quad (34)$$

$$5,03878\dots = 2(1,63806\dots) + 1,762670 = 5,03879$$

La precisión obtenida, le sugirió que no se trataba de una correlación esporádica, sino más bien una regla fija, que permitiría calcular la constante de Madelung de estructuras complejas, descomponiéndola en motivos estructurales más simples,

para los cuales la constante de Madelung es constante. Este hecho permitió a Doerffel, como veremos más adelante, estimar los coeficientes energéticos independientes de la constante estructural de los minerales.

III.2.2. Factor de repulsión.

Experimentalmente se ha podido comprobar que el factor de repulsión o coeficiente de Born viene expresado por la fórmula:

$$p = 1 + \frac{9 V r_1}{Z_A \cdot Z_C \cdot e^2 \cdot N \cdot A \cdot \beta} \quad (35)$$

Donde V es el volumen del retículo, y  $\beta$  es el coeficiente de compresibilidad que puede determinarse experimentalmente.

El valor de p se ha determinado para algunos cristales iónicos, tal como se observa en la tabla II.

TABLA II

Valores del factor de repulsión

Cristal	LiF	LiCl	LiBr	NaCl	NaBr
p	5.9	8.0	8.7	9.1	9.5

Dada su escasa incidencia en el valor de la energía reticular calculado según (19), se puede suponer constante e igual a 9.



### III.2.3. Distancia entre los iones.

Para determinar esta distancia de enlace, es necesario conocer los radios efectivos de los distintos iones, para lo cual es preciso conocer el tipo de enlace químico en los compuestos (grado de covalencia) y los valores de los radios iónicos efectivos en cada mineral.

#### III.2.3.a. Grado de covalencia.

Para el cálculo del grado de covalencia hemos seguido las ideas de Povarennykh A.S. (1955) basadas en las electronegatividades iónicas. La expresión del contraste químico es la electronegatividad de los átomos, definida como la energía de atracción de los electrones, cuando hay átomos combinados con otros átomos. Este concepto fué desarrollado primero por Pauling (1947), que calculó las electronegatividades de los elementos por las diferencias entre la energía de enlace en compuestos y propuso una escala convencional de unidades. Otros autores consideran que es más sencillo, y en algunos casos, más exacto calcular las electronegatividades de la mayoría de los elementos teniendo en cuenta no sólo el potencial de ionización, sino también la afinidad de un electrón para formar un átomo.

La ecuación para determinar la electronegatividad de un átomo puede ser expresada en la siguiente forma:

$$E = I/n + E \quad (36)$$

Donde I es el potencial de ionización de un átomo para el correspondiente estado de valencia en Kcal/átomo gr., n es la valencia y E la afinidad electrónica en Kcal/átomo gr.

En general, la electronegatividad de un elemento está determinada por su máxima valencia, para lo cual I ha sido calculado como la energía de combinación del primer electrón del orbital externo para completar el orbital más profundo.



TABLA III

Electronegatividades de los elementos químicos

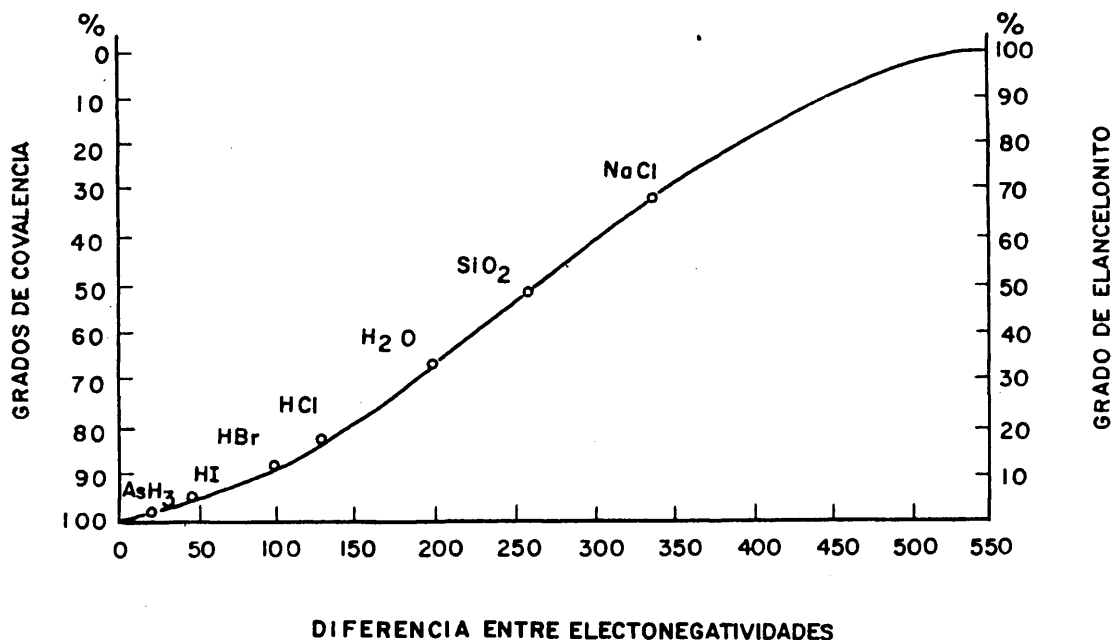
Elemento	Electronegatividad	Elemento	Electronegatividad
H <sup>+</sup>	328	V <sup>+5</sup>	315
Li	125	V <sup>+4</sup>	280
Be	210	V <sup>+3</sup>	235
B	290	Cr <sup>+6</sup>	370
C <sup>+4</sup>	370	Cr <sup>+3</sup>	250
N	450	Mn <sup>+3</sup>	420
O	520	Mn <sup>+4</sup>	310
F	605	Mn <sup>+2</sup>	170
Na	118	Fe <sup>+3</sup>	245
Mg	175	Fe <sup>+2</sup>	185
Al	220	Co <sup>+3</sup>	260
Si	270	Co <sup>+2</sup>	200
P	320	Ni <sup>+3</sup>	275
S	385	Ni <sup>+2</sup>	220
Cl	460	Cu <sup>+2</sup>	235
K	100	Cu <sup>+1</sup>	177
Ca	137	Zn	208
Sc	200	Ga	235
Ti <sup>+4</sup>	260	Ge	285
Ti <sup>+3</sup>	220	As <sup>+5</sup>	310
As <sup>+3</sup>	220	Ba	115
Se	360	La	150
Br	425	Hf	180
Rb	97	Ta <sup>+4</sup>	190
Sr	125	W <sup>+4</sup>	205
Y	160	Re <sup>+4</sup>	220
Zr	200	Os	---

TABLA III (Continuación)

Elemento	Electronegatividad	Elemento	Electronegatividad
Nb <sup>+5</sup>	240	Ir	---
Nb <sup>+4</sup>	215	Pt <sup>+4</sup>	240
Mo <sup>+6</sup>	275	Pt <sup>+2</sup>	200
Mo <sup>+4</sup>	235	Au	212
Ru <sup>+4</sup>	270	Hg	240
Rh <sup>+3</sup>	240	Ti	140
Pd <sup>+2</sup>	230	Pb <sup>+4</sup>	245
Ag	175	Pb <sup>+2</sup>	170
Cd	195	Bi <sup>+3</sup>	195
In	215	Fr	85
Sn <sup>+4</sup>	235	Ra	113
Sn <sup>+2</sup>	170	Ac	145
Sb <sup>+5</sup>	270	Th	170
Sb <sup>+3</sup>	195	Pa	195
Te <sup>+4</sup>	220	U <sup>+4</sup>	190
I	375	Cs	90

\* Datos tomados de "Fundamental Problems of Crystals Chemistry in Relation of Mineralogy".- A.S. Povarennykh.- (1955).

Povarennykh analizó las relaciones entre la diferencia de electronegatividad y la cantidad de ionicidad o covalencia en el enlace. Para sus cálculos Povarennykh tomó los datos empíricos de la ionicidad de los compuestos: AsH<sub>2</sub> (1%), HI(5%), HBr(12%), HCl(17%), y H<sub>2</sub>O (33%), SiO<sub>2</sub>(48%) y NaCl (68%). A partir de los cuales construyó el gráfico:



La curva muestra la dependencia entre el tipo de enlace y la diferencia entre las electronegatividades. Una vez conocidas las electronegatividades podemos determinar el porcentaje de iónicidad o covalencia del enlace de un compuesto. Así por ejemplo, para el Corindón ( $Al_2O_3$ ), la diferencia de las electronegatividades de O y Al es:  $530 - 220 = 310$  Kcal, que corresponde a un 60% de enlace iónico.

El enlace iónico predomina en compuestos en los cuales la diferencia de electronegatividades de los elementos constituyentes exceda de 275 Kcal. En el caso contrario predomina el enlace covalente. Este límite corresponde aproximadamente al enlace Si-O, característico en los silicatos.

III.2.3.b. Valores efectivos de los radios.

Mientras que el radio metálico-covalente de los elementos era establecido con bastante exactitud mediante rayos X, que daba por determinar el radio iónico verdadero, para la mayoría de los elementos. Estos pueden ser fácilmente determinados en un compuesto binario, así, por ejemplo, en un óxido, el tipo de enlace y los límites de variación de los radios son conocidos, si al menos conocemos el de uno de ellos, oxígeno por ejemplo. Por esto es necesario establecer algunos de los radios iónicos primarios. En sus cálculos, Povarenykh partió de la determinación del radio iónico del flúor.

Tomando como base los compuestos NaF y KF con un 5 y 3% de covalencia respectivamente, es fácil conocer los radios iónicos del  $\text{Na}^{+1}$  y  $\text{K}^{+1}$  calculados a partir del radio iónico del fluor (1.33 Å).

$$\begin{aligned} R_{\text{Na}^{+1}} &= d_{\text{NaF}} - (R_{\text{F}^{-1}} - 0.05 (R_{\text{F}^{-1}} - R_{\text{F}^0})) = \\ &= 2,31 - [1,33 - 0,05 (1,36 - 0,72)] = 2,31 - (1,33 - 0,03) = \\ &= 1,01 \overset{\circ}{\text{Å}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} R_{\text{K}^{+1}} &= d_{\text{KF}} - (R_{\text{F}^{-1}} - 0,03 (R_{\text{F}^{-1}} - R_{\text{F}^0})) = \\ &= 2,66 - [1,33 - 0,03 (1,36 - 0,72)] = 2,66 - (1,33 - 0,01) = \\ &= 1,34 \overset{\circ}{\text{Å}} \end{aligned}$$

Povarenykh decidió tomar el antiguo valor del radio iónico del sodio en combinación con el flúor, 0,98. Por esto, el radio iónico del  $\text{F}^{-1}$  debe ser considerado como 1.36 Å.

Partiendo de estos valores,  $R_{\text{Na}^{+1}} = 0,98 \overset{\circ}{\text{Å}}$  y  $R_{\text{F}^{-1}} = 1,36 \overset{\circ}{\text{Å}}$ , es fácil determinar el verdadero radio iónico para el Na y el K. El radio metálico, es decir con una covalencia

del 100%, del Na, determinado por rayos X, es  $1,86 \text{ \AA}^{\circ}$ . Como acabamos de ver el radio iónico del Na en el FNa, con una covalencia del 95% es 0,98. Por tanto:

$$1,86 - 0,98 = 0,88 \text{ \AA}^{\circ}$$

$$\begin{array}{l} 95 \text{ ———— } 0,88 \\ 100 \text{ ———— } x \end{array} \quad x = \frac{100 \times 0,88}{95} = 0,93 \text{ \AA}^{\circ}$$

Entonces

$$R_{\text{Na}^{+1}} = 1,86 - 0,93 = 0,93 \text{ \AA}^{\circ}$$

El radio iónico verdadero del  $\text{K}^{+1}$  calculado de forma análoga es  $1,29 \text{ \AA}^{\circ}$ .

Conociendo el radio iónico verdadero del Na y K, se puede determinar los radios iónicos verdadero del  $\text{O}_2$  y Cl a partir de sus compuestos con el Na y el K, el radio iónico verdadero del oxígeno es 1,46 y el del cloro 1,86. El resto de los radios iónicos de los elementos puede ser calculado a partir de estos.

En la tabla IV se dan los valores de los radios iónicos verdaderos de la mayoría de los elementos para sus estados de valencia más importantes y el radio efectivo de los elementos en los óxidos y fluoruros, todos ellos expresados en  $\text{Å}^{\circ}$ . Estos datos fueron tomados de los suministrados por Povarennykh en All-union-miner succ. 84. nº 4, pp. 469-494; 1955, incluido en Aspects of Theoretical Mineralogy in the USSR. M.H. Battey and S.I. Tomkeieff; 1964. Pergamon Press. En la misma tabla se incluyen los valores del grado de covalencia de los distintos elementos en combinación con el oxígeno calculados por nosotros a partir de los radios de Povarennykh.

TABLA IV

Elemento	Radio 100% iónico	Radio 100% covalente	Radio en óxidos	Grado de covalencia % <sup>-</sup> en óxidos	R. Fluoruros
Li	0,65	1,52	0,80	17	0,70
Be	0,31	1,13	0,61	36	0,46
B	0,13	0,89	0,57	57	0,43
C <sup>+4</sup>	0,03	0,77	0,60	75	0,46
O	1,46	0,60	1,01	52	--
Na	0,93	1,86	1,08	16	0,98
Mg	0,60	1,60	0,88	28	0,72
Al	0,37	1,43	0,79	39	0,59
Si <sup>+4</sup>	0,19	1,17	0,70	52	0,51
P <sup>+5</sup>	0,09	1,09	0,74	65	0,55
S <sup>+6</sup>	0,02	1,05	0,84	79	--
K	1,29	2,25	1,40	11	1,32
Ca	0,91	1,91	1,11	20	0,99
Sc	0,58	1,60	0,93	34	0,75
Ti <sup>+3</sup>	0,57	1,47	0,97	44	--
Ti <sup>+4</sup>	0,49	1,47	0,98	50	--
V <sup>+3</sup>	0,61	1,35	0,93	56	--
V <sup>+4</sup>	0,46	1,35	0,95	55	--
V <sup>+5</sup>	0,35	1,35	0,98	63	--
Cr <sup>+3</sup>	0,58	1,30	0,92	47	--
Cr <sup>+6</sup>	0,26	1,30	1,06	76	--
Mn <sup>+2</sup>	0,87	1,36	1,00	50	0,91
Mn <sup>+3</sup>	0,60	1,36	0,98	26	--
Mn <sup>+4</sup>	0,33	1,36	0,97	48	--
Fe <sup>+2</sup>	0,80	1,28	0,95	46	0,87
Fe <sup>+3</sup>	0,65	1,28	0,94	30	0,82
Ni	0,75	1,24	0,95	41	0,85
Co	0,78	1,25	0,93	31	0,87

TABLA IV (Continuación)

Elemento	Radio 100% iónico	Radio 100% covalente	Radio en óxidos	Grado de covalencia % en óxidos	R. fluoruros
Cu <sup>+1</sup>	0,75	1,24	0,95	41	0,95
Cu <sup>+2</sup>	0,77	1,28	0,98	41	0,89
Zn	0,72	1,39	0,96	35	0,84
Ga	0,52	1,31	0,88	44	--
Ge	0,45	1,22	0,84	50	0,70
As <sup>+3</sup>	0,67	1,24	0,99	56	--
As <sup>+5</sup>	0,37	1,24	0,91	56	--
Rb	1,42	2,43	1,54	12	1,45
Sr	1,07	2,10	1,25	17	1,13
Y	0,78	1,79	1,03	25	0,89
Zr	0,65	1,60	0,98	35	--
Nb <sup>+5</sup>	0,49	1,47	0,93	45	--
Mo <sup>+5</sup>	0,56	1,40	0,92	43	--
Mo <sup>+6</sup>	0,42	1,40	0,94	53	--
Ru <sup>+4</sup>	0,57	1,34	0,97	52	--
Rh	0,68	1,34	0,98	45	0,80
Pd	0,80	1,37	1,04	42	0,94
Ag	1,18	1,44	1,25	27	1,21
Cd	0,95	1,56	1,16	34	1,04
In	0,73	1,52	1,04	39	0,89
Sn <sup>+2</sup>	0,97	1,53	1,12	25	--
Sn <sup>+4</sup>	0,63	1,40	0,96	42	--
Sb <sup>+3</sup>	0,86	1,45	1,06	34	--
Sb <sup>+5</sup>	0,49	1,45	1,99	52	--
Ba	1,30	2,17	1,44	16	1,33
La	0,95	1,87	1,15	22	1,03
Ce <sup>+3</sup>	0,93	1,82	1,15	25	1,02
Ta	0,50	1,47	0,87	38	--
W <sup>+6</sup>	0,41	1,41	0,84	43	--



TABLA IV (Continuación)

Elemento	Radio 100% iónico	Radio 100% covalente	Radio en óxidos	Grado de covalencia % en óxidos	R. fluoruros
W <sup>+4</sup>	0,54	1,41	0,85	36	--
Hg	1,00	1,60	1,23	38	1,12
Pb <sup>+2</sup>	1,14	1,75	1,30	26	1,10
Pb <sup>+4</sup>	0,75	1,51	1,10	46	1,30
Bi <sup>+3</sup>	0,96	1,55	1,16	33	1,55
Ra	1,38	2,19	1,51	16	1,38
Th	0,87	1,80	1,12	26	0,87
V <sup>+4</sup>	0,93	1,53	1,12	32	0,93

Los valores calculados para los radios en la mayoría de los casos muestran una buena concordancia con los datos experimentales, especialmente en los casos en que los compuestos presentan un alto grado de covalencia. Povarennykh (1955), considera que su sistema de radio atómico variable tiene una ventaja sobre otros sistemas, no sólo en el sentido teórico, sino también en el práctico, ya que permite una unificación y un sistema uni universal para el cálculo de las distancias interiónicas en com puestos isodésmicos iónico-covalentes para cualquier composición, dando la mejor aproximación para los valores verdaderos de esas distancias. Sin embargo, la aproximación a los resultados experi mentales no resulta igualmente buena para todos los compuestos. En algunos casos, como en los haluros de litio, las desviaciones parecen ser causadas por la existencia de fuerza repulsivas adicionales producidas entre los orbitales electrónicos de los gran des aniones (el fenómeno de doble repulsión, definido por Pauling). El efecto de estas fuerzas adicionales no fué tenido en cuenta en los cálculos de Povarennykh. En otros casos, como por

ejemplo en los compuestos de los elementos de transición, o en los compuestos de  $\text{Te}^{+1}$ ,  $\text{Pb}^{+2}$ ,  $\text{Bi}^{+3}$ , las distancias interiónicas están fuertemente distorsionadas por no haber enlace entre los electrones de los orbitales d y s lo cual tiende a incrementar estas distancias.

Es obvio señalar que en todos los casos similares será necesario introducir correcciones relativas a los efectos repulsivos adicionales. Así, para los compuestos de litio y berilio hay una máxima corrección que varía del 2 al 4%. Para compuestos con elementos de gran tamaño, como por ejemplo el calcio, estroncio y rubidio, la corrección oscila del 1 al 1,5%. La corrección basada en el efecto de repulsión causado por la falta de enlace en algunos orbitales es muy difícil de calcular, porque depende del número de electrones sueltos. En general estas variaciones oscilan entre el 1,5 y el 8%.

#### III.2.4. Ecuación de Kapustinsky.

Como ya indicamos anteriormente, una vez conocidos los valores que pueden tomar las constantes contenidas en la ecuación de Born, M., es posible aplicarla para determinar la energía reticular de las distintas estructuras cristalinas.

Esto fué precisamente lo que hizo Kapustinsky (1933), consideró que en una primera aproximación los valores de A y p podrían considerarse como invariantes y calculó el valor de  $\frac{A \cdot N \cdot e^2 (1 - 1/p)}{4,186 \times 10^{-10}}$  para el NaCl, obteniendo un valor de 256,1.

La ecuación propuesta por Kapustinsky fué:

$$-E_r = \frac{256,1 \cdot Z_A \cdot Z_C \cdot n}{r_A \cdot r_C} \text{ Kcal/mol} \quad (37)$$

En la que n representa el número de iones de la molécula cristalológica.

El valor 256,1 se supone válido para el cálculo de la energía reticular de cualquier estructura, debido a la introducción del término,  $n$ , en la ecuación, ya que si bien  $N$ ,  $e$  y  $p$  pueden considerarse como constantes para cualquier estructura, el valor de la constante de Madelung,  $A$ , varía de unas estructuras a otras, según podemos ver en la Tabla I. Pero hay que tener en cuenta que los valores de la constante de Madelung expresados en esta Tabla, están calculados para un motivo estructural, representado por 16 iones en el caso del NaCl y, a medida que este motivo se complica, la serie de la ecuación (28) tarda más en converger hacia el valor expresado en la tabla y por tanto estará referido a una molécula cristaloquímica mayor. Si dividimos el valor de la constante de Madelung por el número de iones utilizados para conseguir que la serie converja, los valores que obtendremos serán todos muy próximos y podremos tomar el obtenido para el NaCl como representativo de todos ellos. Hay que tener en cuenta que el NaCl tiene una coordinación 6/6, que es la coordinación media de las estructuras cristalinas.

Pero el cálculo de la energía mediante la fórmula de Kapustinsky presenta serias dificultades, ya que en ella intervienen los radios iónicos efectivos. Cuanto mejor se conozcan los radios aniónicos y catiónicos mayor precisión obtendremos en el cálculo de la energía. Los trabajos de Povarenykh permiten conocer el valor de estos radios en los óxidos. Tabla IV. Pero como ya indica el mismo, en algunos compuestos había que introducir modificaciones de hasta un 10%.

Además en estructuras complejas, como puede ser un silicato, el radio del silicio en combinación con el oxígeno es 0,70 Å, mientras que el oxígeno toma un valor de 1,01 Å, para una covalencia del 52%, pero el oxígeno también estará enlazado con otros cationes, como por ejemplo el Mg, en este caso la covalencia es del 28% y los valores de los radios son 0,88 Å para el Mg y 1,22 Å para el oxígeno. Por tanto, en estructuras complejas para conocer  $r_A$  y  $r_C$ , había que calcular la covalencia de cada enlace en la estructura a partir de las electronegativida-

des, y una vez conocida ésta, calcular los radios iónicos mediante diferencias, suponiendo que ambos iones son tangentes. Una vez calculados todos los radios aniónicos y catiónicos, se tomará su valor medio y se calcula la energía que, naturalmente, no dejará de ser una aproximación no verificable.

### III.2.5. Coefficientes energéticos.

Debido precisamente a las dificultades que presenta la ecuación de Kapustinkky, Fersman A.E. (1930), introdujo el concepto de EK, "coeficientes energéticos iónicos", con la idea de establecer las leyes geoquímicas basadas en los aportes energéticos de cada ión al edificio cristalino.

Fersman supuso que las energías aportadas por los iones era aditivas (hecho falso, pero que en primera aproximación se puede aceptar) de forma que la energía reticular se podría estimar mediante la fórmula

$$-E_r = 256,1 (a \cdot EK_A + b EK_B + \dots) \text{ Kcal/mol} \quad (38)$$

donde a, b, ... son los coeficientes estequiométricos de la molécula.

Para calcular los diferentes EK, Fersman utilizó la energía reticular del fluoruro potásico y del óxido de estroncio, pues en estos enlaces, según Goldschmidt, los radios de los aniones y de los cationes son iguales.

Fersman repartió las energías reticulares, conocidas de estos dos compuestos de forma igual entre el anión y el catión, y así obtuvo los valores de los coeficientes energéticos del F, O, K y Sr, que utilizó para la determinación sustractiva de los EK de los restantes iones.

Aunque los EK fueron obtenidos de forma empírica, Fersman comprobó que para los cationes típicos, los EK obtenidos cum

plían aproximadamente la ecuación:

$$E_K = \frac{Z^2}{2r} \quad (39)$$

Mientras los  $E_K$  de los iones con valores más elevados seguían la ecuación:

$$E_K = 0,75 \frac{Z^2}{2r} (r + 0,20) \quad (40)$$

Doerffel, K. (1956), propuso unos nuevos coeficientes energéticos. Para su cálculo utilizó los datos más recientes de que disponía (datos termodinámicos y de radios iónicos). Doerffel propone sustituir la ecuación (39) por la ecuación empírica

$$E_{KD} = \frac{128 Z^2}{r} \quad (41)$$

Para lo cual se apoya en la hipótesis defendida por Hoppe. En esta ecuación la constante de proporcionalidad propuesta por Kapustinsky (256,1) está incorporada a cada uno de los coeficientes energéticos.

El valor de la energía reticular vendrá expresado según Doerffel por:

$$-E_r = (a \cdot E_{K_A} + b \cdot E_{K_B} + \dots) \text{ Kcal/mol} \quad (42)$$

Esta ecuación permite además de simplificar los cálculos, corregir mejor la no aditividad de los aportes energéticos en el cálculo de la energía reticular.

Los coeficientes energéticos, propuestos por Doerffel y Fersman para los distintos elementos se encuentran en la tabla V.

TABLA V

Valores de los coeficientes energéticos propuestos  
por Doerffel y Fersman

Elemento	EK Doerffel	EK Fersman	Elemento	EK Doerffel	EK Fersman
Li	155	141	Mn <sup>+4</sup>	1.680	2.330
Be	700	678	Fe <sup>+2</sup>	580	543
B	1.715	1.535	Fe <sup>+3</sup>	1.280	1.320
C	3.520	3.124	Co <sup>+2</sup>	620	1.320
N <sup>+5</sup>	5.800	5.060	Co <sup>+3</sup>	551	--
N <sup>-3</sup>	980	920	Ni	620	558
O	340	397	Cu <sup>+1</sup>	215	179
F	95	95	Cu <sup>+2</sup>	630	538
Na	125	115	Zn	610	565
Mg	590	538	Ga	1.300	1.385
Al	1.280	1.270	Ge	2.320	2.700
Si	2.500	2.200	As <sup>+3</sup>	1.265	--
P <sup>+5</sup>	4.000	3.560	As <sup>+5</sup>	3.735	3.890
P <sup>-3</sup>	790	690	As <sup>-3</sup>	750	680
S <sup>+6</sup>	6.000	--	Se <sup>-2</sup>	238	282
S <sup>-2</sup>	275	295	Br	55	57
Cl	60	64	Rb	89	84
K	98	92	Sr	426	384
Ca	477	448	Y	967	1.010
Sc	1.075	1.190	Zr	1.980	2.005
Ti <sup>+3</sup>	1.160	1.190	Nb	3.150	3.485
Ti <sup>+4</sup>	2.150	2.170	Mo <sup>+4</sup>	2.170	2.180
V <sup>+3</sup>	1.115	1.360	Mo <sup>+6</sup>	4.930	--
V <sup>+4</sup>	2.180	--	Ru <sup>+4</sup>	2.180	2.330
V <sup>+5</sup>	3.600	3.870	Rh <sup>+3</sup>	1.250	--
Cr <sup>+3</sup>	1.140	1.220	Pd <sup>+2</sup>	640	--
Cr <sup>+6</sup>	6.200	--	Ag	180	154
Mn <sup>+2</sup>	560	512	Cd	550	512
Mn <sup>+3</sup>	1.300	--	In	1.170	1.115



TABLA V (Continuación)

Elemento	EK Doerffel	EK Fersman	Elemento	EK Doerffel	EK Fersman
Sn <sup>+2</sup>	26	--	Pb <sup>+2</sup>	480	423
Sn <sup>+4</sup>	2.080	2.025	Pb <sup>+4</sup>	2.060	2.035
Sb <sup>+3</sup>	1.022	--	Bi <sup>+3</sup>	1.090	--
Sb <sup>+5</sup>	3.180	3.155	Bi <sup>+5</sup>	--	3.050
Sb <sup>-3</sup>	700	590	Po	--	--
Te	215	243	At	--	--
I	45	46	Fr	78	--
Cs	79	77	Ra	382	--
Ba	378	346	Ce <sup>+3</sup>	922	--
La	900	918	Pr <sup>+3</sup>	925	--
Hf	1.995	2.000	Nd <sup>+3</sup>	930	--
Ta	3.150	3.485	Pm <sup>+3</sup>	934	--
W <sup>+4</sup>	1.684	--	Sm <sup>+3</sup>	943	--
W <sup>+6</sup>	4.470	4.455	Eu <sup>+3</sup>	943	--
Re <sup>+4</sup>	1.850	2.280	Gd <sup>+3</sup>	947	--
Re <sup>+6</sup>	4.500	--	Tb <sup>+3</sup>	956	--
Re <sup>+7</sup>	6.380	7.200	Dy <sup>+3</sup>	957	--
Os	--	2.280	Ho <sup>+3</sup>	987	--
Ir	--	2.290	Er <sup>+3</sup>	999	--
Pt	521	--	Tm <sup>+3</sup>	999	--
Au	183	166	Yo <sup>+3</sup>	1.000	--
Hg <sup>+1</sup>	240	238	Cp <sup>+3</sup>	1.002	--
Hg <sup>+2</sup>	570	538	Th <sup>+4</sup>	1.750	--
Tl <sup>+1</sup>	131	108	U <sup>+4</sup>	1.800	--
Tl <sup>+3</sup>	1.195	885	U <sup>+6</sup>	4.250	--

Datos tomados de "Sur quelques procedes contribuant à l'explication theorique de processus geochimiques, en tenant compte en particulier de l'energie reticulaire".- F. Leutwein y K. Doerffel.

III.2.5.a. Coefficientes energéticos de los iones complejos.

Para el cálculo de los coeficientes energéticos de estos iones, Fersman determinó los radios iónicos, mediante la ecuación:

$$r_{xy} = r_x + 2 r_y \quad (43)$$

donde:

- $r_{xy}$  = radio del ión complejo,
- $r_x$  = radio del ión central,
- $r_y$  = radio del ión coordinado.

Los valores de  $r_x$  y  $r_y$  fueron deducidos por Fersman a partir de los radios iónicos de Goldschmidt, lo cual conduce indudablemente a resultados inexactos, ya que en los iones complejos, el enlace ión central, ión coordinado es mucho más débil que el enlace entre los iones que forman el ión complejo.

Wyckoff y Kodes (1939), midieron mediante rayos X las distancias entre el ión central y el ión coordinado y calcularon los radios de los complejos utilizando la ecuación

$$r' = 2(a - r_x) + r_x \quad (44)$$

donde

- $r'$  = radio del ión complejo,
- $r_x$  = radio del ión central,
- $a$  = distancia ión central-ión coordinado.

En la Tabla VI se indican los radios de los iones complejos calculados mediante la ecuación (44). Los radios indicados son únicamente válidos para los tipos de red indicados. Pero también pueden ser utilizados en otras combinaciones con otras redes cuando no cambia el tipo de fórmula. Los radios indicados



en la tabla VI representan los valores medios para las combinaciones tipo AB, donde B representa un anión complejo.

Doerffel defiende que los coeficientes energéticos de los aniones simples en función del radio iónico indicado en la tabla VI, siguen aproximadamente la ecuación:

$$E_K = \frac{128 Z^2}{r^{3/2}}$$

Cuando esta ecuación se aplica a los aniones complejos, se obtienen para los coeficientes de energía los valores indicados en la tabla VI.

Estos  $E_K$  están calculados suponiendo que los aniones complejos se comportan como iones que alcanzan la estructura de un gas noble. Esta suposición es aceptable para la mayoría de los iones complejos mencionados en la tabla VI.

Puesto que los radios de los aniones complejos no representan más que los valores medios, los valores de los  $E_K$  presentan las mismas características. Los  $E_K$  mencionados en la tabla VI son los más viables para las combinaciones del tipo AB, siendo B ión complejo. Para otros tipos se obtendrán valores algo diferentes, al igual que para los radios iónicos, para obtener cálculos exactos, los  $E_K$  deberían ser determinados separadamente en cada caso.

TABLA VI

Radio y coeficientes energéticos de los aniones complejos

Los radios están expresados en Å y los EK en Kcal/mol

Anión	Tipo de red	Distancia ión central ión coorden.	Radio ión central	Radio ión complejo	Radio medio ión complejo	EK
CN <sup>-1</sup>	NaCl	2.91		1.91	1.90	50
OH <sup>-1</sup>	NaCl	2.89		1.56	1.55	65
SH <sup>-1</sup>	NaCl	3.03		2.03	2.00	45
SeH	NaCl	3.15		2.15	2.15	40
NO <sub>3</sub> <sup>-1</sup>	NaNO <sub>3</sub>	1.25	0.14	2.36	2.35	35
NbO <sub>3</sub> <sup>-1</sup>	NaNbO <sub>3</sub>	1.94	0.73	3.11	3.10	25
ClO <sub>4</sub> <sup>-1</sup>	KClO <sub>4</sub>	1.44	0.27	2.61	2.60	30
CO <sub>2</sub> <sup>-2</sup>	CaCO <sub>3</sub>	1.25	0.18	2.32	2.30	145
TiO <sub>3</sub> <sup>-2</sup>	CaTiO <sub>3</sub>	1.90	0.60	3.20	3.20	95
SiO <sub>3</sub> <sup>-2</sup>	MgSiO <sub>3</sub>	1.54	0.40	2.68	2.70	120
SO <sub>4</sub> <sup>-2</sup>	CaSO <sub>4</sub>	1.60	0.31	2.89	2.90	105
WO <sub>4</sub> <sup>-2</sup>	MgWO <sub>4</sub>	1.73	0.65	2.81	2.80	110
MoO <sub>4</sub> <sup>-2</sup>	CaMoO <sub>4</sub>	1.65	0.65	2.65	2.65	120
CrO <sub>4</sub> <sup>-2</sup>	PbCrO <sub>4</sub>	1.95	0.52	3.38	3.40	80
BO <sub>3</sub> <sup>-3</sup>	SeBO <sub>4</sub>	1.25	0.25	2.25	2.25	400
PO <sub>4</sub> <sup>-3</sup>	AlPO <sub>4</sub>	1.54	0.36	2.72	2.70	260
AsO <sub>4</sub> <sup>-3</sup>	AlAsO <sub>4</sub>	1.62	0.46	2.78	2.80	250
SiO <sub>4</sub> <sup>-4</sup>	ZrSiO <sub>4</sub>	1.62	0.40	2.88	2.90	420
AlO <sub>4</sub> <sup>-5</sup>					2.90	650

Datos tomados de: "Sur quelques procedes contribuant à l'explication de processus geochimiques, en tenant compte en particulier de l'energie reticulaire theorique F.Leutwein y K. Doerffel.

### III.3. CONSIDERACIONES SOBRE EL CALCULO DE LA ENERGIA.

A la vista de lo hasta ahora expuesto, podemos pensar que con ninguno de los dos caminos utilizados, termodinámico y cristalquímico, podemos tener la certeza de alcanzar resultados exactos al calcular la energía de una determinada estructura. Pero también es cierto que no existe ningún otro procedimiento accesible a nuestros medios que nos permita obtener mejores resultados. Además, si consideramos las imprecisiones que podemos cometer al calcular por cualquiera de los tres métodos estudiados, ciclo de Born-Haber, ecuación de Kapustinsky y coeficientes energéticos, el error con que conocemos la energía no debe nunca sobrepasar el 10%. Hay que tener también en cuenta que estos errores serán prácticamente iguales en todos los compuestos minerales. Es decir, quizás cometamos un error en la determinación de la magnitud energía, pero podremos conocer con certeza las diferencias energéticas entre los distintos minerales que es realmente el dato que pensamos utilizar para la realización de este estudio.

De los tres métodos estudiados, es el de los coeficientes energéticos el más rápido y de más fácil aplicación. De los dos tipos de coeficientes de que disponíamos, los de Fersman y los de Doerffel, estos últimos están más perfeccionados, ya que en su elaboración se utilizaron datos más optimizados. Si comparamos los valores obtenidos mediante la aplicación de los coeficientes de Doerffel, con los datos experimentales, obtenidos medante el ciclo de Bohr-Haber, publicados por Urusov V.s. (1965) y por Plend J.N. y Gielisse P. (1961). Vemos que los resultados obtenidos mediante los coeficientes energéticos de Doerffel son prácticamente análogos a los obtenidos por los autores antes mencionados.



TABLA VII

Minerales	Datos experimentales	Datos calculados EK Doerffel
Periclasa - MgO	944	-930
Manganosita - MnO	923	-900
Oxido de calcio - CaO	823	-817
Bunsenita - NiO	960	-960
Tenorita - CuO	920	-970
Cincinita - ZnO	952	-950
Bromellita - BeO	1.055	-1.040
Oxido de cadmio - CdO	911	-890
Cuarzo - SiO <sub>2</sub>	3.109	-3.180
Rutilo - TiO <sub>2</sub>	2.900	-2.830
Pirolusita - MnO <sub>2</sub>	3.100	-3.360
Cuprita - CuO <sub>2</sub>	740	-770
Casiterita - SnO <sub>2</sub>	2.800	-2.760
Plattnerita - PbO <sub>2</sub>	2.830	-2.740
Halita - NaCl	184	-185
Silvina - KCl	169	-158
Fluorita - CaF <sub>2</sub>	662	-667
Sellaíta - MgF <sub>2</sub>	797	-780
Villiaumita - NaF	218	-220
Marshita - CuI	231	-260
Nantokita - CuCl	236	-275
Bromyrita - AgBr	212	-235
Andalucita - Al <sub>2</sub> [SiO <sub>5</sub> ]	6.760	-6.760

TABLA VII (Continuación)

Minerales	Datos experimentales	Datos calculados EK Doerffel
Cianita - Al [SiO <sub>5</sub> ]	6.760	-6.760
Silimanita - Al <sub>2</sub> [SiO <sub>5</sub> ]	6.760	-6.760
Wollastonita - Ca [SiO <sub>3</sub> ]	3.941	-3.997
Anortita - CaAl <sub>2</sub> [Si <sub>2</sub> O <sub>6</sub> ]	10.372	-10.757
Monticellita - CaMg [SiO <sub>4</sub> ]	4.852	-4.927
Diópsido - Ca <sub>2</sub> Mg [Si <sub>2</sub> O <sub>6</sub> ]	7.969	-8.087
Tremolita - Ca <sub>2</sub> Mg <sub>5</sub> [Si <sub>8</sub> O <sub>22</sub>  (OH) <sub>2</sub> ]	31.409	-31.544
Esfena - CaTi [SiO <sub>5</sub> ]	6.799	-6.702
Ferrosilita - Fe [SiO <sub>3</sub> ]	4.036	-4.100
Fayalita - Fe [SiO <sub>4</sub> ]	4.962	-5.020
Fosterita - Mg [SiO <sub>4</sub> ]	4.933	-5.040
Ortosa - K [AlSi <sub>3</sub> O <sub>8</sub> ]	11.495	-11.611
Talco - Mg [Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub>  (OH) <sub>2</sub> ]	16.188	-15.300
Antofilita - Mg <sub>7</sub> [Si <sub>8</sub> O <sub>22</sub>  (OH) <sub>2</sub> ]	32.231	-32.565
Rodonita - Mn [SiO <sub>3</sub> ]	4.010	-4.058
Tefroita - Mn <sub>2</sub> [SiO <sub>4</sub> ]	4.913	-4.980
Jadeita - NaAl [Si <sub>2</sub> O <sub>6</sub> ]	8.363	-8.445
Albita - NaAl [Si <sub>3</sub> O <sub>8</sub> ]	11.473	-11.582

Por tanto en la realización del presente trabajo se han utilizado los coeficientes energéticos de Doerffel, que permiten estimar la energía reticular de los minerales, cualquiera que sea su estructura y su complejidad química, con gran facilidad.

IV. CALCULO DEL VOLUMEN RETICULAR

Según veíamos en la introducción, otro parámetro que permite caracterizar a los minerales cristalinos, es su volumen reticular.

Para calcular el volumen molar de un determinado compuesto mineral, normalmente conoceremos el volumen de la celdilla fundamental calculado a partir de los vectores  $\overline{a_0}$ ,  $\overline{b_0}$ ,  $\overline{c_0}$  y de los ángulos  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , que los vectores forman entre sí.

Para los distintos sistemas de cristalización el volumen de la celdilla viene dado por:

Sistema cúbico:  $V = (a_0)^3$

Sistema tetragonal:  $V = (a_0)^2 \cdot c$

Sistema hexagonal:  $V = (a_0)^2 \cdot c \cdot \text{sen } 60^\circ$

Sistema rómbico:  $V = a_0 \cdot b_0 \cdot c_0$

Sistema monoclinico:  $V = a_0 b_0 c_0 \text{ sen } \beta$

Sistema triclinico:  $V = a_0 b_0 c_0 \frac{\sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}}{1}$

Este volumen representa el espacio reticular ocupado por los iones que constituyen la celdilla. Por tanto, el volumen de la celda también puede expresarse en función del peso molecular de los iones que contiene y de la densidad del mineral.

$$V_{\text{cel}} = \frac{n \cdot P_{\text{A}} \cdot M_{\text{H}}}{D} \quad (46)$$

donde:

D : representa la densidad del mineral;

n : el número de iones contenidos en la celda;

$P_{\text{A}}$  : el peso atómico medio de los iones que constituyen el mineral;



$M_H$  : la masa del hidrógeno en gramos.

Si  $Z$  representa el número de veces que los iones de la molécula química, representada por la fórmula considerada, están contenidos en el volumen de la celdilla, el volumen ocupado por un mol del mineral considerado vendrá expresado por la ecuación

$$V_r = \left( \frac{n \cdot P_A^- \cdot M_H \cdot N}{D} \right) / Z \text{ cm}^3 \cdot \text{mol} \quad (47)$$

siendo  $N$  el número de Avogadro.

V. DENSIDAD DE ENERGIA

Como ya hemos indicado, la energía reticular de un mineral es función del radio y, por tanto, del volumen, ya que el retículo de cada mineral estará condicionado por los radios de los elementos que lo constituyen. Por tanto, como ya veíamos en la introducción, es necesario determinar un parámetro que nos indique la relación existente entre el volumen y la energía. Este parámetro es la densidad de energía, que caracteriza a los diferentes minerales y que puede expresarse como:

$$D_E = - \frac{E_r}{V} \text{ Kcal/cm}^3 \quad (48)$$

La densidad de energía, o energía impartida en la unidad de volumen, tiene dimensiones de presión.

$$D_E = - \frac{E_r}{V}, \quad D_E = \frac{M L^2 T^{-2}}{L^3} = M L^{-1} T^{-2}$$

De hecho, representa un estado potencial del medio sólido que se manifiesta en los procesos competitivos de cristalización, condiciona la morfología cristalina y las estructuras de los sistemas polimineraleles.

Hay que tener en cuenta que la energía de un cristal es anisótropa, es decir, su distribución en la celdilla no es homogénea, debido a que depende, como ya hemos indicado, de la energía de enlace entre las partículas que constituyen la estructura y estas no están distribuidas homogéneamente en todas las direcciones. Si recordamos que la importancia morfológica de un elemento de un cristal, es directamente proporcional a su densidad reticular, los elementos que crecen más rápidamente serán los que tengan una mayor concentración de iones. Pero esta concentración estará limitada por el volumen de los iones. Por tanto, la velo



cidad de crecimiento de un determinado elemento está condicio  
nada por la energía y por el volumen de los elementos que con-  
tiene, es decir es función de densidad de energía o presión de  
cristalización.

## VI. ORDENACION DE LOS MINERALES.

Si efectuáramos una clasificación lineal basada en los valores de la energía reticular de los minerales encontraríamos que, debido a su carácter de energía potencial representaría directamente las propiedades químicas, físicas o cristalográficas de los minerales, sin embargo, pueden existir minerales muy dispares en composición y condiciones de génesis con valores absolutos análogos de energía reticular. Esto se debe a que al ser el valor de la energía el resultado del cociente entre la energía de enlace y el radio, pueden existir minerales que con magnitudes distintas para la energía de enlace y el radio, tengan el mismo valor absoluto de energía. Pero debemos tener en cuenta que como ya hemos indicado la energía reticular representa el conjunto ordenado de las energías de los enlaces químicos existentes entre las partículas formadoras de los minerales. Entonces el carácter de clasificación natural de los minerales no se pierde si la efectuamos de acuerdo con la naturaleza del enlace químico y de la estructura cristalina o estado de ordenación de los mismos.

De acuerdo con estos criterios, y a fin de ordenar las diferentes especies mineralógicas por el cálculo empírico de la energía reticular, establecemos dos grupos básicos de minerales, en función del carácter iónico y covalente que tengan en sus enlaces cristalokuímicos. Así tenemos:

- I. Minerales metálicos, con enlace fundamentalmente covalente (en parte metálico y molecular).
- I.a. Sustancias simples.
- I.b. Sulfuros, seleniuros, telurios, arseniuros y antimonio.
- II. Minerales que forman rocas, con enlaces preponderantemente iónicos.

II.a. Oxidos y compuestos de oxígeno.

II.b. Halogenuros.

Ambos grupos forman series de minerales en cierto modo inmiscibles en los sistemas geológicos, los minerales covalentes constituyen las formaciones que denominamos menas (ore minerals); mientras que los minerales iónicos forman las rocas (rocks minerals). Esta ordenación corresponde con las establecidas por la geoquímica para los elementos químicos. Así los elementos petrógenos de Washimtohm, H. (1920), o los oxífilos de Ramkama, K. (1949), serán aquellos que tienden a formar los minerales que constituyen las rocas por su preponderancia iónica de enlaces no saturados, y los elementos metalógenos o los sulfó fidos de la geoquímica, los que tienden a formar minerales metálicos covalentes.

Entre los dos grupos no existe un límite preciso, puesto que teóricamente la división la efectúamos por la proporción de enlace. No es extraño por tanto en algunos óxidos formen parte de los sistemas metalogénicos.

En segundo lugar debemos tener en cuenta el modo según el cual los enlaces químicos se ordenan en las estructuras reticulares y las diferencias que existen entre los distintos enlaces que los forman, puesto que ambos factores influyen, como ya hemos expuesto al hablar sobre el cálculo de la energía, en el valor de la energía reticular y determinan las propiedades de los minerales.

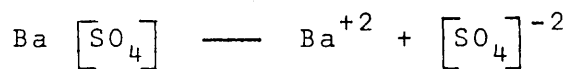
A este fin, los minerales cristalinos se pueden distribuir en dos grandes grupos:

1. Minerales con estructuras de coordinación, generalmente homodésmicas, y que corresponden a una estequiometría sencilla:  $A_a^+ B_b^-$ .
2. Minerales con grupos iónicos estructurales, en redes heterodésmicas y con relaciones estequiométricas complicadas:  $A_a^+ [B_m O_n]^-$ .

Podemos suponer que la existencia de grupos aniónicos en las estructuras de los minerales se debe a las diferencias de la energía de enlace entre los distintos iones y el oxígeno, un ión se une fuertemente a varios oxígenos y forma un grupo aniónico, mientras que el otro ión queda más débilmente unido, la distancia interiónica es más pequeña en el primer enlace debido a su mayor carácter covalente, el grupo iónico formado es tanto más independiente cuanto mayor sea la diferencia entre los enlaces A-O y los enlaces B-O.

A efectos del cálculo de la energía reticular, estos iones complejos, se comportan como iones simples caracterizados por el EK del ión complejo, Tabla VI. En la mayoría de los procesos naturales, estos iones complejos no llegan a disociarse, por lo que su energía de formación no influye en los procesos paragenéticos.

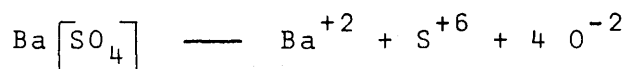
Así en el sulfato de bario  $Ba(SO_4)$  suponemos para el cálculo de su energía que el anión  $SO_4^{=}$  no se disocia.



Por tanto, su energía reticular será:

$$Er Ba [SO_4] = EK Ba^{+2} + EK [SO_4]^{-2} = -483 \text{ Kcal/mol.}$$

Si el anión sulfato se disociara tendríamos:



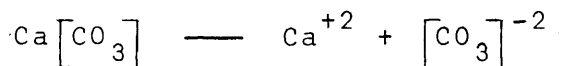
En este caso la energía reticular será:

$$Er Ba [SO_4] = EK Ba^{+2} + EK S^{+6} + 4 \cdot EK O^{-2} =$$

$$= -7738 \text{ Kcal/mol.}$$

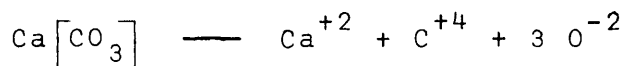
Es decir, si supusiéramos que el ión complejo  $[SO_4]^{-2}$  se disociara, obtendríamos valores energéticos excesivamente al tos para la paragénesis natural de la baritina.

En el caso de carbonato cálcico, si el anión  $[CO_3]^{-2}$  no se disocia tendremos:



$$Er \text{ Ca}[CO_3] = -622 \text{ Kcal/mol.}$$

Si el  $[CO_3]^{-2}$  se disocia tendremos:



$$Er \text{ Ca}[CO_3] = -5017 \text{ Kcal/mol.}$$

En el primer caso tenemos la calcita que paragenéticamente se encuentra en las rocas sedimentarias, en el segundo, la calcita entrará a formar parte de las carbonatitas.

En este segundo grupo debemos distinguir entre minerales complejos, formados por varios cationes, y minerales con iones complejos. Al ser la fuerza de un enlace proporcional a la relación existente entre el número de instantes en que el enlace se comporta como iónico y aquellos en que se comporta como covalente, podemos estimar su carácter de grupo individual en las estructuras cristalinas analizando la proporción de enlace covalente entre los enlaces A-O y los enlaces B-O. La proporción o grado de covalencia para los enlaces B-O calculados de acuerdo con los datos de Povarennykh son los siguientes:

	}	Tantalatos: $Ta^{4+} - O^=$	32% de covalente
		Niobatos: $Nb^{4+} - O^=$	33%
Oxidos Complejos		Wolframatos: $W^4 - O^=$	43%
	}	Ferritos: $Fe^{3+} - O^=$	46%
		Titanatos: $Ti^{4+} - O^=$	49%
	}	Silicatos: $Si^{4+} - O^=$	52%
Oxidos con grupos aniónicos		Molibdatos: $Mo^{6+} - O^=$	53%
		Boratos: $B^{2+} - O^=$	57%
	}	Cromatos: $Cr^{4+} - O^=$	59%
		Arseniatos: $As^{5+} - O^=$	62%
	}	Vanadatos: $V^{5+} - O^=$	64%
Oxidos con ión complejo		Fosfatos: $P^{5+} - O^=$	65%
		Carbonatos: $C^{4+} - O^=$	77%
	}	Sulfatos: $S^{6+} - O^=$	80%
		Nitratos: $N^5 - O^=$	91%

Cuando los enlaces A-O tienen un grado de covalencia en general inferior a un 50%, los radicales con una proporción igual o inferior a un 50% no formarán estructuras con grupos aniónicos independientes y los denominados óxidos complejos. Los radicales con una proporción dominante de covalencia, mayor de 65%, siempre formarán iones complejos; entre unos y otros tenemos una amplia serie con proporciones del 52% al 65% de covalencia en los que existen grupos aniónicos independientes que sólo cuando se aislen por enlaces moleculares al coordinarse por moléculas de agua pueden formar iones complejos o cuando se unan a cationes con enlaces marcadamente iónicos.

Desde el punto de vista cristalquímico y, por ende, geológico tiene gran importancia la ordenación estructural de estos dos grandes grupos, puesto que de ella depende la mayor parte de

las propiedades mineralógicas. En esquema podemos considerar que las distintas estructuras cristalinas se acoplan en los tipos si guientes:

- I. Minerales sin grupos aniónicos.
- II. Minerales con grupos aniónicos aislados.
- II<sub>a</sub>. Minerales con grupos aniónicos en armazón tridimensional.
- II<sub>b</sub>. Minerales con grupos aniónicos en cadenas sencillas y dobles.
- II<sub>c</sub>. Minerales con grupos aniónicos en anillos.
- II<sub>d</sub>. Minerales con grupos aniónicos en capas.

La diferencia fundamental radica en la existencia de enlaces B-O que si por un lado confieren mayor energía a las estructuras por otro las debilita al aumentar la proporción de enlaces moleculares sensiblemente menos energéticos.

Llegamos por tanto a una clasificación mineralógica de doble entrada, de acuerdo con la naturaleza del anión o del grupo aniónico, y por el tipo de ensamble estructural; o si se quiere, una ordenación en clases o subclases, que prácticamente coincide con las propuestas por Barsanov y Povarennykh.

Como los criterios de clasificación que proponemos se basan en proporciones cuantitativas de ciertas propiedades cristaloquímicas, no existen límites precisos entre los distintos grupos. Si aplicáramos rigurosamente estas premisas, perderíamos la visión mineralógica clásica, aunque, de poder efectuarlo, estaríamos más próximos a la realidad geológica. Mas que clasificar a las especies minerales nos interesa remarcar los conceptos que definen su entidad: es necesario conocer lo que cada mineral significa en su ambiente geológico, no las propiedades de una especie que condicionan su clasificación.



VII. UNIDADES EQUIVALENTES.

Si tenemos en cuenta que la energía reticular y el volumen son magnitudes extensivas, sus valores dependerán del tamaño, o extensión del sistema, que asignemos al mineral.

Por tanto, para poder comparar cuantitativamente estas magnitudes, es necesario referirlas a unidades equivalentes; es decir, definir los minerales mediante fórmulas equivalentes entre sí.

Energéticamente, cada unidad mineralógica está caracterizada por la energía impartida en una unidad másica.

Como unidad suele considerarse el mol de masa química, que representa la masa de las N moléculas fórmula contenidas en un mol (N número de Avogadro). Por tanto, la energía reticular vendrá expresada en Kcal/mol. Si recordamos la ecuación de Kapustinsky, la energía reticular de un mineral, de fórmula genérica  $A_a^+ B_b^-$ , vendrá dada por la expresión:

$$Er(AB) = - \frac{256.1}{r_A + r_B} (Z_A \cdot Z_B) n \text{ Kcal/mol}_{eq} \quad (49)$$

Por tanto, la energía contenida en una molécula depende del valor de n, que representa el número de iones contenidos en la molécula (AB). Es decir,  $n = a + b$ , siendo a y b los coeficientes estequiométricos de la fórmula considerada.

En el caso del volumen reticular, si queremos calcular el volumen ocupado por una molécula del mineral  $A_a^+ B_b^-$ , basta con recordar la fórmula (46) y tendremos:

$$Er(AB) = \left( \frac{n \cdot P_A^- \cdot M_H \cdot N}{D} \right) / Z \text{ cm}^3 \quad (50)$$

Es decir, el volumen ocupado por un mol de mineral depende igualmente del valor de n. Para el mineral considerado  $n = a + b$ .





De esta forma el volumen reticular y la energía reticular se refieren a una molécula, es decir, su extensión depende de los coeficientes estequiométricos de la fórmula mineral considerada. Como estos coeficientes están multiplicados por números aleatorios, para conseguir números enteros de fácil memorización, es necesario arbitrar una sistemática para que las fórmulas de las diferentes especies minerales tengan una extensión equivalente.

Por tanto, definiremos como energía reticular equivalente, la impartida por un mol de mineral referido a una molécula que contiene un número definido de iones. El volumen reticular equivalente es el volumen de la celda que contiene ese mismo número de iones.

Como ya hemos indicado, el referir la energía y el volumen a unidades equivalentes, nos permite comparar los valores obtenidos para los distintos minerales, lo cual hará posible el estudiar las transformaciones que pueden tener lugar entre los minerales.

Es sabido que la interacción entre los diferentes sistemas está regulado por los grados internos de libertad (gradiente de parámetros extensivos) o por los grados de libertad externos (gradiente parámetro intensivos).

Si hemos supuesto al edificio cristalino, como un agregado de elementos de densidad de energía ( $EK/V$ ) representativos de los elementos del sistema, podemos esperar que la interacción entre los distintos sistemas minerales se produzca mediante gradientes de volumen, presión, energía, composición y potencial químico.

Sin embargo, como los EK están ligados a la composición iónica, sólo se producirán interacciones cuando existan gradientes de composición, que puede realizarse mediante flujos de componentes aniónicos o flujos de componentes catiónicos.

Para definir estas posibles interacciones, hemos definido las fórmulas equivalentes correspondientes a los moles equivalentes aniónico y catiónico. Con ello conseguimos mantener consta ntes el número de aniones y de cationes, al estudiar las interacciones. Es decir, suponemos que cuando utilizamos el equivalente aniónico, los cambios mineralógicos, que observemos entre los sistemas minerales, se producirán únicamente por la acción de los cationes y cuando empleamos el equivalente catiónico, serán los aniones los causantes de las interacciones entre los sistemas minerales.

Cuando no se esperan gradientes de composición, definimos la fórmula equivalente correspondiente al mol equivalente iónico, es decir, mantenemos constante el volumen de los sistemas minerales. Por lo tanto, las interacciones entre ellos sólo pueden realizarse mediante gradientes de presión de cristalización o la ejecución de trabajo mecánico o químico.

En todos los casos deberá existir una congruencia entre las posibles interacciones de las fases minerales y los potenciales termodinámicos que regulan la evolución geológica.

A la vista de lo expuesto, para poder determinar qué parte de la molécula cristaloquímica considerada interviene en cada caso de las interacciones entre los minerales, hemos estudiado cuatro tipos de moles equivalentes, que nos deben permitir cubrir los posibles caminos seguidos en una transformación mineral.

Para estimar el valor de la energía reticular hemos supuesto que toda molécula mineral está formada por una parte positiva y otra negativa que pueden representarse genéricamente como  $(A_a^+ B_b^-)$ . Donde a y b son los coeficientes estequiométricos.

En esta fórmula general, la parte aniónica  $(B_b^-)$  puede representar:

1. Iones simples; tales como  $O^{=}$ ,  $F^{-}$ ,  $Cl^{-}$ , etc., que generalmente forman estructuras homodésmicas con iones independientes. En este caso la fórmula general puede escribirse como  $(A_a^+ X_x^-)$ .

2. Grupos iónicos constituidos por iones complejos, que por estar fuertemente ligados entre sí dan lugar a unidades estructurales características, las cuales pueden llegar a poseer rotación térmica libre. Estos iones complejos no se disocian debido a la elevada proporción de enlace covalente, la fuerza del enlace del ión complejo es muy superior a la existente entre estos y los cationes, que se produce por un efecto de resonancia con el oxígeno del ión complejo.

En este caso la fórmula de la molécula mineral puede escribirse  $A_a^+ [BO_m]_c^-$ , donde  $[BO_m]_c^-$  representa al ión complejo:  $[OH]^{-1}$ ,  $[CO_2]^{-1}$ ,  $[SO_4]^{-2}$ , etc.  $[BO_m]_c^-$  se ha considerado a todos los efectos como un ión simple de acuerdo con el cálculo de los EK.

3. Grupos iónicos, pero no formados por iones complejos sino por radicales aniónicos. Se produce cuando la diferencia entre la fuerza de los enlaces del ión central del complejo aniónico y la del resto de los enlaces de la estructura no es muy acusada. Este grupo no poseerá las propiedades de un ión complejo, pero si estará claramente diferenciado en la estructura.

Este es el caso de los silicatos  $SiO_4 [(Si,Al) O_4]$ , de los titanatos, etc.

La fórmula general se representa:  $A_a^+ [Z_z^+ O_o^-]_x^-$ .

4. Los tipos 2 y 3 pueden presentarse juntos. Las estructuras minerales en este caso, pueden considerarse que están formadas por capas alternantes enlazadas entre sí por medio de cationes situadas entre ambas. Cuando los dos tipos estructurales están bien diferenciados dan lugar a minerales con propiedades organo-eléctricas típicas, fácilmente exfoliables según el plano basal,

como sucede con las micas. En este caso, la fórmula general vendrá expresada como:  $A_a^+ \left[ \left( Z_z^+ O_o^- \right)_x^- \left( BO_m \right)_c^- \right]$ .

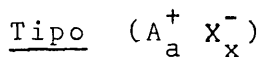
El ión complejo  $\left[ BO_m \right]_c^-$  puede estar sustituido por aniones simples principalmente Cl y F.

### VII.1. EQUIVALENTES EMPLEADOS.

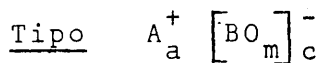
De acuerdo con estos cuatro tipos de moléculas estructurales se han establecido los conceptos de equivalencia siguiente:

#### VII.1.1. Moléculas ión equivalente.

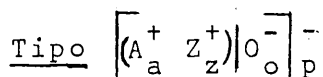
Suponemos que dos moles son iónicamente equivalentes cuando la suma de los coeficientes estequiométricos de los aniones y cationes contenidos en la molécula es 2. Para los cuatro tipos de estructuras, consideraremos equivalentes iónicas las fórmulas que contengan los n iones siguientes:



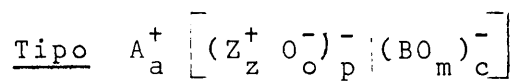
$$n = \frac{2(a + x)}{a + x}$$



$$n = \frac{2(a + c)}{a + c}$$



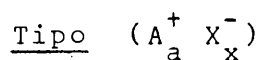
$$n = \frac{2(a + (z \cdot p) + (o \cdot p))}{(a + (z \cdot p) + (o \cdot p))}$$



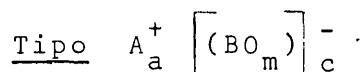
$$n = \frac{2(a + (z \cdot p) + (o \cdot p) + c)}{(a + (z \cdot p) + (o \cdot p) + c)}$$

VII.1.2. Molécula anión equivalente.

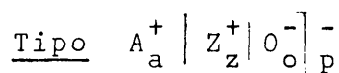
Hemos definido como "mol equivalente aniónico" aquel en que la suma de los coeficientes estequiométricos de los aniones contenidos en él, sea la unidad, es decir:



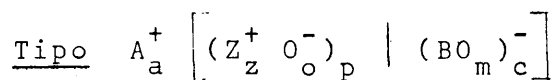
$$n = (a + x) / x$$



$$n = (a + c) / c$$



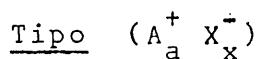
$$n = (a + (z \cdot p) + (o \cdot p) / (o \cdot p))$$



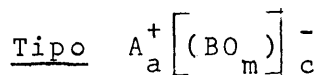
$$n = (a + (z \cdot p) + (o \cdot p) + c) / ((o \cdot p) + c)$$

VII.1.3. Molécula equivalente catiónica.

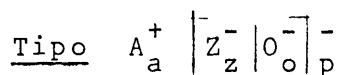
Se considera como "mol equivalente catiónico" aquel en que la suma de los coeficientes estequiométricos de los cationes que contiene la molécula es la unidad, es decir:



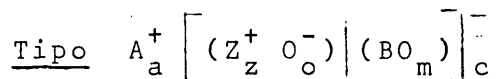
$$n = (a + x) / a$$



$$n = (a + c) / a$$



$$n = (a + (z \cdot p) + (o \cdot p)) / a$$



$$n = (a + (z \cdot p) + (o \cdot p) + c) / a$$

#### VII.1.4. Molécula equivalente radical.

Como ya hemos indicado, cuando en la estructura aparece un ión complejo, estructuras tipo  $A_a^+ [(BO_m)]_c^-$ , al calcular la energía de la estructura no hemos tenido en cuenta la energía de los enlaces existentes entre el ión central del ión complejo y los restantes iones que lo forman, sino que sólo hemos considerado la energía que aporta el enlace entre el ión complejo, parte aniónica de la molécula mineral, y la parte catiónica. Para estas estructuras, definimos como "mol equivalente radical" aquella en las que el coeficiente estequiométrico del ión complejo sea la unidad, es decir:

$$n = (a + c) / c$$

En las estructuras que presentan radicales aniónicos,

tipo  $A_a^+ [(Z_z^+ O_o^-)]_p^-$  hemos tenido en cuenta la energía que aportan los enlaces existentes entre el ión central de Si o Al, y los oxígenos que están en coordinación tetraédrica con él. Como estos tetraedros (Si, Al)  $O_4$  generalmente se unen entre sí y forman cadenas, anillos, etc., establecemos como molécula equivalente radical aquella que contenga un único tetraedro (Si, Al)  $O_4$ . Es decir, aquella en que la suma de los coeficientes estequiométricos del silicio y del aluminio en coordinación tetraédrica sea la unidad. Por tanto en las estructuras del tipo  $A_a^+ [(Z_z^+ O_o^-)]_p^-$  el mol equivalente radical se ha calculado de modo que la parte positiva del radical aniónico sea igual a la unidad, es decir:

$$n = (a + (z \cdot p) + (o \cdot p)) / (z \cdot p)$$

En las estructuras del tipo  $A_a^+ [(Z_z^+ O_o^-)_p | (BO_m)_c]^-$  que son el resultado de la conjunción de las unidades aniónicas de los tipos (2) y (3). Consideramos como mol equivalente radical aquel en que se verifica que:

$$n = (a + (z \cdot p) + (o \cdot p) + c) / ((z \cdot p) + c)$$

Es decir, referido a una única unidad aniónica.

## VII.2 MODELO DE CALCULO DE LAS UNIDADES EQUIVALENTES.

Para facilitar la comprensión de las unidades equivalentes empleadas incluimos el siguiente ejemplo.

Moléculas tipo  $(A_a^+ X_x^-)$

Como ejemplo representativo de los minerales representados por la fórmula general  $(A_a^+ X_x^-)$ , tomamos un óxido:

Corindón:  $Al_2O_3$

Er  $Al_2O_3 = 3.580$  Kcal/mol.

Vr  $Al_2O_3 = 25,750$  cm<sup>3</sup>/mol.

Equivalente iónico.

$$n = \frac{2(2 + 3)}{(2 + 3)}$$

$$Er Al_{2/2,5}O_{3/2,5} = -1432 \text{ Kcal/mol. equiv. iónico.}$$

$$Vr Al_{2/2,5}O_{3/2,5} = 10,300 \text{ cm}^3/\text{mol. equiv. iónico.}$$

Equivalente aniónico.

$$n = \frac{2 + 3}{3}$$

$$Er Al_{2/3}O = -1193,333 \text{ Kcal/mol. equiv. aniónico.}$$

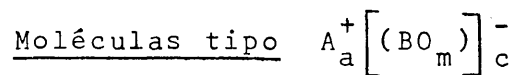
$$Vr Al_{2/3}O = 8,583 \text{ cm}^3/\text{mol. equiv. aniónico.}$$

Equivalente catiónico.

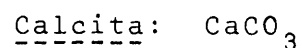
$$n = \frac{2 + 3}{2}$$

$$Er AlO_{3/2} = -1790 \text{ Kcal/mol. equiv. catiónico.}$$

$$Vr AlO_{3/2} = 12,875 \text{ cm}^3/\text{mol. equiv. catiónico.}$$



Tomamos como ejemplo un carbonato:





$$Er \text{ CaCO}_3 = -622 \text{ Kcal/mol.}$$

$$Vr \text{ CaCO}_3 = 110,064 \text{ cm}^3/\text{mol.}$$

Equivalente iónico.

$$n = \frac{2 (1 + 1)}{(1 + 1)}$$

$$Er \text{ CaCO}_3 = -622 \text{ Kcal/mol. equiv. iónico.}$$

$$Vr \text{ CaCO}_3 = 110,064 \text{ cm}^3/\text{mol. equiv. iónico.}$$

Equivalente aniónico.

$$n = \frac{(1 + 1)}{1}$$

$$Er \text{ CaCO}_3 = -622 \text{ Kcal/mol. equiv. aniónico.}$$

$$Vr \text{ CaCO}_3 = 110,064 \text{ cm}^3/\text{mol. equiv. aniónico.}$$

Equivalente catiónico.

$$n = \frac{(1 + 1)}{1}$$

$$Er \text{ CaCO}_3 = -622 \text{ Kcal/mol. equiv. catiónico.}$$

$$Vr \text{ CaCO}_3 = 110,064 \text{ cm}^3/\text{mol. equiv. catiónico.}$$

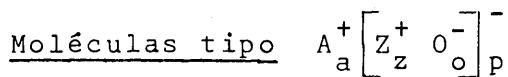


Equivalente radical.

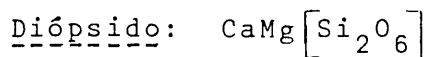
$$n = \frac{(1 + 1)}{1}$$

$$Er \text{ CaCO}_3 = 622 \text{ Kcal/mol. equiv. radical.}$$

$$Vr \text{ CaCO}_3 = 110,064 \text{ cm}^3/\text{mol. equiv. radical.}$$



Como ejemplo consideremos un silicato.



$$Er \text{ CaMg} \left[ \text{Si}_2\text{O}_6 \right] = -8.087 \text{ Kcal/mol.}$$

$$Vr \text{ CaMg} \left[ \text{Si}_2\text{O}_6 \right] = 65,942 \text{ cm}^3/\text{mol.}$$

Equivalente iónico.

$$n = \frac{2 (1 + 1 + 2 + 6)}{(1 + 1 + 2 + 6)}$$

$$Er \text{ Ca}_{1/5}\text{Mg}_{1/5} \left[ \text{Si}_{2/5}\text{O}_{6/5} \right] = -1.619,387 \text{ Kcal/mol. equiv. iónico.}$$

$$Vr \text{ Ca}_{1/5}\text{Mg}_{1/5} \left[ \text{Si}_{1/5}\text{O}_{6/5} \right] = 13,184 \text{ cm}^3/\text{mol. equiv. iónico.}$$

Equivalente aniónico.

$$n = \frac{1 + 1 + 2 + 6}{6}$$

$$\text{Er Ca}_{1/6}\text{Mg}_{1/6}[\text{Si}_{2/6}\text{O}^-] = 1349,489 \text{ Kcal/mol. equiv. ani\u00f3nico.}$$

$$\text{Vr Ca}_{1/6}\text{Mg}_{1/6}[\text{Si}_{2/6}\text{O}^-] = 10,987 \text{ cm}^3/\text{mol. equiv. ani\u00f3nico.}$$

Equivalente cati\u00f3nico.

$$n = \frac{1 + 1 + 2 + 6}{1 + 1 + 2}$$

$$\text{Er Ca}_{1/4}\text{Mg}_{1/4}[\text{Si}_{2/4}\text{O}_{6/4}] = -2.024,233 \text{ Kcal/mol. equiv. cati\u00f3nico.}$$

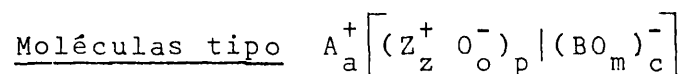
$$\text{Vr Ca}_{1/4}\text{Mg}_{1/4}[\text{Si}_{2/4}\text{O}_{6/4}] = 16,480 \text{ cm}^3/\text{mol. equiv. cati\u00f3nico.}$$

Equivalente radical.

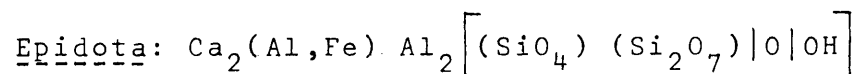
$$n = \frac{1 + 1 + 2 + 6}{2}$$

$$\text{Er Ca}_{1/2}\text{Mg}_{1/2}[\text{SiO}_{6/2}] = -4.048,467 \text{ Kcal/mol. equiv. radical.}$$

$$\text{Vr Ca}_{1/2}\text{Mg}_{1/2}[\text{SiO}_{6/2}] = 32,961 \text{ cm}^3/\text{mol. equiv. radical.}$$



Como ejemplo representativo de los minerales que siguen esta f\u00f3rmula general tomamos otro silicato.

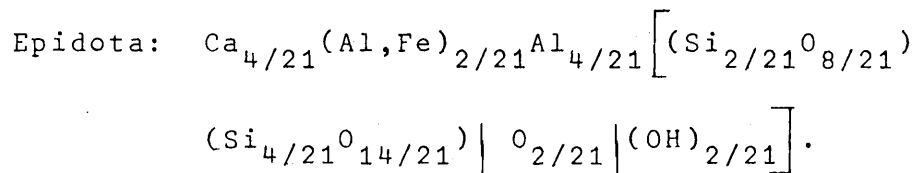


$$Er \text{ Ca}_2(\text{Al,Fe})\text{Al}_2 \left[ (\text{SiO}_4)(\text{Si}_2\text{O}_7) | \text{O} | \text{OH} \right] = -16.439 \text{ Kcal/mol}$$

$$Vr \text{ Ca}_2(\text{Al,Fe})\text{Al}_2 \left[ (\text{SiO}_4)(\text{Si}_2\text{O}_7) | \text{O} | \text{OH} \right] = 147,056 \text{ cm}^3/\text{mol}.$$

Equivalente iónico.

$$n = \frac{2(2 + 1 + 2 + 1 + 4 + 2 + 7 + 1 + 1)}{(2 + 1 + 2 + 1 + 4 + 2 + 7 + 1 + 1)}$$

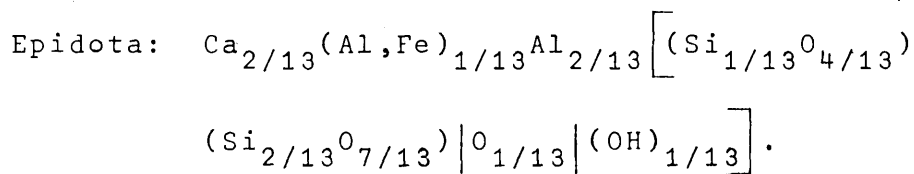


$$Er = -1565,613 \text{ Kcal/mol. equiv. iónico.}$$

$$Vr = 14,005 \text{ cm}^3/\text{mol equiv. iónico.}$$

Equivalente aniónico.

$$n = \frac{2 + 1 + 2 + 1 + 4 + 2 + 7 + 1 + 1}{4 + 7 + 1 + 1}$$

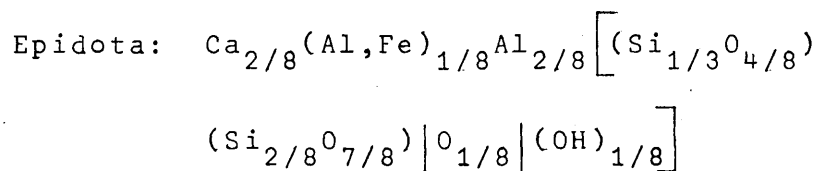


$$Er = -1264,534 \text{ Kcal/mol. equiv. aniónico.}$$

$$Vr = 11,312 \text{ cm}^3/\text{mol. equiv. aniónico.}$$

Equivalente catiónico.

$$n = \frac{(2 + 1 + 2 + 1 + 4 + 2 + 7 + 1 + 1)}{(2 + 1 + 2 + 1 + 3)}$$

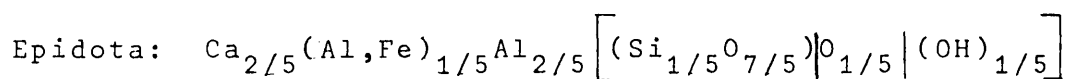


Er = -2054,868 Kcal/mol. equiv. catiónico.

Vr = 18,382 cm<sup>3</sup>/mol. equiv. catiónico.

Equivalente radical.

$$n = \frac{(2 + 1 + 2 + 1 + 4 + 2 + 7 + 1 + 1)}{1 + 2 + 1 + 1}$$



Er = -3287,800 Kcal/mol. equiv. radical.

Vr = 29,411 cm<sup>3</sup>/mol. equiv. radical.

VIII. METODO ESTADISTICO.

Como ya hemos indicado en la introducción, el objeto de este trabajo es verificar si es posible ordenar, en función de sus magnitudes reticulares, los minerales que presentan una cierta semejanza estructural y de composición.

Por tanto, es necesario intentar determinar, mediante ecuaciones termodinámicas, el equilibrio existente entre las distintas especies minerales que constituyen las series morfótropas.

Para que suceda esto es necesario que los valores de las magnitudes estructurales, densidad de energía y volumen reticular, se modifiquen para las distintas especies minerales, de forma que entre ambas exista una cierta relación, que viene expresada por la ecuación (11)

$$\frac{-E_r}{V} = -\mu \frac{1}{V} + P_D$$

Si observamos esta ecuación, vemos que representa la ecuación de una recta. Por tanto, de ser cierta la hipótesis defendida, la relación existente entre los valores de las magnitudes reticulares densidad de energía e inversa de volumen reticular, será una regresión lineal. Esta regresión lineal, permitirá conocer el valor que toman el potencial químico ( $\mu$ ) y la presión de disociación ( $P_D$ ) para las distintas asociaciones minerales (series morfótropas) y para especies minerales independientes. Estas últimas, como ya hemos indicado, presentan una serie de imperfecciones, que se reflejarán en una variabilidad en los valores que toman los parámetros reticulares de su molécula cristaloquímica, y por tanto, cada especie mineral estará representada por una serie de valores de  $D_E$  y  $1/V$ , que nos permitirán obtener la ecuación de la regresión existente entre ellos.

Para poder verificar esta hipótesis, es necesario demostrar que la regresión existente entre las variables es lineal. Es decir, que siguen una ecuación del tipo:

$$Y = A + BX \quad (51)$$

El procedimiento estadístico seguido para establecer la regresión entre ambas variables fué el de los mínimos cuadrados que nos permite determinar A y B con estimables propiedades estadísticas. De acuerdo con los trabajos de Dixon y Massey (1959), Krumbein y Graybill (1965), Guenther (1965) y J. Mottles (1960).

Un paso necesario antes de calcular la ecuación de la regresión para las distintas asociaciones, es el determinar si las variables estudiadas, presión de cristalización y volumen reticular están correlacionadas, es decir, si el coeficiente de correlación entre ambas es lo suficientemente significativo como para poder inferir que existe una regresión lineal entre ellas.

El estimador estadístico utilizado para estimar este coeficiente de correlación fué:

$$\hat{\rho} = \frac{\Sigma(y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{\sqrt{\Sigma(x_i - \bar{x})^2 \Sigma(y_i - \bar{y})^2}} \quad (52)$$

En el caso de una distribución normal bidimensional, puede considerarse como una medida de la correlación, en el sentido de que es un indicador de la densidad de concentración alrededor de la línea de regresión para la distribución de y conocido x.

Se puede demostrar que:

1. El valor de  $\hat{\rho}$  está comprendido entre +1 y -1.
2. Cuando x e y tienen una distribución normal bidimensional x e y son independientes sí y sólo si  $\hat{\rho} = 0$ .



3. Si  $\hat{\rho} = -1$  ó  $\hat{\rho} = +1$  todos los puntos  $(x, y)$  están situados sobre la línea de regresión.
4. La distribución de  $y$  para cualquier  $x$  está fuertemente concentrada alrededor de la línea de regresión si  $\hat{\rho}$  está próximo a  $-1$  ó a  $+1$ .
5. La varianza de la regresión  $\sigma^2$  de  $y$  sobre  $x$  es máxima si  $\hat{\rho} = 0$ . Cuando más dista  $\hat{\rho}$  de  $0$ , menor es la varianza de  $y$  para una  $x$  dada. Cuando  $\hat{\rho} = +1$  ó  $\hat{\rho} = -1$ , la varianza  $\sigma^2(y/x)$  es cero.
6. Si  $\hat{\rho}$  es positivo, la línea de regresión tiene pendiente positiva, y el mayor de los valores de  $x$  tiende a corresponder con el mayor valor de  $y$ . Si es negativo, la línea de regresión es negativa y el mayor valor de  $x$  tiende a corresponder con el menor valor de  $y$ .

#### VIII.1. NIVEL DE SIGNIFICACION DEL COEFICIENTE DE CORRELACION.

Hay que tener en cuenta que en la ecuación (52) no se conocen ni la media ni la varianza verdadera de la población mineral estudiada, pues únicamente conocemos la media y la varianza aproximadas, inferidas a partir de unos elementos de dicha población considerados como una muestra aleatoria, ya que nunca estudiamos todos los elementos de la población, si no una muestra aleatoria  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ . Por lo tanto es necesario determinar si el coeficiente de correlación estimado es realmente representativo de la población. Para ello el estadístico utilizado es:

$$R = \frac{\hat{\rho}\sqrt{n-2}}{\sqrt{1-\hat{\rho}^2}} \quad (53)$$

Si  $R$  es mayor o igual que el valor que la distribución  $t$  toma, con  $n - 2$  grados de libertad, para un determinado nivel de confianza, el coeficiente de correlación estimado  $\hat{\rho}$  puede considerarse como representativo de la población estudiada, para ese



nivel de confianza. Es decir, conocemos la probabilidad, de que  $\hat{\rho}$  represente la correlación existente entre las variables estudiadas, presión de cristalización y volumen.

### VIII.2. ECUACION DE LA REGRESION.

Para aquellas poblaciones, que tienen un coeficiente de correlación significativo se determinaron las ecuaciones de la regresión por el método de mínimos cuadrados. Sean  $(x_1, y_1)$ ,  $(x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$  los n pares de valores que suponemos verifican la ecuación.

$$Y = A + BX$$

Esta ecuación estará determinada si conocemos  $A \pm e$  y  $B \pm e$ . El coeficiente B, que permite conocer el aumento o disminución del valor medio de la variable, y, al aumentar x, representa la pendiente de la recta de regresión y puede estimarse mediante la ecuación:

$$B = \frac{\Sigma(y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{\Sigma(x_i - \bar{x})^2} \quad (54)$$

Teniendo en cuenta el espacio presión de cristalización inversa de volumen, en que se sitúa la recta de regresión, el coeficiente B representa el potencial químico  $\mu$ , que define a la asociación mineral estudiada.

A, representa la ordenada en el origen o constante de la regresión y puede determinarse por la ecuación:

$$A = \bar{y} - B\bar{x} \quad (55)$$

El valor de A nos permitirá conocer la presión de disociación, es decir, la presión que el medio externo ejerce contra el mineral.

La varianza  $\sigma^2$  y/x de la regresión se determina mediante la expresión:

$$\sigma^2 = \frac{1}{n - 2} \left( \Sigma(y_i - \bar{y})^2 - \frac{\Sigma(y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{\Sigma(x_i - \bar{x})^2} \right) \quad (56)$$

n es el tamaño de la muestra o número de pares de valores. La varianza nos permite determinar el error e con que conocemos A y B.

El intervalo de confianza del coeficiente A, que nos permite conocer entre que límites se mueve el coeficiente calculado, para un determinado nivel de confianza. Se ha calculado por la ecuación:

$$A = A \pm t(n - 2) \sqrt{\frac{\sigma^2 y/x \Sigma x_i^2}{n \Sigma (x_i - \bar{x})^2}} \quad (57)$$

El intervalo de confianza del intervalo B, se calculó por la ecuación:

$$B = B \pm t(n - 2) \sqrt{\frac{\sigma^2 y/x}{\Sigma (x_i - \bar{x})^2}} \quad (58)$$

t(n - 2) representa en ambos casos el valor de distribución t para un determinado nivel de confianza.

### VIII.3. CONTRASTE DE LINEABILIDAD DE LA REGRESION.

Mediante el coeficiente de correlación podemos determinar si la distribución de y para cualquier x está o no fuertemente concentrada alrededor de la línea de regresión. Pero sólo con el valor de  $\hat{\rho}$  no podemos determinar la probabilidad de que la línea de regresión calculada sea una recta, para poder determinar esta probabilidad recurrimos al contraste de lineabilidad.

Para contrastar la hipótesis de la lineabilidad de la regresión, analizamos la varianza. Contrastaremos si la media de cada grupo está situada sobre la recta de regresión. Compara

mos la varianza dentro de los grupos con la varianza de las desviaciones de las medias de los grupos con respecto a la línea de regresión estimada.

Los cuadrados medios apropiados para determinar la razón F son:

	Suma de cuadrados	Grados de libertad
Debido a la regresión	$B^2 \Sigma(x-\bar{x})^2$	1
Respecto a la regresión	$\Sigma(y-\bar{y}) - B^2 \Sigma(x-\bar{x})^2$	n - 2
Totales	$\Sigma(y-\bar{y})^2$	

Puede demostrarse que, para muestras aleatorias procedentes de una población en la cual las observaciones de y son independientes, y están distribuidas normalmente, la suma de los cuadrados debida a la regresión y respecto a la regresión divididas por los correspondientes grados de libertad, dan estimaciones independientes e insesgadas de la varianza de y en la población. De aquí se deduce que si la estimación de la varianza debida a la regresión es significativamente mayor que la estimación de la varianza respecto a la regresión cuando la regresión determinada es significativa. El valor

$$F_{(1/n-2)} = \frac{B^2 \Sigma(x_i - \bar{x})^2}{\Sigma(y_i - \bar{y})^2 - B^2 \Sigma(x_i - \bar{x})^2} \quad (56)$$

obtenido mediante el cociente de ambas estimaciones, nos permite conocer la probabilidad de que la línea de regresión sea una recta, mediante la utilización de las tablas correspondientes.

Los cálculos necesarios para la determinación de estos estadísticos se realizaron mediante el programa REMICUA II implementado en FORTRAN V por el autor de este trabajo. La mayor parte de los resultados se obtuvieron mediante el empleo del ordenador UNIVAC 1108 de que dispone el Centro de Proceso de Datos del Ministerio de Educación y Ciencia. También se utilizó el ordenador UNIVAC 1106 de la J.E.N.

IX.- VERIFICACION DEL MODELO DE ORDENACION ENERGETICA DE LOS MINERALES.

Una vez definido el método estadístico, es necesario indicar las condiciones establecidas para poder inferir que un determinado mineral, o grupo mineral, se ordena energéticamente según una recta de equilibrio termodinámico en el espacio presión-volumen definido por la ecuación (11).

Estas condiciones son:

a) Como ya hemos indicado anteriormente, el valor del coeficiente de correlación estimado como representativo de la población estudiada, no permite inferir si las variables estudiadas están o no correlacionadas, ya que un valor determinado de  $\hat{\rho}$ , 0,8 por ejemplo, puede ser significativo en una población con un tamaño elevado y no serlo en poblaciones cuyo tamaño sea reducido. Para poder inferir si en las asociaciones minerales estudiadas existía correlación significativa entre la densidad de energía y la inversa del volumen reticular establecimos que únicamente aceptaríamos la existencia de la correlación para que aquellas asociaciones en las cuales la probabilidad de que el coeficiente de correlación estimado  $\hat{\rho}$  representara a la población estudiada fuera del 99%. Es decir, para aquellas poblaciones en las cuales el valor obtenido para el estadístico R fuera mayor que el valor de la distribución de STUDENT para  $n-2$  grados de libertad y una probabilidad del 99,5%. Este límite debe cumplirse para las cuatro unidades equivalentes utilizadas, ya que estos cuatro equivalentes no son otra cosa que distintas expresiones de una misma fórmula mineral.

b) El objeto fundamental de este trabajo es el demostrar que los distintos grupos minerales pueden ordenarse según rectas de equilibrio termodinámico. Por tanto era fundamental el poder asegurar que la regresión existente entre las variables

estudiadas era lineal; para ello establecimos la siguiente condición: consideramos que cualquier asociación mineral definida por las variables densidad de energía e inversa del volumen reticular podría definirse según una recta si la probabilidad obtenida a partir del contraste de lineabilidad es mayor del 99,99%.

c) Según establecimos en la ecuación general (11), el valor de la constante de la regresión debe representar una cierta presión de disociación, por lo que sólo puede tomar valores nulos o positivos. Debemos tener en cuenta que esta constante representa la ordenada en el origen de la recta de regresión y al ser la regresión estudiada la de la presión de cristalización sobre la inversa del volumen, esta ordenada indica el valor que toma, para cada asociación mineral, la presión cuando el volumen se hace  $\infty$ , ( $1/V = 0$ ). Esta presión que denominamos presión de disociación, nunca puede tomar valores negativos pues indica la presión que el medio externo ejerce contra el mineral y por tanto, debe tener sentido opuesto a la presión de cristalización, o presión que el mineral ejerce contra el medio externo. Dado que hemos considerado que la presión de cristalización tiene signo negativo, la presión de disociación debe ser positiva..

#### IX.1.- DATOS EMPLEADOS.

Los datos utilizados en este trabajo pueden dividirse en dos grandes grupos. El primero comprende todos aquellos minerales cuyas estructuras corresponden a los tipos 3) y 4) señalados en el apartado "Unidades Equivalentes" Es decir, aquellos minerales que presentan radicales en su estructura (representados por los silicatos). En este caso, los datos utilizados fueron todos los análisis iónicos disponibles de cada una de las especies minerales existentes en la obra de Deer, Howie y Zussman, Rock Forming Minerals. El haber utilizado todos los análisis se debe a que las fórmulas genéricas que representan a los silicatos, son realmente una idealización de la composición media y dada la complejidad de las estructuras de los silicatos, estas fórmulas mu-



chas veces no reflejan las posibles variaciones de una misma especie.

De todos los análisis que recopila el libro Rock Forming Minerals, hubo que prescindir de aquellos que no incluyen el dato correspondiente a su densidad, ya que para poder estudiar la variación de volumen que presenta cada especie mineral, calculamos el volumen no a partir de su celdilla fundamental, sino a partir del peso molecular y de la densidad.

Teniendo en cuenta el carácter de recopilación de datos que presenta el referido texto, supusimos que los datos obtenidos a partir de él eran aleatorios y que no debían presentar ningún sesgo estadístico, que invalidara los resultados obtenidos.

El segundo grupo de datos corresponden a los tipos 1) y 2), es decir, aquellos minerales en que la parte aniónica de la molécula mineral está representada bien por iones independientes, caso de los óxidos y los haluros, o bien por iones complejos caso de los sulfatos, carbonatos, etc. Para la determinación de las rectas de equilibrio termodinámico correspondientes a estas clases minerales, los datos utilizados fueron los que nos suministran directamente las fórmulas de cada especie mineral. Esto se hizo así teniendo en cuenta: a) que el número de análisis disponibles es muy reducido e incompleto; b) las estructuras en estas clases minerales presentan una menor variabilidad y por tanto las variaciones que puede presentar cada especie mineral son mucho más reducidas que las que se producen en el caso de los silicatos. Las fórmulas utilizadas fueron tomadas fundamentalmente de Mineralogische Tabellen H. STRUNZ y de Dana's System of Mineralogy.

#### IX.2.- MODELOS DE CALCULO DE LAS RECTAS DE EQUILIBRIO TERMODINAMICO.

Para verificar la tesis sostenida en este trabajo, se eligieron cuatro grupos de minerales representativos de cada uno

de los cuatro tipos de estructuras en que hemos dividido las distintas clases de minerales:

IX.2.1. Estructuras tipo  $A_a^+ \left[ \begin{matrix} Z^+ & 0^- \\ z & o \end{matrix} \right]_x^-$

El grupo mineral elegido para comprobar si la hipótesis propuesta es válida para minerales de este tipo fué el grupo de los granates cuya fórmula general es  $X_3Y_2[SiO_4]_3$ .

Para el estudio estadístico disponíamos de 31 análisis distribuidos de la siguiente forma:

- Almandino: 11
- Piropo: 3
- Espesartita: 3
- Grosularia: 7
- Andreadita: 4
- Uvarovita: 3

Los resultados obtenidos fueron:

Coefficiente de correlación:

Aplicando la fórmula (52).

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
$\hat{\rho}$	0,997	0,997	0,996	0,994

Varianza de la regresión:

Aplicando la ecuación (56).

Los valores obtenidos fueron:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
$\sigma^2_{y/x}$	0,333	0,305	0,521	0,730

Como podemos observar, los valores obtenidos son bajos, como corresponde a los coeficientes de correlación obtenidos.

Nivel de significación del coeficiente de correlación:

Aplicando el estimador R obtenido mediante la ecuación (53).

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
R	76,743	80,273	61,287	51,722

El valor que toma la distribución de STUDENT para n-2 grados de libertad (29 en este caso) con una probabilidad del 99,5% es de 2,756.

Por lo tanto la probabilidad obtenida de que el coeficiente de correlación estimado  $\hat{\rho}$  represente a la población de los gra



nates es, para los cuatro equivalentes estudiados, mayor del 99%.

Contraste de lineabilidad:

Los valores obtenidos para la razón F, aplicando (59), para los cuatro equivalentes fueron:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
$F_{(1/n-2)}$	5.889,630	6.443,755	3.756,139	2.675,197

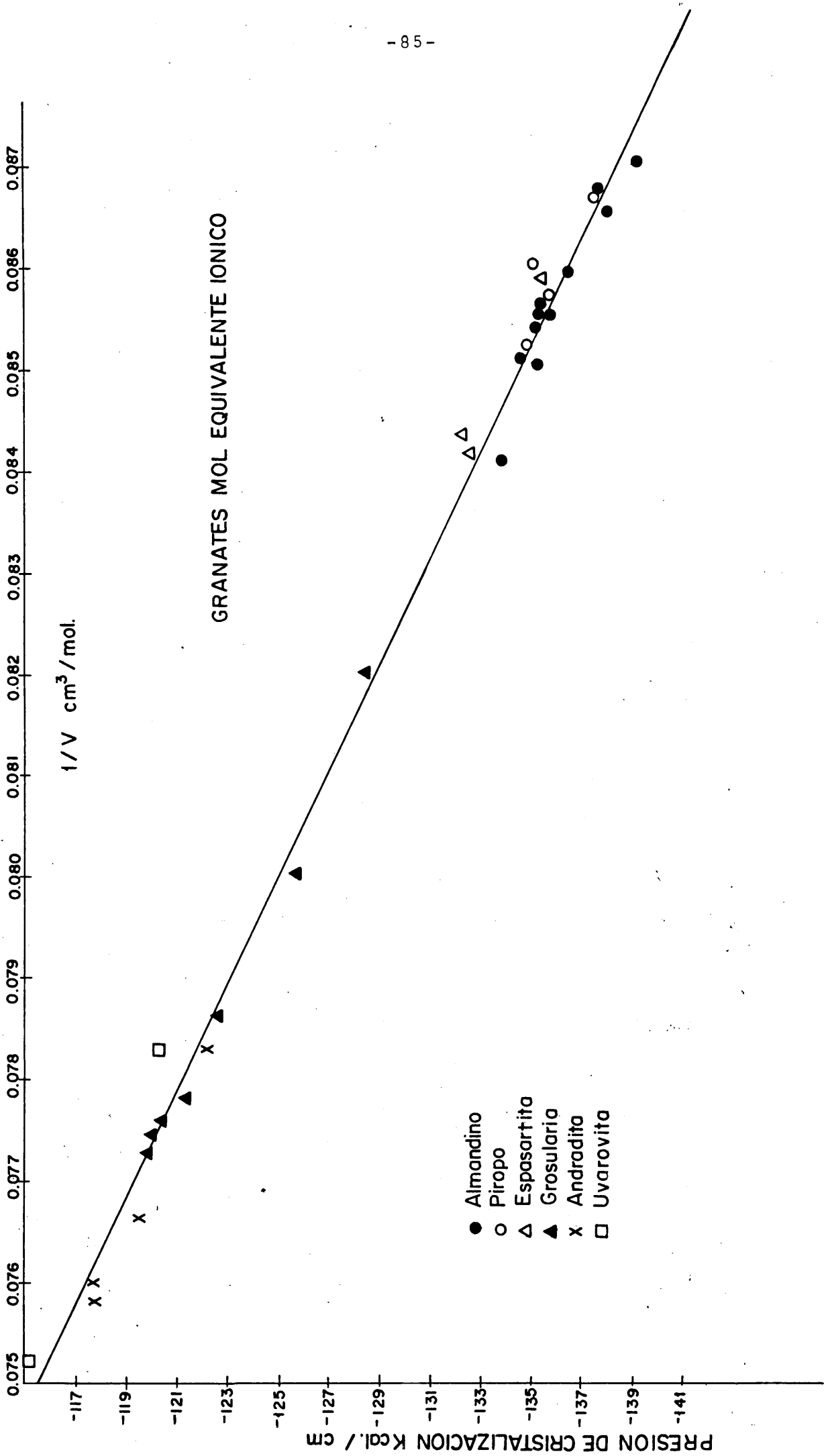
El valor que toma la razón F para 1 sobre 29 grados de libertad con una probabilidad del 99,99% está comprendido entre 20,092 y 21,663. Es decir, podemos asegurar que la línea de regresión es una recta con una probabilidad mayor del 99,99%.

A la vista de los resultados obtenidos no parece aventurado asegurar que los granates se sitúan a lo largo de una recta de equilibrio termodinámico,  $D_E = -\mu \frac{1}{V} + P$ , en un diagrama presión-volumen. En el gráfico de la página siguiente puede verse cómo se distribuyen los análisis a lo largo de la recta para el equivalente iónico.

Una vez definida la regresión como lineal, es necesario determinar los coeficientes de la recta que nos permitirán conocer el potencial químico de esta asociación mineral. Esto es, determinar el coeficiente de regresión, B, y la constante de la regresión, A.

Coefficiente de la regresión:

De acuerdo con la ecuación (54) los valores obtenidos pa



ra el grupo de los granates fueron:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
B = $\mu$	-1905,419	-1509,184	-2369,77	-6398,06

Constante de la regresión:

A partir de la ecuación (55) obtuvimos los siguientes valores:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
A = $P_c$	27,319	27,588	26,486	28,713

Ecuaciones de las rectas de equilibrio termodinámico para la asociación mineral constituida por el grupo de los granates:

Las ecuaciones que definen las rectas de equilibrio termodinámico para esta asociación mineral son:

Equivalente iónico

$$D_E = -1905,419 \frac{1}{V} + 27,319$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1590,184 \frac{1}{V} + 27,588$$

Equivalente catiónico

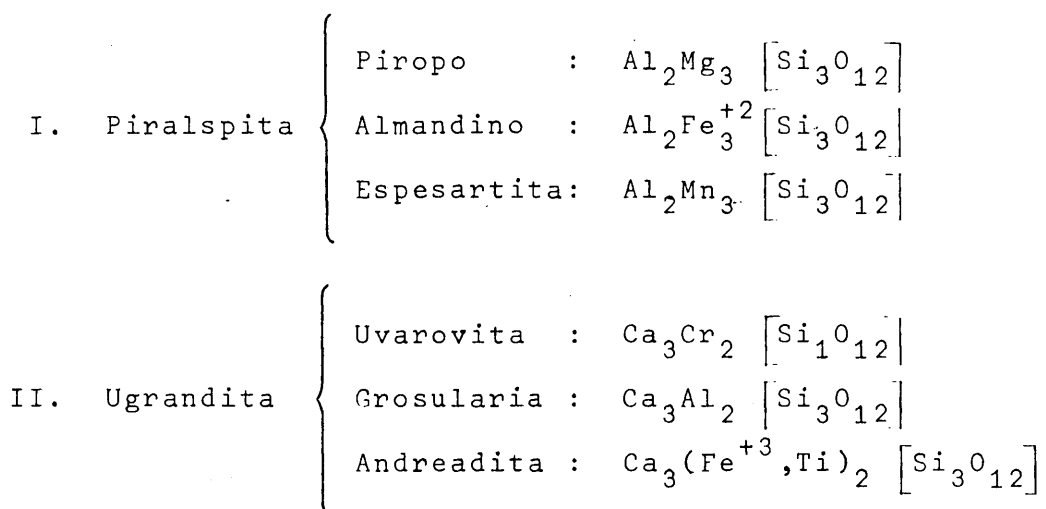
$$D_E = -2369,770 \frac{1}{V} + 26,486$$

Equivalente radical

$$D_E = -6398,067 \frac{1}{V} + 28,713$$

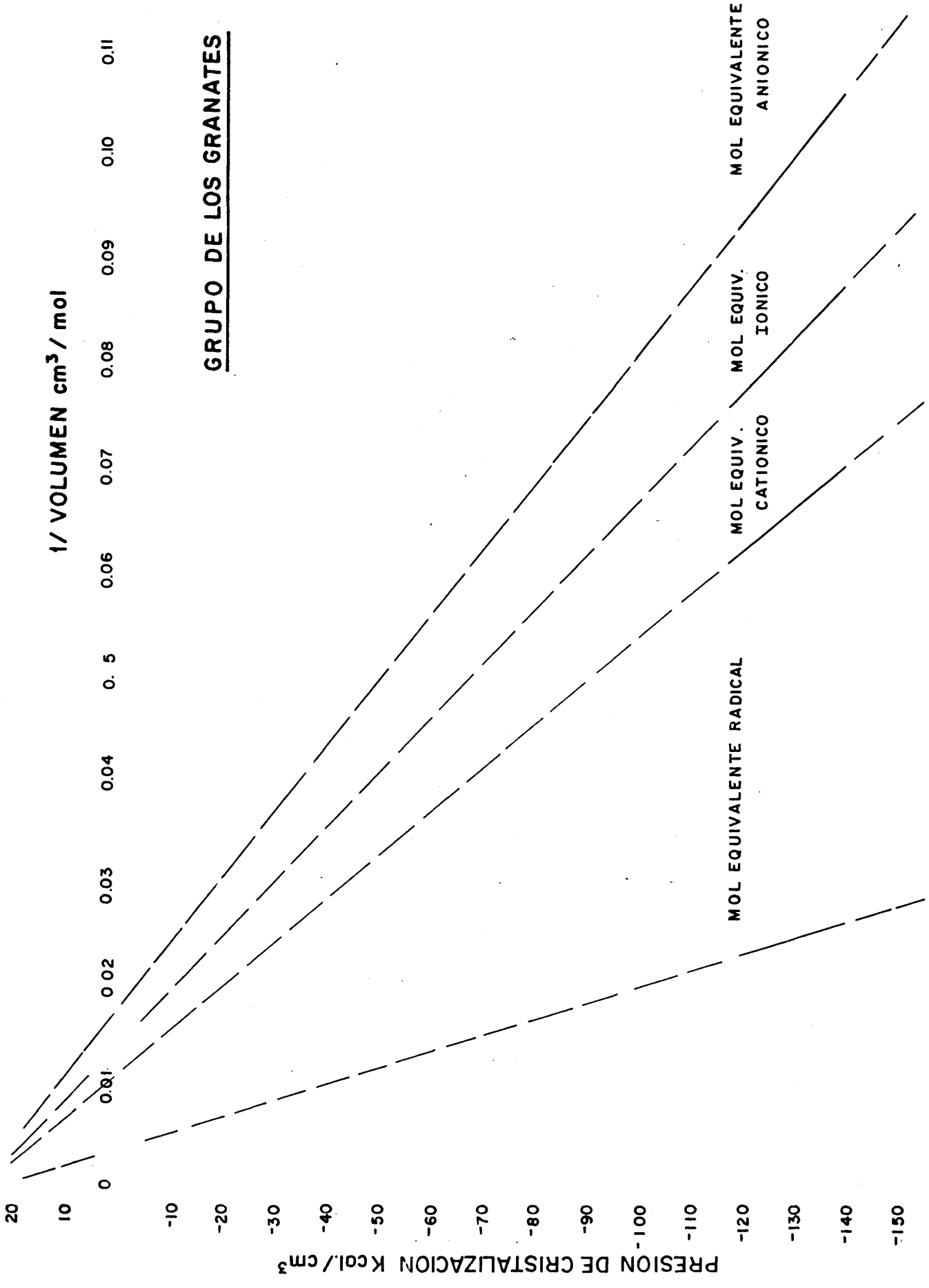
La representación de las cuatro rectas de equilibrio termodinámico en el espacio presión-volumen puede observarse en el gráfico de la página siguiente.

Como es de todos conocido, los granates cristalizan en el sistema cúbico y forman una serie isomórfica; sin embargo, Winchel los dividió en dos series atendiendo a su composición química.



A la vista de esta subdivisión química pensamos que qui-

GRUPO DE LOS GRANATES



zás optimizaríamos los resultados si consideráramos a los granates asociados en dos rectas de equilibrio. Los resultados fueron:

Coefficiente de correlación:

	Piralspita	Ugrandita
Equivalente iónico	0,959	0,982
Equivalente aniónico	0,963	0,983
Equivalente catiónico	0,933	0,974
Equivalente radical	0,934	0,957

Varianza de la regresión:

	Piralspita	Ugrandita
Equivalente iónico	0,287	0,432
Equivalente aniónico	0,259	0,407
Equivalente catiónico	0,464	0,630
Equivalente radical	0,456	1,048

Nivel de significación del coeficiente de correlación:

	Piralspita	Ugrandita
Equivalente iónico	13,130	18,442
Equivalente aniónico	13,886	19,030
Equivalente catiónico	10,042	15,148
Equivalente radical	10,147	11,542

Piralspita nº de muestras  $n = 17$   $t_{(n-2)}_{0,995} = 2,947$

Ugrandita nº de muestras  $n = 14$   $t_{(n-2)}_{0,995} = 3,055$

Por tanto la probabilidad con que podemos aceptar que existe correlación entre ambas variables en los cuatro equivalentes, tanto para la piralspita como para la ugrandita, es mayor del 99%.

Contraste de lineabilidad:

	Piralspita	Ugrandita
Equivalente iónico	172,407	340,128
Equivalente aniónico	192,829	362,168
Equivalente catiónico	100,845	229,476
Equivalente radical	102,961	133,236

Piralspita nº de muestras  $n = 17$   $F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 27,448$

Ugrandita nº de muestras  $n = 14$   $F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 32,427$

La probabilidad para aceptar que la regresión es lineal, tanto para la piralspita como para la ugrandita, es mayor del 99,99%.

Coefficiente de regresión:

	Piralspita	Ugrandita
Equivalente iónico	-2012,82	-1876,14
Equivalente aniónico	-1636,74	-1565,53
Equivalente catiónico	-2511,87	-2248,35
Equivalente radical	-5864,66	-5863,71

Constante de la regresión:

	Piralspita	Ugrandita
Equivalente iónico	36,516	25,045
Equivalente aniónico	32,369	25,294
Equivalente catiónico	36,195	18,973
Equivalente radical	14,930	16,320

Los resultados obtenidos, en los grupos piralspita y ugrandita, cumplen las condiciones establecidas para suponer que pueden representarse mediante rectas independientes. Pero, si comparamos estos resultados con los obtenidos al estudiar los granates, vemos que los estadísticos obtenidos en este caso son aún mejores, que los obtenidos al estudiar los dos grupos por separado.

Además, los coeficientes de regresión obtenidos indican que las tres rectas tienen pendientes muy similares, y si tenemos en cuenta los valores medios de la densidad de energía:

	<u>Piralspita</u>	<u>Ugrandita</u>
D. Energía	-135,81	-120,64

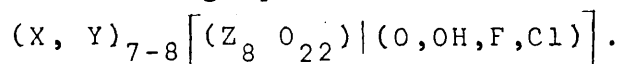
Llegamos a la conclusión de que ambas rectas se encuentran en la misma dirección y prácticamente se sitúan, una a continuación de la otra en el espacio  $D_E - 1/V$ .

Por todo esto, supusimos que el grupo de los granates queda mejor representado mediante una única recta de equilibrio termodinámico, cuya ecuación expresamos anteriormente.



IX.2.2. Estructura tipo  $A_a^+ \left[ (Z_z^+ O_o^-)_x | (BO_m)_c^- \right]$ .

El grupo mineral elegido para comprobar la hipótesis en los minerales con una estructura que responde a esta fórmula fué el grupo de los anfíboles, cuya fórmula general es:



Para el estudio estadístico de este grupo mineral utilizamos 33 análisis.

Los resultados obtenidos fueron:

Coefficiente de correlación:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
$\delta$	0,838	0,899	0,429	0,899

Varianza de la regresión:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
$\sigma^2_{y/x}$	8,231	5,282	22,570	5,300

Nivel de significación del coeficiente de correlación:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
R	8,559	11,467	2,650	11,443

El valor que toma la distribución t para n-2 grados de libertad, 31 en nuestro caso, para una probabilidad del 99,5% es 2.750.

Contraste de lineabilidad:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
F(1/n-2)	73,264	131,491	7,026	130,946

El valor de F para 1 sobre 31 grados de libertad con una probabilidad del 99,99% es 20,092.

Analizando estos resultados vemos que el equivalente catiónico no cumple los niveles de probabilidad establecidos en las condiciones iniciales. El nivel de significación del coeficiente de correlación da una probabilidad comprendida entre el 98 y el 99%. El contraste de lineabilidad está comprendido entre el 97,5 y el 99%. Estos niveles de probabilidad, sin ser los óptimos, son altos y, si el número de muestras de que dispusiéramos fuera menor, quizás los admitiésemos, pero con 33 muestras estos niveles deben rechazarse.

Además, como hemos indicado anteriormente, las cuatro moléculas equivalentes deben dar estadísticos semejantes y, como podemos ver, tanto  $\beta$  como  $\sigma^2$  y/x y R varían de manera sensible en el caso del equivalente catiónico.

Sin embargo, hay que tener en cuenta que los anfíboles presentan una gran variabilidad en los cationes de los tipos X, Y, que pueden ser monovalentes, divalentes o trivalentes y entre ellos se establecen toda una serie de combinaciones para mantener la neutralidad electroquímica de la molécula.

A la vista de estos resultados inferimos que los anfíboles no podían representarse mediante una única recta de equilibrio termodinámico.

Además, así como los granates forman una serie isomórfica con simetría cúbica, los anfíboles se dividen en ortoanfíboles (con simetría rómbica) y en clinoanfíboles (con simetría monoclínica) y aún dentro de ellos se suelen realizar nuevas subdivisiones si atendemos a su composición química. Resumiendo, los anfíboles pueden dividirse en:

- I. Ortoanfíboles.
- II. Clinoanfíboles ferromagnesianos.
- III. Clinoanfíboles cálcicos: serie tremolita-actinolita en los que la posición X está ocupada por Ca.
- IV. Clinoanfíboles cálcicos en los que la posición X está ocupada por Ca y Na en relación 2:1 subgrupo de la hornblenda.
- V. Clinoanfíboles alcalinos.

Aplicamos pues el método estadístico a estos cinco subgrupos y los resultados obtenidos son:

Ortoanfíboles:

Nº de muestras: 8.

Coefficiente de correlación:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
$\hat{\rho}$	0,951	0,9324	0,8853	0,932

Varianza de la regresión:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
$\sigma^2_{y/x}$	0,952	1,320	2,184	1,327

Nivel de significación del coeficiente de correlación:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
R	7,593	6,316	4,662	6,297

y como:

$$t_{(n-2), 0,995} = 3,7072$$

la probabilidad de que  $\beta$  represente a la población estudiada es mayor del 99% para los cuatro equivalentes.

Contraste de lineabilidad:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
F(1/n-2)	57,654	39,899	21,737	39,660

$$F(1/n-2)_{0,0001} = 82,469$$

$$F(1/n-2)_{0,005} = 18,653$$

Por tanto, la probabilidad de que la asociación mineral estudiada pueda ordenarse según una recta es mayor del 99,5%. Es decir, en este caso tampoco alcanzamos la probabilidad preestablecida. Pero hay que tener en cuenta que sólo disponemos de ocho muestras lo que dá a la probabilidad obtenida un valor relativo mayor.

Coefficiente de regresión:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
B = $\mu$	-2131,793	-1551,176	-2720,608	-4657,633

Constante de la regresión:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
A = P <sub>D</sub>	40,966	23,057	39,802	23,156

Ecuación de la recta de equilibrio termodinámico para la asociación mineral constituída por los ortoanfíboles:

Equivalente iónico

$$D_E = -2131,793 \frac{1}{V} + 40,996$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1551,176 \frac{1}{V} + 23,057$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2720,608 \frac{1}{V} + 39,802$$

Equivalente radical

$$D_E = -4657,633 \frac{1}{V} + 23,156$$

Si analizamos estas ecuaciones vemos:

Que los valores que toma la constante de la regresión para los cuatro equivalentes no son análogos, como sucedía en el

caso de los granates. Esto se debe a que, como ya hemos indicado anteriormente, los análisis presentan gran variabilidad; es decir, fluctúan en el plano  $D_E - 1/V$ , en determinadas direcciones: a presión constante, a volumen constante o a potencial químico constante. En el último caso se encuentran los granates, y es debido a esto, por lo que las cuatro constantes son prácticamente iguales, ya que la variación se verifica en la misma dirección de la recta. Sin embargo, en los anfíboles esta variación se verifica según rectas que forman ángulos distintos, para cada uno de los equivalentes, con la recta que define la asociación estudiada y por lo tanto los puntos de corte serán distintos. Pero, una de las condiciones establecidas era que esta constante ha de ser la misma para los cuatro moles equivalentes considerados, por tanto, bien el resultado obtenido para los equivalentes iónico-catiónico; ( $A \approx 40$ ), o bien el obtenido para aniónico-radical ( $A \approx 23$ ) es erróneo. Para resolver esta duda habrá que esperar a conocer las relaciones entre las variables y coeficientes para la clase silicatos en conjunto, lo que, como luego veremos, nos permitirá situar adecuadamente las rectas de los anfíboles.

- Clinoanfíboles cálcicos:

Nº de muestras: 16.

Coefficiente de correlación:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
$\hat{\rho}$	0,8440	0,6350	0,9171	0,6573

Varianza de la regresión:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
$\sigma^2_{y/x}$	1,504	3,120	0,831	3,038

Nivel de significación del coeficiente de correlación:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
R	5,887	3,075	8,606	3,177

$$t_{(n-2)}_{0,995} = 2,997.$$

Por tanto, la probabilidad de que  $\hat{\beta}$  represente a la población estudiada es mayor del 99% para los cuatro equivalentes.

Contraste de lineabilidad:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
F(1/n-2)	34,667	9,461	74,067	10,098



$$F(1/n-2)_{0,0001} = 27,448.$$

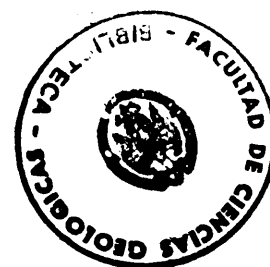
$$F(1/n-2)_{0,01} = 8,683.$$

Si analizamos los 3 estadísticos hasta ahora estudiados, vemos que en caso de los clinoanfíboles alcalinos se acentúan las impresiones provocadas por la dispersión de los análisis estudiados. Al igual que en el caso de los ortoanfíboles podemos distinguir los equivalentes iónico y catiónico de los equivalentes aniónico y radical. Pero en este caso las diferencias se pueden deducir en los coeficientes de correlación obtenidos. Esta diferencia no debe sorprendernos ya que, si bien, los datos de la regresión en los cuatro equivalentes, se obtiene mediante una distribución proporcional de la densidad de energía y la inversa de volumen calculados, con el método estadístico utilizado, lo que realmente hacemos es minimizar la distancia de cada par de valores a la recta. Por tanto, si ya los análisis tienden a distribuirse según la dirección fijada por la presión, en los dos equivalentes aniónico y radical en que los valores de la inversa de volumen alcanzan los valores extremos, la distribución de los puntos respecto a la recta, presentará más dispersión en aquellos en los que los valores de la inversa de volumen tome valores intermedios, equivalente iónico y catiónico.

Coefficiente de la regresión:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
B = $\mu$	-2185,502	-1511,911	-2228,869	-4643,863

Constante de la regresión:



	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
A = P <sub>D</sub>	46,638	20,397	17,008	23,480

Ecuación de la recta de equilibrio termodinámico para la asociación mineral constituida por los clinocanfíboles cálcicos:

Equivalente iónico

$$D_E = -2185,502 \frac{1}{V} + 46,638$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1511,911 \frac{1}{V} + 20,397$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2228,869 \frac{1}{V} + 17,008$$

Equivalente radical

$$D_E = -4643,863 \frac{1}{V} + 23,480$$

-Clinocanfíboles alcalinos:

Nº de muestras: 9.

Coefficiente de correlación:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
$\hat{\rho}$	0,9750	0,9522	0,9229	0,9521

Varianza de la regresión:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
$\sigma^2_{y/x}$	1,238	2,506	3,982	2,510

Nivel de significación del coeficiente de correlación:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
R	11,6007	8,246	6,340	8,239

Coefficiente de regresión:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
A = $\mu$	-2036,805	-1518,296	-2523,106	-4548,436

Constante de la regresión:

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalente radical
B = P <sub>D</sub>	29,494	16,606	23,154	16,399

Ecuación de la recta de equilibrio termodinámico para la asociación mineral constituida por los clinofibros alcalinos:

Equivalente iónico

$$D_E = -2036,805 \frac{1}{V} + 29,494$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1518,296 \frac{1}{V} + 16,606$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2523,106 \frac{1}{V} + 23,154$$

Equivalente radical

$$D_E = -4548,436 \frac{1}{V} + 16,399$$

Los resultados estadísticos obtenidos para el grupo de los anfíboles permiten inferir que ortoanfíboles, clinofibros

cálcicos (subgrupo de la hornblenda) y clinoanfíboles alcalinos pueden representarse mediante rectas de equilibrio termodinámico, en el espacio presión-volumen. Sin embargo, lo que no podemos conocer con una seguridad suficiente, es el valor que, para estos tres subgrupos adquiere la presión de disociación. Para poder saber cual de las dos opciones de que disponemos, la obtenida a partir de los equivalentes iónico-catiónico, o mediante los equivalentes aniónico y radical, es la que realmente representa a los anfíboles, sería necesario disponer de los valores que para los otros grupos estructuralmente semejantes toma esta presión.

Como se ha podido observar, no se han obtenido resultados estadísticos de otros dos grupos de anfíboles: clinoanfíboles ferromagnesianos y clinoanfíboles cálcicos (serie tremolita-actinolita). Esto se debe a que el número de análisis disponibles era muy reducido y a que su diversidad cristaloquímica era aún mayor a la constatada en los tres subgrupos o anfíboles estudiados.

### IX.2.3. Estructuras tipo $(A_a^+ X_x^-)$ .

El grupo mineral elegido para comprobar si la hipótesis propuesta se cumplía en minerales con este tipo de estructura fué el de los óxidos tipo AX.

Los minerales que componen este grupo son<sup>(1)</sup>:

#### - Grupo de la periclasa:

Periclasa:	MgO
Bunsenita:	NiO
Manganosita:	MnO
Oxido de cadmio:	CdO
Oxido de calcio:	CaO

---

(1) En el cálculo estadístico se ha incluido la Delafossita por la similitud de sus parámetros energéticos con este grupo de óxidos.

- Grupo de la cincita:

Cincita: ZnO

Tenorita: CuO

Montroidita: HgO

Litargirio : PbO

Es decir, disponíamos de 10 muestras para realizar el estudio estadístico.

Este grupo mineral por ser del tipo  $(A_a^+ B_b^-)$  no presenta radical y por ser del tipo AX, es decir, con el mismo número de cationes que de aniones, los moles equivalentes iónico, aniónico y catiónico son el mismo.

Los resultados obtenidos fueron:

	$\hat{\rho}$	$\sigma^2_{y/x}$	R	F(1/n-2)
Oxidos tipo AX	0,994	6,597	26,071	679,717

El valor que toma la distribución t para n-2 grados de libertad, 8 en nuestro caso y para una probabilidad del 99,5% es 3,355. La razón  $F(1/n-2)_{0,0001} = 5.069$ .

Por tanto podemos asegurar, que existe correlación entre la presión de cristalización y el volumen con una probabilidad mayor del 99% y que la regresión entre ambas variables se realiza según una recta con una probabilidad mayor del 99,99%.

Coeficiente de regresión:

$$B = \mu = -1028,613$$

Constante de la regresión:

$$A = P_D = 7,789$$

Ecuación de la recta de equilibrio termodinámico de la asociación mineral constituida por los óxidos tipo AX:

$$D_E = -1028,613 \frac{1}{V} + 7,789$$

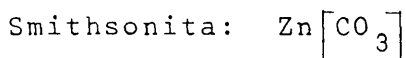
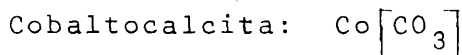
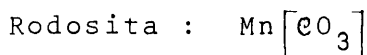
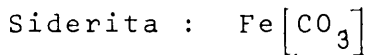
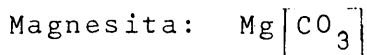
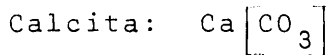
La representación gráfica de esta ecuación en el espacio presión-volumen se encuentra en la página siguiente.

Teniendo en cuenta la similitud estructural, consideraremos que en esta asociación mineral no es factible realizar sub divisiones y que la única recta de equilibrio es la mencionada anteriormente.

IX.2.4. Estructuras tipo  $A_a^+ [(BO_m)]_c$ .

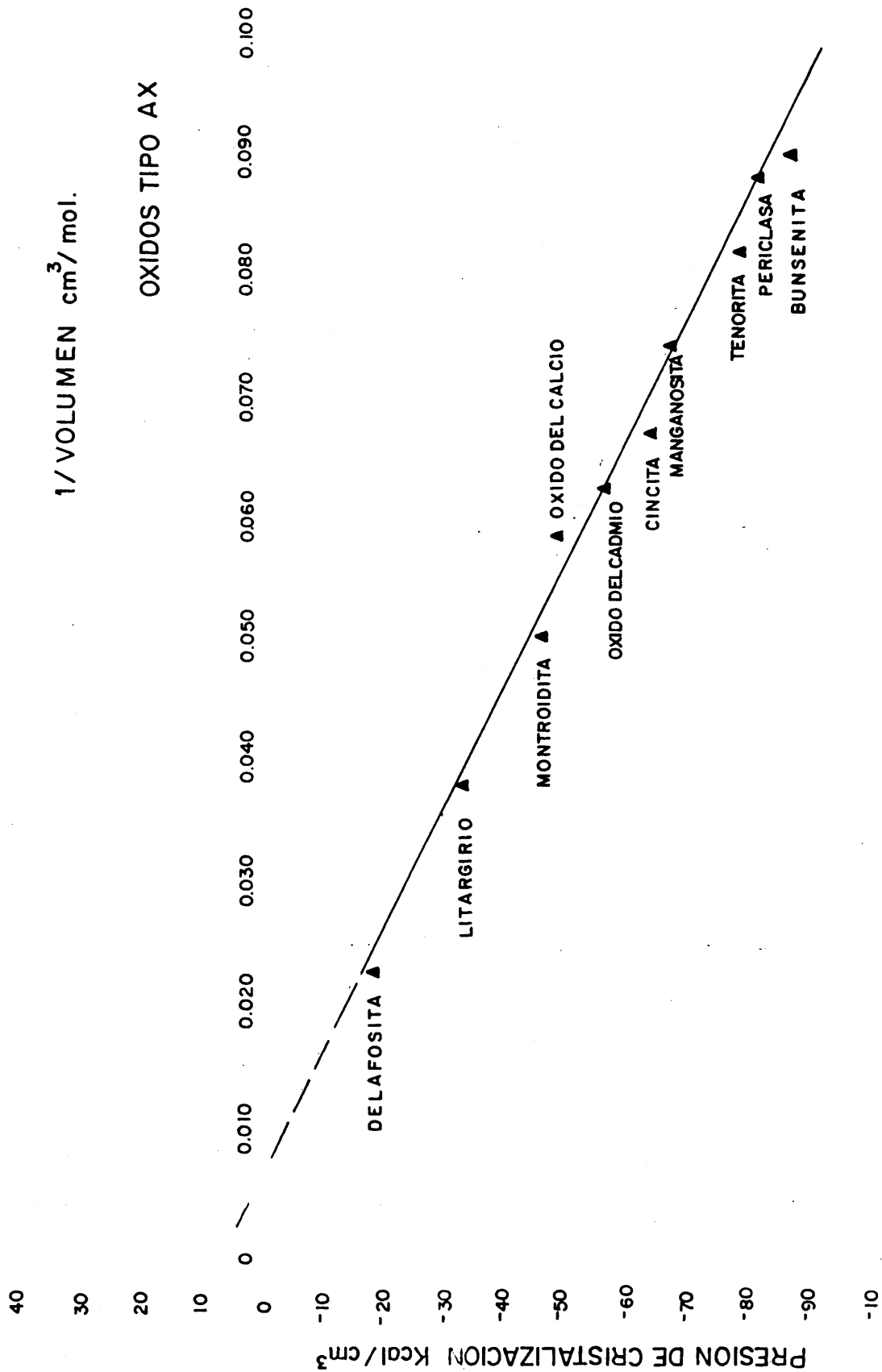
Para verificar la hipótesis en estructuras con ión complejo, elegimos el grupo de la calcita.

Los minerales que componen este grupo son:



En este grupo mineral, al igual que el estudiado anteriormente, el número de aniones y cationes es el mismo; por lo tanto, los cuatro moles equivalentes son iguales. Los resultados estadísticos obtenidos son:

	$\hat{\rho}$	$\sigma^2_{y/x}$	R	F(1/n-2)
Grupo de la calcita	0,996	23,437	23,437	549,313





El valor que toma la distribución t para n-2 grados de libertad y para una probabilidad del 99,5% es 4,60 y la razón  $F(1/n-2)_{0,0001} = 241,62$ .

Es decir, podemos asegurar, que existe una correlación entre las variables estudiadas con una probabilidad mayor del 99% y que la regresión entre estas variables es lineal con una probabilidad mayor del 99,99%.

Coefficiente de regresión:

$$B = \mu = -1159,496$$

Constante de la regresión:

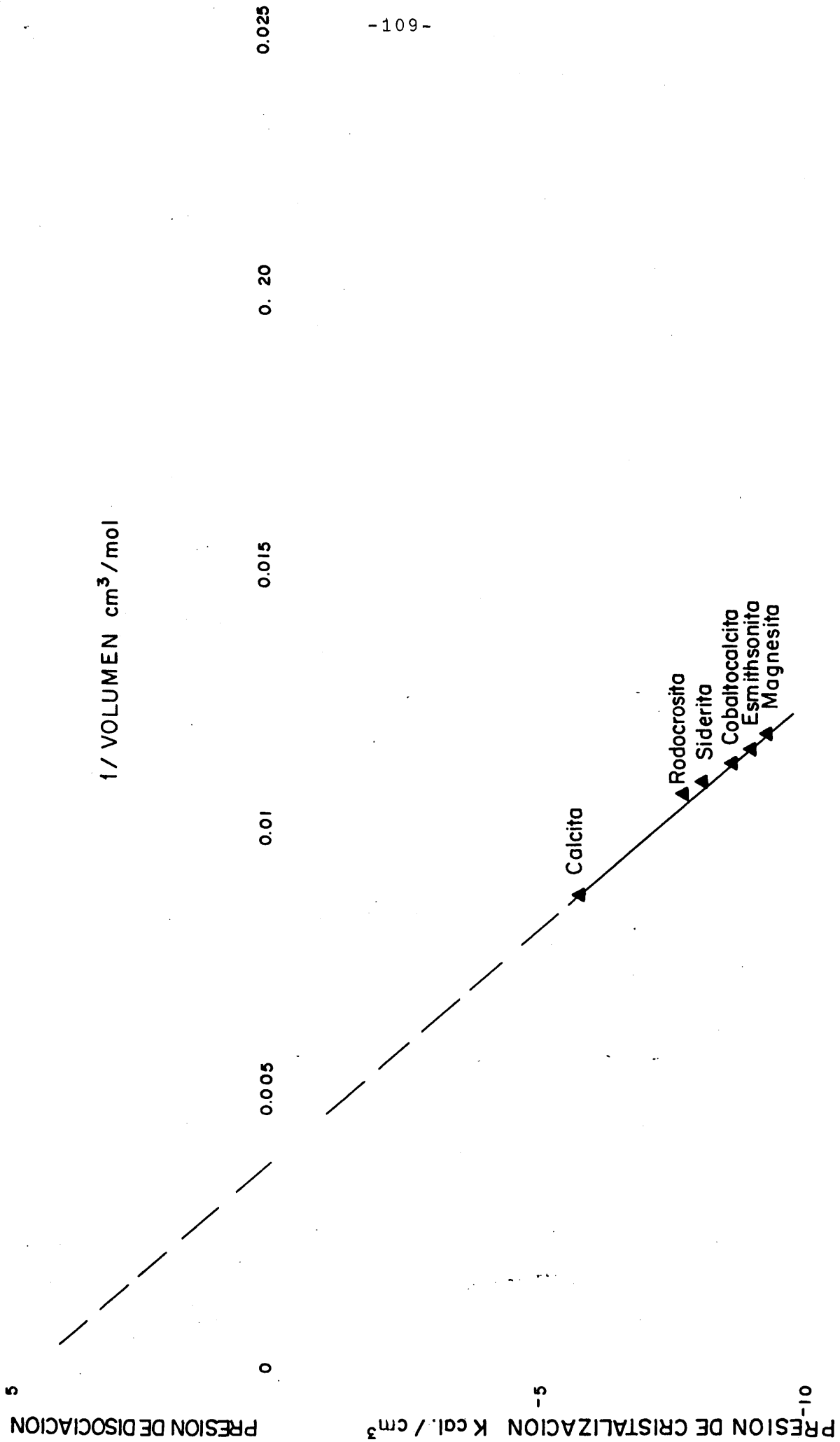
$$A = P_D = 4,870$$

Ecuación de la recta de equilibrio termodinámico para la asociación mineral: carbonatos grupo de la calcita:

$$D_E = -1159,496 \frac{1}{V} + 4,870$$

Al igual que en el caso de los óxidos tipo AX, la característica isoestructural de esta asociación mineral no aconseja intentar dividirla en subgrupos. Por tanto, consideramos que la ecuación que caracteriza al grupo de la calcita es la anteriormente expuesta. Su representación gráfica en el diagrama presión-volumen se encuentra en la página siguiente.

Los resultados del estudio estadístico de un grupo representativo de cada uno de los cuatro tipos de estructuras consideradas, nos indica que, para todos ellos, la probabilidad de que el volumen y la presión de cristalización estén correlacionadas, y de que la regresión existente entre ellos sea lineal, es lo suficientemente alta como para considerar que la hipótesis defendida en este trabajo de que las distintas asociaciones minerales



pueden definirse mediante rectas de equilibrio termodinámico, es correcta y por tanto, puede aplicarse a cualquier asociación mineral, que presente características estructurales semejantes.

X. RESULTADOS OBTENIDOS.

Una vez indicado el proceso de cálculo seguido para determinar los distintos parámetros reticulares que nos permiten caracterizar a las especies minerales y el método estadístico seguido, pasamos a analizar los resultados obtenidos.

Hay que hacer constar, como ya hemos dicho, que el objeto de este Trabajo no es realizar un estudio exhaustivo de todas las rectas de equilibrio termodinámico posibles en la naturaleza. Su objeto es indicar un método de cálculo para determinar los parámetros reticulares, energía y volumen, e indicar cual es la relación existente entre ellos que permite a distintas especies minerales formar asociaciones minerales en equilibrio.

Por tanto, sólo se han estudiado las especies minerales más representativas que corresponden a los cuatro tipos de estructuras antes mencionados.

- Estructuras tipo  $A_a^+(Z_z O_o^-)$  y  $A_a^+[(Z_z O_o^-)_x | (BO_m)_c] =$   
= silicatos.
- Estructuras tipo  $A_a^+ X_x =$  óxidos y haluros.
- Estructuras tipo  $A_a^+ (BO_m)_c^- =$  Fosfatos, sulfatos y carbonatos.

De todas las clases minerales mencionadas, se ha dedicado especial atención al estudio de la clase mineral silicatos. Esto se debe a que es una de las clases más interesantes y que para esta clase mineral disponíamos de una gran cantidad de datos, en forma de análisis de las distintas especies minerales.

Para facilitar la determinación de las distintas aso-

ciaciones minerales dentro de las clases estudiadas, hemos seguido las clasificaciones definidas por: J.D. y E.S. DANA (1944), H. STRUNZ (1957), I. KOSTOV (1957) y A.S. POVARENNYKH (1966). G.P. BARSANOV (1959), F. KLOCKMANN y P. RAMDOHR (1947).

#### X.1. CLASE SILICATOS.

Es la clase mineral más importante, puesto que los silicatos constituyen casi un 25% de los minerales conocidos.

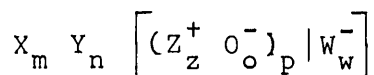
La unidad fundamental, base de la estructura de todos los silicatos, consiste en cuatro iones de oxígeno en los vértices de un tetraedro regular rodeando al ión silicio tetravalente y coordinados con éste.

Como ya hemos indicado, empleando el concepto de electronegatividad, este enlace puede considerarse como aquél en que la fuerza del enlace iónico y el covalente actúan con igual intensidad (grado de covalencia 52%).

Después del oxígeno y del silicio, es el aluminio el constituyente más importante de los silicatos. El aluminio trivalente presenta con el oxígeno coordinación 4 ó 6. Esta capacidad de poder desempeñar un doble papel es lo que da al aluminio su destacada importancia en la cristalografía de los silicatos. Cuando el aluminio coordina los cuatro oxígenos dispuestos en los vértices de un tetraedro regular, el grupo resultante ocupa el mismo espacio que un tetraedro de silicio y oxígeno. Es por ello que en los silicatos hemos considerado como mol equivalente radical, aquél en que la suma de los coeficientes estequiométricos del silicio y del aluminio en coordinación tetraédrica es la unidad.

El aluminio en coordinación seis liga los grupos tetraédricos mediante simples enlaces iónicos mucho más débiles que los que unen los iones de los tetraedros.

La fórmula general para todos los silicatos puede expresarse:



donde:

X representa los cationes grandes, con carga débil, en coordinación ocho o mayor con el oxígeno. Principalmente  $K^{+1}$ ,  $Na^{+1}$  y  $Ca^{+2}$ .

Y cationes medianos, divalentes a tetravalentes en coordinación 6. Principalmente  $Al^{+3}$ ,  $Fe^{+3}$ ,  $Mg^{+3}$ ,  $Ti^{+4}$ ,  $Fe^{+2}$ ,  $Mn^{+2}$ .

Z Si, Al.

W representa grupos aniónicos del tipo  $(BO_m)^-$  o aniones como  $Cl^-$ ,  $F^-$ , etc.

Como veremos más adelante, la naturaleza de los cationes X, Y (cálcicos, calcoalcalinos, ferromagnesianos), tiene una gran influencia en la ordenación energética de los silicatos.

El estudio de la clase mineral silicatos realizado en este Trabajo, está basado en los análisis incluidos en la obra de Deer, Howie y Zussman Rock Forming Minerals.

En el estudio estadístico hemos obtenido resultados dispares. En general han cumplido perfectamente las condiciones establecidas, para aquellas asociaciones minerales en las que el número de análisis de que disponíamos era elevado y las caracteerísticas de su estructura permite suponer que la evaluación enerergética realizada es correcta. En este caso se encuentran las asociaciones minerales pertenecientes a los nesosilicatos o inosililicatos. Sin embargo, al estudiar los filosilicatos sólo hemos conseguido obtener rectas de equilibrio termodinámico para las es-

pecies minerales biotita y moscovita. Tampoco hemos conseguido determinar las rectas de equilibrio termodinámico para las distintas asociaciones pertenecientes al grupo de los feldespatos en los tectosilicatos.

Esto puede deberse:

I. A inconvenientes puramente estadísticos. En la mayoría de estas asociaciones minerales el número de análisis de que disponíamos para caracterizar cada especie mineral era muy reducido y en muchos casos correspondían a variedades de la especie, es decir, estaban fuera del rango de variabilidad admisible para la especie mineral.

II. A que la estimación de la energía realizada no sea exacta, debido a que las estructuras de estas especies minerales son muy abiertas, presentan una gran variabilidad, y además pueden presentar más de un tipo de enlace. No sería raro que en ellas hubiera una elevada proporción de enlaces covalentes y de enlaces por puente de hidrógeno.

Esta segunda posibilidad, deficiencias en el cálculo de la energía, es quizás la más próxima a la realidad. Debemos recordar las dificultades surgidas para determinar las rectas de equilibrio termodinámico de las asociaciones minerales correspondientes al grupo de los anfíboles, cuya estructura es bastante similar a las de estos otros grupos cuyas rectas de equilibrio no ha sido posible determinar. Hay que tener en cuenta, además, que los silicatos con estructura en capas al absorber moléculas de agua aumentan su volumen reticular, lo que da lugar a que las distancias entre las capas aumenten y la coordinación de los cationes situados entre ellas varíe, por lo cual, como ya hemos indicado se modifica su aporte energético al edificio cristalino.

X.1.1. Grupo del Olivino.

X.1.1.a. Cristaloquímica.

La estructura de los minerales que constituyen este grupo consiste en tetraedros independientes  $[\text{SiO}_4]$  ligados entre sí por átomos divalentes,  $\text{Mg}^{+2}$ ,  $\text{Fe}^{+2}$ ,  $\text{Mn}^{+2}$  y  $\text{Ca}^{+2}$ , en coordinación seis. La simetría resultante de este tipo de estructura es ortorómbica. En este grupo no se produce la sustitución del silicio por el aluminio, las posiciones octaédricas de la estructura están ocupadas casi exclusivamente por átomos divalentes, los iones trivalentes, Al y  $\text{Fe}^{+3}$ , están ausentes o se presentan en proporciones muy pequeñas.

En los olivinos ferro-magnesianos hay una serie continua entre la forsterita  $\text{Mg}_2[\text{SiO}_4]$  y la fayalita  $\text{Fe}_2[\text{SiO}_4]$ . Fayalita, knebelita  $\text{FeMn}[\text{SiO}_4]$  y tefroita  $\text{Mn}_2[\text{SiO}_4]$  forman una solución sólida completa.

La moticellita  $\text{CaMg}[\text{SiO}_4]$  no presenta una gran variación respecto a la composición ideal.

X.1.1.b. Estudio estadístico.

En el estudio estadístico del grupo olivino empleamos 21 análisis. Los análisis químicos medios, expresados en forma de óxidos, de los minerales que forman el grupo del olivino, se encuentran en el Apéndice I. Los valores de energía y volumen medio, obtenidos para estas especies minerales son:

Nº de iones contenidos en la fórmula estándar utilizada en la determinación de los valores medios de los parámetros molares  $n = 7$ .



	Er Kcal.	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Olivino	-5028,48	45,24	-111,22
Monticellita	-4911,86	51,45	- 95,51
Tefroita	-5000,26	49,31	-101,61
Knebelita	-4986,62	48,30	-103,29

X.1.1.c. Determinaciones de las rectas de equilibrio termodinámico.

Los resultados obtenidos para cada uno de los cuatro equivalentes en esta asociación mineral, se encuentran en las páginas siguientes.

Al analizar los resultados se demuestra que para los cuatro equivalentes el grupo del olivino, puede representarse mediante una recta de equilibrio termodinámico.

X.1.2. Grupo de la Epidota.

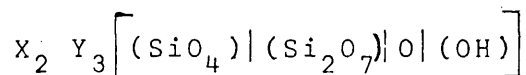
X.1.2.1. Critaloquímica.

Los minerales del grupo de la epidota cristalizan en los sistemas monoclinicos y ortorómbico. Su estructura se basa en cadenas de octaedros  $[AlO_6]$  y  $[AlO_4(OH)_2]$  paralelas al eje c, ligadas entre sí por tetraedros independientes  $[SiO_4]$  y por grupos de tetraedros  $[Si_2O_7]$ .

Los miembros ortorómbicos  $\alpha$  y  $\beta$  zoisitas, en contraste con la serie monoclinica, tienen un limitado rango de composición química y el reemplazamiento de Al por  $Fe^{+3}$  es pequeño. En las series de la clinozoisita y epidota el reemplazamiento de

Al por  $Fe^{+3}$  varía de 0 a 1 átomo por fórmula unidad, pero en la Piamontita dos átomos de aluminio pueden ser reemplazados por 2 ( $Mn^{+3} + Fe^{+3}$ ). En la epidota y en la allanita, las tierras raras  $Ce^{+3}$ ,  $La^{+3}$  e  $Y^{+3}$ , reemplazan al Ca, y esta sustitución se compensa por el reemplazamiento de ( $Al, Fe^{+3}, Mn^{+3}$ ) por  $Fe^{+2}$ . La allanita es el único miembro del grupo de la epidota que contiene una cantidad apreciable de ión ferroso.

La composición química de los minerales del grupo de la epidota pueden expresarse mediante la fórmula general:



X = Ca,  $Ce^{+3}$ ,  $La^{+3}$ ,  $Y^{+3}$ , Th,  $Fe^{+2}$ ,  $Mn^{+2}$ ,  $Mn^{+3}$ .

Y = Al,  $Fe^{+3}$ ,  $Mn^{+3}$ ,  $Fe^{+3}$ ,  $Mn^{+2}$ , Ti.

X.1.2.b. Estudio estadístico.

Los valores de energía y volumen medio obtenidos para los minerales que forman el grupo de la epidota fueron:

Nº de iones contenidos en la fórmula estándar n = 21.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Clinozoisita	-16.445,70	137,49	-119,97
Epidota	-16.460,91	140,51	-116,79
Allanita	-16.115,70	145,30	-110,92
Piamontita	-16.412,90	139,87	-117,34

Los análisis químicos medios, expresados en forma de óxidos, de todos los minerales que constituyen este grupo se encuentran en el Apéndice I.

X.1.2.c. Ecuaciones de las rectas de equilibrio termodinámico.

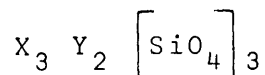
Los resultados obtenidos para los cuatro equivalentes del grupo de la epidota están reflejados en las páginas siguientes y su análisis demuestra que dentro de las condiciones estadísticas preestablecidas, el grupo de la epidota puede representarse mediante una única recta de equilibrio termodinámico.

X.1.3. Grupo de los Granates.

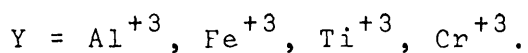
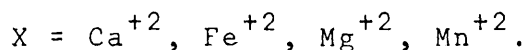
X.1.3.a. Cristaloquímica.

La estructura se caracteriza por la presencia de tetraedros  $\text{SiO}_4$  que forman grupos independientes ligados en octaedros por medio de iones trivalentes, de forma que los iones divalentes ocupan los intersticios de la red Si-Al, y cada ión divalente queda rodeado por 8 oxígenos.

La composición química de los granates puede expresarse mediante la fórmula general:

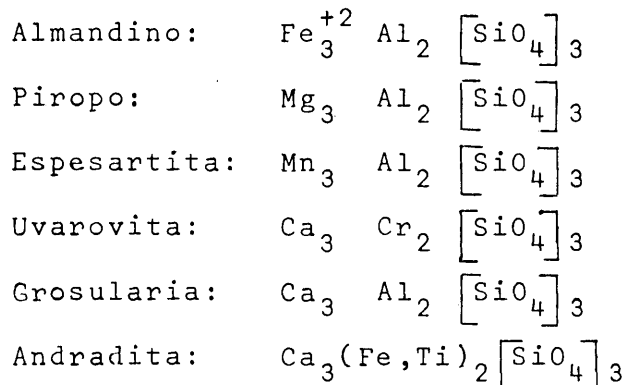


donde



Teóricamente, al combinarse cada uno de los iones divalentes Ca, Mg, Fe y Mn con los trivalentes Al, Fe, Mn y Cr, son

posibles diez y seis especies minerales, pero de estas diez y seis sólo seis tienen verdadero interés.



Winchel dividió la serie isomórfica que constituye el grupo de los granates en dos series, según su composición química.

Piralspita: formada por los granates aluminicos (piropo, almandino y espesartita) y ugrandita, granates cálcicos, (uvarovita, grosularia y andradita).

Las sustituciones que pueden tener lugar en la estructura de los granates, incluyen el posible reemplazamiento de una pequeña proporción de silicio por fósforo y a veces por titanio, aunque el último puede ser reemplazado por Al.

#### X.1.3.b. Estudio estadístico.

Para realizarlo se han utilizado 31 análisis. Los análisis químicos medios, expresados en forma de óxidos, de las distintas especies minerales que forman el grupo de los granates pueden verse en el Apéndice I.

Los valores de energía y volumen medios que caracterizan a los minerales de dicho grupo son:

Nº de iones contenidos en la fórmula estándar n = 40.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Almandino	-31.760,60	234,36	-136,16
Piropo	-31.742,56	232,00	-135,51
Espesartita	-31.456,42	236,05	-133,55
Uvarovita	-30.716,32	261,17	-117,67
Grosularia	-31,272,06	254,26	-122,65
Andradita	-31.182,99	258,90	-119,37

X.1.3.c. Determinación de las rectas de equilibrio termodinámico.

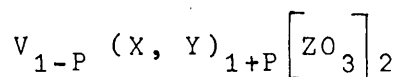
Las distintas hipótesis estudiadas para obtener las rectas de equilibrio termodinámico que mejor representa al grupo de los granates fueron expuestas anteriormente. Los resultados para los cuatro equivalentes del grupo de los granates figuran a continuación.

X.1.4. Grupo de los Piroxenos.

X.1.4.a. Cristaloquímica.

La característica principal de la estructura de los piroxenos es la presencia de tetraedros (SiO<sub>4</sub>) formando cadenas sencillas de composición (Si<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>n</sub> en la dirección del eje c. La distancia entre las cadenas es aproximadamente de 5,3 Å.

La fórmula general propuesta por Berman (1973) y más tarde modificada por Hess (1949) puede expresarse:



donde:

V = Ca, Na, Li.

X = Mg, Fe<sup>+2</sup>, Mn, Ni.

Y = Al, Fe<sup>+3</sup>, Cr, Ti.

Z = Si, Al.

El valor de P oscila entre 0 y 1.

Las cadenas están enlazadas lateralmente por cationes grandes del tipo V ligados a 8 oxígenos vecinos, o del tipo X, Y en coordinación 6 con el oxígeno. La entrada de un ión de mayor o menor carga puede compensarse con una sustitución simultánea tal como la del silicio por el aluminio en las posiciones tetraédricas. Si el enlace entre las cadenas se realiza mediante cationes V, X e Y la simetría es monoclinica, si únicamente intervienen cationes del tipo X, Y la simetría es rómbica. En los piroxenos con simetría rómbica, ortopiroxenos, el coeficiente estequiométrico,  $P \approx 1$ . En los piroxenos monoclinicos, clinopiroxenos, P varía entre 0 y 1.

En los ortopiroxenos, cuando las posiciones X e Y están ocupadas por magnesio o hierro ferroso pueden sustituirse mutuamente en todas las proporciones, con una variación lineal en las propiedades según la composición.

En los clinopiroxenos cuando la posición V está ocupada por el calcio en coordinación 8 y las posiciones (X, Y) por magnesio, hierro ferroso o manganeso divalente, en coordinación 6 resulta un miembro de la serie del diopsido. Si la posición V está ocupada por sodio y la posición (X, Y) por un catión pequeño trivalente da por resultado un miembro de la serie de la espodumena.



Por lo tanto en los piroxenos pueden distinguirse tres series fundamentales: I) Ortopiroxenos: serie de la enstatita; II) Clinopiroxenos cálcicos: serie del diópsido; III) Clinopiroxenos alcalinos: serie de la espodumena.

X.1.4.b. Estudio Estadístico.

Para el estudio estadístico de los piroxenos empleamos 63 análisis. Los valores de energía y volumen medio obtenidos para los minerales que forman las tres series anteriormente mencionadas son:

I) Ortopiroxenos: serie de la Enstatita:

Nº de iones contenidos en la fórmula estándar n = 10.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Enstatita	-8.203,96	64,17	-127,88
Ortoferrosilita	-8.171,77	65,39	-125,13
Hiperstena	-8.155,18	64,96	-125,63

II) Clinopiroxenos cálcicos: serie del diópsido.

Nº de iones contenidos en la fórmula estándar n = 10.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Fasaita	-7.987,40	66,07	-120,71
Augita	-8.074,99	66,53	-121,41
Diópsido	-8.036,89	66,62	-120,63
Hedembergita	-8.075,62	68,52	-117,98
Pigeonita	-8.169,69	65,70	-124,37

III) Clinopiroxenos alcalinos: serie de la espodumena.

Nº de iones contenidos en la fórmula estándar n = 10.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Jadeita	-8.442,41	62,60	-134,543
Egirina	-8.437,71	64,64	-130,46
Espodumena	-8.522,66	58,83	-144,84

Los análisis químicos medios, expresados en forma de óxidos, de todos los minerales que constituyen el grupo de los piroxenos se encuentra en el Apéndice I.

X.1.4.c. Determinación de las rectas de equilibrio termodinámico.

Los resultados obtenidos para las cuatro equivalente en las tres asociaciones minerales estudiadas pueden verse en las páginas siguientes.

Al analizar estos resultados se comprueba que las tres rectas de equilibrio termodinámico, cumplen las condiciones estadísticas preestablecidas. Por tanto, el grupo de los piroxenos puede representarse por las rectas de equilibrio termodinámico correspondientes a las asociaciones minerales ortopiroxenos, clinopiroxenos cálcicos y clinopiroxenos alcalinos.

Quedaba la duda de sí el grupo de los piroxenos quedaría mejor representado mediante una única recta de equilibrio termodinámico que englobase las tres anteriores.

Los resultados obtenidos para los cuatro equivalentes



al estudiar conjuntamente los piroxenos se encuentran al final de este apartado y nos indican que estadísticamente esta recta satisface las condiciones estadísticas aún mejor que lo hacían las de las tres asociaciones minerales estudiadas anteriormente. Pero el término constante de la ecuación de la regresión es decir, la presión de disociación es excesivamente elevada, en relación con la densidad de energía media de los piroxenos, lo cual como veremos más adelante carece de sentido.

Resumiendo: El grupo de los piroxenos debe representarse mediante las tres rectas de equilibrio termodinámico:

- I. Ortopiroxenos: serie de la enstatita.
- II. Clinopiroxenos cálcicos: serie del diópsido.
- III. Clinopiroxenos alcalinos: serie de la espodumena.

#### X.1.5. Grupo de los anfíboles.

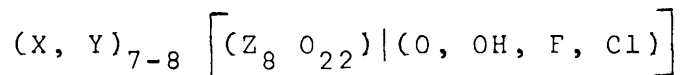
##### X.1.5.a. Cristaloquímica.

La estructura de los anfíboles se caracteriza por la presencia de tetraedros  $[(Si, Al) O_4]$  formando cadenas que tienen una anchura doble a la de los piroxenos y con una composición  $[(Si, Al)_4 O_{11}]$ . Estas cadenas dobles se repiten a lo largo de toda su longitud a intervalos de aproximadamente  $5,3 \text{ \AA}$  y definen el parámetro C de la celda unidad.

Estas cadenas se unen lateralmente por medio de planos de cationes, pero también aparecen algunos OH ocupando los espacios vacíos que dejan las cadenas dobles al unirse lateralmente.

La estructura de los anfíboles presenta una gran flexibilidad lo que permite que se produzcan reemplazamientos iónicos con gran facilidad. Esto da lugar a que los minerales del grupo presenten una gran variabilidad en su composición química.

La fórmula general de los anfíboles puede expresarse:



donde:

X = Na, K, Ca, Li.

Y = Al, Fe<sup>+3</sup>, Fe<sup>+2</sup>, Mn, Mg, Ti, Cr, Li, Zn.

Z = Si, Al.

El reemplazamiento de los átomos de silicio por átomos de Al está limitado a dos átomos de Al por fórmula unidad.

Entre el Na y el Ca y entre el Mg y Fe<sup>+2</sup> puede haber sustitución iónica completa. Entre el Fe<sup>+3</sup> y el Al la sustitución es limitada. También es común la sustitución de OH por F, Cl y oxígeno.

Los anfíboles al igual que los piroxenos se dividen en ortoanfíboles con simetría rómbica y clinanfíboles con simetría monoclinica.

En los ortoanfíboles las posiciones (X, Y) están ocupadas por Mg y Fe<sup>+2</sup> respectivamente.

En los clinanfíboles podemos distinguir:

- I) Clinanfíboles cálcicos: serie tremolita-actinolita. La posición X está ocupada por Ca.
- II) Clinanfíboles cálcicos, subgrupo de la horblenda, en los que en la posición X está ocupada por Ca, Na en relación 2:1.
- III) Clinanfíboles alcalinos, subgrupo de la glaucofana, en los que la mayor proporción en la posición X corresponde a los cationes alcalinos (Na, Li).
- IV) Clinanfíboles ferromagnesianos: serie cumingtonita grunerita.

X.1.5.b. Estudio estadístico.

En su realización se han utilizado 47 análisis químicos medios, expresados en forma de óxidos, de los minerales que constituyen el grupo de los anfíboles que se encuentran en el Apéndice I. Los valores de energía y volumen medios de cada uno de los minerales del grupo de los anfíboles son:

Nº de iones contenidos en la fórmula estándar  $n = 40$ .

I) Ortoanfíboles.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Antofillita	-31.476,47	256,84	-122,51
Gedrita	-30.868,48	264,70	-116,72

II) Cliñoanfíboles ferromagnesianos.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Cumingtonita	-31.352,28	273,10	-114,82
Grunerita	-31.282,09	275,31	-113,61

III) Cliñoanfíboles cálcicos: serie tremoliga actinolita.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Tremolita	-31.458,43	273,75	-114,95
Actinolita	-31.476,47	256,84	-122,51



IV) Clinoanfíboles cálcicos: subgrupo hornblenda.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Hornblenda	-30.591,38	271,94	-112,62
Pargasita	-30.699,41	274,33	-111,90
Hastingita	-30.456,67	280,16	-109,23
Richterita	-31,399,16	277,15	-113,30
Arfvedsonita	-31.264,72	270,67	-115,50
Kaersutita	-30.956,90	274,74	-112,67
Barkevikita	-30.843,31	277,51	-111,14

V) Clinoanfíboles alcalinos.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Glaucofana	-31.581,77	268,51	-117,68
Riebekita	-31.727,19	327,09	-114,49
Holmisquitita	-32.191,51	258,92	-124,32

X.1.5.c. Determinación de las rectas de equilibrio termodinámico.

Las distintas hipótesis estudiadas para obtener las rectas de equilibrio termodinámico que mejor representan al grupo de los anfíboles han sido ya expuestas en el capítulo "Verificación del modelo de ordenación energética de los minerales". Como se recordará el grupo de los anfíboles quedaba representado por:

- A. Ortoanfíboles.
- B. Clinoanfíboles cálcicos.
- C. Clinoanfíboles alcalinos.

Los resultados obtenidos para estas tres asociaciones se encuentran al final de este apartado.

Nótese cómo no se presentan las rectas de equilibrio termodinámico que definen los clinoanfíboles ferromagnesianos, así como los clinoanfíboles cálcicos; correspondientes a la serie actinolita-tremolita. La dificultad para proceder al cálculo de las mismas queda explicada al analizar de una parte, la acusada variabilidad cristaloquímica y estructural de estos minerales, más aún perteneciendo a un grupo con las características de los anfíboles. Por otra parte y desde el punto de vista estadístico, el número de datos de análisis de que se dispone es muy escaso.

Estudiaremos más adelante las rectas que representan a estas especies minerales.

#### X.1.6. Grupo de los piroxenoides.

##### X.1.6.a. Cristaloquímica.

Durante mucho tiempo los minerales componentes de este grupo fueron considerados estructuralmente como piroxenos pertenecientes al subgrupo del diópsido, pero Gossner y Brünckl (1928) determinaron las dimensiones de la celda unidad de la rodonita y demostraron que no existía una relación isoestructural entre la rodonita y el diópsido. Análogamente Warren y Biscoe (1931) demostraron que la celda unidad de la wollastonita no tenía relación con el diópsido. La naturaleza triclínica de la estructura de la wollastonita fué confirmada por Peacock (1935).

La característica fundamental de los piroxenoides es su hábito fibroso debido a la presencia de una cadena sencilla o doble de los tipos  $[\text{SiO}_3]_3$   $[\text{SiO}_3]_5$   $[\text{SiO}_3]_7$   $[\text{Si}_6\text{O}_{17}]$  y  $[\text{Si}_{10}\text{O}_{28}]$  paralela a las cadenas de octaedros de los cationes correspondientes.

La estructura detallada de la rodonita fué determinada por Liebau (1959), que demostró que contiene cadenas de tetraedros  $[\text{SiO}_4]$  paralelos al eje c. La unidad se repite conteniendo cinco tetraedros que coordinan a cinco octaedros de Mn situados en una cadena paralela. La fórmula de la rodonita puede pues expresarse  $\text{Mn}_5[\text{SiO}_3]_5$ . Esta estructura es similar a la de la wollastonita que contiene tres tetraedros  $\text{Ca}_3[\text{SiO}_3]_3$ , a la de la piroxmangita con siete tetraedros  $(\text{Mg,Fe})_7[\text{SiO}_3]_7$  y a la de la bustamita  $(\text{CaMn})_2[\text{SiO}_3]_2$ .

X.1.6.b. Estudio estadístico.

Los valores energéticos y de volumen para los minerales constituyentes del grupo de los piroxenoides son:

Nº de iones contenido en la fórmula estándar n = 30.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Rodonita	-24.406,53	212,69	-114,77
Bustaminta	-24.257,46	220,75	-109,89
Piroxmangita	-24.474,25	208,59	-117,32
Wollastonita	-23.970,97	237,70	-100,95

Los análisis químicos medios, expresados en forma de óxidos, de todos los minerales que constituyen el grupo de los piroxenoides pueden verse en el Apéndice I.

X.1.6.c. Determinación de las rectas de equilibrio termodinámico.

Los resultados obtenidos para esta asociación mineral pueden encontrarse en las páginas siguientes y nos indican que para las cuatro equivalentes, la recta obt



que los piroxenoides forman una asociación mineral única, cumple las condiciones preestablecidas.

X.1.7. Grupo de las micas.

Los minerales de este grupo presentan una considerable variabilidad en su composición química y en sus propiedades físicas. Todas ellas se caracterizan por una morfología en planos y un clivage basal perfecto, debido a su estructura.

X.1.7.a. Cristaloquímica.

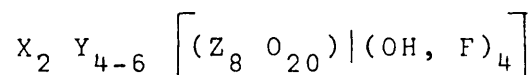
La estructura de las micas está formada por capas, en las que los estratos de cationes en coordinación octaédrica se sitúan entre otros dos estratos de tetraedros  $[(Si, Al) O_4]$  opuestos por sus vértices.

Las capas se unen entre sí por medio de los estratos de cationes.

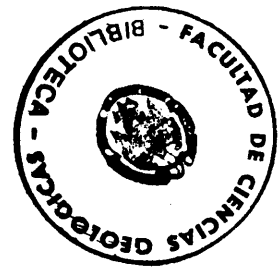
Los hidroxilos juntamente con los oxígenos apicales de los tetraedros completan la coordinación octaédrica de los cationes.

Este tipo de estructura puede interpretarse como si existiera un estrato central de brucita  $Mg_3(OH)$ , en la flogopita, o bien uno de gibbsita  $Al_2(OH)_6$ , en la moscovita, en cuyo caso 4 de los 6 (OH) estarían reemplazados por los oxígenos de los vértices de los tetraedros.

La fórmula general que permite representar la composición química de las micas puede expresarse como:



donde:



X = K, Na, Ca y menos frecuentemente Ba, Rb, Cs, etc.

Y = Al, Mg, Fe y menos frecuentemente Mn, Cr, Ti, Li, etc.

Z = Si, Al, pero a veces también  $Fe^{+3}$  y Ti.

La clasificación de las micas puede realizarse de acuerdo con los iones que ocupen las posiciones X, Y y Z. Se dividen en dioctaédricas y trioctaédricas, según que el número de iones presentes en la posición Y, sea 4 ó 6.

Micas dioctaédricas

	X	Y	Z
Moscovita	$K_2$	$Al_4$	$Si_6 Al_2$
Paragonita	$Na_2$	$Al_4$	$Si_6 Al_2$
Glaucionita	$(K,Na)_{1,2-2,0}$	$(Fe(Fe,Mg,Al))_4$	$Si_{7-7,6} Al_{1,0-0,4}$

Micas Trioctaédricas

	X	Y	Z
Biotita	$K_2$	$(Mg,Fe^{+2})_6$	$Si_6 Al_2$
Flogopita	$K_2$	$(Mg,Fe,Al)_6$	$Si_{6-5} Al_{2-3}$
Zinwaldita	$K_2$	$(Fe,Li,Al)_6$	$Si_{6-7} Al_{2-1}$
Lepidolita	$K_2$	$(Li,Al)_{5-6}$	$Si_{6-5} Al_{2-3}$

En las micas dioctaédricas, la sustitución del silicio por aluminio en coordinación tetraédrica, se equilibra electrostáticamente mediante la sustitución de iones divalentes por aluminio en posiciones octaédricas.



X.1.7.b. Estudio estadístico.

Se realizó teniendo en cuenta la división de las micas, que acabamos de indicar.

Los valores de volumen y energía medios obtenidos son:

I) Micas dioctaédricas.

Nº de iones contenidos en la fórmula estándar n = 38.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Moscovita	-29.843,77	282,85	-106,03
Paragonita	-29.897,86	266,82	-112,47
Glauconita	-30.760,84	313,48	- 99,14

II) Micas trioctaédricas.

Nº de iones contenidos en la fórmula estándar n = 40.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Biotita	-28.704,13	291,91	- 98,40
Flogopita	-29.003,27	291,61	- 99,46
Zinwaldita	---	---	---
Lepidolita	-29.887,48	279,64	-106,87

De la zinwaldita no disponemos de ningún análisis, y por tanto no podemos obtener los valores de energía y volumen que la definen.

X.1.7.c. Determinación de las rectas de equilibrio termodinámico.

Las ecuaciones de las rectas de equilibrio termodinámico

correspondientes a las micas dioctaédricas y trioctaédricas se indican en las páginas siguientes.

Como puede verse en el cálculo de estas rectas se han utilizado únicamente la moscovita en las micas dioctaédricas y la biotita en las trioctaédricas. Si tenemos en cuenta la gran variabilidad cristaloquímica de las micas, el número reducido de análisis para cada mineral no debe sorprendernos esta circunstancia.

Analizando los resultados obtenidos se demuestra que para la biotita y la moscovita las rectas de equilibrio termodinámico cumplen las condiciones estadísticas establecidas a priori, salvo en el caso del equivalente catiónico para el cual la probabilidad de que exista correlación entre las dos variables no alcanza el nivel del 99%. Esta probabilidad es mayor del 98% pero menor del 99% en la biotita y está comprendida entre el 95 y el 98% en la moscovita.

Tampoco el contraste de lineabilidad alcanza el nivel de probabilidad del 99%.

A pesar de estos hechos, pensamos que debíamos incorporar las ecuaciones representativas de las micas dioctaédricas y trioctaédricas a este trabajo, teniendo en cuenta que para tres de los cuatro equivalentes estudiados se obtuvieron las probabilidades propuestas y para el catiónico, si bien no se alcanzan los valores óptimos, los niveles de probabilidad obtenidos son significativos.

#### X.1.8. Grupo de los feldespatos.

##### X.1.8.a. Cristaloquímica.

Son silicatos de aluminio con potasio, sodio y calcio y a veces bario.

El aluminio está presente en coordinación 4 formando tetraedros de aluminio-oxígeno. Estos tetraedros  $[AlO_4]$  se enlazan con los tetraedros  $[SiO_4]$ , compartiendo los oxígenos para formar un armazón tridimensional, sin embargo como el aluminio es trivalente, el tetraedro  $[AlO_4]$  tiene una carga (-5) en lugar de la (-4) del  $[SiO_4]$ . Este exceso de carga negativa permite la introducción de un catión monovalente por cada tetraedro  $[AlO_4]$ . Machatschki (1926) puntualizó que los feldespatos se caracterizan por una estructura donde una cuarta parte o la mitad de los iones tetravalentes de silicio son reemplazados por Al trivalente. Los dos iones feldespáticos representativos de esta sustitución son:  $[AlSi_3O_8]^{-1}$   $[Al_2Si_2O_8]^{-2}$ .

Esta entrada del Al en coordinación 4 no puede ser considerada como solución sólida o sustitución iónica del silicio por el aluminio. En minerales como la ortosa  $AlSi_3O_8K$ , el aluminio no es un constituyente sustitutivo cuyo porcentaje varíe de un ejemplar a otro y que pueda ser totalmente reemplazado por el silicio, es un constituyente esencial, presente en cantidades estequiométricas, y que no es sustituible por el silicio sin romper la estructura. Sin embargo cuando un catión monovalente es reemplazado por un catión divalente como, por ejemplo, el sodio por el calcio en las plagioclasas, la cantidad de aluminio en coordinación 4 varía proporcionalmente a las cantidades relativas de sodio y de calcio para mantener la neutralidad eléctrica. En este caso, las variaciones en la cantidad de aluminio deben ser consideradas, propiamente como parte de un proceso de sustitución iónica. Los principales miembros de la serie de los feldespatos son ortosa  $K[AlSi_3O_8]$ , albita  $Na[AlSi_3O_8]$  y anortita  $Ca[Al_2Si_2O_8]$ . A elevadas temperaturas hay una serie completa entre la albita y la ortosa en los feldespatos alcalinos y entre la albita y la anortita en las plagioclasas.

Su estructura consiste en cadenas de anillos de cuatro miembros que se extienden en la dirección del eje a, unidos entre sí por enlaces iónicos mediante los iones de potasio, calcio, sodio o bario. Los cationes mono y divalentes están rodeados por

10 oxígenos que no pueden ser considerados como ocupando los vértices de un poliedro regular.

X.1.8.b. Estudio estadístico.

En la realización de este estudio se emplearon 42 análisis.

Teniendo en cuenta que para otros grupos estudiados, piroxenos y anfíboles, etc, obtuvimos mejores resultados separando las series alcalinas de las cálcicas, empleamos este mismo criterio en el estudio de los feldespatos, considerando la serie alcalina (ortosa, albita) y la serie calco-alcalina (anortita-celsiana).

Los valores de volumen y energía medios obtenidos para las dos series estudiadas son:

I) Feldespatos alcalinos.

Nº de iones contenidos en la fórmula estándar  $n = 52$ .

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Ortosa	-46.216,58	423,16	-109,24
Microclina	-46.201,23	423,22	-109,23
Sanidina	-46.326,30	426,22	-108,65
Anortoclasa	-46.208,30	412,30	-112,00
Adularia	-46.273,35	433,55	-106,73
Albita	-46.344,28	402,52	-115,27

II) Feldespatos calco-alcalinos.

Nº de iones contenidos en la fórmula estándar  $n = 52$ .

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Anortita	-43.152,79	203,06	-107,06
Hyalofana	-43.406,56	400,517	-108,376
Celsiana	-42.699,05	452,28	- 94,408

X.1.8.c. Determinación de las rectas de equilibrio termodinámico.

Los resultados obtenidos con los cuatro equivalentes para las dos asociaciones estudiadas pueden verse en las páginas siguientes.

Al analizar estos resultados se verifica que las dos rectas de equilibrio termodinámico cumplen las condiciones pre establecidas. Es decir, es posible representar el grupo de los feldespatos mediante las rectas de equilibrio termodinámico co rrespondientes a los feldespatos alcalinos y calco-alcalinos.

X.1.9. CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE  
DE LAS ASOCIACIONES MINERALES

CLASE SILICATOS

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DEL OLIVINO

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 21	$\hat{\rho} = 0,993$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,628$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 37,995	)	
	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 2,861$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 1443,673	)	
	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} < 2,744$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1618,982$

$p = 14,201$

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1618,982 \frac{1}{V} + 14,201$

Fórmulas iónicas equivalentes

Olivino	$(Mg,Fe)_{0,58} [Si_{0,28}^{O_{1,14}}]$
Monticellita	$Ca_{0,29}Mg_{0,29} [Si_{0,28}^{O_{1,14}}]$
Tefroita	$Mn_{0,58} [Si_{0,28}^{O_{1,14}}]$
Knebelita	$(Mn,Fe)_{0,58} [Si_{0,28}^{O_{1,14}}]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DEL OLIVINO

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 21	$\rho = 0,996$	$\sigma^2 Y/X = 0,332$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 52,411	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 2,861$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 2746,957	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} < 2,744$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

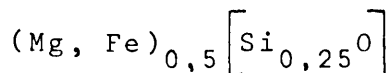
$\mu = -1401,408$	$p = 12,839$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

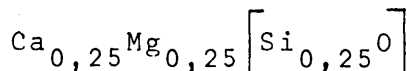
$$D_E = -1401,408 \frac{1}{V} + 12,839$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

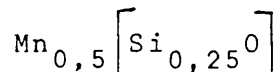
Olivino



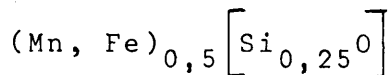
Monticellita



Tefroita



Knebelita





CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DEL OLIVINO

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 21	$\rho = 0,987$	$\sigma^2_{Y/X} = 1,209$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 27,216	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> = 2,861	)	
t <sub>0,995</sub>	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 740,724	)	99,99 < P < 100
F(1/n-2) = 27,448	)	
F <sub>0,0001</sub>	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$\mu = -1918,112$	$p = 16,148$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1918,112 \frac{1}{V} + 16,148$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Olivino	$(Mg,Fe)_{0,66} [Si_{0,33} O_{1,33}]$
Monticellita	$Ca_{0,33} Mg_{0,33} [Si_{0,33} O_{1,33}]$
Tefroita	$Mn_{0,66} [Si_{0,33} O_{1,33}]$
Knebelita	$(Mn,Fe)_{0,33} [Si_{0,33} O_{1,33}]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DEL OLIVINO

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 21	$\rho = 0,979$	$\sigma^2_{Y/X} = 1,921$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 21,426	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 2,861	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 459,072	)	99,99 < p < 100
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> < 2,744	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
$\mu = -5599,200$	p = 11,611

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -5599,200 \frac{1}{V} + 11,611$$

Fórmulas radicales equivalentes

Olivino	$(Mg,Fe)_2 [SiO_4]$
Monticellita	Ca Mg $[SiO_4]$
Tefroita	Mn <sub>2</sub> $[SiO_4]$
Knebelita	$(Mn,Fe)_2 [SiO_4]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DE LA EPIDOTA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 8	$\hat{\rho} = 0,950$	$\sigma^2 Y/X = 0,268$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 7,493	)	
	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 3,707$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 56,150	)	
	)	99,9 < P < 99,99
$F(1/n-2)_{0,0001} = 82,489$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1841,529$	$p = 21,312$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1841,529 \frac{1}{V} + 21,312$$

Fórmulas iónicas equivalentes

Clinozoisita	$Ca_{0,19}Al_{0,28} \left[ \begin{array}{l} 0,1   (OH)_{0,1}   (Si_{0,1}O_{0,38}) \\ (Si_{0,19}O_{0,66}) \end{array} \right]$
Epidota	$Ca_{0,19}(Al,Fe)_{0,1}Al_{0,19} \left[ \begin{array}{l} 0,1   (OH)_{0,1}   \\ (Si_{0,1}O_{0,38})(Si_{0,19}O_{0,66}) \end{array} \right]$
Allanita	$(Ca,Ce,La,Na)_{0,19}(Al,FeBe,MgMn)_{0,28} \left[ \begin{array}{l} 0,1   \\ (OH)_{0,1}   (Si_{0,1}O_{0,38})(Si_{0,19}O_{0,66}) \end{array} \right]$
Piamontita	$Ca_{0,19}Al_{0,28} \left[ \begin{array}{l} 0,1   (OH)_{0,1}   (Si_{0,1}O_{0,38}) \\ (Si_{0,1}O_{0,38})(Si_{0,19}O_{0,66}) \end{array} \right]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DE LA EPIDOTA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 8	$\hat{\rho} = 0,977$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,125$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 11,251	)	99,9 < p = $\hat{\rho}$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> = 3,707	)	
t <sub>0,995</sub>	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 126,597	)	99,99 < P < 100
F(1/n-2) = 82,489	)	
F <sub>0,0001</sub>	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -1405,916$

Término constante

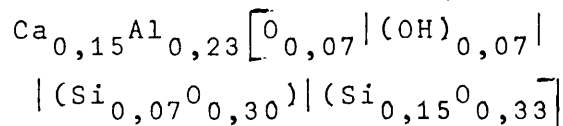
p = 13,475

Ecuación de la recta de equilibrio

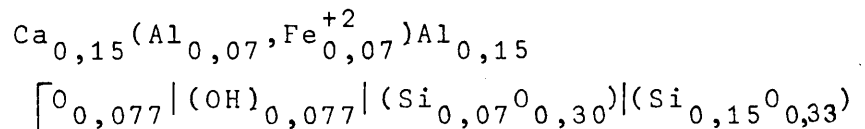
$D_E = -1405,916 \frac{1}{V} + 13,475$

Fórmulas aniónicas equivalentes

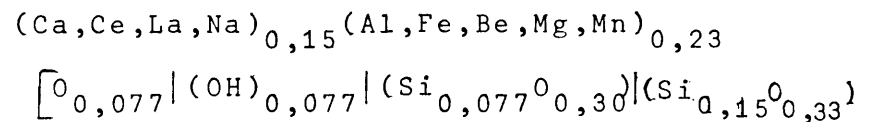
Clinozoisita



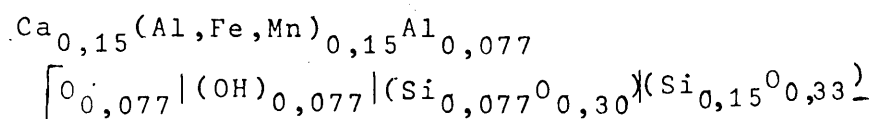
Epidota



Allanita



Piamontita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DE LA EPIDOTA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 8	$\beta = 0,866$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,693$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 4,241	)	
	)	99 < $\rho = \beta$ < 99,9
$t_{(n-2)}_{0,995} = 3,707$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 17,994	)	
	)	99 < P < 99,5
$F(1/n-2)_{0,0001} = 82,489$	)	



Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -2220,575$

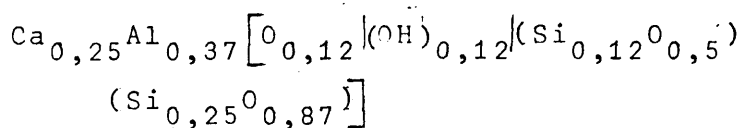
$p = 10,509$

Ecuación de la recta de equilibrio

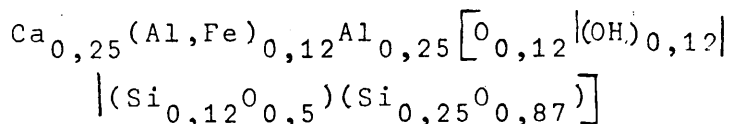
$$D_E = -2220,575 \frac{1}{V} + 10,509$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

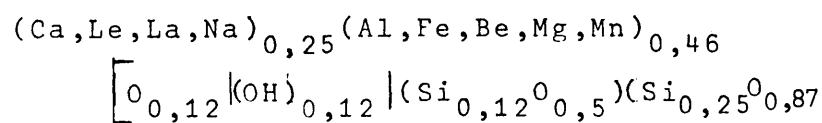
Clinozoisita



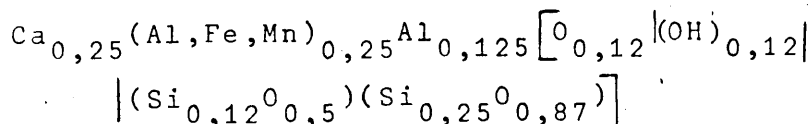
Epidota



Allanita



Piamontita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DE LA EPIDOTA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 8	$\hat{\rho} = 0,963$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,199$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 8,816	)	
	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 4,032$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 77,733	)	
	)	99,9 < P < 99,99
$F(1/n-2)_{0,0001} = 82,489$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
$\mu = -3555,896$	$p = 9,786$

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -3555,896 \frac{1}{V} + 9,786$$

Fórmulas radicales equivalentes

Clinozoisita	$Ca_{0,40}Al_{0,60} \left[ \begin{array}{l} O_{0,20}   (OH)_{0,20}   Si_{0,20} O_{0,80}   \\   Si_{0,40} O_{1,40} \end{array} \right]$
Epidota	$Ca_{0,40} (Al, Fe^{+2})_{0,20} Al_{0,40} \left[ \begin{array}{l} O_{0,20}   (OH)_{0,20}   \\   Si_{0,20} O_{0,80}   Si_{0,40} O_{1,40} \end{array} \right]$
Allanita	$(Ca, Ce, La, Na)_{0,40} (Al, Fe, Be, Mg, Mn)_{0,60} \left[ \begin{array}{l} O_{0,20}   (OH)_{0,20}   Si_{0,20} O_{0,80}   \\   Si_{0,40} O_{1,40} \end{array} \right]$
Piamontita	$Ca_{0,40} (Al, Fe, Mn)_{0,40} Al_{0,20} \left[ \begin{array}{l} O_{0,20}   (OH)_{0,20}   \\   Si_{0,20} O_{0,80}   Si_{0,40} O_{1,40} \end{array} \right]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DE LOS GRANATES

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 31	$\rho = 0,997$	$\sigma^2 Y/X = 0,333$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 76,743	)	
	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)0,995} = 2,756$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 5889,630	)	
	)	99,99 < p < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} < 21,663$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

$\mu = -1905,419$	$p = 27,319$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1905,419 \frac{1}{V} + 27,319$$

Fórmulas iónicas equivalentes

Piropo	$Mg_{0,3} Al_{0,2} [Si_{0,1}O_{0,4}]_3$
Almandino	$Fe_{0,3} Al_{0,2} [Si_{0,1}O_{0,4}]_3$
Espesartita	$Mn_{0,3} Al_{0,2} [Si_{0,1}O_{0,4}]_3$
Grosularia	$Ca_{0,3} Al_{0,2} [Si_{0,1}O_{0,4}]_3$
Andradita	$Ca_{0,3} Fe_{0,2} [Si_{0,1}O_{0,4}]_3$
Uvarovita	$Ca_{0,3} Cr_{0,2} [Si_{0,1}O_{0,4}]_3$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DE LOS GRANATES

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 31	$\rho = 0,997$	$\sigma^2 Y/X = 0,305$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 80,273	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
	)	
$t_{(n-2)0,995} = 2,756$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 6443,755	)	99,99 < p < 100
$F_{(1/n-2)0,0001} < 21,663$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$\mu = -1590,184$	$p = 27,588$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1590,184 \frac{1}{V} + 27,588$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Piropo	$Mg_{0,25}Al_{0,166} [Si_{0,08}O_{0,33}]_3$
Almandino	$Fe_{0,25}Al_{0,166} [Si_{0,08}O_{0,33}]_3$
Espesartita	$Mn_{0,25}Al_{0,166} [Si_{0,08}O_{0,33}]_3$
Grosularia	$Ca_{0,25}Al_{0,166} [Si_{0,08}O_{0,33}]_3$
Andradita	$Ca_{0,25}Fe_{0,166} [Si_{0,08}O_{0,33}]_3$
Uvarovita	$Ca_{0,25}Cr_{0,166} [Si_{0,08}O_{0,33}]_3$



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DE LOS GRANATES

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 31	$\beta = 0,996$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,521$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 61,287	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
	)	
$t_{(n-2)}_{0,995} = 2,756$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 3756,139	)	99,99 < P < 100
	)	
$F(1/n-2)_{0,0001} < 21,663$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -2369,770$	$p = 26,486$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -2369,770 \frac{1}{V} + 26,486$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Piropo	$Mg_{0,37} Al_{0,25} [Si_{0,125} O_{0,5}]_3$
Almandino	$Fe_{0,37} Al_{0,25} [Si_{0,125} O_{0,5}]_3$
Espesartita	$Mn_{0,37} Al_{0,25} [Si_{0,125} O_{0,5}]_3$
Grosularia	$Ca_{0,37} Al_{0,25} [Si_{0,125} O_{0,5}]_3$
Andradita	$Ca_{0,37} Fe_{0,25} [Si_{0,125} O_{0,5}]_3$
Uvarovita	$Ca_{0,37} Cr_{0,25} [Si_{0,125} O_{0,5}]_3$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DE LOS GRANATES

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 31	$\rho = 0,994$	$\sigma^2 Y/X = 0,730$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 51,722	)	
	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 2,756$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 2675,197	)	
	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} < 21,663$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -6398,067$	$p = 28,713$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -6398,067 \frac{1}{V} + 28,713$$

Fórmulas radicales equivalentes

Piropo	Mg Al <sub>0,66</sub> [Si <sub>0,33</sub> <sup>O</sup> <sub>1,33</sub> ] <sub>3</sub>
Almandino	Fe Al <sub>0,66</sub> [Si <sub>0,33</sub> <sup>O</sup> <sub>1,33</sub> ] <sub>3</sub>
Espesartita	Mn Al <sub>0,66</sub> [Si <sub>0,33</sub> <sup>O</sup> <sub>1,33</sub> ] <sub>3</sub>
Grosularia	Ca Al <sub>0,66</sub> [Si <sub>0,33</sub> <sup>O</sup> <sub>1,33</sub> ] <sub>3</sub>
Andradita	Ca Fe <sub>0,66</sub> [Si <sub>0,33</sub> <sup>O</sup> <sub>1,33</sub> ] <sub>3</sub>
Uvarovita	Ca Cr <sub>0,66</sub> [Si <sub>0,33</sub> <sup>O</sup> <sub>1,33</sub> ] <sub>3</sub>

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

PIRALSPITA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 17	$\rho = 0,959$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,287$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 13,130	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 2,947$	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 172,407	)	99,99 < P < 100
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 27,448$	)	



Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -2012,824$

Término constante

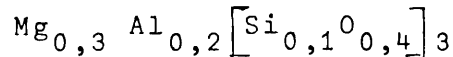
$p = 36,516$

Ecuación de la recta de equilibrio

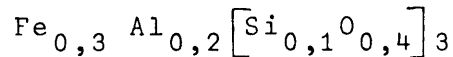
$D_E = -2012,824 \frac{1}{V} + 36,516$

Fórmulas iónicas equivalentes

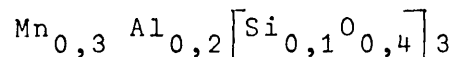
Piropo



Almandino



Espesartita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

PIRALSPITA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 17	$\rho = 0,963$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,259$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 13,986	)	) 99,9 $< \rho = \beta < 100$
$t_{(n-2)}_{0,995} = 2,947$	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 192,829	)	) 99,99 $< P < 100$
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 27,448$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$\mu = -1636,747$	$p = 32.369$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1636,747 \frac{1}{V} + 32,369$$

-----  
Fórmulas aniónicas equivalentes

Piropo	$Mg_{0,25}Al_{0,166} [Si_{0,08}O_{0,33}]_3$
Almandino	$Fe_{0,25}Al_{0,166} [Si_{0,08}O_{0,33}]_3$
Espesartita	$Mn_{0,25}Al_{0,166} [Si_{0,08}O_{0,33}]_3$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

PIRALSPITA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 17	$\beta = 0,933$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,464$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 10,042	)	
$t_{(n-2)0,995} = 2,947$	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 100,845	)	
$F(1/n-2)_{0,0001} = 27,448$	)	99,99 < P < 100
	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

$\mu = -254,875$	$p = 36,195$
------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -254,875 \frac{1}{V} + 36,195$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Piropo	$Mg_{0,37}Al_{0,25} [Si_{0,125}O_{0,5}]_3$
Almandino	$Fe_{0,37}Al_{0,25} [Si_{0,125}O_{0,5}]_3$
Espesartita	$Mn_{0,37}Al_{0,25} [Si_{0,125}O_{0,5}]_3$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

PIRALSPITA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 17	$\rho = 0,934$	$\sigma^2 Y/X = 0,456$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 10,147	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)} = 2,947$	)	
$t_{(n-2)}_{0,995}$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 102,961	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2) = 27,448$	)	
$F(1/n-2)_{0,0001}$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -5864,667$

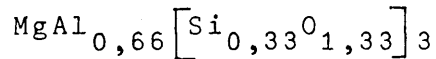
$p = 14,930$

Ecuación de la recta de equilibrio

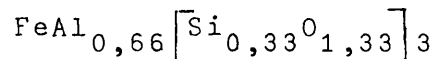
$$D_E = -5864,667 \frac{1}{V} + 14,930$$

-----  
Fórmulas radicales equivalentes

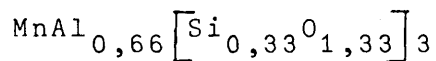
Piropo



Almandino



Espesartita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

UGRANDITA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 14	$\rho = 0,982$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,432$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 18,442	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> = 3,055	)	
t <sub>(n-2)</sub> 0,995	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 340,129	)	99,99 < P < 100
F(1/n-2) = 32,427	)	
F(1/n-2)0,0001	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1876,145$

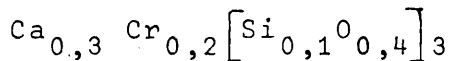
$p = 25,045$

Ecuación de la recta de equilibrio

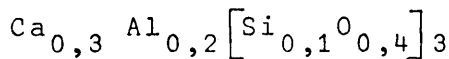
$D_E = -1876,145 \frac{1}{V} + 25,045$

Fórmulas iónicas equivalentes

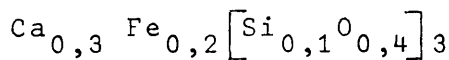
Uvarovita



Grosularia



Andradita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

UGRANDITA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 14	$\rho = 0,983$	$\sigma^2 Y/X = 0,407$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 19,030	)	
	)	99,9 $< \rho = \beta < 100$
$t_{(n-2)0,995} = 3,055$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 362,168	)	
	)	99,99 $< P < 100$
$F(1/n-2)_{0,0001} = 32,427$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

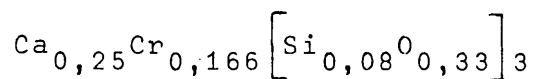
$\mu = -1565,530$	$p = 25,294$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

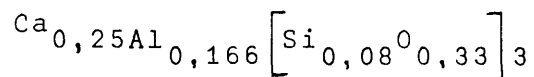
$$D_E = -1565,530 \frac{1}{V} + 25,294$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

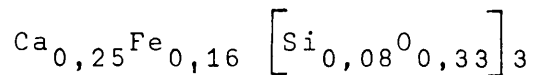
Uvarovita



Grosularia



Andradita





CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

UGRANDITA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 14	$\beta = 0,974$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,630$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 15,148	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 3,055	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 229,476	)	99,99 < p < 100
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 32,427	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -2248,356$

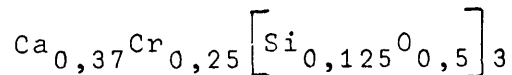
p = 18,973

Ecuación de la recta de equilibrio

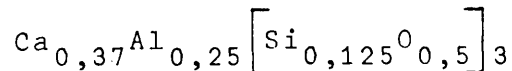
$$D_E = -2248,356 \frac{1}{V} + 18,973$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

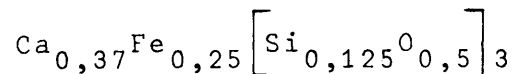
Uvarovita



Grosularia



Andradita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

UGRANDITA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 14	$\rho = 0,957$	$\sigma^2_{Y/X} = 1,048$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 11,542	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 3,055	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 133,236	)	99,99 < P < 100
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 32,427	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación                      Término constante

$\mu = -5863,719$	$p = 16,320$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -5863,719 \frac{1}{V} + 16,320$$

-----

Fórmulas radicales equivalentes

Uvarovita	$Ca Cr_{0,66} [Si_{0,33} O_{1,33}]_3$
Grosularia	$Ca Al_{0,66} [Si_{0,33} O_{1,33}]_3$
Andradita	$Ca Fe_{0,66} [Si_{0,33} O_{1,33}]_3$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

ORTHOPIROXENOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	$\rho = 0,909$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,367$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 5,777	)	99,9 < p = $\rho$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> = 3,499	)	
t <sub>0,995</sub>	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 33,382	)	99,9 < p < 99,99
F(1/n-2) = 62,167	)	
F <sub>0,0001</sub>	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
$\mu = -1992,838$	$p = 27,444$

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1992,838 \frac{1}{V} + 27,444$$

Fórmulas iónicas equivalentes



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

ORTHOPIROXENOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	$\rho = 0,932$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,276$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 6,838	)	99 < $\rho$ = $\beta$ < 99,9
$t_{(n-2)} = 3,499$	)	
$t_{(n-2)} = 3,499$	)	



Contraste de lineabilidad

Nivel F = 46,770	)	99,9 < P < 99,99
$F(1/n-2) = 62,167$	)	
$F(1/n-2) = 62,167$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

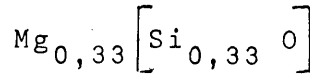
$\mu = -1682,596$	$p = 29,565$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

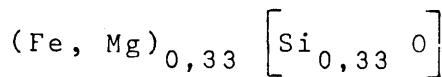
$$D_E = -1682,596 \frac{1}{V} + 29,565$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

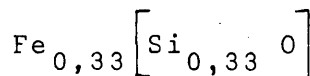
Enstatita



Hiperstena



Ortoferrosilita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

ORTHOPIROXENOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	$\rho = 0,865$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,531$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 4,572	)	99 < $\rho = \beta$ < 99,9
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 3,499	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 20,907	)	99,5 < P < 99,9
F <sub>(1/n-2)</sub> <sub>0,0001</sub> = 62,167	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

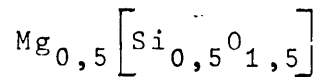
$\mu = -2369,807$	$p = 19,853$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

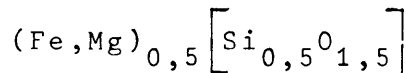
$$D_E = -2369,807 \frac{1}{V} + 19,853$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

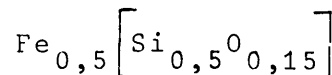
Enstatita



Hiperstena



Ortoferrosilita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

ORTHOPIROXENOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	$\rho = 0,933$	$\sigma^2 Y/X = 0,272$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 6,890	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 3,499	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 47,907	)	99,9 < P < 99,99
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 62,167	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -5042,102$

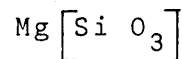
p = 29368

Ecuación de la recta de equilibrio

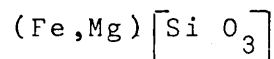
$$D_E = -5042,102 \frac{1}{V} + 29,368$$

-----  
Fórmulas radicales equivalentes

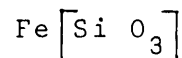
Enstatita



Hiperstena



Ortoferrosilita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CLINOPIROXENOS CALCICOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 45	$\rho = 0,907$	$\sigma^2_{Y/X} = 1,279$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 14,119	)	
	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} < 2,704$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 199,352	)	
	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} < 18,668$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$\mu = -1986,154$	$p = 27,940$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1986,154 \frac{1}{V} + 27,940$$

Fórmulas iónicas equivalentes

Fasaita	$Ca_{0,2} (Al, Fe^{+2}, Fe^{+3}, Mg)_{0,2} [(Si, Al)_{0,4} O_{1,2}]$
Augita	$(Al, Fe^{+2}, Fe^{+3}, Ca, Ti, Mg)_{0,4} [(Si, Al)_{0,4} O_{1,2}]$
Diopsido	$Ca_{0,2} Mg_{0,2} [Si_{0,4} O_{1,2}]$
Hedembergita	$Ca_{0,2} Fe_{0,2} [Si_{0,4} O_{1,2}]$
Pigeonita	$(Mg, Fe, Ca)_{0,2} (Mg, Fe)_{0,2} [Si_{0,4} O_{1,2}]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CLINOPIROXENOS CALCICOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 45	$\rho = 0,931$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,960$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 16,733	)	
	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} < 2,704$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 280,010	)	
	)	99,99 < P < 100
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} < 18,668$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

$\mu = -1622,973$	$p = 24,941$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1622,973 \frac{1}{V} + 24,941$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Fasaita	$Ca_{0,166}(Al, Fe^{+2}, Fe^{+3}, Mg)_{0,166} [ (Si, Al)_{0,33} O ]$
Augita	$(Al, Fe^{+2}, Fe^{+3}, Ca, Ti, Mg)_{0,33} [ (Si, Al)_{0,33} O ]$
Diopsido	$Ca_{0,166} Mg_{0,166} [ Si_{0,33} O ]$
Hedembergita	$Ca_{0,166} Fe_{0,166} [ Si_{0,33} O ]$
Pigeonita	$(Mg, Fe, Ca)_{0,166} (Mg, Fe)_{0,166} [ Si_{0,33} O ]$



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CLINOPIROXENOS CALCICOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 45	$\beta = 0,816$	$\sigma^2_{Y/X} = 2,040$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 10,440	)	
	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} < 2,704$	)	



Contraste de lineabilidad

Nivel F = 108,998	)	
	)	99,99 < p < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} < 18,668$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -2416,077$

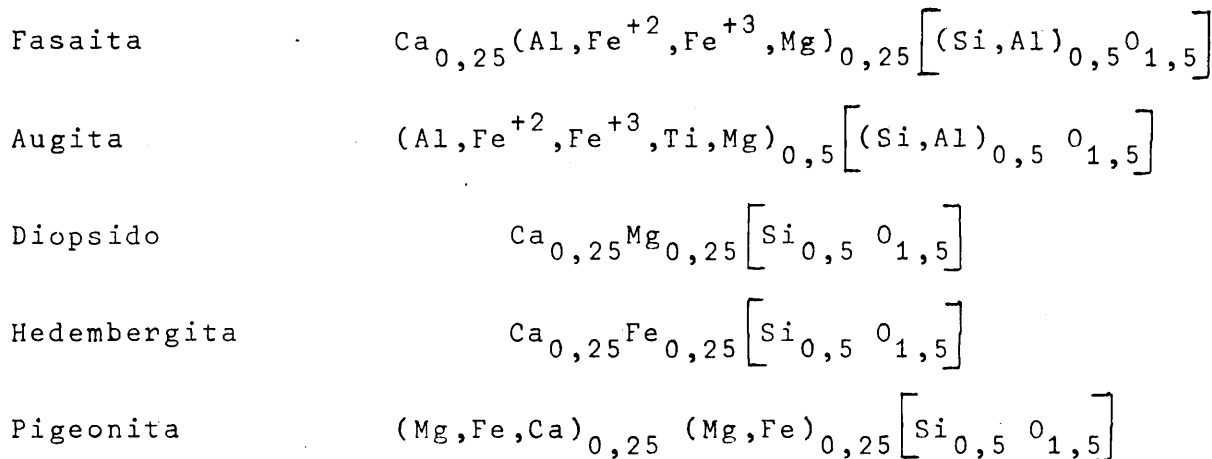
Término constante

p = 24,092

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -2416,077 \frac{1}{V} + 24,092$$

Fórmulas catiónicas equivalentes



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CLINOPIROXENOS CALCICOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 45	$\rho = 0,926$	$\sigma^2 Y/X = 1,023$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 16,132	)	
	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} < 2,704$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 260,240	)	
	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} < 18,668$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación                      Término constante

$\mu = -4814,986$	$p = 23,235$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -4814,986 \frac{1}{V} + 23,235$$

-----

Fórmulas radicales equivalentes

Fasaita	$Ca_{0,5}(Mg, Fe^{+2}, Fe^{+3}, Al)_{0,5} [(Si, Al) O_3]$
Augita	$(Al, Fe^{+2}, Fe^{+3}, Ca, Ti, Mg) [(Si, Al) O_3]$
Diopsido	$Ca_{0,5} Mg_{0,5} [Si O_3]$
Hedembergita	$Ca_{0,5} Fe_{0,5} [Si O_3]$
Pigeonita	$(Mg, Fe, Ca)_{0,5} (Mg, Fe)_{0,5} [Si O_3]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CLINOPIROXENOS ALCALINOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	$\rho = 0,944$	$\sigma^2 Y/X = 0,655$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 25,969	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 3,499$	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 674,436	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} = 62,167$	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$$\mu = -1985,410$$

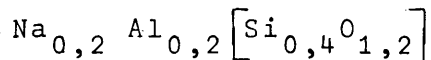
$$p = 22,753$$

Ecuación de la recta de equilibrio

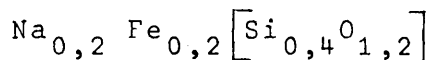
$$D_E = -1985,410 \frac{1}{V} + 22,753$$

Fórmulas iónicas equivalentes

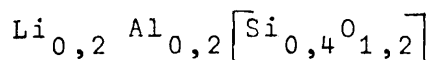
Jadeita



Egirina



Esodumena



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CLINOPIROXENOS ALCALINOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	$\delta = 0,998$	$\sigma^2 Y/X = 0,163$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

$$\begin{array}{l} R = 52,236 \\ t_{(n-2)}_{0,995} = 3,499 \end{array} \quad \begin{array}{l} ) \\ ) \\ ) \end{array} \quad \begin{array}{l} 99,9 < \rho = \delta < 100 \end{array}$$

Contraste de lineabilidad

$$\begin{array}{l} \text{Nivel F} = 2728,630 \\ F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 62,167 \end{array} \quad \begin{array}{l} ) \\ ) \\ ) \end{array} \quad \begin{array}{l} 99,99 < P < 100 \end{array}$$

Potencial químico equivalente de la asociación

$$\mu = -1544,555$$

Término constante

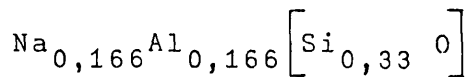
$$p = 13,043$$

Ecuación de la recta de equilibrio

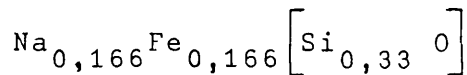
$$D_E = -1544,555 \frac{1}{V} + 13,043$$

-----  
Fórmulas aniónicas equivalentes

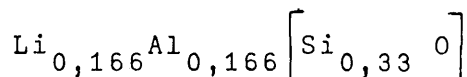
Jadeita



Egirina



Espodumena



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CLINOPIROXENOS ALCALINOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	$\beta = 0,978$	$\sigma^2 Y/X = 2,669$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

$$R = 12,660 \quad )$$

$$t_{(n-2)}_{0,995} = 3,499 \quad ) \quad 99,9 < \rho = \beta < 100$$

Contraste de lineabilidad

$$\text{Nivel } F = 160,275 \quad )$$

$$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 62,167 \quad ) \quad 99,99 < P < 100$$

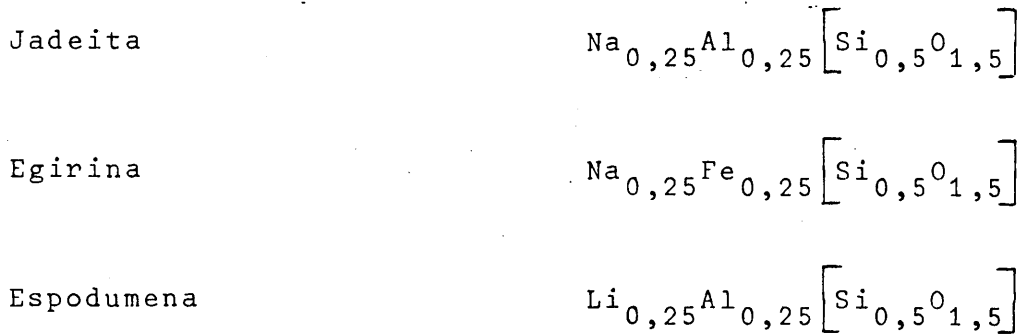
<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

$\mu = -2721,411$	$p = 36,611$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -2721,411 \frac{1}{V} + 36,611$$

Fórmulas catiónicas equivalentes





CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DE LOS PIROXENOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 63	$\rho = 0,948$	$\sigma^2_{Y/X} = 3,153$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 23,370	)	
	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 2,660$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 546,193	)	
	)	99,99 < p < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} = 17,377$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -2476,417$

Término constante

$p = 64,229$

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -2476,417 \frac{1}{V} + 64,299$

Fórmulas iónicas equivalentes

Enstatita	$Mg_{0,4} [Si_{0,4}^{O_{1,2}}]$
Hiperstena	$(Fe, Mg)_{0,4} [Si_{0,4}^{O_{1,2}}]$
Ortoferrosilita	$Fe_{0,4} [Si_{0,4}^{O_{1,2}}]$
Fasaita	$Ca_{0,2} (Al, Fe^{+2}, Fe^{+3}, Mg)_{0,2} [(Si, Al)_{0,4}^{O_{1,2}}]$
Augita	$(Al, Fe^{+2}, Fe^{+3}, Ca, Ti, Mg)_{0,4} [(Si, Al)_{0,4}^{O_{1,2}}]$
Diopsido	$Ca_{0,2} Mg_{0,2} [Si_{0,4}^{O_{1,2}}]$
Hedembergita	$Ca_{0,2} Fe_{0,2} [Si_{0,4}^{O_{1,2}}]$
Pigeonita	$(Mg, Fe, Ca)_{0,2} (Mg, Fe)_{0,2} [Si_{0,4}^{O_{1,2}}]$
Jadeita	$Na_{0,2} Al_{0,2} [Si_{0,4}^{O_{1,2}}]$
Egirina	$Na_{0,2} Fe_{0,2} [Si_{0,4}^{O_{1,2}}]$
Espodumena	$Li_{0,2} Al_{0,2} [Si_{0,4}^{O_{1,2}}]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DE LOS PIROXENOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 63	$\delta = 0,960$	$\sigma^2 Y/X = 2,447$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 26,858	)	99,9 < $\rho = \delta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 2,660$	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 721,390	)	99,99 < p < 100
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 17,377$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$\mu = -1930,814$	$p = 52,245$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1930,814 \frac{1}{V} + 52,245$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Enstatita	$Mg_{0,33} [Si_{0,33} O]$
Hiperstena	$(Fe, Mg)_{0,33} [Si_{0,33} O]$
Ortoferrosilita	$Fe_{0,33} [Si_{0,33} O]$
Fasaita	$Ca_{0,166} (Al, Fe^{+2}, Fe^{+3}, Mg)_{0,166} [(Si, Al)_{0,33} O]$
Augita	$(Al, Fe^{+2}, Fe^{+3}, Ca, Ti, Mg)_{0,33} [(Si, Al)_{0,33} O]$
Diopsido	$Ca_{0,166} Mg_{0,166} [Si_{0,33} O]$
Hedembergita	$Ca_{0,166} Fe_{0,166} [Si_{0,33} O]$
Pigeonita	$(Mg, Fe, Ca)_{0,166} (Mg, Fe)_{0,166} [Si_{0,33} O]$
Jadeita	$Na_{0,166} Al_{0,166} [Si_{0,33} O]$
Egirina	$Na_{0,166} Fe_{0,166} [Si_{0,33} O]$
Espodumena	$Li_{0,166} Al_{0,166} [Si_{0,33} O]$





CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DE LOS PIROXENOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 63	$\rho = 0,960$	$\sigma^2 Y/X = 2,420$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 27,024	)	
	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 2,660$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 730,301	)	
	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} = 17,377$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
$\mu = -5725,816$	$p = 50,157$

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -5725,816 \frac{1}{V} + 50,157$$

Fórmulas radicales equivalentes

Enstatita	Mg [Si O <sub>3</sub> ]
Hiperstena	(Fe, Mg) [Si O <sub>3</sub> ]
Ortoferrosilita	Fe [Si O <sub>3</sub> ]
Fasaita	Ca <sub>0,5</sub> (Mg, Fe <sup>+2</sup> , Fe <sup>+3</sup> , Al) <sub>0,5</sub> [(Si, Al) O <sub>3</sub> ]
Augita	(Al, Fe <sup>+2</sup> , Fe <sup>+3</sup> , Ca, T, Mg) [(Si, Al) O <sub>3</sub> ]
Diopsido	Ca <sub>0,5</sub> Mg <sub>0,5</sub> [Si O <sub>3</sub> ]
Hedembergita	Ca <sub>0,5</sub> Fe <sub>0,5</sub> [Si O <sub>3</sub> ]
Pigeonita	(Mg, Fe, Ca) <sub>0,5</sub> (Mg, Fe) <sub>0,5</sub> [Si O <sub>3</sub> ]
Jadeita	Na <sub>0,5</sub> Al <sub>0,5</sub> [Si O <sub>3</sub> ]
Egirina	Na <sub>0,5</sub> Fe <sub>0,5</sub> [Si O <sub>3</sub> ]
Espodumena	Li <sub>0,5</sub> Al <sub>0,5</sub> [Si O <sub>3</sub> ]

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

ORTOANFIBOLES

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 8	$\rho = 0,951$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,952$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 7,593	)	
$t_{(n-2)} = 3,707$	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995}$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 57,654	)	
$F(1/n-2) = 82,489$	)	99,9 < P < 99,99
$F(1/n-2)_{0,0001}$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$$\mu = -2134,793$$

Término constante

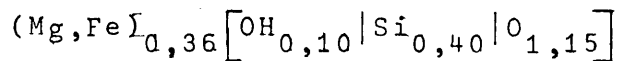
$$p = 40,966$$

Ecuación de la recta de equilibrio

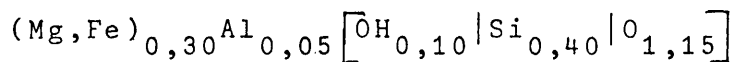
$$D_E = -2134,793 \frac{1}{V} + 40,966$$

Fórmulas iónicas equivalentes

Antofillita



Gedrita



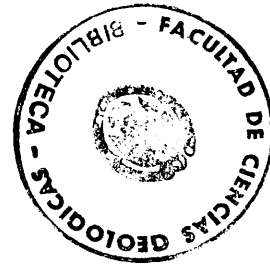
CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

ORTOANFIBOLES

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 8	$\delta = 0,932$	$\sigma^2 Y/X = 1,320$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 6,316	)	99,9 < $\rho = \delta$ < 100
$t_{(n-2)} = 3,707$	)	
$t_{(n-2)} = 3,707$	)	



Contraste de lineabilidad

Nivel F = 39,899	)	99,9 < P < 99,99
$F(1/n-2) = 82,489$	)	
$F(1/n-2) = 82,489$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

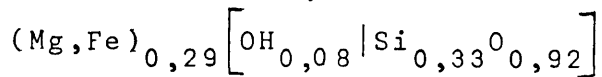
$\mu = -1551,176$	$p = 23,057$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

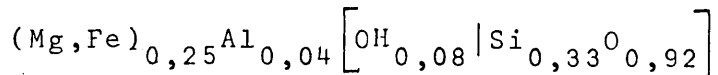
$$D_E = -1551,176 \frac{1}{V} + 23,057$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Antofillita



Gedrita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

ORTOANFIBOLES

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 8	$\rho = 0,885$	$\sigma^2_{Y/X} = 2,184$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 4,662	)	99 < $\rho = \beta$ < 99,9
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 3,707	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 21,737	)	99,5 < P < 99,9
F <sub>(1/n-2)</sub> <sub>0,0001</sub> = 82,489	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -2720,608$

$p = 39,802$

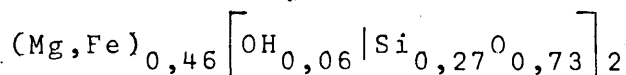
Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -2720,608 \frac{1}{V} + 39,802$

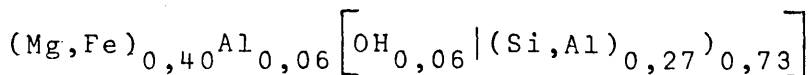
-----

Fórmulas catiónicas equivalentes

Antofillita



Gedrita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

ORTOANFIBOLES

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 8	$\rho = 0,931$	$\sigma^2 Y/X = 1,335$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 6,275	)	
	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 3,707$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 39,384	)	
	)	99,9 < P < 99,99
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 82,489$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

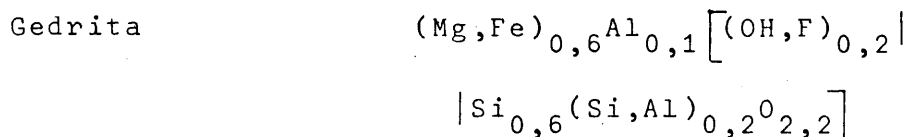
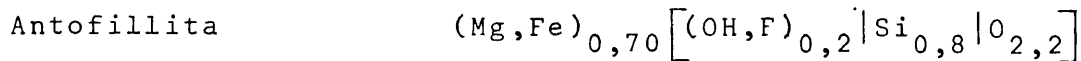
Término constante

$\mu = -3729,093$	$p = 23,261$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -3729,093 \frac{1}{V} + 23,261$$

Fórmulas radicales equivalentes



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CLINOANFIBOLES CALCICOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 16	$\hat{\rho} = 0,8440$	$\sigma^2 Y/X = 1,504$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 5,887	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> = 2,977	)	
t <sub>0,995</sub>	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 34,667	)	99,99 < P < 100
F(1/n-2) = 32,427	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -2185,502$

Término constante

p = 46,638

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -2185,502 \frac{1}{V} + 46,638$

Fórmulas iónicas equivalentes

Hornblenda	$Ca_{0,10} Na_{0,05} (Mg, Fe)_{0,25} [Si_{0,35} Al_{0,05} O_{1,1}   (OH)_{0,1}]$
Pargasita	$Ca_{0,10} Na_{0,05} Mg_{0,20} (Al, Fe)_{0,05} [Si_{0,30} Al_{0,10} O_{1,1}   (OH, F)_{0,1}]$
Hastingita	$Ca_{0,10} Na_{0,05} (Fe, Mg)_{0,25} [Si_{0,30} Al_{0,10} O_{1,1}   (OH)_{0,1}]$
Richterita	$Ca_{0,05} Na_{0,10} (Mg, Fe^{+2}, Mn, Fe^{+3}, Al)_{0,25} [Si_{0,40} O_{1,1}   (OH, F)_{0,1}]$
Arfvedsonita	$Ca_{0,025} Na_{0,125} (Fe^{+2}, Mg, Fe^{+3}, Al)_{0,25} [Si_{0,37} O_{1,1}   (OH, F)_{0,1}]$
Kaersutita	$Ca_{0,10} (Na, K)_{0,05} (Mg, Fe^{+2}, Fe^{+3})_{0,2} [Si_{0,30} O_{1,1}   (O, OH, F)_{0,1}]$
Barkevikita	$Ca_{0,10} (Na, K)_{0,05} (Fe^{+2}, Mg, Fe^{+3}, Mn)_{0,25} [Si_{0,325} O_{1,1}   (OH)_{0,1}]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CLINOANFIBOLES CALCICOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 16	$\hat{\rho} = 0,635$	$\sigma^2_{Y/X} = 3,120$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 3,075	)	99 < p = $\hat{\rho}$ < 99,9
$t_{(n-2)} = 2,977$	)	
$t_{0,995}$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 9,461	)	99 < p < 99,5
$F_{(1/n-2)} = 32,427$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$\mu = -1511,911$	$p = 20,397$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1511,911 \frac{1}{V} + 20,397$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Hornblenda	$Ca_{0,08}Na_{0,04}(Mg,Fe)_{0,21}$ $[Si_{0,29}Al_{0,04}O_{0,92} (OH)_{0,08}]$
Pargasita	$Ca_{0,08}Na_{0,04}Mg_{0,166}(Al,Fe)_{0,04}$ $[Si_{0,25}Al_{0,08}O_{0,92} (OH)_{0,08}]$
Hastingita	$Ca_{0,08}Na_{0,04}(Fe,Mg)_{0,21}$ $[Si_{0,25}Al_{0,08}O_{0,92} (OH)_{0,08}]$
Richterita	$Ca_{0,04}Na_{0,04}(Mg,Fe^{+2},Mn,Fe^{+3},Al)_{0,21}$ $[Si_{0,33}O_{0,92} (OH)_{0,08}]$
Arfvedsonita	$Ca_{0,02}Na_{0,10}(Fe^{+2},Mg,Fe^{+3},Al)_{0,21}$ $[Si_{0,31}O_{0,92} (OH,F)_{0,08}]$
Kaersutita	$Ca_{0,08}(Na,K)_{0,04}(Mg,Fe^{+2},Fe^{+3})_{0,156}Ti_{0,04}$ $[Si_{0,25}Al_{0,08}O_{0,92} (O,OH,F)_{0,08}]$
Barkevikita	$Ca_{0,08}(Na,K)_{0,04}(Fe^{+2},Mg,Fe^{+3},Mn)_{0,21}$ $[Si_{0,27}Al_{0,062}O_{0,92} (O,OH,F)_{0,08}]$



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CLINOANFIBOLES CALCICOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 16	$\beta = 0,917$	$\sigma^2 X/Y = 0,831$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 8,606	)	
	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 2,977$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 74,067	)	
	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} = 32,427$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación                      Término constante

$\mu = -2228,869$	$p = 17,008$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -2228,869 \frac{1}{V} + 17,008$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Hornblenda	$Ca_{0,125}Na_{0,05}(Mg,Fe)_{0,31}$ [Si <sub>0,44</sub> Al <sub>0,06</sub> O <sub>1,37</sub> (OH) <sub>0,125</sub> ]
Pargasita	$Ca_{0,125}Ca_{0,06}Mg_{0,25}(Al,Fe)_{0,06}$ [Si <sub>0,375</sub> Al <sub>0,125</sub> O <sub>1,37</sub> (OH,F) <sub>0,125</sub> ]
Hastingita	$Ca_{0,125}Ca_{0,06}(Fe,Mg)_{0,31}$ [Si <sub>0,375</sub> Al <sub>0,125</sub> O <sub>1,37</sub> (OH) <sub>0,125</sub> ]
Richterita	$Ca_{0,06}Na_{0,125}(Mg,Fe^{+2},Mn,Fe^{+3},Al)_{0,31}$ [Si <sub>0,5</sub> O <sub>1,37</sub> (OH,F) <sub>0,125</sub> ]
Anfredsomita	$Ca_{0,05}Ca_{0,15}(Fe^{+2},Mg,Fe^{+3},Al)_{0,25}$ [Si <sub>0,47</sub> Al <sub>0,06</sub> O <sub>1,37</sub> (OH,F) <sub>0,125</sub> ]
Kaersutita	$Ca_{0,125}(Na,K)_{0,06}(Fe^{+2},Mg,Fe^{+3},Mn)_{0,31}Ti_{0,0}$ [Si <sub>0,375</sub> Al <sub>0,125</sub> O <sub>1,37</sub> (O,OH,F) <sub>0,125</sub> ]
Barkevikita	$Ca_{0,125}(Na,K)_{0,06}(Fe^{+2},Mg,Fe^{+3},Mn)_{0,31}$ [Si <sub>0,40</sub> Al <sub>0,093</sub> O <sub>1,37</sub> (OH) <sub>0,125</sub> ]

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CLINOANFIBOLES CALCICOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 16	$\hat{\rho} = 0,632$	$\sigma^2 Y/X = 3,139$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 3,053	)	99 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> = 2,977	)	
t <sub>0,995</sub>	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 9,323	)	99 < P < 99,5
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 32,427	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -3638,243$	$p = 20,719$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -3638,243 \frac{1}{V} + 20,719$$

Fórmulas radicales equivalentes

Hornblenda	$Ca_{0,2}Na_{0,1}(Mg,Fe)_{0,1} [Si_{0,6}Al_{0,2}O_{2,2}   (OH)_{0,2}]$
Pargasita	$Ca_{0,2}Na_{0,1}Mg_{0,4}(Al,Fe)_{0,1} [Si_{0,6}Al_{0,2}O_{2,2}   (OH,F)_{0,2}]$
Hastingita	$Ca_{0,2}Na_{0,1}(Fe,Mg)_{0,1} [Si_{0,6}Al_{0,2}O_{2,2}   (OH)_{0,2}]$
Richterita	$Ca_{0,1}Na_{0,2}(Mg,Fe^{+2},Mn,Fe^{+3},Al)_{0,5} [Si_{0,8}O_{2,2}   (OH,F)_{0,2}]$
Arfvedsonita	$Ca_{0,05}Na_{0,025}(Fe,Mg,Fe^{+3},Al)_{0,5} [Si_{0,75}Al_{0,05}O_{2,2}   (OH,F)_{0,2}]$
Kaersutita	$Ca_{0,2}(Na,K)_{0,1}(Mg,Fe^{+2},Fe^{+3})_{0,4}Ti_{0,1} [Si_{0,6}Al_{0,2}O_{2,2}   (O,OH,F)_{0,2}]$
Barkevikita	$Ca_{0,2}(Na,K)_{0,1}(Fe^{+2},Mg,Fe^{+3},Mn)_{0,5} [Si_{0,65}Al_{0,15}   (OH,F)_{0,2}]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CLINOANFIBOLES ALCALINOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	$\rho = 0,975$	$\sigma^2_{Y/X} = 2,510$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 11,600	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> = 3,499	)	
t <sub>0,995</sub>	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 134,577	)	99,99 < p < 100
F(1/n-2) = 62,167	)	
F <sub>0,0001</sub>	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

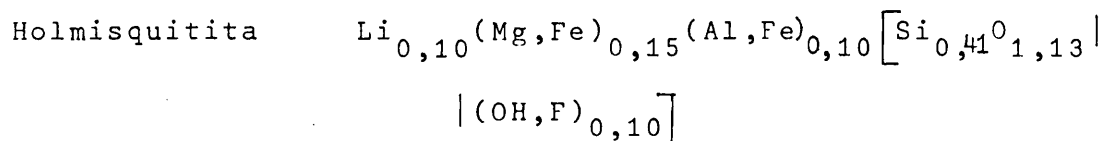
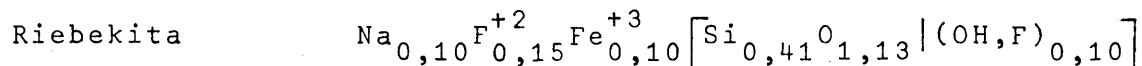
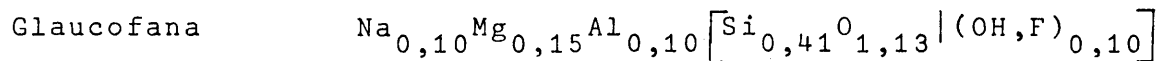
$$\mu = -2036,805$$

$$p = 29,494$$

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -2036,805 \frac{1}{V} + 29,494$$

Fórmulas iónicas equivalentes



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CLINOANFIBOLES ALCALINOS

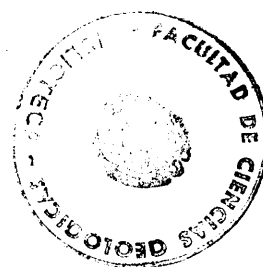
<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	$\rho = 0,952$	$\sigma^2_{Y/X} = 2,506$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 8,246	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 3,499	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 68,003	)	99,99 < P < 100
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 62,167	)	



Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$\mu = -1518,296$	$p = 16,606$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1518,296 \frac{1}{V} + 16,606$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Glauconita	$Na_{0,08}Mg_{0,125}Al_{0,08} [Si_{0,33}O_{0,92}   (OH,F)_{0,08}]$
Riebekita	$Na_{0,08}Fe^{+2}_{0,125}Fe^{+3}_{0,08} [Si_{0,33}O_{0,92}   (OH,F)_{0,08}]$
Holmisquitita	$Li_{0,08}(Mg,Fe)_{0,125}(Al,Fe)_{0,08} [Si_{0,33}O_{0,92}   (OH,F)_{0,08}]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CLINOANFIBOLES ALCALINOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	$\beta = 0,992$	$\sigma^2 Y/X = 3,982$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 6,340	)	
	)	99 < $\rho = \beta$ < 99,9
$t_{(n-2)}_{0,995} = 3,499$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 40,197	)	
	)	99,9 < P < 99,99
$F(1/n-2)_{0,0001} = 62,167$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

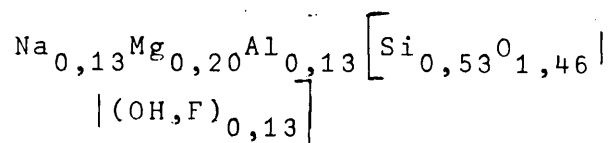
$\mu = -2523,106$	$p = 23,154$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

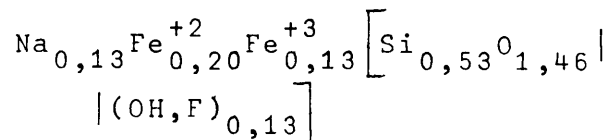
$$D_E = -2523,106 \frac{1}{V} + 23,154$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

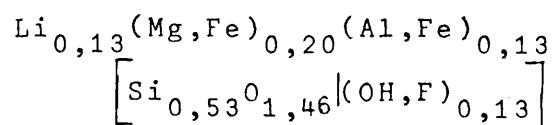
Glaucofana



Riebekita



Holmisquitita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CLINOANFIBOLES ALCALINOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	$\hat{\rho} = 0,952$	$\sigma^2_{Y/X} = 2,504$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 8,250	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> = 3,499	)	
t <sub>0,995</sub>	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 68,067	)	99,99 < P < 100
F(1/n-2) = 62,167	)	
F <sub>0,0001</sub>	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$\mu = -3639,492$	$p = 16,408$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -3639,492 \frac{1}{V} + 16,408$$

Fórmulas radicales equivalentes

Glaucofana	$\text{Na}_{0,2}\text{Mg}_{0,3}\text{Al}_{0,2} \left[ \text{Si}_{0,8}\text{O}_{2,2}   (\text{OH}, \text{F})_{0,2} \right]$
Riebekita	$\text{Na}_{0,2}\text{Fe}^{+2}_{0,3}\text{Fe}_{0,2} \left[ \text{Si}_{0,8}\text{O}_{2,2}   (\text{OH}, \text{F})_{0,2} \right]$
Holmisquitita	$\text{Li}_{0,1}(\text{Mg}, \text{Fe})_{0,3}(\text{Al}, \text{Fe})_{0,2} \left[ \text{Si}_{0,8}\text{O}_{2,2}   (\text{OH}, \text{F})_{0,2} \right]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DE LOS PIROXENOIDES

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 22	$\hat{\rho} = 0,998$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,090$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 87,339	)	
$t_{(n-2)}_{0,995} = 2,845$	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 7628,103	)	
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 23,399$	)	99,99 < P < 100

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1877,189$

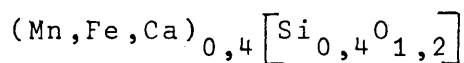
$p = 17,701$

Ecuación de la recta de equilibrio

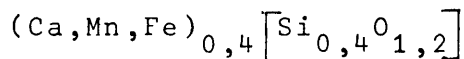
$D_E = -1877,189 \frac{1}{V} + 17,701$

Fórmulas iónicas equivalentes

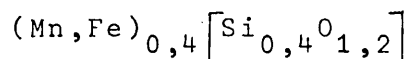
Rodonita



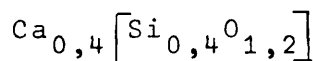
Bustamita



Piroxmangita



Wollastonita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DE LOS PIROXENOIDES

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 22	$\rho = 0,999$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,052$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

$$R = 115,599 \quad )$$

$$t_{(n-2),0,995} = 2,845 \quad ) \quad 99,9 < \rho = \beta < 100$$

Contraste de lineabilidad

$$\text{Nivel } F = 13.363,152 \quad )$$

$$F_{(1/n-2),0,0001} = 23,399 \quad ) \quad 99,99 < P < 100$$



<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
$\mu = - 1547,838$	$p = 16,272$

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1547,838 \frac{1}{V} + 16,272$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Rodonita	$(\text{Mn,Fe,Ca})_{0,33} [\text{Si}_{0,33} \text{O}]$
Bustamita	$(\text{Mn,Fe,Ca})_{0,33} [\text{Si}_{0,33} \text{O}]$
Piroxmangita	$(\text{Mn,Fe})_{0,33} [\text{Si}_{0,33} \text{O}]$
Wollastonita	$\text{Ca}_{0,33} [\text{Si}_{0,33} \text{O}]$



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

GRUPO DE LOS PIROXENOIDES

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 22	$\beta = 0,996$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,221$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 55,742	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)} = 2,845$	)	
$t_{(n-2)}_{0,995} = 2,845$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 3107,265	)	99,99 < P < 100
$F_{(1/n-2)} = 23,399$	)	
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 23,399$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -2380,026$	$p = 19,651$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -2380,026 \frac{1}{V} + 19,651$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Rodonita	$(Mn, Fe, Ca)_{0,5} [Si_{0,5} O_{1,5}]$
Bustamita	$(Ca, Mn, Fe)_{0,5} [Si_{0,5} O_{1,5}]$
Piroxmangita	$(Mn, Fe)_{0,5} [Si_{0,5} O_{1,5}]$
Wollastonita	$Ca_{0,5} [Si_{0,5} O_{1,5}]$



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

MICAS DIOCTAEDRICAS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 5	$\hat{\rho} = 0,980$	$\sigma^2 Y/X = 0,397$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 8,596	)	
	)	99 < $\rho = \hat{\rho}$ < 99,9
$t_{(n-2)}_{0,995} = 5,841$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 73,907	)	
	)	99,5 < P < 99,9
$F(1/n-2)_{0,0001} = 784,01$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1803,429$

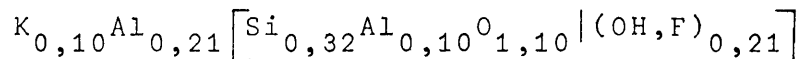
$p = 15,408$

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1803,429 \frac{1}{V} + 15,408$$

-----  
Fórmulas iónicas equivalentes

Moscovita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

MICAS DIOCTAEDRICAS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 5	$\rho = 0,997$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,044$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 26,392	)	
	)	99,9 < $\rho = \delta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 5,841$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 696,553	)	
	)	99,9 < P < 99,99
$F(1/n-2)_{0,0001} = 784,01$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

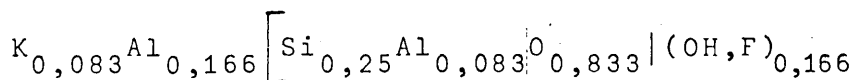
$\mu = -1360,548$	$p = 9,447$
-------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1360,548 \frac{1}{V} + 9,447$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Moscovita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

MICAS DIOCTAEDRICAS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 5	$\beta = 0,865$	$\sigma^2 Y/X = 2,550$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 2,994	)	95 < $\rho = \beta$ < 98
	)	
$t_{(n-2)} = 5,841$	)	

$t_{(n-2)0,995} = 5,841$

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 8,969	)	90 < P < 95
	)	
$F(1/n-2)_{0,0001} = 784,01$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

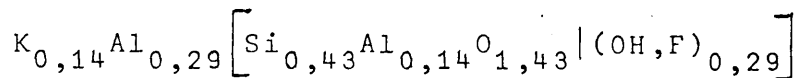
$\mu = -2246,287$	$p = 5,835$
-------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -2246,287 \cdot \frac{1}{V} + 5,835$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Moscovita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

MICAS DIOCTAEDRICAS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 5	$\rho = 0,998$	$\sigma^2 Y/X = 0,041$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 27,199	)	
	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 5,841$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 739,831	)	
	)	99,9 < P < 99,99
$F(1/n-2)_{0,0001} = 784,01$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

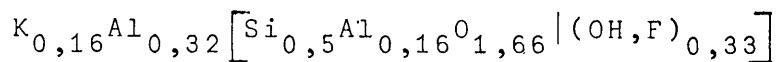
$\mu = -2722,877$	$p = 9,499$
-------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -2722,877 \frac{1}{V} + 9,499$$

Fórmulas radicales equivalentes

Moscovita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

MICAS TRIOCTAEDRICAS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\hat{\rho} = 0,995$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,149$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 14,8974	)	99 < $\rho = \hat{\rho}$ < 99,9
t <sub>(n-2)</sub> = 9,925	)	
t <sub>0,995</sub>	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 221,934	)	99,5 < p < 99,9
F(1/n-2) = 9998,5	)	
F <sub>0,0001</sub>	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -1654,328$

Término constante

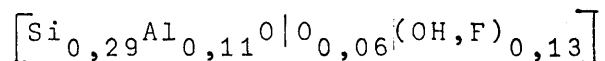
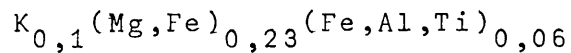
p = 13,587

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1654,328 \cdot \frac{1}{V} + 13,587$$

Fórmulas iónicas equivalentes

Biotita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

MICAS TRIOCTAEDRICAS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\rho = 0,993$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,219$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 12,274	)	99 < p = $\rho$ < 99,9
t(n-2) = 9,925	)	
t(n-2) <sub>0,995</sub>	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 785,985	)	99,5 < p < 99,9
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 9998,5	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

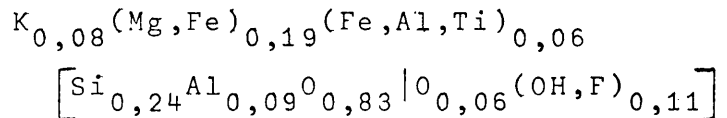
$\mu = -1379,061$	$p = 15,043$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1379,061 \frac{1}{V} + 15,043$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Biotita





CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

MICAS TRIOCTAEDRICAS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\rho = 0,988$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,380$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 9,272	)	98 < $\rho = \beta$ < 99
t(n-2) = 9,925	)	
t(3)_{0,995}	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 85,987	)	97,5 < P < 99
F(1/n-2) = 9998,5	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -2007,651$

Término constante

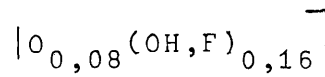
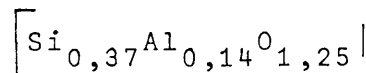
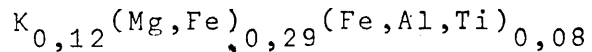
p = 8,244

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -2007,651 \frac{1}{V} + 8,224$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Biotita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

MICAS TRIOCTAEDRICAS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\delta = 0,993$	$\sigma^2 Y/X = 0,219$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 12,262	)	
	)	99 < $\rho = \delta$ < 99,9
$t_{(n-2)}_{0,995} = 9,925$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 150,371	)	
	)	99 < P < 99,5
$F(1/n-2)_{0,0001} = 9998,5$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

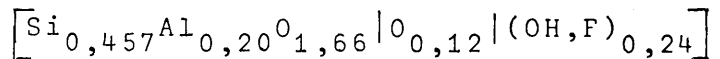
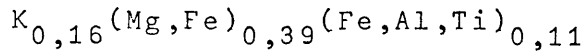
$\mu = -2747,344$	$p = 14,582$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -2747,344 \frac{1}{V} + 14,582$$

Fórmulas radicales equivalentes

Biotita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

FELDESPATOS ALCALINOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 35	$\rho = 0,993$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,117$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

$$\begin{array}{l} R = 50,152 \\ t_{(n-2)} = 2,750 \\ t_{0,995} \end{array} \quad \begin{array}{l} ) \\ ) \\ ) \end{array} \quad \begin{array}{l} \\ \\ 99,9 < \rho = \beta < 100 \end{array}$$

Contraste de lineabilidad

$$\begin{array}{l} \text{Nivel F} = 2515,27 \\ F(1/n-2) = 20,092 \\ F_{0,0001} \end{array} \quad \begin{array}{l} ) \\ ) \\ ) \end{array} \quad \begin{array}{l} \\ \\ 99,99 < P < 100 \end{array}$$

Potencial químico equivalente de la asociación

$$\mu = -1881,686$$

Término constante

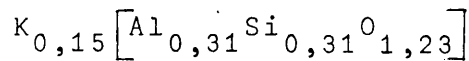
$$p = 6,518$$

Ecuación de la recta de equilibrio

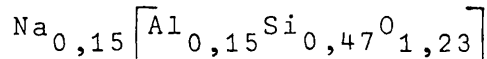
$$D_E = -1881,686 \frac{1}{V} + 6,518$$

Fórmulas iónicas equivalentes

Ortosa



Albita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

FELDESPATOS ALCALINOS

Nº de muestras                      Coef. de correlación                      Varianza de la regresión

N = 35

$\delta = 0,994$

$\sigma^2_{Y/X} = 0,102$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 53,805

)

) 99,9 <  $\rho = \delta$  < 100

$t_{(n-2)0,995} = 2,750$

)

Contraste de lineabilidad

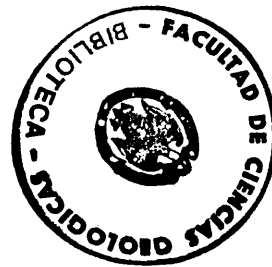
Nivel F = 2895,073

)

) 99,99 < P < 100

$F(1/n-2)_{0,0001} = 20,092$

)



Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1513,077$

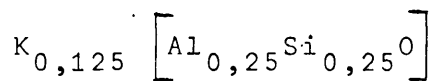
p = 5,245

Ecuación de la recta de equilibrio

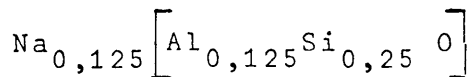
$$D_E = -1513,077 \frac{1}{V} + 5,245$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Ortosa



Albita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

FELDESPATOS ALCALINOS

Nº de muestras                      Coef. de correlación                      Varianza de la regresión

N = 35

$\rho = 0,9902$

$\sigma^2_{Y/X} = 0,177$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 40,665

)

) 99,9 <  $\rho = \beta$  < 100

$t_{(n-2)0,995} = 2,750$

)

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 1653,651

)

) 99,99 < p < 100

$F(1/n-2)_{0,0001} = 20,092$

)

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -2475,095$

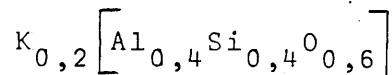
p = 7,997

Ecuación de la recta de equilibrio

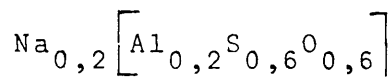
$D_E = -2475,095 \frac{1}{V} + 7,997$

-----  
Fórmulas catiónicas equivalentes

Ortosa



Albita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

FELDESPATOS ALCALINOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 35	$\hat{\rho} = 0,991$	$\sigma^2 Y/X = 0,151$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 44,095	)	
	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 2,750$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 1944,383	)	
	)	99,99 < P < 100
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 20,092$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -3068,121$	$p = 6,860$
-------------------	-------------

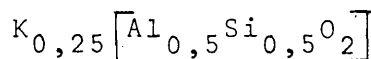
Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -3068,121 \frac{1}{V} + 6,860$$

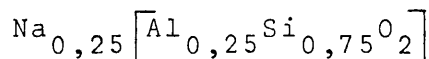
-----

Fórmulas radicales equivalentes

Ortosa



Albita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

FELDESPATOS CALCOALCALINOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 7	$\hat{\rho} = 0,999$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,022$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 120,919	)	
	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 4,032$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 14621,539	)	
	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} = 124,94$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$$\mu = -1845,870$$

Término constante

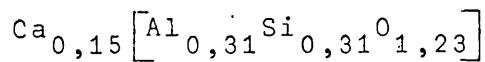
$$p = 11,748$$

Ecuación de la recta de equilibrio

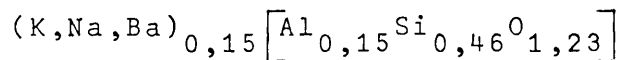
$$D_E = -1845,870 \frac{1}{V} + 11,748$$

Fórmulas iónicas equivalentes

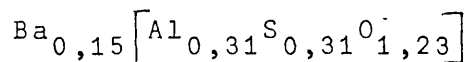
Anortita



Hyalofana



Celsiana



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

FELDESPATOS CALCOALCALINOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 7	$\delta = 0,999$	$\sigma^2 Y/X = 0,010$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 179,115	)	
	)	99,9 < $\rho = \delta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 4,032$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 32.082,516	)	
	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} = 124,94$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$\mu = -1521,435$	$p = 13,231$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1521,435 \frac{1}{V} + 13,231$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Anortita	$Ca_{0,125} [Al_{0,25} Si_{0,25} O]$
Hyalofana	$(K, Na, Ba)_{0,125} [Al_{0,125} Si_{0,375} O]$
Celsiana	$Ba_{0,125} [Al_{0,25} Si_{0,25} O]$



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

FELDESPATOS CALCOALCALINOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 7	$\beta = 0,998$	$\sigma^2 Y/X = 0,222$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

$$R = 37,932 \quad )$$

$$t_{(n-2)}_{0,995} = 4,032 \quad ) \quad 99,9 < \rho = \beta < 100$$

Contraste de lineabilidad

$$\text{Nivel F} = 1438,885 \quad )$$

$$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 124,94 \quad ) \quad 99,99 < P < 100$$

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$$\mu = -2341,651$$

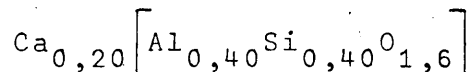
$$p = 9,246$$

Ecuación de la recta de equilibrio

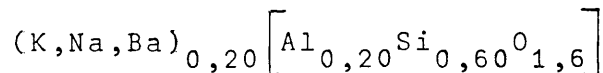
$$D_E = -2341,651 \frac{1}{V} + 9,246$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

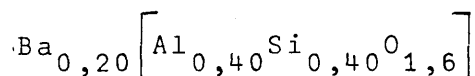
Anortita



Hyalofana



Celsiana



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

FELDESPATOS CALCOALCALINOS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 7	$\rho = 0,994$	$\sigma^2 Y/X = 0,727$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 20,868	)	
	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 4,032$	)	

Contraste de lineabilidad

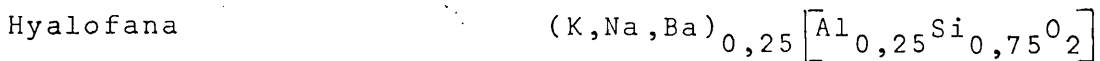
Nivel F = 435,482	)	
	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} = 124,94$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
$\mu = -2797,771$	$p = 3,679$

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -2797,771 \frac{1}{V} + 3,679$$

Fórmulas radicales equivalentes



X.2. CLASE OXIDOS.

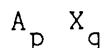
Esta clase contiene los minerales constituídos por uno o dos, raramente más, metales en combinación con el oxígeno o bien con grupos hidroxilos.

La estructura en capas de los óxidos e hidróxidos, está determinada por la forma de situarse los aniones, oxígeno o hidroxilo, y los cationes, los cuales compensan las cargas del armazón aniónico. Los iones divalentes de oxígeno y el hidroxilo monovalente forman un empaquetamiento hexagonal o cúbico, las posiciones octaédricas y tetraédricas en ambos casos están ocupadas por los cationes. El número de coordinación de estos últimos es normalmente 6.

X.2.1. Grupos de los óxidos simples.

X.2.1.a. Cristaloquímica.

La composición química de este grupo puede expresarse mediante la fórmula general:



donde:

A = catión; este grupo se caracteriza precisamente por contener un solo átomo metálico.

X = oxígeno.

La relación  $p/q$  puede tomar valores comprendidos entre  $p/q = 2$ , subgrupo de la cuprita, y  $p/q = \frac{1}{2}$ , subgrupo del rutilo. Y según su valor se pueden distinguir: tipo  $A_2X$ , tipo  $AX$ , tipo  $A_3X_4$ , tipo  $A_2X_3$ , tipo  $AX_2$  y tipo  $A_mX_n$ . Nuestro estudio se refiere a los tipos:

Tipo AX.

A = Mg, Ni, Mn, Cd, Ca, Zn, Cu, Hg, Pb, Be.

Dentro de este tipo pueden distinguirse: a) subgrupo de la periclasa, constituido por: periclasa, bunsenita, manganosita, óxido de cadmio y óxido de calcio. Todos ellos con estructura tipo NaCl; b) subgrupo de la cincita, formado por: cincita y bromellita, ambos con estructura tipo wurtzita.

Tipo  $A_2X_3$ .

A = Al, Fe, Ti, Mg, Mn, As, Sb.

El subgrupo más importante dentro de este tipo, es el de la hematites, formado por: hematites, corindón y serie de la ilmenita. En él, los átomos de oxígeno forman un empaquetado hexagonal, y los iones metálicos están situados entre los seis oxígenos formando un octaedro.

Tipo  $AX_2$ .

A = Ti, Mn, Sn, Pb, Te, Se, Bi.

El grupo más característico dentro de este tipo, es el grupo del rutilo, formado por: rutilo, pirolusita, casiterita y plattnerita. Su estructura consiste en octaedros  $[TiO_6]$  unidos entre sí mediante dos aristas comunes, formando cadenas paralelas al eje c, este tipo de enlace da lugar a un empaquetamiento hexagonal.

X.2.1.b. Estudio estadístico.

Se realizó, como ya hemos indicado anteriormente, a partir de los datos suministrados por las fórmulas de cada especie mineral.

Los datos utilizados para la realización del estudio fueron:



I) Oxidos tipo AX.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Periclasa	-930	11,117	-83,206
Bunsenita	-960	10,924	-87,879
Manganosita	-900	13,141	-68,487
Oxido de cadmio	-890	15,521	-57,341
Oxido de calcio	-817	16,618	-49,163
Cincita	-950	14,500	-65,517
Tenorita	-970	12,034	-80,604
Montroydita	-910	19,189	-47,423
Litargirio	-820	23,972	-34,206

II) Oxidos tipo AX<sub>2</sub>.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Rutilo	-2.830	18,632	-150,188
Plattnerita	-2.740	24,650	-111,156
Casiterita	-2.760	21,264	-129,796
Anatasa	-2.830	19,626	-144,196
Brookita	-2.830	19,259	-146,944
Baddleyita	-2.660	21,873	-121,611

III) Oxidos tipo A<sub>2</sub>X<sub>3</sub>.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Corindón	-3.580	25,750	-139,030
Hematites(Oligisto)	-3.580	30,280	-118,229
Bixbyita	-3.600	30,913	-116,455
Ilmenita	-3.460	31,710	-109,113

X.2.1.c. Rectas de equilibrio termodinámico.

Las rectas de equilibrio termodinámico que representan a los tres tipos de óxidos estudiados, se encuentran en las páginas siguientes, para los tres equivalentes representativos (iónico, aniónico, y catiónico), ya que en la estructura de los óxidos no existen radicales. Todas las rectas estudiadas cumplen las condiciones preestablecidas, salvo la que representa al equivalente catiónico en el tipo  $A_2X_3$ . Para este equivalente la probabilidad obtenida a partir del nivel de significación del coeficiente de correlación y del contraste de lineabilidad no alcanzan el nivel del 99%, pero al ser los valores obtenidos tan próximos a los propuestos y siendo sólo uno de los equivalentes estudiados el que presentaba estas diferencias, pensamos que debe incluirse este grupo.

X.2.2. Grupo de los óxidos múltiples.

X.2.2.a. Cristaloquímica.

Su composición química puede expresarse mediante la fórmula general  $A_p B_\gamma X_q$ .

A y B = representan los dos cationes que presentan los óxidos múltiples.

La fuerza de enlace existente entre los dos cationes y el oxígeno es del mismo orden, y por esta razón no aparecen grupos moleculares en la estructura. Es decir, los óxidos múltiples representan compuestos homodésmicos al igual que los óxidos simples.

El grupo más destacado entre los óxidos múltiples es el de las espinelas que corresponden a la fórmula  $AB_2X_4$ . Los cationes A, divalentes, presentan coordinación 4 formando un tetraedro con los oxígenos. Los cationes B, trivalentes, están en coordinación 6, con un octaedro de oxígenos alrededor de ellos. Los

aniones X, oxígeno, forman un empaquetado cúbico.

X.2.2.b. Estudio estadístico.

Los datos empleados en su realización fueron:

Oxidos tipo  $AB_2X_4$ :

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Espinel	-4,510	39,797	-113,325
Hercinita	-4.500	40,286	-111,701
Gahnita	-4.530	39,443	-114,849
Galaxita	-4.480	42,591	-105,186
Magnetita	-4.500	44,202	-101,805
Magnesioferrita	-4,510	44,076	-102,323
Franklinita	-4.530	44,663	-101,426
Trevorita	-4,540	44,775	-101,395
Jacobsita	-4,480	45,530	- 98,396
Cromita	-4.220	43,729	- 96,503
Magnesiocromita	-4,230	43,119	- 98,100

X.2.2.c. Rectas de equilibrio termodinámico.

Los resultados obtenidos para cada una de las tres equivalentes en esta asociación mineral, se encuentran en las páginas siguientes.

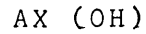
Al estudiar los resultados vemos que para los cuatro equivalentes el grupo de las espinelas, puede representarse mediante una recta de equilibrio termodinámico.

X.2.3. Grupo de los óxidos conteniendo hidroxilos.

X.2.3.a. Cristaloquímica.

Estos minerales pueden considerarse como intermedios entre los óxidos y los hidroxilos. Su estructura consiste en capas de octaedros distorsionados de oxígeno, cada uno de los cuales rodea a un catión. El enlace entre las distintas capas de octaedros se realiza mediante las capas de (OH) situadas entre ellas.

La fórmula general que expresa la composición química de estos óxidos conteniendo (OH) puede representarse como:



donde:

A = Mn, Fe, Al.

X = Oxígeno.

X.2.3. b. Estudio estadístico.

Los datos utilizados para la realización del estudio fueron:

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Lepidocroita	-1.685	22,303	-75,550
Bohemita	-1.685	19,138	-88,044
Manganita	-1.705	19,920	-85,592
Goethita	-1.685	21,116	-79,797



X.2.3.c. Determinación de las rectas de equilibrio termodinámico.

En este grupo hemos determinado las rectas de equilibrio para los cuatro equivalentes, pues consideramos que los (OH) actúan como un ión complejo.

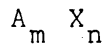
Los resultados obtenidos para los cuatro equivalentes en esta asociación mineral se encuentran en las páginas siguientes. Al estudiar los resultados obtenidos vemos que los cuatro equivalentes de este grupo, pueden representarse mediante una recta de equilibrio termodinámico.

X.2.4. Grupo de los Hidróxidos.

X.2.4.a. Cristaloquímica.

Los hidróxidos presentan una estructura en capas, en la cual cada capa paralela a (0001) consiste en dos "láminas" de  $(OH)^-$  con un empaquetado hexagonal y una "lámina" de cationes en coordinación octaédrica, entre las láminas de  $(OH)^-$ .

La fórmula general que indica la composición química de los hidróxidos puede expresarse como:



donde:

A = cationes.

X =  $(OH)^-$ .

Según la relación entre m y n pueden distinguirse:

Tipo AX<sub>2</sub>:

Constituído por los subgrupos de la: brucita, lepidocroi

ta, hidrocalcita y sjogrenita.

Tipo AX<sub>3</sub>:

Formado por los subgrupos de la: sassolita, gibbsita, bauxita y hydrocalumita.

X.2.4.b. Estudio estadístico.

En este grupo mineral se hicieron todas las posibles combinaciones para obtener estadísticamente las rectas de equilibrio termodinámico correspondientes a los tipos AX<sub>2</sub> y AX<sub>3</sub>. Para el tipo AX<sub>2</sub> solo pudimos obtener la recta de equilibrio termodinámico correspondiente al subgrupo de la brucita. Para el resto de los hidróxidos la única combinación estadística que permitía obtener una recta de equilibrio termodinámico que cumpliera aproximadamente las condiciones preestablecidas, es la formada por gibbsita, hydrocalumita, manaseita, barbertorita, sjogrenita. Es decir, por una combinación de minerales constituyentes de los dos tipos AX<sub>2</sub> y AX<sub>3</sub>. Teniendo en cuenta que en la estructura de los hidróxidos abundan los enlaces por puente de hidrógeno, los cuales no se han tenido en cuenta en la estimación de su energía reticular, pensamos que esta segunda asociación mineral puede ser falsa pero incluimos a falta de otras asociaciones que representan con más exactitud la situación de los hidróxidos en el conjunto de los minerales.

Los datos empleados en la determinación de las rectas de equilibrio termodinámico son:

I) Hidróxidos tipo AX<sub>2</sub>.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Brucita	-720	24,190	-29,764
Pyrocroita	-690	27,226	-25,343
Portalandita	-607	32,808	-18,501

II) Hidróxidos tipo AX<sub>2</sub> y AX<sub>3</sub>.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Gibsita	-1,475	31,407	-46,968
Hidrocalumita	-5,798	260,725	-22,237
Manaseita	-8,965	299,631	-29,643
Barbertorita	-7,285	308,120	-23,643
Sjogrenita	-7,565	312,126	-24,237

X.2.4.c. Determinación de las rectas de equilibrio termodinámico.

Las ecuaciones obtenidas para los distintos tipos de hidróxidos no se ajustan exactamente a las condiciones estadísticas preestablecidas, si bien hay que hacer notar que los niveles de probabilidad obtenidos no son nunca inferiores al 95% por lo que se pueden postular que siguen siendo significativos y más aún al considerar la naturaleza estructural de los hidróxidos.

Las rectas de equilibrio termodinámico pertenecientes al grupo de los hidróxidos se estiman pues representativas y sus ecuaciones se expresan a continuación.

X.2.5. CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE  
DE LAS ASOCIACIONES MINERALES

CLASE OXIDOS E HIDROXIDOS

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS: TIPO AX

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 10	$\rho = 0,994$	$\sigma^2_{Y/X} = 6,597$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 26,071	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> = 3,499	)	
t <sub>0,995</sub>	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 679,717	)	99,99 < p < 100
F <sub>(1/n-2)</sub> = 50,694	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -1028,613$

Término constante

p = 7,789

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1028,613 \frac{1}{V} + 7,789$

Fórmulas iónicas equivalentes

Periclasa	MgO
Bunsenita	NiO
Manganosita	MnO
Oxido de Cadmio	CdO
Oxido de Calcio	CaO
Cincita	ZnO
Tenorita	CuO
Montroydita	HgO
Litargirio	PbO
Delafossita	$Cu_{0,5}Fe_{0,5}O$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS: TIPO AX

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 10	$\delta = 0,994$	$\sigma^2_{Y/X} = 6,597$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 26,071	)	
	)	99,9 < $\rho = \delta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 3,499$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 679,717	)	
	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} = 50,694$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

$\mu = -1028,613$	$p = 7,789$
-------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1028,613 \frac{1}{V} + 7,789$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Periclasa	MgO
Bunsenita	NiO
Manganosita	MnO
Oxido de Cadmio	CdO
Oxido de Calcio	CaO
Cincita	ZnO
Tenorita	CuO
Montroydita	HgO
Litargirio	PbO
Delafossita	$Cu_{0,25}Fe_{0,25}$ )

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS: TIPO AX

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 10	$\beta = 0,9942$	$\sigma^2_{Y/X} = 6,597$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 26,071	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)} = 3,499$	)	
$t_{(n-2)} = 3,499$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 679,717	)	99,99 < P < 100
$F_{(1/n-2)} = 50,694$	)	
$F_{(1/n-2)} = 50,694$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -1028,613$

Término constante

$p = 7,789$

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1028,613 \frac{1}{V} + 7,789$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Manganosita	MnO
Periclasa	MgO
Bunsenita	NiO
Oxido de Cadmio	CdO
Oxido de Calcio	CaO
Cincita	ZnO
Tenorita	CuO
Montroydita	HgO
Litargirio	PbO
Delafossita	$Cu_{0,5}Fe_{0,5}O_2$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS: TIPO AX<sub>2</sub>

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 6	$\rho = 0,989$	$\sigma^2 Y/X = 6,274$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 13,838	)	
	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 4,604$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 191,497	)	
	)	99,9 < P < 99,99
$F(1/n-2)_{0,0001} = 241,62$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -2130,563$

Término constante

p = 20,537

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -2130,563 \frac{1}{V} + 20,537$

Fórmulas iónicas equivalentes

Rutilo	$Ti_{0,66}O_{1,34}$
Platnerita	$Pb_{0,66}O_{1,34}$
Casiterita	$Sn_{0,66}O_{1,34}$
Anatasa	$Ti_{0,66}O_{1,34}$
Brookita	$Ti_{0,66}O_{1,34}$
Baddleyita	$Zr_{0,66}O_{1,34}$



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS: TIPO AX<sub>2</sub>

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 6	$\rho = 0,988$	$\sigma^2_{Y/X} = 6,786$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 13,294	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)} = 9,925$	)	
$t_{(n-2)} = 9,925$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 176,754	)	99,9 < P < 99,99
$F(1/n-2) = 241,62$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$\mu = -1604,640$	$p = 21,005$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1604,640 \frac{1}{V} + 21,005$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Rutilo	Ti <sub>0,5</sub> <sup>0</sup>
Plattnerita	Pb <sub>0,5</sub> <sup>0</sup>
Casiterita	Sn <sub>0,5</sub> <sup>0</sup>
Atanasa	Ti <sub>0,5</sub> <sup>0</sup>
Brookita	Ti <sub>0,5</sub> <sup>0</sup>
Baddteyita	Zr <sub>0,5</sub> <sup>0</sup>

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS: TIPO AX<sub>2</sub>

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 6	$\beta = 0,989$	$\sigma^2_{Y/X} = 6,579$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 13,506	)	99,9 < p = $\beta$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 4,604	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 182,432	)	99,9 < p < 99,99
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 241,62	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$$\mu = -3200,266$$

Término constante

$$p = 20,612$$

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -3200,266 \frac{1}{V} + 20,612$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Rutilo	TiO <sub>2</sub>
Platnerita	SnO <sub>2</sub>
Casiterita	PbO <sub>2</sub>
Anatasa	TiO <sub>2</sub>
Brookita	TiO <sub>2</sub>
Baddleyita	ZrO <sub>2</sub>

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS: TIPO A<sub>2</sub>X<sub>3</sub>

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\beta = 0,992$	$\sigma^2_{Y/X} = 4,364$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 11,347	)	99 < $\rho = \beta$ < 99,9
t(n-2) <sub>0,995</sub> = 9,925	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 128,754	)	99 < p < 99,5
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 9998,5	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -1641,037$

Término constante

p = 18,604

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1641,037 \frac{1}{V} + 18,604$

Fórmulas iónicas equivalentes

Corindón	$Al_{0,8}O_{1,2}$
Hematites (Oligisto)	$Fe_{0,8}O_{1,2}$
Bixbyita	$(Mn,Fe)_{0,8}O_{1,2}$
Ilmenita	$Fe_{0,4}Ti_{0,4}O_{1,2}$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS: TIPO  $A_2X_3$

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\rho = 0,992$	$\sigma^2 Y/X = 4,366$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 11,345	)	99 < $\rho = \hat{\rho}$ < 99,9
	)	
$t_{(n-2)}_{0,995} = 9,925$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 128,710	)	99 < P < 99,5
	)	
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 9998,5$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$\mu = -1376,503$	$p = 19,045$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1376,503 \frac{1}{V} + 19,045$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Corindon	$Al_{0,66}O$
Hematites (Oligisto)	$Fe_{0,66}O$
Bixbyita	$(Mn,Fe)_{0,66}O$
Ilmenita	$Fe_{0,33}Ti_{0,33}O$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS: TIPO A<sub>2</sub>X<sub>3</sub>

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\delta = 0,980$	$\sigma^2_{Y/X} = 11,084$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 7,034	)	98 < p = $\delta$ < 99
t <sub>(n-2)</sub> = 9,925	)	
t <sub>0,995</sub>	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 49,485	)	97,5 < p < 98
F(1/n-2) = 9998,5	)	
F <sub>0,0001</sub>	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -2113,936$

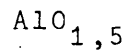
p = 22,836

Ecuación de la recta de equilibrio

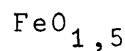
$D_E = -2113,936 \frac{1}{V} + 22,836$

Fórmulas catiónicas equivalentes

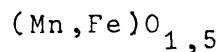
Corindón



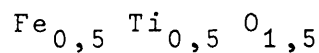
Hematites (Oligisto)



Bixbyita



Ilmenita



CÁLCULO DEL POTENCIAL QUÍMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS: TIPO  $AB_2X_4$ , ESPINELAS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 11	$\rho = 0,991$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,718$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 23,307	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 3,250$	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 543,221	)	99,99 < p < 100
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 43,477$	)	
	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

$\mu = -1480,602$	$p = 17,150$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1480,602 \frac{1}{V} + 17,150$$

Fórmulas iónicas equivalentes

Espinela	$Mg_{0,285} Al_{0,57} O_{1,145}$
Hercinita	$Fe_{0,285} Al_{0,57} O_{1,145}$
Gahnita	$Zn_{0,285} Al_{0,57} O_{1,145}$
Galaxita	$Mn_{0,285} Al_{0,57} O_{1,145}$
Magnetita	$Fe_{0,285} Fe_{0,57} O_{1,145}$
Magnesioferrita	$Mg_{0,285} Fe_{0,57} O_{1,145}$
Franklinita	$Zn_{0,285} Fe_{0,57} O_{1,145}$
Trevorita	$Ni_{0,285} Fe_{0,57} O_{1,145}$
Jacobsita	$Mn_{0,285} Fe_{0,57} O_{1,145}$
Cromita	$Fe_{0,285} Cr_{0,57} O_{1,145}$
Magnesiocromita	$Mg_{0,285} Cr_{0,57} O_{1,145}$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS: TIPO  $AB_2X_4$ : ESPINELAS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 11	$\delta = 0,9918$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,716$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 23,332	)	
	)	99,9 < $\rho = \delta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 3,250$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 544,415	)	
	)	99,99 < P < 100
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 43,477$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
$\mu = -1299,420$	$p = 17,207$

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1299,420 + 17,207$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Espinela	$Mg_{0,25}Al_{0,50}O$
Hercinita	$Fe_{0,25}Al_{0,50}O$
Gahnita	$Zn_{0,25}Al_{0,50}O$
Galaxita	$Mn_{0,25}Al_{0,50}O$
Magnetita	$Fe_{0,25}Fe_{0,50}O$
Magnesioferrita	$Mg_{0,25}Fe_{0,50}O$
Franklinita	$Zn_{0,25}Fe_{0,50}O$
Trevorita	$Ni_{0,25}Fe_{0,50}O$
Jacobsita	$Mn_{0,25}Fe_{0,50}O$
Cromita	$Fe_{0,25}Cr_{0,50}O$
Magnesiocromita	$Mg_{0,25}Cr_{0,50}O$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS: TIPO AB<sub>2</sub>X<sub>4</sub> ESPINELAS

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 11	$\hat{\rho} = 0,984$	$\sigma^2_{Y/X} = 1,324$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 17,045	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
$t_{(n-2)} = 3,250$	)	
$t_{(n-2)}_{0,995} = 3,250$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 290,562	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2) = 43,477$	)	
$F(1/n-2)_{0,0001} = 43,477$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1620,322$

$p = 9,681$

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1620,322 \frac{1}{V} + 9,681$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Espínela	Mg <sub>0,33</sub> Al <sub>0,66</sub> O <sub>1,33</sub>
Hercínita	Fe <sub>0,33</sub> Al <sub>0,66</sub> O <sub>1,33</sub>
Gahnita	Zn <sub>0,33</sub> Al <sub>0,66</sub> O <sub>1,33</sub>
Galaxita	Mn <sub>0,33</sub> Al <sub>0,66</sub> O <sub>1,33</sub>
Magnetita	Fe <sub>0,33</sub> Fe <sub>0,66</sub> O <sub>1,33</sub>
Magnesioferrita	Mg <sub>0,33</sub> Fe <sub>0,66</sub> O <sub>1,33</sub>
Franklinita	Zn <sub>0,33</sub> Fe <sub>0,66</sub> O <sub>1,33</sub>
Trevorita	Ni <sub>0,33</sub> Fe <sub>0,66</sub> O <sub>1,33</sub>
Jacobsita	Mn <sub>0,33</sub> Fe <sub>0,66</sub> O <sub>1,33</sub>
Cromita	Fe <sub>0,33</sub> Cr <sub>0,66</sub> O <sub>1,33</sub>
Magnesiocromita	Mg <sub>0,33</sub> Cr <sub>0,66</sub> O <sub>1,33</sub>



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS CONTENIENDO (OH)

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\hat{\rho} = 0,999$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,072$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 36,303	)	
$t_{(n-2)}_{0,995} = 9,925$	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 1317,932	)	
$F(1/n-2)_{0,0001} = 9998,5$	)	99,9 < P < 99,99



Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -1220,535$

Término constante

$p = 6,688$

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1220,535 \frac{1}{V} + 6,688$

Fórmulas iónicas equivalentes

Lepidocroita	$Fe_{0,666}^0 O_{0,666} (OH)_{0,666}$
Bohemita	$Al_{0,666}^0 O_{0,666} (OH)_{0,666}$
Manganita	$Mn_{0,666}^0 O_{0,666} (OH)_{0,666}$
Goethita	$Fe_{0,666}^0 O_{0,666} (OH)_{0,666}$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS: CONTENIENDO (OH)

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\beta = 0,996$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,339$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 16,743	)	99 < $\rho = \beta$ < 99,9
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 9,925	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 280,334	)	99,5 < P < 99,9
F <sub>(1/n-2)</sub> <sub>0,0001</sub> = 9998,5	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
$\mu = -886,888$	p = 2,119

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -886,888 \frac{1}{V} + 2,119$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Lepidocroita	$Fe_{0,5}O_{0,5}(OH)_{0,5}$
Bohemita	$Al_{0,5}O_{0,5}(OH)_{0,5}$
Manganita	$Mn_{0,5}O_{0,5}(OH)_{0,5}$
Goethita	$Fe_{0,5}O_{0,5}(OH)_{0,5}$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS: CONTENIENDO (OH)

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\hat{\rho} = 0,996$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,337$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 16,979	)	99 < $\rho = \hat{\rho}$ < 99,9
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 9,925	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 282,147	)	99,5 < P < 99,9
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 9998,5	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -1732,409$

Término constante

p = 2,048

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1732,409 \frac{1}{V} + 2,048$$

-----  
Fórmulas catiónicas equivalentes

Lepidocroita	FeO(OH)
Bohemita	AlO(OH)
Manganita	MnO(OH)
Goethita	FeO(OH)

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

OXIDOS CONTENIENDO (OH)

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\rho = 0,996$	$\sigma^2 Y/X = 0,339$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 16,797	)	99 < $\rho = \beta$ < 99,9
$t_{(n-2)} = 9,925$	)	
$t_{(n-2)}_{0,995} = 9,925$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 280,334	)	99,9 < P < 99,99
$F(1/n-2) = 9998,5$	)	
$F(1/n-2)_{0,0001} = 9998,5$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -866,888$	$p = 2,119$
------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -866,888 \frac{1}{V} + 2,119$$

Fórmulas radicales equivalentes

Lepidocroita	$Fe_{0,5}O_{0,5}(OH)_{0,5}$
Bohemita	$Al_{0,5}O_{0,5}(OH)_{0,5}$
Manganita	$Mn_{0,5}O_{0,5}(OH)_{0,5}$
Goethita	$Fe_{0,5}O_{0,5}(OH)_{0,5}$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

HIDROXIDOS: TIPO AX<sub>2</sub>

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 3	$\hat{\rho} = 0,999$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,013$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 57,483	)	98 < $\rho = \hat{\rho}$ < 99
t <sub>(n-2)</sub> = 63,657	)	
0,995	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 3304,290	)	97,5 < P < 99
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 4,052800	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -573,711$

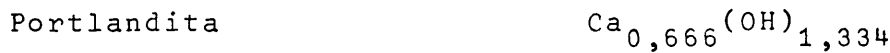
Término constante

p = 3,172

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -573,711 \frac{1}{V} + 3,172$

Fórmulas iónicas equivalentes



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

HIDROXIDOS: TIPO AX<sub>2</sub>

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 3	$\beta = 0,999$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,014$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 55,483	)	98 < $\rho = \beta$ < 99
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 63,657	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 3133,023	)	97,5 < P < 99
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 40528000	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$\mu = -431,024$	$p = 3,733$
------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -431,024 \frac{1}{V} + 3,733$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Brucita	Mg <sub>0,5</sub> (OH)
Pyrocroita	Mn <sub>0,5</sub> (OH)
Portlandita	Ca <sub>0,5</sub> (OH)

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

HIDROXIDOS: TIPO AX<sub>2</sub>

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 3	$\rho = 0,999$	$\sigma^2 Y/X = 0,014$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 55,280	)	98 < $\rho = \rho$ < 99
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 63,657	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 3055,912	)	97,5 < P < 99
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 40528000	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -862,459$

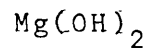
$p = 3,745$

Ecuación de la recta de equilibrio

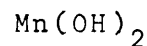
$D_E = -862,459 \frac{1}{V} + 3,745$

Fórmulas catiónicas equivalentes

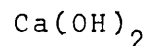
Brucita



Pyrocroita



Portlandita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

HIDROXIDOS: TIPO AX<sub>2</sub>

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 3	$\hat{\rho} = 0,999$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,014$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 55,973	)	98 < $\rho = \hat{\rho}$ < 99
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 63,657	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 3133,022	)	97,5 < P < 99
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 40528000	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$$\mu = -431,024$$

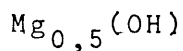
$$p = 3,733$$

Ecuación de la recta de equilibrio

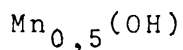
$$D_E = -431,024 \frac{1}{V} + 3,733$$

Fórmulas radicales equivalentes

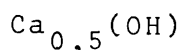
Brucita



Pyrocroita



Portlandita





CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

HIDROXIDOS: TIPO AX<sub>3</sub> y AX<sub>2</sub>

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 6	$\rho = 0,975$	$\sigma^2_{Y/X} = 5,289$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 8,905	)	99 < p = $\rho$ < 99,9
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 4,604	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 79,303	)	99,9 < p < 99,99
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 241,62	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$$\mu = 960,704$$

Término constante

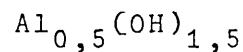
$$p = 14,093$$

Ecuación de la recta de equilibrio

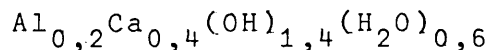
$$D_E = -960,704 \frac{1}{V} + 14,093$$

Fórmulas iónicas equivalentes

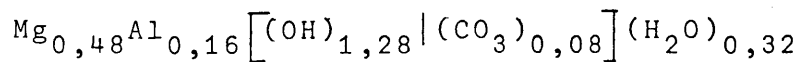
Gibbsite



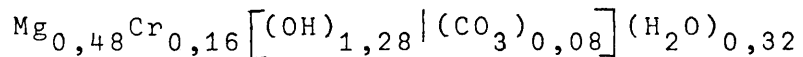
Hidrocalumita



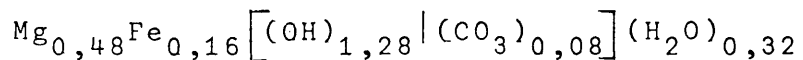
Manaseita



Barbertorita



Sjogrenita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

HIDROXIDOS: TIPOS AX<sub>3</sub> y AX<sub>2</sub>

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 6	$\hat{\rho} = 0,973$	$\sigma^2_{Y/X} = 5,841$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 8,451	)	
	)	99 < $\rho = \hat{\rho}$ < 99,9
$t_{(n-2)}_{0,995} = 4,604$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 71,420	)	
	)	99,9 < P < 99,99
$F(1/n-2)_{0,0001} = 241,62$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$\mu = -554,362$	$p = 5,775$
------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -554,362 \frac{1}{V} + 5,775$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Gibbsite	$Al_{0,333}(OH)$
Hidrocalumita	$Al_{0,14}Ca_{0,28}(OH)(H_2O)_{0,43}$
Manaseíta	$Mg_{0,53}Al_{0,12}[(OH)_{0,94}   (CO_3)_{0,06}](H_2O)_{1,33}$
Barbertorita	$Mg_{0,53}Cr_{0,12}[(OH)_{0,91}   (CO_3)_{0,06}](H_2O)_{1,33}$
Sjogrenita	$Mg_{0,53}Fe_{0,12}[(OH)_{0,94}   (CO_3)_{0,06}](H_2O)_{1,33}$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

HIDROXIDOS: TIPO AX<sub>3</sub> y AX<sub>2</sub>

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 6	$\beta = 0,834$	$\sigma^2 Y/X = 33,473$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 3,027	)	95 < $\rho = \beta$ < 98
	)	
$t_{(n-2)}_{0,995} = 4,604$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 9,162	)	95 < P < 97,5
	)	
$F(1/n-2)_{0,0001} = 241,62$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

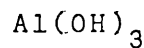
$\mu = -2417,996$	$p = 37,301$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

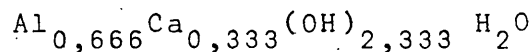
$$D_E = -2417,996 \frac{1}{V} + 37,301$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

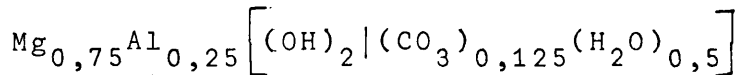
Gibbsita



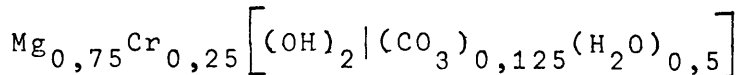
Hidrocalumita



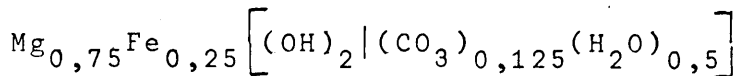
Manaseita



Barbertonita



Sjogrenita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

HIDROXIDOS: TIPO AX<sub>2</sub> y AX<sub>3</sub>

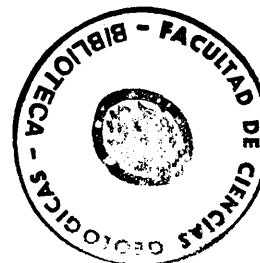
<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 6	$\rho = 0,973$	$\sigma^2 Y/X = 5,841$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 8,451	)	
	)	99 < $\rho = \beta$ < 99,9
$t_{(n-2)}_{0,995} = 4,604$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 71,420	)	
	)	99,5 < P < 99,9
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 241,62$	)	



Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -554,362$

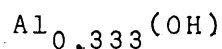
$p = 5,775$

Ecuación de la recta de equilibrio

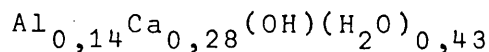
$$D_E = -554,362 \frac{1}{V} + 5,775$$

Fórmulas radicales equivalentes

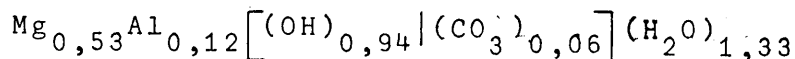
Gibbsita



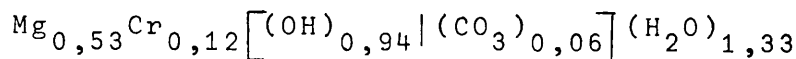
Hidrocalumita



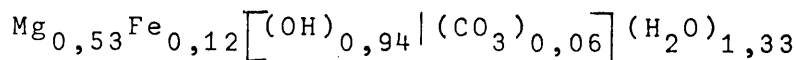
Magsseita



Barbertorita



Sjogrenita



X.3. CLASE FOSFATOS, ARSENIATOS Y VANADATOS.

X.3.1. Cristaloquímica.

Los fosfatos, arseniatos y vanadatos son oxisales anisodésimicas cuya unidad estructural básica son tetraedros  $XO_4$  en los que X es P, As ó V. Puede producirse una sustitución total o parcial entre el P y el As y entre el As y V, menos frecuentes son las sustituciones entre P y V.

A excepción de la sheibersita en la cual el P es trivalente, todos los demás fosfatos incluyen este elemento con valencia  $5^+$  ligado al oxígeno para formar el ión complejo  $[PO_4]^{-3}$ . Análogos son los aniones complejos  $[AsO_4]^{-3}$  y  $[VO_4]^{-3}$ . Las fórmulas de estos minerales pueden ser generalizadas en los dos tipos siguientes:  $A_m [(XO_4)_p | Z_q] \times H_2O$  y  $A_m B_n [(XO_4)_p | Z_q] \times H_2O$ .

En estas fórmulas  $[XO_4]$  representa los iones complejos  $[PO_4]^{-3}$ ,  $[AsO_4]^{-3}$  y  $[VO_4]^{-3}$ .

Z puede ser  $(OH)^-$ , F, Cl u oxígeno.

A y B son los cationes metálicos, los principales son: Al, Fe, Mn, Ca, Zn, Cu y Pb.

Raramente hay algún anión complejo adicional como  $[SO_4]^{-2}$ ,  $[CrO_4]^{-2}$ ,  $[CO_3]^{-2}$  y  $[BO_3]^{-3}$ .

Aparte de los miembros anhidros, estas clases minerales incluyen un considerable número de compuestos hidratados, el número de moléculas de agua varía entre uno y ocho.

X.3.1.a. Estudio estadístico.

Para la realización de este trabajo sólo se consideraron especies minerales correspondientes al grupo de los fosfatos ya que si la tesis defendida se cumple para esta clase mineral, análogamente se verificará para arseniatos y vanadatos, ya que

las tres clases presentan características análogas.

Los grupos de fosfatos estudiados son:

- I). Tipo  $A_2 \left[ PO_4 | Z_q \right]$ .
- II) Tipo  $A_5 \left[ (PO_4)_3 | Z_q \right]$  grupo del apatito.
- III) Tipo  $AB_2 \left[ (PO_4)_2 \right] \times H_2O$ .
- IV) Tipo  $AB_2 \left[ (PO_4)_2 | (OH)_2 \right] \times H_2O$ .
- V) Tipo  $AB_4 \left[ (PO_4)_p | Z_q \right] \times H_2O$ .

Los datos utilizados en el estudio estadístico de estos cinco grupos minerales son:

- I) Fosfatos tipo  $A_2 \left[ (PO_4) | Z_q \right]$ .

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Tarbutita	-1.545	57,889	-26,689
Liebethenita	-1.585	60,898	-26,027
Wagnerita	-1.535	51,557	-29,772
Triploidita	-1.465	58,109	-25,211
Wolfeita	-1.465	55,467	-26,412
Zwsieselita	-1.495	55,559	-26,908
Vayrynemita	-1.376	52,564	-26,177
Herdenita	-1.516	54,755	-27,686
Ambligonita	-1.790	48,235	-27,109

- II) Fosfatos tipo  $A_5 \left[ (PO_4)_3 | Z_q \right]$ .

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Apatito	-3.260	127,383	-20,173
Hidróxido apatito	-3.230	161,494	-20,007
Cloro-apatito	-3.225	162,798	-19,809
Piromorfita	-3.240	189,986	-17,053

III) Fosfatos tipo  $AB_2 \left[ (PO_4)_2 \right] \times H_2O$ .

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Farfieldita	-2,784	115,328	-24,139
Anapaíta	-2,334	142,179	-16,415
Parahopeíta	-2,630	138,703	-18,961
Hopeíta	-2,630	148,226	-17,743
Fosfofilita	-2,600	142,622	-18,230
Laudlamita	-2,540	133,071	-19,687
Fosfoferrita	-2,440	122,928	-19,849
Sholzita	-2,357	126,162	-18,682

IV) Fosfatos tipo  $AB_2 \left[ (PO_4)_2 | (OH)_2 \right] \times H_2O$ .

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Laveíta	-4,330	208,701	-20,747
Pseudolaveíta	-4,330	211,002	-20,521
Vauxíta	-4,280	183,312	-23,348
Metavauxíta	-4,350	202,993	-21,429
Paravauxíta	-4,350	201,300	-21,609
Gordonita	-4,350	199,558	-21,848
Lazulíta	-4,380	96,461	-45,406
Scorzalitha	-4,380	100,170	-44,507

V) Fosfatos tipo  $AB_4 \left[ (PO_4)_p | Z_q \right]$ .

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Goyazita	-5,176	420,247	-12,316
Crandallita	-5,227	411,005	-12,717
Zinckrocbridgeíta	-6,835	184,254	-37,095
Frondelita	-6,505	185,321	-35,101
Rockbridgeíta	-6,505	182,129	-35,716

X.3.1.b. Déterminación de las rectas de equilibrio termodinámico.

Las rectas de equilibrio termodinámico que permiten definir las cinco asociaciones minerales estudiadas en la clase mineral fosfatos se indican a continuación. El análisis de estos resultados nos permite decir que las cinco rectas obtenidas cumplen en su totalidad las condiciones estadísticas preestablecidas.





X.3.2. CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE  
DE LAS ASOCIACIONES MINERALES

CLASE FOSFATOS

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	$\rho = 0,831$	$\sigma^2_{Y/X} = 4,715$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

$R = 3,951$  )  
 )  $99 < \rho = \beta < 99,9$   
 $t_{(n-2)}_{0,995} = 3,499$  )

Contraste de lineabilidad

$Nivel F = 15,617$  )  
 )  $99 < P < 99,5$   
 $F(1/n-2)_{0,0001} = 62,167$  )

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1160,814$

$p = 14,377$

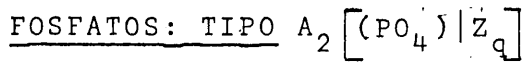
Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1160,814 \frac{1}{V} + 14,377$

Fórmulas iónicas equivalentes

Tarbuttita	Zn $[(PO_4)_{0,5}   (OH)_{0,5}]$
Libethenita	Cu $[(PO_4)_{0,5}   (OH)_{0,5}]$
Wagnerita	Mg $[(PO_4)_{0,50}   F_{0,5}]$
Triploidita	(Mn, Fe) $[(PO_4)_{0,50}   (OH)_{0,50}]$
Wolfeita	(Fe, Mn) $[(PO_4)_{0,50}   (OH)_{0,50}]$
Zwieselita	(Fe, Mn) $[(PO_4)_{0,50}   (OH)_{0,50}]$
Vayrynemita	Mn <sub>0,5</sub> Be <sub>0,5</sub> $[(PO_4)_{0,50}   (OH, F)_{0,50}]$
Herdenita	Ca <sub>0,5</sub> Be <sub>0,5</sub> $[(PO_4)_{0,50}   (OH, F)_{0,50}]$
Ambligonita	Li <sub>0,5</sub> Al <sub>0,5</sub> $[(PO_4)_{0,50}   F_{0,5}]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	ρ = 0,831	σ <sup>2</sup> Y/X = 4,715

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 3,951	)	99,9 < ρ = β < 100
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 3,499	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 15,617	)	99 < p < 99,5
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 62,167	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

μ = -1160,814	p = 14,377
---------------	------------

Ecuación de la recta de equilibrio

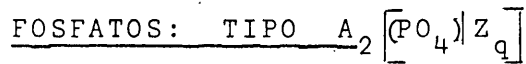
$$D_E = -1160,814 \frac{1}{V} + 14,377$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Tarbuttita	Zn [(PO <sub>4</sub> ) <sub>0,5</sub>   (OH) <sub>0,5</sub> ]
Libethenita	Cu [(PO <sub>4</sub> ) <sub>0,5</sub>   (OH) <sub>0,5</sub> ]
Wagnerita	Mg [(PO <sub>4</sub> ) <sub>0,5</sub>   (F) <sub>0,5</sub> ]
Triploidita	(Mn,Fe) [(PO <sub>4</sub> ) <sub>0,5</sub>   (OH) <sub>0,5</sub> ]
Wolfeita	(Fe,Mn) [(PO <sub>4</sub> ) <sub>0,5</sub>   (OH) <sub>0,5</sub> ]
Zwieselita	(Fe,Mn) [(PO <sub>4</sub> ) <sub>0,5</sub>   (OH) <sub>0,5</sub> ]
Vayrynemita	Mn <sub>0,5</sub> Be <sub>0,5</sub> [(PO <sub>4</sub> ) <sub>0,5</sub>   (OH,F) <sub>0,5</sub> ]
Herdenita	Ca <sub>0,5</sub> Be <sub>0,5</sub> [(PO <sub>4</sub> ) <sub>0,5</sub>   (OH,F) <sub>0,5</sub> ]
Ambligonita	Li <sub>0,5</sub> Al <sub>0,5</sub> [(PO <sub>4</sub> ) <sub>0,5</sub>   F <sub>0,5</sub> ]



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	$\rho = 0,831$	$\sigma^2 Y/X = 4,715$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 3,951	)	99 < $\rho = \beta$ < 99,9
t(n-2) = 3,499	)	
$t_{0,995}^{(n-2)}$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 15,617	)	99 < p < 99,5
F(1/n-2) = 62,167	)	
$F_{0,0001}^{(1/n-2)}$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1160,814$

$p = 14,377$

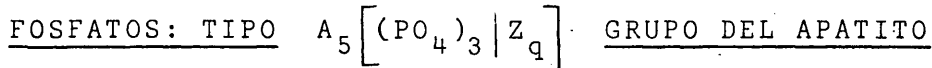
Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1160,814 \frac{1}{V} + 14,377$

Fórmulas radicales equivalentes

Tarbuttita	$Zn \left[ (PO_4)_{0,5}   (OH)_{0,5} \right]$
Libethenita	$Cu \left[ (PO_4)_{0,5}   (OH)_{0,5} \right]$
Wagnerita	$Mg \left[ (PO_4)_{0,5}   F_{0,5} \right]$
Triploidita	$(Mn, Fe) \left[ (PO_4)_{0,5}   (OH)_{0,5} \right]$
Wolfeita	$(Fe, Mn) \left[ (PO_4)_{0,5}   (OH)_{0,5} \right]$
Zwieselita	$(Fe, Mn) \left[ (PO_4)_{0,5}   (OH)_{0,5} \right]$
Vayrynemita	$M_{0,5} Be_{0,5} \left[ (PO_4)_{0,5}   (OH, F)_{0,5} \right]$
Herdenita	$Ca_{0,5} Be_{0,5} \left[ (PO_4)_{0,5}   (OH, F)_{0,5} \right]$
Ambligarita	$Li_{0,5} Al_{0,5} \left[ (PO_4)_{0,5}   F_{0,5} \right]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\hat{\rho} = 0,998$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,016$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 22,132	)	99,9 < p = $\hat{\rho}$ < 100
$t_{(n-2)} = 9,925$	)	
$t_{0,995}$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 489,855	)	99,5 < P < 99,9
$F(1/n-2) = 9998,5$	)	
$F_{0,0001}$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -726,957$

$p = 0,203$

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -726,957 \frac{1}{V} + 0,203$

Fórmulas iónicas equivalentes

Apatito	$Ca_{1,111} \left[ (PO_4)_{0,666}   F_{0,222} \right]$
Hidroxido Apatito	$Ca_{1,111} \left[ (PO_4)_{0,666}   (OH)_{0,222} \right]$
Cloro-Apatito	$Ca_{1,111} \left[ (PO_4)_{0,666}   F_{0,222} \right]$
Piromorfita	$Pb_{1,111} \left[ (PO_4)_{0,666}   Cl_{0,222} \right]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

FOSFATOS: TIPO A<sub>5</sub> [(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> | Z<sub>q</sub>]      GRUPO DEL APATITO

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	ρ = 0,998	σ <sup>2</sup> Y/X = 0,014

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 23,758	)	99,9 < ρ = β < 100
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 9,925	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 564,443	)	99,5 < P < 99,9
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 9998,5	)	



<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

μ = -817,512	p = 0,182
--------------	-----------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -817,512 \frac{1}{V} + 0,182$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Apatito	Ca <sub>1,25</sub> [(PO <sub>4</sub> ) <sub>0,75</sub>   F <sub>0,25</sub> ]
HidroxidoApatito	Ca <sub>1,25</sub> [(PO <sub>4</sub> ) <sub>0,75</sub>   (OH) <sub>0,25</sub> ]
CloroApatito	Ca <sub>1,25</sub> [(PO <sub>4</sub> ) <sub>0,75</sub>   Cl <sub>0,25</sub> ]
Piromorfita	Pb <sub>1,25</sub> [(PO <sub>4</sub> ) <sub>0,75</sub>   Cl <sub>0,25</sub> ]





CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL

FOSFATOS: TIPO  $A_5 [(PO_4)_3 | Z_q]$  GRUPO DEL APATITO

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la re resiõ</u>
N = 4	$\rho = 0,998$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,014$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 23,758	)	99 < $\rho$ = $\beta$ < 99,9
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 9,925	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 564,443	)	99,5 < p < 99,9
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 9998,5	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
$\mu = -817,512$	$p = 0,182$

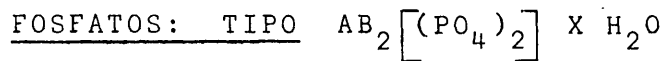
Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -817,512 \frac{1}{V} + 0,182$

Fórmulas radicales equivalentes



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	$\rho = 0,825$	$\sigma^2 Y/X = 1,642$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 3,864	)	99 < $\rho$ = $\hat{\rho}$ < 99,9
t <sub>(n-2)</sub> = 3,449	)	
t <sub>0,995</sub>	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 14,938	)	99 < P < 99,5
F(1/n-2)	)	
F <sub>0,0001</sub> = 62,167	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1122,077$

$p = 2,119$

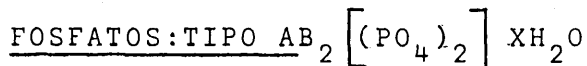
Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1122,077 \frac{1}{V} + 2,119$

Fórmulas iónicas equivalentes

Fairfieldita	$Ca_{0,8}(Mn,Fe)_{0,4}[PO_4]_{0,8}(H_2O)_{0,8}$
Anapaíta	$Ca_{0,8}Fe_{0,4}[PO_4]_{0,8}(H_2O)_{1,6}$
Parahopeíta	$Zn_{1,2}[PO_4]_{0,8}(H_2O)_{1,6}$
Hopeíta	$Zn_{1,2}[PO_4]_{0,8}(H_2O)_{1,6}$
Fosfofilita	$Zn_{0,8}(Fe,Mn)_{0,4}[PO_4]_{0,8}(H_2O)_{1,6}$
Laudlamita	$Fe_{1,2}[PO_4]_{0,8}(H_2O)_{1,6}$
Reddingita	$(Mn,Fe)_{1,2}[PO_4]_{0,8}(H_2O)_{1,2}$
Fosfoferrita	$(Fe,Mn)_{1,2}[PO_4]_{0,8}(H_2O)_{1,2}$
Sholzita	$Ca_{0,4}Zn_{0,8}[PO_4]_{0,8}(H_2O)_{0,8}$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	ρ = 0,841	σ <sup>2</sup> Y/X = 1,507

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 4,112	)	99 < ρ = β < 99,9
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 3,449	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 16,911	)	99 < P < 99,5
F <sub>(1/n-2)</sub> <sub>0,0001</sub> = 62,167	)	



Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

μ = -1408,735	p = 2,169
---------------	-----------

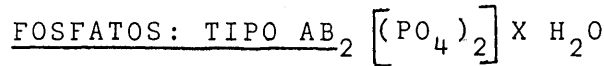
Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1408,735 \frac{1}{V} + 2,169$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Fairfieldita	Ca(Mn,Fe) <sub>0,5</sub> [PO <sub>4</sub> ] (H <sub>2</sub> O)
Anapaíta	Ca Fe <sub>0,5</sub> [PO <sub>4</sub> ] (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>
Parahopeíta	Zn <sub>1,5</sub> [PO <sub>4</sub> ] (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>
Hopeíta	Zn(Fe,Mn) <sub>0,5</sub> [PO <sub>4</sub> ] (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>
Fosfofilita	Zn(Fe,Mn) <sub>0,5</sub> [PO <sub>4</sub> ] (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>
Laudlamita	Fe <sub>1,5</sub> [PO <sub>4</sub> ] (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>
Reddingita	(Mn,Fe) <sub>1,5</sub> [PO <sub>4</sub> ] (H <sub>2</sub> O) <sub>1,5</sub>
Fostoferrita	(Fe,Mn) <sub>1,5</sub> [PO <sub>4</sub> ] (H <sub>2</sub> O)
Sholzita	Ca <sub>0,5</sub> Zn [PO <sub>4</sub> ] (H <sub>2</sub> O)

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	ρ = 0,840	σ <sup>2</sup> Y/X = 1,511

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 4,105	)	99 < ρ = ρ < 99,9
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 3,449	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 16,853	)	99 < P < 99,5
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 62,167	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

μ = -933,087

Término constante

p = 1,979

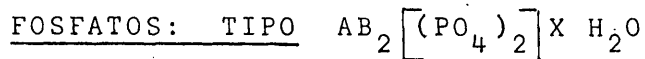
Ecuación de la recta de equilibrio

D<sub>E</sub> = -933,087 + 1,979

Fórmulas catiónicas equivalentes

Fairfieldita	Ca <sub>0,666</sub> (Mn, Fe) <sub>0,333</sub> [PO <sub>4</sub> ] <sub>0,666</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>0,66</sub>
Anapaíta	Ca <sub>0,666</sub> Fe <sub>0,333</sub> [PO <sub>4</sub> ] <sub>0,666</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>1,33</sub>
Parahopeíta	Zn [PO <sub>4</sub> ] <sub>0,666</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>1,33</sub>
Hopeíta	Zn [PO <sub>4</sub> ] <sub>0,666</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>1,33</sub>
Fosfofilita	Zn <sub>0,666</sub> (Fe, Mn) <sub>0,333</sub> [PO <sub>4</sub> ] <sub>0,666</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>1,33</sub>
Laudlamita	Fe [PO <sub>4</sub> ] <sub>0,666</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>1,33</sub>
Reddingita	(Mn, Fe) [PO <sub>4</sub> ] <sub>0,666</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>1,33</sub>
Fosfoferrita	(Fe, Mn) [PO <sub>4</sub> ] <sub>0,666</sub> (H <sub>2</sub> O)
Sholzita	Ca <sub>0,333</sub> Zn <sub>0,666</sub> [PO <sub>4</sub> ] <sub>0,666</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>0,66</sub>

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 9	$\rho = 0,841$	$\sigma^2 Y/X = 1,507$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 4,112	)	99 < $\rho$ < 99,9
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 3,449	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 16,911	)	99 < P < 99,5
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 62,167	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -1408,735$

Término constante

p = 2,169

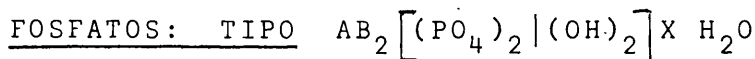
Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1408,735 \frac{1}{V} + 2,169$

Fórmulas radicales equivalentes

Fairfieldita	$Ca(Mn,Fe)_{0,5} [PO_4] (H_2O)$
Anapaíta	$Ca Fe_{0,5} [PO_4] (H_2O)_2$
Parahopeíta	$Zn_{1,5} [PO_4] (H_2O)_2$
Hopeíta	$Zn(Fe,Mn)_{0,5} [PO_4] (H_2O)_2$
Fosfofnilita	$Zn(Fe,Mn)_{0,5} [PO_4] (H_2O)_2$
Laudlamiíta	$Fe_{1,5} [PO_4] (H_2O)_2$
Reddingita	$(Mn,Fe)_{1,5} [PO_4] (H_2O)_{1,5}$
Fosfoferrita	$(Fe,Mn)_{1,5} [PO_4] (H_2O)_{1,5}$
Sholzita	$Ca_{0,5} Zn [PO_4] (H_2O)$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 8	$\hat{\rho} = 0,999$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,083$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

$$R = 99,469 \quad )$$

$$t_{(n-2)}_{0,995} = 3,707 \quad ) \quad 99,9 < \rho = \hat{\rho} < 100$$

Contraste de lineabilidad

$$\text{Nivel F} = 9894,089 \quad )$$

$$F(1/n-2)_{0,0001} = 82,489 \quad ) \quad 99,99 < p < 100$$

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$$\mu = -1284,879$$

$$p = 0,829$$

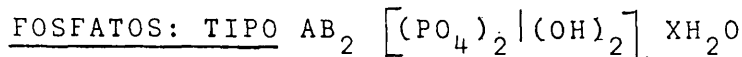
Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1284,879 \frac{1}{V} + 0,829$$

Fórmulas iónicas equivalentes

Laveita	$Mn_{0,285}Fe_{0,57} [(PO_4)_{0,57}   (OH)_{0,57}] (H_2O)_{2,3}$
Pseudolaveita	$Mn_{0,285}Al_{0,57} [(PO_4)_{0,57}   (OH)_{0,57}] (H_2O)_{2,3}$
Vauxita	$Fe_{0,285}Al_{0,57} [(PO_4)_{0,57}   (OH)_{0,57}] (H_2O)_2$
Metavauxita	$Fe_{0,285}Al_{0,57} [(PO_4)_{0,57}   (OH)_{0,57}] (H_2O)_{2,3}$
Paravauxita	$Mg_{0,285}Al_{0,57} [(PO_4)_{0,57}   (OH)_{0,57}] (H_2O)_{2,3}$
Gordonita	$Mg_{0,285}Al_{0,57} [(PO_4)_{0,57}   (OH)_{0,57}] (H_2O)_{2,3}$
Lazulita	$(Mg,Fe)_{0,285}Al_{0,57} [(PO_4)_{0,57}   (OH)_{0,57}]$
Scorzalítha	$(Fe,Mg)_{0,285}Al_{0,57} [(PO_4)_{0,57}   (OH)_{0,57}]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 8	$\rho = 0,999$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,085$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 98,668	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)} = 3,707$	)	
$t_{(n-2)}_{0,995}$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 9735,473	)	99,99 < p < 100
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 82,489$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$\mu = -1123,099$	$p = 0,781$
-------------------	-------------

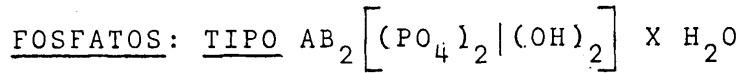
Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1123,099 + 0,781$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Laveita	$Mn_{0,25}Fe_{0,5} [(PO_4)_{0,5}   (OH)_{0,5}] (H_2O)_2$
Pseudolaveita	$Mn_{0,25}Fe_{0,5} [(PO_4)_{0,5}   (OH)_{0,5}] (H_2O)_2$
Vauxita	$Fe_{0,25}Al_{0,5} [(PO_4)_{0,5}   (OH)_{0,5}] (H_2O)_{1.7}$
Metavauxita	$Fe_{0,25}Al_{0,5} [(PO_4)_{0,5}   (OH)_{0,5}] (H_2O)_2$
Paravauxita	$Mg_{0,25}Al_{0,5} [(PO_4)_{0,5}   (OH)_{0,5}] (H_2O)_2$
Gordonita	$Mg_{0,25}Al_{0,5} [(PO_4)_{0,5}   (OH)_{0,5}] (H_2O)_2$
Lazulitha	$(Mg,Fe)_{0,25}Al_{0,5} [(PO_4)_{0,5}   (OH)_{0,5}]$
Scorzalitha	$(Fe,Mg)_{0,25}Al_{0,5} [(PO_4)_{0,5}   (OH)_{0,5}]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 8	$\delta = 0,999$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,124$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 79,985	)	99,9 < $\rho = \delta$ < 100
$t_{(n-2)0,995} = 3,707$	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 6397,627	)	99,99 < P < 100
$F_{(1/n-2)0,0001} = 82,489$	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1502,875$	$p = 0,877$
-------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

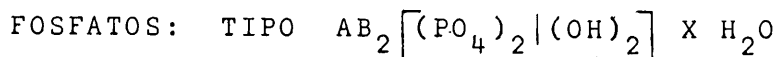
$$D_E = -1502,875 \frac{1}{V} + 0,877$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Laveita	$Mn_{0,33}Fe_{0,66} \left[ (PO_4)_{0,66}   (OH)_{0,66} \right] (H_2O)_{2,66}$
Pseudolaueita	$Mn_{0,33}Fe_{0,66} \left[ (PO_4)_{0,66}   (OH)_{0,66} \right] (H_2O)_{2,66}$
Vauxita	$Fe_{0,33}Al_{0,66} \left[ (PO_4)_{0,66}   (OH)_{0,66} \right] (H_2O)_{2,33}$
Metavauxita	$Fe_{0,33}Al_{0,66} \left[ (PO_4)_{0,66}   (OH)_{0,66} \right] (H_2O)_{2,66}$
Paravauxita	$Mg_{0,33}Al_{0,66} \left[ (PO_4)_{0,66}   (OH)_{0,66} \right] (H_2O)_{2,66}$
Gordonita	$Mg_{0,33}Al_{0,66} \left[ (PO_4)_{0,66}   (OH)_{0,66} \right] (H_2O)_{2,66}$
Lazulitha	$(Mg,Fe)_{0,33}Al_{0,66} \left[ (PO_4)_{0,66}   (OH)_{0,66} \right]$
Scorzalitha	$(Fe,Mg)_{0,33}Al_{0,66} \left[ (PO_4)_{0,66}   (OH)_{0,66} \right]$



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 8	$\delta = 0,999$	$\sigma^2 Y/X = 0,085$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 98,668	)	
	)	99,9 < $\rho = \delta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 3,707$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 9735,473	)	
	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} = 82,489$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1123,099$	$p = 0,781$
-------------------	-------------

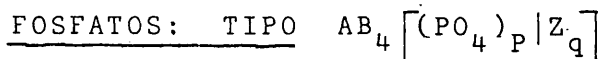
Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1123,099 \frac{1}{V} + 0,781$$

Fórmulas radicales equivalentes

Laveita	$Mn_{0,5}Fe \left[ PO_4   OH \right] (H_2O)_2$
Pseudolaveita	$Mn_{0,5}Fe \left[ PO_4   OH \right] (H_2O)_2$
Vauxita	$Fe_{0,5}Al \left[ PO_4   OH \right] (H_2O)_{1,75}$
Metavauxita	$Fe_{0,5}Al \left[ PO_4   OH \right] (H_2O)_2$
Paravauxita	$Mg_{0,5}Al \left[ PO_4   OH \right] (H_2O)_2$
Gordonita	$Mg_{0,5}Al \left[ PO_4   OH \right] (H_2O)_2$
Lazulitha	$(Mg,Fe)_{0,5}Al \left[ PO_4   OH \right]$
Scorzalitha	$(Fe,Mg)_{0,5}Al \left[ PO_4   OH \right]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 5	$\rho = 0,998$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,736$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 29,937	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 5,841$	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 896,278	)	99,99 < p < 100
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 784,01$	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1189,087$

$p = 6,070$

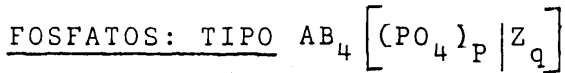
Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1189,087 + 6,670$

Fórmulas iónicas equivalentes

Goyazita	$Sr_{0,15} Al_{0,46} H_{0,15} [(PO_4)_{0,31}   (OH)_{0,92}]$
Crandallita	$Ca_{0,15} Al_{0,46} H_{0,15} [(PO_4)_{0,31}   (OH)_{0,92}]$
Zinkrockbridgeita	$Zn_{0,15} Fe_{0,61} [(PO_4)_{0,46}   (OH)_{0,77}]$
Frondelita	$(Mn, Fe)_{0,15} Fe_{0,61} [(PO_4)_{0,46}   (OH)_{0,77}]$
Rockbridgeita	$(Fe, Mn)_{0,15} Fe_{0,61} [(PO_4)_{0,46}   (OH)_{0,77}]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 3	$\rho = 0,998$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,759$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

$$R = 29,497 \quad )$$

$$t_{(n-2)0,995} = 5,841 \quad ) \quad 99,9 < \rho = \beta < 100$$

Contraste de lineabilidad

$$\text{Nivel } F = 870,126 \quad )$$

$$F(1/n-2)_{0,0001} = 784,01 \quad ) \quad 99,99 < p < 100$$

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$$\mu = -965,933 \quad \quad \quad p = 6,067$$

Ecuación de la recta de equilibrio

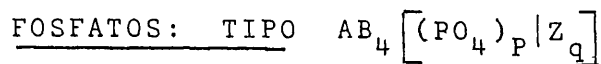
$$D_E = -965,933 \frac{1}{V} + 6,067$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Goyazita	$Sr_{0,125} Al_{0,375} H_{0,125} \left[ (PO_4)_{0,25}   (OH)_{0,75} \right]$
Crandallita	$Ca_{0,125} Al_{0,375} H_{0,125} \left[ (PO_4)_{0,25}   (OH)_{0,75} \right]$
Zinkrockbridgeita	$Zn_{0,125} Fe_{0,5} \left[ (PO_4)_{0,375}   (OH)_{0,625} \right]$
Frondelita	$(Mn, Fe)_{0,125} Fe_{0,5} \left[ (PO_4)_{0,375}   (OH)_{0,625} \right]$
Rockbridgeita	$(Fe, Mn)_{0,125} Fe_{0,5} \left[ (PO_4)_{0,375}   (OH)_{0,625} \right]$



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 5	$\rho = 0,998$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,759$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 29,497	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)0,995} = 5,841$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 870,933	)	99,99 < p < 100
$F_{(1/n-2)0,0001} = 784,01$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -965,933$

$p = 6,067$

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -965,933 \frac{1}{V} + 6,067$

Fórmulas radicales equivalentes

Goyazita	$Sr_{0,125} Al_{0,375} H_{0,125} \left[ (PO_4)_{0,25}   (OH)_{0,75} \right]$
Grandallita	$Ca_{0,125} Al_{0,375} H_{0,125} \left[ (PO_4)_{0,25}   (OH)_{0,75} \right]$
Zinkrockbridgeita	$Zn_{0,125} Fe_{0,5} \left[ (PO_4)_{0,375}   (OH)_{0,675} \right]$
Frondelita	$(Mn, Fe)_{0,125} Fe_{0,5} \left[ (PO_4)_{0,375}   (OH)_{0,625} \right]$
Rocbridgeita	$(Fe, Mn)_{0,125} Fe_{0,5} \left[ (PO_4)_{0,375}   (OH)_{0,625} \right]$

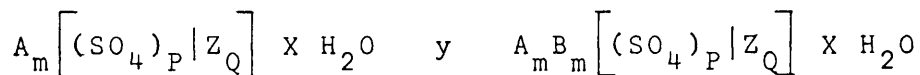
X.4. CLASE SULFATOS.

X.4.1. Cristaloquímica.

El azufre natural tetravalente aparece en la molécula neutra del gas estable  $SO_2$ , la cual con el agua produce el radical inestable  $[SO_3]$ . Este se oxida rápidamente formando el anión complejo  $[SO_4]^{-2}$  con azufre hexavalente, el cual es esencial en la composición de los sulfatos. Algunos sulfatos naturales contienen otros aniones complejos tales como  $[PO_4]$ ,  $[AsO_4]$ ,  $[BO]_3$ ,  $[CO_3]$  y  $[NO_3]$  y la mayor parte de ellos contienen también moléculas de agua.

Los sulfatos son compuestos típicamente anisodésimicos. La unidad estructural básica es el radical  $[SO_4]^{-2}$ , en él los tetraedros de oxígeno rodean al azufre hexavalente. Los grupos de tetraedros  $[SO_4]^{-2}$  están generalmente aislados unos de otros por los cationes y aniones adicionales incluyendo las moléculas de agua. La coordinación de los cationes adicionales es 6, 8 ó 12 de acuerdo con su tamaño. En los sulfatos dobles los cationes están combinados, según la regla, cationes de tamaño grande con cationes de tamaño pequeño, por ejemplo  $Al^{+3} + K^{+1}$ ,  $Fe^{+3} + K^{+1}$ ,  $Mg^{+2} + K^{+1}$ . Cuando hay aniones complejos, éstos ocupan un lugar específico en la estructura, no reemplazando diadóticamente al grupo sulfato.

Las fórmulas generales que permiten representar a los distintos tipos de sulfatos son:



para las sales simples y dobles respectivamente.

Donde:

A y B representan los cationes metálicos principalmente  $Fe^{+3}$ , K, Na, Cu, Mg, Al y Ca, y menos frecuentemente Mn, Pb,  $NH_4$ , Zn, V, Ni, Ba, Sr, Ag, Co y V.

Z representa los aniones o grupos aniónicos adicionales; principalmente  $(OH)^-$  y menos frecuentemente Cl.

X.4.1.a. Estudio estadístico.

Los grupos de sulfatos estudiados por nosotros, para comprobar que la hipótesis establecida se cumple también en esta clase mineral, fueron:

- I) Sulfatos anhidros, tipo  $A [SO_4]$ .
- II) Sulfatos anhidros conteniendo aniones adicionales, tipo  $A_2 [(SO_4)_p | Z_q]$ .
- III) Sulfatos tipo  $A_m [(SO_4) | Z_q]$ .
- IV) Sulfatos hidratados tipo  $A [(SO_4)] \times H_2O$ .

Los datos utilizados en el estudio estadístico de estos cuatro grupos minerales fueron:

I) Sulfatos tipo  $A [SO_4]$ .

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Baritina	-483	51,963	- 9,295
Zinckosita	-715	41,625	-17,177
Anhidrita	-582	45,630	-12,754
Anglesita	-585	47,699	-12,264

II) Sulfatos tipo  $A_2 [(SO_4)_p | Z_q]$ .

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Natrojarosita	-4.565	146,751	-31,107
Jarosita	-4.538	153,894	-29,487
Argentojarosita	-4.620	149,297	-30,945
Woodhavesita	-5.072	137,654	-36,846

III) Sulfatos tipo  $A_m [(SO_4)_p | Z_q]$ .

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Galeita	-599	71,781	-7,787
Shairenita	-599	70,003	-7,985
Sulfohalita	-1,118	151,062	-7,403

IV) Sulfatos tipo  $A [SO_4] \times H_2O$ .

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Melanterita	-1,175	147,029	-7,991
Goslarita	-1,205	148,023	-8,140
Morenosita	-1,215	145,174	-8,369
Epsomita	-1,185	149,275	-7,938
Kalinita	-2,428	270,028	-8,991

En ninguna de las cuatro asociaciones minerales estudiadas se encuentra el yeso, que es quizá el sulfato más conocido. Esto se debe a que el yeso no presenta la estructura en tetraedros aislados que es común a la mayoría de los sulfatos sino que presenta una estructura en capas. La recta de equilibrio termodinámico que nos permite determinar el potencial del yeso se estudia más adelante.

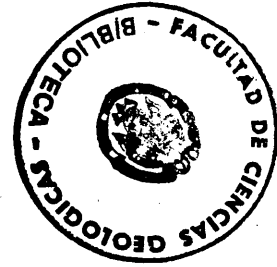
X.4.1.b. Determinación de las rectas de equilibrio termodinámico.

Las rectas de equilibrio termodinámico que hemos estudiado para la clase de los sulfatos se encuentran a continuación.

Al analizar los resultados obtenidos vemos que la recta de equilibrio termodinámico correspondiente al tipo  $A [SO_4]$  presenta unas probabilidades de correlación y de lineabilidad que



no alcanzan el 99% pero si el 98%. Teniendo en cuenta que este grupo es el que contiene los sulfatos más conocidos anhidrita, baritina, etc. Pensamos que una disminución tan pequeña en el nivel de probabilidad no era suficiente para prescindir de esta asociación mineral en el presente trabajo. En el tipo  $A_m(SO_4)_p Z_q$ , tampoco alcanzamos los niveles de probabilidad exigidos, pero hay que tener en cuenta que en este grupo están representados tres sulfatos, jarosita, natrojarosita, argentojarosita, con un fosfosulfato woohovesita. Al intentar obtener la recta que representará la asociación mineral que comprenderá únicamente a los sulfatos los resultados fueron menos satisfactorios. Por lo tanto pensamos o que las pequeñas disminuciones en las probabilidades que presente este grupo no deben tenerse en cuenta, o bien que sería necesario ampliar esta asociación con otros fosfosulfatos cosa que desgraciadamente no hemos podido realizar al no disponer de los datos necesarios.



X.4.2. CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE  
DE LAS ASOCIACIONES MINERALES

CLASE SULFATOS

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

SULFATOS: TIPO A  $[SO_4]$

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\hat{\rho} = 0,988$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,364$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 9,225	)	
	)	98 < $\rho$ = $\hat{\rho}$ < 99
$t_{(n-2)}_{0,995} = 9,925$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 85,103	)	
	)	95 < P < 97,5
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 9998,5$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1612,669$

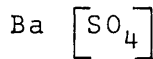
p = 21,852

Ecuación de la recta de equilibrio

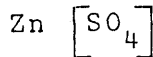
$D_E = -1612,669 \frac{1}{V} + 21,852$

Fórmulas iónicas equivalentes

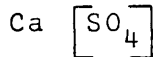
Barinita



Zinckosita



Anhidrita



Anglesita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

SULFATOS: TIPO A [SO<sub>4</sub>]

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	ρ = 0,988	σ <sup>2</sup> Y/X = 0,364

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 9,225	)	98 < ρ = ρ < 99
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 9,925	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 85,103	)	95 < P < 97,5
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 9998,5	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

μ = -1612,669	p = 21,852
---------------	------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1612,669 \frac{1}{V} + 21,852$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Baritina	Ba [SO <sub>4</sub> ]
Zinckosita	Zn [SO <sub>4</sub> ]
Anhidrita	Ca [SO <sub>4</sub> ]
Anglesita	Pb [SO <sub>4</sub> ]

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

SULFATOS: TIPO A  $[SO_4]$

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\hat{\rho} = 0,988$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,364$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 9,225	)	98 < $\rho = \hat{\rho}$ < 99
t <sub>(n-2)</sub> = 9,925	)	
t <sub>0,995</sub>	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 85,103	)	95 < p < 97,5
F(1/n-2) = 9998,5	)	
F <sub>0,0001</sub>	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

$\mu = -1612,669$	$p = 21,852$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1612,669 \frac{1}{V} + 21,852$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Barinita  $Ba [SO_4]$

Zinckosita  $Zn [SO_4]$

Anhidrita  $Ca [SO_4]$

Anglesita  $Pb [SO_4]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

SULFATOS: TIPO A  $[SO_4]$

Nº de muestras                      Coef. de correlación                      Varianza de la regresión

N = 4

$\rho = 0,988$

$\sigma^2 Y/X = 0,364$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 9,225

$t_{(n-2)0,995} = 9,925$

)  
)  
)

98 <  $\rho$  < 99

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 85,103

$F_{(1/n-2)0,0001} = 9998,5$

)  
)  
)

95 < P < 97,5

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -1612,669$

Término constante

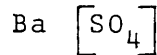
p = 21,852

Ecuación de la recta de equilibrio

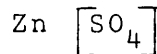
$$D_E = -1612,669 \frac{1}{V} + 21,852$$

Fórmulas radicales equivalentes

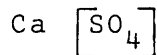
Baritina



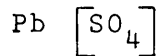
Zinckosita



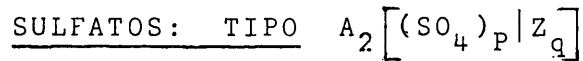
Anhidrita



Anglesita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\rho = 0,9788$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,666$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

$$R = 6,750 \quad )$$

$$t_{(n-2)0,995} = 9,925 \quad ) \quad 95 < \rho = \beta < 98$$

Contraste de lineabilidad

$$\text{Nivel } F = 45,572 \quad )$$

$$F(1/n-2)_{0,0001} = 9998,5 \quad ) \quad 97,5 < P < 99$$

Potencial químico equivalente de la asociación

$$\mu = -1632,296$$

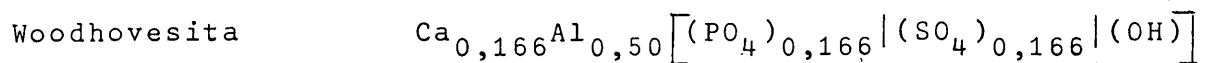
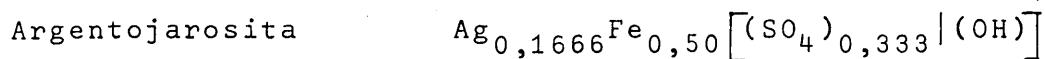
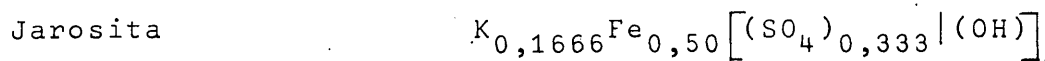
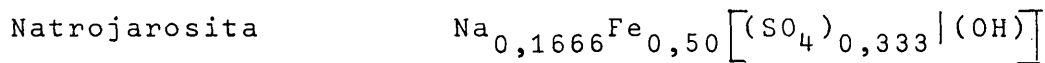
Término constante

$$p = 34,672$$

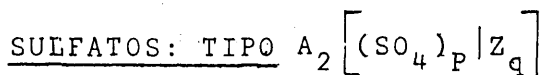
Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1632,296 \frac{1}{V} + 34,672$$

Fórmulas iónicas equivalentes



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	ρ = 0,978	σ <sup>2</sup> Y/X = 0,663

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 6,762	)	95 < ρ = β < 98
t <sub>(n-2)</sub> = 9,925	)	
t <sub>(n-2)</sub> 0,995	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 45,737	)	97,5 < P < 99
F(1/n-2) 0,0001 = 9998,5	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

μ = -1225,027	p = 34,772
---------------	------------

Ecuación de la recta de equilibrio

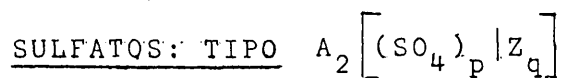
$$D_E = -1225,027 \frac{1}{V} + 34,772$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Natrojarosita	Na <sub>0,125</sub> Fe <sub>0,375</sub> [(SO <sub>4</sub> ) <sub>0,25</sub>   (OH) <sub>0,75</sub> ]
Jarosita	K <sub>0,125</sub> Fe <sub>0,375</sub> [(SO <sub>4</sub> ) <sub>0,25</sub>   (OH) <sub>0,75</sub> ]
Argentojarosita	Ag <sub>0,125</sub> Fe <sub>0,375</sub> [(SO <sub>4</sub> ) <sub>0,25</sub>   (OH) <sub>0,75</sub> ]
Woodhovesita	Ca <sub>0,125</sub> Al <sub>0,375</sub> [(PO <sub>4</sub> ) <sub>0,25</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>0,25</sub>   (OH) <sub>0,7</sub> ]



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\beta = 0,993$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,196$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 12,638	)	99 < $\rho = \beta$ < 99,9
t <sub>(n-2)</sub> = 9,925	)	
t <sub>0,995</sub>	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 159,736	)	99 < P < 99,5
F(1/n-2) = 9998,5	)	
F <sub>0,0001</sub>	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

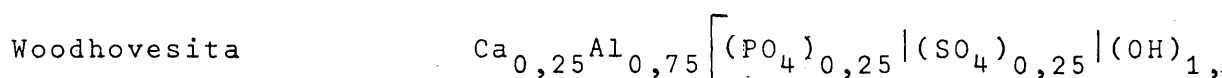
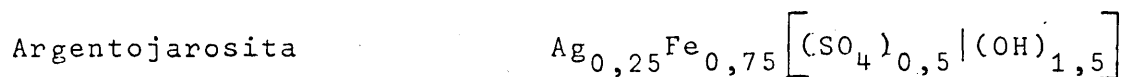
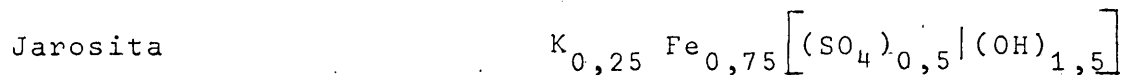
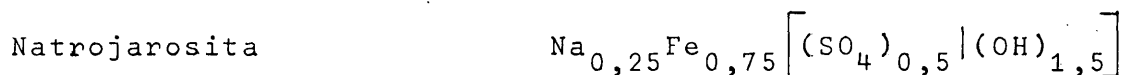
$\mu = -1895,904$

p = 20,017

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1895,904 \frac{1}{V} + 20,017$

Fórmulas catiónicas equivalentes



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\rho = 0,987$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,663$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 6,973	)	98 < $\rho = \beta$ < 99
t <sub>(n-2)</sub> = 9,925	)	
t <sub>0,995</sub>	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 45,737	)	97,5 < P < 99
F(1/n-2)	)	
F <sub>0,0001</sub> = 9998,5	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1225,027$	$p = 34,722$
-------------------	--------------

Ecuación de la recta de equilibrio

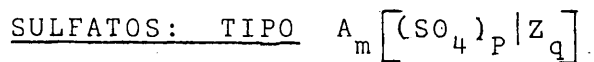
$$D_E = -1225,027 \frac{1}{V} + 34,722$$

Fórmulas radicales equivalentes

Natrojarosít	$Na_{0,125}Fe_{0,375}[(SO_4)_{0,25}   (OH)_{0,75}]$
Jarosít	$K_{0,125}Fe_{0,375}[(SO_4)_{0,25}   (OH)_{0,75}]$
Argentojarosít	$Ag_{0,125}Fe_{0,375}[(SO_4)_{0,25}   (OH)_{0,75}]$
Woodhavesít	$Ca_{0,125}Al_{0,125}[(PO_4)_{0,125}   (SO_4)_{0,125}   (OH)_{0,75}]$



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 3	$\rho = 1,000$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,000$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

$$R = 161,696 \quad )$$

$$t_{(n-2)} = 63,657 \quad ) \quad 99 < \rho = \hat{\rho} < 99,9$$

$$t_{(n-2)}_{0,995}$$

Contraste de lineabilidad

$$\text{Nivel } F = 26.145,632 \quad )$$

$$F(1/n-2)_{0,0001} = 40,528000 \quad ) \quad 99,5 < P < 99,9$$

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$$\mu = -224,098$$

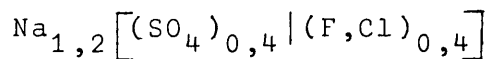
$$p = 0,0162$$

Ecuación de la recta de equilibrio

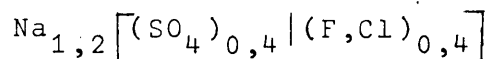
$$D_E = -224,098 \frac{1}{V} + 0,0162$$

Fórmulas iónicas equivalentes

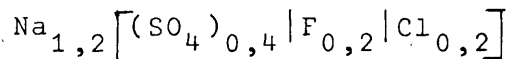
Galeita



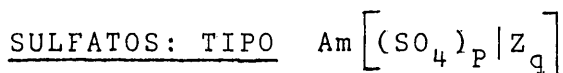
Schairanita



Sulfohalita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 3	$\rho = 0,999$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,000$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

$$R = 95,367 \quad )$$

$$t_{(n-2)} = 63,657 \quad ) \quad 99 < \rho = \beta < 99,9$$

$$t_{0,995} \quad )$$

Contraste de lineabilidad

$$\text{Nivel } F = 9094,962 \quad )$$

$$F(1/n-2)_{0,0001} = 40,528000 \quad ) \quad 99 < p < 99,5$$

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$$\mu = -280,329 \quad \quad \quad p = 0,0217$$

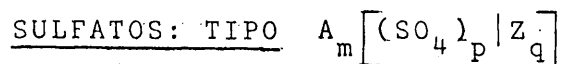
Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -280,329 \frac{1}{V} + 0,0217$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Galeita	$\text{Na}_{1,5} \left[ (\text{SO}_4)_{0,5}   (\text{F}, \text{Cl})_{0,5} \right]$
Schairenita	$\text{Na}_{1,5} \left[ (\text{SO}_4)_{0,5}   (\text{F}, \text{Cl})_{0,5} \right]$
Sulfohalita	$\text{Na}_{1,5} \left[ (\text{SO}_4)_{0,5}   \text{F}_{0,25}   \text{Cl}_{0,25} \right]$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 3	$\beta = 1,000$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,000$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

$$R = 301,070 \quad )$$

$$t_{(n-2)} = 63,657 \quad ) \quad 99,9 < \rho = \beta < 100$$

$$t_{(n-2)}_{0,995}$$

Contraste de lineabilidad

$$\text{Nivel } F = 90643,415 \quad )$$

$$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 40,528000 \quad ) \quad 99 < P < 99,5$$

Potencial químico equivalente de la asociación

$$\mu = -186,653$$

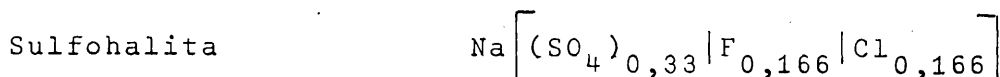
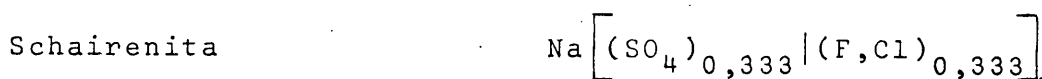
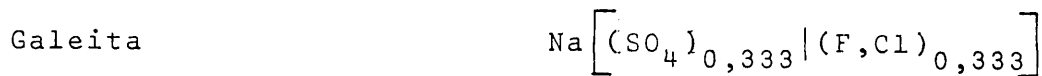
Término constante

$$p = 0,012$$

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -186,653 + 0,012$$

Fórmulas catiónicas equivalentes



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



Nº de muestras                      Coef. de correlación                      Varianza de la regresión

N = 3

$\rho = 1,000$

$\sigma^2_{Y/X} = 0,000$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 95,367

)

99 <  $\rho$  =  $\beta$  < 99,9

$t_{(n-2)}_{0,995} = 63,657$

)

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 9094,962

)

99 < P < 99,5

$F(1/n-2)_{0,0001} = 40528000$

)



Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -280,329$

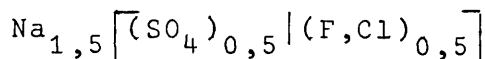
p = 0,0217

Ecuación de la recta de equilibrio

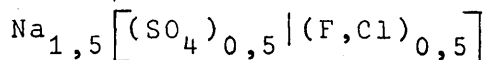
$D_E = -280,329 \frac{1}{V} + 0,0217$

Fórmulas radicales equivalentes

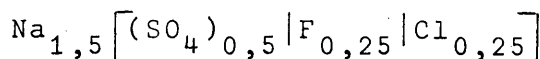
Galeita



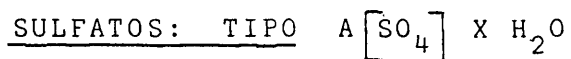
Schairerita



Sulfohalita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 5	$\hat{\rho} = 0,970$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,014$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 7,004	)	99 < $\rho$ = $\hat{\rho}$ < 99,9
$t_{(n-2)} = 5,841$	)	
$t_{(n-2)}_{0,995}$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 49,056	)	99 < P < 99,5
$F(1/n-2) = 784,01$	)	
$F(1/n-2)_{0,0001}$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -1453,946$

Término constante

$p = 1,752$

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1453,946 \frac{1}{V} + 1,752$

Fórmulas iónicas equivalentes

Melanterita	$Fe [SO_4] 7 H_2O$
Goslarita	$Zn [SO_4] 7 H_2O$
Morenosita	$Ni [SO_4] 7 H_2O$
Epsomita	$Mg [SO_4] 7 H_2O$
Kalinita	$K_{0,5} Al_{0,5} [SO_4] 6 H_2O$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

SULFATOS: TIPO A  $[SO_4] \times H_2O$

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 5	$\rho = 0,970$	$\sigma^2 Y/X = 0,014$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 7,004	)	99 < $\rho$ = $\beta$ < 99,9
$t_{(n-2)} = 5,841$	)	
$t_{(n-2)}_{0,995}$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 49,056	)	99 < P < 99,5
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 784,01$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

$\mu = -1453,946$	$p = 1,752$
-------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1453,946 + 1,752$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Melanterita	$Fe [SO_4] 7 H_2O$
Goslarita	$Zn [SO_4] 7 H_2O$
Morenosita	$Ni [SO_4] 7 H_2O$
Epsomita	$Mg [SO_4] 7 H_2O$
Kalinita	$K_{0,5} Al_{0,5} [SO_4] 6 H_2O$



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

SULFATOS: TIPO A  $[SO_4] X H_2O$

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 5	$\delta = 0,970$	$\sigma^2 Y/X = 0,014$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 7,004	)	99 < $\rho = \delta$ < 99,9
$t_{(n-2)}_{0,995} = 5,841$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 49,056	)	99 < P < 99,5
$F(1/n-2)_{0,0001} = 784,01$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1453,946$	$p = 1,752$
-------------------	-------------

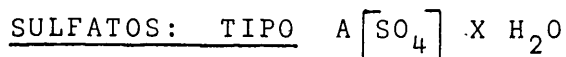
Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1453,946 \frac{1}{V} + 1,752$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Melanterita	$Fe [SO_4] 7 H_2O$
Goslarita	$Zn [SO_4] 7 H_2O$
Morenosita	$Ni [SO_4] 7 H_2O$
Epsomita	$Mg [SO_4] 7 H_2O$
Kalinita	$K_{0,5} Al_{0,5} [SO_4] 6 H_2O$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 5	$\beta = 0,970$	$\sigma^2 Y/X = 0,014$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 7,004	)	
	)	99 < $\rho = \beta$ < 99,9
$t_{(n-2)}_{0,995} = 5,841$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 49,056	)	
	)	99 < P < 99,5
$F(1/n-2)_{0,0001} = 784,01$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

$\mu = -1453,946$	$p = 1,752$
-------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1453,946 \frac{1}{V} + 1,752$$

-----

Fórmulas radicales equivalentes

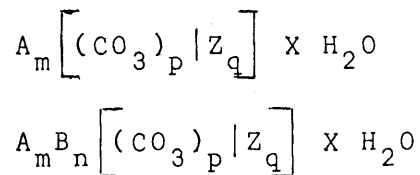
Melanterita	Fe	$[SO_4]$	7	$H_2O$
Goslarita	Zn	$[SO_4]$	7	$H_2O$
Morenosita	Ni	$[SO_4]$	7	$H_2O$
Epsomita	Mg	$[SO_4]$	7	$H_2O$
Kalinita	KAl	$[SO_4]$	12	$H_2O$

X.5. CLASE CARBONATOS

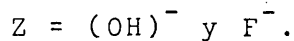
X.5.1. Cristaloquímica.

Comprenden una familia de oxisales anisodésmicas en las que la unidad fundamental de la estructura es el ión complejo  $[\text{CO}_3]^{-2}$ . El átomo de carbono está situado en el centro del triángulo equilátero que forman los tres átomos de oxígeno. Los enlaces carbono-oxígeno son fundamentalmente covalentes mientras que el enlace entre los cationes es esencialmente iónico.

Las unidades  $[\text{CO}_3]^{-2}$  aisladas entre sí, mediante cationes metálicos o aniones adicionales, se sitúan en planos paralelos, lo que da a la estructura de los carbonatos un marcado carácter anisométrico. La estructura de la calcita y carbonatos afines es una estructura en estratos debido a la distribución en planos de los iones complejos  $[\text{CO}_3]^{-2}$ , mientras que la bastnasita  $[(\text{CO}_3)|\text{F}]$  presenta una estructura en cadenas debido a la distribución axial de los iones complejos  $[\text{CO}_3]^{-2}$ . La composición química de los carbonatos puede expresarse mediante las dos fórmulas generales siguientes:



A y B representan los cationes, que fundamentalmente son: Mg, Ca, Na, Th, V, Fe, Al, Mn, Ba, Zn, Cu, Pb y menos frecuentemente K, Sr, Bi, Cr, Co, N y  $\text{NH}_4$ .



X.5.1.a. Estudio estadístico.

Los carbonatos estudiados en este trabajo, corresponden a los grupos de carbonatos más conocidos, grupo de la calcita y grupo del aragonito.

Los datos empleados en el estudio estadístico de estos dos grupos minerales son:

I) Grupo de la calcita.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Calcita	-622	110,064	-5,651
Siderita	-725	89,225	-8,122
Rodocrosita	-705	90,657	-7,776
Magnesita	-735	81,749	-8,990
Cobaltocalcita	-765	86,040	-8,891
Smithsonita	-755	84,289	-8,957;

II) Grupo del aragonito.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Aragonito	-622	33,777	-18,414
Vaterita	-622	37,869	-16,425
Witherita	-523	45,678	-11,449
Stroncianita	-571	39,383	-14,489
Cerusita	-625	40,483	-15,438

X.5.1.b. Determinación de las rectas de equilibrio termodinámico.

Las rectas de equilibrio termodinámico obtenidas para estas dos asociaciones minerales se encuentran a continuación. Analizando estos resultados vemos que ambas rectas cumplen las condiciones establecidas a priori.

X.5.2. CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE  
DE LAS ASOCIACIONES MINERALES

CLASE CARBONATOS

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CARBONATOS: GRUPO DE LA CALCITA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 6	$\rho = 0,996$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,015$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 23,437	)	
$t_{(n-2)}_{0,995} = 4,604$	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 549,313	)	
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 241,62$	)	99,99 < P < 100

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -1159,496$

$p = 4,870$

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1159,496 \frac{1}{V} + 4,870$

Fórmulas iónicas equivalentes

Calcita	Ca [CO <sub>3</sub> ]
Siderita	Fe [CO <sub>3</sub> ]
Rodocrosita	Mn [CO <sub>3</sub> ]
Magnesita	Mg [CO <sub>3</sub> ]
Cobaltocalcita	Co [CO <sub>3</sub> ]
Smithsonita	Zn [CO <sub>3</sub> ]

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CARBONATOS: GRUPO DE LA CALCITA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 6	$\hat{\rho} = 0,996$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,015$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 23,437	)	
	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 4,604$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 549,313	)	
	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} = 241,62$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -1159,496$

Término constante

p = 4,870

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1159,496 \frac{1}{V} + 4,870$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Calcita	Ca	[CO <sub>3</sub> ]
Siderita	Fe	[CO <sub>3</sub> ]
Rodocrosita	Mn	[CO <sub>3</sub> ]
Magnesita	Mg	[CO <sub>3</sub> ]
Cobaltocalcita	Co	[CO <sub>3</sub> ]
Smithsonita	Zn	[CO <sub>3</sub> ]

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CARBONATOS: GRUPO DE LA CALCITA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 6	$\hat{\rho} = 0,996$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,015$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 23,437	)	
	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 4,604$	)	



Contraste de lineabilidad

Nivel F = 170,568	)	
	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} = 241,62$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -1159,496$

Término constante

p = 4,870

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -1159,496 \frac{1}{V} + 4,870$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Calcita	Ca	$[CO_3]$
Siderita	Fe	$[CO_3]$
Rodocrosita	Mn	$[CO_3]$
Magnesita	Mg	$[CO_3]$
Cobaltocalcita	Co	$[CO_3]$
Smithsonita	Zn	$[CO_3]$



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CARBONATOS: GRUPO DE LA CALCITA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 6	$\rho = 0,996$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,015$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 23,437	)	
	)	99,9 < $\rho = \rho$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 4,604$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 549,313	)	
	)	99,99 < p < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} = 241,62$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

$\mu = -1159,496$	$p = 4,870$
-------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -1159,496 \frac{1}{V} + 4,870$$

Fórmulas radicales equivalentes

Calcita	Ca [CO <sub>3</sub> ]
Siderita	Fe [CO <sub>3</sub> ]
Rodocrosita	Mn [CO <sub>3</sub> ]
Magnesita	Mg [CO <sub>3</sub> ]
Cobaltocalcita	Co [CO <sub>3</sub> ]
Smithsonita	Zn [CO <sub>3</sub> ]

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CARBONATOS: GRUPO ARAGONITO

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 5	$\rho = 0,999$	$\sigma^2 Y/X = 0,005$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 72,135	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 5,841$	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 5203,46	)	99,99 < P < 100
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 784,010$	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = -898,729$

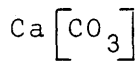
p = 8,230

Ecuación de la recta de equilibrio

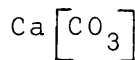
$$D_E = -898,729 \frac{1}{V} + 8,230$$

Fórmulas iónicas equivalentes

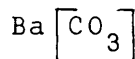
Aragonito



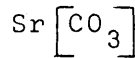
Vaterita



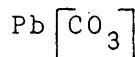
Witherita



Stroncianita



Cerusita



CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CARBONATOS: GRUPO DEL ARAGONITO

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 7	$\rho = 0,999$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,005$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 72,135	)	
	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 5,841$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 5203,487	)	
	)	99,99 < P < 100
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 784,010$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación      Término constante

$\mu = -898,729$	$p = 8,230$
------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -898,729 \frac{1}{V} + 8,230$$

-----  
Fórmulas aniónicas equivalentes

Aragonito	Ca [CO <sub>3</sub> ]
Vaterita	Ca [CO <sub>3</sub> ]
Witherita	Ba [CO <sub>3</sub> ]
Stroncianita	Sr [CO <sub>3</sub> ]
Cerusita	Pb [CO <sub>3</sub> ]

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CARBONATOS: GRUPO DEL ARAGONITO

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 5	$\rho = 0,999$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,005$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 72,135	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
	)	
$t_{(n-2)0,995} = 5,841$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 5203,487	)	99,99 < P < 100
$F_{(1/n-2)0,0001} = 784,010$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

Término constante

$\mu = 898,729$

$p = 8,230$

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -898,729 \frac{1}{V} + 8,230$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Aragonito	Ca [CO <sub>3</sub> ]
Vaterita	Ca [CO <sub>3</sub> ]
Witherita	Ba [CO <sub>3</sub> ]
Stroncianita	Sr [CO <sub>3</sub> ]
Cerusita	Pb [CO <sub>3</sub> ]

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

CARBONATOS: GRUPO DEL ARAGONITO

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 5	$\rho = 0,999$	$\sigma^2_{Y/X} = 0,005$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 72,135	)	
	)	99,9 < $\rho = \beta$ < 100
$t_{(n-2)}_{0,995} = 5,841$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 5203,487	)	
	)	99,99 < p < 100
$F(1/n-2)_{0,0001} = 784,010$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

$\mu = -898,729$	$p = 8,230$
------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -898,729 \frac{1}{V} + 8,230$$

Fórmulas radicales equivalentes

Aragonito	Ca [CO <sub>3</sub> ]
Vaterita	Ca [CO <sub>3</sub> ]
Witherita	Ba [CO <sub>3</sub> ]
Stroncianita	Sr [CO <sub>3</sub> ]
Cerusita	Pb [CO <sub>3</sub> ]

X.6. CLASE HALUROS.

X.6.1. Cristaloquímica.

Comprende las sales de los ácidos HF, HCl, HBr, y HI. Los halógenos F, Cl, Br y I, son notables por su fuerte afinidad para con los electrones y por tanto son unos de los más fuertes agentes oxidantes. De los cuatro halógenos el más abundante en la corteza terrestre es el cloro seguido del fluor, bromo e iodo que son más escasos. Los haluros más importantes son los cloruros de Na, K, Mg y Pb y los fluoruros de Ca, Na y Al. Los metales Cu, Ag, Hg, Fe y Mn están también representados entre los principales cationes.

Los haluros son compuestos típicamente iónicos, tanto isodésimicos como anisodésimicos, las estructuras anisodésimicas contienen grupos tetraédricos como el  $[BF_4]$  en la ferrucita. Na  $[BF_4]$  u octaédricos  $[SiF_6]$  o  $[AlF_6]$  como en la hieratita  $[K_2SiF_6]$ .

En los compuestos isodésimicos, el aumento de la polarización de los diferentes aniones es importante, produciendo un aumento en el carácter covalente de los enlaces dentro de la estructura.

La mayor parte de los haluros son monoatómicos, sólo algunos son biatómicos formados por algunos pares característicos como son K-Na, K-Mg, K-Ca y Pb-Cu.

El tamaño de los iones de los halógenos juega un papel importante en la determinación en el tipo de estructura cristalina. De acuerdo con la aproximación hecha por P. Groth, la mayor parte de los haluros tiene una alta simetría cristalina en las estructuras de los tipos AX y AX<sub>2</sub>.

X.6.1.a. Estudio estadístico.

Se han determinado tres asociaciones minerales que sirven para verificar la hipótesis defendida.

- I) Tipo AX, grupo de la halita.
- II) Tipo AX<sub>2</sub>.
- III) Tipo A<sub>m</sub> BX<sub>n</sub> . X H<sub>2</sub>O.

Los datos empleados para este estudio son:

I) Haluros tipo AX grupo de la halita.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Halita	-185	26,823	- 6,879
Silvina	-158	37,233	- 4,243
Cerargirita	-240	22,989	-14,828
Bromirita	-235	28,695	-10,439
Miersita	-242	41,173	- 5,877
Marshita	-260	33,322	- 7,802

II) Haluros tipo AX<sub>2</sub>.

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Cotunita	-6.000	47,545	-12,619
Cloromagnesita	- 710	39,189	-18,117
Lawrencita	- 700	38,793	-18,044
Schachita	- 680	123,451	- 5,508



III) Haluros tipo  $A_m BX_n \cdot X H_2O$ .

	Er Kcal	Vr cm <sup>3</sup>	D. Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Carnalita	- 868	172,718	- 5,025
Erythrosiderita	-1.846	142,365	-12,966
Diaboleita	-1.850	111,755	-16,554
Pseudodiaboleita	-6.180	371,326	-16,643
Cumengita	-5.510	342,440	-16,090
Atacamita	-1.515	56,504	-26,812
Fieldddlerita	-1.810	140,340	-12,897

X.6.1.b. Determinación de las rectas de equilibrio termodinámico.

En esta clase mineral no puede considerarse la existencia de un radical, por tanto no existe la recta correspondiente a este equivalente.

En los grupos I y III las ecuaciones de las rectas obtenidas no alcanzan los niveles de probabilidad del 99%, pero están tan próximos a ellos que podemos considerar que cumplen las condiciones preestablecidas.

Las ecuaciones de las rectas de equilibrio termodinámico obtenidas para estas tres asociaciones minerales se indican a continuación.



X.6.2. CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE  
DE LAS ASOCIACIONES MINERALES

CLASE HALUROS

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

HALUROS: GRUPO DE LA HALITA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 7	$\rho = 0,861$	$\sigma^2 Y/X = 1,983$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 3,789	)	98 < $\rho = \hat{\rho}$ < 99
	)	
$t_{(n-2)}_{0,995} = 4,032$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 14,358	)	97,5 < P < 99
	)	
$F(1/n-2)_{0,0001} = 124,94$	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -294,972$

Término constante

p = 2,206

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -294,972 \frac{1}{V} + 2,206$

Fórmulas iónicas equivalentes

Halita	Na Cl
Silvina	K Cl
Cerargirita	Ag Cl
Bromirita	Ag Br
Nantokita	Cu Cl
Miersita	Ag I
Marshita	Cu I

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

HALUROS: GRUPO DE LA HALITA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 7	$\beta = 0,861$	$\sigma^2_{Y/X} = 1,983$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 3,789	)	98 < $\rho = \beta$ < 99
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 4,032	)	
	)	



Contraste de lineabilidad

Nivel F = 14,358	)	97,5 < P < 99
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 124,94	)	
	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

$\mu = -294,972$	$p = 2,206$
------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -294,972 \frac{1}{V} + 2,206$$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Halita	NaCl
Silvina	KCl
Cerargirita	AgCl
Bromirita	AgBr
Nantokita	CuCl
Miersita	AgI
Marshita	CuI

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

HALUROS: GRUPO DE LA HALITA

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 7	$\rho = 0,861$	$\sigma^2_{Y/X} = 1,983$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 3,789	)	98 < $\rho = \beta$ < 99
$t_{(n-2)}_{0,995} = 4,032$	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 14,358	)	97,5 < P < 99
$F_{(1/n-2)}_{0,0001} = 124,94$	)	
	)	



Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -294,972$

Término constante

p = 2,206

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -294,972 \frac{1}{V} + 2,206$$

Fórmulas catiónicas equivalentes

Halita	NaCl
Silvina	K Cl
Cerargirita	AgCl
Bromirita	AgBr
Nantokolita	CuCl
Miersita	Ag I
Marsnita	Cu I

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

HALUROS: TIPO AX<sub>2</sub>

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\rho = 0,983$	$\sigma^2_{Y/X} = 1,745$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 7,684	)	98 < $\rho = \hat{\rho}$ < 99
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 9,925	)	
	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 59,081	)	97,5 < P < 99
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 9998,5	)	
	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -471,238$

Término constante

p = 0,638

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -471,238 \frac{1}{V} + 0,638$

Fórmulas iónicas equivalentes

Cotunita	Pb <sub>0,666</sub> Cl <sub>1,333</sub>
Cloromagnesita	Mg <sub>0,666</sub> Cl <sub>1,333</sub>
Lawrencita	Fe <sub>0,666</sub> Cl <sub>1,333</sub>
Scachita	Mn <sub>0,666</sub> Cl <sub>1,333</sub>

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

HALUROS TIPO: AX<sub>2</sub>

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\hat{\rho} = 0,983$	$\sigma^2_{Y/X} = 1,756$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 7,662	)	
	)	98 < $\rho = \hat{\rho}$ < 99
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 9,925	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 58,709	)	
	)	97,5 < P < 99
F <sub>(1/n-2)</sub> <sub>0,0001</sub> = 9998,5	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

$\mu = -353,597$	$p = 0,641$
------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -353,597 \frac{1}{V} + 0,641$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Cotumita	Pb <sub>0,5</sub> Cl
Cloromagnesita	Mg <sub>0,5</sub> Cl
Lawrencita	Fe <sub>0,5</sub> Cl
Scachita	Mn <sub>0,5</sub> Cl

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

HALUROS: TIPO AX<sub>2</sub>

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 4	$\delta = 0,983$	$\sigma^2 Y/X = 1,752$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 7,671	)	98 < $\rho = \delta$ < 99
$t_{(n-2)}_{0,995} = 9,925$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 58,851	)	97,5 < P < 99
$F(1/n-2)_{0,0001} = 9998,5$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

$\mu = -706,927$	$p = 0,639$
------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -706,927 \frac{1}{V} + 0,639$

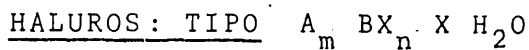
Fórmulas catiónicas equivalentes

Cotunita	Pb Cl <sub>2</sub>
Cloromagnesita	Mg Cl <sub>2</sub>
Lawrencita	Fe Cl <sub>2</sub>
Scacchita	Mn Cl <sub>2</sub>





CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:



<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 7	$\hat{\rho} = 0,987$	$\sigma^2_{Y/X} = 1,248$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 14,071	)	99,7 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
$t_{(n-2)} = 4,032$	)	
$t_{0,995}$	)	

Contraste de lineabilidad

Nivel F = 198,015	)	99,99 < P < 100
$F(1/n-2) = 124,94$	)	
$F_{0,0001}$	)	

<u>Potencial químico equivalente de la asociación</u>	<u>Término constante</u>
---	--------------------------

$\mu = -341,639$	$p = 0,495$
------------------	-------------

Ecuación de la recta de equilibrio

$D_E = -341.639 \frac{1}{V} + 0,495$

Fórmulas aniónicas equivalentes

Carnalita	$K_{0,33} Mg_{0,33} Cl_{1,0} (H_2O)_2$
Erythrosiderita	$K_{0,40} Fe_{0,20} Cl_{1,0} (H_2O)_{0,125}$
Diaboleita	$Pb_{0,333} Cu_{0,166} Cl_{0,333} (OH)_{0,666}$
Pseudodiaboleita	$Pb_{0,277} Cu_{0,222} Cl_{0,555} (OH)_{0,44} (H_2O)_{0,1}$
Cumengita	$Pb_{0,25} Cu_{0,25} Cl_{0,5} (OH)_{0,5} (H_2O)_{0,06}$
Atacamita	$Cu_{0,15} Cl_{0,25} (OH)_{0,75}$
Fieddlerita	$Pb_{0,5} Cl_{0,66} (OH)_{0,33}$

CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO EQUIVALENTE DE LA ASOCIACION MINERAL:

HALUROS: TIPO Am BX<sub>n</sub> X H<sub>2</sub>O

<u>Nº de muestras</u>	<u>Coef. de correlación</u>	<u>Varianza de la regresión</u>
N = 7	$\rho = 0,983$	$\sigma^2_{Y/X} = 1,713$

Nivel de significación del coeficiente de correlación

R = 11,954	)	
	)	99,9 < $\rho = \hat{\rho}$ < 100
t <sub>(n-2)</sub> <sub>0,995</sub> = 4,032	)	



Contraste de lineabilidad

Nivel F = 142,916	)	
	)	99,99 < p < 100
F(1/n-2) <sub>0,0001</sub> = 124,94	)	

Potencial químico equivalente de la asociación

$\mu = -543,015$

Término constante

p = 3,284

Ecuación de la recta de equilibrio

$$D_E = -543,015 \frac{1}{V} + 3,284$$

Fórmulas iónicas equivalentes

Carnalita	$K_{0,4} Mg_{0,4} Cl_{1,2} (H_2O)_{2,4}$
Erythrosiderita	$K_{0,5} Fe_{0,25} Cl_{1,25} (H_2O)_{0,25}$
Diaboleita	$Pb_{0,44} Cu_{0,22} Cl_{0,44} (OH)_{0,88}$
Pseudodiaboleita	$Pb_{0,37} Cu_{0,30} Cl_{0,73} (OH)_{0,60} (H_2O)_{0,15}$
Cumengita	$Pb_{0,333} Cu_{0,333} Cl_{0,666} (OH)_{0,666} (H_2O)_{0,}$
Atacamita	$Cu_{0,666} Cl_{0,333} (OH)_{1,0}$
Fieddlerita	$Pb_{0,666} (OH)_{0,444} Cl_{0,93}$

XI. RELACION ENTRE LA PRESION DE CRISTALIZACION Y  
LA PRESION DE DISOCIACION.

Al analizar los datos obtenidos para las distintas asociaciones minerales se pudo observar una relación entre la presión de cristalización y la presión de disociación. Es decir, dentro de cada clase mineral, cada grupo tiene una presión de disociación mayor cuanto mayor es su presión de cristalización.

Para ver si la relación existente podía expresarse mediante una ecuación matemática sencilla representamos los pares de valores obtenidos, presión de cristalización y presión de disociación, para los cuatro equivalentes, en la clase mineral, mejor representada en las estimaciones estadísticas. Es decir, en la clase silicatos, como puede observarse en el gráfico de la página siguiente es posible trazar una recta que interseca a doce de los catorce segmentos que representan la variación de la presión de disociación de cada uno de los grupos estudiados en los silicatos.

Al analizar estos valores mediante el código REMICUA III, obtuvimos un coeficiente de correlación  $\rho = 0,88$  y una probabilidad de que la regresión sea lineal mayor del 99%. Por tanto podemos inferir que la relación entre la presión de cristalización y la presión de disociación es lineal en el segmento en que disponemos de datos.

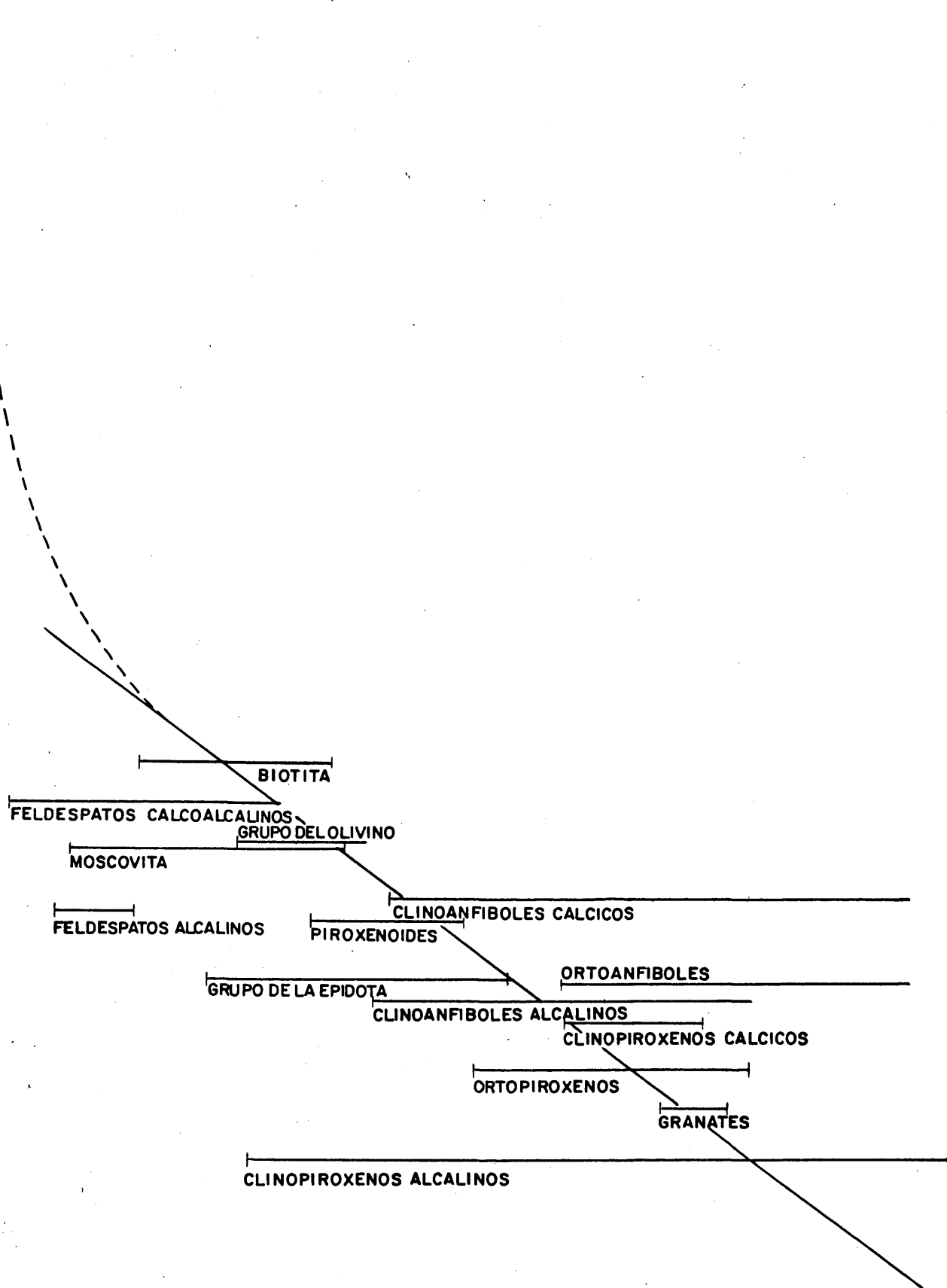
La ecuación de la recta de regresión entre la presión de cristalización y la presión de disociación para los grupos minerales estudiados en la clase mineral es:

$$P_c = -1,964 P_D - 77,142$$

Pero como se debe esperar que a una presión de cristalización cero le corresponda una presión de disociación también nula, es posible que la relación existente entre ambas variables

PRESION DE DISOCIACION  $Kcd/cm^3$

0 2 4 6 8 10 12 14 16 18 20 22 24 26 28 30 32 34 36



no sea lineal, sino que realmente siga la ecuación de una cónica, probablemente una parábola, que pasando por los puntos utilizados para el cálculo de la regresión lineal, alcance el valor (0, 0). Pero hemos considerado que, a falta de más datos, y teniendo en cuenta la dispersión de los datos estadísticos, y como una primera aproximación, la ecuación antes mencionada puede utilizarse para recalcular las presiones de disociación y los potenciales químicos, de las asociaciones minerales correspondientes a la clase mineral de los silicatos. Como ya hemos indicado y como puede verse en el gráfico adjunto, la recta considerada no contiene los valores de presión de disociación correspondientes a las asociaciones minerales: feldespatos alcalinos y ortoanfíboles; pero suponemos que esto se debe a la dispersión de los datos estadísticos.

Para la clase mineral óxidos actuamos de forma análoga y como puede verse en el gráfico adjunto, de los siete grupos minerales estudiados, cinco pertenecen a la recta considerada. La ecuación de esta recta es:

$$P_C = -6 P_D - 10$$

Análogamente calculamos las ecuaciones de las rectas de regresión para las demás clases minerales estudiadas. Los resultados obtenidos son:

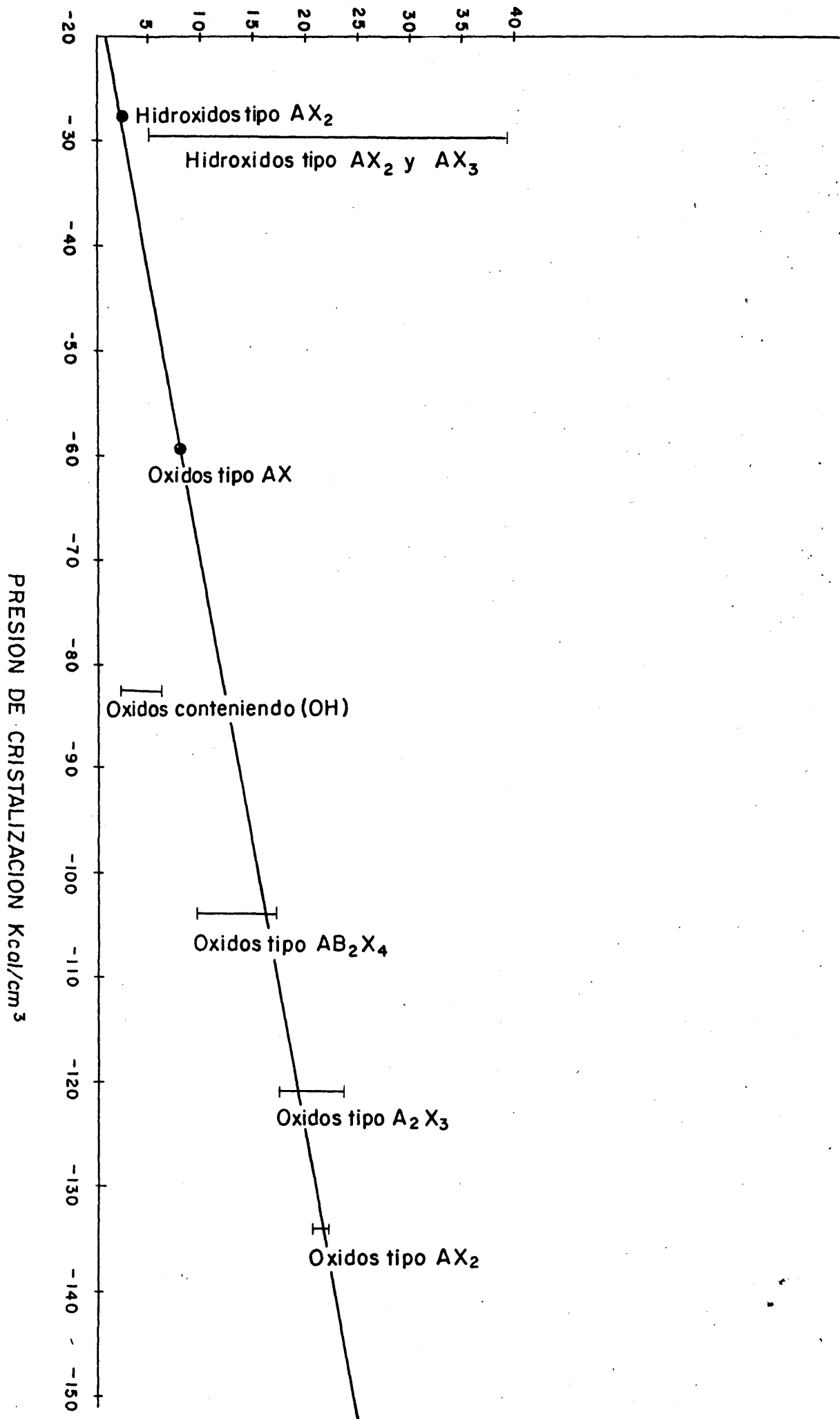
Haluros:

$$P_C = -2 P_D - 5$$

Fosfatos:

$$P_C = -4 P_D - 2$$

PRESION DE DISOCIACION Kcal./ cm<sup>3</sup>



Sulfatos y carbonatos:

$$P_C = -1,333 P_D - 1,333$$

A partir de estas ecuaciones es posible calcular el potencial químico y la presión de disociación para aquellos minerales en los cuales por carecer de los suficientes datos estadísticos o por tratarse de minerales, que no pertenecen a ninguna asociación mineral, no pudieron definirse anteriormente. Por lo tanto, podemos conocer para cualquier asociación mineral o especie mineral, los parámetros que nos permitirán realizar un estudio comparativo de todos ellos.

A este fin podemos considerar que el oxígeno en los óxidos y los halógenos en los haluros representan radicales elementales. Esto, nos permitirá comparar mediante el equivalente radical todas las clases minerales estudiadas.

XII. ECUACIONES DE EQUILIBRIO TERMODINAMICO DE LAS DISTINTAS  
ASOCIACIONES MINERALES

XII.1. CLASE SILICATOS

GRUPO DEL OLIVINO:

Olivino, Monticellita, Tefroita, Knebelita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1630,960 \frac{1}{V} + 15,10$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1428,056 \frac{1}{V} + 15,10$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -1901,072 \frac{1}{V} + 15,10$$

Equivalente radical

$$D_E = -5766,889 \frac{1}{V} + 15,10$$

---



GRUPO DE LA EPIDOTA:

Epidota, Clinozoisita, Allanita, Piamontita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1841,631 \frac{1}{V} + 21,30$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1489,903 \frac{1}{V} + 21,30$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2406,568 \frac{1}{V} + 21,30$$

Equivalente radical

$$D_E = -3878,743 \frac{1}{V} + 21,30$$

---

GRUPO DE LOS GRANATES:

Piropo, Almandino, Espesartita, Grosularia, Andradita,  
Uvarovita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1917,280 \frac{1}{V} + 28,25$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1596,111 \frac{1}{V} + 28,25$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2396,600 \frac{1}{V} + 28,25$$

Equivalente radical

$$D_E = -6390,934 \frac{1}{V} + 28,25$$

---

GRUPO DE LOS ORTOPIROXENOS:

Enstatita, Hiperstena, Ortoferrosilita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1967,001 \frac{1}{V} + 25,40$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1638,099 \frac{1}{V} + 25,40$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2461,158 \frac{1}{V} + 25,40$$

Equivalente radical

$$D_E = 4914,299 \frac{1}{V} + 25,40$$

---

GRUPO DE LOS CLINOPIROXENOS CALCICOS:

Fasaita, Augita, Diopsido, Hedembergita, Pigeonita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1923,710 \frac{1}{V} + 23,20$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1603,802 \frac{1}{V} + 23,20$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2403,039 \frac{1}{V} + 23,20$$

Equivalente radical

$$D_E = -4806,039 \frac{1}{V} + 23,20$$

---

GRUPO DE LOS CLINOPIROXENOS ALCALINOS:

Jadeita, Egirina, Espodumena.

Equivalente iónico

$$D_E = -2096,111 \frac{1}{V} + 29,40$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1716,273 \frac{1}{V} + 29,40$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2604,568 \frac{1}{V} + 29,40$$

Equivalente radical

$$D_E = -5143,406 \frac{1}{V} + 29,40$$

---

GRUPO DE LOS ORTOANFIBOLES:

Antofilita, Gedrita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1867,876 \frac{1}{V} + 21,10$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1528,822 \frac{1}{V} + 21,10$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2396,034 \frac{1}{V} + 21,10$$

Equivalente radical

$$D_E = -3676,455 \frac{1}{V} + 21,10$$

---

GRUPO DE LOS CLINOANFIBOLES CALCICOS:

Hornblenda, Pargasita, Hastिंगita, Richterita, Arfvedsonita, Kaersutita, Barkevikita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1776,930 \frac{1}{V} + 17,20$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1475,651 \frac{1}{V} + 17,20$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2232,792 \frac{1}{V} + 17,20$$

Equivalente radical

$$D_E = -3544,016 \frac{1}{V} + 17,20$$

---

GRUPO DE LOS CLINOANFIBOLES ALCALINOS:

Glaucofana, Riebekita, Holmisquitita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1938,194 \frac{1}{V} + 22,20$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1581,272 \frac{1}{V} + 22,20$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2507,646 \frac{1}{V} + 22,20$$

Equivalente radical

$$D_E = -3798,445 \frac{1}{V} + 22,20$$

---

GRUPO DE LOS PIROXENOIDES:

Rodonita, Bustamita, Piroxmangita, Wollastonita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1890,834 \frac{1}{V} + 18,60$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1575,695 \frac{1}{V} + 18,60$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2359,299 \frac{1}{V} + 18,60$$

Equivalente radical

$$D_E = -4744,151 \frac{1}{V} + 18,60$$

---

GRUPO DE LAS MICAS DIOCTAEDRICAS:

Moscovita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1790,073 \frac{1}{V} + 15,15$$

Equivalente aniónico

$$D_E = 1472,515 \frac{1}{V} + 15,15$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2282,259 \frac{1}{V} + 15,15$$

Equivalente radical

$$D_E = -2858,207 \frac{1}{V} + 15,15$$

---

GRUPO DE LAS MICAS TRIOCTAEDRICAS:

Biotita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1617,459 \frac{1}{V} + 11,10$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1330,522 \frac{1}{V} + 11,10$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2062,184 \frac{1}{V} + 11,10$$

Equivalente radical

$$D_E = -2664,282 \frac{1}{V} + 11,10$$

---

GRUPO DE LOS FELDESPATOS ALCALINOS:

Ortosa, Albita.





Equivalente iónico

$$D_E = -2067,452 \frac{1}{V} + 18,10$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1679,637 \frac{1}{V} + 18,10$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2682,561 \frac{1}{V} + 18,10$$

Equivalente radical

$$D_E = -3354,935 \frac{1}{V} + 18,10$$

---

GRUPO DE LOS FELDESPATOS CALCOALCALINOS:

Anortita, Hyalofana, Celsiana.

Equivalente iónico

$$D_E = -1871,183 \frac{1}{V} + 13,30$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1523,113 \frac{1}{V} + 13,30$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2425,462 \frac{1}{V} + 13,30$$

Equivalente radical

$$D_E = -3054,285 \frac{1}{V} + 13,30$$

---

XII.2. CLASES OXIDOS

OXIDOS TIPO A X:

Periclasa, Busenita, Manganosita, Oxido de Cadmio, Oxido de Calcio, Cincita, Tenorita, Montroydita, Litargirio, De lafossita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1028,955 \frac{1}{V} + 7,79$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1028,955 \frac{1}{V} + 7,79$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -1028,955 \frac{1}{V} + 7,79$$

Equivalente radical

$$D_E = -1028,955 \frac{1}{V} + 7,79$$

---

OXIDOS TIPO A<sub>2</sub>X<sub>3</sub>:

Corindón, Hematites, Bixbyita, Ilmenita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1647,488 \frac{1}{V} + 18,50$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1371,020 \frac{1}{V} + 18,50$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2051,497 \frac{1}{V} + 18,50$$

Equivalente radical

$$D_E = -1371,020 \frac{1}{V} + 18,50$$

---

OXIDOS TIPO AX<sub>2</sub>:

Rutilo, Platnerita, Casiterita, Anatasa, Brookita, Baddleyita.

Equivalente iónico

$$D_E = -2137,682 \frac{1}{V} + 21,00$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1604,368 \frac{1}{V} + 21,00$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -3208,737 \frac{1}{V} + 21,00$$

Equivalente radical

$$D_E = -1604,368 \frac{1}{V} + 21,00$$

---

OXIDOS TIPO AB<sub>2</sub>X<sub>4</sub>:

Espinela, Hercinita, Gahnita, Galaxita, Magnetita, Magnesiocromita, Franklinita, Trevorita, Jacobsita, Cromita, Magnesiocromita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1463,992 \frac{1}{V} + 15,75$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1283,736 \frac{1}{V} + 15,75$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -1705,561 \frac{1}{V} + 15,75$$

Equivalente radical

$$D_E = -1283,736 \frac{1}{V} + 15,75$$

---

OXIDOS CONTENIENDO (OH)<sup>-</sup>:

Lepidocroita, Bohemita, Manganita, Goethita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1220,535 \frac{1}{V} + 12,00$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -968,612 \frac{1}{V} + 12,00$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -1935,236 \frac{1}{V} + 12,00$$

Equivalente radical

$$D_E = -968,612 \frac{1}{V} + 12,00$$

---

HIDROXIDOS TIPO AX<sub>2</sub>:

Brucita, Pyrocroita, Portlandita.

Equivalente iónico

$$D_E = -551,675 \frac{1}{V} + 2,5$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -413,756 \frac{1}{V} + 2,5$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -827,513 \frac{1}{V} + 2,5$$

Equivalente radical

$$D_E = -413,756 \frac{1}{V} + 2,5$$

---

HIDROXIDOS TIPO AX<sub>2</sub> y AX<sub>3</sub>:

Gibsita, Hidrocalumita, Manaseita, Barbertorita, Sjogrenita.

Equivalente iónico

$$D_E = -721,625 \frac{1}{V} + 3,0$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -513,486 \frac{1}{V} + 3,0$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -1195,608 \frac{1}{V} + 3,0$$

Equivalente radical

$$D_E = -513,486 \frac{1}{V} + 3,0$$

---

XII.3. CLASE FOSFATOS

FOSFATOS TIPO A<sub>2</sub> [(PO<sub>4</sub>) | Z<sub>q</sub>]

Tarbutita, Libethenita, Wagnerita, Triploidita, Wolfeita, Zwieselita, Vayrynemita, Herdenita, Ambligonita.

Equivalente iónico

$$D_E = -946,547 \frac{1}{V} + 6,55$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -946,547 \frac{1}{V} + 6,55$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -946,547 \frac{1}{V} + 6,55$$

Equivalente radical

$$D_E = -946,547 \frac{1}{V} + 6,55$$

---

FOSFATOS TIPO  $A_5 [(PO_4)_3 | Z_q]$ :

Apatito, Hidroxido-Apatito, Cloro-Apatito, Piromorfita.

Equivalente iónico

$$D_E = -881,296 \frac{1}{V} + 4,40$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -995,606 \frac{1}{V} + 4,40$$

Equivalente catiónico

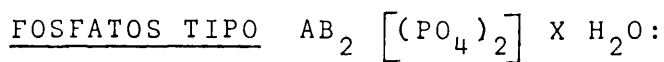
$$D_E = -795,819 \frac{1}{V} + 4,40$$

Equivalente radical

$$D_E = -995,606 \frac{1}{V} + 4,40$$

---





Fairfieldita, Anapaíta, Parahopeíta, Hopeíta, Fosfofilíta, Laudlamíta, Reddingíta, Fosfoferríta, Sholzíta.

Equivalente iónico

$$D_E = -1235,842 \frac{1}{V} + 4,65$$

Equivalente aniónico

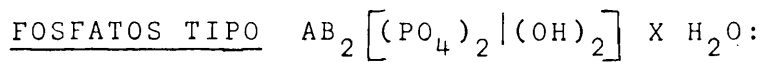
$$D_E = -1577,682 \frac{1}{V} + 4,65$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -1049,471 \frac{1}{V} + 4,65$$

Equivalente radical

$$D_E = -1577,682 \frac{1}{V} + 4,65$$



Laveíta, Pseudolaveíta, Vauxíta, Metavauxíta, Paravauxíta, Gordoníta, Lazulíta, Scorzalíta.

Equivalente iónico

$$D_E = -1535,318 \frac{1}{V} + 6,35$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1345,697 \frac{1}{V} + 6,35$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -1796,648 \frac{1}{V} + 6,35$$

Equivalente radical

$$D_E = -1345,697 \frac{1}{V} + 6,35$$

---

FOSFATOS TIPO  $AB_4[(PO_4)_P|Z_q]$ :

Goyacita, Crandallita, Zinckrocbridgeita, Frondelita,  
Rockbridgeita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1170,509 \frac{1}{V} + 5,60$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -952,337 \frac{1}{V} + 5,60$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -1518,349 \frac{1}{V} + 5,60$$

Equivalente radical

$$D_E = -952,337 \frac{1}{V} + 5,60$$

---

XII.4. CLASE SULFATOS

SULFATOS TIPO A  $[SO_4]$ :

Baritina, Zinckosita, Anhidrita, Anglesita

Equivalente iónico

$$D_E = -997,302 \frac{1}{V} + 8,57$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -997,302 \frac{1}{V} + 8,57$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -997,302 \frac{1}{V} + 8,57$$

Equivalente radical

$$D_E = -997,302 \frac{1}{V} + 8,57$$

---

SULFATOS TIPO  $A_2[(SO_4)_1|Z_q]$ :

Jarosita, Natrojarosita, Argentojarosita, Woodhavesit.

Equivalente iónico

$$D_E = -1353,202 \frac{1}{V} + 23,25$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1015,522 \frac{1}{V} + 23,25$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -2012,581 \frac{1}{V} + 23,25$$

Equivalente radical

$$D_E = -1015,522 \frac{1}{V} + 23,25$$

---

SULFATOS TIPO  $A_m[(SO_4)_p|Z_q]$ :

Galeita, Schairenita, Sulfohalita.

Equivalente iónico

$$D_E = -352,927 \frac{1}{V} + 4,45$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -441,159 \frac{1}{V} + 4,45$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -293,397 \frac{1}{V} + 4,45$$

Equivalente radical

$$D_E = -441,159 \frac{1}{V} + 4,45$$

---

SULFATOS TIPO A [SO<sub>4</sub>] X H<sub>2</sub>O:

Melanterita, Goslarita, Morenosita, Epsomita, Kalinita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1461,739 \frac{1}{V} + 1,80$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1461,739 \frac{1}{V} + 1,80$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -1461,739 \frac{1}{V} + 1,80$$

Equivalente radical

$$D_E = -1461,739 \frac{1}{V} + 1,80$$

---

XII.5. CLASE CARBONATOS

GRUPO DE LA CALCITA:

Calcita, Siderita, Rodocrosita, Magnesita, Cobaltocalcita, Smithsonita.

Equivalente iónico

$$D_E = -1087,050 \frac{1}{V} + 4,10$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -1087,050 \frac{1}{V} + 4,10$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -1087,050 \frac{1}{V} + 4,10$$

Equivalente radical

$$D_E = -1087,050 \frac{1}{V} + 4,10$$

---

GRUPO DEL ARAGONITO:

Aragonito, Vaterita, Witherita, Stroncianita, Cerusita.

Equivalente iónico

$$D_E = -891,875 \frac{1}{V} + 8,05$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -891,875 \frac{1}{V} + 8,05$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -891,875 \frac{1}{V} + 8,05$$

Equivalente radical

$$D_E = -891,875 \frac{1}{V} + 8,05$$

---

XII.6. CLASE HALUROS

GRUPO DE LA HALITA:

Halita, Silvina, Cerargirita, Bromirita, Nantokita, Mier-sita, Marshita.

Equivalente iónico

$$D_E = -291,935 \frac{1}{V} + 2,10$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -291,935 \frac{1}{V} + 2,10$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -291,935 \frac{1}{V} + 2,10$$

Equivalente radical

$$D_E = -291,935 \frac{1}{V} + 2,10$$

---

HALUROS TIPO AX<sub>2</sub>:

Cotunita, Cloromagnesita, Lawrencita, Scachita.

Equivalente iónico

$$D_E = -471,239 \frac{1}{V} + 5,05$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -463,233 \frac{1}{V} + 5,05$$



Equivalente catiónico

$$D_E = -926,467 \frac{1}{V} + 5,05$$

Equivalente radical

$$D_E = -463,233 \frac{1}{V} + 5,05$$

---



HALUROS TIPO  $A_m B X_n \cdot X H_2O:$

Carnalita, Erythrosiderita, Diaboleita, Pseudodiaboleita, Cumengita, Atacamita, Fieddlerita.

Equivalente iónico

$$D_E = -623,801 \frac{1}{V} + 6,05$$

Equivalente aniónico

$$D_E = -461,774 \frac{1}{V} + 6,05$$

Equivalente catiónico

$$D_E = -911,709 \frac{1}{V} + 6,05$$

Equivalente radical

$$D_E = -461,774 \frac{1}{V} + 6,05$$

---

XII.7. ESTIMACION DEL POTENCIAL QUIMICO SEGUN EL EQUIVALENTE  
RADICAL DE ALGUNAS ESPECIES MINERALES QUE NO PERTENE-  
CEN A LAS ASOCIACIONES ESTUDIADAS

-HALUROS-

FLUORITA:  $\text{Ca}_{0,5}\text{F}$

$$D_E = -474,224 \frac{1}{V} + 11,50$$

-----

-OXIDOS-

CUPRITA:  $\text{Cu}_2\text{O}$ ;

$$D_E = -850,925 \frac{1}{V} + 3,50$$

URANINITA:  $\text{U}_{0,5}\text{O}$

$$D_E = -1431,123 \frac{1}{V} + 15,50$$

TANTALITA:  $(\text{Fe}, \text{Mn})_{0,166} (\text{Ta}, \text{Cb})_{0,33} \text{O}$

$$D_E = -2416,510 \frac{1}{V} + 23,05$$

CRISOBERILO:  $\text{Be}_{0,25} \text{Al}_{0,50} \text{O}$

$$D_E = -1356,188 \frac{1}{V} + 23,50$$

FERGUNSONITA:  $(Y, Er, Ce, Fe)_{0,25} (Cb, Ta, Ti)_{0,25} O$

$$D_E = -1382,714 \frac{1}{V} + 32,10$$

-----  
-SILICATOS-

ZIRCON: Zr  $[Si O_4]$

$$D_E = -7179,150 \frac{1}{V} + 36,80$$

ESFENA:  $Ca_{0,5} Ti_{0,5} [(Si_{0,5} O_2) | (O, OH, F)_{0,5}]$

$$D_E = -5195,289 \frac{1}{V} + 22,80$$

ANDALUTICA: Al  $[(Si_{0,5} O_2) | O_{0,5}]$

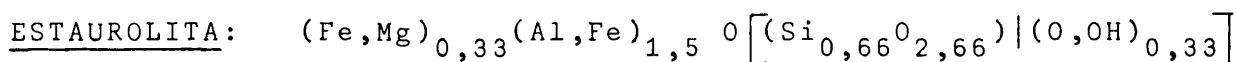
$$D_E = -8233,333 \frac{1}{V} + 28,05$$

CIANITA: Al  $[(Si_{0,5} O_2) | O_{0,5}]$

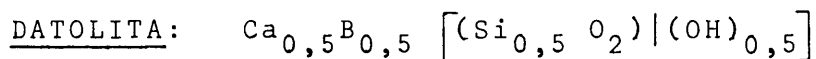
$$D_E = -8433,783 \frac{1}{V} + 37,00$$

TOPACIO:  $Al_{0,66} [(Si_{0,33} O_{1,33}) | (OH, F)_{0,66}]$

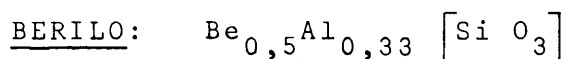
$$D_E = -2673,310 \frac{1}{V} + 26,60$$



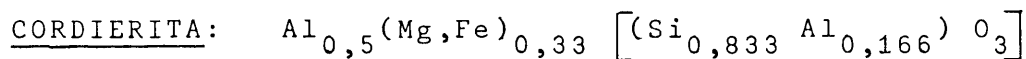
$$D_E = -6104,710 \frac{1}{V} + 31,60$$



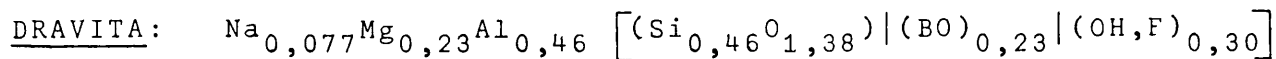
$$D_E = -3586,631 \frac{1}{V} + 19,60$$



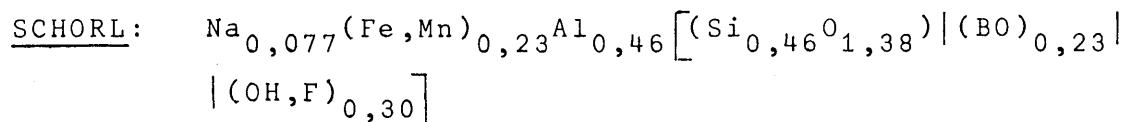
$$D_E = -5180,743 \frac{1}{V} + 26,20$$



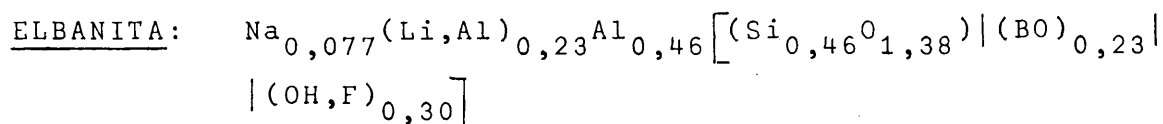
$$D_E = -4769,498 \frac{1}{V} + 16,20$$



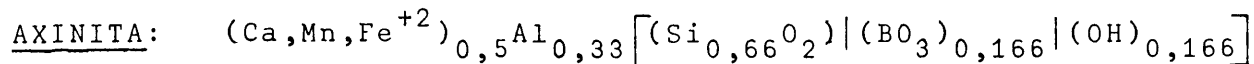
$$D_E = -3641,219 \frac{1}{V} + 24,90$$



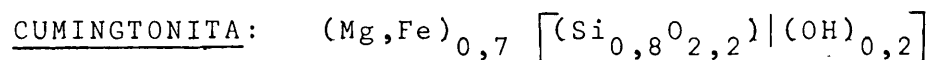
$$D_E = -3635,555 \frac{1}{V} + 24,10$$



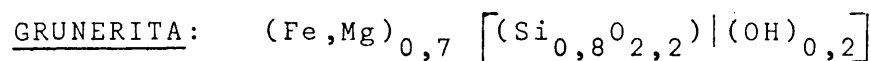
$$D_E = -3845,945 \frac{1}{V} + 27,50$$



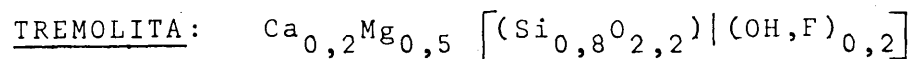
$$D_E = -4161,560 \frac{1}{V} + 23,10$$



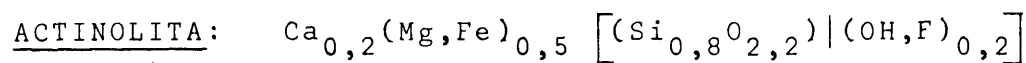
$$D_E = -3696,712 \frac{1}{V} + 19,90$$



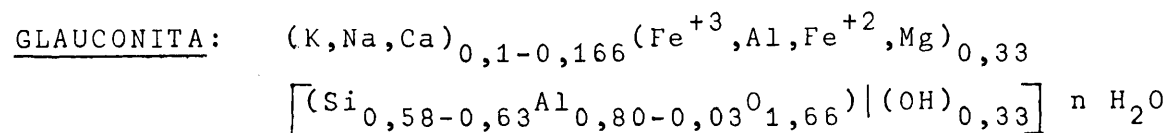
$$D_E = -3666,298 \frac{1}{V} + 19,10$$



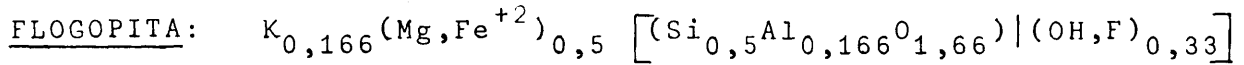
$$D_E = -3747,010 \frac{1}{V} + 20,90$$



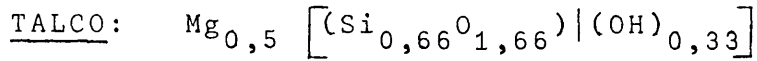
$$D_E = -3638,397 \frac{1}{V} + 18,80$$



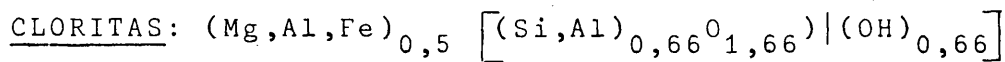
$$D_E = -2842,807 \frac{1}{V} + 9,95$$



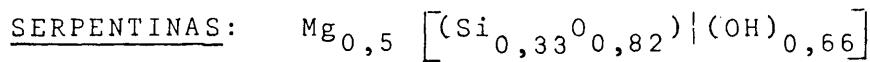
$$D_E = -2707,055 \frac{1}{V} + 11,80$$



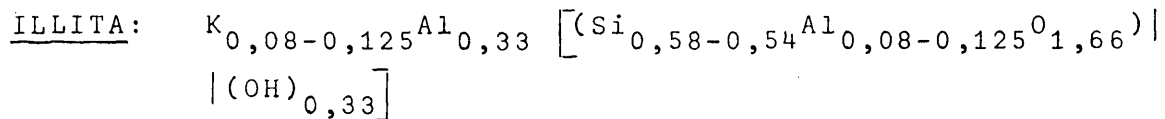
$$D_E = -2893,779 \frac{1}{V} + 14,90$$



$$D_E = -1501,415 \frac{1}{V} + 5,0$$



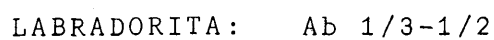
$$D_E = -1568,181 \frac{1}{V} + 5,20$$



$$D_E = -2928,109 \frac{1}{V} + 13,85$$



$$D_E = -3146,075 \frac{1}{V} + 16,20$$



$$D_E = -3230,303 \frac{1}{V} + 17,50$$

ANDESITA: Ab 1/2-2/3

$$D_E = -3293,686 \frac{1}{V} + 18,40$$

PETALITA: Li<sub>0,20</sub> [(Al<sub>0,20</sub>Si<sub>0,80</sub>)<sub>2</sub>O<sub>2</sub>]

$$D_E = -1958,670 \frac{1}{V} + 20,05$$

SODALITA: Na<sub>0,57</sub> [(Al<sub>0,428</sub>Si<sub>0,428</sub>)<sub>1,7</sub>Cl<sub>0,142</sub>]

$$D_E = -2348,414 \frac{1}{V} + 4,40$$

HELVITA: Mn<sub>0,57</sub> [Be<sub>0,42</sub>Si<sub>0,42</sub>O<sub>1,71</sub>S<sub>0,14</sub>]

$$D_E = -5124,637 \frac{1}{V} + 9,80$$

DANALITA: Fe<sub>0,57</sub> [Be<sub>0,42</sub>Si<sub>0,42</sub>O<sub>1,71</sub>S<sub>0,14</sub>]

$$D_E = -5136,320 \frac{1}{V} + 10,80$$

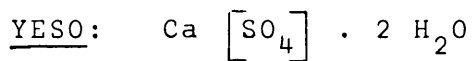
ESCAPOLITAS: (Na,Ca,K)<sub>0,30</sub> [Al<sub>0,23</sub>(Al,Si)<sub>0,23</sub>Si<sub>0,46</sub>O<sub>1,84</sub> | (Cl,F,OH,CO<sub>3</sub>,SO<sub>4</sub>)<sub>0,07</sub>]

$$D_E = -3251,036 \frac{1}{V} + 16,60$$

ANALCIMA: Na<sub>0,33</sub> [Al<sub>0,33</sub>Si<sub>0,66</sub>O<sub>2</sub>] · H<sub>2</sub>O

$$D_E = -3160,370 \frac{1}{V} + 10,0$$

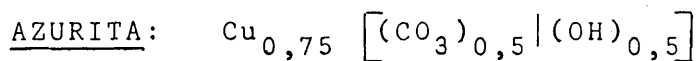
-SULFATOS-



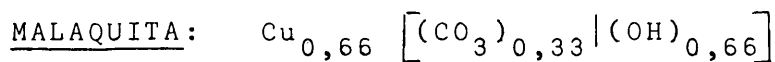
$$D_E = -1158,287 \frac{1}{V} + 5,50$$

-----

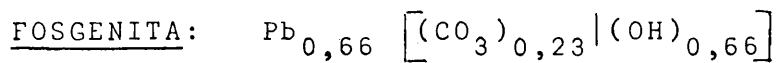
-CARBONATOS-



$$D_E = -985,168 \frac{1}{V} + 18,25$$



$$D_E = -875,983 \frac{1}{V} + 19,90$$



$$D_E = -661,660 \frac{1}{V} + 8,60$$

-----





### XIII. DISCUSION DE LOS RESULTADOS.

#### XIII.1. PROCESOS Y TRANSFORMACIONES GEOLOGICAS.

De acuerdo con la posible transferencia de cargas termodinámicas, se suelen considerar tres tipos de regímenes en los sistemas naturales:

- Régimen de equilibrio, cuando no existen flujos a través de la superficie limitante de los sistemas.
- Régimen permanente, cuando existen flujos, pero el número de cargas que entran en el sistema es igual al número de cargas que salen.
- Régimen no permanente, cuando el flujo de cargas se modifica en función del tiempo de modo que su número aumenta o disminuye en el sistema.

Dada la continua evolución del Universo, todos los procesos naturales deben encontrarse en régimen no permanente, es decir, su evolución depende del tiempo. Sin embargo, las unidades geológicas, rocas y minerales, se comportan como si estuvieran en equilibrio. Esto es debido a que el régimen de equilibrio mineralógico no se establece para la totalidad de las cargas, sino sólo para algunas de ellas. Así, por ejemplo, un mineral puede estar sometido a un flujo de cargas eléctricas sin que se perturbe su equilibrio, o una arenisca puede soportar un flujo de agua. A los componentes, o cargas químicas, que pueden entrar o salir del sistema sin perturbar el equilibrio alcanzado, se les suele denominar componentes móviles, mientras a los que no pueden salir del sistema sin modificar su régimen de equilibrio se les denomina componentes inertes. Componente inerte sería la sílice o la alúmina en un sistema metamórfico, y componente móvil, el agua, el  $\text{CO}_2$  y el  $\text{O}_2$ . Estos componentes móviles regulados por el medio externo son factores de equilibrio, en el sentido de poder desplazarlo cuando en el sistema se puedan formar fases con-

teniendo componentes móviles. En el caso anterior, el agua puede desplazar el equilibrio si los minerales contienen agua o  $(OH^-)$  en su estructura.

Experimentalmente se ha comprobado que cualquier flujo va acompañado por un aumento en la entropía, debido a la habilitación de cargas térmicas en todo movimiento, cuyo número será proporcional al flujo de cargas. Por lo que podemos escribir:

$$dS_d = - \frac{1}{T} dP_i \cdot dE_i = - \frac{dQ'}{T} \quad (60)$$

donde:

$S_d$ : representa la entropía liberada en el proceso, o número de cargas térmicas habilitadas por la fracción térmica del flujo.

$dP_i$ : la variación del parámetro intensivo causante del flujo que se modifica durante el proceso.

$dE_i$ : la variación del parámetro extensivo, que determina el número de cargas transferidas.

$dQ'$ : la modificación de calor del sistema, calor incompensado o disipado que no se puede recuperar al invertir el proceso.

$T$  : la temperatura absoluta a la cual se realiza el proceso.

Cuando no existen flujos entre el sistema y el medio externo, el sistema sigue evolucionando, como un sistema aislado, es decir, se producen en su interior los flujos de cargas necesarios hasta conseguir la homogeneización del sistema. La variación de entropía del sistema puede expresarse mediante la ecuación:

$$dS_e = \frac{1}{T} P_i \cdot dE_i = \frac{dQ}{T} \quad (61)$$

en este caso el parámetro intensivo permanece constante en el ámbito del sistema.

Esto conduce a considerar dos tipos de procesos naturales:

- Procesos irreversibles, cuando existe disipación de calor y se producen flujos para anular los gradientes de los parámetros intensivos, lo que implica que al final del proceso la entropía habrá alcanzado un valor máximo, es decir:

$$d S_d = 0 \quad , \quad S_d = \text{máximo}$$

- Procesos reversibles, se realizan en condiciones de equilibrio y se producen manteniendo las relaciones paramétricas constantes, es decir, sólo se modifican los parámetros extensivos permitidos por los grados de libertad del sistema. Esto es, el sistema tiende a disminuir su energía interna reestructurándose interiormente hasta conseguir un mínimo energético, al final del proceso reversible se cumplirá que

$$d S_e = 0 \quad , \quad S_e = \text{máximo}$$

lo que equivale a  $U_s = \text{mínimo}$  ( $U = \text{energía interna del sistema}$ ).

La producción de entropía ( $S_d$ ) es por tanto un hecho macroscópico entre el sistema y su entorno, mientras que la cesión de entropía ( $S_e$ ) es un hecho microscópico. Por tanto, para valores constantes de los parámetros termodinámicos externos, los sistemas siguen evolucionando hacia la forma microscópica más estable; es decir, tienden hacia el reposo microscópico reteniendo el mínimo de cargas entrópicas.

El valor de la entropía de cualquier proceso reversible se puede evaluar por la conocida ecuación:

$$S_e = S_c + \int_0^T \frac{C_p}{T} dT \quad (62)$$

donde  $S_c$  representa la constante de integración conocida como entropía de configuración, o valor mínimo de la expresión de Boltzmann

$$S = k \ln W$$

siendo  $W$  la probabilidad de que las partículas, átomos, iones o moléculas de los minerales, estén en los nudos reticulares, y  $K$  la constante de Boltzmann.

Según esto en el estado de reposo microscópico (forma estable del equilibrio) los sistemas habrán adquirido una estructuración interna definida por la energía reticular de naturaleza potencial, y una entropía de configuración mínima (habrán cedido el máximo de entropía al medio externo), es decir, se habrá transformado en un sólido idealmente perfecto en las proximidades de cero absoluto de temperatura.

De acuerdo con este planteamiento podemos imaginar que la evolución geológica se produce según una secuencia de procesos irreversibles encaminados a la anulación de los gradientes de los parámetros intensivos (temperatura, presión, potencial químico de los componentes móviles), y de transformaciones mineralógicas o procesos reversibles conducentes a conseguir mínimos energéticos de los sistemas, esto es, formar estructuras estables.

### XIII.2. TRANSFORMACIONES MINERALOGICAS.

Como hemos establecido las transformaciones minerales se producen en régimen de equilibrio, prácticamente reversibles y dan lugar a configuraciones estructurales estables.

Las transformaciones están reguladas por los potenciales termodinámicos que definen la parte de la energía de un sistema

que puede modificarse en régimen de equilibrio. Es decir, los trabajos que puede ejecutar un sistema para minimizar su energía interna, trabajos que están condicionados por los grados internos o externos de libertad, entendiendo que el sistema sólo puede modificar los parámetros extensivos cuando ello no implique un cambio en los parámetros intensivos regulados por el medio externo, y que determinan el régimen de equilibrio.

Según veíamos en la introducción, la formación de los minerales estaba determinada por los factores de equilibrio, presión y temperatura del medio externo. Por consiguiente, debemos considerar que las transformaciones minerales están determinadas por el potencial termodinámico isobárico-isotérmico o entalpía libre de Gibbs:

$$G^0 = f(T, P, n_a, \dots, n_e, \mu_f, \dots, \mu_k) = V^0 - TS + PV \quad (63)$$

y como

$$U^0 = U - \sum_{i=f}^k \mu_i n_i \quad \text{y} \quad U = TS - PV + \sum_{i=a}^k \mu_i n_i$$

$$G^0 = \sum_a^e \mu_i n_i \quad (64)$$

Es decir, en el punto de equilibrio  $P = \text{const}$ ,  $T = \text{const}$ , el potencial termodinámico sólo puede minimizarse ejecutando un trabajo químico.

En las proximidades del equilibrio podemos imaginar una modificación infinitesimal del potencial termodinámico para analizar en qué sentido tiende a desplazarse, así tenemos que:

$$dG^0 = -S dT + V dP + \mu_a dn_a + \dots + n_e dn_e - n_f d\mu_f - \dots - n_k d\mu_k - dQ' \quad (65)$$

en el equilibrio se cumplirá que  $dG^0 = 0$  y  $G^0 = \text{mínimo}$ . El equi-

librio entre dos estados I y II de un sistema se conseguirá cuando

$$d(G^I - G^{II}) = 0 \quad (66)$$

y se desarrollará el estado que tenga menor G de modo que el equilibrio se desplazará en función del  $\Delta G$  de la transformación y serán espontáneas las transformaciones que cedan trabajo al medio externo cuando éste se encuentre a un nivel energético inferior; mientras que si éste está a un nivel superior, se invertirá el sentido del proceso, pues el medio externo tenderá a ceder trabajo al sistema y éste se transformará absorbiendo el trabajo térmico de su entorno.

#### XIII.2.1. Significado de las asociaciones (rectas $\mu = \text{const}$ ).

Al establecer las rectas de equilibrio mineralógico se supuso que las especies minerales estaban formadas por sólo dos componentes, anión y catión. En este sentido se consideraron tres planteamientos: que fueran componentes móviles, en los sistemas, la parte aniónica, la parte catiónica, o ninguno de los dos.

a) Equivalente aniónico: Consideramos el número de aniones de la molécula igual a la unidad. Se supone a éstos como componentes inertes, con fracción molar constante, por consiguiente el equilibrio se conseguirá cuando:

$$\mu_{\text{cat}}^I = \mu_{\text{cat}}^{II} \quad (67)$$

Es decir, según la ecuación (65) el equilibrio entre los estados I y II se cumplirá cuando:

$$d(\Delta G) = -(S_I - S_{II}) dT + (V_I - V_{II}) dP + \sum (\mu_a^I - \mu_a^{II}) dn_a - \sum (n_c^I - n_c^{II}) d\mu_c - dQ' = 0 \quad (68)$$



como hemos considerado que los aniones son los componentes inertes

$$(\mu_a^I - \mu_a^{II}) = 0$$

Por tanto:

$$d(\Delta G) = -\Delta S dT + \Delta V dP - \Delta n_c d\mu_c = 0 \quad (c) \quad (69)$$

Pero hemos de tener en cuenta que estamos considerando transformaciones a presión y temperaturas constantes, y en estas condiciones  $dP = 0$  y  $dT = 0$

$$d(\Delta G) = - \Sigma \Delta n_c d\mu_c = 0 \quad (70)$$

Luego la condición de equilibrio será:

$$\Sigma \Delta n_c d\mu_c = 0 \quad (71)$$

b) En el equivalente cationico, la parte catiónica se comporta como componente inerte, de modo que el equilibrio se alcanza cuando

$$\mu_{ani}^I = \mu_{ani}^{II} \quad (72)$$

en este caso se consideró como parte aniónica el ión oxígeno, o el radical aniónico o el ión complejo, de forma que el equilibrio se establecerá así:

$$\Delta_n^I \text{Oxig} d\mu_{\text{Oxig}}^I + \Delta_n^{II} \text{Oxig} d\mu_{\text{Oxig}}^{II} + \dots = 0 \quad (73)$$

$$\Delta_n^I (\text{SiAlO}_n) d\mu_{(\text{SiAlO}_n)}^I + \Delta_n^{II} (\text{SiAlO}_n) d\mu_{(\text{SiAlO}_n)}^{II} + \dots = 0 \quad (74)$$

$$\Delta_n^I (\text{SO}_4) d\mu_{(\text{SO}_4)}^I + \Delta_n^{II} (\text{SO}_4) d\mu_{(\text{SO}_4)}^{II} + \dots = 0 \quad (75)$$

c) Para el cálculo del equivalente iónico, se da igual énfasis a la parte aniónica y a la catiónica, de modo que al referir las fórmulas moleculares a iones se supone que anión y catión se comportan como componentes inertes, de modo que el sistema es cerrado.

Al establecer las rectas que agrupan a los minerales con el mismo potencial químico, no se encontraron diferencias fundamentales como puede verse en los gráficos adjuntos, lo que parece indicar que dentro de la agrupación o recta de equilibrio los minerales se comportan como fases de un sistema cerrado, cualquiera que sea el equivalente considerado.

### XIII.2.2. Equilibrio en las asociaciones minerales.

Según hemos establecido, el equilibrio dentro de las asociaciones estará regulado por la entalpía libre de Gibbs, donde el balance energético se puede evaluar como:

$$\Delta G_R = G^I - G^{II} \quad (76)$$

En el equilibrio entre I y II se cumplirá que  $\Delta G_R = 0$ , de manera que podemos escribir en las condiciones de equilibrio

$$G^I - G^{II} = 0 = (E_r^I - T S^I) + PV^I - [(E_r^{II} - TS^{II}) + PV^{II}] \quad (77)$$

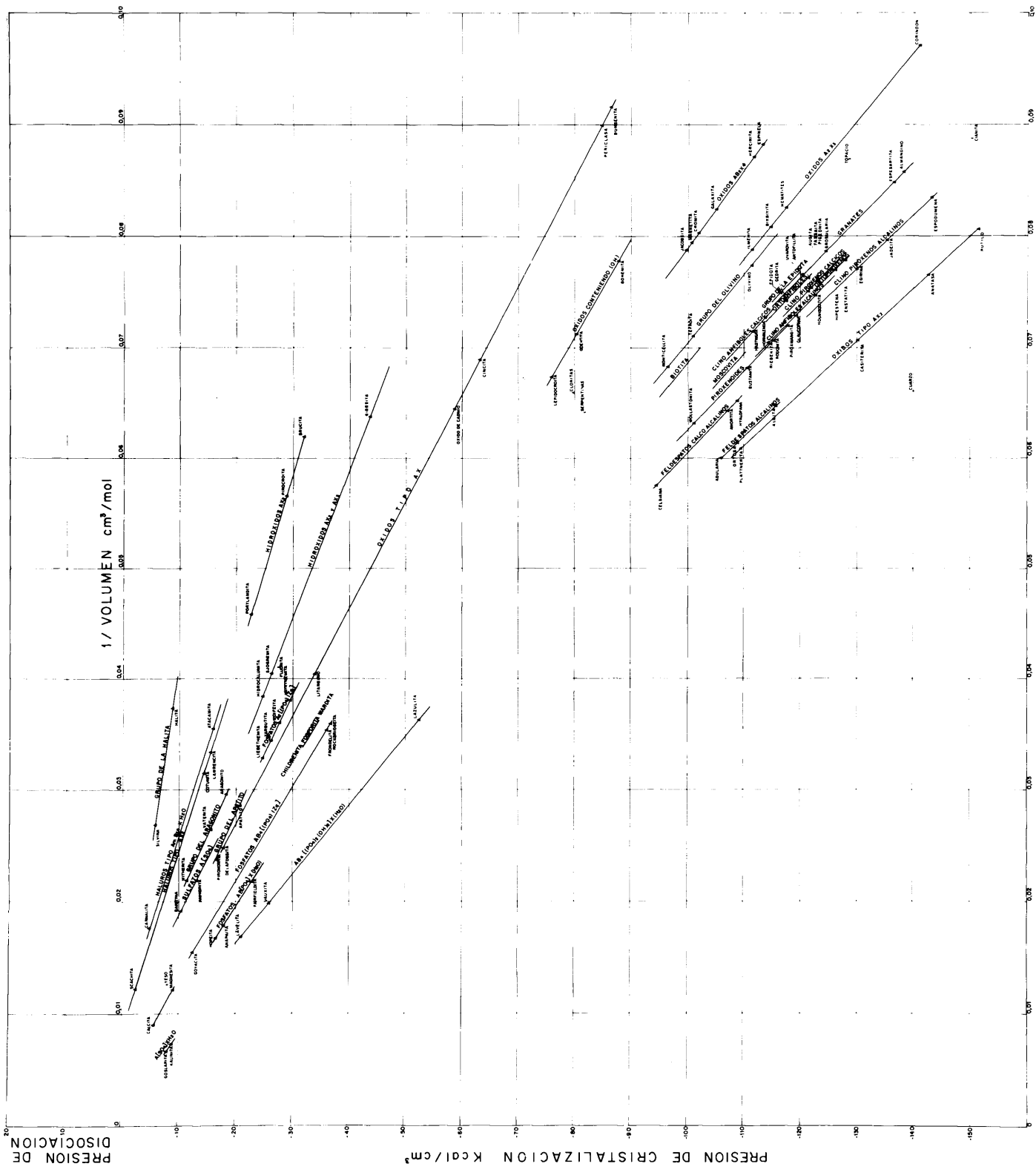
Siempre que fijemos los valores de T y P.

Si suponemos una transformación en la que prácticamente,  $V^I = V^{II}$ , la ecuación anterior puede quedar de la forma

$$F^I - F^{II} = 0 \quad (78)$$

donde F representa la energía libre de Helmholtz, que puede eva-













luarse por:

$$F^I = E_r^I - T S_c + \int_0^T \frac{C_P^I}{T} dT \quad (79)$$

En condiciones de temperatura ambiente (298°C), se puede considerar que la capacidad calorífica de los metales es de 6,4 cal. grad<sup>-1</sup> átomo gramo<sup>-1</sup>, según la ley de Dulong y Petit, y de 3,8 para el silicio y 4.0 para el oxígeno según la ley de Neuman-Kopp.

Por consiguiente, la capacidad calorífica de los minerales se puede evaluar mediante la suma de las capacidades caloríficas de los iones que interviene en la fórmula cristaloquímica. De modo que para cada equivalente considerado, prácticamente todos los minerales tiene la misma capacidad calorífica. Podemos por tanto considerar que el equilibrio está regulado por

$$E_r^I - T S_c = E_r^{II} - T S_c \quad (80)$$

y si los dos minerales I y II tiene la misma estructura, el equilibrio dependerá solamente de:

$$E_r^I = E_r^{II} \quad (81)$$

es decir, del valor que adquiera la energía reticular en los dos minerales.

En una mezcla binaria de los minerales A y B, si se forma una fase AB, puede ocurrir, que para una fracción molar de 0,5

$$E_{AB} < \frac{E_A + E_B}{2}, \quad E_{AB} = \frac{E_A + E_B}{2}, \quad E_{AB} > \frac{E_A + E_B}{2}$$

En el primer caso será más estable la solución sólida AB, que la mezcla física, mientras que para el tercero será más estable la mezcla que la solución sólida. En cualquier caso, será necesario que la estructura del mineral A sea igual a la del mineral B, pues, en caso contrario, no pueden existir soluciones

sólidas. Al mismo tiempo serán más estables las soluciones sólidas donde predomine con mucho uno de los minerales, pues las imperfecciones que esta solución implica, aumentan considerablemente la entropía de configuración.

Dado que las rectas de equilibrio se han conseguido para minerales con estructuras cristal químicas análogas, cabe esperar que los minerales integrantes de cada asociación de equilibrio formen soluciones sólidas, lo que supone que cualquier punto de las rectas representa un mineral; sin embargo, la experiencia sugiere que no todos los puntos tienen igual probabilidad, ello es debido, a la forma de los mínimos y máximos de la energía, en función de la fracción molar de las mezclas binarias y de las modificaciones estructurales dentro de cada asociación mineral.

### XIII.2.3. Características cristal químicas de las asociaciones minerales.

De acuerdo con este planteamiento, las rectas de equilibrio obtenidas para las diferentes asociaciones minerales pueden estar potencialmente formadas por soluciones sólidas de las diferentes especies minerales pertenecientes a cada asociación. Sin embargo, las rectas de equilibrio calculadas no siempre contienen soluciones sólidas, lo que plantea la necesidad de analizar el significado cristal químico de las asociaciones minerales obtenidas estadísticamente.

La característica fundamental de las asociaciones obtenidas, es la semejanza en la composición química de las especies minerales que las constituyen. Es decir, en todas ellas la relación entre la parte aniónica y la parte catiónica permanece constante.

Con un criterio semejante, Doelter estableció el concepto de sinmorfismo. Dos especies minerales son sinmorfas cuando tienen una fórmula química semejante, pero pertenecen a clases cristalinas diferentes. Por tanto, las especies minerales cons-

tituyentes de las asociaciones minerales consideradas son sinmorfas entre sí y, por consiguiente, estas asociaciones constituyen series sinmorfas. Sin embargo, no debemos olvidar que dentro de estas asociaciones hay dos, el grupo de la calcita y el grupo del aragonito, que teniendo fórmulas químicas semejantes se en encuentran en rectas de equilibrio termodinámico distinto, debido a que las especies minerales que constituyen estas dos asociacio nes son polimorfas entre sí.

Hay otro concepto cristaloquímico relacionado con la semejanza entre las especies minerales, el morfotropismo. Según Goldschmidt (1926) morfótropo será todo aquel cambio estructural que se produzca por la variación de la relación de tamaños de las partículas que forman el cristal. Ahora bien, estas sustancias deben ser químicamente semejantes, esto es, deben constituir una serie química uniforme. Como ya hemos indicado, las aso ciaciones minerales estudiadas forman una serie química, por tan to, cumplen una de las condiciones establecidas por el morfotropismo. Pero respecto al cambio estructural, ateniéndonos al concepto de Goldschmidt, no podemos saber hasta dónde el cambio estructural sufrido al producirse una sustitución de tipo diadócido puede considerarse morfótropo. Pero, teniendo en cuenta que el que las especies minerales que forman una asociación puedan representarse sobre una recta, indica que la relación existente entre la energía (que es función de su composición) y el volumen (que es función de su estructura) es constante, podemos dedu cir que las asociaciones minerales estudiadas son realmente series morfótropas, aunque el concepto de morfotropismo que de ellas puede deducirse no sea totalmente análogo al definido por Goldsch midt. Fué Dolter el que estableció las condiciones estructurales para que dos especies minerales puedan considerarse morfótropas. Son morfótropas en sentido estricto, aquellas especies minerales que tienen hábito cristalino idéntico, igual exfoliación, fórmula química semejante, pero ángulo de prisma diferente. Estas especies minerales pueden dar origen a cristales mixtos.

Así, como morfótropas deben considerarse, por ejemplo,

las especies minerales constituyentes del grupo de la goethita y la manganita, en las cuales el ángulo de prisma es respectivamente  $87^{\circ} 07'$  y  $80^{\circ} 20'$ . También son morfótropas las fosterita y la morticellita, ambas rómbicas, cuyo ángulo (120) es  $85^{\circ} 57'$  y  $81^{\circ} 53'$  respectivamente.

Si aplicamos de forma estricta estos conceptos a las asociaciones minerales obtenidas, son morfótropas, en sentido estricto, tan sólo las siguientes:

Clase silicatos: Todas excepto los feldespatos calco-  
-alcalinos.

Clase óxidos : Grupo de las espinelas.

Clase fosfatos: Grupo del apatito.

Clase sulfatos: Sulfatos tipo  $A [SO_4]$  y  $A_2 [(SO_4)_p | Z_q]$

Clase carbonatos: Grupo de la calcita y grupo del aragonito.

Clase haluros : Grupo de la halita.

El resto de las asociaciones minerales no pueden definirse como morfótropas en sentido estricto, ya que las especies minerales que las forman pertenecen a más de una clase cristalina. Pero lo que realmente sucede es que estas asociaciones no morfótropas no forman series continuas, sino que forman series discretas. Es decir, entre las zonas ocupadas en la recta de equilibrio por los límites de estabilidad de las distintas especies minerales, existen espacios vacíos donde no existen especies minerales. Esto puede deberse a que para los volúmenes correspondientes no pueden formarse estructuras que corresponden a un mínimo energético. Por tanto, cada una de estas rectas, representativas de una especie mineral, puede dividirse en varios segmentos, que contendrán una o varias especies minerales morfótropas entre sí, como sucede en la asociación mineral, grupo óxidos conteniendo (OH), goethita y magnetita que forman una serie morfótropa pero que son sinmorfas con la boehmita y lepidocroita.



Es decir, como ya habíamos indicado, existe una buena correspondencia entre el morfotropismo que puede deducirse de las asociaciones minerales obtenidas y el morfotropismo que define la Cristalografía.

Si seguimos intentando establecer relaciones entre el significado de las rectas de equilibrio termodinámico obtenidas y los conceptos de la Cristalografía, debemos estudiar ahora qué semejanza podemos lograr entre ellas y el concepto más restrictivo creado por la cristalografía para definir la semejanza entre especies minerales, el isomorfismo. Según Goldschmidt para que dos especies minerales sean isomórficas es necesario: a) semejanza de forma exterior; b) igualdad de tipo estructural; c) compatibilidad en los tamaños de las partículas constituyentes. Para Goldschmidt, el isomorfismo debe considerarse posible cuando la variación del tamaño de los radios no exceda del 15% del valor medio. Esta afirmación, aunque cierta en general, viene corregida por determinadas circunstancias que limitan o amplían los límites de estabilidad. La influencia del tamaño a veces no es tan decisiva como, por ejemplo, en la serie del apatito definida por McConnell (1938).

De los tres factores mencionados, es el tipo estructural de la sustancia el de mayor importancia. Esto se debe a que no todas las estructuras poseen los mismos límites de estabilidad, sino que unas son solamente posibles para relaciones de radios muy determinados mientras que otras las admiten mucho más amplias.

Si aplicamos el concepto de isomorfismo definido por la cristalografía a las asociaciones minerales obtenidas, al ser este concepto aún más restrictivo que el de morfotropismo en sentido estricto, el número de asociaciones que lo cumple será menor.

Podemos distinguir dos tipos de isomorfismo: A) Isomorfismo a volumen constante. El cambio estructural producido por las sustituciones diadocicas es tan reducido que el volumen de las distintas especies isomórficas es prácticamente constante. Este es el isomorfismo que presenta la serie isomorfa de las plagioclasas



sas (albita - anortita). Este tipo de isomorfismo, por realizarse a volumen constante, no es asimilable a ninguna de las asociaciones minerales obtenidas, ya que los extremos de la serie isomórfica se encuentran en rectas distintas.

B) Isomorfismo a potencial químico constante: El cambio estructural producido por las variaciones en la composición química es más amplio y la relación entre el volumen y la energía permanece constante. Es decir, en este caso, las especies minerales que constituyen la serie isomorfa se sitúan a lo largo de la recta de equilibrio termodinámico, y sus dominios de estabilidad presentan zonas comunes que darán lugar a cristales mixtos. Ejemplo de series isomorfas de este tipo son los granates y las perlititas (serie ortosa - albita).

Por tanto, no todas las asociaciones minerales obtenidas en este trabajo corresponden a series isomorfas definidas por la cristaloquímica.

Sin embargo, si recordamos el concepto de conjuntos isomorfos dado por el álgebra de conjuntos. Dos conjuntos  $C_1$  y  $C_2$  son isomorfos, si se puede establecer una función biunívoca  $f$  entre los puntos que los constituyen, de forma que basta reemplazar cada uno de los puntos de  $C_1$  por los obtenidos al aplicar  $f$  sobre ellos, para pasar a  $C_2$ .

Cada una de las especies minerales contenidas en una asociación es un conjunto, constituido por los distintos análisis que la define, y como estos conjuntos pueden representarse sobre una recta serán isomorfos entre sí. Por tanto, al ser la relación biunívoca ( $f$ ), que nos permite pasar de un conjunto a otro, una recta de equilibrio termodinámico, las asociaciones minerales obtenidas pueden considerarse como termodinámicamente isomorfas, y por consiguiente, como energéticamente isomorfas.

Este isomorfismo energético, al igual que sucedía con el morfotropismo, no puede asimilarse totalmente con el isomorfismo cristaloquímico.

### XIII.3. ESTABILIDAD DE LOS MINERALES.

Sabemos que las transformaciones mineralógicas están reguladas por los potenciales termodinámicos de los sistemas geológicos, de manera que, en cada situación, serán estables las fases minerales capaces de minimizar este potencial termodinámico. Las transformaciones se realizarán en el sentido para el cual el incremento del potencial termodinámico sea negativo, y los minerales producto de esta transformación serán más estables cuanto menor sea este incremento.

#### XIII.3.1. Estabilidad en función de la temperatura.

Consideremos un sistema en el que se puede verificar la transformación del mineral  $\alpha$  en mineral  $\beta$ . Si el sistema no está térmicamente aislado, la transformación se efectuará por vía isotérmica, es decir, estará regulada por la temperatura del medio externo. Por tanto, el sistema no puede efectuar ningún cambio reversible que implique modificar la temperatura, pues ello supondría perder la condición de equilibrio.

Según hemos visto en (80), las transformaciones están poco reguladas por la energía térmica. Por lo tanto podemos suponer que están determinadas por el potencial termodinámico isotérmico-isocórico, o energía libre de Helmholtz:  $F = U - TS$ .

Para la transformación  $\alpha \rightarrow \beta$  tendremos

$$(F^\alpha - F^\beta) = [U^\alpha - U^\beta] - T[S^\alpha - S^\beta] \quad (82)$$

$$\Delta F = \Delta U - T \Delta S \quad (83)$$

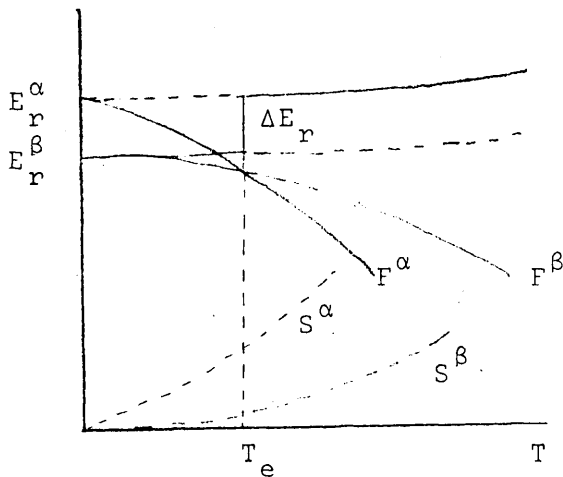
$$\Delta F = \Delta(-E_r) - T \Delta S \quad (84)$$

de forma que la transformación  $\alpha \rightarrow \beta$  será espontánea si  $\Delta F$  es negativo, lo que ocurrirá siempre que el incremento de la energía reticular,  $\Delta(-E_r)$ , sea negativo y el incremento de entropía

$\Delta S$ , sea positivo. Sin embargo, en un proceso de cristalización, el incremento de entropía es negativo pues suponemos que pasa de una estructura arbitraria en  $\alpha$  a una estructura ordenada en el mineral  $\beta$ . A temperaturas bajas el término  $T \Delta S$  será menor que  $\Delta(-E_r)$ , por lo que el incremento de la energía libre  $\Delta F$  será negativo, y se formará el mineral  $\beta$ .

Al aumentar la temperatura,  $T \Delta S$  llegará a ser igual o mayor que  $\Delta(-E_r)$  por lo que el incremento de la energía libre,  $\Delta F$ , será positivo. En este caso se invertirá el sentido de la transformación, pues será mas estable el mineral  $\alpha$ , estructura menos ordenada, o la fase fluida correspondiente. El equilibrio

entre  $\alpha$  y  $\beta$  se alcanza, según se indica en el gráfico adjunto, cuando  $F^\alpha = F^\beta$  lo que ocurre a la temperatura de transición  $T_e$ .



Si en las condiciones iniciales  $F^\alpha > F^\beta$ , al sobrepasar la temperatura de transición ocurrirá que  $F^\alpha < F^\beta$  y será más estable el mineral  $\alpha$  que tiene mayor energía interna.

Por tanto podemos considerar que el orden de estabilidad de los minerales en función de la temperatura, es el mismo que el de sus energías reticulares, de modo, que a temperaturas elevadas sólo son estables los minerales de menor energía reticular (mayor en valor absoluto), dado que hemos supuesto los minerales tienen aproximadamente la misma entropía mol equivalente.

En la tabla VIII se indica el orden de estabilidad en función de la energía reticular, según el equivalente iónico, del mineral mas representativo de cada una de las asociaciones minerales obtenidos.

TABLA VIII

Mineral	Er Kcal/mol	Mineral	Er Kcal/mol
Rutilo	-1.876,41	Goslarita	-1.182,68
Ortosa	-1.770,26	Lepidocroita	-1.051,64
Egirina	-1.713,45	Hopeita	-955,16
Hiperstena	-1.672,60	Periclasa	-941,12
Anortita	-1.669,24	Goyacita	-791,31
Piroxmangita	-1.631,86	Tarbutita	-755,33
Glaucofana	-1.630,69	Jarosita	-753,55
Augita	-1.612,89	Gibsita	-673,37
Piropo	-1.589,31	Apatito	-724,22
Antofillita	-1.589,22	Calcita	-625,14
Moscovita	-1.561,80	Aragonito	-619,34
Epidota	-1.555,55	Baritina	-549,21
Hornblenda	-1.541,10	Pyrocroita	-505,29
Corindón	-1.455,63	Cotunita	-350,36
Biotita	-1.444,30	Carnalita	-272,88
Magnetita	-1.264,27	Halita	-234,67
Vauxita	-1.247,93		

XIII.3.2. Estabilidad en función del potencial químico.

Análogamente, podemos considerar que la transformación se realiza para valores constantes de la presión y la temperatura, de forma que están determinadas por el potencial termodinámico isobárico-isotérmico o entalpía libre de Gibbs, G. La transformación será espontánea cuando:

$$(G^I - G^{II}) = -\Delta G \quad (85)$$

y como

$$G = U - T S + pV \quad (86)$$

y la energía interna es igual a

$$U = T S - pV + \sum_a^k \mu_i n_i \quad (87)$$

tendremos que

$$G = \sum_a^e \mu_i n_i \quad (88)$$

de manera que

$$G = \left( \sum_a^e \mu_i n_i \right)^I - \left( \sum_a^e \mu_i n_i \right)^{II} \quad (89)$$

En consecuencia serán más estables los minerales que ten gan menor energía química  $\left( \sum_a^e \mu_i n_i \right)$  y puesto que hemos considera- do, en la estimación de la energía reticular, a los minerales co- mo sistemas aislados con  $n_i$  constante e igual a la unidad. Pode- mos escribir que

$$\mu_i = \bar{G}_i \quad \text{puesto que}$$

puesto que

$$\mu_i = \left( \frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T,P}$$

En condiciones arbitrarias podemos aceptar que la estabi lidad de las especies minerales se puede establecer según el va- lor del potencial químico o energía libre molar de los minerales, que en las condiciones de cálculo prácticamente coincide con el orden de estabilidad establecido de acuerdo con los valores de la energía reticular, según puede leerse en el gráfico correspondiente a los distintos equivalentes.

En la tabla IX se indica el orden de estabilidad, en fun ción del potencial químico, calculado para moléculas iónicas equi- valentes de los mismos minerales utilizados en el caso de la energía reticular.

TABLA IX

Mineral	Potencial químico	Mineral	Potencial químico
Rutilo	-2.137,68	Magnetita	-1.463,99
Egirina	-2.096,11	Goslarita	-1.461,73
Ortosa	-2.067,45	Jarosita	-1.353,202
Hiperstena	-1.967,00	Hopeita	-1.235,84
Glaucofana	-1.938,19	Lepidocroita	-1.220,53
Augita	-1.923,71	Goyacita	-1.170,50
Piropo	-1.917,28	Calcita	-1.087,05
Piroxmangita	-1.890,83	Periclasa	-1.028,95
Anortita	-1.871,183	Baritina	-997,30
Antofillita	-1.867,87	Tarbutita	-946,547
Epidota	-1.841,63	Aragonito	-891,87
Moscovita	-1.790,07	Apatito	-881,29
Hornblenda	-1.776,93	Gibsita	-721,62
Corindón	-1.647,48	Carnalita	-623,80
Olivino	-1.630,96	Pirocroita	-551,67
Biotita	-1.617,459	Cotunita	-471,23
Vauxita	-1.535,31	Halita	-291,935

XIII.3.3. Estabilidad en función de la presión y el volumen.

Si ordenamos los minerales o asociaciones de igual potencial químico según el equivalente molar iónico, fácilmente comprobaremos que no existe correspondencia con las ordenaciones mineralógicas efectuadas a partir de los análisis de las facies y grados de los procesos metamórficos.

Igualmente destacan, las diferentes ordenaciones según el equivalente molar considerado. Esta aparente contradicción es debida a que en la estabilidad no sólo interviene la energía reticular, pues como indicamos al iniciar el Trabajo, la energía

reticular es función del volumen molar y la relación entre ambas magnitudes, o densidad de energía, expresa la presión de cristalización. Es decir, la estabilidad ha de depender del volumen y de la presión, magnitudes que pueden estar determinadas por el medio externo.

Por tanto, las transformaciones minerales pueden realizarse por vía isocórica o por vía isobárica (corresponden a los procesos metamórficos y metasomáticos de la geología). Los potenciales termodinámicos que determinan el desplazamiento del equilibrio será respectivamente:

$$d(\Delta F) = -\Delta S dT - \Delta P dV + \sum_a^e \Delta \mu_i dn_i - \sum_f^k \Delta n_m d\mu_m - dQ' = 0 \quad (90)$$

$$d(\Delta G) = -\Delta S dT + \Delta V dP + \sum_a^e \Delta \mu_i dn_i - \sum_f^k \Delta n_m d\mu_m - dQ' = 0 \quad (91)$$

Para estos potenciales termodinámicos, el comportamiento térmico y químico de las fases minerales es idéntico, y serán má estables las fases que consigan disminuir más el potencial termodinámico (fases de mayor entropía y fases con componentes inertes de menor potencial químico y móviles con mayor fracción molar). Sin embargo, si consideramos el comportamiento mecánico (compresión - dilatación), cuando el sistema se transforme a volumen constante, serán más estables los minerales que tengan mayor presión de cristalización, esto es, mayor densidad de energía; mientras que cuando lo haga a presión constante, serán más estables los minerales con menor volumen reticular.

En las tablas X y XI se indican los órdenes de estabilidad de los minerales según el equivalente iónico, en función de su densidad de energía y su volumen reticular.





TABLA X

Mineral	D.Energía Kcal/cm <sup>3</sup>	Mineral	D.Energía Kcal/cm <sup>3</sup>
Rutilo	-151,08	Periclasa	-84,71
Corindón	-141,31	Lepidocroita	-75,01
Piropo	-137,01	Gibsita	-42,89
Egirina	-132,62	Jarosita	-29,389
Hiperstena	-128,86	Pirocroita	-27,84
Augita	-121,27	Vauxita	-26,30
Antofillita	-120,67	Tarbutita	-26,10
Glaucofana	-118,51	Apatito	-20,71
Piroxmangita	-117,35	Aragonito	-18,34
Epidota	-116,26	Hopeita	-16,11
Hornblenda	-113,40	Cotunita	-14,74
Anortita	-111,88	Goyacita	-12,24
Olivino	-110,97	Baritina	-10,57
Ortosa	-108,84	Halita	-8,75
Moscovita	-104,96	Goslarita	-7,99
Magnetita	-100,26	Calcita	-5,68
Biotita	-94,03	Carnalita	-4,74

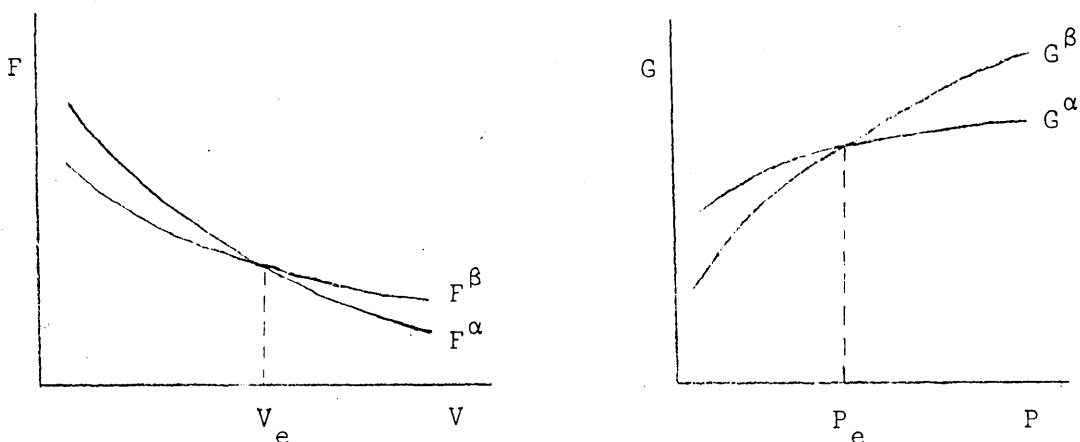
TABLA XI

Mineral	V. reticular cm <sup>3</sup>	Mineral	V. reticular cm <sup>3</sup>
Corindón	10,30	Biotita	15,36
Periclasa	11,11	Gibsita	15,70
Piropo	11,60	Pirocroita	18,15
Rutilo	12,42	Cotunita	23,77
Magnetita	12,61	Jarosita	25,64
Olivino	12,91	Halita	26,82
Egirina	12,92	Tarbutita	28,94
Hiperstena	12,98	Aragonito	33,77
Antofillita	13,17	Apatito	34,97
Augita	13,30	Vauxita	47,44
Epidota	13,38	Baritina	51,96
Hornblenda	13,59	Carnalita	57,57
Glaucofana	13,76	Hopeita	59,29
Piroxmangita	13,90	Goyacita	64,65
Lepidocroita	14,02	Calcita	110,06
Moscovita	14,88	Goslarita	148,02
Anortita	14,92		

Si analizamos las variaciones de los potenciales termodinámicos

$$\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T, n_i, \mu_m} = -P \quad \text{y} \quad \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_{T, n_i, \mu_m} = V$$

estas se producirán como expresan los gráficos adjuntos.



De manera que en los procesos metasomáticos, a volúmenes pequeños del sistema, sólo pueden formarse los minerales cuya densidad de energía sobrepase un cierto valor. Los minerales se ordenarán de acuerdo con su densidad de energía, pero como estos minerales se forman a partir de los componentes móviles y sólo hay una fase estable, las zonas metasomáticas serán monominerales y se ordenarán según frentes de difusión análogos a los de la cromatografía en orden a su presión de cristalización; los minerales de pequeña densidad de energía, sólo podrán formarse en volúmenes cerrados amplios y podrán ser reemplazados por minerales de mayor presión de cristalización.

En los procesos isobáricos, a medida que aumenta la presión, sólo pueden formarse los minerales cuyo volumen reticular sea menor al exigido por la presión de transición. De manera que en los procesos de metamorfismo dinámico, la estabilidad de los minerales está determinada por el volumen reticular y serán más estables los de menor volumen.

Por tanto, en condiciones mecánicas arbitrarias, podemos esperar que la estabilidad de los minerales sea directamente proporcional al valor absoluto de la densidad de energía reticular e inversamente al volumen reticular. De manera que:

$$\text{Estabilidad} = \frac{|D_E|}{V}$$

pero como  $|D_E| = \frac{|E_r|}{V}$

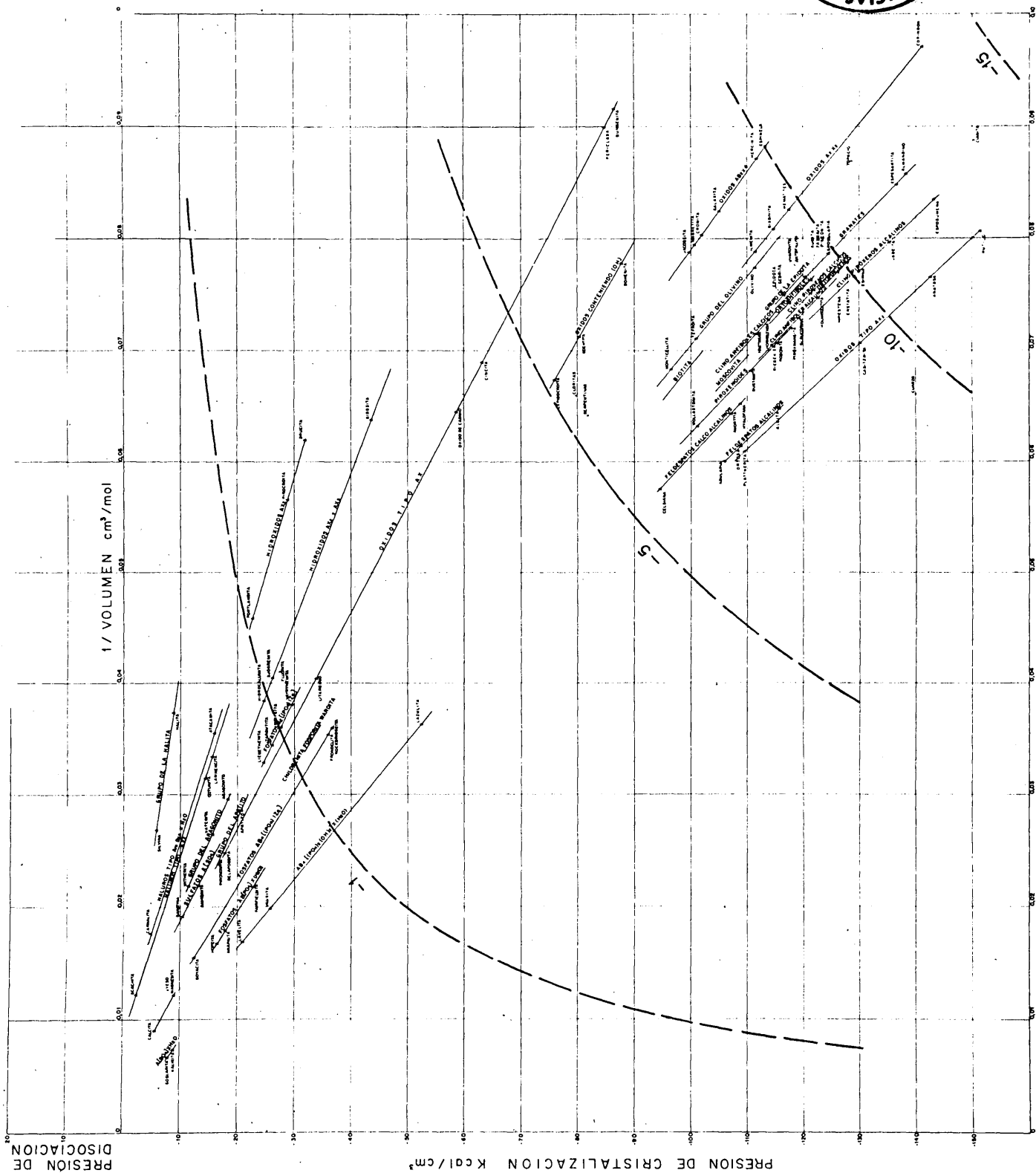
$$\text{Estabilidad} = \frac{|E_r|}{V^2} \quad (92)$$

es decir, la estabilidad de los minerales es proporcional al valor absoluto de la energía reticular e inversamente proporcional al cuadrado del volumen molar, como puede leerse en el gráfico adjunto, en el cual se han presentado las curvas  $-E_r/V^2$  para los valores de -1, -5, -10, -15.

En la tabla XII se consignan algunos valores a modo de ejemplo, los datos están expresados en equivalente iónico.

TABLA XII

Mineral	$E_r/V_r^2$	Mineral	$E_r/V_r^2$
Espodumena	12,308	Glaucofana	8,539
Rutilo	12,250	Hornblenda	8,270
Espinela	9,963	Ilmenita	8,197
Hiperstena	9,668	Periclasa	7,525
Grosularia	9,670	Anortita	7,172
Augita	9,116	Ortosa	6,708
Epidota	8,751	Wollastonita	6,364
Olivino	8,586	Gohetita	5,667
Gedrita	8,586		



#### XIII.4. EVOLUCION DE LOS SISTEMAS GEOLOGICOS.

Es sabido que los sistemas geológicos son abiertos pues no se conocen pantallas para los elementos químicos (iones, átomos, o moléculas). Por tanto podemos esperar que algunos componentes se comporten como componentes perfectamente móviles, es decir, que su entrada o salida de los sistemas naturales no perturbe el equilibrio establecido por los componentes inertes.

##### XIII.4.1. Sistemas abiertos.

Según hemos visto, los minerales están formados por dos componentes: catión y anión (simple, complejo o radical). Es difícil precisar los procesos geológicos que se realizan en función de los potenciales químicos de los componentes móviles. Su análisis obligaría a introducirnos en problemas petrogenéticos que nos son desconocidos. Generalmente se plantea la hipótesis de que el contenido en oxígeno de la litosfera es constante, o que aumenta o disminuye por acciones meteóricas, o por aportes del manto terrestre.

Si el contenido en oxígeno es constante, este componente es inerte y los minerales deben ordenarse según el equivalente aniónico, mientras que si suponemos un contenido de oxígeno variable, se comportará como un componente móvil, por tanto la ordenación de los minerales debe efectuarse según el equivalente molar catiónico, estando la evolución regulada por el potencial químico o la actividad del oxígeno.

Los órdenes de estabilidad según los criterios establecidos pueden leerse en los gráficos correspondientes. En ellos no se observan grandes diferencias en la posición de los minerales en el espacio DE-1/V.

Como ya hemos indicado, los valores obtenidos en cada equivalente para la energía y el volumen varían, ya que se trata de magnitudes extensivas, mientras que la densidad de energía, por

ser una magnitud intensiva, permanece constante, es una función de estado característica de cada mineral.

En las cuatro ordenaciones se observa claramente la separación existente entre las especies minerales constituyentes de las rocas cristalinas, fundamentalmente silicatos y óxidos, y aquellas que forman las rocas sedimentarias, sulfatos, carbonatos, fosfatos, hidróxidos y haluros.

Desde el punto de vista energético, para el equivalente catiónico serán más estables las especies minerales constituyentes de la asociación óxidos  $AX_2$ . Realmente hay una especie mineral, el cuarzo, que presenta una energía menor (mayor en valor absoluto), pero hay que tener en cuenta que el cuarzo ha sido calculado como un óxido  $SiO_2$  y no como un silicato  $Si SiO_4$ , por lo que quizás hayamos cometido un error en la determinación de su energía.

Refiriéndonos únicamente a asociaciones minerales para el equivalente iónico, son los feldespatos alcalinos la asociación más estable, mientras que para el equivalente radical, la asociación más estable es la constituida por los granates.

En el equivalente radical es donde mejor se observa la separación existente entre las especies que forman la clase mineral silicatos y las demás especies minerales. Cuando se analizan procesos de granitización, de frentes metasomáticas de difusión, volcánicos, plutónicos, etc., se suele considerar que los radicales  $[Al_m Si_n O_o]$  ya están formados por procesos anteriores. De igual manera consideramos formados los iones complejos  $[SO_4]$   $[CO_3]$ , etc., en los procesos sedimentarios de diagénesis o de epigénesis.

Estos radicales aniónicos deben comportarse como componentes inertes en los procesos geológicos en los que los cationes actúan como componentes móviles y regulan la formación de las dife-

rentes especies mineralógicas. De forma que cuando existen gradientes de potencial químico se establecen flujos de difusión (o de filtración cuando éstos están disueltos en fluidos acuosos), que se interrumpen bruscamente cuando la concentración de los componentes móviles alcanza el valor exigido para entrar a formar parte de las fases minerales de los sistemas.

Sin embargo, hemos de tener en cuenta que el análisis de la estabilidad mineralógica bajo la hipótesis de fases con componeses móviles no puede efectuarse para el conjunto del sistema, pues, cuando los minerales pasan a formar parte del sistema, se comportan como componentes inertes aunque el contenido molar esté regulado por el medio externo.

#### XIII.4.2. Procesos metamórficos y metasomáticos.

Los procesos metamórficos naturales son difíciles de interpretar mediante un único modelo de evolución, pues aunque generalmente tienen lugar por vía isobárica-isotérmica es frecuente la formación de fenoblastos producidos probablemente en régimen isocórico. El análisis de las facies metamórficas presenta grandes problemas de interpretación a la hora de establecer órdenes de cristalización y de estabilidad de los minerales.

Si aplicamos la regla de las fases a los sistemas naturales encontramos que en régimen metamórfico, isobárico-isotérmico, para valores arbitrarios de la presión y la temperatura el número máximo de fases o minerales es igual o menor al de componentes inertes, por lo que no deben formarse minerales constituídos únicamente por componentes móviles. No obstante, estos componentes pueden entrar a formar parte de los minerales de metamorfismo, pero su contenido está regulado por el medio externo. De manera que la evolución metamórfica está regulada además de por la presión, y la temperatura, por los potenciales químicos o actividades de los componentes móviles ( $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $K_2O$ ,...).  
1

En los procesos metasomáticos isocóricos-isotérmicos, la regla de fases presupone que el número de minerales es igual al de componentes inertes más uno. Por tanto, cuando el volumen del sistema permanece constante, es posible que se formen minerales formados exclusivamente por componentes móviles. Estos minerales pueden dar lugar a reemplazamientos, a relleno de cavidades o a la formación de grandes fenoblastos, o fenocristales autigénicos. Al mismo tiempo, hemos de tener en cuenta que los minerales constituyen fases de sistemas naturales y que la evolución está regulada por el potencial termodinámico del sistema, no por el de cada una de las fases. De forma que para cada composición han de cristalizar los minerales en orden a su menor volumen, o menor energía, o mayor presión de cristalización. Así por ejemplo, se formará siempre minerales alcalinos, cálcicos, magnésicos, ferríferos, etc., pero, si no se expulsan algunos componentes, todos los minerales posibles cristalizarán en el sistema, con independencia de su estabilidad absoluta.

En la transformación del sistema esfena + cianita  $\longrightarrow$  anortita + rutilo, las magnitudes que intervienen en cada miembro de la ecuación son:

	CaTiSiO <sub>5</sub>	Al <sub>2</sub> SiO <sub>5</sub>	$\longrightarrow$	CaAl <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>8</sub>	TiO <sub>2</sub>
	Esfena	+ Cianita		Anortita	+ Rutilo
Er	-6.670	-6.764		-10.787	-2.830
DE	- 120	- 150		- 107	- 150
Vr	55	45		101	18
	⏟			⏟	
ΣEr	-13.437			-13.617	
ΣDE	- 134			-114	
ΣVr	100			119	
$\Sigma  DE $	1,34			0,95	
(ΣV)					

$$\Delta Er = -180 \text{ Kcal/mol}$$

$$\Delta DE = 20 \text{ Kcal/mol}$$

$$\Delta Vr = 19 \text{ cm}^3$$



De acuerdo con las consideraciones anteriores, en un proceso a presión constante será mas estable el sistema esfena - cianita, si el proceso resultante es de compresión  $\Delta V_R < 0$ , mientras que si es de dilatación, el sistema mas estable es el anortita - rutilo  $\Delta V_R > 0$ .

En procesos a volumen constante, es mas estable el sistema esfena - cianita, ya que su densidad de energía es mayor.

Cuando el proceso está regido por la temperatura, el orden de estabilidad, como ya hemos indicado puede considerarse función de la energía reticular; por tanto, en este caso el sistema mas estable es el anortita - rutilo, pues su energía reticular es menor, mayor en valor absoluto.

En condiciones mecánicas arbitrarias, el sistema esfena - cianita es el mas estable ya que el valor del cociente entre la densidad de energía y el volumen es mayor en valor absoluto, para este que para el sistema anortita - rutilo.

#### XIII.4.3. Procesos magmáticos.

El equivalente radical se presenta como el más idóneo para establecer un orden de cristalización en los procesos magmáticos, plutónicos y volcánicos, en los cuales es posible la formación de fases minerales a partir de componentes móviles, cualesquiera que sean los valores de los factores de estado.

El orden de cristalización obtenidos a partir de nuestros datos son:

	<u>Asociaciones Minerales</u>	<u>Especies Minerales</u>
Nivel 1	Olivino-granates	Estauroлита
Nivel 2	Piroxenos-Piroxenoides	Corderita-Berilo
Nivel 3	Anfíboles-Epidota	Analcima-Turmalina
Nivel 4	Feldespatos	Celsiana-Illinita
Nivel 5	Micas	Sodalita-Datolita
Nivel 6		Cloritas-Topacio

dentro de cada nivel, el orden de estabilidad se establece de acuerdo a la densidad de energía o presión de cristalización. Sin embargo, en los órdenes de estabilidad dados por los petrógrafos en las rocas ígneas sólo aparecen las especies minerales correspondientes a las zonas centrales de cada uno de los niveles considerados, mientras que las especies minerales situadas en las zonas superiores corresponden a un metamorfismo de contacto y las situadas en las zonas inferiores a un metamorfismo dinámico.

<u>Metamorfismo de Contacto</u>		<u>Zona Central</u>	<u>Metamorfismo Dinámico</u>
Nivel 1	Monticellita	Olivino Grosularia	Estauroлита Almandino
Nivel 2	Wollastonita Cordierita	Augita Enstatita	Esodumena
Nivel 3	Apofillita Analcima	Hornblenda (Epidota) Turmalinas	Esfena Silimanita Andalucita Cianita
Nivel 4	Feldespatoïdes	Ortosa-Albita	
Nivel 5	Sodalita	Biotita Moscovita	Topacio
Nivel 6		Cloritas	

Extraña la posición de la epidota en relación con su ausencia casi total de los productos de cristalización plutónica (sólo algunas veces en rocas básicas y escasa proporción). Ello parece ser debido al alto contenido en aluminio que es necesario para su formación en contraste con la ausencia de Al en los anfíboles.

## XII.5. EQUILIBRIO EN LAS TRANSFORMACIONES GEOLOGICAS.

### XIII.5.1. Equilibrio isocórico.

Consideremos en primer lugar la transformación isocórica-isotérmica, es decir, una transformación a volumen constante. En el equivalente iónico, el orden de estabilidad para un valor de volumen representado por  $1/V = 0,07 \text{ cm}^3/\text{mol}$ , será:

Oxidos  $AX_2$ : (Cassiterita).



Piroxenoides: (Rodonita).

Clinoanfíboles alcalinos: (Riebekita).

Clinoanfíboles cálcicos: (Hastingita).

Biotita.

Grupo del Olivino: (Tefroita).

Cada una de las especies minerales consideradas, no presentarán su composición media ideal, es decir, cristalizará la composición química que, manteniendo el volumen reticular dentro de los límites permitidos por la estructura consiga para la especie la mayor presión de cristalización.

El orden de estabilidad indicado no es un orden cronológico, ya que este viene fijado por las concentraciones molares respectivas. Es decir, al cristalizar la primera especie, que será aquella cuya fracción molar está ya en equilibrio, se modifican las fracciones molares de todas las demás y puede alcanzar el equilibrio cualquiera de ellas.

Para analizar completamente el orden de estabilidad debemos recordar que las asociaciones minerales obtenidas pueden no constituir series continuas sino discretas, y por tanto, es posible que en alguno de los puntos de intersección de las líneas de volumen constante y potencial químico constante no pueda existir una estructura que sea capaz de contener la composición química correspondiente y, por tanto, no pueda existir la especie mineral. Esto nos indica que el orden de estabilidad teórico puede muy bien no presentarse completo. Así por ejemplo, la presencia de cristales de tefroita, para el volumen considerado, es difícil porque como podemos ver en el gráfico no se formaría realmente un cristal de tefroita, sino un cristal mixto de tefroita y moticellita, y como la monticellita es morfotropa con el resto del grupo del olivino, no es seguro que se puedan formar cristales mixtos.

Para el nivel de las rocas sedimentarias, una transformación con este mismo volumen ( $1/V = 0,07 \text{ cm}^3/\text{mol}$ ) sólo daría lugar a óxidos conteniendo  $(\text{OH})^-$ : (Goethita) y óxidos tipo AX (Cin cita).

En el equivalente catiónico la variación de volumen con respecto al equivalente iónico es notable. Así en una transformación análoga a la estudiada en el equivalente iónico las únicas especies estables serían

Oxidos  $\text{A}_2\text{X}_3$  Hematites - Corindón

Oxidos  $\text{AB}_2\text{X}_4$  Cromita - Galaxita

Es prácticamente imposible que mediante una transformación a volumen constante vuelva a presentarse una secuencia de estabilidad como la obtenida en el equivalente iónico.

En el equivalente aniónico también se observa una variación de volumen, pero para este equivalente en vez de un aumento con respecto al iónico, como se observaba en el equivalente catiónico, lo que se produce es una disminución. En este equivalente para la transformación considerada ( $1/V = 0,07 \text{ cm}^3/\text{mol}$ ) sólo será estable, en el nivel de las rocas silicatadas, un feldespato calcoalcalino: la Celsiana.

La secuencia de estabilidad isocórica-isotérmica que contiene a la casiterita se produciría en este equivalente, para un volumen tal que  $1/V = 0,094 \text{ cm}^3/\text{mol}$ . Esta secuencia sería:

Clinopiroxeno alcalino (Jadeita - Egirina).

Oxidos  $\text{AX}_2$  (Casiterita).

Clinopiroxenos alcalinos.

Granates (Andreadita - Grosularia).

Grupo de la Epidota (Epidota - Clinozoisita).

Oxidos  $A_2X_3$  (Ilmenita).

Oxidos  $AB_2X_4$  (Galaxita).

En el equivalente radical en ninguna transformación a volumen constante pueden ser estables en una misma secuencia silicatos y óxidos.

#### XIII.5.2. Equilibrio isobárico.

Consideremos ahora las transformaciones isobáricas-isotérmicas. Es decir, las transformaciones a presión constante. El orden de estabilidad en este tipo de transformaciones está regulado por el volumen. Las especies minerales más estables, serán las que tengan menor volumen.

Si recordamos que la presión de cristalización es un parámetro intensivo, en las transformaciones a presión constante serán estables siempre las mismas especies minerales, lo único que variará será su orden de aparición.

Para el equivalente iónico el orden de estabilidad para una posición de cristalización constante - 110 Kcal/cm<sup>3</sup> es:

Oxidos  $AB_2X_4$  (Hercinita - Galaxita).

Oxidos  $A_2X_3$  (Ilmenita).

Grupo del Olivino (Olivino).

Clinoanfíboles cálcicos (Hartingita).

Moscovita.

Piroxenoides (Bustamita).

Feldespatos alcalinos (Ortosa - Albita).

Oxidos  $AX_2$  (Plattnerita).

Equivalente aniónico.- El orden de estabilidad, manteniendo las condiciones, es para este equivalente:

Oxidos  $AB_2X_4$  (Hercinita - Galaxita).

Oxidos  $A_2X_3$  (Ilmenita).

Moscovita.

Grupo del Olivino (Olivino).

Clinoanfíboles cálcicos (Hastingita).

Piroxenoides (Bustamita).

Oxidos  $AX_2$  (Plattnerita).

Feldespatos alcalinos (Ortosa - Albita).

Equivalente radical.- El orden de estabilidad para este equivalente es:

Oxidos  $AB_2X_4$  (Hercinita - Galaxita).

Oxidos  $A_2X_3$  (Ilmenita).

Oxidos  $AX_2$  (Plattnerita).

Feldespatos alcalinos (Ortosa - Albita).

Clinoanfíboles cálcicos (Hastingita).

Piroxenoides (Bustamita).

Grupo del Olivino (Olivino).

### XIII.5.3. Equilibrio isoquímico.

Como veíamos anteriormente, para que dos fases minerales estén en equilibrio es necesario que sus potenciales químicos adquieran igual valor en el sistema. Si consideramos la dependencia del potencial químico de la fracción molar de los minerales en el sistema, ésta vendrá determinada por la ecuación

$$\partial \mu_A = R T \partial (L_n X_i) \quad (93)$$

donde  $X_A$  denota la fracción molar del mineral A en el sistema de manera que el potencial químico de un mineral valdrá:

$$(\mu_A)_{T,P} = n R T L_n X_A + (\mu_A^0)_{T,P} \quad (94)$$

donde  $n$  representa el número de iones intercambiables y  $\mu_A^0$  la parte del potencial químico independiente de la concentración que sólo depende de la presión y la temperatura.

Por tanto, el equilibrio en una asociación mineral cualquiera A-B se alcanzará cuando:

$$(\mu_A)_{T,P} = (\mu_B)_{T,P} \quad (95)$$

es decir:

$$n_A R T L_n X_A + (\mu_A^0)_{T,P} = n_B R T L_n (1 - X_A) + (\mu_B^0)_{T,P} \quad (96)$$

como  $n_A$  y  $n_B$ , son conocidos para todos los minerales y  $\mu_A^0$  y  $\mu_B^0$  se pueden estimar de acuerdo con las relaciones establecidas a partir de las rectas de equilibrio, fácilmente podemos conocer la fracción molar o proporción en que deben encontrarse los minerales A y B para estar en equilibrio en un sistema o unidad litológica.

Al mismo tiempo podemos deducir cómo pequeñas fracciones molares de otros componentes disminuye sensiblemente el potencial químico, y como éste es igual, en valor, a la energía libre molar parcial, serán más estables los minerales con fracciones molares, de algún componente, menor que la unidad. Este comportamiento explica la dificultad de encontrar especies puras de minerales con capacidad de intercambio iónico.

Para conseguir igualar la energía libre molar parcial, las especies minerales pueden modificar su energía reticular o

su volumen dentro de ciertos límites, mediante modificaciones de su composición química. Sobrepasados estos límites, la estructura ya no puede contener estas modificaciones y se transforma, dando lugar a una nueva especie mineral, o pasa a formar una fase fluida. Las modificaciones permitidas por cada retículo definen la variabilidad cristaloquímica, que se manifiesta de distinta forma para las distintas especies minerales.

Esta variabilidad cristaloquímica ha producido serios problemas a la hora de determinar las ecuaciones estadísticas de las asociaciones minerales, pues teníamos que partir de análisis reales generalmente impurificados por las razones antes expuestas. En unos casos esta variabilidad se produce en la dirección, que en el diagrama  $DE - 1/V$ , indica que el potencial químico permanece constante. Naturalmente en estos casos el obtener las rectas de equilibrio definidas por la ecuación general  $DE = -\mu 1/V + PD$  resultó sencillo, ya que los distintos análisis se sitúan a lo largo de la recta que las representa. Para comprobarlo basta recordar la distribución del grupo mineral granates (pág. 85)

En otras especies minerales la variación se produce manteniendo constante el volumen. Esto implica que el paso de una especie mineral a otra se produce mediante sustituciones diadócicas isoestructurales. Este es el caso de la serie de las plagioclasas, en las cuales como puede verse en el gráfico adjunto los análisis representativos de la serie albita, andesina, labradorita, bitownita, anortita se sitúan prácticamente paralelos al eje de las presiones.

Cuando la variación cristaloquímica se verifica a volumen constante, la ecuación de la recta de equilibrio que obtendríamos mediante el estudio estadístico de los distintos análisis tendrían una pendiente muy elevada y por tanto, el valor de la presión de disociación que obtendríamos sería muy alto para la presión de cristalización que caracteriza a las plagioclasas. Es decir, la recta obtenida carecería de sentido físico.

Hay un tercer tipo de variación cristaloquímica donde se



1/VOLUMEN  $\text{cm}^3 / \text{mol}$

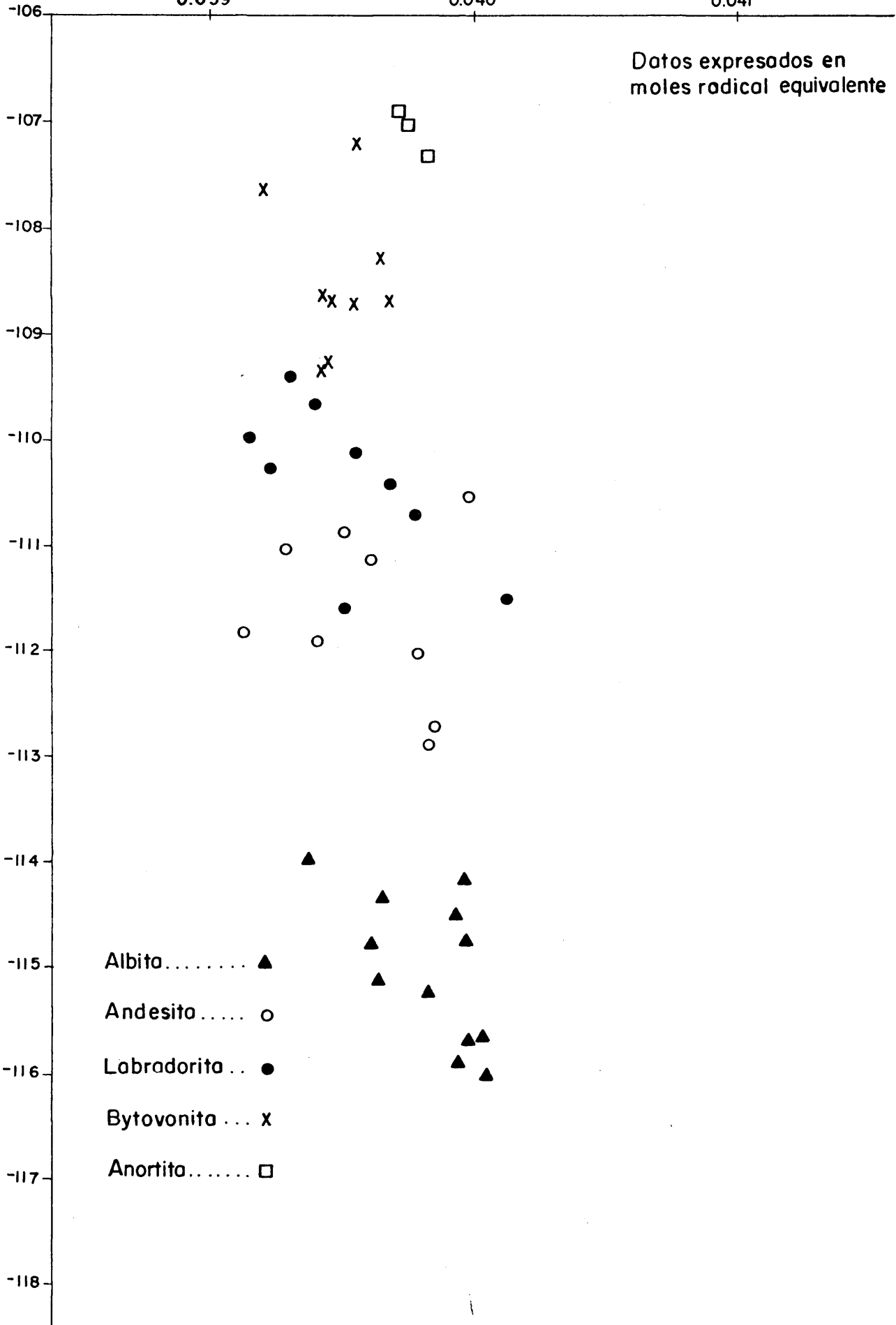
0.039

0.040

0.041

Datos expresados en moles radical equivalente

PRESION DE CRISTALIZACION Kcal./ $\text{cm}^3$





combinan las dos antes estudiadas. Este produce una distribución estadística de los análisis alrededor del punto medio. En este caso es prácticamente imposible saber qué análisis representan realmente la búsqueda del equilibrio por parte del mineral.

No es de extrañar, por tanto, que en las especies minerales con una gran variabilidad en los análisis disponibles no hallamos podido determinar estadísticamente sus ecuaciones de equilibrio termodinámico.

Cuando la variación cristaloquímica se verifica según los dos últimos tipos mencionados, para calcular las rectas de equilibrio termodinámico, ha sido imprescindible el recurrir a la relación existente entre la presión de disociación y la de cristalización.

#### XIII.6. APLICACION DE LOS PARAMETROS TERMODINAMICOS AL ANALISIS DE LOS PROCESOS GEOLOGICOS.

Esta ordenación energética de los minerales, pese a sus imperfecciones, debe permitirnos, si no resolver, plantear adecuadamente la mayor parte de los problemas geológicos determinados por una composición mineralógica. Aunque sea salirnos del tema de este Trabajo consideramos necesario dedicar un breve comentario a los problemas mineralogenéticos que en líneas generales, pueden enunciarse como:

- Análisis de zonados y secuencias.
- Predicción de ubicación de los minerales.
- Análisis cuantitativo de sistemas geológicos.

Es difícil dar normas para la aplicación de los parámetros energéticos de los minerales a la resolución de estos problemas petrogenéticos y metalogénicos, pues, como hemos indicado, han de tener distinto planteamiento termodinámico según los grados de libertad o factores de equilibrio de los sistemas geológicos.

En general hay cuatro planos, o superficies termodinámicas, en las que se realizan las transformaciones geológicas. De modo que la evolución se efectúa según líneas normales a estas superficies de equilibrio. En consecuencia deberemos considerar los fenómenos geológicos siguientes:

Trabajo		Potencial termodinámico	Factores de equilibrio	
Térmico	Mecánico		Interno	Externo
Isentrópico	Isocórico	U	(S, V)	
Isentrópico	Isobárico	H	(S)	(P)
Isotérmico	Isocórico	F	(V)	(T)
Isotérmico	Isobárico	G		(T, P)

En cada caso deberemos considerar la modificación de la energía interna causada por realización de un trabajo químico. Esta puede estar regulada por los factores de equilibrio:

Factores químicos de equilibrio

Internos comp. inertes	Externos comp. móviles
$\Sigma n_i$	
$\Sigma n_a$	$\Sigma \mu_c$
$\Sigma n_c$	$\Sigma \mu_a$

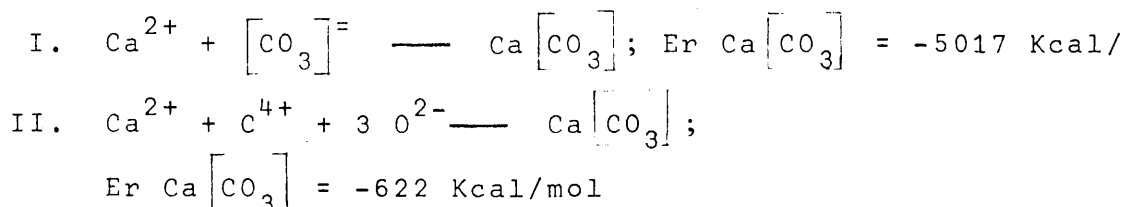
i = iones integrantes del mineral o sistema.

a = aniones.

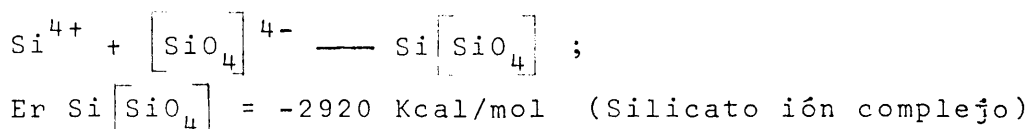
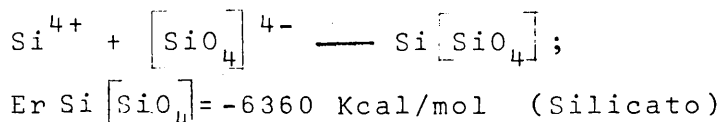
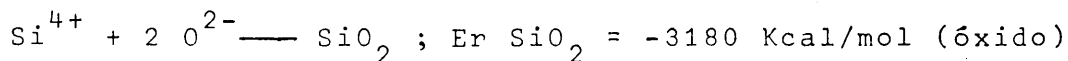
c = cationes.

Al mismo tiempo, en los minerales heterodésimicos será necesario tener en cuenta el estado de disociación iónica del mine

ral; es decir si la energía liberada para formar el grupo iónico interviene, o no, en el proceso geológico considerado. Por ejemplo en el caso del carbonato cálcico tendremos: como veíamos en la pág. 56



que parece correspondernos al nivel de las carbonáticas (ígneas) y de las calizas (sedimentarias). O en caso del cuarzo:



Además de estos problemas, fáciles de resolver mediante la verificación de las diversas hipótesis posibles en cada caso, será preciso analizar la influencia del potencial gravitacional, el gradiente geotérmico y el quimismo del entorno en el equilibrio químico entre las fases minerales; la inversión de temperatura, la presión interna del sistema, las transformaciones de evolución y epigenitización y los rejuvenecimientos del ciclo evolutivo, etc. Aspectos que permiten la ordenación geológica de los minerales y que deben poder analizarse, pues conocemos la posición de cada mineral en el espacio energético.

Sin embargo, hemos de recordar que la conocida ley de Hess establece la convergencia de los procesos naturales hacia puntos definidos (mínimos energéticos) pues en, último término, el equilibrio de cada asociación mineral no depende de los caminos seguidos en su génesis, dado que la energía reticular es una

función de estado del sistema. Así, de la existencia de una especie mineral o petrográfica, sólo podemos deducir en qué punto de su formación se alcanzó, de algún modo, un determinado nivel energético, pero no podemos deducir el proceso metalogénico o petrognético.

Estos procesos pueden, no obstante, deducirse del análisis de la zonación y las secuencias mineralógicas, pues ellas nos indican la disposición espacio-tiempo de los factores termodinámicos de equilibrio y de la evolución.

Por ejemplo, supongamos una asociación augita-grosularia de la cual se ha podido deducir por análisis microscópico que la augita se ha formado en primer lugar. Se trata de analizar termodinámicamente los procesos y transformaciones que hayan podido producir dicha asociación. Para lo cual suponemos que no existen restricciones de composición química, y que son ciertos los parámetros termodinámicos estimados en este trabajo. Estos datos se incluyen en la tabla adjunta.

TABLA XIV

GROSULARIA ---  $P_C = -122,648 \text{ Kcal/cm}^3$

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalent radical
Er Kcal/mol	-1558,907	-1298,865	-1948,885	-5181,586
Vr $\text{cm}^3/\text{mol}$	12,710	10,590	15,885	42,247

AUGITA ---  $P_C = -121,417 \text{ Kcal/cm}^3$

	Equivalente iónico	Equivalente aniónico	Equivalente catiónico	Equivalent radical
Er Kcal/mol	-1616,156	-1347,899	-2017,439	-4039,613
Vr $\text{cm}^3/\text{mol}$	13,310	11,101	16,615	33,270

Dada la similitud de orden entre los equivalentes iónico, catiónico y aniónico, únicamente consideramos dos hipótesis:

H<sub>1</sub> equivalente aniónico (no existen enlaces iónicos previos).

H<sub>2</sub> equivalente radical (supone radicales (Al, Si, On)<sup>m-</sup> formados en anteriores procesos geológicos).

En ambos casos los componentes catiónicos (Ca, Mg, Al, Fe) se comportarán como componentes móviles y condicionarán el equilibrio entre las dos fases cristalinas.

Para verificar las diferentes hipótesis o modelos de evolución geológica vamos a suponer en primer lugar que la evolución se verifica según tres caminos independientes, isocórico, isobárico e isotérmico.

Evolución en función del volumen del sistema:

En esquema esta evolución puede reducirse a tres estadios V<sub>1</sub>, V<sub>2</sub> y V<sub>3</sub> en cada uno de los cuales puede tener lugar una transformación. Según hemos analizado anteriormente, en toda transformación isocórica se produce la fase de mayor presión de cristalización, pues, de este modo se conseguirá alcanzar el valor mínimo del potencial termodinámico. Por consiguiente, puesto que P<sub>C</sub> grosularia > P<sub>C</sub> augita, tendremos:

f(V <sub>sist.</sub> )	V <sub>1</sub>	>	V <sub>2</sub>	>	V <sub>3</sub>
H <sub>1</sub> = H <sub>2</sub>	grosularia (augita)		grosularia (augita)		grosularia augita

Es decir: en cualquier tipo de evolución en función del volumen del sistema se formarán cristales de grosularia, y sólo podrá cristalizar la augita en los volúmenes residuales. De manera que la secuencia de cristalización será siempre grosularia -- -- augita.

Evolución en función de la presión:

Igual que en el caso anterior suponemos una evolución según tres transformaciones en régimen de equilibrio  $P_1$ ,  $P_2$ , y  $P_3$ , dado que la entalpía libre molar parcial (igual en valor al potencial químico) de la grosularia es menor (mayor en valor absoluto) que la de augita, y el volumen reticular equivalente es menor en la grosularia, no debe existir una presión de transición. Por consiguiente, si tenemos en cuenta que para  $H_1$ :  $V_{\text{augita}} > V_{\text{grosularia}}$  y para  $H_2$ :  $V_{\text{grosularia}} > V_{\text{augita}}$ , podemos expresar:

f(P)	$P_1$	<	$P_2$	<	$P_3$
$H_1$	grosularia augita		grosularia augita		grosularia augita
$H_2$	augita grosularia		augita grosularia		augita

Por tanto, a presiones bajas o intermedias pueden coexistir ambas especies minerales, pero a presiones elevadas (en relación con la presión de cristalización de estas especies), sólo podemos encontrar grosularia bajo la hipótesis,  $H_1$ , correspondiente al equivalente aniónico, y augita si consideramos como válida la hipótesis  $H_2$ , radical equivalente, independientemente de que la evolución se efectúe según presiones crecientes o decrecientes.

Evolución en función de la temperatura:

La evolución térmica puede efectuarse según tres estadios de equilibrio isotérmicos  $T_1$ ,  $T_2$  y  $T_3$ , donde  $T_2$  representa la temperatura de transición del sistema grosularia-augita. Para temperaturas crecientes debemos esperar se formen las fases siguientes de acuerdo con los valores de sus energías reticulares.



f(T)	$T_{A_1}$	<	$T_{A_2}$	<	$T_{A_3}$
$H_1$	grosularia		grosularia augita		augita (grosularia)
$H_2$	augita		augita grosularia		grosularia (augita)

Mientras que para temperaturas decrecientes tendremos:

f(T)	$T_{B_1}$	>	$T_{B_2}$	>	$T_{B_3}$
$H_1$	augita		augita grosularia		augita grosularia
$H_2$	grosularia		grosularia augita		grosularia augita

Vemos que la diferencia fundamental es la persistencia del mineral de mayor energía reticular en los estadios de menor temperatura, en los que permanece en forma metastable (por tener una energía interna mayor que el medio externo).

La existencia conjunta de augita y grosularia se puede producir en la temperatura de transición y en forma metastable permanece en los procesos de enfriamientos conducentes a la temperatura de afloramiento.

En un proceso de calentamiento, a partir de una temperatura ( $T_{A_2}$ ) la fase formada a menor temperatura ( $T_{A_1}$ ) dejará de ser estable y tenderá a disociarse de manera que si interrumpe el proceso, encontraremos al mineral de baja temperatura corroído y parcialmente sustituido por el mineral de alta temperatura.

La secuencia de cristalización que encontraríamos sería:

$T_A$  (crecientes)  $H_1$  grosularia-augita (reemplazamiento).  
 $H_2$  augita-grosularia (reemplazamiento fenocristales).



$T_B$  (decreciente)  $H_1$  augita-grosularia (fenocristales).  
 $H_2$  grosularia (corroída) - augita.

(incluimos el término fenocristales por ser la forma más general de cristalizar los minerales de mayor densidad de energía).

Procesos geológicos compatibles:

Puesto que los procesos geológicos tienen lugar por la interacción conjunta de los trabajos térmico y mecánico, debemos analizar la congruencia entre los resultados anteriores. Congruencias que expresamos en la tabla siguiente:

Proceso geológico	$H_1$ (aniónico)	$H_2$ (radical)
Isocórico-isotérmico ( $T_A$ )	Congruente, $H \neq H^0$	Incongruente, $H \neq H^0$
Isocórico-isotérmico ( $T_B$ )	Congruente, $H \neq H^0$	Incongruente, $H \neq H^0$
Isobárico-isotérmico ( $T_A$ )	Congruente, $H \neq H^0$	Congruente, $H = H^0$
Isobárico-isotérmico ( $T_B$ )	Congruente, $H = H^0$	Congruente, $H \neq H^0$

Si aceptamos la hipótesis de partida según la cual la augita cristalizó antes de la grosularia, únicamente son válidas las hipótesis:

- Proceso isobárico-isotérmico (Temp. decrecientes) oxígeno equivalente.
- Proceso isobárico-isotérmico (Temp. crecientes) radical equivalente.

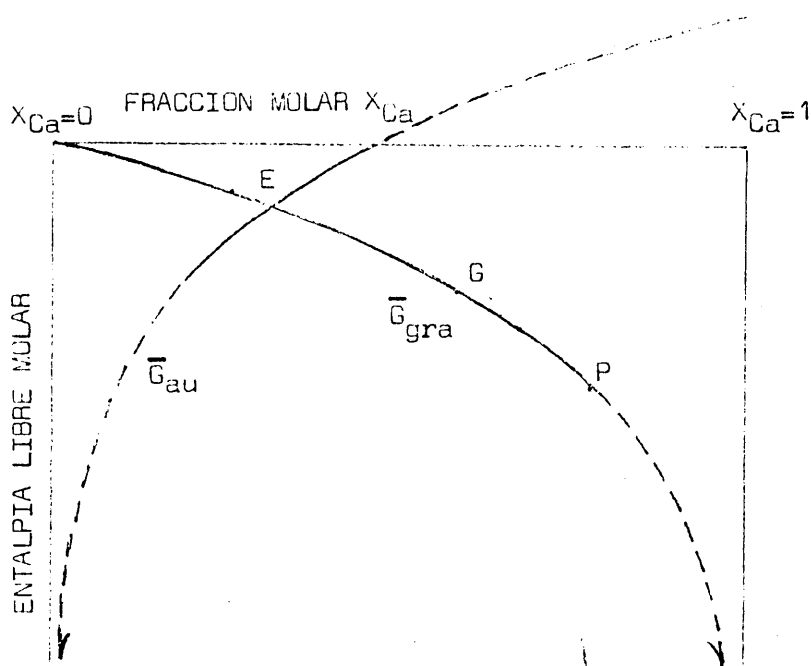
Ahora bien, como los procesos isobáricos-isotérmicos,  $f(T, P)$  se asimilan generalmente a procesos metamórficos, debemos suponer como más verosímil la hipótesis segunda, en la cual los radicales  $[Al, Si, O_n]^{m-}$  están formados por procesos geológicos anteriores, en cuyo caso la secuencia augita-grosularia se habrá producido por un proceso de metamorfismo regional. Pe-

ro no podemos precisar el rango de presiones, es decir, puede tratarse de un metamorfismo térmico o un metamorfismo regional, si bien la grosularia sola se producirá a no muy altas presiones, pues a altas presiones se produce generalmente almandino. Sin embargo, la capacidad de los granates de formar soluciones sólidas puede dar lugar a resultados aparentemente contradictorios.

Si suponemos que entre el piroxeno y el granate se establece un equilibrio, éste estará regulado por la entalpía libre molar parcial, la cual podemos aceptar que depende únicamente de la fracción molar del calcio:

$$X_{Ca} = \frac{Ca}{(Fe + Mg + Mn + Na)}$$

De acuerdo con la variabilidad de composición de estas especies minerales la fracción molar del calcio en la augita puede variar de  $X_{Ca} = 0,18$  a  $X_{Ca} = 0,49$ , mientras que en los granates oscila desde  $X_{Ca} = 0$ , en el almandino, hasta  $X_{Ca} = 0,8$ , en el piropro. De forma que una modificación de la fracción molar de 0 a 0,8 en los granates corresponde con una modificación de 0,18 a 0, en los piroxenos. La variación de la entalpía libre en función de la fracción molar del calcio ha sido representada en el gráfico adjunto



En él puede observarse cómo la entalpía de equilibrio se alcanza para una fracción molar del calcio de  $X_{Ca}^{equiv} = 0,32$  que debe corresponder a la fracción molar del supuesto cristal mixto augita-granate. El equilibrio se puede alcanzar para distintas concentraciones augita-granate; entre ellas destaca la del 76% de augita y 24% de granates análoga a la media de las eclogitas, calculada para una fracción molar media de la augita de  $X_{Ca} = 0,42$ . Sin embargo, es más frecuente que se forme onfacita-granate en proporción variable ya que en cada una de estas especies minerales la fracción molar del calcio puede adquirir un valor igual al exigido por la condición de equilibrio, ( $X_{Ca}^{onfacita} = 0,24$  a  $0,46$ ). La fracción molar de  $0,32$  se puede alcanzar mediante una solución sólida piropo-grosularia-andreadita. De esta manera, al mismo tiempo, puede llegar a igualar la presión de cristalización de ambos minerales.

CONCLUSIONES

- . Las especies minerales se asocian estadísticamente en función de los parámetros termodinámicos, definidos por el volumen y la energía reticular. Estas asociaciones definen rectas de equilibrio termodinámico en un espacio: presión de cristalización - 1/volumen reticular.
  
  - . Estas rectas permiten conocer la estabilidad de las distintas especies minerales en los diversos estadios de la evolución geológica.
- 
- . Es imposible conocer con exactitud el valor absoluto que adquiere la energía en cada edificio cristalino, ya que no podemos medir todos los movimientos de las partículas integrantes de las estructuras cristalinas.
  
  - . Puede considerarse que la energía de una estructura es el resultado de la adición de las energías aportadas por cada uno de los iones constituyentes del edificio cristalino.
  
  - . La estimación de la energía reticular a partir de los coeeficientes de Fersman-Doerffel permite obtener una precisión suficiente para caracterizar los minerales cristalinos. Estos coeficientes energéticos portan la energía de enlace entre los iones y el coeficiente estructural de Templeton-Hoppe.
  
  - . El determinar el volumen de las especies minerales a partir de la densidad permite conocer los límites compatibles con la estructura de cada especie.

- . Para poder comparar los valores que toman estas magnitudes en las especies minerales, es preciso referirlas a moléculas cristaloquímicas equivalentes. Definidos por contener:
  - el mismo número de iones,
  - el mismo número de aniones (simples, complejos, radicales),
  - el mismo número de cationes.
  
- . La clasificación estructural de las especies minerales, en homodésmicas y heterodésmicas, puede realizarse a partir del concepto de electronegatividad iónica de Pauling-Pova rennykh.
  
- . Los óxidos múltiples que en su estructura tienen algunos enlaces con menos del 50% de ionicidad pueden considerarse formados por iones complejos. Para proporciones menores de ionicidad se considera que las estructuras contienen radicales aniónicos.
  
- . La densidad de energía, o energía impartida por unida de volumen, expresa la presión de cristalización característica de cada mineral. Al ser la presión de cristalización un parámetro intensivo tiende a equilibrarse en los procesos geológicos.  
  
-----
  
- . La correlación existente entre la presión de cristalización y la inversa del volumen ha permitido establecer las rectas de regresión estadística, para las diferentes asociaciones minerales, con una probabilidad mayor del 95%.

- . Estas rectas pueden expresarse mediante la ecuación general:

$$D_E = - \mu \frac{1}{V} + P_D$$

- por lo tanto definen asociaciones minerales en equilibrio termodinámico.
- . En este trabajo se han determinado 34 rectas de equilibrio termodinámico que permiten ordenar energéticamente las paragénesis minerales.
- . Estas rectas permiten establecer, una serie de niveles energéticos en la Corteza Terrestre, dentro de los cuales se establece el equilibrio mineralógico.
- . La distribución espacial de las distintas asociaciones minerales, no presenta diferencias fundamentales en los cuatro equivalentes estudiados, lo cual parece indicar, que dentro de cada asociación, las especies minerales se comportan como fases de un sistema cerrado.
- . Estas ecuaciones permiten estimar los valores que, para cada especie, adquiere el potencial químico  $\mu_i$ . Por otro lado, entre el valor medio de la presión de cristalización y la ordenada en el origen de cada recta de equilibrio existe una relación lineal característica de cada clase mineral. Relación que permite determinar la presión de disociación.
- . Dentro de cada asociación, el equilibrio se establece bien por modificaciones en el contenido del ión determinante de cada mineral, o bien por pequeños cambios estructurales.
- . Esta variabilidad cristaloquímica permite igualar, dentro de las asociaciones naturales, la entalpía libre molar parcial; y establecer el equilibrio químico.

-----

- . El conocimiento de estos parámetros termodinámicos permite determinar las características de los procesos geológicos responsables de una determinada asociación y los posibles estadios de la evolución.
- . El equivalente radical es el más idóneo para establecer el orden de cristalización en los procesos geológicos posteriores a la primera formación de la Corteza Terrestre.
- . El orden mineralógico de estabilidad en función de la temperatura es el mismo que el de sus energías reticulares. A temperaturas elevadas son estables los minerales de menor energía reticular (mayor en valor absoluto).
- . Cuando un sistema se transforma a volumen constante serán más estables las fases minerales que tengan mayor presión de cristalización; mientras que, cuando la transformación se realiza a presión constante serán más estables los minerales de menor volumen reticular.
- . En condiciones mecánicas arbitrarias podemos esperar que la estabilidad de los minerales será directamente proporcional al valor absoluto de la densidad de energía e inversamente proporcional al volumen reticular.

-----



BIBLIOGRAFIA

- AMOROS, J.L.- "Introducción al estado sólido".- (1.962).
- BARSANOV, G.P.- "The Principles of a modern classification of minerals. Aspects of theoretical mineralogy in the USSR".- Copyright 1.964. Pergamon Press Ltd.- (1.959).
- BERMAN, H.- "Constitution and clasification of the natural silicats".- Am. Min. Vol. 22, p. 342.- (1.937).
- BORN, F.- "Über Dampfdruckmessungen an veinem Argon".- Ann. Phys. (4), 69 (1.922). 473.- (1.922).
- BORN, M. y HABBER, F.- "Deut Phys Gess".- 21, (1.919), 679, 750.- (1.919).
- DANA, J.D. y E.S.- "The System of Mineralogy".- John Wiley and Sons, Inc.- Chapman and Hall, Ltd. London.- (1.944).
- DEER, W.A., HOWIE, R.A. y ZUSSMAN, J.- "Rock-Forming Minerals".- Willian Clowes and Sons.- (1.962).
- DIXON y MASSEY.- "Introducción al análisis estadístico".- 1.969.- Ediciones Castillo.- (1.951).
- DOERFFEL, K.- "Sur quelques procedes contribuant a l'explication theorique de processus geochimiques, en tenant compte en particulier de l'energie reticulaire".- Extr. de Geologie fasc. 5, nº 2, Berlín 1.956, pp. 65 - 100.- (1.956).
- FERSMAN, A.E.- "Anwendung EK-werte zur Bestimmung der Gitterenergien".- Nachr. d. Akad. d. wiss. d. URSS. 1.935. Abt. Math. v. Naturw 1426.- (1.933).



- GIBBS, J.W.- "On the equilibrium of heterogeneous substances".- Thermodynamical works Gostekhizdat, Moscow, 1.950.- (1.948).
- GOLDSCHMIDT.- "Skrift, norske viden K. A Kad".- Oslo 2 (1.926). (1.926).
- GOSSNER, B. and BRUCKL, K.- "Uber struk Furelle Beziehungen von Thodonit ZV anderen silikaten".- Centr. Min., Abt. A, p. 316.- (1.928).
- GRIGOR'YEV, D.P.- "The fundamental problems of mineralogy. Aspects of Theoretical in the USSR". Copynght, 1.964 Pergamon Press, Ltd.- (1.960).
- GUENTHER, W.C.- "Introducción a la Inferencia Estadística".- 1.958. Ediciones del Castillo, S.A.- (1.965).
- HABER, F. y THONSON.- "Betrachtungen zur Theorie der Warmetönum Verh".- d. dt phys Ges 21 (1.919), 750.- (1.919).
- HES, H.H.- "Chemical composition and optical properties of common clinopyroxenes".- Part. I.- Amer. Min.- Vol. 34, p. 621.- (1.949).
- HOPPE, V.R.- "Uber eine neue ein fache methode zur berechnung Von Madelung-Facktoeren".- S.Z.f. anorg. v. allg. Chemic 203, 1.956, 196.- (1.956).
- KLOCMANN, F. y RAMDOHR, P.- "Tratado de Mineralogia". Editorial Gustavo Gili.- (1.947).
- KORZINSKII.- "Physiochemical basis of the analysis of the paragenesis of minerals".- Traslated from Russian Chapman and Hall Ltd.- (1.957).

- KRUMBEIN y GRAYBILL.- "An introduction to statistical models in geology".- 1.965. McGraw-Hill Book Company.- (1.965).
- KOSTOV, I.- "Mineralogy".- 1.968.- Oliver and Boyd Edinburgh and London.- (1.957).
- LIEBAV, F., HILMER, W. y LINDEMANN, G.- "Uberche Kristallstruktur der Rhodonits (Mn, Ca) SiO<sub>3</sub>".- Acta Cryst. Vol. 12, p. 182.- (1.959).
- MADELUNG, H.- "Phys Zeit".- 19, (1.918), 524.- (1.918).
- MACHATSCHKI, F.- "Ein Harmotomvorkommen in steiermark".- Centralbl Min. Abt. A.P. 115.- (1.926).
- McCONNELL, D.- Am. Miner. 23, (1.938), 1.- (1.938).
- MINGARRO, E.- "Establecimiento y aplicación de las funciones metalogénicas a una nueva técnica de prospección".- (1.973).
- MOTHEs, J.- "Estadística aplicada a la Ingeniería".- 1.960.- Ediciones Ariel.- (1.960).
- PEACOCK, M.A.- "On Wollastonite and parawollastonite".- Amer. Journ. Sci., Ser. 5, Vol. 30, p. 495.- (1.935).
- PLENDL, J.N. y GIELISSE, P.J.- "Hardness of nonmetallic solids on an Atomic Basis".- Physical Review, Vol. 125, nº 3, pp. 832 - 882, (1.962).- (1.961).
- POVARENNYKH, A.S.- "Some fundamental problems of crystal chemistry in relation to mineralogy. Aspects of Theoretical Mineralogy in the USSR". Copyright 1.964.- Pergamon Press Ltd.- (1.955).

- POVARENNYKH, A.S.- "Crystal chemical classification of minerals".- 1.972.- Plenum Press New York. London.- (1.966).
- PRIGOGINE, J. and DEFAY, R.- "Thermodynamique Chimique".- (Liege, 1.950).-
- RANKAMA, K. y SAHAMA, T.H.G.- "Geoquímica".- 1.954.- Aguilar S.A. de Ediciones.- Madrid.- (1.949).
- STRUNZ, H.- "Mineralogische Tabellen".- 1.957.- Akademische Verlagsgesellschaft Greest & Portig K-G. Leipzig.- (1.957).
- TEMPLETON, J.- "Chem. Physics".- 21, 2097 (1.953).- (1.953).
- URUSOV, V.S.- "On the use of concept of lattice".- Geokhimiya n<sup>o</sup> 5, pp. 551 - 555 (1.965).- (1.965).
- WARREN, B.E. y BISCOE, J.- "The crystal structure of the monoclinic pyroxenes".- Zeit. Krist. Vol. 80, p. 391.- (1.931).
- WASHINGTON, H.S.- "The Chemistry of the Earth's crust".- J. Frankhn Inst. 190, p. 757.- (1.920).

APENDICE I

En las páginas siguientes se incluyen las salidas correspondientes al uso del programa "PORCENTAJES". En cada una de ellas, se indican, la composición media expresada en óxidos de todas las especies minerales incluidas en las distintas asociaciones obtenidas. Para poder conocer entre que límites oscila la variabilidad cristaloquímica se han obtenido la varianza, la desviación típica y los límites de confianza del 95%.

Asimismo se incluyen los aportes, de energía, volumen y densidad de energía de cada óxido al edificio cristalino.



OLIVINO (N=7)

NUMERO DE MUESTRA= 10.0

	VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02E	38.29	41.24	35.73	17.84	4.15
TJ02E	.15	.05	.11	.01	.02
AL203E	.66	.41	.11	.06	.24
CE007E	.15	1.12	.25	.01	.71
FE0E	2.52	35.16	5.85	48.90	23.84
MA0E	.28	.43	.18	.04	.21
MG0E	39.82	51.56	27.68	37.20	19.27
CA0E	.16	.26	.15	.13	.17
HA02E	.32	.45	.00	.00	.05
H20E	.11	.15	.00	.00	.02
H20E	.25	.37	.14	.03	.16
LJ0E	.18	.00	.00	.00	.00
CO2E	.00	.00	.00	.00	.00
CO2E	.00	.00	.00	.00	.00
4M100E	.00	.00	.00	.00	.00
CO4E	.18	.00	.10	.00	.00
ENERGIAE	5928.68	5035.44	5921.52	124.80	11.23
ENERGIAE	45.24	46.69	44.39	1.68	1.37
ENERGIAE	111.22	113.23	109.21	10.58	3.94

POPCENTAJES

	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	O. ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02E	1925.23	2456.68	17.32	18.83	42.58	46.25
TJ02E	1.61	2.71	.01	.12	.06	.06
AL203E	15.82	20.58	.12	.19	.29	.12
FE203E	36.56	56.64	.31	.52	.76	.77
FE0E	1931.04	1779.34	9.28	16.21	22.80	6.70
MA0E	15.34	21.90	.14	.20	.34	.12
MG0E	1992.33	2596.47	17.93	23.77	44.17	50.34
CA0E	7.20	13.24	.07	.12	.17	.30
HA20E	1.16	2.62	.01	.00	.03	.00
H20E	.66	1.32	.01	.01	.03	.00
H20E	12.67	18.39	.11	.17	.28	.15
LJ0E	.04	.01	.00	.00	.00	.00
PA0E	.05	.03	.00	.00	.00	.00
CO2E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
CO2E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
SG4E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
HALUROSE	.00	.00	.00	.00	.00	.00



NUMERO DE MUESTRAS 2.0

VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VARIAMPA	DESVIACION TIPICA
SI02= 34.39	32.52	28.27	1.53
TJ02= .12	.07	.00	.00
AL203E .24	.71	.12	.34
FE203E .72	1.68	.00	.69
MOE .02	2.39	.00	1.06
MG0E 63.14	62.00	56.28	3.51
CA0E 3.64	9.00	17.23	4.15
K20E .35	1.04	.25	.49
H20E .00	.00	.00	.00
L20E .29	.06	.01	.12
CO2E .00	.00	.00	.00
HAIUROSE .00	.00	.00	.00
SO4E .00	.00	.00	.00
ENERGIAE 5030.26	5016.39	4984.13	11.64
VOLUMENE 40.31	49.56	135.47	.18
ENERGIAE 141.61	132.25	109.98	.21

POPCENTALES

ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	O.ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02= 1514.83	1631.41	1498.93	1498.93	31.25	28.54
TJ02= 1.25	3.71	.00	.00	.00	.00
AL203E 12.00	35.64	.12	.35	.24	.00
FE203E 36.00	84.36	.36	.83	.73	.00
MOE 46.00	119.69	.45	1.19	.93	.00
MG0E 3157.16	3411.10	3113.13	3570.70	64.16	56.85
CA0E 182.26	471.42	1.89	4.66	3.74	.00
K20E 17.50	51.97	.17	.51	.26	.00
H20E .00	.00	.00	.00	.00	.00
L20E .04	.00	.00	.00	.00	.00
CO2E 14.75	23.16	.15	.23	.07	.11
SO4E .00	.00	.00	.00	.00	.00
HAIUROSE .00	.00	.00	.00	.00	.00
ENERGIAE 141.61	132.25	109.98	109.98	11.64	.18
VOLUMENE 40.31	49.56	135.47	135.47	.18	.21
ENERGIAE 5030.26	5016.39	4984.13	4984.13	11.64	.21

NUMERO DE MUESTRAS= 50

VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02= 28.75	29.39	30	.82
TI02= .63	.69	.66	.07
AI203= .69	1.76	.42	.65
FE203E 3.10	1.63	.52	.72
FE0E 33.28	58.91	484.38	21.11
MA0E 36.79	46.42	334.27	18.17
MG0E 2.88	3.83	1.20	1.09
CA0E .60	1.69	1.13	1.02
NA02= .69	.69	.00	.00
K20E .60	.60	.00	.00
H20E 1.14	2.59	2.73	1.65
L10E .64	.64	.00	.00
PA0E .69	.69	.00	.00
CO2E .60	.60	.00	.00
HAIUROSE .60	.60	.00	.00
SOAE .60	.60	.00	.00
ENERGIAE 4986.62	4996.96	116.00	10.77
VOLUMENE 49.36	49.33	1.37	1.17
ENERGIAE 193.29	195.59	6.35	2.52

PERCENTAJES

ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D. ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02= 1433.65	1463.66	13.89	14.05	29.79	30.91
TI02= 1.58	4.44	.61	.64	.63	.69
AI203= 34.21	63.83	.33	.62	.71	1.33
FE203E 49.07	81.22	.48	.80	1.63	1.71
FE0E 1659.65	2543.42	16.58	25.11	38.38	53.71
MA0E 1521.32	2319.65	14.73	22.90	31.89	48.97
MG0E 143.42	191.69	1.39	1.89	2.97	4.05
CA0E 39.79	84.32	.39	.83	.82	1.78
NA20= .00	.00	.00	.00	.00	.00
K20E .60	.60	.60	.60	.60	.60
H20E 56.85	129.28	.55	1.28	1.18	2.73
L10E .60	.60	.60	.60	.60	.60
PA0E .60	.60	.60	.60	.60	.60
CO2E .60	.60	.60	.60	.60	.60
HAIUROSE .60	.60	.60	.60	.60	.60
SOAE .60	.60	.60	.60	.60	.60
ENERGIAE 193.29	195.59	6.35	6.35	2.52	2.52



\*\*\*\*\*

NUMERO DE MUESTRA= 6.0

DESVIACION TIPICA

LIMITE DE CONFIANZA

VALORES MEDIOS

MARIANZA

	VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	MARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02E	37.28	38.29	36.27	1.25
TJ02E	.14	.58	.51	.05
AL203E	22.45	23.79	21.52	1.13
FF203E	14.81	16.03	12.78	2.03
FE0E	.83	.55	.31	.18
WNOE	.10	.43	.06	.13
WGOE	.37	.63	.14	.12
CA0E	23.52	23.92	23.11	.26
MA02E	.83	.93	.80	.09
K20E	.10	.00	.00	.00
H20E	1.79	1.99	1.59	.28
L20E	.10	.00	.00	.00
MA0E	.83	.84	.80	.00
CO2E	.10	.00	.00	.00
HAIHRO2E	.83	.83	.80	.00
SO2E	.10	.00	.00	.00
FFR031E	16461.91	16579.65	16342.17	148.40
WVILH02E	246.51	141.48	339.54	1.21
S.F.FR031E	116.79	117.45	116.14	.67

PORCENTAJES

\*\*\*\*\*

	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D. ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02E	6137.10	6308.68	5028.87	54.18	43.55	42.13
TJ02E	7.41	14.05	.86	.12	.75	.10
AL203E	3696.30	3877.28	3517.52	33.89	26.23	25.00
FF203E	2371.47	2658.16	2088.04	22.68	16.83	14.84
FE0E	73.78	91.48	51.36	.77	.59	.76
WNOE	31.73	71.68	.11	.61	.22	.00
WGOE	61.85	144.57	.52	.89	.44	.74
CA0E	3871.16	3966.43	3776.05	33.85	27.47	26.84
MA02E	.83	.84	.80	.80	.80	.80
K20E	.10	.00	.00	.00	.00	.00
H20E	298.18	328.36	264.31	2.22	2.39	1.85
L20E	.10	.00	.00	.00	.00	.00
MA0E	.83	.84	.80	.80	.80	.80
CO2E	.10	.00	.00	.00	.00	.00
S.F.FR031E	.83	.84	.80	.80	.80	.80
HAIHRO2E	.10	.00	.00	.00	.00	.00

NUMERO DE MUESTRAS = 20

VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	MARIANZA	RESVACION TIPICA
SI02= 38.32	38.94	37.71	37.09	0.23	0.45
TI02= 1.17	1.21	1.10	1.01	0.11	0.10
AL203= 29.73	33.64	25.76	25.76	8.08	2.34
FF203= 6.12	8.96	3.29	3.29	4.18	2.04
FE0E 1.19	0.27	0.16	0.16	0.09	0.06
MNOE 0.82	0.66	0.60	0.60	0.07	0.03
MGOE 0.06	0.15	0.00	0.00	0.01	0.07
CA0E 23.82	23.80	23.76	23.76	0.04	0.05
NA02= 0.01	0.00	0.04	0.04	0.00	0.00
K20E 0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
H20E 1.84	1.84	1.84	1.84	0.00	0.00
LY0E 0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
RA0E 0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CO2E 0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
H21UROSE 0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
SO4E 0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
ENERGIAE 16445.73	16005.78	16395.62	16395.61	36.13	36.13
VOLUMENE 137.49	138.29	136.69	136.69	0.34	0.52
ENERGIAE 119.97	120.31	119.62	119.62	0.06	0.25

PORCENTAJES

ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D. ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02= 632.81	6423.85	6182.49	53.85	45.98	46.85
TI02= 11.51	34.18	0.00	0.29	0.02	0.25
AL203= 4824.37	5509.11	4083.58	46.52	35.63	40.47
FF203= 1607.33	1577.56	8.42	12.39	7.35	10.78
FE0E 34.42	45.07	15.87	0.38	0.22	0.33
MNOE 3.29	9.77	0.00	0.18	0.07	0.07
MGOE 9.87	26.06	0.00	0.22	0.07	0.19
CA0E 3018.19	3041.04	3095.11	33.04	28.58	28.75
NA20E 0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
K20E 0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
H20E 342.60	353.52	300.58	2.54	2.21	2.20
LY0E 0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
RA0E 0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CO2E 0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
SO4E 0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
H21UROSE 0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00



PTROPO (N=40)

	VALORES MEDIOS		LIMITE DE CONFIANZA		NUMERO DE MUESTRAS		VARIANZA		DESVIACION TIPICA	
S102	41.65	41.95	41.36	.07	.27					
T102	.11	.24	.11	.11	.12					
A1203E	22.36	22.39	21.64	.41	.64					
FF203E	1.82	3.09	.56	1.24	1.12					
FE0E	11.21	16.22	6.16	19.67	4.04					
MNOE	.53	.86	.16	.15	.78					
W0E	17.33	22.55	14.815	8.25	2.87					
CA0E	5.26	5.68	4.71	.18	.43					
MA02E	.34	.88	.34	.08	.70					
K20E	.80	.80	.80	.00	.00					
W20E	.11	.23	.08	.14	.37					
L10E	.08	.08	.08	.00	.00					
BA0E	.03	.04	.00	.00	.00					
CO2E	.16	.00	.00	.00	.00					
HA1U0SE	.03	.03	.00	.00	.00					
SO4E	.10	.00	.00	.00	.00					
EMERGIAE	31742.56	31836.22	31678.98	3164.84	56.26					
EMERGIAE	232.16	233.63	230.37	2.68	1.44					
EMERGIAE	135.51	138.14	132.87	5.42	2.33					
				PERCENTAJES						

	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	EMERGIA	LIM DE CONFIANZA
S102	13225.81	13347.19	13103.21	98.14	56.46	57.97
T102	33.86	77.91	.10	.57	.14	.34
A1203E	7008.69	7343.32	6854.99	53.94	39.54	31.89
FF203E	578.77	921.44	177.71	7.21	2.47	4.26
FE0E	3554.11	5157.64	1956.97	37.88	15.17	22.80
MNOE	168.24	365.91	31.11	2.25	.72	1.33
W0E	5492.52	6537.68	4491.58	48.92	23.45	28.39
CA0E	1449.56	1867.27	1492.46	13.27	7.44	6.26
MA20E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
K20E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
H20E	138.14	268.16	.95	1.94	.56	1.15
L10E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
BA0E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
CO2E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
SO4E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
HA1U0SE	.00	.00	.00	.00	.00	.00

NUMERO DE MUESTRAS 11.00

DESVIACION TIPICA

VARIANZA

LIMITE DE CONFIANZA

VALORES MEDIOS

	VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02=	37.75	38.36	1.06	1.03
TI02=	.36	.67	.28	.87
AL203=	21.17	20.65	.76	.87
FE203=	1.13	.62	.75	.87
FE02=	28.79	25.76	28.24	5.12
MM02=	1.36	.98	.59	.63
MG02=	5.19	3.58	8.28	2.86
CA02=	4.21	1.85	15.92	3.99
MA02=	.81	.83	.53	.83
K202=	.00	.00	.00	.00
H202=	.09	.21	.04	.21
L202=	.06	.00	.00	.00
SO02=	.00	.00	.00	.00
HA02=	.09	.00	.00	.00
SO02=	.16	.00	.00	.00
ENERGIA=	3178.67	31836.83	16639.05	128.99
VOLUMEN=	234.36	237.85	17.87	4.21
ENERGIA=	136.16	137.11	2.50	1.61

PERCENTAJES

	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02=	1190.63	12232.84	88.47	90.85	51.90	52.60
TI02=	115.49	289.61	.85	1.55	.50	.90
AL203=	672.28	6931.91	22.82	51.35	28.22	20.72
FE203=	361.05	524.21	89.64	3.90	1.44	2.26
FE02=	0140.17	1129.87	2.66	75.36	39.74	30.88
MM02=	83.50	549.48	67.47	4.09	1.85	2.37
MG02=	1688.66	2101.51	3.18	16.30	7.07	4.73
CA02=	1337.99	2491.87	12.17	15.56	5.74	2.51
MA02=	4.25	18.35	.03	.00	.02	.00
K202=	.29	.86	.00	.00	.00	.00
H202=	26.56	66.91	.29	.00	.11	.28
L202=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
SO02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
HA02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
SO02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
HA02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00

ESPESARTITA (N=40)

NUMERO DE MUESTRAS 30

VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02= 36.55	37.38	55	.74
TI02= .22	.44	.02	.15
AL203= 20.32	20.05	.01	.12
FE203= .85	1.79	.09	.83
FE01= 5.33	7.93	5.40	2.32
MNOE 30.10	34.61	15.85	3.98
MGOE 1.72	3.32	1.99	1.41
CA0E 8.86	8.89	11.15	3.61
MA02= .00	.00	.00	.00
K20E .10	.00	.00	.00
H20E .03	.05	.00	.02
L10E .00	.00	.00	.00
CO2E .00	.00	.00	.00
H21HROSE .00	.00	.00	.00
SO4E .10	.00	.00	.00
ENERGIAE 3156.42	31345.86	9544.68	97.70
VOLUMENE 236.65	239.31	8.29	2.88
PERCENTAJE= 133.55	131.57	3.05	1.75

PERCENTAJES

ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D. ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02= 1109.27	1189.70	86.27	89.46	48.21	50.66
TI02= 87.03	139.14	.65	1.15	.37	.60
AL203= 6390.90	6856.57	47.96	48.95	27.13	26.55
FE203= 267.38	564.16	2.01	4.28	1.34	2.02
FE01= 1668.24	2584.44	12.52	18.90	7.08	10.75
MNOE 989.43	1924.94	71.46	82.82	46.24	33.68
MGOE 582.10	1047.31	4.07	7.94	2.30	3.50
CA0E 1518.96	2066.87	11.34	21.28	6.51	12.05
MA20E .00	.00	.00	.00	.00	.00
K20E .00	.00	.00	.00	.00	.00
H20E 8.39	16.67	.06	.13	.04	.07
L10E .00	.00	.00	.00	.00	.00
CO2E .00	.00	.00	.00	.00	.00
SO4E .00	.00	.00	.00	.00	.00
H21HROSE .00	.00	.00	.00	.00	.00

NUMERO DE MUESTRAS= 360

	VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
S102=	36.66	37.48	.52	.72
T102=	.00	.00	.00	.00
A1203=	2.87	5.33	5.00	2.24
F203=	26.78	30.69	11.91	3.45
F02=	.00	.00	.00	.00
M02=	.16	.15	.11	.02
M02=	.26	.25	.05	.23
C02=	33.43	30.36	.58	.76
N02=	.00	.00	.00	.00
K20=	.00	.00	.00	.00
H20=	.01	.00	.00	.00
L10=	.00	.00	.00	.00
R02=	.00	.00	.00	.00
C02=	.16	.00	.00	.00
H02=	.00	.00	.00	.00
S02=	.00	.00	.00	.00
F02=	30714.32	30793.64	6689.64	68.33
M02=	261.17	267.61	26.61	5.16
F02=	117.67	128.62	114.71	2.61
PORCENTAJES				

	FRECUENCIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D. ENERGIA	LIM RE CONFIANZA
S102=	11269.69	11591.17	19981.39	95.74	108.87	91.51
T102=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
A1203=	859.25	1641.51	82.72	7.31	14.23	3.29
F203=	8226.25	9450.19	7009.56	69.95	81.94	58.41
F02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
M02=	18.43	46.13	.16	.46	.46	.07
M02=	83.80	161.54	.84	4.74	4.74	.31
C02=	18269.49	10561.05	9979.26	87.32	91.57	83.16
N02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
K20=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
H20=	.02	.00	.00	.00	.00	.00
L10=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
R02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
C02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
S02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
F02=	18269.49	10561.05	9979.26	87.32	91.57	83.16
M02=	18.43	46.13	.16	.46	.46	.07
M02=	83.80	161.54	.84	4.74	4.74	.31
C02=	18269.49	10561.05	9979.26	87.32	91.57	83.16
N02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
K20=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
H20=	.02	.00	.00	.00	.00	.00
L10=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
R02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
C02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
S02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
F02=	18269.49	10561.05	9979.26	87.32	91.57	83.16
M02=	18.43	46.13	.16	.46	.46	.07
M02=	83.80	161.54	.84	4.74	4.74	.31
C02=	18269.49	10561.05	9979.26	87.32	91.57	83.16
N02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
K20=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
H20=	.02	.00	.00	.00	.00	.00
L10=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
R02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
C02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
S02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
F02=	18269.49	10561.05	9979.26	87.32	91.57	83.16
M02=	18.43	46.13	.16	.46	.46	.07
M02=	83.80	161.54	.84	4.74	4.74	.31
C02=	18269.49	10561.05	9979.26	87.32	91.57	83.16
N02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
K20=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
H20=	.02	.00	.00	.00	.00	.00
L10=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
R02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
C02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
S02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
F02=	18269.49	10561.05	9979.26	87.32	91.57	83.16
M02=	18.43	46.13	.16	.46	.46	.07
M02=	83.80	161.54	.84	4.74	4.74	.31
C02=	18269.49	10561.05	9979.26	87.32	91.57	83.16
N02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
K20=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
H20=	.02	.00	.00	.00	.00	.00
L10=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
R02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
C02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
S02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
F02=	18269.49	10561.05	9979.26	87.32	91.57	83.16
M02=	18.43	46.13	.16	.46	.46	.07
M02=	83.80	161.54	.84	4.74	4.74	.31
C02=	18269.49	10561.05	9979.26	87.32	91.57	83.16
N02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
K20=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
H20=	.02	.00	.00	.00	.00	.00
L10=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
R02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
C02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
S02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
F02=	18269.49	10561.05	9979.26	87.32	91.57	83.16
M02=	18.43	46.13	.16	.46	.46	.07
M02=	83.80	161.54	.84	4.74	4.74	.31
C02=	18269.49	10561.05	9979.26	87.32	91.57	83.16
N02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
K20=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
H20=	.02	.00	.00	.00	.00	.00
L10=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
R02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
C02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
S02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
F02=	18269.49	10561.05	9979.26	87.32	91.57	83.16
M02=	18.43	46.13	.16	.46	.46	.07
M02=	83.80	161.54	.84	4.74	4.74	.31
C02=	18269.49	10561.05	9979.26	87.32	91.57	83.16
N02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
K20=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
H20=	.02	.00	.00	.00	.00	.00
L10=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
R02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
C02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
S02=	.00	.00	.00	.00	.00	.00











OPITOFERROSILITA (M=10)

NUMERO DE MUESTRAS= 200

VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
46.75	48.32	1.20	1.13
.13	.20	.07	.05
1.15	1.69	.11	.33
.88	2.61	.66	.81
39.28	43.93	11.20	3.36
2.85	7.18	9.82	3.07
6.07	13.79	24.22	4.92
.03	1.91	.50	.71
.92	.00	.00	.00
.00	.00	.00	.00
.01	1.05	.21	.46
.00	.66	.66	.80
.98	.00	.00	.00
.66	.66	.66	.80
.52	.00	.00	.00
.66	.66	.66	.80
8171.77	8189.39	161.46	12.71
65.39	66.31	.44	.66
125.13	126.28	.70	.83

PORCENTAJES

ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D. ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
3824.32	3956.95	32.57	32.54	58.50	61.02
11.65	16.67	.69	.14	.17	.26
92.75	136.67	.74	1.66	1.42	2.02
72.52	164.77	.58	1.53	1.21	2.54
3289.46	3597.53	25.68	29.13	49.14	55.48
232.96	561.71	1.86	4.71	3.57	6.97
566.57	1129.39	4.56	9.14	8.72	17.42
76.60	156.42	.61	1.27	1.10	2.81
.00	.00	.00	.00	.00	.00
.60	.60	.60	.60	.60	.60
33.91	86.15	.27	.70	.52	1.33
.60	.60	.60	.60	.60	.60
.00	.00	.00	.00	.00	.00
.60	.60	.60	.60	.60	.60
.00	.00	.00	.00	.00	.00
.00	.00	.00	.00	.00	.00
.00	.00	.00	.00	.00	.00
.00	.00	.00	.00	.00	.00
.00	.00	.00	.00	.00	.00

HYPERSTENA (N-10)

NUMERO DE MUESTRA= 60

VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
S102=	51.63	7.98	2.81
T102=	41	.13	.16
AL203=	5.49	10.66	3.27
EP203=	2.56	.79	.89
FE02=	29.66	63.70	7.98
MA02=	6.44	.85	.23
MG02=	22.96	35.97	6.00
CA02=	1.35	.53	.73
MA02=	.21	.02	.15
K202=	.25	.14	.20
H202=	.31	.03	.17
L202=	.60	.80	.00
PA02=	.00	.00	.00
CO22=	.00	.00	.00
SO22=	.00	.00	.00
ENERGIA=	8166.15	1997.98	44.70
VOLUMENE	65.46	.56	.75
C.ENERGIA=	126.65	2.16	1.47
PORCENTAJES			

ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	O.ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
S102=	4226.76	32.26	33.80	62.42	65.30
T102=	33.41	.19	.27	.37	.52
AL203=	449.66	2.19	3.68	4.76	6.96
EP203=	269.27	1.26	1.67	2.44	3.24
FE02=	2427.69	15.67	16.41	39.31	37.56
MA02=	49.42	.29	.46	.55	.76
MG02=	1879.82	12.21	15.13	23.63	20.08
CA02=	116.74	.55	.89	1.17	1.71
MA202=	16.81	.07	.13	.13	.26
K202=	26.19	.07	.16	.14	.31
H202=	25.55	.13	.27	.25	.40
L102=	.66	.00	.00	.00	.00
PA02=	.00	.00	.00	.00	.00
CO22=	.00	.00	.00	.00	.00
SO22=	.00	.00	.00	.00	.00
HALUROSE=	.00	.00	.00	.00	.00

CASSAITA (M=13)

NUMERO DE MUESTRAS= 266

	VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D. ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	DESVIACION TIPICA
ST02=	46.82	50.25	47.39	1.87	1.03	1.03	
TJ02=	.51	.55	.47	.47	.03	.03	
AL203=	7.33	7.88	6.78	.16	.40	.40	
FF203=	1.64	1.19	1.60	2.65	1.63	1.63	
FE02=	1.07	2.34	.40	.84	.92	.92	
MNO2=	.02	.14	.66	.66	.02	.02	
MRO2=	15.34	15.79	14.89	.11	.33	.33	
CAC2=	24.71	25.64	23.48	.70	.84	.84	
M202=	.36	.12	.63	.63	.08	.08	
K202=	.66	.66	.66	.66	.00	.00	
H202=	.71	1.28	.13	.13	.42	.42	
LJ02=	.60	.60	.60	.60	.00	.00	
BA02=	.93	.93	.93	.93	.00	.00	
CO2E=	.10	.10	.10	.10	.00	.00	
HAIHROSE=	.32	.32	.32	.32	.00	.00	
SO2E=	.60	.60	.60	.60	.00	.00	
ENERGIAE=	7947.41	8433.85	7948.95	1123.38	33.52	33.52	
VOLUMENE=	66.17	66.60	65.54	.15	.38	.38	
D.ENERGIAE=	120.71	122.00	119.42	.87	.93	.93	

PERCENTAJES

	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D. ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
ST02=	3999.45	4937.87	3762.15	33.47	58.93	61.31
TJ02=	46.74	44.12	37.30	.37	.62	.67
AL203=	585.48	632.97	536.49	5.25	8.85	9.61
FF203=	154.06	336.04	1.28	2.79	2.34	5.12
FE02=	85.47	182.31	.71	1.56	1.29	2.86
MNO2=	1.20	3.57	.61	.43	.62	.05
MRO2=	1225.27	1268.61	1197.74	14.52	18.59	10.27
CAC2=	1973.69	2024.37	1864.15	17.28	29.83	31.65
M202=	4.79	14.27	.64	.12	.77	.22
K202=	.60	.60	.60	.60	.60	.00
H202=	56.31	193.89	16.47	.85	.85	1.57
LJ02=	.60	.60	.60	.60	.60	.00
BA02=	.83	.60	.60	.60	.60	.00
CO2E=	.60	.60	.60	.60	.60	.00
SO2E=	.60	.60	.60	.60	.60	.00
HAIHROSE=	.60	.60	.60	.60	.60	.00

AUGITA (N=12)

MEFRO DE MUESTRA 1806

DESVIACION TIPICA

VARIANZA

LIMITE DE CONFIANZA

VALORES MEDIOS

	VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02E	48.94	50.15	6.82	2.61
TI02E	1.40	2.67	2.10	1.45
AL203E	4.89	5.05	4.34	2.08
FE203E	4.58	4.67	20.48	4.52
FE02E	9.42	11.97	34.41	5.81
MG02E	.31	.63	.07	.27
MG02E	14.81	12.48	13.42	3.61
CA02E	18.87	20.52	12.70	3.52
MA02E	1.38	2.29	3.83	1.96
K202E	.14	.19	.61	.12
H202E	.29	.29	.03	.17
L102E	.10	.00	.00	.00
MA02E	.09	.00	.00	.00
CO20E	.18	.00	.00	.00
HALUROSE	.00	.00	.00	.00
CONE	.00	.00	.00	.00
ENERGIAE	8974.99	8121.39	9857.02	98.27
VOLUMENE	66.53	67.03	1.19	1.09
PERCENTAJE	121.41	122.74	8.20	2.88

PERCENTAJES

	FRECUENCIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D.ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02E	3082.26	472.43	3933.18	33.62	59.43	41.56
TI02E	113.91	168.46	50.97	1.39	1.71	2.55
AL203E	329.01	440.88	250.81	30.79	4.98	4.20
FE203E	370.60	541.59	200.43	4.47	5.56	8.19
FE02E	761.98	972.13	552.14	8.03	11.44	14.69
MG02E	25.03	35.13	15.05	.29	.38	.53
MG02E	873.13	1023.43	734.35	8.37	13.13	15.32
CA02E	1523.80	1666.52	1382.57	13.76	22.91	25.19
MA20E	111.79	185.84	38.61	1.53	1.68	2.81
K202E	16.99	15.62	6.41	.13	.17	.24
H202E	16.55	23.19	9.99	.19	.25	.35
L102E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
MA02E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
CO20E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
SO20E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
HALUROSE	.00	.00	.00	.00	.00	.00



DIAPYRIDO (N=20)

NUMERO DE MUESTRAS 1300

	VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02	50.94	50.23	5.05	2.28
TI02	.84	1.37	1.15	1.02
AL03	3.14	4.19	3.74	1.93
FE03	2.58	1.98	.54	.74
FE04	5.23	6.74	7.65	2.77
MNO	.15	.21	.11	.10
MNO	14.92	16.89	13.13	3.62
CA01	21.24	24.73	42.15	6.49
NA02	.45	.57	.05	.23
K20	.74	.67	.02	.05
H20	.22	.30	.14	.15
LI01	.10	.06	.06	.05
RA01	.00	.00	.00	.00
CO02	.00	.00	.00	.00
HAUROSE	.00	.00	.00	.00
SO01	.00	.00	.00	.00
ENERGIA	8336.89	8462.48	2216.17	47.08
VOLUMEN	66.62	66.87	.21	.46
ENERGIA	120.63	121.13	.75	.87

PORCENTAJES

	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D. ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02	4096.35	4211.31	33.94	34.93	61.45	63.25
TI02	67.26	112.20	.56	.93	1.11	1.69
AL03	252.39	337.85	2.39	2.80	3.79	5.07
FE03	126.61	159.31	1.15	1.32	1.94	2.39
FE04	421.51	545.54	3.49	6.50	6.31	9.16
MNO	12.53	17.02	.10	.14	.19	.26
MNO	1199.35	1361.95	9.94	11.30	18.00	20.86
CA01	1743.94	1993.97	14.12	16.54	25.57	29.95
NA02	36.29	46.20	.33	.38	.54	.70
K20	3.28	5.25	.13	.14	.15	.17
H20	17.92	24.41	.15	.20	.27	.37
LI01	.00	.00	.00	.00	.00	.00
RA01	.00	.00	.00	.00	.00	.00
CO02	.00	.00	.00	.00	.00	.00
SO01	.00	.00	.00	.00	.00	.00
HAUROSE	.00	.00	.00	.00	.00	.00





MEDEMERGIA (N=10)

NUMERO DE MUESTRAS = 60

VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02= 97.32	58.13	13.51	3.21
TI02= .42	1.05	.52	.72
AL203= 2.45	6.67	6.41	2.53
FE203= 2.46	0.60	6.34	2.52
FE02= 16.23	24.25	68.48	8.28
MN02= 5.13	10.66	42.26	6.42
MG02= 4.78	7.76	11.52	3.41
CA02= 10.87	23.68	18.61	4.31
MA02= .34	.79	.14	.40
K202= .16	.45	.11	.10
H202= .52	.28	.13	.37
LI02= .10	.66	.06	.00
PO02= .79	.44	.41	.00
CO02= .10	.69	.14	.00
HA0203= .21	.69	.03	.00
SO02= .16	.66	.10	.00
ENERGIA= 8375.62	8112.31	1751.66	41.85
VOLUMEN= 59.52	69.25	.77	.84
EMERGIA= 117.99	119.41	2.68	1.64

PORCENTAJES

ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D.EMERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02= 3821.38	3577.78	32.42	34.72	55.23	50.87
TI02= 33.76	.66	.29	.73	.19	1.26
AL203= 197.85	18.57	1.68	3.23	2.39	5.58
FE203= 193.65	15.36	1.64	3.19	2.83	5.50
FE02= 1356.73	767.41	11.51	16.66	19.32	28.72
MN02= 486.37	.66	3.45	7.58	5.44	12.73
MG02= 385.89	144.04	3.27	5.37	5.05	0.27
CA02= 1604.95	1293.76	13.62	16.28	23.45	28.25
MA02= 27.78	.69	.24	.68	.42	.23
K202= 4.85	.66	.14	.10	.67	.17
H202= 42.32	16.34	.36	.58	.92	1.01
LI02= .04	.66	.00	.00	.00	.00
PO02= .00	.66	.00	.00	.00	.00
CO02= .16	.66	.00	.00	.00	.00
HA0203= .20	.66	.00	.00	.00	.00
SO02= .16	.66	.00	.00	.00	.00
EMERGIA= 117.99	.66	.66	.66	.66	.00

JAFETA (N=10)

NUMERO DE MUESTRAS 200

VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02= 58.51	58.51	.00	.00
VI02= .00	.00	.00	.00
AL203= 22.00	22.00	.00	.00
FE203= 3.31	3.31	.00	.00
FE0= .98	.98	.00	.00
MG0= .00	.00	.00	.00
MG0= .59	.59	.00	.00
CA0= .71	.71	.00	.00
MA02= 13.74	13.74	.00	.00
K20= .21	.21	.00	.00
H20= .00	.00	.00	.00
L20= .00	.00	.00	.00
PA0= .00	.00	.00	.00
CO2= .00	.00	.00	.00
HA100= .00	.00	.00	.00
SO2= .00	.00	.00	.00
ENERGIA= 8442.41	8442.41	.00	.00
VOLUMEN= 62.60	62.60	.00	.00
D.ENERGIA= 5130.85	5130.85	.29	.54
7072.21			

PORCENTAJES

ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D.ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02= 8930.65	8930.65	36.63	37.06	3000.40	8739.31
VI02= .00	.00	.00	.00	.00	.00
AL203= 1857.33	1857.33	13.77	13.94	1129.07	3286.02
FE203= 279.44	279.44	2.07	2.10	169.96	0940.00
FE0= 82.74	82.74	.61	.61	50.32	1040.30
MG0= .00	.00	.00	.00	.00	.00
MG0= 42.21	42.21	.31	.32	25.67	700.68
CA0= 59.94	59.94	.44	.45	36.46	1040.05
MA02= 1159.99	1159.99	8.60	8.70	705.53	2052.27
K20= 17.73	17.73	.13	.13	10.78	46.00
H20= .00	.00	.00	.00	.00	.00
L20= .00	.00	.00	.00	.00	.00
PA0= .00	.00	.00	.00	.00	.00
CO2= .00	.00	.00	.00	.00	.00
HA100= .00	.00	.00	.00	.00	.00
SO2= .00	.00	.00	.00	.00	.00
ENERGIA= 8442.41	8442.41	.00	.00	.00	.00
VOLUMEN= 62.60	62.60	.00	.00	.00	.00
D.ENERGIA= 5130.85	5130.85	.00	.00	.00	.00

FIRMA (N=10)

NUMERO DE MUESTRASE n=10

DESVIACION TIPICA

VARIANZA

LIMITE DE CONFIANZA

VALORES MEDIOS

	VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02E	52.13	52.91	.67	.82
TI02E	.81	1.09	1.44	1.20
AI203E	1.10	1.23	.82	.91
FE203E	20.63	30.82	28.63	5.29
FE0E	.68	1.07	.59	.77
MA0E	.43	.79	.13	.35
MO0E	1.22	3.09	3.37	1.84
CA0E	1.05	1.94	5.45	2.33
BA02E	11.54	12.84	.83	.91
K20E	.29	.31	.11	.12
H20E	.27	.46	.04	.19
L10E	.80	.86	.06	.08
PA0E	.03	.03	.00	.00
CO2E	.10	.10	.00	.00
HA1UR0SE	.93	.93	.00	.00
SO3E	.00	.00	.00	.00
ENERGIAE	8432.71	8056.92	613.22	24.76
VOLUMENE	64.64	65.88	.73	.85
D.ENERGIAE	138.46	152.09	2.76	1.66

PORCENTAJES

	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D.ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02E	8591.39	4476.64	33.70	34.06	68.12	69.92
TI02E	68.30	167.25	.52	1.31	1.16	2.62
AI203E	92.97	113.62	.71	.80	1.44	1.62
FE203E	2483.82	2044.70	19.15	22.80	38.66	45.99
FE0E	57.55	116.21	.44	.94	.89	1.02
MA0E	36.26	15.78	.28	.51	.56	1.03
MO0E	102.82	255.30	.79	1.98	1.59	3.99
CA0E	139.56	333.46	1.07	2.58	2.16	5.21
BA20E	973.56	1051.66	7.46	8.74	15.76	16.43
K20E	16.23	26.16	.12	.21	.25	.41
H20E	22.77	38.05	.17	.34	.35	.61
L10E	.60	.80	.10	.10	.00	.00
PA0E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
CO2E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
SO3E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
HA1UR0SE	.00	.00	.00	.00	.00	.00

\*\*\*ESPONUMENNA\*\*\* (N=10)

NUMRO DE MUESTRASE 200

DESVIACION TIPICA

VARIANTA

LIMITE DE CONFIANZA

VALORES MEDIOS

ITEM	VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VARIANTA	DESVIACION TIPICA
SI02E	67.21	63.21	.00	.00
TI02E	.60	.60	.00	.00
AL203E	24.92	26.92	.00	.00
FE203E	1.58	1.58	.00	.00
FE0E	.00	.00	.00	.00
MNGE	.66	.66	.00	.00
MGE	.00	.00	.00	.00
CA0E	.10	.10	.00	.00
MAG0E	1.16	1.16	.00	.00
K20E	.52	.52	.00	.00
K20E	.77	.77	.00	.00
L10E	.10	.10	.00	.00
BA0E	.00	.00	.00	.00
CO2E	5.83	5.83	.00	.00
HALUROSE	.00	.00	.00	.00
SOBE	.10	.10	.00	.00
FERROIAE	8522.66	8522.66	.00	.00
SI01ME	50.83	50.83	.00	.00
SI01FERROIAE	144.84	144.84	.00	.00

PERCENTAJES

ITEM	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	O.ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02E	5387.17	5387.17	37.19	37.19	91.55	91.55
TI02E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
AL203E	2294.32	2294.32	15.84	15.84	38.99	38.99
FE203E	134.66	134.66	.93	.93	2.29	2.29
FE0E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
MNGE	.66	.66	.00	.00	.00	.00
MGE	.00	.00	.00	.00	.00	.00
CA0E	.10	.10	.00	.00	.00	.00
MAG0E	98.86	98.86	.68	.68	1.68	1.68
K20E	44.32	44.32	.31	.31	.75	.75
K20E	65.62	65.62	.45	.45	1.12	1.12
L10E	.10	.10	.00	.00	.00	.00
BA0E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
CO2E	496.87	496.87	3.43	3.43	8.44	8.44
SO4E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
HALUROSE	.00	.00	.00	.00	.00	.00





TRIFENOLITA (N=19)

NUMERO DE MUESTRA= 600

VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D. ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	DESVIACION TIPICA
55.74	57.35	50.14	4.82	60.38	67.23	2.00
.17	.28	.66	.62	.24	.33	.15
2.03	3.25	.76	2.42	2.33	3.81	1.55
.29	.44	.19	.19	.33	.75	.54
6.16	1.12	2.19	24.56	7.98	11.97	4.96
1.32	3.76	.00	8.84	1.52	5.34	2.97
19.37	23.68	15.65	21.54	22.26	27.06	4.64
12.27	12.74	11.21	.33	14.22	10.93	.58
.69	1.18	.19	.39	.79	1.39	.62
.19	.40	.66	.27	.22	.47	.27
2.98	2.64	1.31	.53	.22	.47	.71
.16	.50	.16	.66	.79	1.39	.00
.33	.69	.09	.66	.22	.47	.00
.14	.66	.16	.66	.79	1.39	.00
.09	.21	.04	.62	.22	.47	.15
.68	.66	.66	.66	.79	1.39	.00
31458.43	31778.71	31138.15	160211.20	410.26	410.26	
273.75	278.19	269.31	34.86	5.55	5.55	
114.95	117.24	112.66	0.17	2.86	2.86	

PORCENTAJES

EMERDIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D. ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
17532.45	18223.78	16857.63	159.53	60.38	67.23
54.66	89.11	10.68	.78	.24	.33
620.69	1032.04	235.32	9.93	2.33	3.81
06.71	212.58	.18	1.77	.33	.75
1937.31	3217.33	682.71	20.16	7.98	11.97
415.25	1175.34	.66	30.29	1.52	5.34
6892.97	7335.14	53.72	64.21	22.26	27.06
3061.05	4647.16	33.60	35.43	14.22	10.93
216.54	376.57	1.88	.52	.79	1.39
59.77	127.83	.14	1.12	.22	.47
653.61	840.10	471.15	7.35	2.33	3.81
.00	.00	.66	.66	.79	1.39
.03	.03	.66	.66	.79	1.39
.00	.00	.66	.66	.79	1.39
.03	.03	.66	.66	.79	1.39
29.36	66.74	.00	.58	.22	.47

CUOTERITA (N=79)

\*\*\*\*\*

NUMERO DE MUESTRA 360

	VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02E	48.36	50.34	46.38	1.75
TI02E	.00	.00	.00	.00
AI203E	.58	1.03	.15	.40
FE203E	.76	1.11	.41	.31
FE0E	43.53	47.64	39.52	3.59
W0E	1.10	2.24	.00	1.02
W0E	2.37	4.89	.00	2.22
CA0E	.01	1.99	.00	.95
W02E	.25	.52	.06	.24
K20E	.10	.12	.00	.06
W20E	2.37	2.55	2.55	.46
L10E	.00	.00	.00	.00
W0E	.00	.00	.00	.00
CO2E	.00	.00	.00	.00
HA1HROSE	.00	.00	.00	.00
SO2E	.00	.00	.00	.00
PARAGIAE	31282.89	31917.34	315137.16	561.37
W0E	275.21	279.32	271.31	3.54
PARAGIAE	113.61	115.09	112.13	1.31

PORCENTAJES

	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	DE ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02E	15128.02	16467.48	14213.73	140.61	58.94	57.94
TI02E	.00	.00	133.14	.00	.00	.00
AI203E	181.44	333.13	38.51	2.89	.66	1.19
FE203E	239.79	355.56	126.47	3.11	.87	1.28
FE0E	1331.69	15234.52	12119.46	133.04	49.51	49.41
W0E	343.66	722.13	.00	6.32	1.25	2.60
W0E	742.43	1560.93	.00	13.66	2.70	5.63
CA0E	294.67	634.48	2.51	5.55	1.03	2.29
W20E	79.25	166.51	.00	3.66	.29	.60
K20E	18.77	39.26	.17	.34	.07	.14
L10E	647.54	828.12	5.73	7.25	2.35	2.08
PA0E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
CO2E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
SO2E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
HA1HROSE	.00	.00	.00	.00	.00	.00





HORNPLENDA (N=49)

NUMERO DE MUESTRA= 360

DESVIACION TIPICA

VARIANZA

LIMITES DE CONFIANZA

VALORES MEDIOS

	VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
S102E	46.86	53.56	38.57	6.62
T102E	1.86	5.63	0.0	1.56
M203E	8.28	22.57	3.99	3.79
F203E	3.69	4.38	2.99	.61
F00E	11.58	26.36	2.81	7.75
M00E	.22	.33	.11	.10
M00E	13.65	22.24	5.66	7.59
M00E	11.50	11.84	11.16	.30
M00E	1.15	1.72	.58	.50
K20E	.63	1.14	.27	.64
H20E	1.19	2.11	.27	.81
L00E	.60	.66	.08	.00
P00E	.43	.84	.08	.00
C00E	.00	.00	.06	.00
HAIUROSE	.00	.00	.00	.00
S04E	.00	.00	.00	.00
ENERGIA	38591.38	51153.59	38929.17	496.82
VOLUMEN	271.04	282.64	261.24	9.86
CONFIANZA	112.62	119.25	145.99	5.85

PERCENTAJES

	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D. ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
S102E	14921.41	16684.95	11582.13	151.37	51.88	63.97
T102E	567.98	1113.06	25.87	10.25	7.09	8.33
M203E	2571.95	5955.70	1197.42	35.52	9.32	14.09
F203E	127.80	154.29	89.11	12.38	8.15	5.22
F00E	3583.50	6362.12	343.58	57.54	13.95	24.28
M00E	68.32	18.18	33.71	.95	.25	.40
M00E	9176.70	6934.07	1520.82	62.87	15.38	26.53
M00E	3519.03	3690.54	3352.34	33.47	12.96	14.12
M00E	551.80	174.65	3.18	4.86	1.34	2.05
K20E	193.75	354.05	59.12	3.21	.71	1.36
H20E	368.14	657.71	83.72	5.97	1.34	2.52
L00E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
P00E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
C00E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
S04E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
HAIUROSE	.00	.00	.00	.00	.00	.00



NUMERO DE MUESTRASE P.P

VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VOLUMEN	LTM DE CONFIANZA	DESVIACION TIPICA
39.96	41.78	58.13	6.96	2.04
1.14	1.44	2.75	.25	.50
12.35	12.89	12.88	4.97	2.73
5.87	6.85	3.52	4.59	2.14
19.24	23.76	14.63	43.39	6.59
7.1	8.6	4.6	25.56	5.22
5.93	9.43	2.43	25.56	5.22
21.06	20.00	6.0	1011.65	31.80
2.82	2.80	1.60	.36	.60
1.37	1.80	.93	.40	.63
1.27	1.80	.71	.63	.80
.80	.80	.80	.80	.80
.80	.80	.80	.80	.80
.80	.80	.80	.80	.80
.32	.67	.68	.26	.51
.80	.80	.80	.80	.80
30056.67	30792.79	36120.54	2352.91.28	485.06
290.16	233.94	276.28	29.76	5.46
100.23	118.89	107.57	5.72	2.39
PORCENTAJES				

ENERGIA	LTM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LTM DE CONFIANZA	DEPRESIA	LTM DE CONFIANZA
12169.34	11424.22	111.24	12.64	43.64	96.33
532.36	224.73	3.66	4.18	1.19	1.59
3761.02	3256.41	34.60	39.45	13.49	15.41
1543.61	1078.80	14.19	12.66	5.53	7.26
5846.54	4697.14	53.78	67.47	20.97	26.35
95.18	48.54	.88	1.32	.34	.51
1885.72	730.45	16.61	26.78	6.48	10.46
6689.81	61.54	61.54	124.93	23.99	48.79
615.22	483.18	5.86	6.72	2.21	2.70
416.49	281.69	3.83	5.12	1.49	2.00
385.66	215.12	3.55	5.16	1.38	2.02
.80	.80	.80	.80	.80	.80
.80	.80	.80	.80	.80	.80
.80	.80	.80	.80	.80	.80
.80	.80	.80	.80	.80	.80
96.32	285.88	.89	1.90	.35	.74

NUMERO DE MUESTRAS= 2.0

	VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02	54.35	54.58	.13	.35
TI02	.07	2.13	.01	.04
AL203	1.72	2.73	.21	.46
FE203	4.63	14.00	15.12	3.87
FE02	1.58	4.78	4.38	2.09
MNO2	4.52	12.61	33.37	5.78
MGO2	18.88	18.81	.27	.52
CA02	4.37	6.05	2.28	1.51
MA02	4.71	8.34	2.35	1.53
K202	1.03	2.28	.17	.27
H202	1.23	2.74	1.14	1.02
LI02	.61	.60	.00	.00
SA02	.00	.00	.00	.00
CO2	.10	.00	.00	.00
HAUROSE	1.25	2.09	1.58	1.26
SO4	.00	.00	.00	.00
ENERGIAE	3139.16	31916.38	130275.88	373.70
VOLUMENE	277.15	281.03	11.91	3.45
D.ENERGIAE	113.33	117.12	7.60	2.76

PORCENTAJES

	FRECUENCIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D.ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02	16971.25	17417.23	16540.36	153.77	61.24	53.88
TI02	21.90	41.11	3.46	.56	.08	.01
AL203	532.22	744.29	326.73	6.57	1.92	2.73
FE203	1453.78	3191.77	12.83	28.19	5.25	11.71
FE02	464.71	1398.19	4.10	12.35	1.68	5.13
MNO2	1565.93	4825.17	12.76	55.56	5.22	14.77
MGO2	5676.97	6071.94	50.11	53.02	20.48	22.03
CA02	1376.57	2059.37	703.37	18.19	4.95	7.56
MA02	2118.45	2821.92	1416.99	24.93	7.61	10.36
K202	592.72	728.46	5.29	6.03	2.16	2.67
H202	417.61	874.89	3.69	7.73	1.51	3.21
LI02	.00	.00	.00	.00	.00	.00
SA02	.00	.00	.00	.00	.00	.00
CO2	.00	.00	.00	.00	.00	.00
SO4	.00	.00	.00	.00	.00	.00
HAUROSE	392.49	955.71	3.46	8.44	1.42	3.51

NUMPRO DE MUESTRAS= 36

	VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02	51.57	53.81	3.92	1.98
TI02	2.43	5.41	6.98	2.63
AI203	2.22	2.81	.28	.53
FE201	17.85	15.27	16.63	4.02
FE02	8.57	8.32	17.62	4.20
MNO	3.53	7.61	16.38	4.05
MGO	18.92	12.68	1.29	1.13
CA02	2.43	4.44	3.83	1.96
MA02	9.13	17.51	1.55	1.24
K20	1.65	2.14	.91	.96
H20	1.67	2.11	.15	.39
L10	.66	.80	.60	.80
RA0	.38	.93	.89	.94
CO2	.79	.66	.60	.80
MAI00S	.79	2.08	1.42	1.22
SO2	.60	.66	.60	.80
ENERGIA	31264.72	31025.19	340561.29	583.58
VOLUMEN	270.67	272.86	3.55	1.88
D. ENERGIA	115.53	117.94	4.64	2.15

PORCENTAJES

	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D. ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02	16122.18	17177.75	15996.18	186.78	59.56	63.46
TI02	752.69	1726.41	6.57	14.75	2.88	6.32
AI203	693.83	897.89	6.88	7.67	2.56	3.32
FE201	333.74	4874.47	28.84	41.65	12.38	18.01
FE02	1428.89	2975.27	12.37	25.42	5.28	10.00
MNO	986.36	2430.63	8.21	20.77	3.58	8.98
MGO	3376.59	3857.77	29.23	32.96	12.47	14.25
CA02	758.69	1425.34	6.57	12.66	2.86	5.47
MA02	2844.85	3353.84	24.62	28.66	18.51	17.39
K20	332.45	684.67	2.88	5.85	1.23	2.53
H20	522.12	673.11	4.52	5.75	1.93	2.49
L10	.60	.66	.60	.60	.80	.80
RA0	.38	.68	.89	.89	.94	.94
CO2	.60	.66	.60	.60	.80	.80
SO2	.60	.66	.60	.60	.80	.80
MAI00S	219.91	664.64	1.98	5.68	.81	2.86

KAERSUITTA (N=40)

NUMERO DE MUESTRA= 200

	VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	MARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02=	39.81	39.81	.00	.00
TI02=	6.05	6.05	.00	.00
AL203=	13.60	13.60	.00	.00
FE203=	5.25	5.25	.00	.00
FE0=	7.42	7.42	.00	.00
MNO=	.14	.14	.00	.00
MNO=	11.73	11.73	.00	.00
CA0=	12.05	12.05	.00	.00
MNO2=	2.51	2.51	.00	.00
K20=	1.11	1.11	.00	.00
H20=	1.17	1.17	.00	.00
RA0=	.60	.60	.00	.00
CO2=	.60	.60	.00	.00
HAFURO5=	.00	.00	.00	.00
S04=	.00	.00	.00	.00
ENERGIA=	30956.90	30956.90	.00	.00
VOLUMEN=	274.74	274.74	.00	.00
D.ENERGIA=	112.67	112.67	.00	.00

POPCENTAJES

	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D.ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02=	12076.29	12076.29	107.18	107.18	43.95	43.95
TI02=	1872.89	1872.89	16.62	16.62	6.82	6.82
AL203=	4213.14	4213.14	37.36	37.36	15.32	15.32
FE203=	1625.24	1625.24	14.42	14.42	5.92	5.92
FF0=	2297.00	2297.00	20.39	20.39	8.36	8.36
MNO=	43.34	43.34	.38	.38	.16	.16
MNO=	3631.24	3631.24	32.23	32.23	13.22	13.22
CA0=	3730.31	3730.31	33.11	33.11	13.58	13.58
MNO2=	777.02	777.02	6.90	6.90	2.83	2.83
K20=	343.62	343.62	3.05	3.05	1.25	1.25
H20=	362.20	362.20	3.21	3.21	1.32	1.32
LIO=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
RA0=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
CO2=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
S04=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
HAFURO5=	.00	.00	.00	.00	.00	.00





NUMERO DE MUESTRAS= 200

	VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02	50.00	61.72	22.11	4.70
TI02	1.03	2.75	1.73	1.32
AL203E	10.28	13.72	6.55	2.48
FE203E	2.76	5.75	4.77	2.18
FE0E	9.41	17.25	32.09	5.66
MNOE	1.12	3.34	1.63	1.16
M0E	10.75	15.19	10.22	3.20
CACE	25.42	73.78	3267.86	57.75
MAD2E	5.41	8.11	3.50	1.86
K20E	3.33	5.99	2.19	1.46
H20E	2.33	2.52	1.11	1.12
L10E	0.00	0.00	0.00	0.00
R0E	0.00	0.00	0.00	0.00
CO2E	0.00	0.00	0.00	0.00
H41UROS=	0.00	0.00	0.00	0.00
S0E	1.0	0.00	0.00	0.00
EMERGIAS	31581.77	32172.53	181609.83	4260.25
VOLUMENE	268.51	278.23	49.26	7.01
EMERGIAS	117.68	124.13	21.71	4.66

PERCENTAJES

	EMERGIAS	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	EMERGIAS	LIM DE CONFIANZA
SI02	17116.93	145.55	168.95	63.79	75.38
TI02	293.71	2.54	7.66	1.19	3.82
AL203E	3248.19	27.82	38.19	12.10	17.04
FE203E	854.29	7.26	15.95	3.18	7.12
FE0E	2971.35	25.27	47.99	11.77	21.41
MNOE	36.32	0.31	0.95	0.14	0.42
M0E	3392.20	28.89	42.26	12.66	18.86
CACE	8029.67	69.78	205.26	31.14	91.59
MAD2E	1835.32	15.59	22.54	6.83	10.06
K20E	112.12	0.95	2.76	0.42	1.23
H20E	743.75	6.32	7.92	2.77	1.13
L10E	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
R0E	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CO2E	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
S0E	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
H41UROS=	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00



NUMERO DE MUESTRAS 26

DESVIACION TIPICA

VARIANZA

LIMITES DE CONFIANZA

VALORES MEDIOS

	VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02=	51.16	51.43	0.04	0.20
TI02=	1.30	1.52	0.02	0.16
AL203=	2.31	3.07	0.34	0.58
FE203=	13.62	14.75	0.66	0.81
FE0=	14.73	22.12	2.04	5.33
WNO=	0.12	0.16	0.00	0.04
WGO=	6.31	12.76	37.15	6.10
CA0=	2.97	4.65	7.83	2.65
MA02=	5.47	6.54	0.55	0.74
K20=	1.57	1.72	0.22	0.47
H20=	2.34	3.61	0.23	0.48
L10=	0.00	0.00	0.00	0.00
RA0=	0.00	0.00	0.00	0.00
CO2=	0.00	0.00	0.00	0.00
HALUROSE	0.11	0.28	0.01	0.12
SO4=	0.00	0.00	0.00	0.00
ENERGIAE	3127.19	3204.31	397796.29	630.71
VOLUMENE	527.69	824.97	4987.11	70.62
D.ENERGIAE	114.49	117.60	5.02	2.04
PORCENTAJES				

	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D.ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02=	16231.63	16768.20	167.34	216.58	58.58	60.49
TI02=	412.45	494.11	0.25	6.44	1.89	1.79
AL203=	734.88	1000.73	7.57	13.04	2.65	3.61
FE203=	4322.83	4869.35	44.57	62.69	15.61	17.35
FE0=	4673.42	7211.15	48.18	94.00	16.87	26.01
WNO=	36.49	53.47	0.38	0.71	0.13	0.19
WGO=	1367.44	4159.14	14.14	50.22	4.93	15.00
CA0=	943.88	2167.99	9.75	28.26	3.41	7.82
MA20=	1737.06	2124.30	17.91	27.64	6.27	7.65
K20=	339.42	559.71	3.50	7.34	1.23	2.02
H20=	742.92	989.13	7.65	12.78	2.68	3.54
L10=	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
RA0=	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CO2=	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
SO4=	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
HALUROSE	36.49	91.81	0.38	1.20	0.13	0.33

\*\*\*ADMISQUITA\*\*\* (M=79)

NUMERO DE MUESTRAS= 200

VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02	59.83	14	.37
TI02	58.81	.02	.10
AL203	9.78	13.47	3.67
FE203	5.86	24.43	4.94
FE01	7.86	17.76	4.21
MNOE	.33	.01	.11
MGOE	10.24	4.93	2.01
CA0E	.13	.01	.11
M002	.33	.09	.28
K20E	.16	.02	.16
H20E	2.21	.00	.07
L10E	.00	.00	.00
PA0E	3.44	.02	.15
CO2E	.00	.00	.00
HAIUROSE	.29	.09	.09
SO4E	.00	.00	.00
ENERGIAE	32192.51	8166.80	64.54
VOLUMENE	259.17	.01	.13
P.ENERGIAE	124.32	.02	.16

PORCENTAJES

ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D.ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02	19313.57	18879.35	155.86	73.75	74.51
TI02	95.55	.26	.77	.12	.37
AL203	3139.94	25.34	38.58	12.15	10.52
FE203	1984.81	15.16	32.93	7.58	15.82
FE01	4422.75	20.35	35.51	9.77	17.06
MNOE	157.14	.85	1.26	.01	.41
MGOE	8214.91	26.51	33.75	12.73	14.22
CA0E	43.46	.35	.73	.17	.35
M002	98.19	.79	1.78	.33	.66
K20E	51.51	.41	.97	.29	.47
H20E	711.43	5.72	5.99	2.75	2.87
L10E	.00	.00	.00	.00	.00
PA0E	1195.78	8.89	9.44	4.27	4.53
CO2E	.00	.00	.00	.00	.00
SO4E	.00	.00	.00	.00	.00
HAIUROSE	62.77	53.16	.58	.24	.28

AFJM

ODONTOLOGIA (N=30)

NÚMERO DE MUESTRASE P.M

DESVIACION TIPICA

VARIANZA

LIMITES DE CONFIANZA

VALORES MEDIOS

	VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SIO2E	46.66	47.15	.59	.71
TIO2E	.46	.46	.00	.00
AL2O3E	.12	.21	.01	.11
FE2O3E	.48	1.13	.28	.44
FE0E	6.82	11.45	44.66	6.58
MNOE	37.04	46.43	156.12	12.25
MGOE	1.72	2.89	2.89	1.70
CA0E	6.17	8.91	16.85	4.10
MA0E	.00	.00	.00	.00
K2O0E	.00	.00	.00	.00
H2O0E	.00	.00	.00	.00
Li0E	.00	.00	.00	.00
BA0E	.00	.00	.00	.00
CO2E	.00	.00	.00	.00
HALUROSE	.00	.00	.00	.00
SO0E	.00	.00	.00	.00
ENERGIAE	24436.53	24462.61	6549.46	80.92
VOLUMENE	212.60	214.76	3.94	2.09
D.ENERGIAE	114.77	116.19	3.67	1.92

PERCENTAJES

	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D.ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SIO2E	1137.88	11533.36	99.24	101.25	53.55	52.37
TIO2E	.71	.71	.00	.00	.00	.00
AL2O3E	32.95	52.33	.29	.12	.15	.04
FE2O3E	118.17	277.17	1.03	2.43	.56	.00
FE0E	166.22	2696.91	14.54	24.59	7.83	2.48
MNOE	9259.23	11357.52	80.69	99.71	43.54	53.90
MGOE	412.88	737.46	3.65	6.21	1.97	3.36
CA0E	1440.56	2179.83	12.49	10.14	6.06	10.35
MA0E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
K2O0E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
H2O0E	42.13	76.06	.37	.67	.23	.36
Li0E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
BA0E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
CO2E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
SO4E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
HALUROSE	.00	.00	.00	.00	.00	.00



NUMERO DE MUESTRAS= 7.0

VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VARIANTA	DESVIACION TIPICA
S102= 46.41	47.27	64	.30
T102= .00	.00	.66	.70
A1203E .15	.09	.07	.70
FE203E .06	.23	.81	.90
FE0E 13.36	19.73	6.38	9.02
MNOE 33.87	42.16	123.69	11.12
Y60E 2.82	3.89	1.72	1.31
CA0E 2.46	3.54	2.11	1.15
M402E .03	.04	.00	.00
K20E .00	.00	.00	.00
H20E .19	.56	.06	.23
L10E .00	.00	.00	.00
R00E .00	.00	.00	.00
C02E .00	.00	.00	.00
HPIUROS= .00	.00	.00	.00
COBE .00	.00	.00	.00
ENERGIAE 24471.25	24501.85	1746.99	41.32
VOLUMENE 219.59	246.65	6.89	2.63
C.F.ENERGIAE 117.32	118.45	2.35	1.53

PERCENTAJES

ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D. ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
S102= 11495.03	11564.94	97.22	99.37	54.68	55.91
T102= .00	.00	.00	.00	.00	.00
A1203E 36.31	84.13	.31	.72	.17	.81
FE203E 219.19	303.05	1.87	3.29	1.85	.27
FE0E 3194.90	4835.42	27.23	41.55	15.32	7.81
MNOE 8287.36	10316.40	76.64	88.65	39.73	40.87
Y60E 694.79	930.04	5.89	7.99	3.31	2.15
CA0E 601.89	866.25	5.13	7.44	2.89	7.61
M402E .00	.00	.00	.00	.00	.00
K20E .00	.00	.00	.00	.00	.00
H20E 94.39	137.14	.89	1.18	.45	.25
L10E .00	.00	.00	.00	.00	.00
R00E .00	.00	.00	.00	.00	.00
C02E .00	.00	.00	.00	.00	.00
S04E .00	.00	.00	.00	.00	.00
HPIUROS= .00	.00	.00	.00	.00	.00



MOSCOVITA (M=38)

NUMERO DE MUESTRAS= 500

	VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02=	46.24	46.55	.12	.35
TI02=	.14	.12	.11	.09
AL203=	35.22	37.32	5.75	2.40
FE203=	.65	1.65	1.23	1.11
FE0=	.74	1.18	.25	.50
MNO=	.11	.25	.12	.15
WGO=	.32	.62	.12	.34
CA0=	.18	.19	.11	.12
NA02=	1.41	2.23	.87	.93
K20=	0.09	16.48	.31	.56
W20=	2.63	2.74	5.82	2.41
L10=	.00	.00	.16	.00
CO2=	.03	.04	.07	.00
HALUROSE	.03	.09	.01	.07
SOA=	.00	.00	.00	.00
ENERGIA=	2083.77	58763.81	63018.38	251.93
VOLUMEN=	292.85	288.870	44.59	6.68
D.ENERGIA=	106.03	138.46	7.65	2.77

\*\*\*\*\*

PORCENTAJES

\*\*\*\*\*

	PSICOGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D.ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02=	13995.88	13995.88	139.79	134.39	49.83	50.80
TI02=	12.53	37.38	.12	.36	.64	.13
AL203=	10509.78	11219.29	99.61	197.74	37.34	40.47
FE203=	195.12	488.85	1.25	4.69	.69	1.76
FE0=	221.84	355.27	2.09	3.41	.78	1.20
MNO=	33.43	74.80	.32	.71	.12	.27
WGO=	96.14	187.45	.91	1.88	.34	.68
CA0=	24.47	55.07	.23	.54	.69	.20
NA20=	421.30	672.19	3.99	6.44	1.50	2.42
K20=	2988.00	3150.61	28.25	30.26	10.59	11.37
H20=	794.29	1425.64	7.43	13.69	2.79	5.14
L10=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
BA0=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
CO2=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
SOA=	.00	.00	.00	.00	.00	.00
HALUROSE	9.55	26.48	.09	.27	.03	.10



NOTIA (N=38)

\*\*\*\*\*

NUMERO DE MUESTRA 06

VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02E	36.17	35.69	0.52
TI02E	3.47	2.59	1.18
AL203E	19.12	19.61	1.52
FE203E	2.31	3.55	1.63
FE0E	14.95	15.91	0.98
MNOE	11.32	12.23	1.11
MG0E	11.39	12.71	1.44
CAN0E	0.15	0.25	0.10
MA02E	0.25	0.41	0.16
K20E	8.85	8.99	0.14
H20E	2.99	5.82	2.07
LTOE	0.18	0.10	0.00
RA0E	0.01	0.01	0.00
CO2E	0.06	0.06	0.00
HAUROSE	0.26	0.88	0.22
SO4E	0.06	0.00	0.00
ENERGIAE	28794.13	28872.12	171.41
VOLUMENE	201.01	388.23	8.49
D.ENERGIAE	98.49	161.67	3.34
		95.13	

\*\*\*\*\*

PORCENTAJES

\*\*\*\*\*

ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D.ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02E	10323.01	12591.97	10175.76	35.59	37.30
TI02E	997.47	1324.59	674.68	3.42	6.66
AL203E	5201.39	5651.63	4735.76	17.83	19.84
FE203E	659.48	1624.69	298.47	2.26	3.61
FE0E	4292.73	4593.81	3994.82	14.72	16.18
MNOE	34.44	65.32	3.87	0.12	0.23
MG0E	3242.65	3673.28	2829.17	11.12	12.02
CAN0E	42.54	71.73	13.26	0.15	0.25
MA20E	71.76	117.63	26.42	0.25	0.41
K20E	2541.03	2593.64	2486.59	8.71	9.14
H20E	858.25	1448.31	275.81	2.94	5.10
LTOE	0.80	0.80	0.80	0.00	0.00
RA0E	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CO2E	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
SO4E	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
HAUROSE	75.35	137.88	13.54	0.26	0.49

ORTOSA (N=52)

NUMRO DE MUESTRAE 760

DESVIACION TIPICA

VARIANZA

LIMITE DE CONFIANZA

VALORES MEDIOS

	VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02	64.46	63.93	.47	.53
TI02	.00	.00	.00	.00
AL203	17.31	11.45	56.36	7.51
FF204	.21	.38	.05	.22
FE05	.00	.00	.00	.00
MNOE	.12	.07	.00	.06
MG0E	.01	.03	.04	.03
CAD0	.47	.68	.18	.29
MA02	3.97	5.40	3.73	1.93
V20E	10.62	12.80	8.64	2.94
H20E	.27	.41	.03	.18
LIC0	.00	.00	.00	.00
RA0E	3.92	8.65	57.80	7.60
CO2E	.07	.20	.03	.18
HAIUROSE	.00	.00	.00	.00
S00E	.00	.00	.00	.00
EMERGIAE	46216.59	46253.83	2528.13	50.28
VOLUMERE	423.16	418.12	46.30	6.80
D.ENERGIAE	100.24	107.90	3.24	1.80

PERCENTAJES

	ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D.ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02	29791.21	33331.61	29551.16	278.02	70.41	71.70
TI02	.00	.00	.00	.00	.00	.00
AL203	7861.00	13443.39	5286.83	96.65	18.58	20.96
FF204	99.64	174.18	24.61	1.61	.23	.42
FE05	.00	.00	.00	.00	.00	.00
MNOE	10.56	31.20	6.00	.29	.00	.00
MG0E	5.28	15.65	.00	.14	.01	.04
CAD0	217.22	316.25	118.35	2.93	.51	.76
MA02	1832.92	2496.31	1170.30	23.11	4.33	5.97
K20E	6989.52	5928.42	3900.24	54.81	11.60	10.15
H20E	126.77	187.23	66.49	1.73	.39	.45
LIC0	.00	.00	.00	.00	.00	.00
RA0E	1393.76	3999.88	.00	37.03	3.29	0.56
CO2E	31.03	91.93	.00	.85	.22	.00
S00E	.00	.00	.00	.00	.00	.00
HAIUROSE	.00	.00	.00	.00	.00	.00





NUMERO DE MUESTRAS R.60

VALORES MEDIOS	LIMITES DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02E	66.20	1.01	1.01
TJ02E	.89	.00	.00
AL203E	21.06	.99	.99
FF203E	.69	.11	.33
FE0E	.23	.00	.20
MM0E	.66	.00	.00
MG0E	.25	.03	.16
CA0E	1.87	.54	.74
MA20E	8.34	.27	.52
K20E	4.16	.45	.67
H20E	.41	.03	.18
L10E	.00	.00	.00
RA0E	.00	.00	.00
CO2E	.00	.00	.00
HAIUROSE	.00	.00	.00
SO2E	.00	.00	.00
ENERGIAE	46316.37	24132.99	155.35
VO:IMPNE	415.45	2.64	1.62
ENERGIAE	112.93	.58	.76

PERCENTAJES

ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	O. ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02E	37661.04	279.97	273.68	73.37	74.89
TJ02E	.00	.00	.00	.00	.00
AL203E	9752.86	83.98	87.06	22.81	23.70
FF203E	321.85	1.92	2.87	.52	.78
FE0E	184.54	.35	.93	.10	.25
MM0E	.00	.00	.00	.00	.00
MG0E	113.73	.55	1.82	.15	.28
CA0E	864.95	5.60	7.72	1.52	2.10
MA20E	3868.70	32.91	30.50	8.94	9.39
K20E	2098.21	16.76	18.73	4.55	5.10
H20E	189.49	1.17	1.69	.32	.44
L10E	.00	.00	.00	.00	.00
RA0E	.00	.00	.00	.00	.00
CO2E	.00	.00	.00	.00	.00
SO2E	.00	.00	.00	.00	.00
HAIUROSE	.00	.00	.00	.00	.00



NUMERO DE MUESTRA 2.0

VALORES MEDIOS	LIMITE DE CONFIANZA	VARIANZA	DESVIACION TIPICA
SI02= 64.14	64.41	.34	.20
TI02= .66	.66	.00	.00
AL203= 10.22	10.28	.04	.04
FE207= .14	.13	.00	.00
FE02= .00	.00	.00	.00
MG02= .00	.00	.00	.00
MG01= .00	.00	.00	.00
CA02= .13	.17	.00	.04
MA02= .08	2.70	1.53	1.24
K202= 6.54	19.36	85.54	9.25
H202= .04	.19	.00	.05
LI02= .00	.00	.00	.00
RA02= .26	.55	.04	.21
CO2E= .00	.00	.00	.00
HA0205= .00	.00	.00	.00
SO02= .00	.00	.00	.00
ENERGIA= 46273.35	46299.75	362.60	19.04
VOLUMEN= 433.55	431.53	4.74	2.18
D.ENERGIA= 106.73	107.53	.34	.58

PERCENTAJES

ENERGIA	LIM DE CONFIANZA	VOLUMEN	LIM DE CONFIANZA	D.ENERGIA	LIM DE CONFIANZA
SI02= 29679.73	29823.79	278.98	281.21	68.46	62.27
TI02= .66	.66	.00	.00	.00	.00
AL203= 9893.74	8926.04	83.33	84.17	20.51	20.30
FE207= 20.82	61.67	.20	.58	.65	.14
FE02= .35	.00	.00	.00	.00	.00
MG02= .00	.00	.00	.00	.00	.00
MG01= .00	.00	.00	.00	.00	.00
CA02= 57.64	28.56	.54	.76	.13	.19
MA02= 455.79	1250.09	4.27	11.79	1.05	2.00
K202= 3026.28	8962.80	28.35	84.51	6.98	20.02
H202= 14.23	47.97	.15	.45	.04	.11
LI02= .00	.00	.00	.00	.00	.00
RA02= 120.31	256.53	1.13	2.42	.28	.60
CO2E= .00	.00	.00	.00	.00	.00
SO02= .00	.00	.00	.00	.00	.00
HA0205= .00	.00	.00	.00	.00	.00



APENDICE II

A continuación se incluyen las salidas del programa REMICUA correspondientes a cada una de las asociaciones obtenidas y para cada uno de los cuatro equivalentes estudiados.

Este programa realiza el ajuste, por mínimos cuadrados de las rectas de regresión de y sobre x y de x sobre y, determinando los parámetros que las definen, así como la precisión de dichos parámetros y de la regresión, calculando los valores siguientes:

- . Coeficiente de correlación.
- . Nivel de significación del coeficiente de correlación.
- . Coeficiente de regresión de y sobre x y de x sobre y.
- . Constante de regresión de y sobre x y de x sobre y.
- . Límites de confianza del 95% del coeficiente de regresión y de la constante de la regresión.
- . Constante de lineabilidad, nivel F.
- . Varianza de la regresión.



JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR

OLIVERO AGUISEL-LIA IFFROTTA KREPELLITA

NUMERO DE MUESTRA= 21.0  
 T RE STUDENTE 2.005  
 VALOR MEDIO P.ENERGIA=-105.828  
 VARIANZA P.ENERGIA= 45.0157  
 DESVIACION TIPICA= 6.7161

EQUIVALENTE IONICO

EQUIVALENTE AMERICANO

EQUIVALENTE CATTIONICO

EQUIVALENTE ANIONICO

ENERGIA MEDIE -1426.7515  
 VOLUMEN MEDIO 13.5334  
 VOLUMEN MEDIO 13.5334  
 VARIANZA IVE .000117291  
 DESV TIPICAE .00416  
 -1249.2698  
 11.9495  
 .0844  
 .000223219  
 .00482  
 -1663.3742  
 15.7777  
 .0634  
 .000212168  
 .00349  
 -5043.6964  
 47.8404  
 .0209  
 .000001406  
 .00119

COEF DE CORRELACIONE .9936  
 NIVEL DE SIGNIFIC 37.9957  
 .9966  
 52.4114  
 .9878  
 27.2162  
 .9799  
 21.4260

REGIA DE REGRESION 1/V /O.ENERGIA

COEF DE REGRESIONE -1.0007  
 LIM DE CONFIANZAE .0001  
 CONST REGRESIONE .0097  
 LIM DE CONFIANZAE .1114  
 2746.957  
 .0001  
 740.724  
 .0001  
 .0002  
 .0000  
 .0028  
 .0062  
 459.072  
 .0001

REGIA DE REGRESION P.ENERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESIONE -1401.4083  
 LIM DE CONFIANZAE 55.9639  
 CONST REGRESIONE 12.8392  
 LIM DE CONFIANZAE 18.5531  
 1515.9922  
 49.1214  
 14.2132  
 20.2638  
 .623  
 1443.673  
 -1919.1122  
 147.5079  
 16.1487  
 38.0073  
 1.279  
 740.724  
 -5599.2000  
 546.9591  
 11.6116  
 45.1903  
 1.921  
 459.072

NUMERO DE MUESTRAS= 8.0  
 T DE STUDENTE= 2.447  
 VALOR MEDIO D.ENERGIA=-117.559  
 VARIANZA D.ENERGIA= 2.3761  
 DESVIACION TIPICA= 1.5415

EQUIVALENTE IONICO

EQUIVALENTE CATIONICO

EQUIVALENTE ANIONICO

EQUIVALENTE RADIACION

ENERGIA MEDIA= -158.9103  
 VOLUMEN MEDIO= 13.2806  
 VOLUMEN MEDIO= .7754  
 VARIANZA 1/V= .00000633  
 DESV TIPICA= .00380

COEF DE CORRELACION= .9503  
 NIVEL DE SIGNIF= 7.4934

COEF DE REGRESION= -.0103  
 LIM DE CONFIANZA= .0002  
 CONST REGRESION= .0177  
 LIM DE CONFIANZA= .5439

NIVEL DE LINEALIDAD FE= 55.150  
 VARIANZA DE LA REGRESION= .000

COEF DE REGRESION= -.0007  
 LIM DE CONFIANZA= .0001  
 CONST REGRESION= .0134  
 LIM DE CONFIANZA= .5006

NIVEL DE LINEALIDAD FE= 126.597  
 VARIANZA DE LA REGRESION= .000

COEF DE REGRESION= -.0003  
 LIM DE CONFIANZA= .0002  
 CONST REGRESION= .0190  
 LIM DE CONFIANZA= .6603

NIVEL DE LINEALIDAD FE= 17.934  
 VARIANZA DE LA REGRESION= .000

COEF DE REGRESION= -.0003  
 LIM DE CONFIANZA= .0001  
 CONST REGRESION= .0051  
 LIM DE CONFIANZA= .2456

NIVEL DE LINEALIDAD FE= 77.733  
 VARIANZA DE LA REGRESION= .000

RECTA DE REGRESION 1/V D.ENERGIA

RECTA DE REGRESION 1/V D.ENERGIA

RECTA DE REGRESION D.ENERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESION= -1841.5291  
 LIM DE CONFIANZA= 501.3519  
 CONST REGRESION= 21.3126  
 LIM DE CONFIANZA= 1624.7829

VARIANZA DE LA REGRESION= .266  
 NIVEL DE LINEALIDAD FE= 56.153

COEF DE REGRESION= -1405.9346  
 LIM DE CONFIANZA= 395.7507  
 CONST REGRESION= 13.4756  
 LIM DE CONFIANZA= 937.1787

VARIANZA DE LA REGRESION= .425  
 NIVEL DE LINEALIDAD FE= 126.597

COEF DE REGRESION= -220.5751  
 LIM DE CONFIANZA= 1280.9770  
 CONST REGRESION= 10.5095  
 LIM DE CONFIANZA= 2679.2557

VARIANZA DE LA REGRESION= .693  
 NIVEL DE LINEALIDAD FE= 17.934

COEF DE REGRESION= -3555.8962  
 LIM DE CONFIANZA= 986.9173  
 CONST REGRESION= 9.7862  
 LIM DE CONFIANZA= 1145.5583

VARIANZA DE LA REGRESION= .100  
 NIVEL DE LINEALIDAD FE= 77.733

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR

GRUAFIIS

NUMERO DE MUESTRA= 31.0  
 T DE STUDENTE= 2.467  
 VALOR MEDIO D.ENERGIA=-12F.967  
 VARIANZA D.ENERGIA= 65.7714  
 DESVIACION TIPICA= 8.1100

EQUIVALENTE IONICO

ENERGIA MEDIE -1572.5412  
 VOLUMEN MEDIO 10.1718  
 VOLUMEN MEDIO  
 VARIANZA DE  
 DESV. TIPICA

EQUIVALENTE ANIONICO

-1300.0627  
 10.1973  
 .0955  
 .000025894  
 .00509

EQUIVALENTE CATIONICO

-1966.0064  
 15.2442  
 .0754  
 .000011589  
 .00341

COEF DE CORRELACIONE .8975  
 NIVEL DE SIGNIFE 76.7439

.0970  
 60.2737

.9946  
 51.7223

RECTA DE REGRESION 1/V D.ENERGIA

COEF DE REGRESION - .0006  
 LIM DE CONFIANZA .0000  
 CONST REGRESION .0177  
 LIM DE CONFIANZA .0072  
 NIVEL DE LIAMFAMILIAR FE 5899.630  
 VARIANZA DE LA REGRESION .001

- .0004  
 .0077  
 .0116  
 .0763  
 1756.139  
 .170

- .0002  
 .0000  
 .0047  
 .0028  
 2675.197  
 .000

RECTA DE REGRESION D.ENERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESION -1725.4192  
 LIM DE CONFIANZA 61.2512  
 CONST REGRESION 27.3199  
 LIM DE CONFIANZA 17.7658  
 VARIANZA DE LA REGRESION .335  
 NIVEL DE LIAMFAMILIAR FE 5889.650

-1590.1945  
 48.3705  
 27.5882  
 17.6394  
 -2369.7776  
 95.3004  
 26.4864  
 22.0407  
 .521  
 1756.139

-6398.0678  
 305.1688  
 28.7139  
 26.9099  
 .730  
 2675.197

NUMERO DE MUFSTRASE 17.0  
 T DE STUDENTE 2.131  
 VALOR MEDIO G.F.ENERGIAE -135.819  
 VARIANZA G.F.ENERGIAE 3.3613  
 DESVIACION TIPICAE 1.8338

EQUIVALENTE IONICO	EQUIVALENTE AMONICO	EQUIVALENTE PANTONICO	FOLVALENTE PANICAL
*****	*****	*****	*****
ENERGIA MEDIAE -1596.3227	-1321.7427	-1083.3237	-5283.8253
VOLUMEN MEDIOE 11.8797	0.7316	14.6227	38.9034
1/VOLUMEN MEDIOE .0836	.1028	.0685	.0257
VARIANZA IONICAE 13314.768	.01311169	.000000464	.000000085
DESV TIPICAE .00187	.00106	.00068	.00029
COEF DE CORRELACIONE .9591	.9432	.9330	.9343
NIVEL DE SIGNIFICE 13.1324	13.8863	10.0422	10.1470

RECTIV DE REGRESION 1/V G.F.ENERGIA

COEF DE REGRESIONE	-.0006	-.0003	-.0001
LIM DE CONSTANZAE	.0001	.0001	.0000
CONST ACORRECCIONAE	.0258	.0214	.0055
LIM DE CONSTANZAE	.1385	.1453	.0786
NIVEL DE SIGNIFICACIONE	172.407	100.845	102.961
VARIANZA DE LA REGRESIONE	.000	.000	.000

RECTIV DE REGRESION G.F.ENERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESIONE	-1636.7477	-2511.8755	-5864.6672
LIM DE CONSTANZAE	251.1746	533.0737	1231.4500
CONST ACORRECCIONAE	30.3692	36.1955	14.0304
LIM DE CONSTANZAE	614.5919	917.7518	696.6746
VARIANZA DE LA REGRESIONE	.259	.464	.456
NIVEL DE SIGNIFICACIONE	192.829	100.845	102.961

NUMERO DE MUESTRAS 14.0  
 T DE STUDENTE 2.107  
 VALOR MEDIO D.ENERGIAE -120.648  
 VARIANZA D.ENERGIAE 11.7369  
 DESVIACION TIPICAE 3.4215

EQUIVALENTE IONICO	EQUIVALENTE ANIONICO	EQUIVALENTE CATIONICO	EQUIVALENTE RADICAL
ENERGIA MEDIA -150.613	-120.1944	-1042.8178	-5165.0216
VOLUMEN MEDIO 12.8774	19.7271	16.1032	42.8118
AVGLOWER MED 4.777	.0932	.0621	.0238
VARIANZA I/VE .00033213	.00074623	.00000221	.000000312
DESV TIPICAE .00179	.00215	.00148	.00056

COEF DE CORRECCIONE .0229	.9838	.9748	.9578
NIVEL DE SIGNIFE 11.4226	19.0377	15.1485	11.5428

RECTA DE REGRESION I/V D.ENERGIA

COEF DE REGRESIONE	-0.0006	-0.0004	-0.0002
LIN DE CONFIANZA	.0001	.0001	.0000
CONST REGRESIONE	.0186	.0111	.0045
LIN DE CONFIANZA	.0224	.0724	.0352

NIVEL DE LIMITILIDAD DE	24.1179	229.476	133.236
VARIANZA DE LA REGRESIONE	.000	.000	.000

RECTA DE REGRESION D.ENERGIA/ I/V

COEF DE REGRESIONE	-1274.144	-2248.3561	-5863.7100
LIN DE CONFIANZA	223.4888	326.0817	1116.0718
CONST REGRESIONE	29.1658	18.9737	16.3205
LIN DE CONFIANZA	248.8893	235.2177	302.3588

VARIANZA DE LA REGRESIONE	.432	.639	1.048
NIVEL DE LIMITILIDAD DE	248.129	220.476	133.236

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR

NUMERO DE MUESTRAS 9.0  
 T DE STUDENTE 2.365  
 VALOR MEDIO D.ENERGIA=-125.469  
 VARIANZA D.ENERGIA= 1.8527  
 DESVIACION TIPICA= 1.3611

EQUIVALENTE IONICO EQUIVALENTE AMONICO EQUIVALENTE CATIONICO EQUIVALENTE PANICAL

ENERGIA MEDIA -125.469  
 VOLUMEN MEDIO 13.5325  
 1/VOLUMEN MEDIO .0739  
 VARIANZA 1/V 1.131335  
 DESV TIPICA .3362

COEF DE CORRELACIONE .9290  
 NIVEL DE SIGNIF 5.7777

FACTA DE REGRESION 1/V D.ENERGIA

COEF DE REGRESIONE -.0005  
 LIM DE CONFIDANZA .0002  
 CONST REGRESIONE .6273  
 LIM DE CONFIDANZA .7311

-.0002  
 .0001  
 .0090  
 .2426

NIVEL DE LIBERABILIDAD DE .001  
 VARIANZA DE LA REGRESIONE .001

46.270  
 .001  
 FACTA DE REGRESION D.ENERGIA/ 1/V .330

FACTA DE REGRESION D.ENERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESIONE -1622.5962  
 LIM DE CONFIDANZA 551.9718  
 CONST REGRESIONE 29.5657  
 LIM DE CONFIDANZA 2319.1129

-2349.8177  
 1225.7348  
 16.8532  
 3270.2116

VARIANZA DE LA REGRESIONE .567  
 NIVEL DE LIBERABILIDAD DE 33.362

.531  
 20.907

.272  
 47.482

-4085.7442  
 32.5639  
 .0307  
 .000900064  
 .00025

.8655  
 4.5724

20.567  
 .330

5042.1026  
 1730.5295  
 29.1687  
 2289.6199

NUMERO DE MUESTRAS= 45.0  
 T DE STUDENTE 2.020  
 VALOR MEDIO D.F.ENERGIA=-121.463  
 VARIANZA D.F.ENERGIA= 7.0474  
 DESVIACION TIPICA= 2.6547

EQUIVALENTE IONICO	EQUIVALENTE ANIONICO	EQUIVALENTE CATIONICO	EQUIVALENTE RADICAL
PARCIA MEDIAE -1614.6641	-1346.4886	-2016.1718	-4041.7959
VOLUMEN MEDIO 13.2935	11.0855	16.5997	33.2759
AVOLUMEN MOLE .0752	.0912	.0602	.0301
VARIANZA 1/VE .00002319	.00002319	.00002319	.00002319
DESV TIPICAE .00121	.01152	.00093	.00051

COEF DE CORRELACIONE .9273  
 NIVEL DE SIGNIFC 14.1192

.8468  
 10.4402

.9264  
 16.1320

RECTA DE REGRESION 1/V D.F.ENERGIA

COEF DE REGRESIONE -.0004  
 LIM DE CONFIANZAE .0004  
 CONST REGRESIONE .1245  
 LIM DE CONFIANZAE .0497  
 NIVEL DE SIGNIFICALIDAD FE 199.352  
 VARIANZA DE LA REGRESIONE .000

-.0005  
 .0001  
 .0253  
 .0540

-.0002  
 .0001  
 .0242  
 .0481

-.0002  
 .0000  
 .0044  
 .0187

260.010  
 .000

106.998  
 .000

260.240  
 .000

RECTA DE REGRESION D.F.ENERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESIONE -.1285.1541  
 LIM DE CONFIANZAE 484.1541  
 CONST REGRESIONE 27.9838  
 LIM DE CONFIANZAE 27.9838  
 NIVEL DE SIGNIFICALIDAD FE 1.279  
 VARIANZA DE LA REGRESIONE 199.352

-1622.0777  
 195.9107  
 24.0021  
 157.6607

-2416.0778  
 467.4696  
 24.0021  
 274.9603

-4814.9859  
 602.9109  
 23.2358  
 160.7624

.961  
 280.010

2.049  
 106.998

1.023  
 260.240

NUMERO DE MUESTRAS 9.000  
 T DE STUDENTE 2.365  
 VALOR MEDIO D.ENERGIAE -133.646  
 VARIANZA D.ENERGIAE 55.8080  
 DESVIACION TIPICAE 7.4795

ENERGIA PROMEDIO	-1407.2161	EQUIVALENTE ANIONICO	-2136.2762	EQUIVALENTE PARTICAL	-8219.8218
VOLUMEN MEDIO	10.5204		15.9845		31.5745
VOLUMEN MEDIO	.728		.0626		.0317
VARIANZA MEDIO	.00023333		.000007220		.000002636
VARIANZA TIPICA	.00483		.00269		.00162
COEF DE CORR. LACTONE	.9987		.9789		.9989
NIVEL DE SIGNIFIC	52.2353		12.6680		55.3841

RECTA DE REGRESION 1/V / D.ENERGIA

COEF DE REGRESION	-.0006		-.0004		-.0002
LIM DE CONFIANZA	.0000		.0001		.0000
CONST REGRESION	.0067		.0155		.0027
LIM DE CONFIANZA	.0035		.0558		.0079
NIVEL DE LINEALIDAD DE	674.436		160.275		3067.394
VARIANZA DE LA REGRESION	.000		.000		.000

RECTA DE REGRESION D.ENERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESION	-1544.5553		-2721.0116		-4595.8004
LIM DE CONFIANZA	60.5226		506.3850		196.2491
CONST REGRESION	17.0434		36.6111		11.0077
LIM DE CONFIANZA	46.2721		262.2480		82.0646
VARIANZA DE LA REGRESION	.163		2.669		.145
NIVEL DE LINEALIDAD DE	674.436		160.275		3067.394



NUMERO DE MUESTRAS= 63.0  
 T DE STUDENTE= 2.660  
 VALOR MEDIO D.ENERGIA=-123.776  
 VARIANZA D.ENERGIA= 30.8823  
 DESVIACION TIPICA= 5.5572

EQUIVALENTE IONICO  
 \*\*\*\*\*  
 EQUIVALENTE AMONICO  
 \*\*\*\*\*  
 EQUIVALENTE CATIONICO  
 \*\*\*\*\*  
 EQUIVALENTE ANIONICO  
 \*\*\*\*\*

ENERGIA MEDIA=	-1629.7766	-1357.7253	-2030.1493	-4074.6585
VOLUMEN MEDIO=	13.1672	10.9692	16.0665	32.0197
1/VOLUMEN MEDIO=	.0759	.0912	.0607	.0304
VARIANZA 1/V=	.000004530	.000007638	.000002287	.000000869
DESV TIPICA=	.00213	.00276	.01151	.00093
COEF DE CORRELACION=	.9484	.9632	.9139	.9607
NIVEL DE SIGNIF=	23.3708	20.8587	17.5873	27.0241

RECTA DE REGRESION 1/V / D.ENERGIA  
 \*\*\*\*\*

COEF DE REGRESION=	-.0004	-.0005	-.0002	-.0002
LIM DE CONFIANZA=	.0000	.0000	.0000	.0000
CONST REGRESION=	.0310	.0321	.0299	.0104
LIM DE CONFIANZA=	.0145	.0166	.0132	.0056
NIVEL DE LINEABILIDAD F=	546.193	721.393	309.314	730.301
VARIANZA DE LA REGRESION=	.000	.000	.000	.000

RECTA DE REGRESION D.ENERGIA/ 1/V  
 \*\*\*\*\*

COEF DE REGRESION=	-2476.4174	-1920.8148	-3358.2482	-5725.8168
LIM DE CONFIANZA=	281.3594	191.2217	507.9188	563.5965
CONST REGRESION=	64.2994	52.2452	80.1690	50.1572
LIM DE CONFIANZA=	97.0839	73.1961	157.4906	70.9033
VARIANZA DE LA REGRESION=	3.153	2.447	5.170	2.420
NIVEL DE LINEABILIDAD F=	516.195	721.393	309.314	730.301

3FIN

NUMERO DE MUESTRAS = 8.C  
 T DE STUDENTE = 2.447  
 VALOR MEDIO D.EMERGIA = -117.87C  
 VARIANZA D.EMERGIA = 8.6547  
 DESVIACION TIPICA = 2.919

EQUIVALENTE IONICO \*\*\*\*\* EQUIVALENTE AMONICO \*\*\*\*\* EQUIVALENTE CATIONICO \*\*\*\*\* EQUIVALENTE ANIONICO \*\*\*\*\* EQUIVALENTE RADICAL \*\*\*\*\*

ENERGIA MEDIDA = 1584.2031  
 VOLUMEN MEDIO = 11.0069  
 1/VOLUMEN MEDIO = 0.0909  
 VARIANZA 1/V = 0.00103327  
 DESV TIPICA = 0.0177  
 -1297.3831  
 -2033.8288  
 17.2548  
 0.0587  
 0.00000916  
 0.00056

COEF DE CORRELACION = 0.9324  
 NIVEL DE SIGNIF = 7.5931  
 0.9316  
 6.3166  
 0.8853  
 4.6623

RECTA DE REGRESION 1/V / D.EMERGIA

COEF DE REGRESION = -0.006  
 LIM DE CONFIANZA = 0.002  
 CONST REGRESION = 0.248  
 LIM DE CONFIANZA = 0.3877  
 -0.0002  
 0.0001  
 0.0104  
 0.1621

NIVEL DE LIMFIDIDAD FE = 57.654  
 VARIANZA DE LA REGRESION = 0.333  
 30.899  
 21.737  
 39.384  
 0.000

RECTA DE REGRESION E.EMERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESION = -1551.1784  
 LIM DE CONFIANZA = 607.9166  
 CONST REGRESION = 23.3578  
 LIM DE CONFIANZA = 1089.5682  
 -3729.0915  
 1054.0408  
 23.2617  
 1071.4845

VARIANZA DE LA REGRESION = 0.952  
 NIVEL DE LIMFIDIDAD FE = 67.654  
 1.320  
 2.184  
 39.899  
 21.737  
 39.384

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR

NUMERO DE MUESTRAS= 16.C  
 T DE STUDENTE= 2.145  
 VALOR MEDIO D.ENERGIA=-110.739  
 VARIANZA D.ENERGIA= 4.8304  
 DESVIACION TIPICAE 2.2092

*****	EQUIVALENTE IGNIOR *****	EQUIVALENTE CATIONICO *****	EQUIVALENTE RADICAL *****
ENERGIA MEDIA=	-1557.2358	-1276.7432	-3069.8066
VOLUMEN MEDIA	13.3871	11.5293	27.6759
1/VOLUMEN MEDIA	.0722	.0867	.0361
VARIANZA 1/V	.000000729	.000000861	.000000147
DESVI TIPICAE	.00005	.00093	.00038
COEF DE CORRELACIONE	.844	.6350	.6322
NIVEL DE SIGNIF	5.3879	3.0758	3.0533

RECTA DE REGRESION 1/V /O.ENERGIA

*****	RECTA DE REGRESION 1/V /O.ENERGIA *****	RECTA DE REGRESION O.ENERGIA/ 1/V *****
COEF DE REGRESION	-.0003	-.0004
LIM DE CONFIDANZA	.0002	.0001
CONST REGRESION	.0572	.0155
LIM DE CONFIDANZA	.2657	.1348
NIVEL DE LIMFIDIDAD FE	24.667	74.067
VARIANZA DE LA REGRESION	.000	.000

COEF DE REGRESION	-1511.0111	-2228.8695
LIM DE CONFIDANZA	1050.3625	555.5217
CONST REGRESION	21.3974	17.0085
LIM DE CONFIDANZA	2207.4516	518.4952
VARIANZA DE LA REGRESION	3.120	.831
NIVEL DE LIMFIDIDAD FE	34.667	74.067

NUMERO DE MUESTRA 9.0  
 T DE STUDENTE 2.365  
 VALOR MEDIO D.F.MERGEDA=-119.482  
 VARIANZA D.F.MERGEDA 23.4949  
 DESVIACION TIPICA 4.8472

EFECTO APLICADO	EQUIVALENTE AMONIO	EQUIVALENTE CATIONICO	EQUIVALENTE PANTAL
*****	*****	*****	*****
EFECTO APLICADO	-133.0275	-2113.5242	-3200.0357
VOLUMEN APLICADO	11.1567	17.6890	26.7825
1/VOLUMEN APLICADO	.0896	.0565	.0373
VARIANZA TYPICA	.00309241	.00303143	.000001608
DESVIACION TIPICA	.00309	.00177	.00127
COEF DE CORRELACIONE	.9520	.9220	.9522
NIVEL DE SIGNIF	11.5017	4.3401	8.2503

RECTA DE REGRESION 1/V / D.F.MERGEDA

COEF DE REGRESION	-.0004	-.0003	-.0002
LIM DE CONFIANZA	.0002	.0001	.0001
CONST REGRESION	.0183	.0162	.0076
LIM DE CONFIANZA	.1786	.1313	.0745
NIVEL DE LINEALIDAD FE	68.003	68.107	68.067
VARIANZA DE LA REGRESION	.000	.000	.000

RECTA DE REGRESION D.F.MERGEDA / 1/V

COEF DE REGRESION	-1518.2963	-2523.1766	-3639.4928
LIM DE CONFIANZA	430.4354	941.1730	1043.2842
CONST REGRESION	15.6361	23.1545	16.4083
LIM DE CONFIANZA	407.2830	600.3401	405.8917
VARIANZA DE LA REGRESION	2.506	3.782	2.508
NIVEL DE LINEALIDAD FE	68.003	68.107	68.067

NUMERO DE MUSTRASE= 22.0  
 T DE STUDENTE= 2.000  
 VALOR MEDIO G.ENERGIA=-112.813  
 VARIANZA G.ENERGIA= 32.8999  
 DESVIACION TIPICA= 5.7358

EQUIVALENTE IONICO                      EQUIVALENTE CATIONICO                      EQUIVALENTE PASCAL  
 \*\*\*\*\*

FABRICA MEDIA                      -1022.5224                      -2022.9463                      -4075.9586  
 VOLUMEN MEDIO                      14.5829                      17.9673                      36.1301  
 VOLUMEN MEDIO                      .0295                      .0557                      .0277  
 VARIANZA IONICO                      .0000000000                      .0000000000                      .0000000000  
 DESV TIPICAE                      .0000                      .0000                      .0000

COEF DE CORRELACIONE                      .9987                      .9066                      .9893  
 NIVEL DE SIGNIFEE                      87.3390                      55.7429                      30.3770

RECTA DE REGRESION I/V /G.ENERGIA  
 \*\*\*\*\*

COEF DE REGRESIONE                      -.0004                      -.0004                      -.0002  
 LIM DE CONFIANZAE                      .0000                      .0000                      .0000  
 CONST REGRESIONE                      .0000                      .0000                      .0000  
 LIM DE CONFIANZAE                      .0000                      .0000                      .0000

NIVEL DE LIMITACION DE                      13363.152                      1107.265                      922.808  
 VARIANZA DE LA REGRESIONE                      .000                      .000                      .000

RECTA DE REGRESION G.ENERGIA/ I/V  
 \*\*\*\*\*

COEF DE REGRESIONE                      -1547.9381                      -2380.0263                      -4591.6116  
 LIM DE CONFIANZAE                      27.9309                      89.0650                      315.2008  
 CONST REGRESIONE                      16.2722                      19.6514                      14.2721  
 LIM DE CONFIANZAE                      11.4696                      25.1063                      42.7202

VARIANZA DE LA REGRESIONE                      .052                      .221                      .733  
 NIVEL DE LIMITACION DE                      13363.152                      1107.265                      922.808

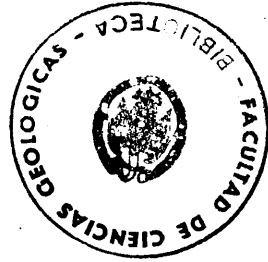
MUMERO DE MUFSTRASE 5.6  
 T DE STUDENTE 3.182  
 VALOR MEDIO C.ENERGIA=-106.638  
 VARIANZA D.ENERGIAE 7.6296  
 DESVIACION TIPICAE 2.7622

EQUIVALENTE IGROICO	EQUIVALENTE ANTONICO	EQUIVALENTE CATIONICO	EQUIVALENTE ANIONICO
RECTA DE REGRESION	RECTA DE REGRESION	RECTA DE REGRESION	RECTA DE REGRESION
COEF DE CORRELACIONE	COEF DE CORRELACIONE	COEF DE CORRELACIONE	COEF DE CORRELACIONE
NIVEL DE SIGNIFIE	NIVEL DE SIGNIFIE	NIVEL DE SIGNIFIE	NIVEL DE SIGNIFIE

RECTA DE REGRESION 1/V /D.FNEP31A

COEF DE REGRESIONE	COEF DE REGRESIONE	COEF DE REGRESIONE	COEF DE REGRESIONE
LIM DE CONFIANZAE	LIM DE CONFIANZAE	LIM DE CONFIANZAE	LIM DE CONFIANZAE
CONST REGRESIONE	CONST REGRESIONE	CONST REGRESIONE	CONST REGRESIONE
LIM DE CONFIANZAE	LIM DE CONFIANZAE	LIM DE CONFIANZAE	LIM DE CONFIANZAE
NIVEL DE LINEAFILITAE FE	NIVEL DE LINEAFILITAE FE	NIVEL DE LINEAFILITAE FE	NIVEL DE LINEAFILITAE FE
VARIANZA DE LA REGRESIONE	VARIANZA DE LA REGRESIONE	VARIANZA DE LA REGRESIONE	VARIANZA DE LA REGRESIONE

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR



NUMERO DE MUESTRAS 4.7  
 T DE STUDENTE 4.303  
 VALOR MEDIO D.ENERGIAE -88.402  
 VARIANZA D.ENERGIAE 11.1428  
 DESVIACION TIPICAE 3.3361

EQUIVALENTE IONICO	EQUIVALENTE ANIONICO	EQUIVALENTE CATIONICO	EQUIVALENTE PANTAL
*****	*****	*****	*****
ENERGIA MEDIAE -1453.6081	-1196.1951	-1852.7961	-2392.7538
VOLUMEN MEDIO 14.7721	12.1562	18.8288	24.3161
VOLUMEN MEDO .0677	.0823	.0531	.0411
VARIANZA 1/2E .000005789	.000005789	.000005789	.000001457
DESV TIPICAE .00003	.00240	.00164	.00121
COEF DE CORRELACIONE .6955	.9034	.9886	.9934
NIVEL DE SIGNIFIE 14.6974	12.2747	9.2729	12.2626

RECTA DE REGRESION 1// 1/D.ENERGIAE

COEF DE REGRESIONE	-.0007	-.0005	-.0004
LIM DE CONFIANZAS	.0003	.0002	.0001
CONST REGRESIONE	.0118	.0052	.0058
LIM DE CONFIANZAS	.4205	.3785	.2113
NIVEL DE LIMFAMILIAR FE	221.924	85.987	150.371
VARIANZA DE LA REGRESIONE	.000	.000	.000

RECTA DE REGRESION D.ENERGIAE/ 1/V

COEF DE REGRESIONE	-1379.2515	-2007.6519	-2747.3489
LIM DE CONFIANZAS	467.4402	931.6277	964.0574
CONST REGRESIONE	15.0433	8.2244	14.5826
LIM DE CONFIANZAS	785.6854	923.6928	780.4045
VARIANZA DE LA REGRESIONE	.140	.380	.219
NIVEL DE LIMFAMILIAR FE	221.934	85.987	150.371

ORTOSA HICROCLINA SANIDIMA AVORTOCLISA ADJUDOTA ALRITA

NUMERO DE MUESTRAS= 35.C  
 T DE STUDENTE 2.040  
 VALOR MEDIO D.ENERGIA=-111.736  
 VARIANZA D.ENERGIA= 9.7397  
 DESVIACION TIPICAE 2.9647

EQUIVALENTE IONICO	EQUIVALENTE AMONICO	EQUIVALENTE CATIONICO	EQUIVALENTE CATIONICO
ENERGIA MEDIA= -1777.543	-1045.2329	-2309.7650	-2890.4475
VOLUMEN MEDIO 15.7122	12.0354	21.6717	25.0708
3/VOLUMEN MEDIO .0628	.0773	.0884	.0387
VARIANZA IONICAE .000112450	.000033796	.013001407	.000000918
DESVIACION TIPICAE .00157	.00195	.00110	.00006
COEF DE CORRELACIONE .9935	.9943	.9902	.9916
NIVEL DE SIGNIFIC 53.1525	53.0359	40.6651	44.0952

RECTA DE REGRESION I/V D.ENERGIA

COEF DE REGRESION= .0007	-.0008	-.0008	-.0003
LIM DE CONFIANZAE .0010	.0011	.0011	.0009
CONST REGRESION .0042	.0043	.0041	.0028
LIM DE CONFIANZAE .0154	.0179	.0144	.0107
NIVEL DE LINEALIDAD FE 2515.274	2895.073	1653.651	1044.383
VARIANZA DE LA REGRESION .039	.000	.000	.000

RECTA DE REGRESION D.ENERGIA/ I/V

COEF DE REGRESION= -1951.6861	-1513.0772	-2475.0851	-3048.1216
LIM DE CONFIANZAE 76.5393	57.3669	124.1652	101.0423
CONST REGRESION 6.5184	5.2453	7.9979	6.8401
LIM DE CONFIANZAE 33.1389	39.0020	42.0307	37.0811
VARIANZA DE LA REGRESION .117	.102	.177	.151
NIVEL DE LINEALIDAD FE 2515.274	2895.073	1653.651	1044.383

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR



JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR

CELSIANA HYALOFANA AMORTITA

NUMERO DE MUESTRAS 7.0  
 T DE STUDENTE 2.571  
 VALOR MEDIO D.ENERGIA=142.152  
 VARIANZA D.ENERGIA= 53.3877  
 DESVIACION TIPICA= 7.3667

EQUIVALENTE IONICO

EQUIVALENTE AMONICO

EQUIVALENTE CATIONICO

EQUIVALENTE PARTICA

ENERGIA MEDIA= -1656.4753      -1346.9701      -2147.2998      -2700.5073  
 VOLUMEN MEDIO 16.2361      13.1859      21.0008      26.4360  
 VOLUMEN MEDIO 0.6317      0.758      0.476      0.378  
 VARIANZA 1/VE 0.00119564      0.0002336J      0.0010097J      0.000004743  
 DESV TIPICA= 0.0596      0.0480      0.0331      0.0260

COEF DE CORRELACIONE .9998      .9998      .9988      .9943  
 NIVEL DE SIGNIF 120.7195      179.1159      37.9326      20.9682

RECTA DE REGRESION 1/V D.ENERGIA

COEF DE REGRESIONE      -.0007      -.0004      -.0004  
 LIM DE CONFIANZA      0.003      0.003      0.000  
 CONST REGRESIONE      0.067      0.067      0.017  
 LIM DE CONFIANZA      0.055      0.169      0.255  
 NIVEL DE LINEALIDAD FE 12082.516      1438.885      835.482  
 VARIANZA DE LA REGRESIONE      .003      .003      .000

RECTA DE REGRESION D.ENERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESIONE      -1521.435J      -2341.6517      -2797.7717  
 LIM DE CONFIANZA      21.5394      150.7125      340.6906  
 CONST REGRESIONE      13.9312      0.2467      2.6798  
 LIM DE CONFIANZA      10.7148      47.2500      77.9502  
 VARIANZA DE LA REGRESIONE      .011      .222      .727  
 NIVEL DE LINEALIDAD FE 12082.516      1438.885      835.482

FIN

NUMERO DE MUESTRAS= 10.0  
 T DE STUDENT= 2.326  
 VALOR MEDIO D.F. ENERGIA= 55.196  
 VARIANZA D.F. ENERGIA= 594.1106  
 DESVIACION TIPICA= 22.4524

EQUIVALENTE IONICO EQUIVALENTE AMONICO EQUIVALENTE CATIONICO EQUIVALENTE PANTALIC

ENERGIA MEDIA= -909.0031 -909.0031 -909.0031 -909.0031  
 VOLUMEN MEDIO= 15.3558 15.3558 15.3558 15.3558  
 VOLUMEN MEDIO= 0.0651 0.0651 0.0651 0.0651  
 VARIANZA IONICO= 0.00470911 0.00470911 0.00470911 0.00470911  
 DESV TIPICA= 0.02170 0.02170 0.02170 0.02170

COEF DE CORRELACION= .9942 .9942 .9942 .9942  
 NIVEL DE SIGNIF= 26.7714 26.7714 26.7714 26.7714

RECTA DE REGRESION I / I / D.F. ENERGIA

COEF DE REGRESION= -.0010 -.0010 -.0010 -.0010  
 LIM DE SUSFIANZA= .0001 .0001 .0001 .0001  
 CONST REGRESION= .0082 .0082 .0082 .0082  
 LIM DE CONSTANZA= .0050 .0050 .0050 .0050

NIVEL DE LIMFABILIDAD DE 679.717 679.717 679.717 679.717  
 VARIANZA DE LA REGRESION= .000 .000 .000 .000

RECTA DE REGRESION D.F. ENERGIA / I / V

COEF DE REGRESION= -1028.6139 -1028.6139 -1028.6139 -1028.6139  
 LIM DE SUSFIANZA= 90.9803 90.9803 90.9803 90.9803  
 CONST REGRESION= 7.7893 7.7893 7.7893 7.7893  
 LIM DE CONSTANZA= 6.5190 6.5190 6.5190 6.5190

VARIANZA DE LA REGRESION= 6.597 6.597 6.597 6.597  
 NIVEL DE LIMFABILIDAD DE 679.717 679.717 679.717 679.717



NUMERO OF MUFSTRASE 4.6  
 T OF STUDENTE 3.182  
 VALOR MEDIO D.ENERGIA=-121.207  
 VARIANZA D.ENERGIA= 193.2221  
 DESVIACION TIPICAE 13.7521

EQUIVALENTE IONICO	EQUIVALENTE AMIACICO	EQUIVALENTE CATIONICO	EQUIVALENTE RADICAL
ENERGIA MEDIAE -1422.7352	-1189.5843	-1778.7600	-1189.5843
VOLUMEN MEDIOE 11.7474	9.4145	14.6757	9.4145
1/VOLUMEN MEDIOE .248	.1019	.0681	.1019
VARIANZA 1/VE .13162245	.00309858	.00304914	.00009485
DESVI TIPICAE .3629	.00994	.00643	.00994
COEF DE CORRELACIONE .9923	.9804	.9923	.9923
NIVEL DE SIGNIFEE 11.3473	11.3451	7.0345	11.3451
REGIA DE REGESION 1/V D.ENERGIA			
COEF DE REGESIONE -.0007	-.0007	-.0005	-.0007
LIN DE CORRELACIONE .0002	.0002	.0002	.0002
CONST REGESIONE .0124	.0152	.0130	.0152
LIN DE CORRELACIONE .1143	.1245	.1277	.1246
NIVEL DE LIMITACIONE FE 129.754	129.710	49.485	129.710
VARIANZA DE LA REGESIONE .073	.000	.000	.000
REGIA DE REGESION D.ENERGIA/ 1/V			
COEF DE REGESIONE -1374.5734	-2113.9363	-2113.9363	-1374.5734
LIN DE CORRELACIONE 308.1743	956.2175	956.2175	308.1743
CONST REGESIONE 19.1452	22.8359	22.8359	19.1452
LIN DE CORRELACIONE 234.4076	403.3610	403.3610	234.4076
VARIANZA DE LA REGESIONE 4.365	11.784	11.784	4.366
NIVEL DE LIMITACIONE FE 129.754	129.710	49.485	129.710

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR

NUMERO DE MUESTRA= 11.0  
 T DE STUDENT= 2.262  
 VALOR MEDIO D.ENERGIA=-104.151  
 VARIANZA D.ENERGIA= 30.6518  
 DESVIACION TIPICAF 6.2970

EQUIVALENTE IONICO

ENERGIA MEDIAE -1271.2810  
 VOLUMEN PROBUE 12.2299  
 VOLUMEN CEDA 1.8519  
 VARIANZA I/VE .00017793  
 DESV TIPICAE .00422

COEF DE CORRELACIONE .9918  
 NIVEL DE SIGNIFEE 23.3371

EQUIVALENTE AMONICO

-1115.1722  
 10.7073  
 .0934  
 .000023102  
 .00481

.9918  
 23.3327

EQUIVALENTE CATIONICO

-1492.5189  
 14.2343  
 .0703  
 .000014699  
 .00383

.9840  
 17.0459

EQUIVALENTE PACTAL

-1115.1722  
 10.7073  
 .0934  
 .000023102  
 .00481

.9918  
 23.3327

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR

RECTA DE REGRESION I/V D.ENERGIA

COEF DE REGRESIONE-- -.0608  
 LIM DE CONFIANZAE .0001  
 CONST REGRESIONE .0127  
 LIM DE CONFIANZAE .0382

NIVEL DE LINEALIDAD FE 543.221  
 VARIANZA DE LA REGRESIONE .000

-.0606  
 .0001  
 .0079  
 .0434

290.562  
 .000

-.0008  
 .0001  
 .0145  
 .0401

544.415  
 .000

RECTA DE REGRESION D.ENERGIA/ I/V

COEF DE REGRESIONE -1492.5129  
 LIM DE CONFIANZAE 143.6656  
 CONST REGRESIONE 17.1507  
 LIM DE CONFIANZAE 72.4675

VARIANZA D LA REGRESIONE .716  
 NIVEL DE LINEALIDAD FE 543.221

-1620.3926  
 215.0180  
 9.6811  
 87.9156

1.324  
 293.562

-1299.4200  
 125.9729  
 17.2077  
 72.4675

.716  
 544.415

NUMERO DE MUESTRAS 4.0  
 T DE STUDENTE 4.333  
 VALOR MEDIO D.E.MERGIA= -F2.569  
 VARIANZA D.E.MERGIAE 03.1491  
 DESVIACION TIPICAE 6.5688

EQUIVALENTE IONICO \*\*\*\*\*  
 FERRICIA MEDIANE -1135.529  
 VOLUMEN MEDIO 13.7243  
 1/VOLUMEN MEDIO .0726  
 VARIANZA 1/VOL .00031537  
 DESV TIPICAE .00649

COEF DE CORRELACIONE .9973  
 NIVEL DE SIGNIFIC 1%.1973

EQUIVALENTE AMONICO \*\*\*\*\*  
 -848.7397  
 10.2754  
 .0973  
 .000042124  
 .00649

.9997  
 56.1806

EQUIVALENTE PANTAL \*\*\*\*\*  
 -848.7397  
 10.2754  
 .0973  
 .000042124  
 .00649

.9997  
 56.1806

RECTA DE REGRESION 1/1 /O.MERGIA \*\*\*\*\*

COEF DE REGRESIONE -.0010  
 LIM DE SIGNIFICANZA .0001  
 CONST REGRESIONE .0157  
 LIM DE SIGNIFICANZA .0456

NIVEL DE SIGNIFICANZA 1% 3156.260  
 VARIANZA DE LA REGRESIONE .000

-.0005  
 .0001  
 .0157  
 .0456

3171.779  
 .000

-.0010  
 .0001  
 .0157  
 .0456

3156.260  
 .000

RECTA DE REGRESION D.E.MERGIA/ 1/1 \*\*\*\*\*

COEF DE REGRESIONE -1111.7695  
 LIM DE SIGNIFICANZA 77.4937  
 CONST REGRESIONE 15.8661  
 LIM DE SIGNIFICANZA 65.5072

VARIANZA DE LA REGRESIONE .041  
 NIVEL DE SIGNIFICANZA 1% 3156.260

-2121.8956  
 154.4925  
 15.7813  
 65.2345

.041  
 3171.779

-1011.7695  
 77.4937  
 15.8661  
 65.5072

.041  
 3156.260

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR



NUMERO DE MUESTRAS= 3.0  
 T DE STUDENT=12.303  
 VALOR MEDIO C. ENERGIA= -27.456  
 VARIANZA D. ENERGIA= 22.2635  
 DESVIACION TIPICA= 4.6672

EQUIVALENTE ANIONICO

EQUIVALENTE CATIONICO

EQUIVALENTE ANIONICO

EQUIVALENTE ANIONICO

ENERGIA TYPICA	-579.4315	-379.4315	-759.9730	-379.4315
VOLUMEN MEDIO	13.8198	13.8198	27.6421	13.8198
1/VOLUMEN MEDIO	.0724	.0724	.0762	.0724
VARIANZA 1/V	.000118722	.000118722	.00020652	.000118722
RESV TIPICAE	.01090	.01090	.00545	.01090

COEF DE CORRELACIONE	.9998	.9998	.9998	.9998
NIVEL DE SIGNIFIC	55.9734	55.9734	55.2803	55.9734

RECTA DE REGRESION 1/V D. ENERGIA

COEF DE REGRESION	-.0023	-.0023	-.0012	-.0023
LIM DE CONFIDANZA	.0075	.0075	.0073	.0075
CONST REGRESION	.0044	.0044	.0044	.0044
LIM DE CONFIDANZA	.0590	.0590	.0298	.0590

NIVEL DE LINEALIDAD DE	3133.022	3133.022	3055.912	3133.022
VARIANZA DE LA REGRESION	.001	.001	.001	.001

RECTA DE REGRESION D. ENERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESION	-431.7243	-431.7243	-862.4592	-431.7243
LIM DE CONFIDANZA	94.7395	94.7395	191.9460	94.7395
CONST REGRESION	3.7333	3.7333	3.7652	3.7333
LIM DE CONFIDANZA	32.6786	32.6786	33.1135	32.6786

VARIANZA DE LA REGRESION	.014	.014	.014	.014
NIVEL DE LINEALIDAD DE	3133.022	3133.022	3055.912	3133.022

NUMERO DE MUFSTRASE 5.C  
 T DE STUDENTE 3.128  
 VALOR MEDIO D.ENERGIAE -26.401  
 VARIANZA D.ENERGIAE 105.9133  
 RESVIACION TIPICAE 10.2471

EQUIVALENTE IONICO	EQUIVALENTE AMIONICO	EQUIVALENTE CATIONICO	EQUIVALENTE PANICAL
ENERGIA MEDIAE -65.2777	-465.8248	-1085.9096	-465.8248
VOLUMEN MEDIOE 22.2575	15.4479	36.9359	15.4479
1/VOLUMEN MEDIOE .445	.0631	.0271	.0671
VARIANZA 1/VF .00112254	.00132397	.00012919	.000329397
RESV TIPICAE .0159	.01815	.00359	.01815
COEF DE CORRELACIONE .9801	.9731	.8002	.9731
NIVEL DE SIGNIF 5.0279	7.3182	3.3849	7.3182

RECTA DE REGRESION 1/V D.ENERGIA

COEF DE REGRESIONE -0.0017	-0.0017	-0.0017	-0.0017
LIM DE CONSTANZAE .0007	.0007	.0003	.0007
CONST REGRESIONE .0124	.0124	.0179	.0124
LIM DE CONSTANZAE .0341	.0341	.0133	.0341
NIVEL DE LIMITILIDAD FE 73.238	53.557	11.458	53.557
VARIANZA D LA REGRESIONE .031	.021	.120	.021

RECTA DE REGRESION D.ENERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESIONE -549.4227	-2519.8756	-549.4227	-549.4227
LIM DE CONSTANZAE 234.8371	2347.0812	234.8371	234.8371
CONST REGRESIONE 5.2768	39.3636	5.2768	5.2768
LIM DE CONSTANZAE 27.4773	242.8768	27.4773	27.4773
VARIANZA DE LA REGRESIONE 5.519	29.051	7.426	7.426
NIVEL DE LIMITILIDAD FE 73.238	53.557	11.458	53.557



NUMERO DE MUESTRAS= 9.0  
 T DE STUDENTE 2.365  
 VALOR MEDIO D.ENERGIA= -27.959  
 VARIANZA D.ENERGIA= 13.3300  
 DESVIACION TIPICA= 3.6510

EQUIVALENTE IONICO \*\*\*\*\*  
 ENERGIA MEDIA -766.9791  
 VOLUMEN MEDIO 27.3931  
 VOLUMEN MOLE 0.265  
 VARIANZA I/VE 0.00006831  
 DESV TIPICAE 0.00261  
 COEF DE CORRELACIONE 0.8310  
 NIVEL DE SIGNIFIC 3.9519

EQUIVALENTE AMONICO \*\*\*\*\*  
 -766.9791  
 27.3931  
 0.265  
 0.00006831  
 0.00261  
 0.8310  
 3.9519

EQUIVALENTE CATIONICO \*\*\*\*\*  
 -766.9791  
 27.3931  
 0.265  
 0.00006831  
 0.00261  
 0.8310  
 3.9519

EQUIVALENTE PANICAL \*\*\*\*\*  
 -766.9791  
 27.3931  
 0.265  
 0.00006831  
 0.00261  
 0.8310  
 3.9519

RECTA DE REGRESION 1/V D.ENERGIA \*\*\*\*\*

COEF DE REGRESION -0.0006  
 LIM DE CONFIANZA 0.0074  
 CONST REGRESION 0.0199  
 LIM DE CONFIANZA 0.0274  
 NIVEL DE LINEALIDAD FE 15.617  
 VARIANZA DE LA REGRESION 0.000

-0.0006  
 0.0074  
 0.0199  
 0.0274  
 15.617  
 0.000

-0.0006  
 0.0074  
 0.0199  
 0.0274  
 15.617  
 0.000

-0.0006  
 0.0074  
 0.0199  
 0.0274  
 15.617  
 0.000

RECTA DE REGRESION D.ENERGIA/ 1/V \*\*\*\*\*

COEF DE REGRESION -1160.8146  
 LIM DE CONFIANZA 694.6883  
 CONST REGRESION 14.3772  
 LIM DE CONFIANZA 125.8062  
 NIVEL DE LINEALIDAD FE 4.715  
 NIVEL DE LINEALIDAD FE 15.617

-1160.8146  
 694.6883  
 14.3772  
 125.8062  
 4.715  
 15.617

-1160.8146  
 694.6883  
 14.3772  
 125.8062  
 4.715  
 15.617

-1160.8146  
 694.6883  
 14.3772  
 125.8062  
 4.715  
 15.617

NUMERO DE MUESTRAS= 4.6  
 T DE STUDENTE= 4.303  
 VALOR MEDIO O-ENERGIA= -15.354  
 VARIANZA O-ENERGIA= 3.6424  
 DESVIACION TIPICA= 1.9085

EQUIVALENTE IONICO	EQUIVALENTE ANIONICO	EQUIVALENTE CATIONICO	EQUIVALENTE RADICAL
ENERGIA FOTEA	-717.6763	-808.1846	-808.1846
VOLUMEN FOTEA	57.0924	41.7580	41.7580
1/VOLUMEN FOTEA	.0270	.0239	.0239
VARIANZA 1/V	.000003861	.000003861	.000003861
DESVI TIPICA	.00221	.00252	.00106
COEF DE CORRELACION	.9952	.9952	.9956
NIVEL DE SIGNIF	14.5471	14.4386	15.0845

RECTA DE REGRESION 1/V O-ENERGIA

COEF DE REGRESION	-.0012	-.0012	-.0010
LIN DE CONFIANZA	.0003	.0004	.0003
CONST REGRESION	.0047	.0041	.0041
LIN DE CONFIANZA	.0005	.0003	.0003
NIVEL DE LINEAS LIMITE	205.825	208.474	227.543
VARIANZA DE LA REGRESION	.000	.000	.000

RECTA DE REGRESION O-ENERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESION	-359.7971	-752.4927	-967.0798
LIN DE CONFIANZA	257.8910	228.2547	275.6687
CONST REGRESION	3.0099	3.1497	3.3051
LIN DE CONFIANZA	40.0073	46.2162	46.7215
VARIANZA DE LA REGRESION	.055	.052	.048
NIVEL DE LINEAS LIMITE	205.825	208.474	227.543

NUMERO DE MUESTRAS = 9.0  
 T DE STUDENTE = 2.365  
 VALOR MEDIO D.EMERGIA = -15.173  
 VARIANZA D.EMERGIA = 4.5237  
 DESVIACION TIPICA = 2.1222

EQUIVALENTE CATIONICO

ENERGIA MEDIA = 111.4052  
 VOLUMEN MEDIO = 52.5974  
 VOLUMEN MEDIO = 66.0766  
 VARIANZA 1/V = .07001605  
 DESV TIPICA = .00127

CORR DE CORRELACIONE = .8410  
 NIVEL DE SIGNIF = 3.8037

RECTA DE REGRESION 1/V D.EMERGIA

CORR DE REGRESIONE = -.0005  
 LIM DE CONFIDENCIA = .0074  
 CONST REGRESIONE = .0082  
 LIM DE CONFIDENCIA = .0277

NIVEL DE LINEALIDAD DE FE = 14.938  
 VARIANZA DE LA REGRESIONE = .003

RECTA DE REGRESION D.EMERGIA/ 1/V

CORR DE REGRESIONE = -1408.7357  
 LIM DE CONFIDENCIA = 810.1692  
 CONST REGRESIONE = 2.1693  
 LIM DE CONFIDENCIA = 52.2163

VARIANZA DE LA REGRESIONE = 1.507  
 NIVEL DE LINEALIDAD DE FE = 14.923

EQUIVALENTE ANIONICO

ENERGIA MEDIA = -845.7097  
 VOLUMEN MEDIO = 44.1133  
 VOLUMEN MEDIO = .0227  
 VARIANZA 1/V = .000003655  
 DESV TIPICA = .00191

CORR DE CORRELACIONE = .8410  
 NIVEL DE SIGNIF = 4.1123

RECTA DE REGRESION 1/V D.EMERGIA

CORR DE REGRESIONE = -.0005  
 LIM DE CONFIDENCIA = .0074  
 CONST REGRESIONE = .0082  
 LIM DE CONFIDENCIA = .0277

NIVEL DE LINEALIDAD DE FE = 16.853  
 VARIANZA DE LA REGRESIONE = .000

RECTA DE REGRESION D.EMERGIA/ 1/V

CORR DE REGRESIONE = -933.0872  
 LIM DE CONFIDENCIA = 537.5504  
 CONST REGRESIONE = 1.9791  
 LIM DE CONFIDENCIA = 51.4095

VARIANZA DE LA REGRESIONE = 1.511  
 NIVEL DE LINEALIDAD DE FE = 16.853

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR

REGISTRO DE CONTABILIDAD (CONTINUA) Y (RDO)

NUMERO DE CUENTAS- 9.7  
 T OF CUENTAS 2.776  
 VALOR MEDIO O.F.ENERGIA -27.497  
 VARIANZA O.F.ENERGIA 117.0302  
 RECAPITACION TITICAB 10.9554

CONTRAVALENTE PASIVO	EQUIVALENTE PASIVO	EQUIVALENTE PASIVO	EQUIVALENTE PASIVO
ENERGIA MEDIO -27.497	-1001.0070	-1456.2420	-1001.0072
VOLUMEN MEDIO 45.5004	79.0149	53.0762	39.8749
VOLUMEN MEDIO 0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
VARIANZA TITICAB 10.9554	0.0000	0.0000	0.0000
RECAPITACION TITICAB 10.9554	0.0000	0.0000	0.0000
TOTAL PASIVO	0.0000	0.0000	0.0000

CASE DE CONTABILIZACION 0.0000  
 NIVEL DE CONTABILIZACION 0.0000

REGISTRO DE CONTABILIDAD (CONTINUA) Y (RDO)

CONTRAVALENTE PASIVO	EQUIVALENTE PASIVO	EQUIVALENTE PASIVO	EQUIVALENTE PASIVO
ENERGIA MEDIO -27.497	-1001.0070	-1456.2420	-1001.0072
VOLUMEN MEDIO 45.5004	79.0149	53.0762	39.8749
VOLUMEN MEDIO 0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
VARIANZA TITICAB 10.9554	0.0000	0.0000	0.0000
RECAPITACION TITICAB 10.9554	0.0000	0.0000	0.0000
TOTAL PASIVO	0.0000	0.0000	0.0000

CASE DE CONTABILIZACION 0.0000  
 NIVEL DE CONTABILIZACION 0.0000

REGISTRO DE CONTABILIDAD (CONTINUA) Y (RDO)

CONTRAVALENTE PASIVO	EQUIVALENTE PASIVO	EQUIVALENTE PASIVO	EQUIVALENTE PASIVO
ENERGIA MEDIO -27.497	-1001.0070	-1456.2420	-1001.0072
VOLUMEN MEDIO 45.5004	79.0149	53.0762	39.8749
VOLUMEN MEDIO 0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
VARIANZA TITICAB 10.9554	0.0000	0.0000	0.0000
RECAPITACION TITICAB 10.9554	0.0000	0.0000	0.0000
TOTAL PASIVO	0.0000	0.0000	0.0000

CASE DE CONTABILIZACION 0.0000  
 NIVEL DE CONTABILIZACION 0.0000

NUMERO DE MUESTRA 5.0  
 T OF STUDENT 3.102  
 VALOR MEDIO D. ENERGIA -26.509  
 VARIANZA D. ENERGIA 145.5705  
 DESVIACION TIPICA 12.2674

EQUIVALENTE ANIONICO  
 EQUIVALENTE CATIONICO  
 EQUIVALENTE RADICAL

ENERGIA MEDIA -267.0375  
 VOLUMEN MEDIO 174.4007  
 VARIANZA MEDIO 174.4007  
 DESV. TIPICA 13.2130

COEF. DE CORRELACION .7297  
 NIVEL DE SIGNIF. 00.0379

COEF. DE REGRESION 1/V D. ENERGIA  
 NIVEL DE REGRESION 0.0682

COEF. DE REGRESION -1109.0073  
 LIM. DE CONFIANZA 124.1041  
 CONST. DE REGRESION 6.0105  
 LIM. DE CONFIANZA 4.2570

ENERGIA MEDIA -186.4706  
 VOLUMEN MEDIO 47.1787  
 VARIANZA MEDIO 47.1787  
 DESV. TIPICA 6.8686

COEF. DE CORRELACION .7297  
 NIVEL DE SIGNIF. 00.0379

COEF. DE REGRESION 1/V D. ENERGIA  
 NIVEL DE REGRESION 0.0682

COEF. DE REGRESION -1548.8450  
 LIM. DE CONFIANZA 173.1046  
 CONST. DE REGRESION 6.5705  
 LIM. DE CONFIANZA 5.3094

VARIANZA DE LA REGRESION .759  
 NIVEL DE CONFIANZA 0.0682

COEF. DE REGRESION -0.0004  
 LIM. DE CONFIANZA 0.0001  
 CONST. DE REGRESION 0.0043  
 LIM. DE CONFIANZA 0.0023

COEF. DE REGRESION 1/V D. ENERGIA  
 NIVEL DE REGRESION 0.0682

COEF. DE REGRESION -345.2770  
 LIM. DE CONFIANZA 174.1773  
 CONST. DE REGRESION 6.0673  
 LIM. DE CONFIANZA 5.0321

VARIANZA DE LA REGRESION .759  
 NIVEL DE CONFIANZA 0.0682

COEF. DE REGRESION -0.0010  
 LIM. DE CONFIANZA 0.0001  
 CONST. DE REGRESION 0.0044  
 LIM. DE CONFIANZA 0.0036

COEF. DE REGRESION 1/V D. ENERGIA  
 NIVEL DE REGRESION 0.0682

COEF. DE REGRESION 1/V D. ENERGIA  
 NIVEL DE REGRESION 0.0682

COEF. DE REGRESION 1/V D. ENERGIA  
 NIVEL DE REGRESION 0.0682

COEF. DE REGRESION 1/V D. ENERGIA  
 NIVEL DE REGRESION 0.0682

COEF. DE REGRESION 1/V D. ENERGIA  
 NIVEL DE REGRESION 0.0682

COEF. DE REGRESION 1/V D. ENERGIA  
 NIVEL DE REGRESION 0.0682

COEF. DE REGRESION 1/V D. ENERGIA  
 NIVEL DE REGRESION 0.0682

COEF. DE REGRESION 1/V D. ENERGIA  
 NIVEL DE REGRESION 0.0682

COEF. DE REGRESION 1/V D. ENERGIA  
 NIVEL DE REGRESION 0.0682

COEF. DE REGRESION 1/V D. ENERGIA  
 NIVEL DE REGRESION 0.0682

FIN

NUMERO DE MUESTRAS= 4.0  
 T DE STUDENTE 2.776  
 VALOR MEDIO D.ENERGIAE -12.872  
 VARIANZA D.ENERGIAE 12.9705  
 DESVIACION TIPICAE 3.2532

EQUIVALENTE IONICO

ENERGIA MEDIAE -597.8173  
 VOLUMEN MEDIAE 46.4414  
 INVOLUMEN MEDIE .0215  
 VARIANZA IONICAE .000003971  
 DESV TIPICAE .00199  
 COEF DE CORRELACIONE .9885  
 NIVEL DE SIGNIFIC 9.2251

EQUIVALENTE CATIONICO

ENERGIA MEDIAE -597.8173  
 VOLUMEN MEDIAE 46.4414  
 INVOLUMEN MEDIE .0215  
 VARIANZA IONICAE .000003971  
 DESV TIPICAE .00199  
 COEF DE CORRELACIONE .9885  
 NIVEL DE SIGNIFIC 9.2251

EQUIVALENTE ANIONICO

ENERGIA MEDIAE -597.8173  
 VOLUMEN MEDIAE 46.4414  
 INVOLUMEN MEDIE .0215  
 VARIANZA IONICAE .000003971  
 DESV TIPICAE .00199  
 COEF DE CORRELACIONE .9885  
 NIVEL DE SIGNIFIC 9.2251

RECTA DE REGRESION 1/V D.ENERGIA

COEF DE REGRESIONE -0.0006  
 LIM DE CONFIDANZAE .0002  
 CONST REGRESIONE .0137  
 LIM DE CONFIDANZAE .0056  
 NIVEL DE LIMITILIDAD FE 85.103  
 VARIANZA DE LA REGRESIONE .000

RECTA DE REGRESION D.ENERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESIONE -1612.6693  
 LIM DE CONFIDANZAE 485.2809  
 CONST REGRESIONE 21.8523  
 LIM DE CONFIDANZAE 65.6060  
 NIVEL DE LIMITILIDAD FE .364  
 VARIANZA DE LA REGRESIONE 85.103

NUMRO DE MUFSTRASE 4.C  
 T DE STUDENTE 4.333  
 VALOR MEDIO G.F.MERGIAE -32.096  
 VARIANZA G.F.MERGIAE 10.5574  
 DESVIACION TIPICAE 3.2452

EQUIVALENTE IONICO	EQUIVALENTE ANIONICO	EQUIVALENTE CATIONICO	EQUIVALENTE PADICAL
ENERGIA MEDIAE -754.0555	-588.4361	-1167.6671	-588.4361
VOLUMEN MEDIO 24.4469	18.3335	36.3902	18.3335
VOLUMEN MEDIO .5485	.0545	.0275	.0545
VARIANZA IONICAE .0000000000	.0000000000	.0000000000	.0000000000
DESVIACION TIPICAE .00195	.00260	.00170	.00260
COEF DE CORRELACIONE .9788	.9788	.9788	.9788
NIVEL DE STUDENTE 5.7507	6.7629	12.6387	6.7629

RECTA DE REGRESION I/V /O.F.MERGIA

COEF DE REGRESION	COEF DE REGRESION I/V /O.F.MERGIA	RECTA DE REGRESION I/V /O.F.MERGIA I/V
COEF DE REGRESIONE -0.0004	-0.0005	-0.0005
LIN DE CONFIDANZAE .0000	.0005	.0005
CONST REGRESIONE .0294	.0294	.0294
LIN DE CONFIDANZAE .0000	.0000	.0000
NIVEL DE CONFIDANZAE FE 45.737	45.737	45.737
VARIANZA DE LA REGRESIONE .000	.000	.000

COEF DE REGRESION	RECTA DE REGRESION
COEF DE REGRESIONE -1225.0278	-1225.0278
LIN DE CONFIDANZAE 779.4377	779.4377
CONST REGRESIONE 34.7229	34.7229
LIN DE CONFIDANZAE 516.5600	516.5600
NIVEL DE CONFIDANZAE FE .667	.667
VARIANZA DE LA REGRESIONE .000	.000

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR





MELANIERITA BOULARITA MORTONOSITA EPSOMITA VALINTTA

NUMERO DE MUESTRA 5.7  
 T DE STUDENTE 4.303  
 VALOR PFIJO D.FEMERDIAE -6.286  
 VARIANZA D.FEMERDIAE .1833  
 DESVIACION TIPICAE .4222

EQUIVALENTE IONICO	EQUIVALENTE CATIONICO	EQUIVALENTE ANIONICO	FOLYVALENTE PARICAI
*****	*****	*****	*****
FABRICA MFOIAE -1200.1448	-1200.1448	-1200.1448	-1200.1448
VOLUMEN METRICO 144.8436	144.8436	144.8436	144.8436
1/VOLUMEN MERE .0069	.0069	.0069	.0069
VARIANZA 1/VE .000000002	.000000002	.000000002	.000000002
DESV TIPICAE .00029	.00029	.00029	.00029
COEF DE CORRELACIONE .9708	.9708	.9708	.9708
NIVEL DE SIGNIFEE 7.0040	7.0040	7.0040	7.0040

RECTA DE REGRESION 1/V D.FEMERDIA

COEF DE REGRESIONE	-0.0006	-0.0006	-0.0006
LIM DE COMPIANZAE	.0004	.0004	.0004
CONST REGRESIONE	.0015	.0015	.0015
LIM DE COMPIANZAE	.0020	.0020	.0020
NIVEL DE LIMFALIDAD FE	49.054	49.054	49.054
VARIANZA DE LA REGRESIONE	.0003	.0003	.0003

RECTA DE REGRESION P.FEMERDIA / 1/V

COEF DE REGRESIONE	-1453.9461	-1453.9461	-1453.9461
LIM DE COMPIANZAE	893.2484	893.2484	893.2484
CONST REGRESIONE	1.7522	1.7522	1.7522
LIM DE COMPIANZAE	74.5673	74.5673	74.5673
NIVEL DE LA REGRESIONE	.014	.014	.014
NIVEL DE LIMFALIDAD FE	49.054	49.054	49.054

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR

NUMERO DE MUESTROSE 6.0  
 T DE SIGNIFICO 2.776  
 VALOR MEDIO D.ENERGIAE -8.075  
 VARIANZA D.ENERGIAE 1.6507  
 DESVIACION TIPOICAE 1.2883

EQUIVALENTE IONICO	EQUIVALENTE CATIONICO	EQUIVALENTE CATIONICO
*****	*****	*****
ENERGIA MEDIAE -723.2273	-723.2273	-723.2273
VOLUMEN MEDIOE 89.5656	89.5656	89.5656
1/VOLUMEN MEDIOE .0112	.0112	.0112
VARIANZA 1/VE .00001224	.00001224	.00001224
DESV TIPOICAE .0111	.0111	.0111
COEF DE CORRELACIONE .9264	.9264	.9264
NIVEL DE SIGNIFIE 23.4374	23.4374	23.4374

RECTA DE REGRESION 1/V D.ENERGIA

COEF DE REGRESIONE	- .0179	- .0179
LIM DE CONFIANZAE	.0001	.0001
CONST REGRESIONE	.0043	.0043
LIM DE CONFIANZAE	.0023	.0023
NIVEL DE LINEALIDAD EE	549.313	549.313
VARIANZA DE LA REGRESIONE	.000	.000

RECTA DE REGRESION D.ENERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESIONE	-1159.4962	-1159.4962
LIM DE CONFIANZAE	137.3343	137.3343
CONST REGRESIONE	4.8759	4.8759
LIM DE CONFIANZAE	6.9724	6.9724
VARIANZA DE LA REGRESIONE	.015	.015
NIVEL DE LINEALIDAD EE	549.313	549.313

FIN



NUMERO DE MUESTRAS= 5.C  
 T DE STUDENTE= 3.182  
 VALOR MEDIO D. ENERGIA= -14.792  
 VARIANZA D. ENERGIA= 4.3969  
 DESVIACION TIPICA= 2.1222

EQUIVALENTE IONICO	EQUIVALENTE ANIONICO	EQUIVALENTE CATIONICO	EQUIVALENTE PANTCAL
*****	*****	*****	*****
ENERGIA MEDIA= -577.3022	-577.3022	-577.3022	-577.3022
VALOR MEDIO= 39.0533	39.0533	39.0533	39.0533
VALOR MEDIO PEDE= .0256	.0256	.0256	.0256
VARIANZA 1/V= .00007915	.00007915	.00007915	.00007915
DESVI TIPICA= .00281	.00281	.00281	.00281
COEF DE CORRELACION= .9997	.9997	.9997	.9997
NIVEL DE SIGNIF= 72.1352	72.1352	72.1352	72.1352

RECTA DE REGRESION 1/V D. ENERGIA

COEF DE REGRESION	-0.011	-0.011
LIM DE CONFIANZA	.000	.000
CONST REGRESION	.0092	.0092
LIM DE CONFIANZA	.0022	.0022
NIVEL DE LINEALIDAD DE LA REGRESION	5203.487	5203.487
VARIANZA D. LA REGRESION	.003	.003

RECTA DE REGRESION D. ENERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESION	-898.7295	-898.7295
LIM DE CONFIANZA	39.6444	39.6444
CONST REGRESION	8.2395	8.2395
LIM DE CONFIANZA	4.6642	4.6642
VARIANZA DE LA REGRESION	.005	.005
NIVEL DE LINEALIDAD DE LA REGRESION	5203.487	5203.487

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR

ALFONSO ROSPO DE LA HALLITA

NUMERO DE MUESTRAS 7.0  
 T DE STUDENTE 2.571  
 VALOR MEDIO D.ENERGIAE -1.855  
 VARIANZA D.ENERGIAE 6.3988  
 DESVIACION TIPICAE 2.5296

EQUIVALENTE IONICO

ENERGIA MEDIEA -230.2802  
 VOLUMEN MEDIO 29.3169  
 1/VOLUMEN MEDIO 0.0341  
 VARIANZA 1/V 0.000054547  
 DESV TIPICAE 0.00739

COEF DE CORRELACIONE .8612  
 NIVEL DE SIGNIFE 3.7892

EQUIVALENTE AMONICO

ENERGIA MEDIEA -230.2802  
 VOLUMEN MEDIO 29.3169  
 1/VOLUMEN MEDIO 0.0341  
 VARIANZA 1/V 0.000054547  
 DESV TIPICAE 0.00739

COEF DE CORRELACIONE .8612  
 NIVEL DE SIGNIFE 3.7892

EQUIVALENTE CATIONICO

ENERGIA MEDIEA -230.2802  
 VOLUMEN MEDIO 29.3169  
 1/VOLUMEN MEDIO 0.0341  
 VARIANZA 1/V 0.000054547  
 DESV TIPICAE 0.00739

COEF DE CORRELACIONE .8612  
 NIVEL DE SIGNIFE 3.7892

EQUIVALENTE RADICAL

ENERGIA MEDIEA -230.2802  
 VOLUMEN MEDIO 29.3169  
 1/VOLUMEN MEDIO 0.0341  
 VARIANZA 1/V 0.000054547  
 DESV TIPICAE 0.00739

COEF DE CORRELACIONE .8612  
 NIVEL DE SIGNIFE 3.7892

RECTA DE REGRESION 1/V D.ENERGIA

COEF DE REGRESIONE -0.0025  
 LIM DE CONFIANZAE 0.0117  
 CONST REGRESIONE 0.0144  
 LIM DE CONFIANZAE 0.0185

NIVEL DE LIBERILIDAD FE 14.358  
 VARIANZA DE LA REGRESIONE .000

COEF DE REGRESIONE -0.0025  
 LIM DE CONFIANZAE 0.0117  
 CONST REGRESIONE 0.0144  
 LIM DE CONFIANZAE 0.0185

NIVEL DE LIBERILIDAD FE 14.358  
 VARIANZA DE LA REGRESIONE .000

RECTA DE REGRESION D.ENERGIA/ 1/V

COEF DE REGRESIONE -294.9729  
 LIM DE CONFIANZAE 200.1424  
 CONST REGRESIONE 2.2067  
 LIM DE CONFIANZAE 13.3891

VARIANZA DE LA REGRESIONE 1.983  
 NIVEL DE LIBERILIDAD FE 14.358

COEF DE REGRESIONE -294.9729  
 LIM DE CONFIANZAE 200.1424  
 CONST REGRESIONE 2.2067  
 LIM DE CONFIANZAE 13.3891

VARIANZA DE LA REGRESIONE 1.983  
 NIVEL DE LIBERILIDAD FE 14.358

COEF DE REGRESIONE -294.9729  
 LIM DE CONFIANZAE 200.1424  
 CONST REGRESIONE 2.2067  
 LIM DE CONFIANZAE 13.3891

VARIANZA DE LA REGRESIONE 1.983  
 NIVEL DE LIBERILIDAD FE 14.358



OPORTUNIDAD ECONOMICA INDUSTRIAL PSEUDOPARALELA CUANTIA ATACA FIF

NUMERO DE MUESTRAS 7.0  
 T DE STUDENTE 2.571  
 VALOR MEDIO D.F.MERZIAE -15.284  
 VARIANZA D.F.MERZIAE 42.2204  
 DESVIACION TIPICAE 6.4977

EQUIVALENTE IONICO

EQUIVALENTE CATIONICO

EQUIVALENTE ANIONICO

FOLIVALENTE PARICAI

EMPIRICA MEDIANE	-480.9711	-735.9115	-653.0367	-651.8430
VELOCIDAD MEDIANE	29.2447	21.6510	42.7272	42.6491
1/3 SOLUCION MEDIANE	.6242	.442	.0234	.0234
VARIANZA 1/3VE	.00135345	.00035223	.00051064	.000050972
DESV TIPICAE	.03176	.01878	.02114	.00714

COEF DE CORRELACIONE	.563	.4876	.9891	.9899
NIVEL DE SIGNIFIC	11.9517	14.0718	15.0464	15.6328

RECTA DE REGRESION 1/W /D.F.MERZIAE

COEF DE REGRESIONE	-.0024	-.0011	-.0011	-.0011
LIM DE CONFIANZAE	.0075	.0075	.0072	.0072
CONST REGRESIONE	.0026	.0026	.0068	.0068
LIM DE CONFIANZAE	.0083	.0083	.0031	.0030
NIVEL DE LIBERTAD DE	142.916	198.015	226.395	244.371
VARIANZA DE LA REGRESIONE	.001	.001	.000	.000

RECTA DE REGRESION D.F.MERZIAE / 1/W

COEF DE REGRESIONE	-341.6392	-990.2935	-900.2935	-900.2935
LIM DE CONFIANZAE	62.4194	153.8351	148.1748	148.1748
CONST REGRESIONE	.495	5.7870	5.8406	5.8406
LIM DE CONFIANZAE	3.3083	5.2051	5.0287	5.0287
VARIANZA DE LA REGRESIONE	1.719	1.795	1.016	1.016
NIVEL DE LIBERTAD DE	180.918	226.595	244.371	244.371

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR