

UNIVERSIDAD NACIONAL MICAELA BASTIDAS DE APURÍMAC
FACULTAD DE INGENIERÍA

ESCUELA ACADÉMICO PROFESIONAL DE INGENIERÍA DE MINAS



Tesis

Caracterización mineralógica de muestras de mina de sal Puca-Cachi provincia de Andahuaylas 2024, mediante la técnica de difracción de rayos X (DRX) y refinamiento de Rietveld con FullProf.

Presentado por:

Esther Salinas Serrano

Wendy Taco Bolívar

Para optar el título de Ingeniero de Minas

Abancay, Perú

2025



UNIVERSIDAD NACIONAL MICAELA BASTIDAS DE APURÍMA
FACULTAD DE INGENIERIA
ESCUELA ACADÉMICO PROFESIONAL DE INGENIERIA DE MINAS



TESIS

Caracterización Mineralógica de Muestras de Mina de Sal Puca Cachi Provincia de Andahuaylas 2024, mediante la Técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y Refinamiento de Rietveld con FullProf.

Presentado por **Esther Salinas Serrano** y **Wendy Taco Bolivar**, para optar el título de Ingeniero de Minas.

Sustentado y aprobado el 16 de julio del 2025 ante el jurado evaluador:

Presidente:



Dr. Leoncio Teófilo Carnero Carnero

Primer miembro:



Mtro. Dario Dante Sanchez Castillo

Segundo miembro:

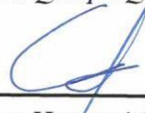


Mtro. José Adolfo Cárdenas Catalán

Asesores:



Mag. Arturo Quispe Quispe



Dr. Walquer Huacani Calsin



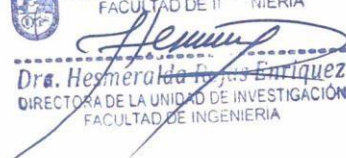
"Año de la recuperación y consolidación de la economía peruana"

CONSTANCIA DE ORIGINALIDAD N° 156-2025

La Universidad Nacional Micaela Bastidas de Apurímac, a través de la Unidad de Investigación de la Facultad de Ingeniería declara que, la Tesis intitulada: **Caracterización Mineralógica de Muestras de Mina de Sal Puca-Cachi Provincia de Andahuaylas 2024, mediante la Técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y Refinamiento de Rietveld con FullProf.**, presentado por las Bachrs: Esther Salinas Serrano y Wendy Taco Bolívar, Para optar el Título de **Ingeniero de Minas**; ha sido sometido a un mecanismo de evaluación y verificación de similitud, a través del Software Turnitin, siendo el índice de similitud ACEPTABLE de **(17%)** por lo que, cumple con los criterios de originalidad establecidos por la Universidad.

Abancay, 11 de julio del 2025

Atentamente,


Dra. Hesmérica Rojas Enriquez
DIRECTORA DE LA UNIDAD DE INVESTIGACIÓN
FACULTAD DE INGENIERÍA

C. c.
Archivo
REG. N° 501



Agradecimiento

A Dios por darme sabiduría, fuerza y ser guía en mi camino, mi madre, hijo, hermanas, hermano y familia por brindarme su apoyo incondicional que han sido mi mayor motivación, mi inspiración y gracias a ello logre cumplir mis objetivos personales y académicos.

Expreso mi gratitud a todos los docentes de Ingeniería de Minas por sus consejos y recomendaciones en mi formación profesional, a todas las personas que me brindaron su apoyo para seguir adelante y por el asesoramiento de la tesis.

Esther Salinas Serrano

Agradezco a Dios, a mi madre, a mis abuelas y todas las personas que estuvieron apoyándome, por haberme siempre motivado a nunca rendirme y darme consejos positivos para la mejora continua de mi persona y por darme el apoyo incondicional para seguir adelante. A los docentes por el apoyo incondicional en la elaboración de la tesis.

Wendy Taco Bolívar



Dedicatoria

Dedico esta tesis a dos personas que son muy importantes en mi vida, mi hijo Andréé y mi madre Aparicia; por su amor incondicional, sus buenos consejos, apoyo moral y económico, logre concluir satisfactoriamente mis estudios superiores, esta tesis es el reflejo de perseverancia, amor y dedicación de mí misma.

Esther Salinas Serrano

Quiero dedicar esta tesis para mi madre María Bolívar por su apoyo incondicional, por sus consejos, ya que gracias a ello pude concluir mi carrera profesional por último agradecerme a mí misma por no rendirme y seguir adelante.

Wendy Taco Bolívar



Caracterización mineralógica de muestras de mina de sal Puca-Cachi provincia de Andahuaylas 2024,
mediante la técnica de difracción de rayos X (DRX) y refinamiento de Rietveld con FullProf .

Línea de investigación: Minería, procesamiento de minerales.

Esta publicación está bajo una Licencia Creative Commons



ÍNDICE

	Pág.
INTRODUCCIÓN	1
RESUMEN	3
ABSTRACT	4
CAPÍTULO I	5
PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	5
1.1 Descripción del problema	5
1.2 Enunciado del problema	6
1.2.1 Problema general	6
1.2.2 Problemas específicos	6
1.3 Justificación de la investigación	6
1.4 Ubicación geográfica y política	7
1.4.1 Ubicación geográfica	8
1.4.2 Accesibilidad	8
OBJETIVOS E HIPOTESIS	11
2.1 Objetivos	11
2.1.1 Objetivo general	11
2.1.2 Objetivos específicos	11
2.2 Hipótesis	11
2.2.1 Hipótesis general	11
2.2.2 Hipótesis específicas	12
2.3 Operacionalización de variables	12
CAPÍTULO III	13
MARCO TEÓRICO REFERENCIAL	13
3.1 Antecedentes	13
3.1.1 Antecedentes internacionales	13
3.1.2 Antecedentes nacionales	14
3.1.3 Antecedentes locales	16
3.2 Aspectos generales	16
3.2.1 Importancia de la técnica de difracción de rayos x (DRX).	17
3.2.2 Importancia del software Match	17



3.2.3.	Importancia del software FullProf	17
3.2.4.	Operaciones unitarias de la mina	17
3.2.4.1.	Ventilación	17
3.2.4.2.	Carguío	17
3.2.4.3.	Acarreo y transporte	18
3.2.4.4.	Comercialización	18
3.2.5.	Geología regional	18
3.2.6.	Estratigrafía	19
3.2.6.1.	Formación Chambará	20
3.2.6.2.	Formación Aramachay	20
3.2.6.3.	Formación Condorsinga	20
3.2.6.4.	Formación Chunumayo	21
3.2.6.5.	Formación Puente	21
3.2.6.6.	Formación Cachíos	21
3.2.6.7.	Formación Labra	21
3.2.6.8.	Formación Vilquechico	21
3.2.7.	Geología local	23
3.2.8.	Aspectos litológicos	23
3.2.9.	Geología estructural	23
3.3.	Marco teórico	23
3.3.1.	Fundamentos de la difracción de rayos x (DRX)	23
3.3.1.2.	Ley de Bragg	24
3.3.2.	Aplicaciones de la DRX en la caracterización mineralógica	24
3.3.2.1.	Identificación de fases minerales	24
3.3.2.2.	Cuantificación de minerales	24
3.3.2.3.	Análisis de fases cristalinas y amorfas	25
3.3.2.4.	Determinación de estructuras cristalinas	25
3.3.2.5.	Medición de tensiones y deformaciones	25
3.3.2.6.	Estudio de texturas	25
3.3.3.	Refinamiento de Rietveld	25
3.3.3.1.	Descripción del método de refinamiento de Rietveld	25
3.3.3.2.	Uso de FullProf para el análisis de datos de DRX	26
3.3.4.	Mineralogía de las sales	28

3.3.4.1.	Métodos para la identificación y cuantificación de minerales en muestras de sal	28
3.4.	Marco conceptual	28
CAPÍTULO IV		31
METODOLOGÍA		31
4.1.	Tipo y nivel de investigación	31
4.1.1.	Tipo de investigación	31
4.1.2.	Diseño de investigación	31
4.2.	Población y muestra	31
4.2.1.	Población	32
4.2.2.	Muestra	32
4.3.	Procedimiento de la investigación	32
4.3.1.	Técnicas de recolección	32
4.3.2.	Planificación y diseño de la investigación	33
4.3.3.	Recolección de muestras	33
4.3.4.	Preparación de muestras	34
4.3.5.	Análisis de datos	37
4.3.6.	Análisis de difracción de rayos x (DRX)	38
4.3.7.	Refinamiento de Rietveld con FullProf	39
4.4.	Técnicas e instrumentos	39
4.4.1.	Difracción de rayos x (DRX)	39
4.4.2.	Refinamiento de Rietveld	40
4.4.3.	Procedimiento de software FullProf	40
4.4.4.	Configuración del programa FullProf	44
4.4.5.	Características del software FullProf	49
4.5.	Instrumento	50
CAPITULO V		51
RESULTADOS Y DISCUSIÓN		51
5.1.	Análisis de los resultados	51
5.1.1.	Identificación y cuantificación de minerales principales y secundarios	51
5.1.1.1.	Descripción de las fases minerales encontradas	53
5.2.	Aplicación del método de refinamiento de Rietveld con FullProf	57
5.2.1.	Procedimiento de refinamiento con el software FullProf : Fase principal NaCl	58
5.2.2.	Resultados del refinamiento	63
5.3.	Interpretación de los resultados mineralógicos	64

5.3.1.	Identificación de minerales clave	64
5.3.2.	Relaciones entre las fases minerales	65
5.3.3.	Implicaciones geológicas y génesis del depósito mineral	67
5.4.	Discusión de resultados	68
CAPITULO VI		70
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES		70
6.1.	Conclusiones	70
6.2.	Recomendaciones	71
REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS		72
ANEXOS		76



ÍNDICE DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1 —Registro de derecho minero INGEMMET Codigo:05006156X01.	7
Figura 2 —Ubicación de la mina Puca Cachi.	8
Figura 3 — Ruta de acceso vía terrestre Abancay – mina de sal Puca Cachi.	10
Figura 4 — Geología regional de la mina Puca Cachi.	20
Figura 5 — Cuadrángulo de Andahuaylas (28-p).	22
Figura 6 — Muestras de sal.	32
Figura 7 — Recolección de muestras.	33
Figura 8 — Plano de ubicación de la extracción de muestra de los puntos A y B.	34
Figura 9 — Proceso de molienda.	35
Figura 10 — Vaciado de muestra molida al holder.	35
Figura 11 — Tamizaje de muestra con una malla de 325, 44micrones.	36
Figura 12 — Obtención de muestra fina en la porta muestra.	36
Figura 13 — Introducción de muestra al equipo de DRX.	37
Figura 14 — Muestra dentro del DRX.	39
Figura 15 — Ventana del software Match!.	41
Figura 16 — Comparación de los picos con la base existente.	41
Figura 17 — Comparación de picos.	42
Figura 18 — Identificamos la formula, muestra, intensidad y el tipo de patrón de difracción.	43
Figura 19 — Base de datos de Crystalography.	43
Figura 20 — Búsqueda de resultados con formula NaCl.	44
Figura 21 — Ingreso al programa FullProf.	45
Figura 22 — Selección de archivo CIF.	45
Figura 23 — Configuración de título de archivo.	46
Figura 24 — Se carga datos del difractograma en extensión data.	46
Figura 25 — Información para subir los datos de la muestra.	47
Figura 26 — Abrimos el archivo que corresponde.	47
Figura 27 — Seleccionamos el archivo.	48
Figura 28 — Mejorar selección con opcion "X-Ray".	48
	5



Figura 29 — Visualización del archivo.	49
Figura 30 — Patrón de difracción de rayos X; picos de difracción en función del ángulo 2θ .	51
Figura 31 — Los diagramas muestran los picos de difracción de rayos X (DRX) de las muestras obtenidas de la Mina de Sal Puca-Cachi en función del ángulo 2θ .	52
Figura 32 — Datos fallidos que corresponde a la muestra del nivel 3470 del frente B	53
Figura 33 — Estructura cristalina de la halita, grafico generado utilizando el software Vesta.	54
Figura 34 — Estructura cristalina del cuarzo, generado usando el software Vesta.	55
Figura 35 — Estructura cristalina de la Grossita, gráfico generado utilizando el software Vesta.	56
Figura 36 — Estructura cristalina de Clorita tipo IIB, gráfico generado por el software Vesta.	57
Figura 37 — Ventana del software FullProf, utilizado para el refinamiento de Rietveld.	57
Figura 38 — Búsqueda del archivo CIF de NaCl en la base de datos de cristalografía.	58
Figura 39 — Interfaz del software FullProf; carga informacion de la fase principal NaCl..	59
Figura 40 — Búsqueda del archivo CIF de SiO ₂ (cuarzo) en la base de datos de cristalografía.	60
Figura 41 — Interfaz y ventanas del software FullProf, donde se introduce la información correspondiente a la fase 2 SiO ₂ (cuarzo).	61
Figura 42 — Búsqueda del archivo CIF (Crystallographic Information File) de CaAl ₄ O ₇ (Grossita) en la base de datos de cristalografía.	62
Figura 43 — Interfaz y ventanas del software FullProf, donde se introduce la información correspondiente a la fase 3 CaAl ₄ O ₇ (Grossita).	62
Figura 44 — Búsqueda del archivo CIF (Crystallographic Information File) de Clorita IIB (Fe, Mg, Al) ₂ SiO ₄ en la base de datos de cristalografía.	63
Figura 45 — Plano de ubicación mina de sal Puca Cachi.	81
Figura 46 — Plano horizontal de la mina de sal Puca Cachi.	81



ÍNDICE DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1 — Vértices de la Concesión Puca Cachi (ver ANEXO A).	8
Tabla 2 — Acceso vía terrestre mina Puca Cachi.	9
Tabla 3 — Operacionalización de variables.	12
Tabla 4 — Descripción de los minerales y porcentajes.	64
Tabla 5 — Matriz de consistencia.	76
Tabla 6 — Cuadro comparativo "Índice de espectrometría con masas y difracción de rayos x".	79
Tabla 7 — Ventajas y desventajas de la técnica de difracción de rayos x.	80

INTRODUCCIÓN

La mina de sal Puca Cachi es subterránea que extrae mineral no metálico (sal de roca halita), para el consumo pecuario, generando empleo en el distrito de San Antonio de Cachi provincia de Andahuaylas, siendo un valioso recurso natural. Su caracterización mineralógica proveerá información crucial para la industria minera local y la gestión sostenible de los recursos naturales.

La caracterización mineralógica de muestras geológicas es importante para comprender la composición y propiedades de los yacimientos minerales. En este caso, la utilización de la Técnica de Difracción de Rayos X (DRX) resulta fundamental al ofrecer datos detallados sobre la estructura cristalina y la composición química de los materiales. Específicamente, nos centramos en la mina de sal Puca-Cachi en la provincia de Andahuaylas. La exploración y explotación de depósitos minerales demandan un profundo entendimiento de los minerales presentes en las muestras. A través de la Técnica de Difracción de Rayos X (DRX), se pueden identificar no solo los minerales, sino también cuantificar su presencia, siendo esencial para evaluar la rentabilidad económica de la explotación.

El principal propósito de la investigación es identificar la composición mineralógica de las muestras de la mina de sal Puca-Cachi, en la investigación se emplearán las técnicas de Difracción de Rayos X (DRX) y el refinamiento de Rietveld con FullProf en el estudio de la caracterización mineralógica de las muestras de la mina, realizadas con el difractor en el laboratorio de Física de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos. La técnica de DRX se fundamenta en la interacción de los rayos X con la estructura cristalina de un material, donde la dispersión de los rayos X en la muestra revela la disposición de los átomos en la red cristalina. Se procederá a registrar los patrones de difracción generados, los cuales contienen información sobre la distancia entre planos cristalinos y la presencia de fases cristalinas específicas. Mediante la DRX, se podrá identificar los minerales presentes en las muestras de sal como halita, cuarzo, grossita y clorita tipo IIB, así como cuantificar la cantidad de cada mineral presente.

Por otro lado, el refinamiento de Rietveld es una técnica que ajusta un modelo cristalográfico a los datos experimentales de DRX, permitiendo calcular parámetros cristalográficos como las posiciones atómicas y los factores de escala para refinar el modelo. Esta metodología contribuirá a mejorar la precisión en la determinación de la composición mineralógica y la

estructura cristalina de las muestras, identificando impurezas y fases adicionales presentes en las muestras.

La combinación de la técnica de DRX y el refinamiento de Rietveld proporcionará datos detallados sobre la composición mineralógica y la estructura cristalina de las muestras de la mina de sal Puca-Cachi. Este enfoque contribuirá significativamente a los objetivos de determinar la composición mineralógica, evaluar la calidad de la sal extraída y la génesis geológica de la mina.

Actualmente, hay una carencia en la literatura científica y mineralógica referente a la mina de sal Puca-Cachi. Nuestra investigación abordará esta brecha al ofrecer datos detallados acerca de la composición mineralógica y la estructura cristalina de las muestras, aportando al conocimiento existente. Los resultados obtenidos tendrán implicaciones significativas para la explotación sostenible de la mina. En ese sentido, la industria minera local podrá emplear esta información para optimizar sus procesos de extracción y mejorar la calidad de los productos. Igualmente, la gestión sostenible de los recursos naturales se verá beneficiada al comprender mejor la génesis geológica y la distribución de minerales en la región.

El proyecto de tesis se organiza en diferentes capítulos. En el Capítulo I se plantea el problema de investigación, identificando la problemática actual en cuanto al problema de la caracterización mineralógica. En el Capítulo II se presentan los objetivos e hipótesis de la investigación, donde se detallan los aspectos que serán analizados. En el Capítulo III se desarrolla un marco teórico referencial, sustentado en investigaciones previas a nivel internacional y nacional. La metodología utilizada para esta investigación se expone en el Capítulo IV, describiendo las técnicas e instrumentos utilizados para recolectar datos relevantes. Además, se detallarán los procedimientos y la muestra empleada en el estudio. Por último, en el Capítulo V se abordará los resultados, conclusiones, donde se establecerán los pasos a seguir, se elaborarán las conclusiones y recomendaciones finales.

Por lo tanto, el presente trabajo de tesis se considera relevante y aportará conocimientos sobre el impacto de la caracterización mineralógica de muestras de mina de Sal Puca-Cachi Provincia de Andahuaylas 2024, mediante la Técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y Refinamiento de Rietveld con FullProf. Además, se espera que las recomendaciones propuestas contribuyan a mejorar la explotación del recurso minero.



RESUMEN

En el presente trabajo de investigación, titulada “Caracterización Mineralógica de Muestras de Mina de Sal Puca Cachi Provincia de Andahuaylas 2024, mediante la Técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y Refinamiento de Rietveld con Fullprof”. El objetivo general es determinar la composición mineralógica y estructural de las muestras de sal de la mina Puca Cachi, utilizando la técnica de Difracción de Rayos (DRX) y el método de refinamiento de Rietveld con software FullProf para la optimización de recursos naturales. Para este estudio se aplicó el método científico, tipo aplicada, nivel; descriptivo – explicativo, con un diseño experimental. La población son las formaciones de sal y la muestra son las áreas representativas que contengan mineral de interés, cuyos resultados obtenidos a partir de las mediciones realizadas mediante los diagramas que exhiben los picos de difracción en función del ángulo 2θ ; los cuales se han utilizado para identificar las fases minerales presentes en las muestras. Cada pico en el patrón de difracción corresponde a un conjunto específico de planos cristalinos en la muestra, lo que permite confirmar la presencia de las fases mineralógicas identificadas; fase principal, la Halita (NaCl) con un porcentaje de 91.756%, fases secundarias; Cuarzo (SiO_2) constituye el 3.522%, Grossita el 2.075%, la “Clorita tipo IIb” el 2.648% se caracteriza por la presencia de capas alternadas de octaedros y tetraedros, lo que le otorga propiedades físicas y químicas distintivas. En conclusión, aplicando la técnica de difracción de rayos X (DRX) se identificó en menores proporciones cuarzo, grossita y clorita tipo II b, lo que apunta a un entorno de formación evaporítica y ofrece un contexto geológico relevante para la región. La identificación y cuantificación de las fases minerales en las muestras revelaron que la Halita (NaCl) es el mineral predominante.

Palabras clave: *Caracterización mineralógica, difracción, rayos x y refinamiento.*



ABSTRACT

In the present research work, entitled "Mineralogical Characterization of Samples from the Puca Cachi Salt Mine, Andahuaylas Province 2024, using the X-ray Diffraction (XRD) Technique and Rietveld Refinement with Fullprof." The general objective is to determine the mineralogical and structural composition of the salt samples from the Puca Cachi mine, using the X-ray Diffraction (XRD) technique and the Rietveld refinement method with FullProf software for the optimization of natural resources. For this study, the scientific method, applied type, level; descriptive - explanatory, with an experimental design was applied. The population are the salt formations and the sample are the representative areas that contain minerals of interest, whose results obtained from the measurements made through the diagrams that exhibit the diffraction peaks as a function of the angle 2θ ; which have been used to identify the mineral phases present in the samples. Each peak in the diffraction pattern corresponds to a specific set of crystal planes in the sample, confirming the presence of the identified mineralogical phases. The primary phase is halite (NaCl), with a percentage of 91.756%, and the secondary phases are quartz (SiO_2), which constitutes 3.522%, grossite, 2.075%, and "type IIb chlorite," 2.648%, characterized by the presence of alternating layers of octahedra and tetrahedra, which gives it distinctive physical and chemical properties. In conclusion, applying the X-ray diffraction (XRD) technique, quartz, grossite, and type IIb chlorite were identified in smaller proportions, which indicates an evaporite-forming environment and provides a relevant geological context for the region. The identification and quantification of the mineral phases in the samples revealed halite (NaCl) to be the predominant mineral.

Keywords: *Mineralogical characterization, diffraction, X-rays and refinement.*



CAPÍTULO I

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1 Descripción del problema

La mina de sal Puca-Cachi, ubicada en la provincia de Andahuaylas, es una fuente valiosa de cloruro de sodio (Halita) y otros minerales asociados. Sin embargo, la falta de un análisis mineralógico detallado ha limitado la comprensión de la composición exacta y la estructura de las muestras extraídas. Esta limitación afecta directamente la eficiencia de los procesos de extracción y purificación, así como la calidad del producto final. Actualmente, la mina se explota únicamente para el consumo de ganado.

Para superar estos desafíos, se propone la caracterización mineralógica mediante la técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y el refinamiento de Rietveld con FullProf. Este enfoque permitiría identificar y cuantificar los minerales presentes, determinar su estructura cristalina y detectar impurezas. Así, se optimizaría la explotación de los recursos minerales y se mejoraría la calidad del producto.

Además, la falta de un adecuado análisis mineralógico también limita la capacidad de la mina de sal Puca-Cachi para diversificar su oferta de productos y explorar nuevos mercados. Con un mejor entendimiento de la composición de las muestras extraídas, la mina podría investigar la posibilidad de producir sales especiales para usos específicos, como la industria química, alimentaria o farmacéutica. Esto podría traducirse en una mayor rentabilidad y crecimiento del negocio.

Por lo tanto, la implementación de un método preciso de caracterización mineralógica no solo beneficiaría la eficiencia de los procesos de extracción y purificación en la mina Puca-Cachi, sino que también abriría nuevas oportunidades para diversificar sus productos y expandir su mercado. Este desafío requerirá la colaboración de expertos en el campo de la mineralogía y la minería para desarrollar e implementar un plan estratégico que aproveche al máximo el potencial de la mina de sal.



1.2 Enunciado del problema

1.2.1 Problema general

¿Cómo influye la composición mineralógica y estructural de las muestras de sal de la mina Puca - Cachi en la provincia de Andahuaylas 2024, determinada mediante la técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y el método de refinamiento de Rietveld con FullProf, en la optimización de la explotación de recursos minerales?

1.2.2 Problemas específicos

- ¿Qué minerales principales y secundarios se pueden identificar y cuantificar en las muestras de sal de la mina Puca - Cachi mediante la técnica de Difracción de Rayos X (DRX), y cómo contribuye este perfil mineralógico detallado a la comprensión y mejora de la explotación de la mina?
- ¿Cómo permite el método de refinamiento de Rietveld, utilizando el software FullProf, obtener una interpretación precisa de los patrones de Difracción de Rayos X (DRX) para determinar la estructura cristalina y las posibles impurezas en las muestras de la mina Puca – Cachi?
- ¿De qué manera el conocimiento de la composición mineralógica de la mina de sal Puca Cachi y estructura incide en mejorar los procesos de extracción y purificación del mineral?

1.3 Justificación de la investigación

La justificación de la tesis se estructura de la siguiente manera:

- **Relevancia científica y técnica:** La investigación se justifica por la necesidad de comprender a fondo la composición mineralógica de las muestras de sal de la mina Puca-Cachi, lo cual es fundamental para la optimización de los procesos de extracción y purificación. La aplicación de la técnica de DRX y el software refinamiento de Rietveld son métodos avanzados que permiten una caracterización precisa y detallada, siendo esencial para identificar y cuantificar los minerales presentes, así como para detectar impurezas que podrían afectar la calidad del producto final.
- **Impacto económico:** El estudio tiene el potencial de impactar positivamente en la

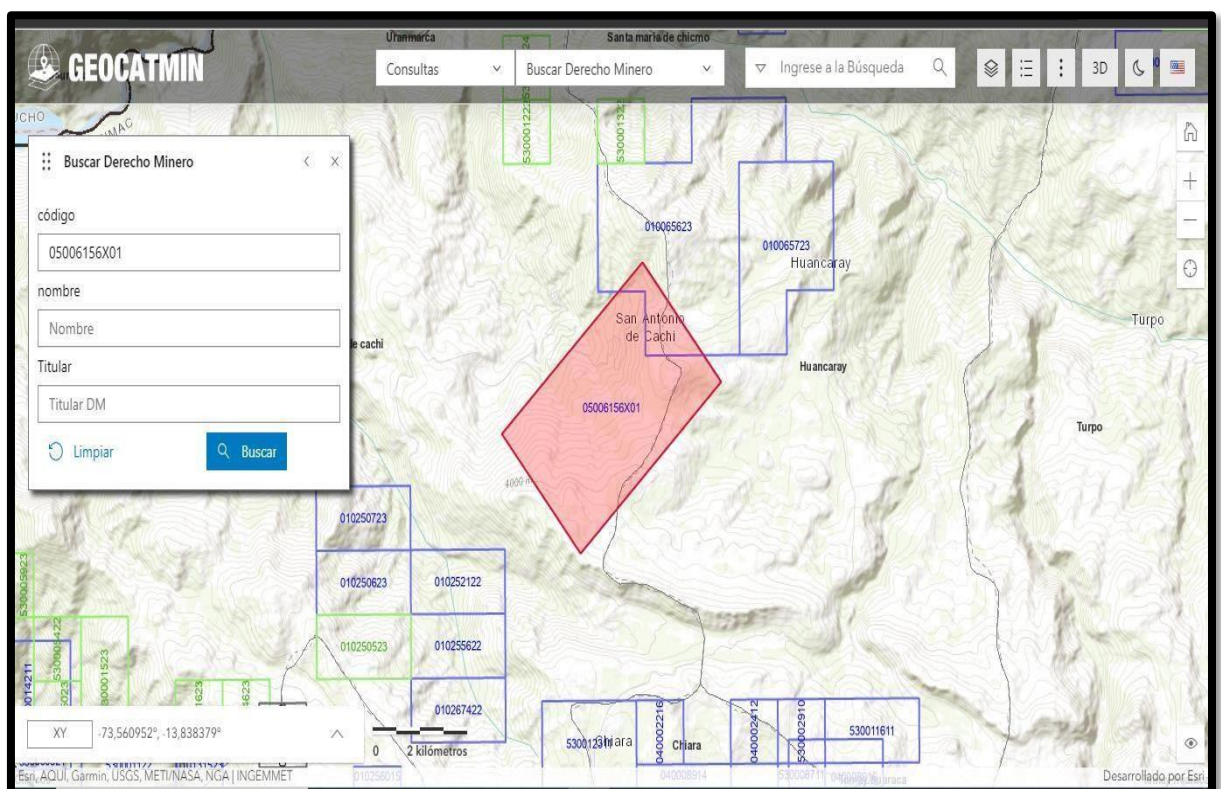


industria minera local, proporcionando información clave que puede conducir a una explotación más eficiente y sostenible de los recursos minerales.

- **Avance académico:** Este estudio ampliará el conocimiento existente en el campo de la mineralogía y la cristalografía, sirviendo como referencia para futuras investigaciones y para la formación de estudiantes y profesionales en áreas relacionadas con la geología y la minería.
- **Innovación tecnológica:** La implementación del método de refinamiento de Rietveld con FullProf representa un avance tecnológico en el análisis de muestras minerales, lo que podría inspirar la adopción de nuevas técnicas y herramientas en la industria minera de la región.

1.4 Ubicación geográfica y política

La mina de sal Puca Cachi se encuentra situada en el anexo de Cachihuancaray del distrito de San Antonio de Cachi, provincia de Andahuaylas, departamento de Apurímac, con una altitud de 3650 m.s.n.m. con registro de derecho minero por INGEMMET código: 05006156X01.



Fuente: Geocatmin accedido 03/03/24

Figura 1—Registro de derecho minero INGEMMET Código:05006156X01.

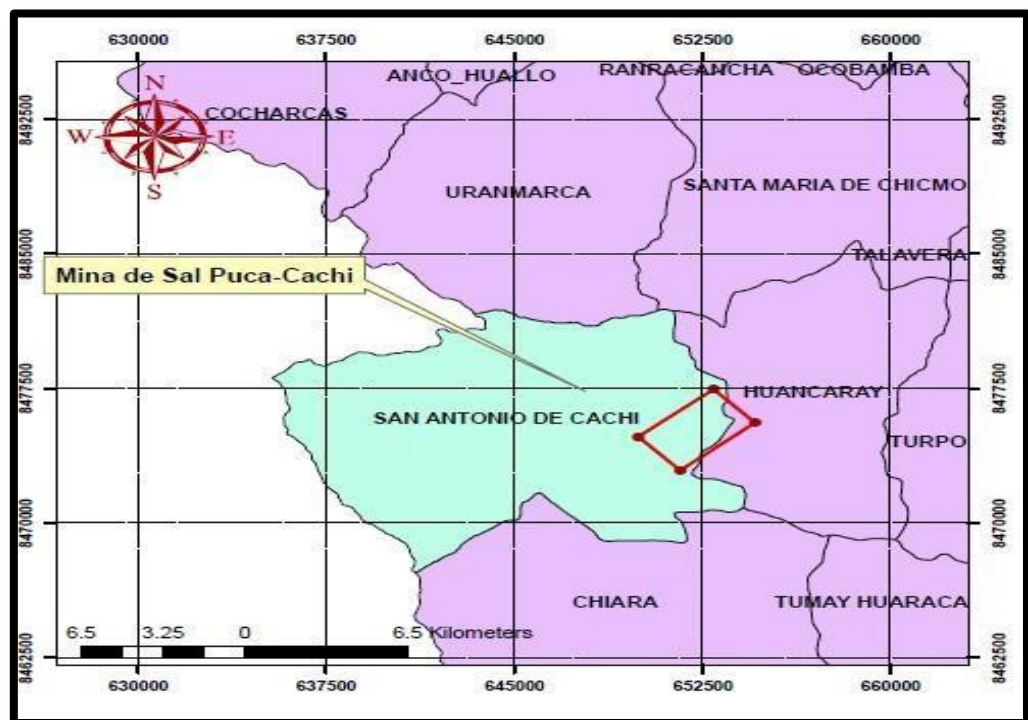
1.4.1 Ubicación geográfica

- Datum UTM (WGS84)
- Zona 18 Sur
- NORTE: 8475600
- ESTE: 641702

Tabla 1- Vértices de la Concesión Puca Cachi (ver ANEXO I).

Vértice	Coordenadas WGS84	
	Norte	Este
1	8475579,09	654599,89
2	8472923,91	651608,30
3	8474793,71	649948,85
4	8477448,89	652940,42

Fuente: elaborado con datos de la mina Puca Cachi.



Fuente: elaboración con datos de la mina de Sal Puca Cachi.

Figura 2—Ubicación de la mina Puca Cachi.

1.4.2 Accesibilidad

La accesibilidad para llegar a la mina Puca Cachi, tiene la siguiente ruta de

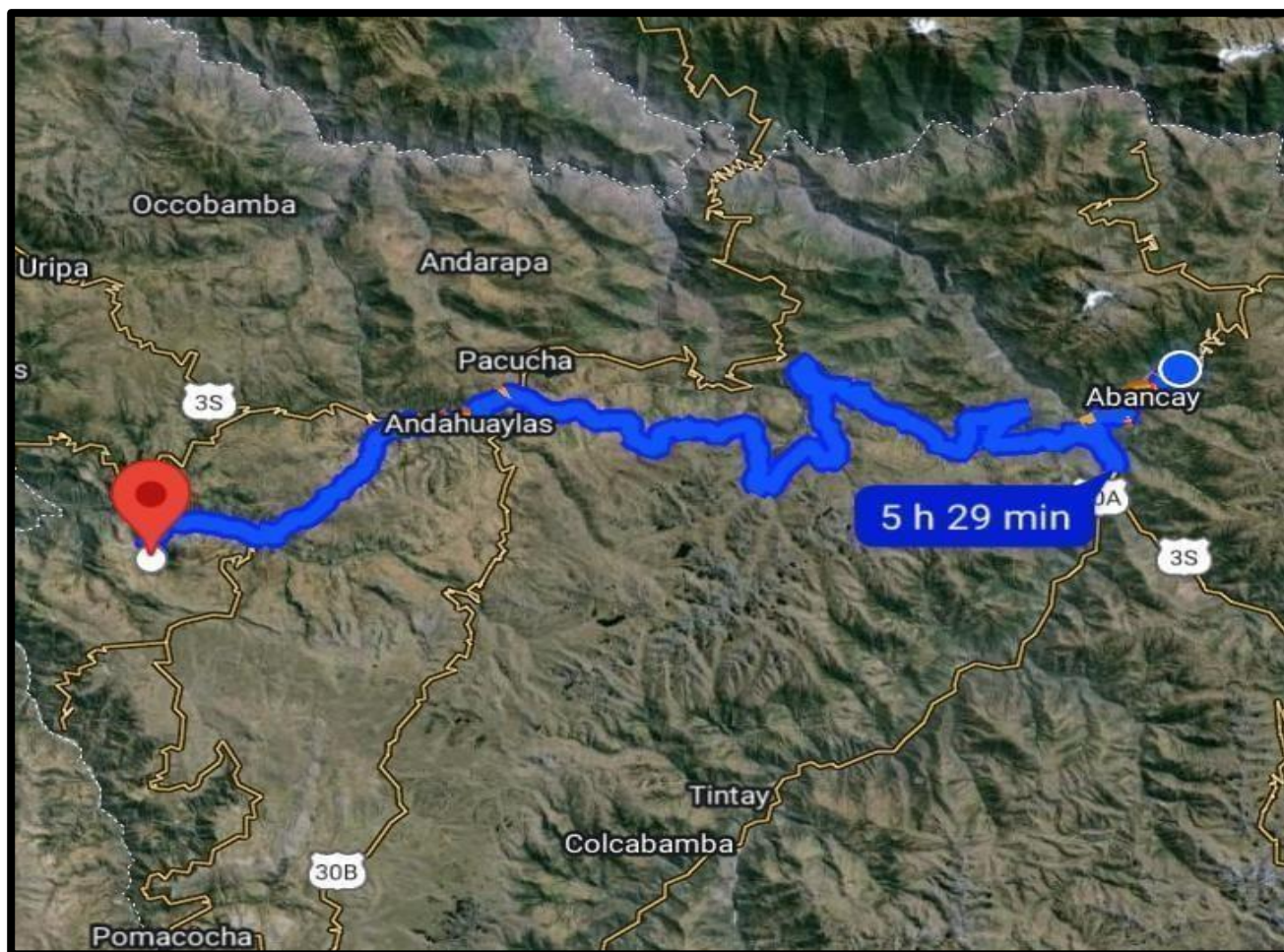


acceso y el tiempo total como se indica en la tabla N°2.

Tabla 2- Acceso vía terrestre mina Puca Cachi.

Ruta	Distancia (KM)	Tiempo (HR)	Tipo de Acceso
Abancay- Andahuaylas	149	3	Asfaltado
Andahuaylas – Huancaray	42	1.30	Trocha
Huancaray- Cachihuancaray	25	1.30	Trocha
Tiempo total de recorrido		6.00 horas	
Fuente: Elaboración propia			





Fuente: Google Maps accedido 04/03/24.

Figura 3— Ruta de acceso vía terrestre Abancay – mina de sal Puca Cachi.

CAPÍTULO II

OBJETIVOS E HIPOTESIS

2.1 Objetivos

2.1.1 Objetivo general

Determinar la composición mineralógica y estructural de las muestras de sal de la mina Puca-Cachi en la provincia de Andahuaylas 2024, utilizando la técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y el método de refinamiento de Rietveld con software FullProf para optimizar la explotación de recursos minerales.

2.1.2 Objetivos específicos

- Identificar y cuantificar los minerales principales y secundarios presentes en las muestras de sal de la mina Puca-Cachi, aplicando la técnica de Difracción de Rayos X (DRX), para establecer un perfil mineralógico detallado.
- Aplicar el método de refinamiento de Rietveld con el software FullProf para obtener una interpretación precisa de los patrones de DRX, lo que permitirá determinar la estructura cristalina y posibles impurezas en las muestras.
- Evaluar de qué manera la composición mineralógica contribuye en mejorar los procesos de extracción y purificación del mineral.

2.2. Hipótesis

2.2.1. Hipótesis general

La aplicación de la técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y el método de refinamiento de Rietveld con FullProf revelará la composición mineralógica y estructural compleja en las muestras de sal de la mina Puca- Cachi, que incluye minerales no previamente identificados, lo cual predominará| desarrollar métodos más eficientes y sostenibles para la explotación de los recursos minerales de la región.

2.2.2. Hipótesis específicas

- La identificación y cuantificación de los minerales principales y secundarios mediante DRX en las muestras de sal de la mina Puca-Cachi muestra una predominancia de halita (NaCl), acompañada de diversos minerales de sulfato y cloruro, lo que proporcionará un entendimiento integral de la calidad y la pureza de la sal, facilitando así la implementación de técnicas de extracción y procesamiento más selectivas y eficientes.
- El uso del método de refinamiento de Rietveld con el software FullProf permitirá una caracterización detallada de la estructura cristalina de los minerales en las muestras de sal de la mina Puca-Cachi, revelando la presencia de impurezas específicas y variaciones estructurales que, una vez identificadas, mejorarán significativamente la eficiencia de los métodos de extracción y purificación mineral.
- Con el conocimiento de la composición mineralógica de la sal de la mina Puca Cachi mejoraran significativamente la eficiencia de los métodos de extracción y purificación del mineral.

2.3. Operacionalización de variables

Tabla 3- Operacionalización de variables.

	Indicadores	Índice
Variable independiente: Técnica de Difracción de Rayos X (DRX).	1.1. Granulometría. 1.2. Tiempo de molienda.	m m mi n
Variable dependiente: Caracterización Mineralógica de muestras de Mina de Sal Puca-Cachi Provincia de Andahuaylas.	2.1. Intensidad de los picos de difracción. 2.2. Índices de bondad de ajuste del refinamiento.	Rwp Rp, χ^2
Fuente: Elaboración propia.		



CAPÍTULO III

MARCO TEÓRICO REFERENCIAL

3.1. Antecedentes

3.1.1. Antecedentes internacionales

Según CAMPBELL(2001), en su trabajo de tesis (Evidencia de la tendencia de la halita), los resultados más significativos obtenidos en el estudio sobre las inclusiones sólidas de halita en cuarzo de las Montañas Capitán, indican que las composiciones analizadas de halita en las muestras presentan un rango de totales que varía desde el 92.6% hasta el 97.3%, con un promedio del 95.7% y una desviación estándar de 1.9%. Además, se destacan que las inclusiones sólidas de halita corresponden a composiciones de aproximadamente 80-90 mol% de NaCl, lo que está alineado con las tendencias observadas en otros depósitos minerales. Esto proporciona evidencia de que las inclusiones de fluidos son una muestra de un proceso geológico significativo asociado a la precipitación de halita en entornos hidrotermales.

Por otro lado, VERA (2016), en su tesis titulada “Aplicación del método de difracción de rayos X para la identificación y cuantificación de minerales de alteración hidrotermal en las concesiones mineras del proyecto La Bonita - Sucumbíos”, realizada en la Escuela Superior Politécnica del Litoral, Guayaquil, Ecuador, establece un precedente significativo en el campo de la geología minera. La investigación se centró en la identificación y cuantificación de minerales de alteración hidrotermal en 32 muestras recolectadas en las concesiones mineras, donde se observaron rocas con alteraciones hidrotermales visibles a lo largo de la carretera. Utilizando la difracción de rayos X (DRX), una técnica analítica valiosa para el estudio mineralógico, esta investigación proporcionó una base para determinar el tipo predominante de alteración hidrotermal en diferentes zonas, apoyándose inicialmente en una descripción macroscópica de las muestras.

Otro estudio realizado por SANCHEZ (2018), tuvo como objetivo principal el (Análisis mineralógico y multielemental de la ceniza volcánica, producto de la

erupción del Cotopaxi en 2015, por difracción de rayos x (DRX) y espectrometría de masas con plasma acoplado inductivamente (ICP-MS) y sus posibles aplicaciones e impactos). Se emplearon dos técnicas analíticas: la difracción de rayos X (XRD) y la espectrometría de masas con plasma acoplado inductivamente (ICP-MS) para analizar las muestras. Los resultados del análisis por ICP-MS revelaron concentraciones significativas de aluminio, azufre, hierro, calcio, magnesio, titanio, metales alcalinos y alcalinotérreos, que son característicos de una composición andesítica. Mediante el análisis por XRD, se identificaron los minerales mayoritarios presentes en la fase cristalina de la ceniza. Estos incluyen plagioclasas, ortoclasas y óxidos de silicio (cristobalina). Además, se encontraron minerales minoritarios, como óxidos de hierro (magnetita, hematita y maghemita), yeso, dolomita y mayenita.

También RODRIGUEZ (2022), en su tesis titulada "Montevive: la desconocida y estratégica mina de celestina de la cuenca Granada 2022", reveló que esta es la mayor reserva de Europa de mineral de estroncio de alto valor económico. La mina actualmente enfrenta un desafío debido a la gran cantidad de relaves generados por la clasificación manual en seco del mineral de celestina de alta ley durante los primeros años de la minería. Para mejorar la concentración y la recuperación del mineral, se utilizaron diversas técnicas analíticas; microscopía óptica, microscopía electrónica, rayos X, fluorescencia de rayos X y difracción de rayos X, para caracterizar completamente la morfología, microestructura, química y mineralogía del mineral. Se descubrió que el mineral de baja ley está compuesto por cristales prismáticos de celestina que reemplazan una matriz de calcita microcristalina, junto con otros minerales minoritarios como estroncianita, dolomita, cuarzo y diversas arcillas. Mediante un método de concentración basado en molienda y separación por tamaño, se logró recuperar una mayor cantidad de celestina en las fracciones más gruesas, lo que demostró ser un enfoque económico y respetuoso con el medio ambiente.

3.1.2. Antecedentes nacionales

En la investigación de ARCE (2023), presentada en su tesis "Estudio de pretratamiento de mineral refractario de oro con altos contenidos de sulfuros de hierro (piritosos) mediante tostación oxidante: caracterización por difracción de rayos X, variación de temperatura, tiempo y tamaño de partícula" de la



Universidad Nacional de San Agustín de Arequipa, se aborda la problemática de los minerales auríferos conocidos como refractarios. La tesis propone que, antes de la lixiviación por cianuración, es esencial realizar un pretratamiento a estos minerales, utilizando métodos como la lixiviación a presión, biohidrometalurgia o tostación. El estudio se enfoca en la tostación oxidante como técnica de pretratamiento, con el objetivo de definir parámetros óptimos de operación que puedan ser implementados tanto por Mineros Artesanales (MA) como por Pequeños Mineros (PM) en el procesamiento de sus minerales refractarios.

Según QUILLE (2006), en su estudio "Caracterización de arcillas de la provincia de Morropon por técnicas físicas y químicas", el análisis de Difracción de Rayos X en las muestras de tierra de Chulucanas reveló la presencia predominante de cuarzo, seguido por albita y algunos minerales arcillosos, sin grandes diferencias entre ellos. Además, al aplicar la microscopía electrónica de barrido (MEB), se pudo determinar la presencia de compuestos químicos en cada muestra, destacando una mayor presencia de alúmina y óxido de silicio, lo que sugiere que las muestras de arcilla no poseen mucha plasticidad. Por otro lado, la espectroscopia Mössbauer (EM) permitió determinar los parámetros Mössbauer de las muestras, mostrando un bajo contenido de hierro, lo cual es un aspecto favorable para la fabricación de cuerpos cerámicos blancos.

También HUAYPAR (2012), en su estudio (Aplicación de la técnica de difracción de rayos x (DRX) en la industria minera, menciona sobre la aplicación de la técnica de difracción de rayos x (DRX) en una industria minera, es relevante y fundamental. Esta herramienta analítica permite la identificación y cuantificación de especies minerales en muestras de polvo, proporcionando datos cruciales sobre su estructura cristalina. La contribución de la DRX es vital para comprender las propiedades y el comportamiento de los minerales en diversos procesos industriales.

Por otro lado, MELGAREJO et al., (2010), menciona que la técnica de caracterización mineral y su aplicación en exploración y explotación minera proporcionan un resumen de las principales técnicas analíticas utilizadas en la caracterización mineral, así como su aplicación en la exploración y explotación minera. Estos autores dividen las técnicas en dos grupos. El primero, conocido como "técnicas convencionales", incluye la difracción de rayos X en polvo y



DRX cuantitativo, la microscopía electrónica de barrido-espectroscopía de rayos X por dispersión de energía (SEM-EDS), el cátodo luminiscencia y el microanálisis de sonda electrónica (EPMA). Por otro lado, el segundo grupo abarca las “técnicas no convencionales”, que son menos utilizadas y más costosas e incluyen la Emisión de Rayos X Inducida por Partículas (Micro-PIXE), la Espectrometría de Masas de Iones Secundarios (SIMS) y la Espectrometría de Masas por Plasma Acoplado Inductivamente-Ablación con Láser (LA-ICP-MS).

3.1.3. Antecedentes locales

En el estudio presentado a la Universidad Nacional Micaela Bastidas de Apurímac por ACOSTA (2018) “Selección del método de explotación para el yacimiento minero salinas Cachihuancaray por la asociación de mineros artesanales Puca Cachi, 2018” el objetivo principal de esta investigación es la selección del método de explotación apropiado al aplicar el método numérico de Nicholas para el yacimiento minero Salinas Cachihuancaray por la asociación de Mineros Artesanales Puca Cachi, 2018. Por ello se desarrolló una evaluación geomecánica propuesta por Nicholas, valorando los parámetros de forma, potencia, inclinación y distribución de leyes.

Por otro lado, CHAVEZ (2018), en su tesis “Geología y exploración del prospecto Skarn de Fe (Au) de Pitumarca-Andahuaylas Apurímac”, llega a la conclusión de que la mineralización, está controlada por una falla de contacto de rumbo SW-NE, por el cual circularon soluciones hidrotermales depositando, cobre en las zonas de mayor temperatura (SW del prospecto), se identifica la calcopirita y bornita primaria. Esta mineralización se forma debido a que no hubo mayor circulación de aguas hidrotermales (fase del sistema Posgrado). En el sector NE, que corresponde a la parte central del prospecto, la temperatura fue menor depositándose minerales de metales básicos como esfalerita, galena (observados muy esporádicamente).

3.2. Aspectos generales

La Mina de sal Puca Cachi está ubicada en el distrito de San Antonio de Cachi en la provincia de Andahuaylas, abarca 1000 ha de extensión en concesión, el equipo técnico y todo el personal de la asociación de mineros artesanales Puca Cachi a realizado trabajos de exploración en la mina, descubriendo un cuerpo mineralizado de



halita de baja a buena calidad en forma de manto.

La mina trabaja de manera artesanal-convencional: piqueo en banco de mineral; este proceso se realiza en las cámaras de producción realizando el piqueo horizontal a una altura lo más cómoda posible para el trabajador minero con una profundidad de 80cm a 1m, este piqueo de los bancos se realiza en los contornos del que será extraído, con el objetivo de posteriormente realizar la perforación y los bloques tengan una mejor caída.

3.2.1. Importancia de la técnica de difracción de rayos X (DRX)

La técnica de DRX es una herramienta analítica fundamental en la caracterización de minerales, especialmente en la identificación de fases cristalinas determinación de estructuras cristalinas, dicha técnica ni es destructiva y proporciona resultados precisos y confiables.

3.2.2. Importancia del software Match

Match es un software de identificación de fases cristalinas presentes en una muestra que se utiliza en la difracción de rayos x, su uso no es complicado de aplicar y también proporciona resultados precisos en la identificación de fases cristalinas.

3.2.3. Importancia del software FullProf

FullProf es un software de refinamiento de estructuras cristalinas que se utiliza en la técnica de difracción de rayos x, software proporciona resultados precisos y confiables y permite refinar estructuras cristalinas complejas y obtener información detallada.

3.2.4. Operaciones unitarias de la mina

3.2.4.1. Ventilación

Según GLOSARIO (2001), es una operación encargada de poder transportar aire fresco y puro a los frentes de explotación y evacuar de ellos el aire viciado o enrarecido, indicando que la ventilación de la mina es natural.

3.2.4.2. Carguío

Según GLOSARIO (2001) indica que es una operación que se realiza después del arranque y que consiste en colocar el material en un medio de transporte, ya sea manual o mecánico. Este proceso es efectuado

de manera manual de las diferentes cámaras al carrito minero tipo U con una capacidad de 200 kg.

3.2.4.3. Acarreo y transporte

Según GLOSARIO (2001), el acarreo se refiere al transporte de corta distancia de minerales. El transporte en general implica el movimiento de personas o mercancías de un lugar a otro, utilizando diversos medios.

3.2.4.4. Comercialización

Según GLOSARIO (2001), el termino de comercialización en minería es un proceso de compraventa de minerales o de cualquier producto resultante de la actividad minera. Una vez trasladado el mineral a la bocamina, se realiza el debido pesado para la posterior venta, donde vienen al mismo lugar compradores de roca de sal, la visita por parte de los clientes es de un promedio aproximado de 3 a 4 veces por mes.

3.2.5. Geología regional

INGEMMET (2003) El sistema geológico catastral minero (Geocadmin) define como una zona en estudio una sección transversal al alineamiento andino, indicando en unidad geomorfológica de oeste a este, cordillera occidental. Formada por gruesas sucesiones de rocas volcánicas y sedimentarias de edad cenozoica.

El proyecto minero de sal Puca Cachi de la concesión minera Salinas de Cachihuancaray se compara tanto con el antiguo cuenca occidental peruano, comenzó a individualizarse en el jurásico inferior con el inicio del recodo volcánico chocolate (190-170 Ma), y su carga sedimentaria con carbonatos, turbiditas y silico-clásticos hasta el cretácico inferior. Ya en el cretácico superior, las zonas de frente de agua empiezan a elevarse lo cual la sedimentación en la tierra firme es cada vez más trascendente.

Según INGEMMET (2010), la tectónica del Cretácico Superior crea los empujes Cincha-Lluta y Tapacocha - Conchao-Cocachacra que tienen hacia la vergencia este.

La desfiguración se desplaza hacia el E y durante el Eoceno son los marcos de emisión Cusco-Lagunillas-Mañazo en el sur, que cabalgan sobre el Altiplano



occidental. Esta zona está caracterizada por graves movimientos volcánicos conectados con las curvas volcánicas cenozoicas que son: Toquepala-Tantará (75-55 Ma), Challaviento-Llama (55-42 Ma), Anta Pativilca (42-30 Ma), Tacaza-Calamarca (30-24 Ma), Huaylillas-Palca-Sillapaca Calipuy (24-10 Ma), Barroso inferior-Negritos (10-3 Ma), Barroso superior (3 1 Ma) y Curva frontal (1ma) .

La tectónica del Cretácico superior ocasiona lo que es el cabalgamiento Cincha-Lluta y Tapacocha-Conchao-Cocachacra que tienen vergencia al este. La deformación migra hacia el E y durante el Eoceno son los sistemas de fallas Cusco-Lagunillas Mañazo en el sur, Marañón en el norte, que cabalgan sobre el Altiplano Occidental. El dominio está caracterizado por la intensa actividad volcánica relacionado a los arcos volcánicos cenozoicos denominados: Toquepala-Tantará (75-55 Ma), Challaviento-Llama (55-42 Ma), Anta-Pativilca (42-30 Ma), Tacaza Calamarca (30-24 Ma), Huaylillas-Palca-Sillapaca-Calipuy (24-10 Ma), Barroso inferior-Negritos (10-3 Ma), Barroso superior (3-1 Ma) y Arco Frontal (1ma). Sus magmas de los arcos son calcoalcalinos y las firmas de sus elementos traza son típicas de subducción y se observan variaciones con el tiempo de los elementos traza como Sm/Yb y Sr/Y.

3.2.6. Estratigrafía

Las unidades litoestratigráficas en orden cronológico que van entre mesozoico-cenozoico: en la Cordillera Occidental, los arreglos mesozoicos van desde el Triásico Superior hasta el Jurásico Inferior, esencialmente el Encuentro Pucará, separado por F(GMMG, 1968) en los desarrollos Chambará, Aramachay y Condorsinga.



Fuente: Extraído de Ingemmet (GEOCATMIN), accedido 15/05/24.

Figura 4– Geología regional de la mina Puca Cachi.

3.2.6.1. Formación Chambará

Se conforma por calizas tenues en capas medias, con intercalaciones de chert.

3.2.6.2. Formación Aramachay

Es un horizonte direccional que trabaja con la separación de las partes calcáreas del encuentro Pucará. Se compone de calizas arenosas y negruzcas, periódicamente bituminosas, intercaladas con areniscas calcáreas y calizas silíceas oscuras que se diferencian con la tonalidad más clara de los desarrollos subyacentes y suprayacentes.

3.2.6.3. Formación Condorsinga

Formado por una gruesa sucesión de rocas calcáreas delineadas con

algunos esquistos de chert.

3.2.6.4. Formación Chunumayo

Compuesto por las calizas oscuras en capas delgadas para ciertas margas y capas calcáreo-arenosas de color crema. Se encuentra sobre el arreglo Pucará en contacto concordante y debajo del arreglo Yura en una relación similar, sus afloramientos en el espacio de interés son disminuidos, restringiéndose al SO y hacia el este de la laguna mareal de Pacucha. Sus piedras que lo conforman en este acopio están compuestas por cuarzenitas, areniscas, pizarras y calizas. A la luz de sus atributos litológicos y algunas pruebas fósiles, se han separado 5 unidades topográficas, que son los desarrollos Puente, Cachíos, Labra

3.2.6.5. Formación Puente

Está compuesto por cuarcitas y areniscas de color claro, intercalado con escasos niveles centimétricos de lutitas oscuras.

3.2.6.6. Formación Cachíos

Compuesto de lutitas oscuras negras, girando inconsistentemente con capas endebles de areniscas tenues con potencia hacia la parte superior.

3.2.6.7. Formación Labra

Se compone de cuarzoarenitas blanco-grisáceas con tonos verde amarillentos, sustituidas por niveles esquistosos.

3.2.6.8. Formación Vilquechico

Formado por limolitas calcáreas amarillas, areniscas cuarzosas y arcosas de grano medio de color blanco grisáceo, intercaladas con limolitas cubiertas, calizas superpuestas de color verdoso a violáceo y lutitas tenues.

3.2.6.9. Formación Ausangate

Conformado por pizarras, limolitas, limolitas recubiertas de color marrón rosado, que al final se intercambian con capas gruesas de areniscas de color terroso. Los afloramientos de este desarrollo se han percibido generalmente hacia el norte y SE de la sábana de

Andahuaylas; una de sus mejores aperturas es en la vertiente de Atapra, que se encuentra al norte de la localidad de Pacobamba. Termina con el Cenozoico que contiene.

Eratemala	Sistema	Serie	Unidades Litoestratigráficas	Columna Estratigráfica		
CENOZOICA	CUATERNARIO	Holocena	Depósitos fluviales Depósitos coluviales Depósitos bofedales Depósitos aluviales			
		Pleistocena	Depósitos glaciofluviales Depósitos morrénicos			
	NEÓGENO	Pliocena	Grupo Puno		Fm. Soncco	
		Miocena				
	PALEÓGENO	Oligocena	Gpo. Barroso		Complejo Volcánico Carhuarazo (Formación Yacotingo) Complejo Volcánico Indiferenciado	
		Eocena				
		Paleocena				
	MESOZOICA	CRETÁCEO	Superior		Fm. Muñani	
					Fm. Auzangate	
					Fm. Vilquechico	
Fm. Arcurquina			Miembro C Miembro B Miembro A			
Inferior			Fm. Murco			
JURÁSICO		Superior	Grupo Yura	Fm. Hualhuani		
		Medio		Fm. Gramadal Fm. Labra		
		Inferior	Fm. Cachíos Fm. Puente			
			Fm. Socosani			

Fuente: INGEMMET (memoria descriptiva de la revisión del cuadrángulo de Andahuaylas), accedido 20/06/24.

Figura 5— Cuadrángulo de Andahuaylas (28-p).



3.2.7. Geología local

ACOSTA (2018), en la zona de estudio se reconocieron en afloramiento la unidad con intensidad Formación Vilquechico (Ks-vi) intercalación de areniscas rojizas con areniscas cuarzosas, hacia la dirección Este del paraje Ranchopampa y el paraje Kiswi. Formación Auzangate (KsP-a) de arcillas rojas intercaladas con horizontes calcáreos, que posiblemente sea el yacimiento “in situ” que por debajo se aloja la Halita. Formación Arcurquina (Kis-ali) Calizas grises en estratos gruesos intercalados con arenisca, hacia la dirección Oeste del paraje Masmachay y paraje Cabramachay del anexo San Juan Bautista. Hacia el Norte del área de estudio pasa el batolito de Andahuaylas-Yauri, estrato Parco, Plutón Parco (PN-pa/pa-di) de Diorita.

3.2.8. Aspectos litológicos

El objetivo de encontrar el método de explotación para el yacimiento minero Salinas Cachihuancay se hicieron estudios de mapeos geomecánicos en todo el eje del túnel en material de la Formación Auzangate (KsP-a) de arcillas rojas intercaladas con horizontes calcáreos y enmaderando completamente con cuadros de madera de tipo cónico, planeado hasta alcanzar al cuerpo mineralizado de Halita.

3.2.9. Geología estructural

El manto Salinas Cachihuancay se encuentra sobre las rocas sedimentarias del cretácico superior como la formación Vilquechico y están unificados con varios episodios de mineralización.

3.3. Marco teórico

Para la investigación de la tesis el marco teórico adecuado es:

3.3.1. Fundamentos de la difracción de rayos x (DRX)

3.3.1.1. Principios básicos de la DRX

Según GIACOVAZZO (1992), la DRX se basa en el fenómeno de difracción, que ocurre cuando los rayos X interactúan con los átomos de un cristal. Los átomos actúan como puntos de dispersión, y los rayos X difractados pueden interferir entre sí. Si la interferencia es constructiva, se forman picos de difracción que se pueden observar y medir.



3.3.1.2. Ley de Bragg

La Ley de Bragg es una expresión matemática que relaciona la geometría de la difracción con las distancias entre los planos atómicos en un cristal. Se formula como Casanova et al. (2002)

$$n\lambda = 2d\sin(\theta)$$

Donde:

(n) es el orden de la difracción, un número entero.

(λ) es la longitud de onda de los rayos X utilizados.

(d) es la distancia entre los planos cristalinos que difractan rayos X.

(θ) es el ángulo de incidencia (y también de difracción) de los rayos X respecto a los planos cristalinos.

Cuando se cumple esta condición, los rayos X reflejados por los planos atómicos están en fase y se refuerzan mutuamente, creando un pico de difracción que se puede detectar con un detector de rayos X.

Según RAQUEJO (2015), la DRX es una técnica no destructiva que proporciona información valiosa sobre la estructura atómica y molecular de los materiales, lo que la hace indispensable en campos como la mineralogía, la química de materiales, la biología estructural y la ciencia de los materiales.

3.3.2. Aplicaciones de la DRX en la caracterización mineralógica

Para ANDIA (2022), la difracción de rayos x (DRX) tiene múltiples aplicaciones en la caracterización mineralógica, permitiendo identificar y cuantificar las fases minerales, determinación de estructuras cristalinas, identificación de compuestos presentes en una muestra.

3.3.2.1. Identificación de Fases Minerales

Según HUAYPAR (2012), la DRX es una herramienta esencial para identificar los minerales presentes en una muestra, basándose en su patrón de difracción único. Esto es crucial en la minería y la geología para determinar la composición de los yacimientos.

3.3.2.2. Cuantificación de minerales

Para HUAYPAR (2012), la identificación de minerales por la técnica



de DRX , se realiza comparando la intensidad de los picos de difracción con estándares conocido y también se logra cuantificar su abundancia en la muestra.

3.3.2.3. Análisis de fases cristalinas y amorfas

Según GOMEZ (2015), la DRX puede distinguir entre fases cristalinas y amorfas, proporcionando información sobre el estado estructural de los minerales.

3.3.2.4. Determinación de estructuras cristalinas

Para QUIROGA (2021), se pueden determinar las estructuras cristalinas de los minerales, lo que es fundamental para entender sus propiedades físicas y químicas.

3.3.2.5. Medición de tensiones y deformaciones

Por otro lado, QUIROGA (2021), afirma que la técnica también permite medir tensiones y deformaciones en los cristales, lo que puede indicar procesos geológicos o efectos de tratamientos en materiales.

3.3.2.6. Estudio de texturas

Según QUIROGA (2021), la DRX se utiliza para estudiar la textura de los minerales, es decir, la orientación preferencial de los granos cristalinos dentro de una muestra.

3.3.3. Refinamiento de Rietveld

El método de refinamiento de Rietveld es una técnica avanzada utilizada en la difracción de rayos X y neutrones para la caracterización de materiales cristalinos. Fue desarrollado por Hugo Rietveld en la década de 1960 y es especialmente útil para analizar polvos o materiales policristalinos donde los picos de difracción se superponen.

3.3.3.1. Descripción del método de refinamiento de Rietveld

Para QUIROGA (2021), el refinamiento de Rietveld ajusta el modelo teórico de la estructura cristalina de una muestra para que sea lo más cercano posible al patrón de difracción obtenido experimentalmente. Este proceso se realizó utilizando el método de mínimos cuadrados, donde se minimizó la suma de los cuadrados de las diferencias entre los valores de intensidad de difracción observados y calculados.



El modelo teórico incluye:

- La estructura cristalina y el grupo espacial.
- La posición de los átomos en la celda unitaria.
- Factores microestructurales como el tamaño de cristal y las micro deformaciones.
- El factor instrumental, que considera el efecto de la óptica del equipo sobre la medición.

Durante el refinamiento, se ajustan varios parámetros, incluyendo:

- Parámetros estructurales o de red.
- Desplazamientos atómicos.
- Anisotropía.
- Tensiones de la red.

El resultado es un conjunto refinado de parámetros estructurales que permite una descripción detallada de la estructura cristalina de la muestra.

Según GARCIA (2017), el refinamiento de Rietveld es una herramienta poderosa para obtener información precisa sobre la estructura de un material, lo cual es crucial para comprender sus propiedades y comportamiento.

3.3.3.2. Uso de FullProf para el análisis de datos de DRX

El software FullProf es una herramienta muy utilizada para el análisis de datos de difracción de rayos X (DRX) mediante el método de Rietveld.

Este método permite determinar los parámetros estructurales de una muestra a partir de su patrón de difracción. FullProf puede realizar un refinamiento automatizado y es capaz de procesar grandes cantidades de datos, lo que facilita significativamente el análisis de materiales cristalinos.

Para GARCIA (2017), utilizar FullProf en el análisis de DRX, es importante conocer los archivos de trabajo del software y cómo llevar a cabo el refinamiento Rietveld. La intensidad total en cada punto del difractograma se calcula utilizando la siguiente ecuación.



$$y_{ci} = (\mu_m)^{-1} [(\Phi_{rsi}) \sum_{\Phi} S_{\Phi} \sum_{h\Phi} J_{h\Phi} L_{p_{h\Phi}} |F_{h\Phi}|^2 G_{h\Phi} P_h] + y_{bi}$$

Donde cada término representa:

μ_m : Coeficiente de absorción de la mezcla.

Φ_{rsi} : Corrección por rugosidad superficial en el punto i .

S_{Φ} : Factor de escala de la fase.

$J_{h\Phi}$: Multiplicidad del plano (hkl) de la fase Φ .

$L_{p_{h\Phi}}$: Factor de polarización de Lorentz de la fase Φ .

$F_{h\Phi}$: Factor de estructura asociado con al plano (hkl) de la fase Φ .

$G_{h\Phi}$: Función del perfil de las líneas de difracción asociadas a los planos (hkl) de la fase Φ .

P_h : Valor de la función de corrección por orientación preferencial del plano (hkl).

y_{bi} : Contribución de la radiación de fondo (background).

El ajuste se realiza minimizando la función de mínimos cuadrados, comparando los patrones experimental y teórico.

Como puede verse, la ecuación tiene en cuenta la contribución de todas las fases

Los patrones experimental y teórico se comparan por medio del método de mínimos cuadrados:

$$M = \sum_j \frac{(y_{oj} - y_{cj})^2}{y_{oj}}$$

Esa función se minimiza con relación a los M parámetros de refinamiento, así: $\frac{\partial M}{\partial \rho_i}$

Los parámetros de refinamiento son:

- Coeficientes de la expansión en series de la función que describe el background (línea base)
- El factor de escala
- Los parámetros de red
- Los coeficientes en la función del perfil

3.3.4. Mineralogía de las sales

La mineralogía de la sal, que comprende minerales como la carnalita, resulta sumamente fascinante y compleja. Se detallan las propiedades y atributos de los minerales salinos, además de los procedimientos para su identificación y cuantificación.

Características y propiedades de los minerales de sal:

- **Color:** Depende de la composición química y la presencia de impurezas.
- **Brillo:** La apariencia de una superficie cuando la luz se refleja en ella puede ser vítreo, graso, nacarado, metálico, mate, sedoso, entre otros.
- **Dureza:** Mide la resistencia a ser rayado; se clasifica según la escala de Mohs.
- **Fractura/exfoliación:** Describe cómo se rompe el mineral y si se separa a lo largo de planos definidos.
- **Densidad:** Relacionada con la masa del mineral por unidad de volumen.
- **Tenacidad:** Resistencia del mineral a ser deformado o roto.

3.3.4.1. Métodos para la identificación y cuantificación de minerales en muestras de sal:

- **Difracción de Rayos X (DRX):** Utiliza la relación entre los planos cristalográficos de un mineral y los picos en un difractograma para identificar y cuantificar fases minerales.
- **Microscopía Óptica y Electrónica:** Permite observar la morfología y estructura interna de los minerales.
- **Espectrometría de Masas con Plasma de Acoplamiento Inductivo (ICP-MS):** Para determinar la composición elemental de las sustancias minerales.
- **Análisis de Inclusiones Fluidas:** Estudia las características de los fluidos atrapados en los minerales durante su formación.

Estos métodos son fundamentales para comprender la composición y las propiedades de los minerales de sal, lo que a su vez es crucial para su uso en diversas aplicaciones industriales.

3.4. Marco conceptual

- **Difracción:** según HUYGENS (1680), la difracción tiene lugar cuando las ondas que



se propagan encuentran un obstáculo, por ejemplo, un orificio, cuyas dimensiones son del orden de la longitud de onda de las ondas incidentes. Las ondas se propagan entonces como si el orificio se convirtiera en un nuevo centro emisor y penetran tras el orificio en lo que debería de ser una "zona de sombra" si su comportamiento fuera como el de un chorro de partículas. Según Huygens este comportamiento puede explicarse si suponemos que el propio orificio se convierte en una fuente secundaria de ondas.

- **Radiación monocromática:** según FERNANDEZ (1982), se refiere a los rayos X que pasan a través de una rendija cuyo espesor es comparable a la longitud de onda de la radiación, lo cual es esencial para obtener un patrón de difracción claro y preciso. La longitud de onda de los rayos X se mide en angstroms, que es del mismo orden de magnitud que la distancia entre los átomos que forman una red cristalina.
- **Interferencia constructiva:** Sucede cuando las ondas difractadas por diferentes planos cristalinos están en fase y se combinan para aumentar la intensidad del haz difractado.
- **Interferencia destructiva:** Esto ocurre cuando las ondas difractadas están desfasadas y se cancelan entre sí, lo que provoca que la intensidad del patrón de difracción disminuya o desaparezca.
- **Mineral:** según GLOSARIO (2001), el mineral es una sustancia cristalina, por lo general inorgánica, con características físicas y químicas propias debido a un agrupamiento atómico específico, individuos minerales que se caracterizan por una estructura cristalina determinada y por una composición química, que pertenecen a un rango de variaciones continuas y que se encuentran en equilibrio bajo unas condiciones termodinámicas determinadas.
- **Cristalografía:** según RIPOLL (2015) Se trata de la rama de la mineralogía que se dedica al estudio de las propiedades cristalinas y las formas cristalinas de los minerales, considerando las leyes físicas y químicas de cada sistema cristalino, así como su estructura interna, mediante el uso de técnicas como la difracción de rayos X.
- **Modelo teórico:** Dentro del marco del refinamiento de Rietveld, se hace referencia a la serie de parámetros estructurales y microestructurales que caracterizan la estructura cristalina de la muestra, incluyendo la ubicación de los átomos, el tamaño del cristal y las micro deformaciones.

- **Patrón de difracción:** según ZARATE (2018), es un conjunto de picos obtenidos en un experimento de difracción que refleja la estructura interna de un material. El refinamiento de Rietveld intenta reducir la diferencia entre los patrones experimentales y los calculados a partir de un modelo teórico
- **Método de mínimos cuadrados:** según CORDERO (2014), es un método estadístico utilizado en el refinamiento de Rietveld para optimizar el ajuste entre el patrón de difracción experimental y el modelo teórico modificando los parámetros del modelo para minimizar la suma de diferencias al cuadrado.
- **FullProf:** según PROGRAMA FULLPROF (1993), es un “software” de la suite “FullProf” que se utiliza para el análisis Rietveld automatizado de patrones de difracción de polvo utilizando FullProf como motor de refinamiento. Esta herramienta está diseñada para manejar fácilmente grandes cantidades de datos de difracción generados mediante experimentos de detección de alto rendimiento (HTS), así como mediante estudios in situ y operando en grandes usuarios.
Instalaciones como fuentes de sincrotrón y neutrones. Esta aplicación asume que toda la Suite FullProf está instalado en la computadora que permite analizar datos de difracción de neutrones o rayos X y es ampliamente utilizado por su capacidad para manejar complejas estructuras cristalinas.
- **Interfaz gráfica de usuario (GUI):** Full Prof el objetivo de esta interfaz gráfica es representar el código del backend de un sistema de la forma más clara posible para el usuario para simplificarle las tareas diarias que facilita la interacción con el programa, permitiendo a los usuarios realizar refinamientos de manera más intuitiva y visual.

CAPÍTULO IV METODOLOGÍA

4.1. Tipo y nivel de investigación

4.1.1. Tipo de investigación

La investigación detallada en la tesis titulada "Caracterización Mineralógica de Muestras de Mina de Sal Puca Cachi Provincia de Andahuaylas 2024, mediante la Técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y el método refinamiento de Rietveld con software FullProf", se empleó el tipo de Investigación aplicada, porque se obtendrá información precisa y detallada acerca de la muestra analizada como; la caracterización, identificación y cuantificación de los minerales presentes en la muestra de la mina Puca Cachi. Teniendo como objetivo principal determinar la composición mineralógica y estructural de las muestras de sal de la mina Puca Cachi en la provincia de Andahuaylas 2024, utilizando la técnica de Difracción de Rayos X y el método de refinamiento de Rietveld con software Fullprof para optimizar la explotación de recursos minerales.

4.1.2. Diseño de investigación

El diseño de investigación adecuado a esta tesis es un diseño de investigación experimental. Por lo tanto, se usó del software Matchj para la caracterización mineralógica e identificación de fases de muestras de sal de la mina Puca Cachi provincia de Andahuaylas 2024. Una vez identificado los minerales asociados obtuvimos una base de datos, seguidamente se hizo uso del software FullProf para realizar el refinamiento de Rietveld. Interesa obtener conclusiones y resultados para hacer comparación con los datos experimentales. Lo que nos ayudara a identificar, las características, estructuras y porcentajes de leyes.

4.2. Población y muestra



4.2.1. Población

Según FLOR (2019) la población en una investigación mineralógica se refiere al conjunto total de unidades de estudio que poseen las características de interés para la investigación, en esta tesis la población son todas las formaciones de sal accesibles de la mina de sal Puca Cachi.

4.2.2. Muestra

Según FLORES (2015), para la identificación de la zona de muestreo seleccionamos áreas representativas de la mina que puedan contener una variedad de minerales de interés, se seleccionó la zona de explotación artesanal por parte de comuneros de la comunidad de Puca Cachi, teniendo en cuenta los criterios de homogeneidad, integridad y relevancia.



Figura 6— Muestras de sal.

Fuente: elaboración propia del autor.

4.3. Procedimiento de la investigación

4.3.1. Técnicas de recolección

Se tomo muestras directamente de las formaciones salinas expuestas, nos aseguramos que las muestras se mantengan en condiciones que no alteren su

composición hasta su análisis y finalmente se registró la ubicación exacta, fecha y hora de la recolección.

4.3.2. Planificación y diseño de la investigación

Pudimos definir objetivos y preguntas de investigación y estableciendo la metodología y los criterios de selección de muestras con la preparación del plan de análisis de datos y estadísticos a utilizar.

4.3.3. Recolección de muestras

Se seleccionó las muestras siguiendo el criterio establecido, y se documentó la recolección de muestras (ubicación, fecha, condiciones).



Fuente: elaboración propia del autor.

Figura 7— Recolección de muestras.



Fuente: Propia en el laboratorio de UNMSM.

Figura 10— Proceso de molienda.



Fuente: Propia en el laboratorio de UNMSM.

Figura 9— Vaciado de muestra molida al holder.



Fuente: propia en el laboratorio de UNMSM.

Figura 12— Tamizaje de muestra con una malla de 325, 44micrones.



Fuente: Propia en el laboratorio de UNMSM.

Figura 11— Obtención de muestra fina en la porta muestra.



Fuente: Propia en el laboratorio de UNMSM.

Figura 13— Introducción de muestra al equipo de DRX.

4.3.5. Análisis de datos

Para interpretar los patrones de difracción obtenidos por la técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y los resultados del refinamiento de Rietveld con FullProf en la investigación titulada, "Caracterización Mineralógica de Muestras de Mina de Sal Puca Cachi Provincia de Andahuaylas 2024, mediante la Técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y Refinamiento de Rietveld con FullProf", se siguieron los siguientes pasos. Se interpretó los patrones de difracción, con ello se identificó cada pico en el patrón de difracción correspondiente a un conjunto de planos cristalinos en la muestra de sal, con ello se observó la intensidad de los picos lo que proporcionó información sobre la cantidad de cada fase mineral y orientación

de los cristales, el ensanchamiento de los picos pudo indicar tamaño de partícula pequeño, tensiones internas o presencia de fases amorfas.

4.3.6. Resultados del refinamiento de Rietveld con FullProf

Para interpretar los patrones de difracción obtenidos por la técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y los resultados del refinamiento de Rietveld con FullProf en la investigación titulada, "Caracterización Mineralógica de Muestras de Mina de Sal Puca Cachi Provincia de Andahuaylas 2024, mediante la Técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y Refinamiento de Rietveld con FullProf", se siguieron los siguientes pasos. Se interpretó los patrones de difracción, con ello se identificó cada pico en el patrón de difracción correspondiente a un conjunto de planos cristalinos en la muestra de sal, con ello se observó la intensidad de los picos lo que proporcionó información sobre la cantidad de cada fase mineral y orientación de los cristales, el ensanchamiento de los picos pudo indicar tamaño de partícula pequeño, tensiones internas o presencia de fases amorfas.

- **Resultados del Refinamiento de Rietveld con FullProf.**

Se ajustó a un modelo cristalino teórico a los datos experimentales. Este modelo incluye la posición atómica, los factores de ocupación y los parámetros de la celda unitaria, luego se realizó iteraciones matemáticas para minimizar la diferencia entre el patrón de difracción experimental y el calculado por el modelo, los parámetros refinados nos proporcionaron una imagen precisa de la estructura cristalina, incluyendo las posiciones atómicas y las concentraciones de las fases mineralógicas presentes, la representación gráfica FullProf nos permitió visualizar gráficamente la estructura cristalina refinada de cada fase mineralógica y comparar el patrón de difracción experimental con el calculado.

La interpretación de estos datos nos permitió obtener una comprensión detallada de la composición mineralógica de las muestras de la mina de sal Puca-Cachi, lo cual fue esencial para la investigación.

4.3.7. Análisis de difracción de rayos x (DRX)

Se realizó mediciones de DRX con las muestras preparadas, como también registramos los patrones de difracción obtenidos.



4.3.8. Refinamiento de Rietveld con FullProf



Fuente: Propia en el laboratorio de UNMSM.

Figura 14— Muestra dentro del DRX.

Se introdujo los datos respectivos de DRX en FullProf para el refinamiento y se ajustó los parámetros del modelo estructural hasta que obtuvimos un buen ajuste con los datos experimentales.

4.4. Técnicas e instrumentos

Las técnicas utilizadas en la investigación de la tesis son:

4.4.1. Difracción de rayos x (DRX)

Según TUESTA (2012), es una técnica analítica que permite determinar la estructura cristalina de un material. Los rayos X inciden en la muestra y se difractan en patrones específicos que son característicos de la estructura atómica del material.

Los patrones de difracción se registran y se analizan para identificar los minerales

presentes en la muestra.

4.4.2. Refinamiento de Rietveld

Para GARCIA (2007), lo define un método matemático y computacional utilizado para interpretar los datos de DRX. Este refinamiento ajusta un modelo estructural teórico a los datos experimentales para obtener una descripción detallada de la estructura cristalina. El software FullProf es una herramienta que implementa este método y nos permitió realizar un análisis cuantitativo y cualitativo de los datos de DRX.

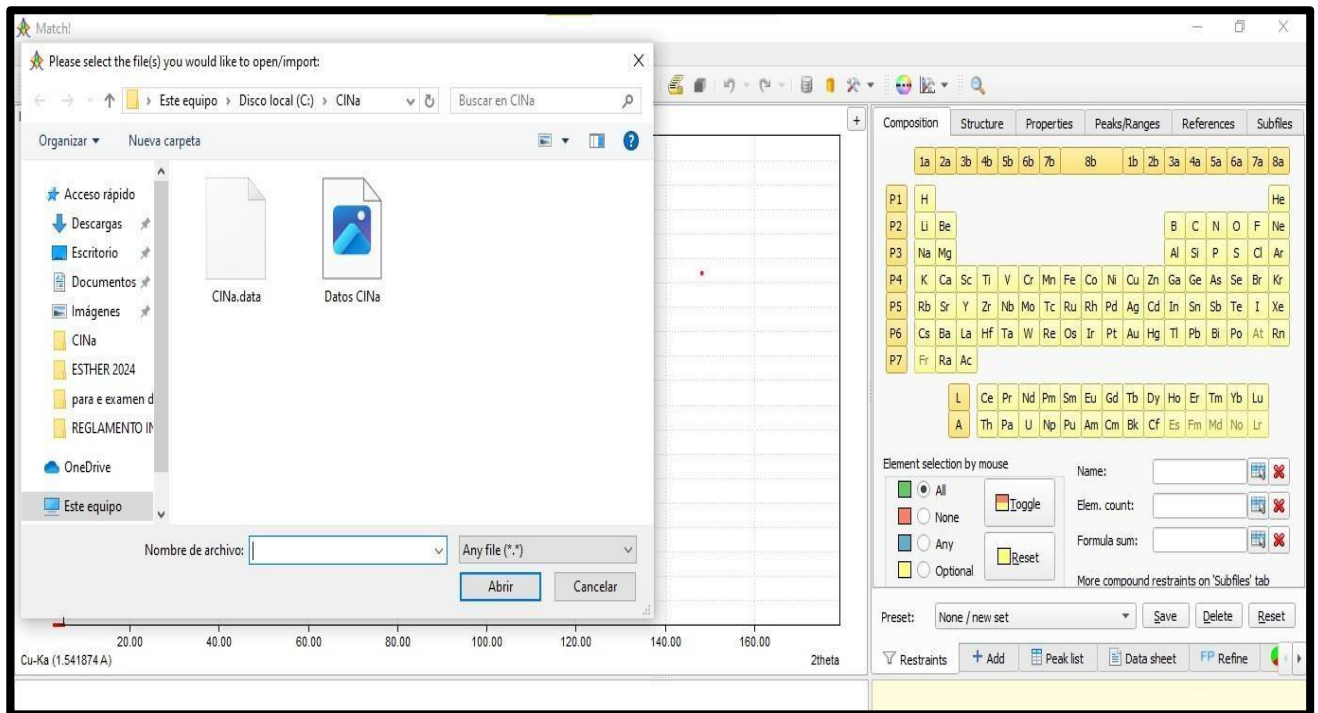
Estas técnicas son complementarias y se utilizan conjuntamente para caracterizar de manera precisa la composición mineralógica de las muestras de la mina de sal Puca-Cachi. La DRX proporciona los datos brutos de los patrones de difracción, mientras que el refinamiento de Rietveld con FullProf que nos permitió analizar esos datos para obtener información detallada sobre la estructura y composición de los minerales.

4.4.3. Procedimiento de software FullProf

Para hacer uso del software FullProf, se siguen los siguientes pasos.

- ✓ **PASO 1:** Preparación de datos, nos aseguramos de tener los patrones de difracción en formato adecuado (dat o xy), identificamos las fases con el software MATCH!, para lo cual creamos una carpeta en nuestra PC.

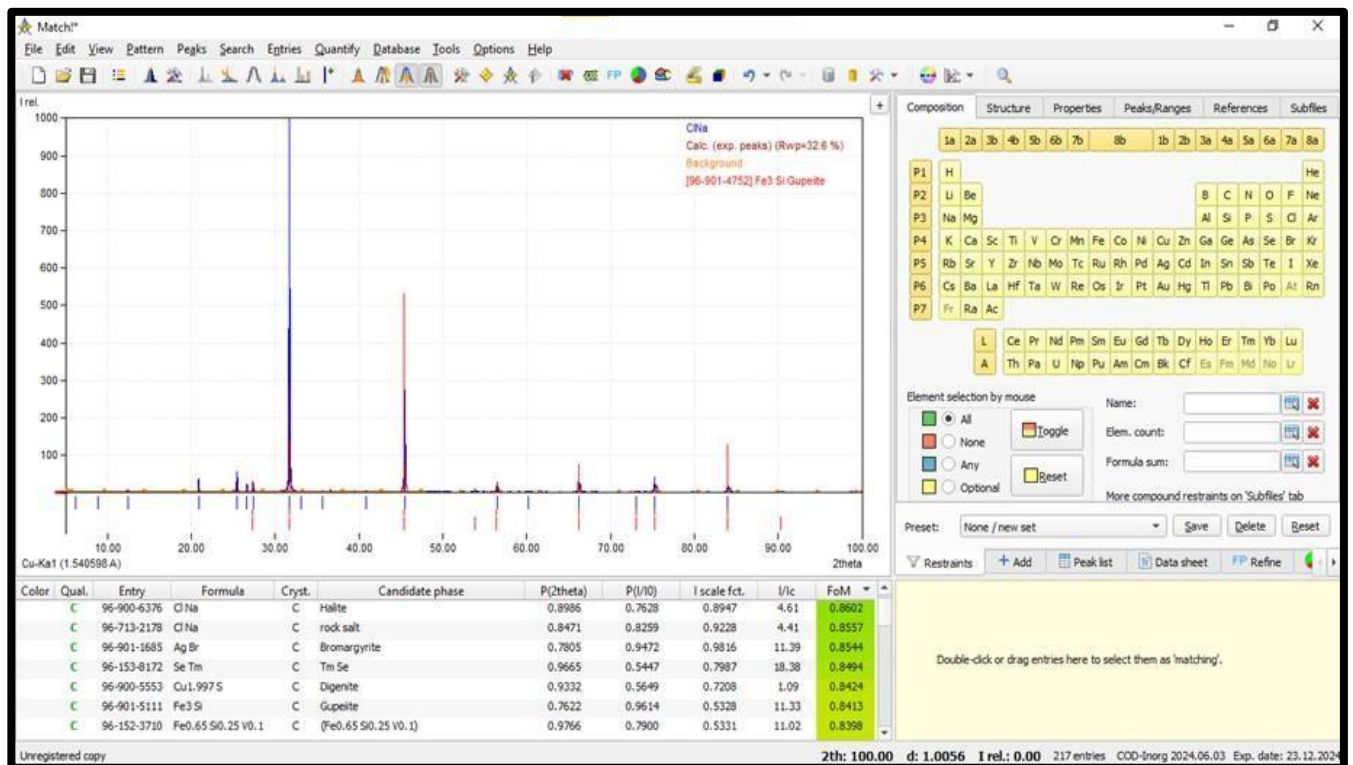
- ✓ **PASO 2:** Abrimos el software MATCH! y automáticamente observamos la ventana como se muestra en la figura 15 y seleccionamos nuestra carpeta en archivo XY para luego cargar el archivo al software Match tal como se muestra en la siguiente figura.



Fuente: propia del software Match.

Figura 15— Ventana del software Match!.

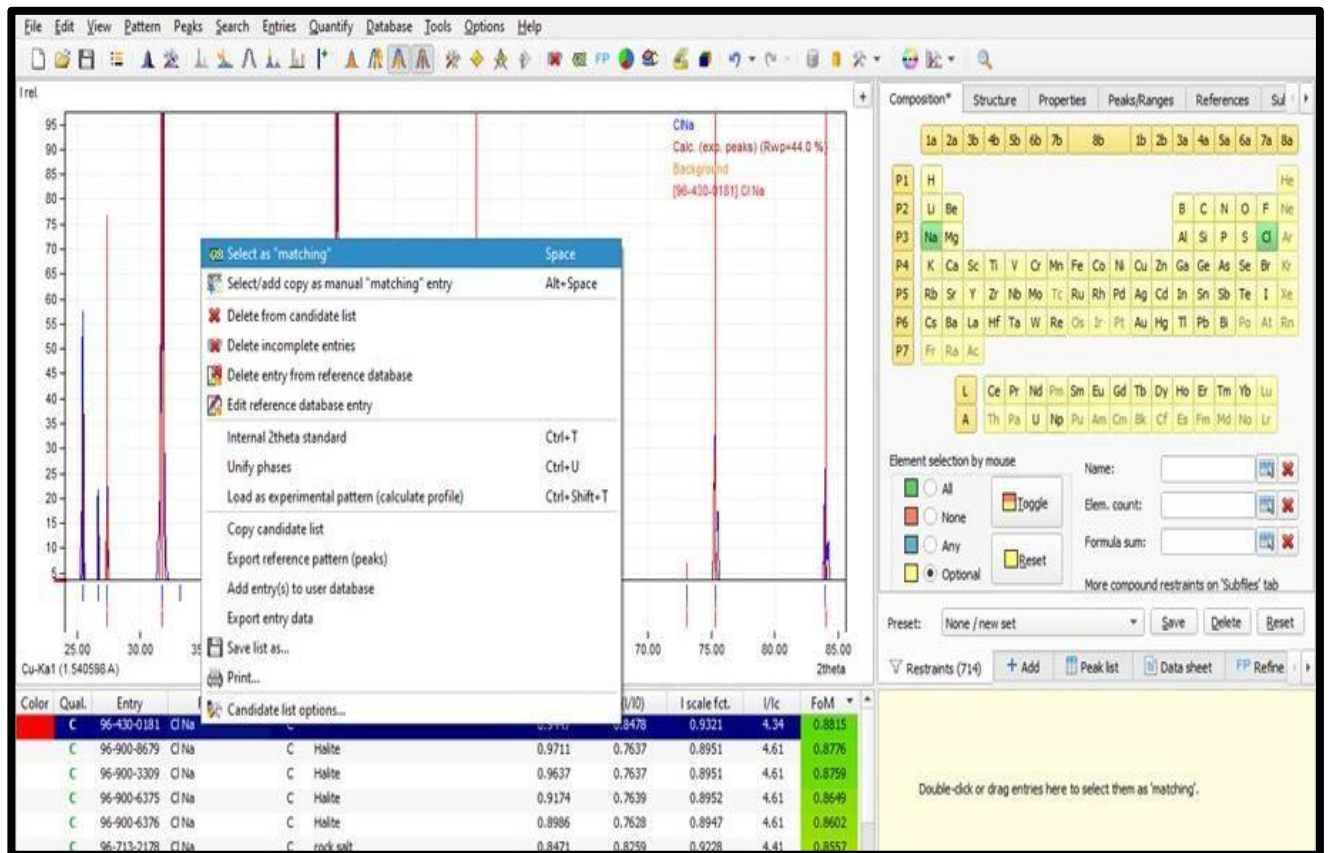
Una vez que ponemos ok, nos muestra el perfil de difracción donde se observa que el software hace la comparación de cada pico con la base existente.



Fuente: propia del programa Match.

Figura 16— Comparación de los picos con la base existente.

En la siguiente ventana identificamos ClNa, seleccionamos los elementos de la tabla periódica Cl y Na y damos en la opción toggle, luego observamos una nueva lista de color verde, en el grafico se observa la comparación entre picos; el pico de color rojo es lo que nosotros comparamos y el pico de color azul son los datos experimentales.

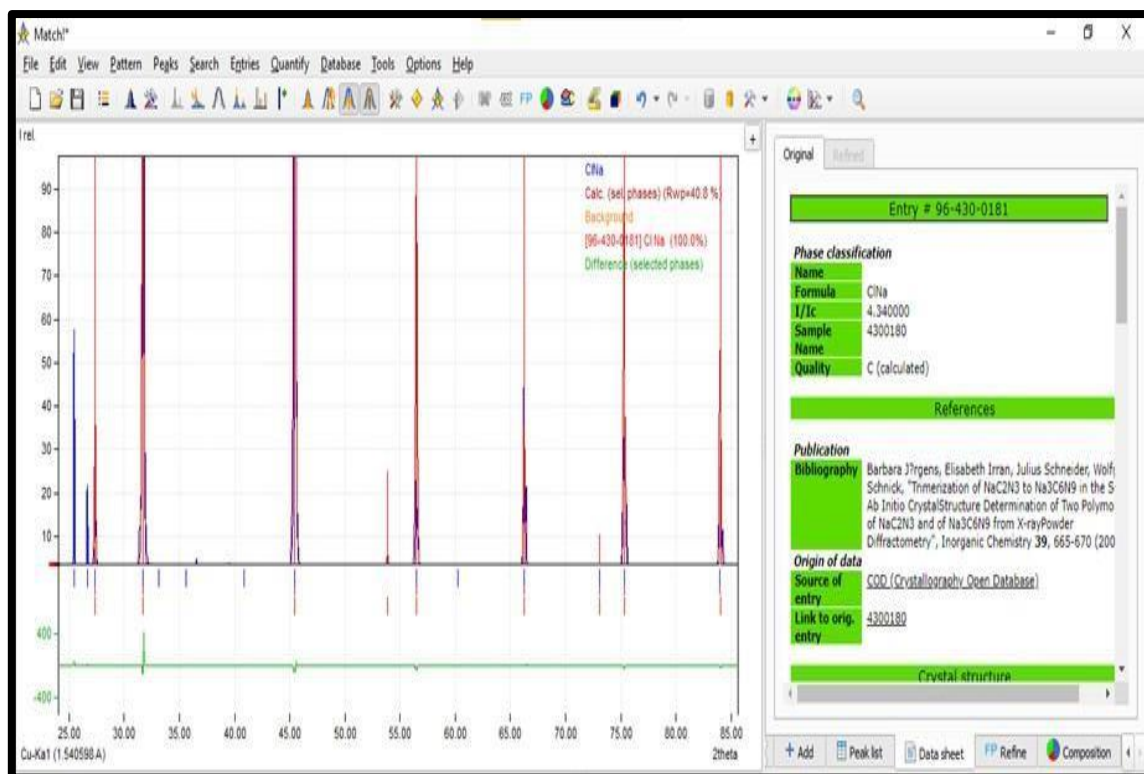


Fuente: propia del software Match.

Figura 17— Comparación de picos.

Una vez seleccionado nos muestra la siguiente ventana, damos clip en data sheet, y observamos la formula, muestra, intensidad, el tipo de patrón de difracción, bibliografía de donde fue publicado este patrón de difracción, link para descargar el CIF; este CIF nos servirá para realizar el refinamiento de Rietveld.





Fuente: propia del programa Match.

Figura 18— Identificamos la formula, muestra, intensidad y el tipo de patrón de difracción.

Entramos a la página CRYSTALOGRAPHY OPEN DATA BASE donde descargaremos el CIF que es la partida de nacimiento que es “información de su estructura interna” del CLORURO DE SODIO.

Fuente: propia del programa crystalography.

Figura 19— Base de datos de Crystalography.



En esta pestaña nos bota los antecedentes de muchos estudios de investigaciones como las revistas y en una de ellas coincide con la fórmula que buscamos lo cual haremos click en el código ID.

Search results

Result: there are 1332 entries in the selection

Switch to the old layout of the page

Download all results as: [list of COD numbers](#) | [list of CIF URLs](#) | [data in CSV format](#) | [archive of CIF files \(ZIP\)](#)

Searching elements including Na, Cl

◀◀ First | ◀ Previous 20 | Page 1 of 67 | Next 20 ▶ | Last ▶▶ | Display 2 20 50 100 200 300 500 1000 entries per page

COD ID ▲	Links	Formula ▲	Space group ▲	Cell parameters	Cell volume ▲	Bibliography
1000028	CIF	Al6 Cl2 Na8 O24 Si6	P-43n	8.875; 8.875; 8.875 90; 90; 90	699	Hassan, I.; Grundy, H. D. The Crystal Structures of Sodalite-Group Minerals <i>Acta Crystallographica Section B: Structural Science</i> , 1984 , <i>40</i> , 6-13
1000041	CIF	ClNa	Fm-3m	5.62; 5.62; 5.62 90; 90; 90	177.5	Abrahams, S C; Bernstein, J L Accuracy of an automatic diffractometer. measurement of the sodium chloride structure factors <i>Acta Crystallographica (1948-73, 1967)</i> , 1965 , <i>18</i> , 926-932
1001025	CIF	Cd Cl4 H6 Na2 O3	R-3m:H	7.89; 7.89; 26.52 90; 90; 120	1429.7	Boistelle, R; Pepe, G; Simon, B; Leclaire, A Structure cristalline du sel mixte Cd Cl-2- (Na Cl)-2- (H-2- O)-3- <i>Acta Crystallographica B (24, 1968-38, 1982)</i> , 1974 , <i>30</i> , 2200-2203
1001127	CIF	Cl Na O3	P121a1	8.78; 5.17; 6.88 90; 110; 90	293.5	Meyer, D; Gasperin, M Etude Structurale d'une Phase haute Temperature instable du Chlorate de Sodium <i>Bulletin de la Societe Francaise de Mineralogie et de Cristallographie (27, 1949-100, 1977)</i> , 1973 , <i>96</i> , 18-20
1004043	CIF	Al Cl4 Na	P212121	9.886; 6.617; 10.322 90; 90; 90	675.2	Mairesse, G; Barbier, P; Wignacourt, J P Comparison of the crystal structures of alkaline (M = Li, Na, K, Rb, Cs) and Pseudo-alkaline (M = N O, N H-4-) Tetrachloroaluminates, M Al Cl-4- <i>Acta Crystallographica B (24, 1968-38, 1982)</i> , 1979 , <i>35</i> , 1573-1580

<https://www.crystallography.net/cod/1000041.html>

Fuente: propia del programa.

Figura 20— Búsqueda de resultados con formula NaCl.

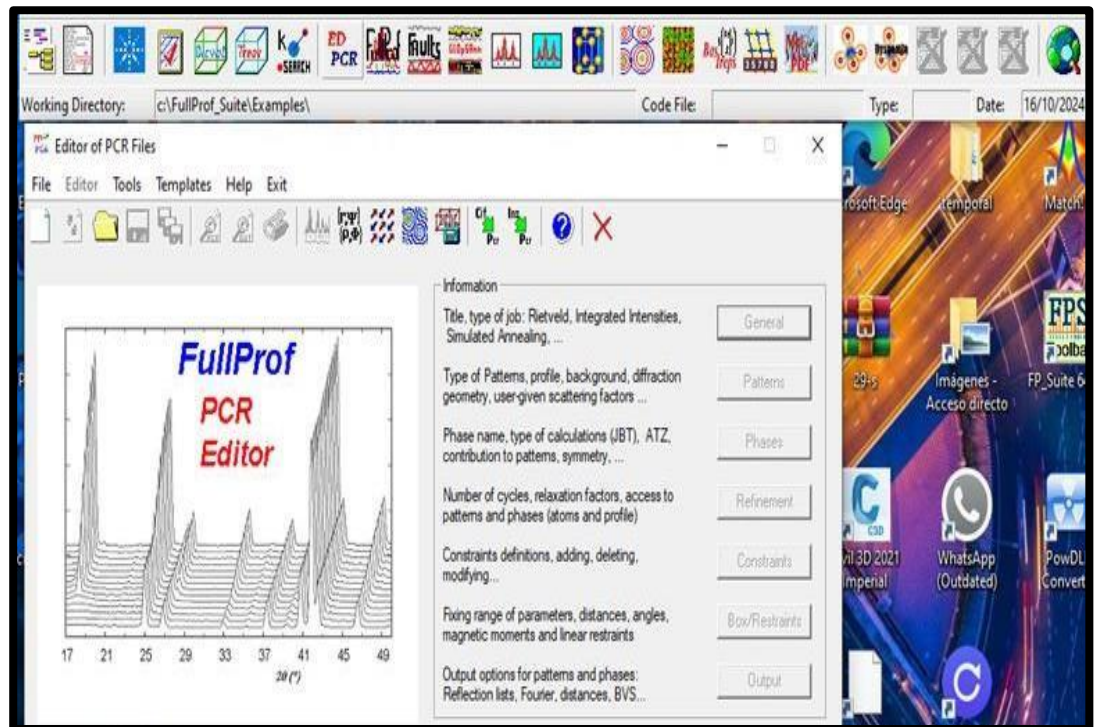
4.4.4. Configuración del programa FullProf

En esta actividad vamos a utilizar el paquete de programas fullprof para realizar el refinamiento de rayos x de datos de difracción de rayos x experimentales para obtener parámetros cristalográficos de sólidos cristalinos.

El programa FullProf se puede descargar de forma gratuita a través de la siguiente dirección (<https://www.ill.eu/sites/fullprof/php/downloads.html>) si seleccionan el panel superior download y aparece una ventana donde se puede realizar la descarga en función del sistema operativo que tengamos.

Ingresamos al programa y hacemos click en ED/PCR lo que haremos es cargar el CIF que es “información de su estructura interna.

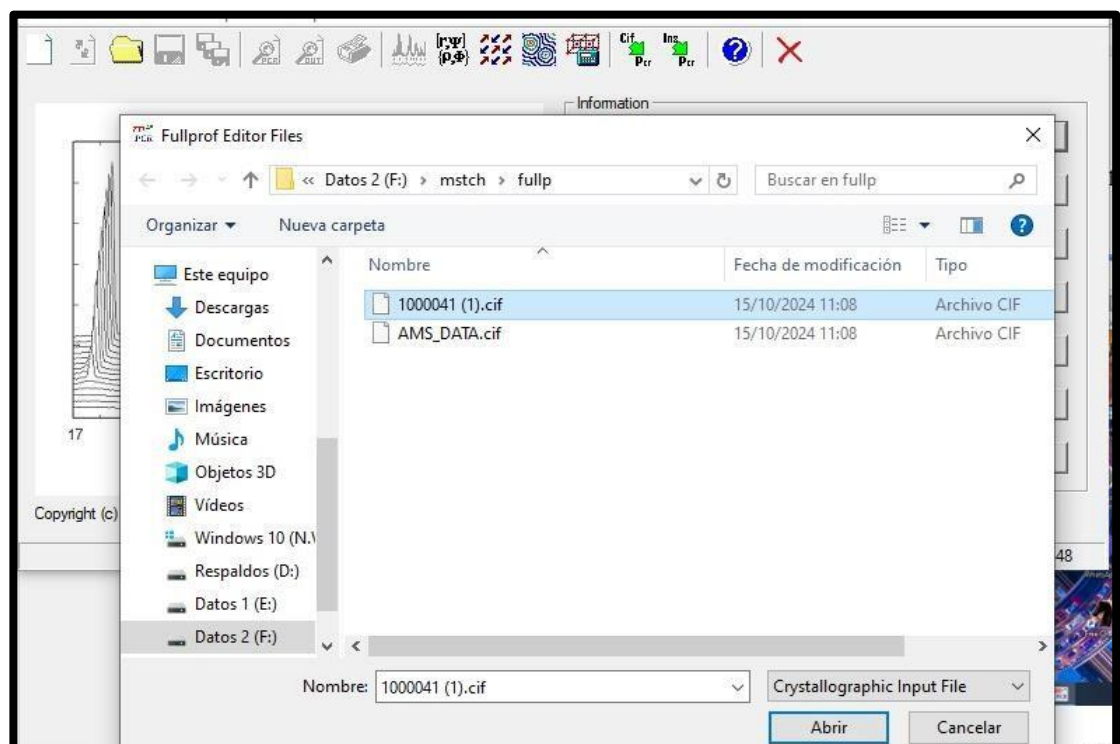




Fuente: propia del software FullProf.

Figura 21— Ingreso al programa FullProf.

Buscamos el archivo CIF donde lo teníamos guardado y lo jalamos.

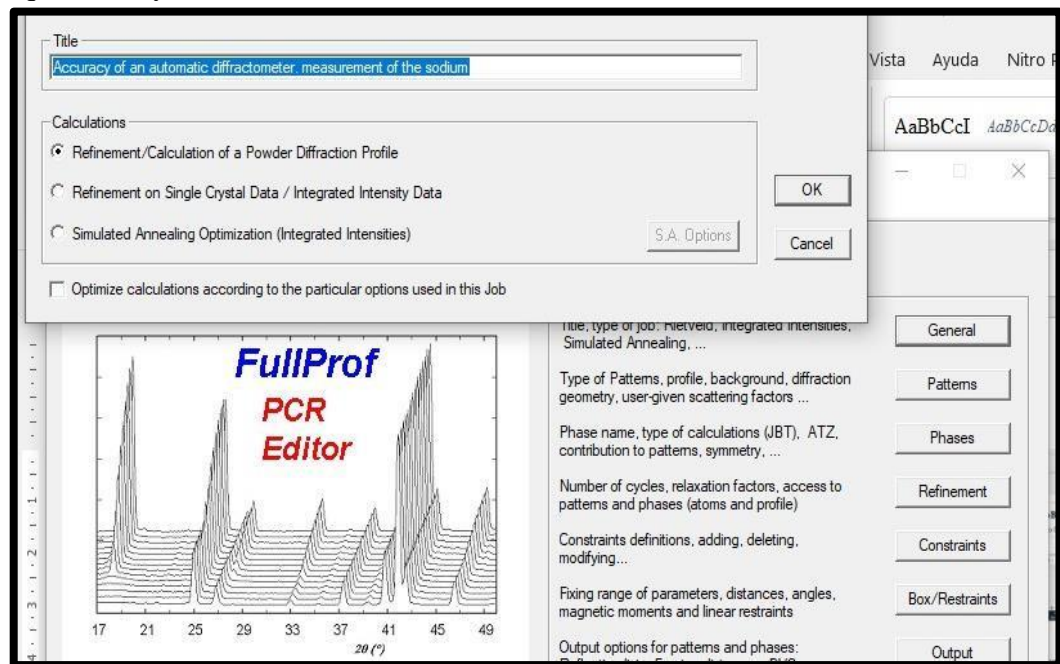


Fuente: propia del software FullProf.

Figura 22— Selección de archivo CIF.

Podemos apreciar la diferente información de los datos que se cargan del archivo en la parte cell parameters/ spacegroup, hacemos un click en “ok”.

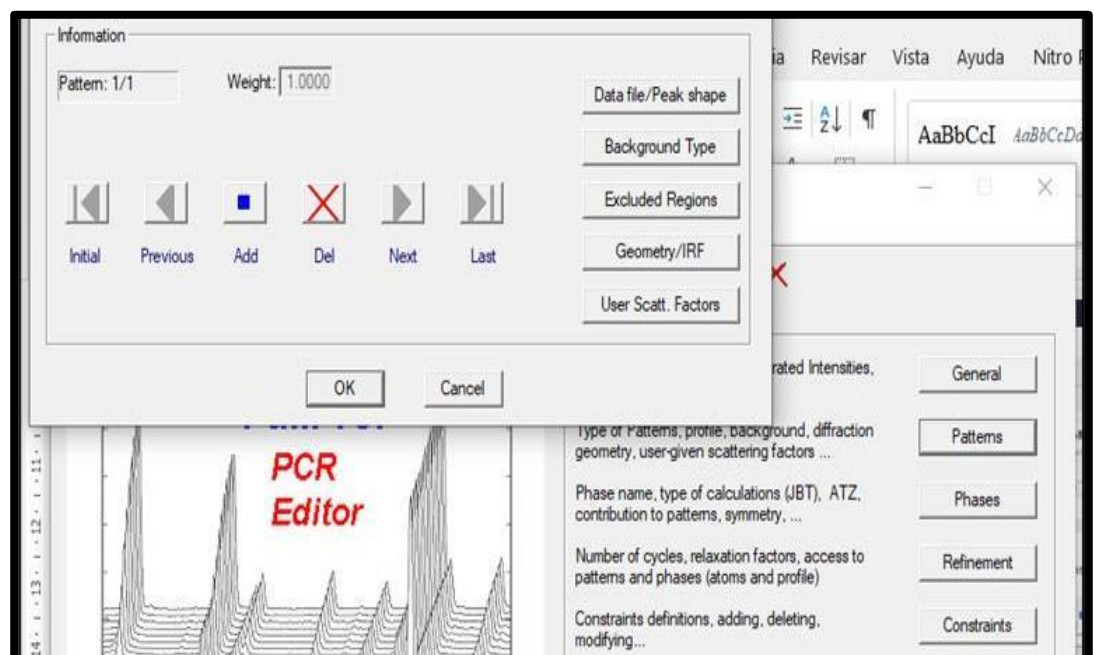
Entramos a la pestaña “general” donde ya le está dando un título automático, si queremos lo dejamos como esta o por el contrario le ponemos el título que queramos y hacemos clic en “OK”



Fuente: propia del software FullProf.

Figura 23— Configuración de título de archivo.

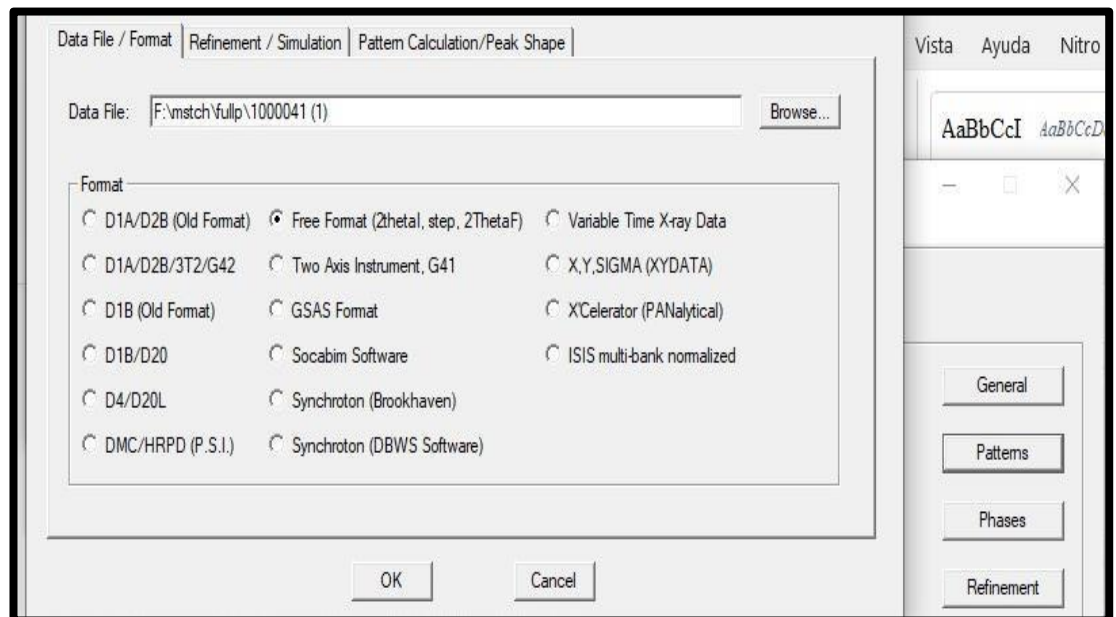
Continuamos con la segunda pestaña que es “Paterms” donde nos mandara para poder subir nuestros datos de la muestra obtenida lo cual daremos click en “data file/peak shape para poder definir.



Fuente: propia del software FullProf

Figura 24— Se carga datos del difractograma en extensión data.

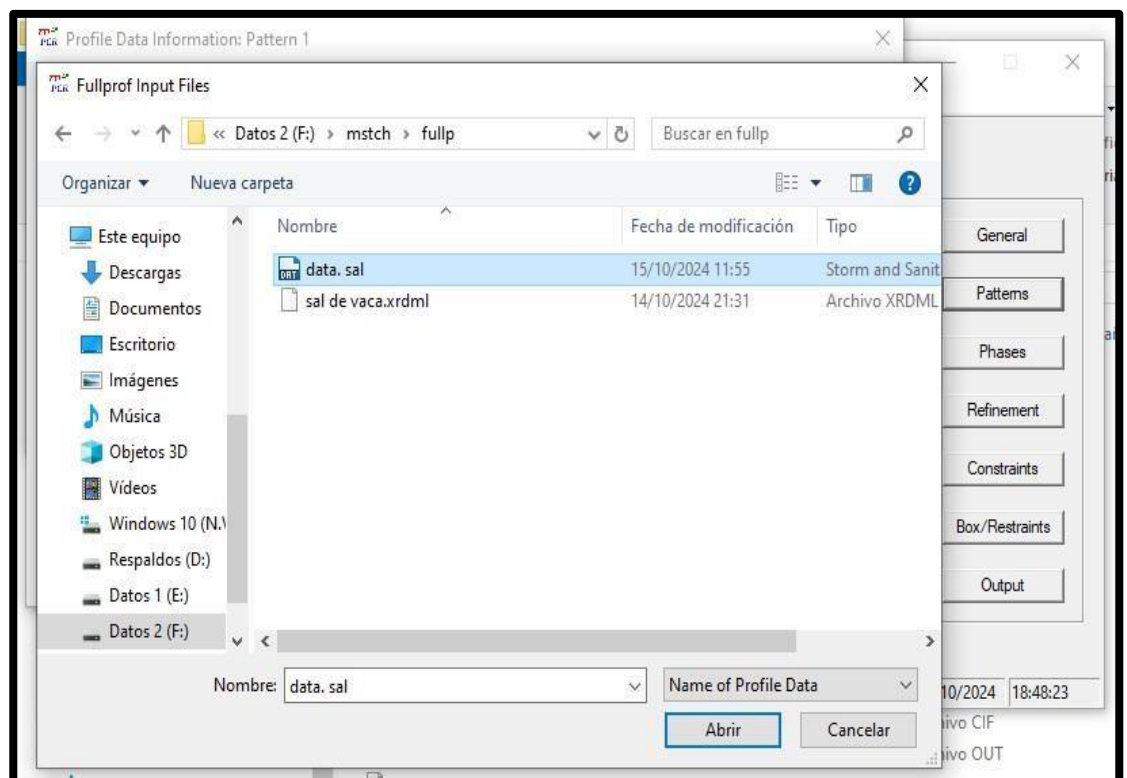
Hacemos clic en “Browse” para buscar en la carpeta que se encuentra nuestros datos.



Fuente: propia del software FullProf.

Figura 25— Información para subir los datos de la muestra.

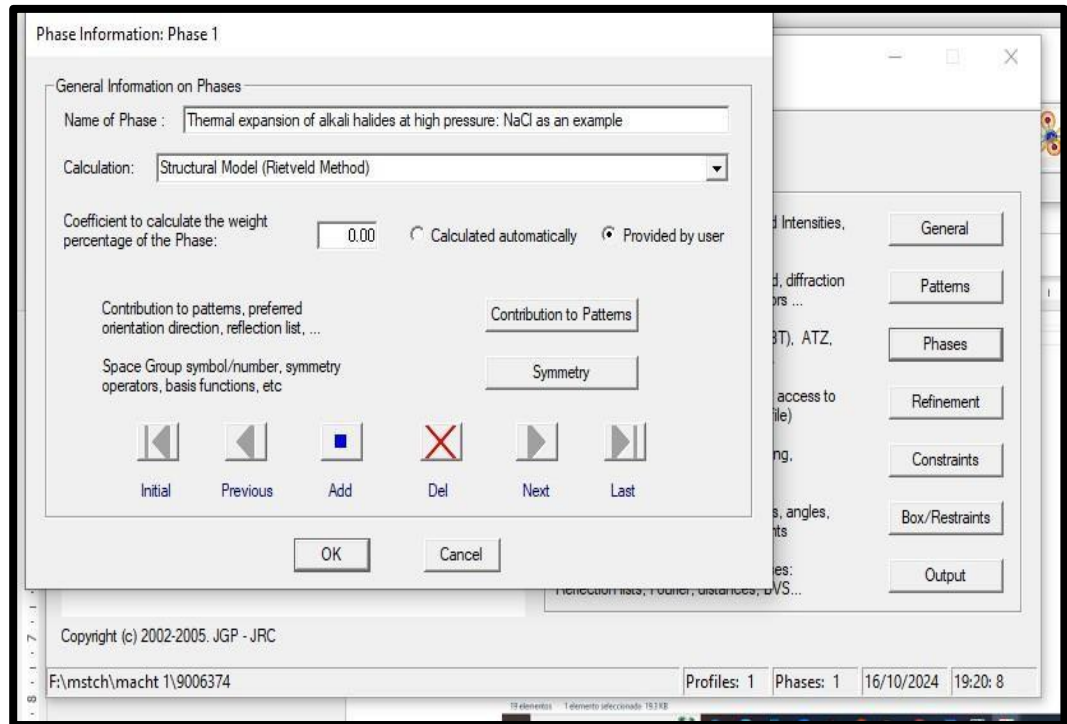
Jalamos nuestro archivo que esta con el nombre de “data.sal” y lo abrimos.



Fuente: propia del software FullProf.

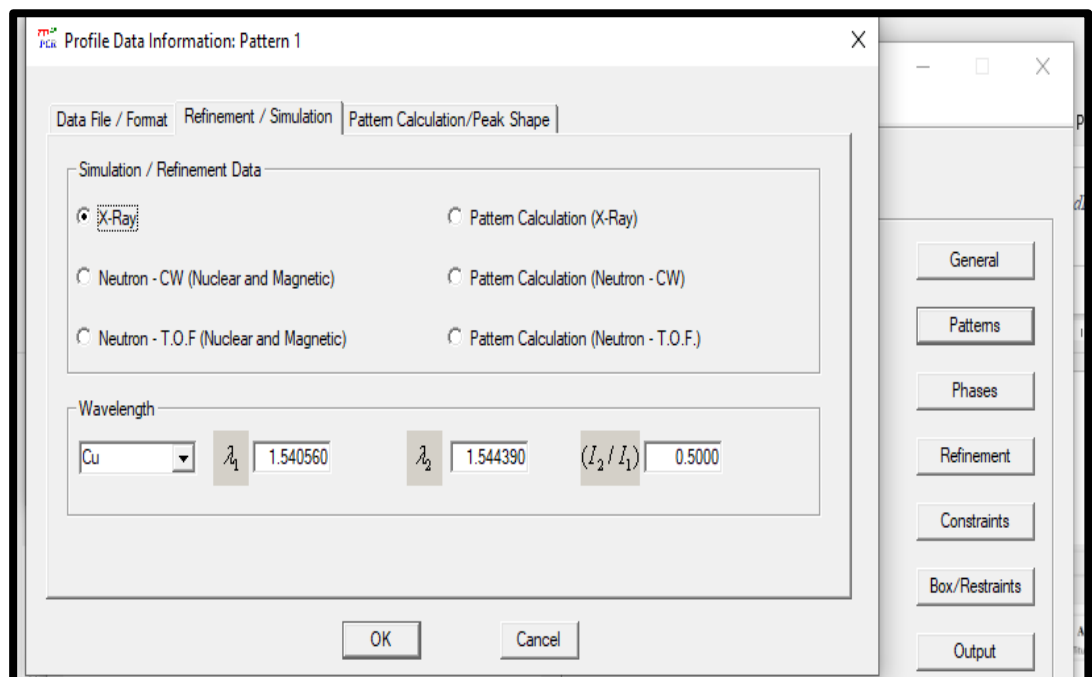
Figura 26— Abrimos el archivo que corresponde.

Vamos a la “phases” donde nos manda esta ventana donde seleccionamos “Provided by user” luego nos dirigimos a la pestaña “contribution to paterms” para ver las diferentes opciones que tenemos para cargar nuestro archivo.



Fuente: propia del software FullProf

Figura 27— Seleccionamos el archivo.
Seleccionamos la opción en “X-Ray”



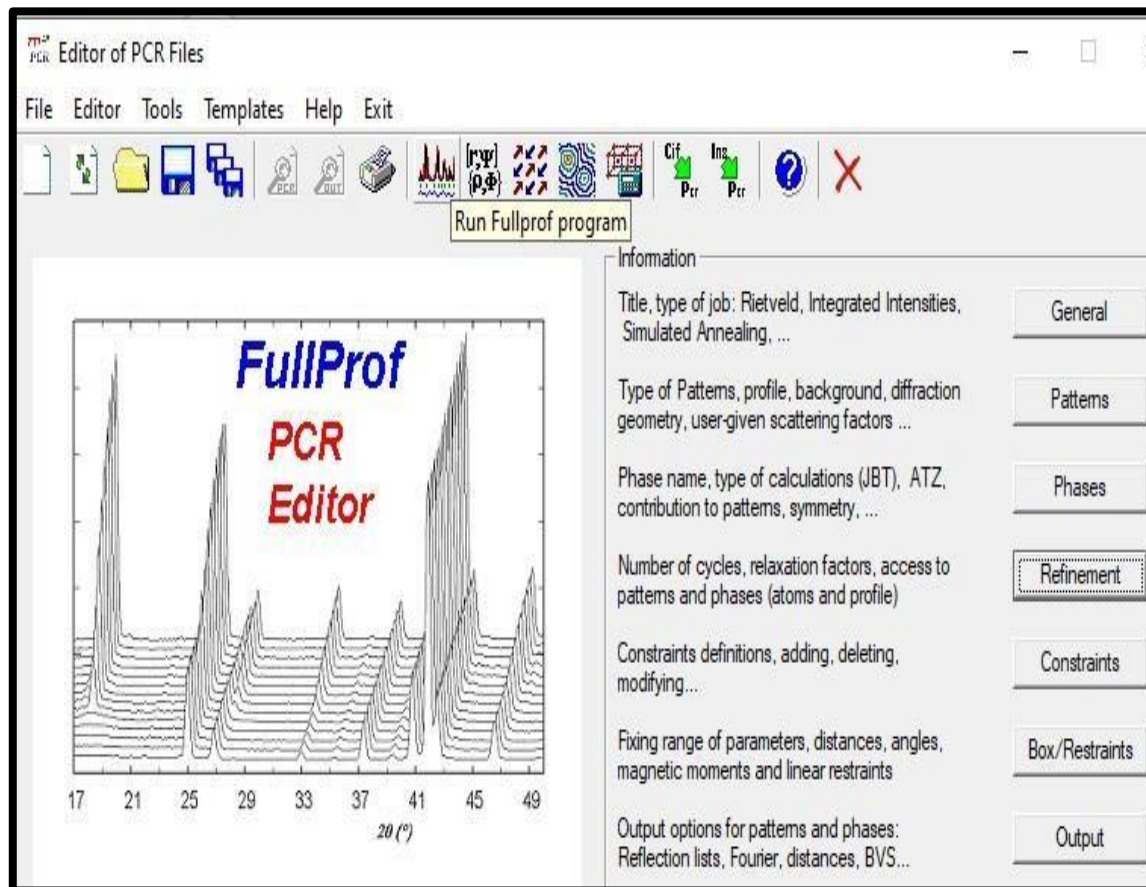
Fuente: propia se software FullProf.

Figura 28— Mejorar selección con opción "X-Ray".



Le damos clic en “save data” donde se guardará los archivos que subimos al programa para que pueda darnos el resultado que estamos buscando.

Una vez guardado hacemos click en “Run Fullprof program”, y se carga el archivo .dat.



Fuente: propia del software FullProf.

Figura 29— Visualización del archivo.

4.4.5. Características del software FullProf

FullProf es un software de análisis de difracción de rayos X y neutrones que ofrece una amplia gama de herramientas para la caracterización de materiales. A continuación, se presentan algunas de las características más destacadas del software:

- ✓ **Análisis de Patrones de Difracción:** Como el ajuste de patrones de difracción utilizando el método de Rietveld y la capacidad para manejar datos de difracción de alta resolución.
- ✓ **Refinamiento de Estructuras Cristalinas:** El refinamiento de estructuras cristalinas utilizando el método de Rietveld y la capacidad para refinar

estructuras cristalinas complejas.

- ✓ **Análisis de Fases:** La identificación y cuantificación de fases presentes en la muestra y el análisis de la composición química de las fases.
- ✓ **Modelado de Estructuras:** la creación y refinamiento de modelos estructurales como también la capacidad para modelar estructuras cristalinas complejas.
- ✓ **Ventajas y Beneficios:** La mayor precisión en la determinación de estructuras cristalinas y parámetros estructurales y mayor eficiencia en el análisis de datos de difracción.

4.5. Instrumento

Nos ha permitido realizar el análisis en el software de FullProf para darnos la cantidad de picos.

- FullProf suite
- Match!
- Excel
- Microsoft office 2016

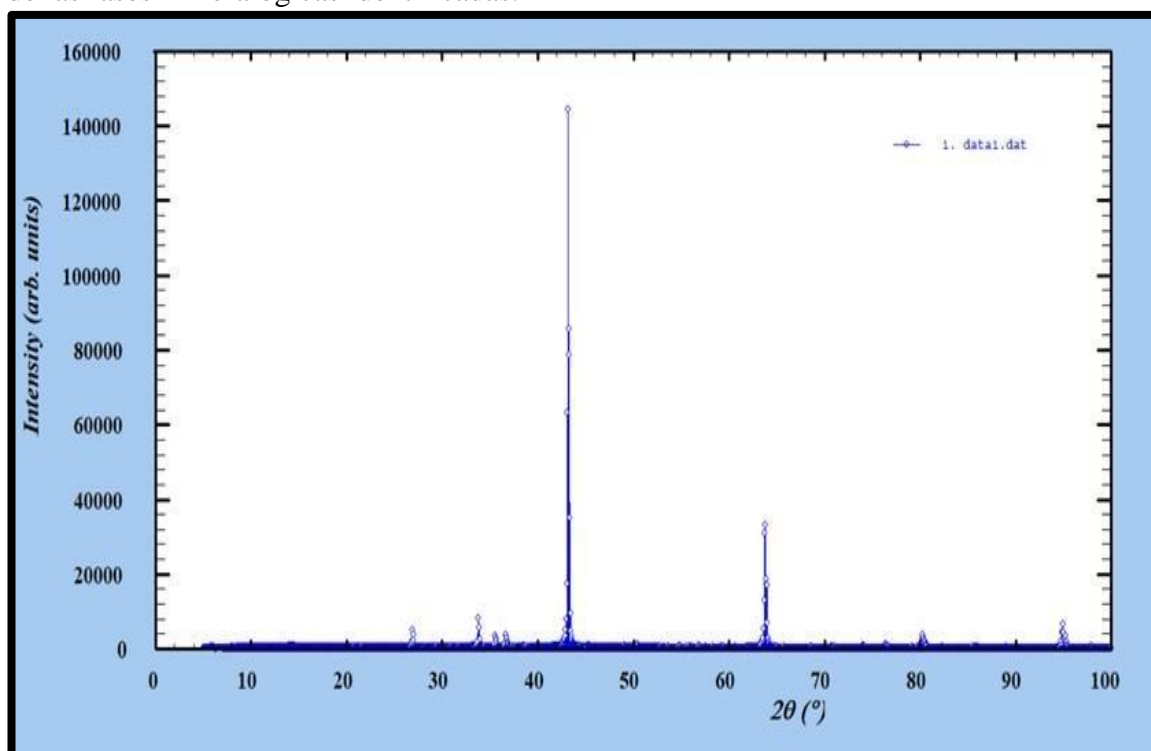
CAPITULO V

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

5.1. Análisis de los resultados

5.1.1. Identificación y cuantificación de minerales principales y secundarios

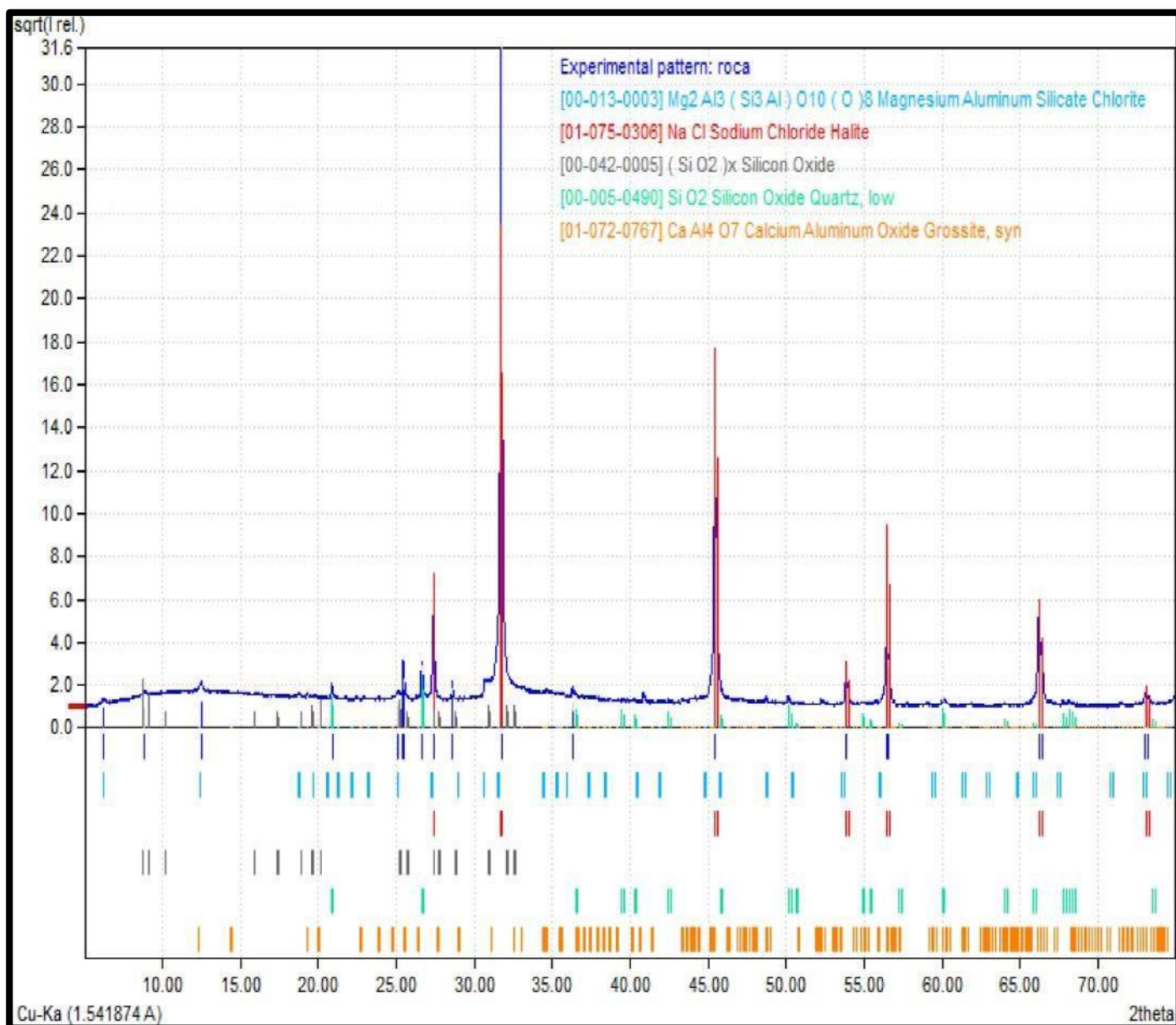
Los resultados según el objetivo identificar y cuantificar los minerales principales y secundarios presentes en la mina de sal Puca Cachi, aplicando la técnica de DRX; la figura 30 presenta patrones de difracción de rayos X (DRX) de las muestras provenientes de la Mina, obtenidos a partir de las mediciones realizadas. Estos diagramas exhiben los picos de difracción en función del ángulo 2θ , los cuales se han utilizado para identificar las fases minerales presentes en las muestras. Cada pico en el patrón de difracción corresponde a un conjunto específico de planos cristalinos en la muestra, lo que permite confirmar la presencia de las fases mineralógicas identificadas.



Fuente: Elaboración propia del software.

Figura 30— Patrón de difracción de rayos X (DRX) muestran los picos de difracción en función del ángulo 2θ .

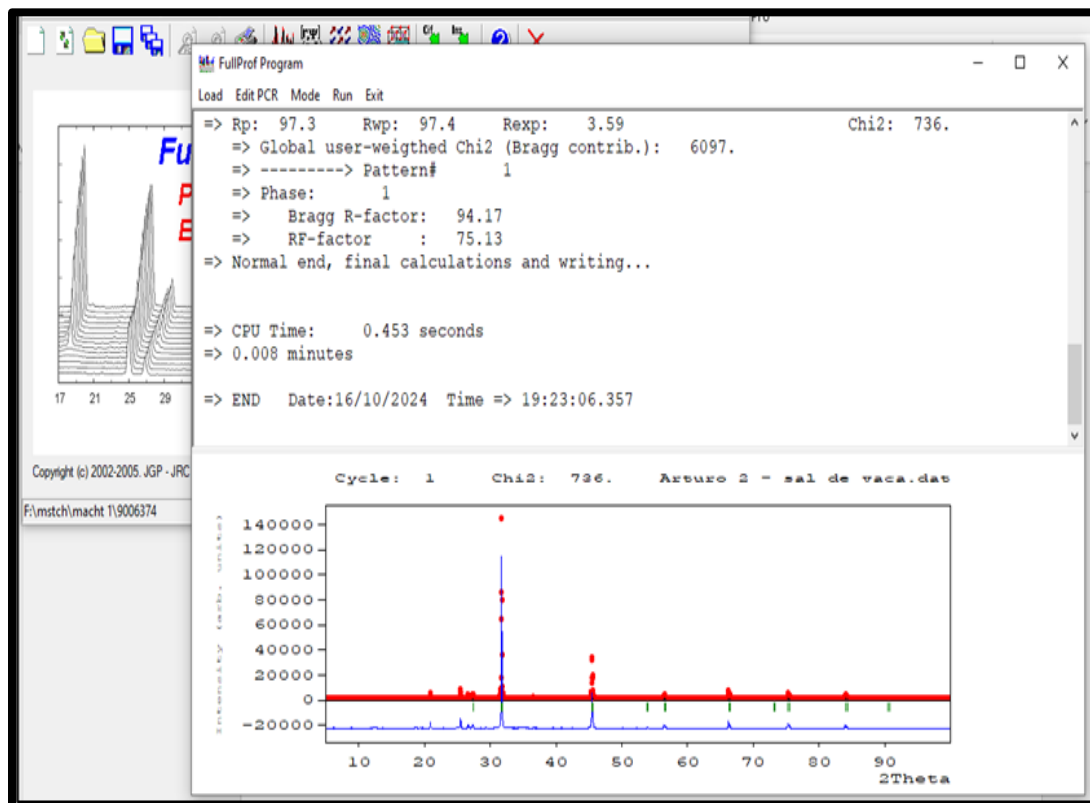
Según la Figura 31, se ha identificado la fase principal y las fases asociadas mediante el software Match! a partir del análisis del difractograma de polvo de las muestras extraídas de la mina de sal Puca-Cachi. Esto se logró a través de la comparación con una base de datos de referencia integrada en el programa. Este software permite realizar tanto análisis cualitativos como cuantitativos y cuenta con la capacidad de refinamiento de Rietveld utilizando FullProf. Además, posee una interfaz intuitiva y modos avanzados para usuarios experimentados, facilitando tanto la identificación como el refinamiento de fases en muestras de difracción de rayos X (DRX). Las fases identificadas son las siguientes:



Fuente: Elaboración propia del software Fullprof.

Figura 31— Los diagramas muestran los picos de difracción de rayos X (DRX) de las muestras obtenidas de la Mina de Sal Puca-Cachi en función del ángulo 2θ .

Recalcando este error es fallidico debido a las impurezas de primera muestra tomada del nivel 3470 del punto B.



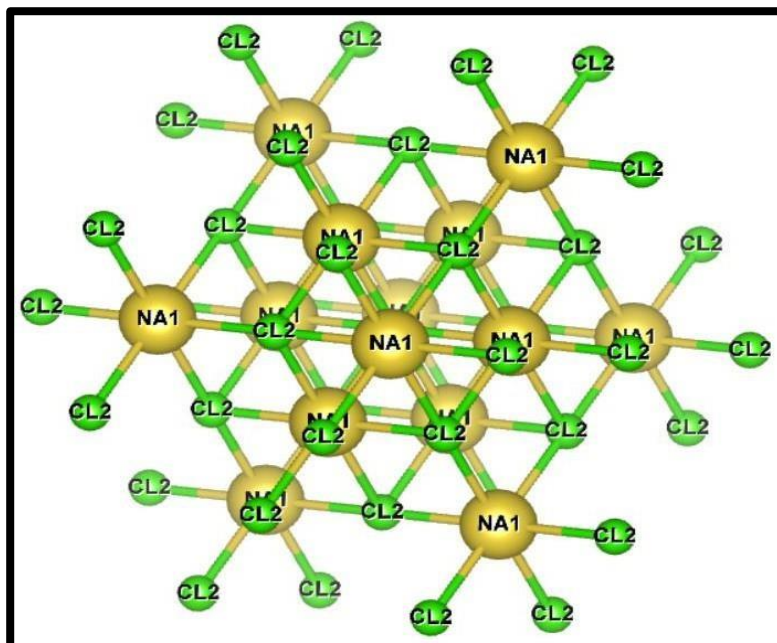
Fuente: elaboración propia del software FullProf.

Figura 32— Datos fallidos que corresponde a la muestra del nivel 3470 del frente B

5.1.1.1. Descripción de las fases minerales encontradas

- **Fase 1 (Principal): Halita**

Para MORENO, y otros (2011), la halita es conocida como sal de roca, es un mineral compuesto principalmente de cloruro de sodio (NaCl). Este mineral es altamente soluble en agua y se forma comúnmente en ambientes evaporíticos. En la figura 33, se muestra que la halita tiene una estructura cristalina cúbica, lo cual facilita su identificación mediante el uso de técnicas de difracción de rayos X (DRX). El análisis de los datos de difracción de rayos X (DRX) obtenidos de las muestras de la Mina de Sal Puca-Cachi permite no solo identificar de manera precisa la estructura cúbica característica de la halita, sino también determinar posibles impurezas como variaciones en la composición del mineral. Este análisis es fundamental para entender la formación y las propiedades físicas de la halita en el contexto geológico específico de la mina.

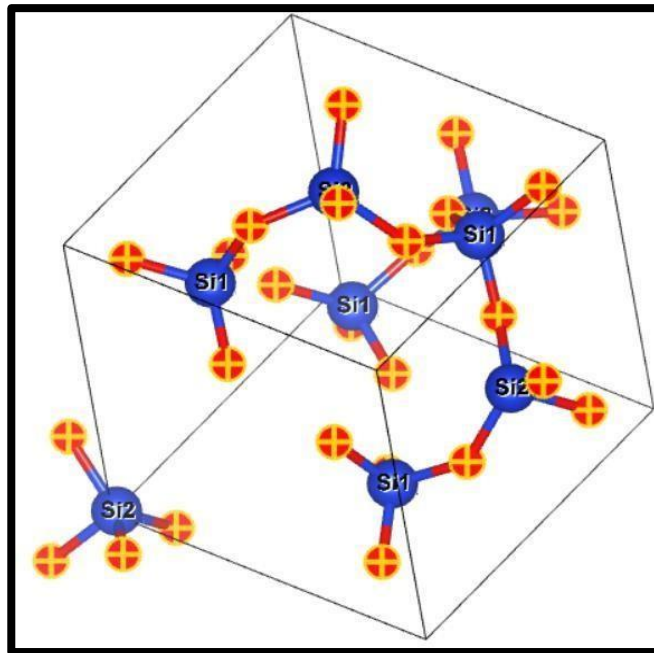


Fuente: manual de mineralogía.

Figura 33— Estructura cristalina de la halita, grafico generado utilizando el software Vesta.

- **Fase 2: Cuarzo**

Para MINERO (1999), el cuarzo, con la fórmula química SiO_2 , es uno de los minerales más abundantes en la corteza terrestre y de gran interés en estudios mineralógicos. Su estructura cristalina hexagonal, como se muestra en la figura 34 y sus propiedades piezoeléctricas lo hacen particularmente valioso. El cuarzo se presenta en una variedad de formas y colores, lo que contribuye a su diversidad y belleza. El análisis de los datos de difracción de rayos X (DRX) obtenidos de las muestras provenientes de la mina de sal Puca-Cachi es fundamental para identificar de manera precisa las características del cuarzo. Este método permite determinar su estructura cristalina hexagonal y revelar detalles sobre su composición y pureza. La DRX facilita la identificación y diferenciación del cuarzo en comparación con otros minerales presentes en las muestras, proporcionando información esencial sobre su formación y estabilidad en el ambiente geológico específico de la mina.

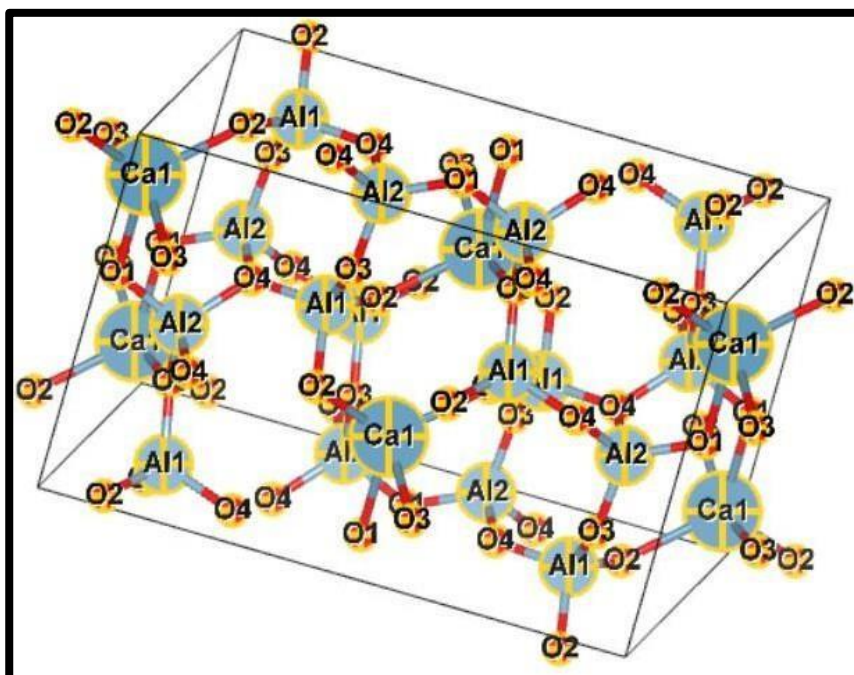


Fuente: manual de mineralogía.

Figura 34— Estructura cristalina del cuarzo, generado usando el software Vesta.

- **Fase 3: Grossita**

Según MATE (2022), la grossita, con fórmula química CaAl_4O_7 , es un mineral formado bajo condiciones de alta temperatura y baja presión que contiene calcio y aluminio. Este mineral es un componente común en inclusiones refractarias en meteoritos, y su análisis es esencial para comprender su formación y características. En la figura 35 se muestra que la grossita posee una estructura cristalina ortorrómbica. El análisis de los datos de difracción de rayos X (DRX) obtenidos de las muestras provenientes de la Mina de Sal Puca-Cachi permite identificar con precisión esta estructura ortorrómbica característica, lo cual es crucial para diferenciar la grossita de otros minerales presentes en el entorno. Asimismo, este análisis proporciona información detallada sobre las condiciones geológicas y el entorno específico en el que se formó la grossita, contribuyendo así a un entendimiento más profundo de su origen y estabilidad en el ambiente geológico de la mina.

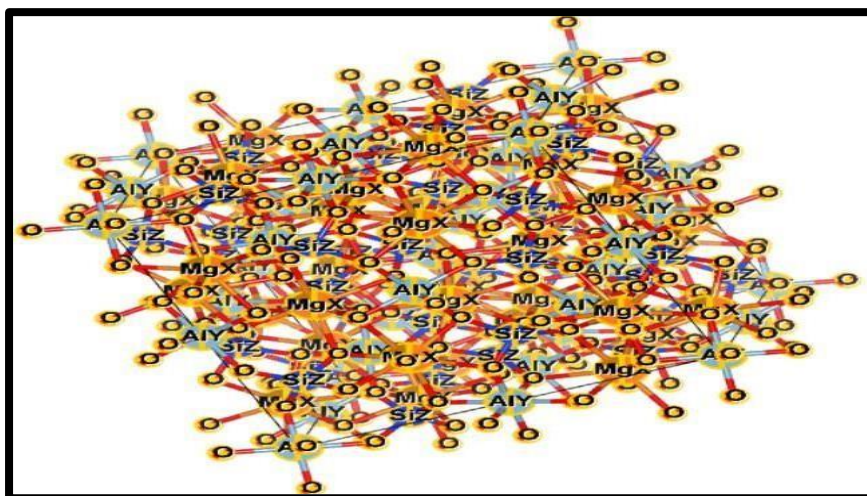


Fuente: manual de mineralogía.

Figura 35— Estructura cristalina de la Grossita, gráfico generado utilizando el software Vesta.

- **Fase 4: "Clorita tipo IIb"**

Por otro lado, PAZ (2022), la clorita es un grupo de minerales filosilicatos con una fórmula química variable, generalmente compuesta por silicatos de aluminio, hierro y magnesio. En la figura 36 se observa que la estructura de la clorita tipo IIb se caracteriza por la presencia de capas alternadas de octaedros y tetraedros, lo que le otorga propiedades físicas y químicas distintivas. El análisis de difracción de rayos X (DRX) realizado en muestras obtenidas de la Mina de Sal Puca-Cachi es esencial para identificar y diferenciar las diversas formas de clorita presentes en estas muestras. Este método permite determinar con precisión las variaciones estructurales y composicionales dentro del grupo de las cloritas, proporcionando información crucial sobre su formación y estabilidad en el ambiente geológico específico de la mina.



FUENTE: Manual de mineralogía.

Figura 36— Estructura cristalina de la Clorita IIB, gráfico generado utilizando el software Vesta.

5.2. Aplicación del método de Refinamiento de Rietveld con FullProf

Según la figura 37, el refinamiento de Rietveld se realizó utilizando el software FullProf para analizar los datos de difracción de rayos X (DRX) obtenidos de las muestras de la Mina de Sal Puca-Cachi. A continuación, se describen el procedimiento y los resultados:

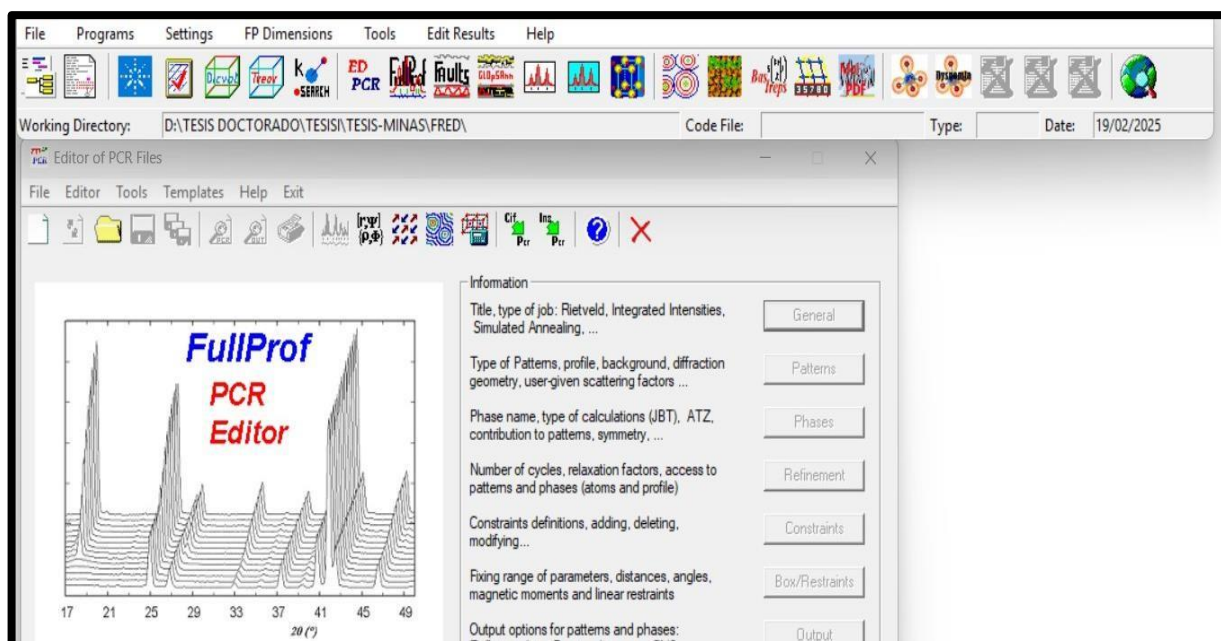


Figura 37— Interfaz y ventanas del software FullProf, utilizado para el refinamiento de Rietveld.

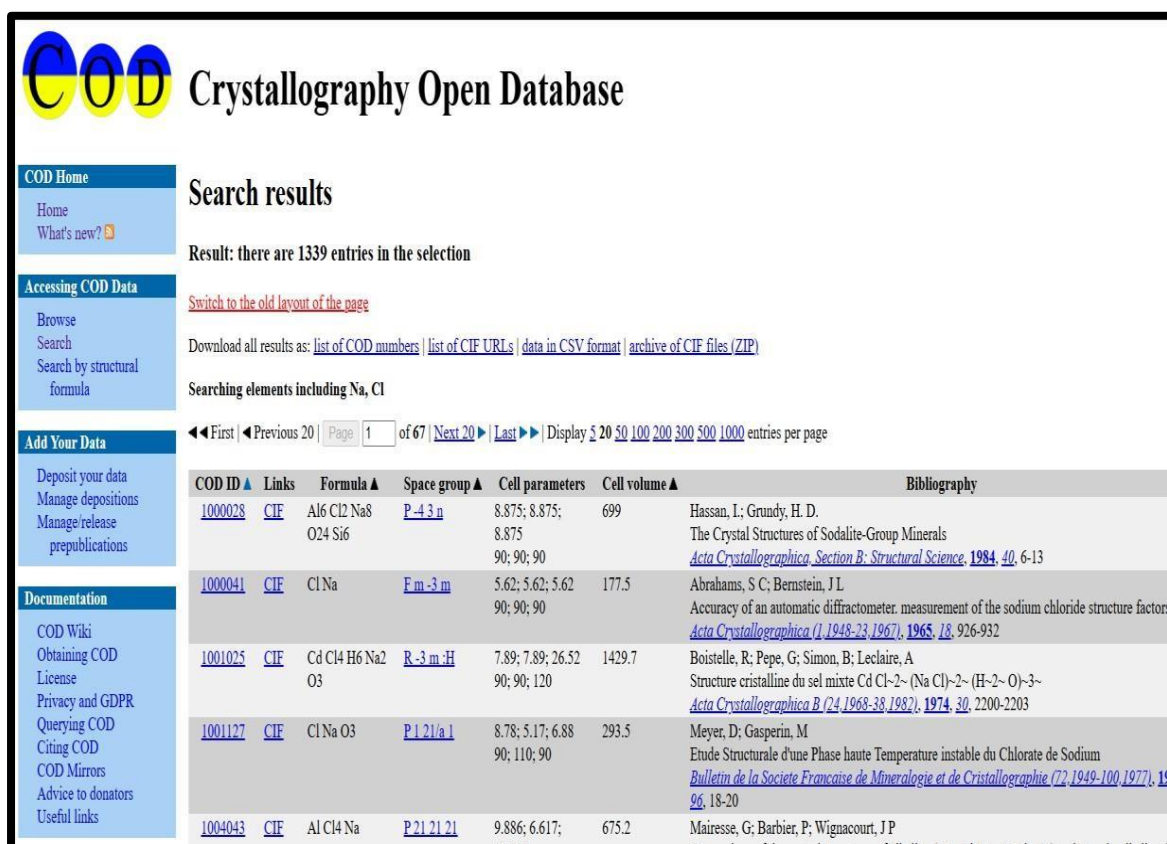
Fuente: propia del software FullProf.

El método de refinamiento por Rietveld se centra en ajustar un modelo teórico de la estructura cristalina a los patrones de difracción obtenidos experimentalmente. Este proceso toma en cuenta la intensidad de las reflexiones y ajusta parámetros clave como los de la celda unitaria, ocupaciones atómicas y la orientación preferida de los cristales. En este análisis específico, se emplearon valores R, como el Rexp, Rwp y GOF, para evaluar la calidad del ajuste del modelo a los datos experimentales, garantizando la precisión y confiabilidad del refinamiento

5.2.1. Procedimiento de refinamiento utilizando software FullProf

- **Fase 1: Fase principal NaCl**

Utilizamos la base de datos COD (Crystallography Open Database) para descargar el archivo CIF el cual como sabemos contiene toda la información de la fase como: posiciones atómicas, parámetros de red, nombre de fase.



Crystallography Open Database

Search results

Result: there are 1339 entries in the selection

Download all results as: [list of COD numbers](#) | [list of CIF-URLs](#) | [data in CSV format](#) | [archive of CIF files \(ZIP\)](#)

Searching elements including Na, Cl

◀◀ First | ◀ Previous 20 | Page 1 of 67 | Next 20 ▶ | Last ▶▶ | Display 5 20 50 100 200 300 500 1000 entries per page

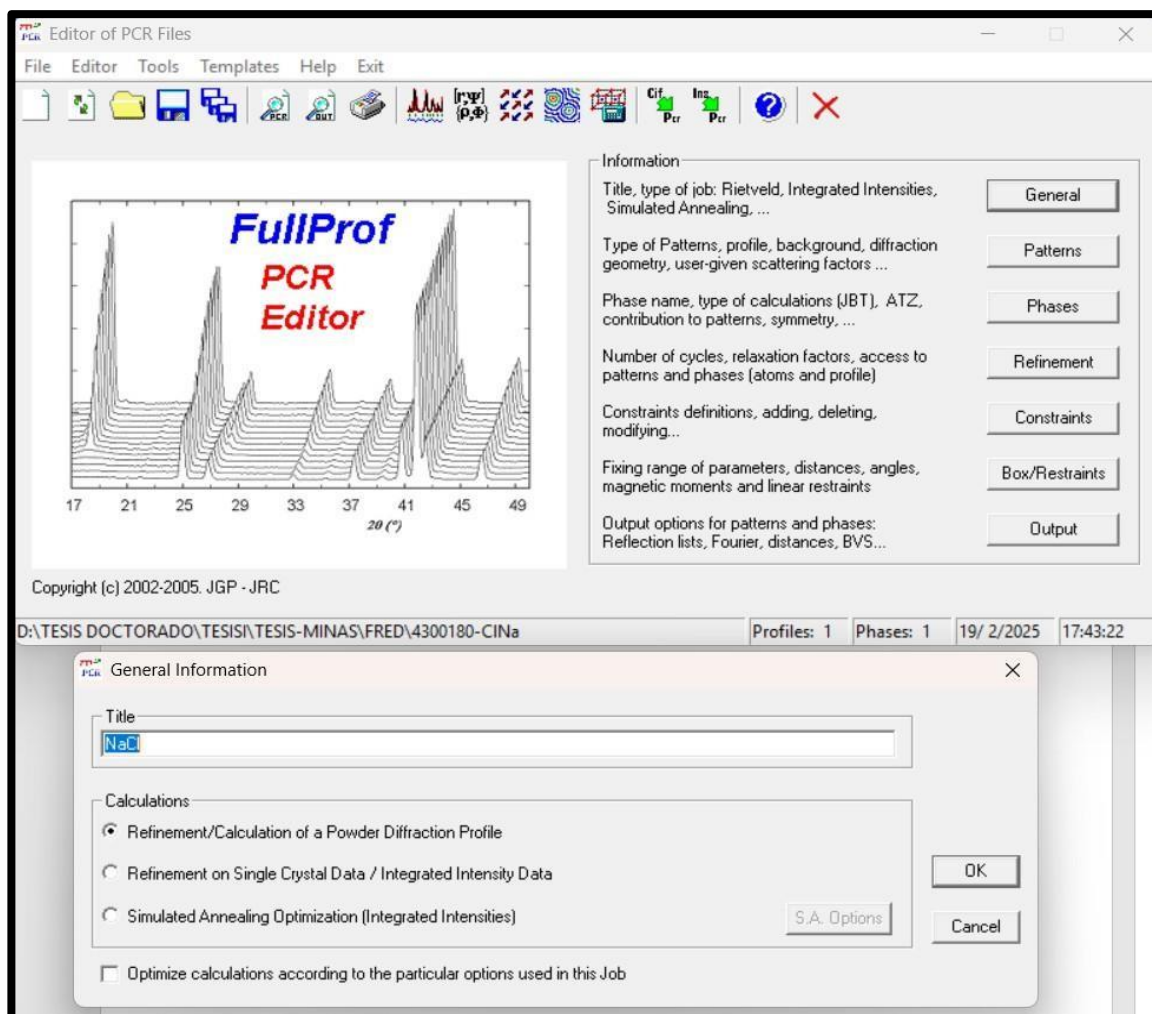
COD ID ▲	Links	Formula ▲	Space group ▲	Cell parameters	Cell volume ▲	Bibliography
1000028	CIF	Al6 Cl2 Na8 O24 Si6	P-43n	8.875; 8.875; 8.875 90; 90; 90	699	Hassan, I.; Grundy, H. D. The Crystal Structures of Sodalite-Group Minerals <i>Acta Crystallographica, Section B: Structural Science</i> , 1984 , <i>40</i> , 6-13
1000041	CIF	Cl Na	Fm-3m	5.62; 5.62; 5.62 90; 90; 90	177.5	Abrahams, S C; Bernstein, J L Accuracy of an automatic diffractometer. measurement of the sodium chloride structure factors <i>Acta Crystallographica (1,1948-23,1967)</i> , 1965 , <i>18</i> , 926-932
1001025	CIF	Cd Cl4 H6 Na2 O3	R-3m:H	7.89; 7.89; 26.52 90; 90; 120	1429.7	Boistelle, R; Pepe, G; Simon, B; Leclaire, A Structure cristalline du sel mixte Cd Cl ₂ -2~ (Na Cl)-2~ (H-2~ O)-3~ <i>Acta Crystallographica B (24,1968-38,1982)</i> , 1974 , <i>30</i> , 2200-2203
1001127	CIF	Cl Na O3	P121a1	8.78; 5.17; 6.88 90; 110; 90	293.5	Meyer, D; Gasperin, M Etude Structurale d'une Phase haute Temperature instable du Chlorate de Sodium <i>Bulletin de la Societe Francaise de Mineralogie et de Cristallographie (72,1949-100,1977)</i> , 1977 , <i>100</i> , 18-20
1004043	CIF	Al Cl4 Na	P212121	9.886; 6.617; 9.886; 6.617; 9.886	675.2	Mairesse, G; Barbier, P; Wignacourt, J P Structure cristalline du chlorure de sodium <i>Acta Crystallographica (1,1948-23,1967)</i> , 1965 , <i>18</i> , 926-932

Fuente: propia del programa.

Figura 38— Búsqueda del archivo CIF (Crystallographic Information File) de NaCl en la base de datos de cristalografía.

Estos datos de la fase principal se cargan en el software Fullprof, hasta lograr un ajuste de bondad de apropiados.





Fuente: propia del software FullProf.

Figura 39— Interfaz y ventanas del software FullProf, donde se introduce la información correspondiente a la fase principal de NaCl.

- **Fase 2: SiO₂ (cuarzo)**

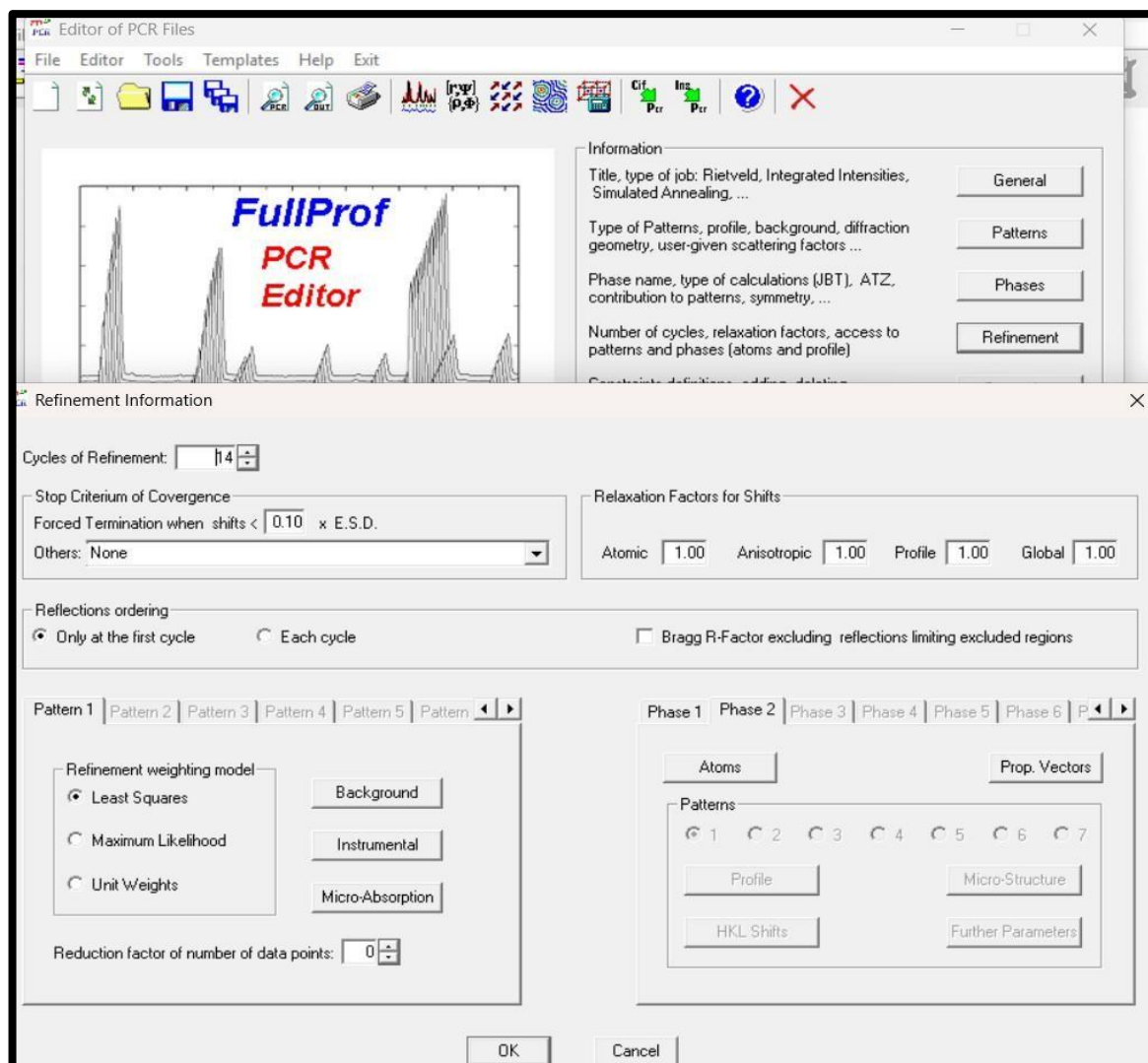
Para el análisis estructural, se empleó la base de datos Crystallography Open Database (COD) para descargar el archivo CIF correspondiente. Este archivo CIF contiene información detallada sobre la fase cristalina, incluyendo las posiciones atómicas precisas, los parámetros de red, y el nombre de la fase. La disponibilidad de esta información permite una caracterización exhaustiva de la estructura cristalina y facilita el refinamiento de los datos de difracción obtenidos.

1010806	CIF	Al ₃ Ca H ₁₂ K O ₂₂ Si ₅		10; 14.25; 8.62 90; 54.2; 90	996.3	Wyart, J; Chatelain, P Etude cristallographique de la Christianite <i>Bulletin de la Societe Francaise de Mineralogie</i> (-71,1948), 1938 , <i>61</i> , 121-126
1010921	CIF	O ₂ Si	P213	7.16; 7.16; 7.16 90; 90; 90	367.1	Barth, T F W The Cristobalite Structures. I. High-Cristobalite <i>American Journal of Science, Serie 5(1,1921-1938)</i> , 1932 , <i>23</i> , 350-356
1010935	CIF	H ₂ Mg ₇ O ₂₄ Si ₈	Pnma	18.5; 17.89999; 5.27 90; 90; 90	1745.2	Warren, B E; Modell, D I The structure of Anthophyllite H ₂ Mg ₇ (Si O ₃) ₈ <i>Zeitschrift fuer Kristallographie, Kristallgeometrie, Kristallphysik, Kristallchemie</i> (-144,1977), 1930 , <i>75</i> , 161-179
1010937	CIF	Ca ₄ F H ₁₆ K O ₂₈ Si ₈	P4/mnc	9; 9; 15.8 90; 90; 90	1279.8	Taylor, W H; Naray-Szabo, S The Structure of Apophyllite <i>Zeitschrift fuer Kristallographie, Kristallgeometrie, Kristallphysik, Kristallchemie</i> (-144,1977), 1931 , <i>77</i> , 146-159
1010938	CIF	O ₂ Si	P41212	4.964; 4.964; 6.92 90; 90; 90	170.5	Nieuwenkamp, W Die Kristallstruktur des Tief-Cristobalits Si O ₂ <i>Zeitschrift fuer Kristallographie, Kristallgeometrie, Kristallphysik, Kristallchemie</i> (-144,1977), 1935 , <i>92</i> , 82-88
1010944	CIF	O ₂ Si	Fd-3m:1	7.12; 7.12; 7.12 90; 90; 90	360.9	Wyckoff, Ralph W. G. IX. Die Kristallstruktur von β -Cristobalit SiO ₂ -2. (bei hohen Temperaturen

FUENTE: propia del software FullProf.

Figura 40— Búsqueda del archivo CIF (Crystallographic Information File) de SiO₂ (cuarzo) en la base de datos de cristalografía.

Los datos correspondientes a la fase 2 se cargan en el software FullProf para llevar a cabo el refinamiento. Este proceso continúa hasta que se obtiene un ajuste de bondad adecuado, evaluado mediante parámetros estadísticos de calidad del ajuste como el Rwp, Rp y la razón de bondad de ajuste (GOF). El software FullProf permite realizar ajustes iterativos y precisos, asegurando que el modelo cristalográfico se alinee óptimamente con los datos experimentales obtenidos, logrando así una representación fiel de la estructura cristalina



FUENTE: propia del software FullProf.

Figura 41— Interfaz y ventanas del software FullProf, donde se introduce la información correspondiente a la fase 2 SiO₂ (cuarzo).

- **Fase 3: CaAl₄O₇ (Grossita)**

Hacemos uso de la base de datos Crystallography Open Database (COD) para obtener el archivo CIF, el cual, como es conocido, incluye toda la información referente a la fase, tales como: ubicaciones atómicas, parámetros de la celda, y denominación de la fase.

Crystallography Open Database

Search results

Result: there are 4 entries in the selection

Download all results as: [list of COD numbers](#) | [list of CIF URLs](#) | [data in CSV format](#) | [archive of CIF files \(ZIP\)](#)

Searching elements including Ca, Al4, O7

◀◀ First | ◀ Previous 5 | Page 1 of 1 | Next 5 ▶▶ | Display 5 20 50 100 200 300 500 1000 entries per page

COD ID ▲	Links	Formula ▲	Space group ▲	Cell parameters	Cell volume ▲	Bibliography
1527948	CIF	Al4 Ca O7	C12/c1	12.866; 8.879; 5.44 90; 106.75; 90	595.083	Ponomarev, V.I.; Kheiker, D.M.; Belov, N.V. Crystal structure of calcium dialuminate, C A2 <i>Kristallografiya</i> , 1970 , <i>15</i> , 1140-1143
3500014	CIF	Al4 Ca O7	C12/c1	12.886; 8.883; 5.4423 90; 106.905; 90	596	Efremov, V. A.; Gutnikov, S. I.; Kartashov, A. A.; Lazoryak, B.I. Average grossite crystal structure <i>Personal communication to COD</i> , 2012
9007446	CIF	Al4 Ca O7	C12/c1	12.89; 8.88; 5.45 90; 107.05; 90	596.407	Boyko, E. R.; Wisnyi, L. G. The optical properties and structures of CaO*2Al2O3 and SrO*2Al2O3 <i>Acta Crystallographica</i> , 1958 , <i>11</i> , 444-445
9014425	CIF	Al4 Ca O7	C12/c1	12.8398; 8.8624; 5.4311 90; 106.83; 90	591.542	Goodwin, D. W.; Lindop, A. J. The crystal structure of CaO.2Al2O3 <i>Acta Crystallographica Section B</i> , 1970 , <i>26</i> , 1230-1235

Fuente: propia del programa.

Figura 42— Búsqueda del archivo CIF (Crystallographic Information File) de CaAl_4O_7 (Grossita) en la base de datos de cristalografía.

Estos datos de la fase 2 se cargan en el software Fullprof, hasta lograr un ajuste de bondad apropiados.

FullProf Editor of PCR Files

File Editor Tools Templates Help Exit

Information

Title, type of job: Rietveld, Integrated Intensities, Simulated Annealing, ...

Type of Patterns, profile, background, diffraction geometry, user-given scattering factors ...

Phase name, type of calculations (JBT), ATZ, contribution to patterns, symmetry, ...

Number of cycles, relaxation factors, access to patterns and phases (atoms and profile)

Constraints definitions, adding, deleting, modifying...

Fixing range of parameters, distances, angles, magnetic moments and linear restraints

Output options for patterns and phases: Reflection lists, Fourier, distances, BVS...

Phase Information: Phase 3

General Information on Phases

Name of Phase:

Calculation:

Coefficient to calculate the weight percentage of the Phase: Calculated automatically Provided by user

Contribution to patterns, preferred orientation direction, reflection list, ...

Space Group symbol/number, symmetry operators, basis functions, etc.

Fuente: propia del software FullProf.

Figura 43— Interfaz y ventanas del software FullProf, donde se introduce la información correspondiente a la fase 3 CaAl_4O_7 (Grossita).

- **Fase 4: Clorita Iib (Fe, Mg, Al)₂SiO₄**

Utilizamos la base de datos COD (Crystallography Open Database) para descargar el archivo **CIF** el cual como sabemos contiene toda la información de la fase como: posiciones atómicas, parámetros de red, nombre de fase.

1534623	CIF	Al15.14 Ca4 Fe0.026 Mg Mn0.024 O40 Si2.36 Ti0.3 V5.15	P-1	10.273; 10.634; 8.808 106.24; 95.71; 124.47	720.098	Arakcheeva, A.V.; Ivanov, I.T. Crystal structure of a phase of disomatic type of a variable composition CaAl(Al, V, M(I)) ₂ (V, M(II)) (Si, Al) ₂ O ₁₀ , where M(I)=Mg, M(II)=Al, Fe, Mn, Ti, Mg; and its polytype modifications and structural homologues <i>Kristallografiya</i> , 1993 , <i>38</i> , 144-161
1537910	CIF	Al0.01 Ca0.01 Fe0.35 Mg1.64 O4 Si0.99	Pbnm	4.771; 10.274; 6.011 90; 90; 90	294.643	Brown, G.E.; Prewitt, C.T. High-temperature crystal chemistry of hortonolite <i>American Mineralogist</i> , 1973 , <i>58</i> , 577-587
1537912	CIF	Al0.01 Fe0.58 Mg1.42 O4 Si0.99	Pbnm	4.775; 10.28; 6.016 90; 90; 90	295.307	Brown, G.E.; Prewitt, C.T. High-temperature crystal chemistry of hortonolite <i>American Mineralogist</i> , 1973 , <i>58</i> , 577-587
1541749	CIF	Al17.56 Fe3.14 H3.44 Mg0.96 Mn0.06 O48 Si7.76 Ti0.12 Zn0.04	C12/m1	7.871; 16.62399; 5.656 90; 90.1; 90	740.072	Tagai, T.; Joswig, W. Untersuchungen der Kationverteilung im Staurolith durch Neutronenbeugung bei 100K <i>Neues Jahrbuch fuer Mineralogie. Monatshefte (Band=Jahr)</i> , (1950-), 1985 , <i>1085</i> , 97-107

Fuente: propia del software

Figura 44— Búsqueda del archivo CIF (Crystallographic Information File) de Clorita Iib (Fe, Mg, Al)₂SiO₄ en la base de datos de cristalografía.

Estos datos de la fase 2 se cargan en el software Fullprof, hasta lograr un ajuste de bondad apropiados.

5.2.2. Resultados del refinamiento

El análisis cuantitativo realizado mediante el método de Rietveld proporcionó una comprensión detallada de la composición y estructura de las muestras de la Mina de Sal Puca-Cachi analizadas. La distribución de fases encontrada revela una predominancia marcada de la Halita, que representa el 91.756% del total, lo que sugiere que este compuesto es el componente principal dentro de la muestra. Las cantidades de las otras fases son mucho más bajas: el Cuarzo constituye el 3.521%, la Grossita el 2.075%, la “Clorita tipo Iib” constituye el 2.648% estos datos se obtienen mediante el software Fullprof que me brinda en formato docx. Esta variabilidad en las fases puede ser indicativa de un sistema geológico o ambiental heterogéneo donde la Halita es la fase dominante, posiblemente

asociada a condiciones de evaporación.

En cuanto a los parámetros estructurales derivados del refinamiento de Rietveld, el tamaño de cristalito se determinó en 29.3 nm, lo que indica que los cristalitos son relativamente pequeños, lo que puede implicar en las propiedades físicas y químicas de la muestra. La densidad cristalina reportada de 2.093 g/cm³ es consistente con las expectativas para estructuras cristalinas de estas fases, proporcionando información sobre la compactación de los cristales.

Los parámetros de la red cristalina también ofrecen información crucial sobre la estructura. Los valores reportados son: $a = 11.676 \text{ \AA}$, $b = 10.843 \text{ \AA}$ y $c = 21.095 \text{ \AA}$. Estos valores son esenciales para entender la geometría del sistema cristalino. Además, los ángulos α , β y γ son importantes para definir las relaciones espaciales entre los ejes de la celda unitaria, lo que puede influir en las propiedades anisotrópicas de los materiales.

La combinación de estos resultados estructurales y composicionales permite una mejor comprensión del comportamiento del material bajo diversas condiciones y puede influir en su aplicación en campos como la ciencia de materiales y la geología.

Tabla 4- Descripción de los minerales y porcentajes.

N°	Mineral	Porcentaje (%)	Resultados
1	Halita	91.75	Dominante
2	Cuarzo	3.521	Mediano
3	Grossita	2.075	Débil
4	Clorita Tipo IIB	2.648	Débil

FUENTE: Datos del Software Fullprof.

5.3. Interpretación de los resultados mineralógicos

5.3.1. Identificación de minerales clave

A continuación, se presentan los minerales más significativos encontrados en el análisis, basados en los resultados del método Rietveld de análisis de difracción de rayos X (XRD).

- **Halita (NaCl):** Este es el mineral principal encontrado en el análisis, representando el 91.756% del total de la muestra. La halita es de suma importancia en la mina de sal Puca-Cachi, no solo como un recurso económico clave, sino también como un indicador de la formación geológica del área. Este mineral es fundamental para la industria alimentaria, la preservación de alimentos y la producción de cloruros como el cloruro de sodio.
- **Cuarzo (SiO₂):** Con un peso de 3.521% en la muestra, el cuarzo es un mineral común en diversas formaciones geológicas. En el contexto de la mina de sal, la presencia de cuarzo puede indicar un entorno de sedimentación o la interacción con otros procesos mineralógicos. Su resistencia química y físicas lo hacen relevante en la caracterización del entorno mineral.
- **Grossita (CaAl₂O₄):** Este mineral se identificó también en cantidades menores, con 2.075% de la muestra. La grossita es importante para entender los procesos metamórficos que han afectado la región. Su formación puede estar relacionada con condiciones específicas de temperatura y presión.
- **Clorita tipo Iib (Mg,Fe)₃Si₄O₁₀(OH)₂·(Mg,Fe)₃(OH)₆:** Con un peso del 2.648%, la clorita es un mineral de interés en el contexto de los procesos de alteración hidrotermal y puede proporcionar información sobre el historial térmico de la mina.

La identificación y análisis de estos minerales no solo son fundamentales para comprender la composición mineral del área, sino que también son cruciales para la evaluación de recursos y la planificación sostenible de la explotación minera. La calidad y cantidad de estos minerales influyen directamente en las aplicaciones industriales y comerciales, así como en la viabilidad económica de la mina de sal Puca-Cachi.

5.3.2. Relaciones entre las fases minerales

En esta sección se analizar las interacciones y relaciones entre los diferentes minerales identificados en el estudio es fundamental para comprender la dinámica y el comportamiento de la muestra. A continuación, se presentan observaciones detalladas basadas en los datos reportados en el documento:

- **Composición mineral:** Los resultados de refinamiento de Rietveld indican que la Halita es el mineral dominante en la muestra, representando el 91.756 % de la composición total. Otros minerales presentes incluyen Cuarzo (3.521



%), Grossite (2.075 %) y Chlorita tipo IIb (2.648 %) estos datos se obtienen mediante el software Fullprof que me brinda en formato docx. La predominancia de la Halita sugiere que podría tener una influencia significativa en las propiedades físicas y químicas de la muestra. Además, su alta concentración podría afectar la interacción y estabilidad de los demás minerales.

- **Interacciones de la Halita:** Como mineral de sal, la Halita puede desempeñar un papel crucial como agente de estabilización para otros minerales presentes. Su presencia puede influir en la solubilidad y movilidad de otros compuestos minerales, especialmente en ambientes geológicos donde el agua es un factor clave. Por ejemplo, la Halita puede afectar la precipitación y disolución de otros minerales, alterando las condiciones químicas y físicas del entorno.
- **Relaciones geométricas y estructurales:** Los parámetros de red y las características estructurales de la Clorita tipo IIb y la Grossita, que presentan diferentes estructuras y espacios cristalinos, sugieren la posibilidad de interacciones a nivel de microminerales. La cercanía en la composición y en el espacio físico de la muestra facilita estas interacciones. La variación en la densidad y el coeficiente de absorción lineal entre estos minerales puede proporcionar información sobre su distribución y comportamiento dentro de la estructura general.
- **Impacto en la cristalización:** La comparación de tamaños de cristal y coeficientes de absorción entre las fases minerales ofrece información sobre su coexistencia y su influencia en la cristalización de la matriz mineral. Tal como, el tamaño de cristal de la Clorita tipo IIb (32.0 nm) y la Grosita (285.6 nm) sugiere que el tamaño de los cristales puede jugar un papel crucial en los procesos de nucleación y crecimiento de cristales. Estas interacciones afectan directamente la dinámica de formación y evolución de la matriz mineral.

En resumen, las interacciones y relaciones entre las fases minerales identificadas son complejas y multifacéticas. Están influenciadas por factores como la composición mineral, estructura cristalina y las condiciones ambientales. Un análisis detallado de estas relaciones proporciona una comprensión más profunda del comportamiento geológico y mineralógico de la muestra, lo cual es esencial para evaluar sus propiedades y aplicaciones potenciales.



5.3.3. Implicaciones geológicas y génesis del depósito mineral

- **Composición mineral:** La presencia de múltiples fases minerales como Halita, Cuarzo, Grossita y Clorita IIb sugiere un entorno geológico variado y complejo. La Halita, con un 91.756 % de la composición total, domina claramente la muestra, mientras que la Grossita representa un 2.075 %. Esta disparidad en las proporciones indica procesos de sedimentación y mineralización específicos que han influido en la acumulación de estos minerales. La alta concentración de Halita podría reflejar condiciones evaporíticas en el entorno sedimentario, donde la evaporación del agua salina conduce a la precipitación de sales.
- **Condiciones ambientales:** QUIROS (2004), las propiedades físicas y estructurales de los minerales, como el tamaño de los cristalitos y la densidad cristalina, proporcionan pistas valiosas sobre las condiciones ambientales durante su formación. Tal como, el tamaño de cristalito de 285.6 nm para la Grossita sugiere un proceso de formación bajo un control hidrológico significativo, posiblemente relacionado con fluidos hidrotermales. Estas condiciones hidrotermales podrían estar asociadas a la circulación de fluidos calientes que facilitan la precipitación de minerales en fracturas y cavidades.
- **Génesis hidrotermal:** CARRANZA et al., (1987) la magnitud de los coeficientes de absorción lineales de los diversos minerales (tal como, 150.846 1/cm para la Grossita) sugiere un proceso de formación hidrotermal. Las altas temperaturas y presiones típicas de los contextos geológicos asociados a sistemas de mineralización de tipo magmático o de contacto favorecen la formación de minerales con altos coeficientes de absorción. Este entorno hidrotermal podría haber sido crucial para la precipitación y crecimiento de minerales como la Grossita.
- **Preferencia de orientación:** Los valores de preferencia de orientación de los minerales, como la Grossita (0.5754957 en la dirección [3 -1 -1]), indican que ciertos planos cristalinos se han desarrollado de manera preferente. Esta preferencia puede estar relacionada con las dinámicas tectónicas del área, donde la presión y el esfuerzo tectónico han influido en la orientación de los cristales durante su formación. La orientación preferente puede proporcionar información sobre las condiciones de deformación y los regímenes de estrés en la región geológica.



- **Modelos geológicos:** LIRA (2005), la diversidad de fases minerales y sus propiedades estructurales permite desarrollar modelos geológicos más precisos que representen la evolución del depósito mineral. La combinación de datos de difracción de rayos X y refinación de Rietveld ofrece una perspectiva integral sobre la génesis del depósito y su contexto geológico.

5.4. Discusión de resultados

Según VERA (2016) en su tesis titulada “Aplicación del método de difracción de rayos X para la identificación y cuantificación de minerales de alteración hidrotermal en las concesiones mineras del proyecto La Bonita - Sucumbíos”, se centraron en la identificación y cuantificación de minerales de alteración hidrotermal en 32 muestras recolectadas en las concesiones mineras, donde se observaron rocas con alteraciones hidrotermales visibles a lo largo de la carretera. Utilizando la difracción de rayos X (DRX), esta investigación proporcionó una base para determinar el tipo predominante de alteración hidrotermal en diferentes zonas, apoyándose inicialmente en una descripción macroscópica de las muestras. Para nosotras en nuestra tesis los resultados obtenidos fueron la identificación y cuantificación de minerales principales y secundarios presentes en la mina de sal Puca Cachi, aplicando la técnica de DRX; que presenta patrones de difracción de rayos X (DRX) de las muestras provenientes de la Mina de Sal Puca-Cachi, obtenidos a partir de las mediciones realizadas, obtuvimos diagramas que exhiben los picos de difracción en función del ángulo 2θ , los cuales se han utilizado para identificar las fases minerales presentes en las muestras. Cada pico en el patrón de difracción corresponde a un conjunto específico de planos cristalinos en la muestra.

Para SANCHEZ (2018) en su trabajo de tesis titulada (Análisis mineralógico y multielemental de la ceniza volcánica, producto de la erupción del Cotopaxi en 2015, por difracción de rayos x (DRX) y espectrometría de masas con plasma acoplado inductivamente (ICP-MS) y sus posibles aplicaciones e impactos. Concluyeron que mediante el análisis por XRD, se identificaron los minerales mayoritarios presentes en la fase cristalina de la ceniza. Estos incluyen plagioclasas, ortoclasas y óxidos de silicio (cristobalina). Además, se encontraron minerales minoritarios, como óxidos de hierro (magnetita, hematita y maghemita), yeso, dolomita y mayenita. En nuestra investigación respecto a la identificación de los minerales principales y secundarios concluimos que la halita es nuestro mineral predominante principal y como secundarios

tenemos el cuarzo, grossita y clorita, también se logró obtener sus parámetros, como su tamaño del cristalito y su densidad cristalina que son sumamente cruciales para entender sus propiedades físicas y las posibles impurezas que puedan tener.

Según QUILLE (2006), en su estudio 'Caracterización de arcillas de la provincia de Morropon por técnicas físicas y químicas según el análisis de Difracción de Rayos X concluyo la presencia predominante de cuarzo, seguido por albita y algunos minerales arcillosos, sin grandes diferencias entre ellos. En nuestro trabajo de investigación con la técnica de difracción de rayos X concluimos la presencia del mineral predominante es la halita con un porcentaje mucho mayor (91.765%), como también minerales en menores cantidades como cuarzo, grossita y clorita.

HUAYPAR (2012), en su estudio (Aplicación de la técnica de difracción de rayos x (DRX) en la industria minera), concluyo que la técnica de difracción de rayos x (DRX) en una industria minera, es relevante y fundamental. Esta herramienta analítica permite la identificación y cuantificación de especies minerales en muestras de polvo, proporcionando datos cruciales sobre su estructura cristalina. La contribución de la DRX es vital para comprender las propiedades y el comportamiento de los minerales en diversos procesos industriales. En nuestro trabajo de investigación respecto a la técnica de difracción de rayos x mediante el Refinamiento de Fullprof concluimos que es de suma importancia para realizar este tipo de estudios; es una técnica avanzada y eficiente que nos permite interpretar de mejor manera los resultados y optimizar los métodos de extracción y purificación del mineral en función de la composición mineralógica identificada.

CAPITULO VI

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

6.1. Conclusiones

La caracterización mineralógica de las muestras de sal de la mina Puca-Cachi ha revelado que la halita (NaCl) es el mineral predominante, consolidándose como el recurso principal para la explotación. Además, se identificaron en menores proporciones cuarzo, grossita y clorita tipo IIb, lo que apunta a un entorno de formación evaporítica y ofrece un contexto geológico relevante para la región. Mediante el uso de la Difracción de Rayos X (DRX) y el refinamiento de Rietveld con el software FullProf, se logró no solo identificar y cuantificar las fases minerales, sino también obtener información clave sobre la estructura cristalina y las impurezas presentes. Estos resultados son fundamentales para mejorar los procesos de extracción y purificación, aumentando así la eficiencia y sostenibilidad de las operaciones mineras.

La identificación y cuantificación de las fases minerales en las muestras de sal de la Mina Puca-Cachi revelaron que la halita (NaCl) es el mineral predominante, constituyendo el 91.756% de la muestra. Además, se identificaron otros minerales en cantidades menores, como el cuarzo (3.521%), la grossita (2.075%) y la clorita tipo IIb (2.648%). Estos resultados no solo establecen un perfil mineralógico detallado, sino que también indican un entorno de formación evaporítica, lo cual es fundamental para comprender las condiciones geológicas y los procesos mineralógicos del área.

La aplicación del método de refinamiento de Rietveld con el software FullProf resultó en una interpretación precisa de los patrones de difracción, proporcionando información valiosa sobre la estructura cristalina de la halita y otros minerales presentes. Los parámetros obtenidos, como el tamaño de cristalito (29.3 nm) y la densidad cristalina (2.093 g/cm³), son cruciales para entender las propiedades físicas de los minerales y las posibles impurezas. Esta información es vital para optimizar los procesos de extracción y purificación mineral, mejorando la eficiencia y sostenibilidad de las operaciones mineras en la Mina Puca-Cachi.

Asimismo, se concluye que el conocimiento detallado de la composición mineralógica de la sal de la Mina Puca-Cachi permite identificar las fases cristalinas presentes y sus



respectivas proporciones, lo que resulta determinante para seleccionar los métodos más adecuados de extracción y purificación. Este enfoque mineralógico no solo mejora la eficiencia técnica de los procesos, sino que también reduce el impacto ambiental al optimizar el uso de recursos y minimizar la generación de residuos durante la explotación.

6.2. Recomendaciones

- Se recomienda realizar la ampliación extensa del muestreo en diferentes zonas de la mina, como también incorporar análisis isotópicos y de inclusiones fluidas, para determinar la composición mineralógica y estructural de las muestras de sal de la mina Puca Cachi.
- Para identificar y cuantificar los minerales principales y secundarios de la mina de sal Puca Cachi, se recomienda las mejoras en la técnica de análisis; como refinar las técnicas de DRX y el modelo de refinamiento de Rietveld para aumentar la precisión de los resultados como también el análisis comparativo.
- Para aplicar el método de refinamiento de Rietveld con el software se debe conocer la estructura cristalina aproximada de las fases presentes en la muestra y hacer uso del programa Match_i, implementar un Programa de Capacitación Continua: dado que la técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y el método de refinamiento de Rietveld con FullProf permiten revelar la complejidad mineralógica de las muestras, es recomendable realizar un programa de capacitación para docentes y estudiantes dentro de la universidad.
- Se recomienda la implementar un laboratorio especializado en Difracción de Rayos X (DRX) dentro de la Escuela Académico Profesional, equipado con instrumentos adecuados y software de análisis como FullProf y Match!. Esta infraestructura permitirá realizar investigaciones con mayor profundidad sobre la composición mineralógica y cristalográfica de materiales regionales. Además, fomentará la formación práctica de estudiantes y docentes en técnicas avanzadas de caracterización, promoviendo así la autosuficiencia investigativa, la innovación tecnológica y la consolidación de líneas de investigación en geología aplicada y procesos extractivos.



REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- ACOSTA VENEGAS, AVELINO.** (2018) *Selección del método de explotación para el yacimiento minero salinas Cachihuancaray por la.*
- GIACOVAZZO, C ET AL.** (1992) *Fundamentals of Crystallography.*
- ANDIA, A.** (2022) Mineralogía, Química e inclusiones fluidas en los depósitos de nitratos de Maria Elena , Ila. [aut. libro] E Arce S. Collao y A. Andía. Chile : Boletín de la Sociedad Chilena de Química., 2022, Vol. 47.
- GABRIEL, E., HUAYPAR, Y. y CONGRESO NACIONAL DE MINERÍA.** (2012) s.l. *Aplicación de la técnica de difracción de rayos x (DRX) en la industria minera.:* Lima: Colegio de Ingenieros del Perú. Capítulo de Ingenierías de Minas, Geología y Metalurgica.
- ARIZA RODRIGUEZ, NOEMI.** (2022) "Montevive: La desconocida y estratégica mina de celestina de la cuenca granada". EUROPA : REVISTA MINERALS.
- BERNAOLA ALONSO, JOSE y CASTILLA GOMEZ, JORGE.** (2013) *Perforación y Voladura de rocas en Minería.*
- BONEWITZ, R.** (2012) Rocas y minerales. Londres : DK Publishing. : 2.
- CAMPBELL, A. R., LUNDBERG, S. A., & DUNBAR, N. W.** (2001) *Solid inclusions of halite in quartz: evidence for the halite trend.*
- QUILLE, R., RUBÉN, Y OTROS.** (2006) *Caracterización de arcillas de la provincia de Morropon por técnicas físicas y químicas.* 2, Lima : Revista de Investigación de Física, Vol. Vol. 9. ISSN 1605-7744.
- CONTRERAS FAYAD, DAVID ANDREI Y JARAMILLO MEJÍA, JOSE MARIA.** (2010) *Caracterización mineralógica de las rocas que componen el cuerpo volcánico que aflora en cercanías al municipio de Iza. Boyacá. Colombia. Petrografía, metalografía y análisis elemental por medio de un microscopio electrónico de barrido. p. 45-54., Colombia : Ingeniería Investigación y Desarrollo., Vols. vol. 10, no 2 .*
- CARRANZA, ARTURO EDWARDS y CAMARGO AGUAYO, EDUARDO.** (1987) *Actividad hidrotermal submarina y su importancia en la genesis de sulfuros minerales.*
- CHAVEZ, ALMONACID.** (2018) "Geología y exploración del prospecto Skarn de Fer (Au) de Pitumarca-Andahuaylas Apurímac". APURIMAC : s.n.
- CORDERO LEYVA, OSWALDO.** (2014) *Modelo de ecuaciones estructurales por el método de mínimo cuadrados parciales.* José trinidad: s.n.
- DONAIRES MATAMOROS, FELICIANO VICENTE.** (1997) *Sostenimiento de minas subterráneas.*
- FERNANDEZ MURIEL, MIGUEL ANGEL.** (1982) *Estudio de las trayectorias de una radiación monocromática a través de un capilar con cristal líquido esméctico.*



- PASTOR ROBLES, BLANCA FLOR.** (2019) *Población y muestra*. Pueblo continente : s.n.
- FLORES CARILLO, LILIA ANA.** (2015) *Población Y Muestra*.
- GARCIA, R. LUISA M.** (2017) *Introducción al Método Rietveld*.
- GARCIA, R.** (2007) *Introducción al metodo Rietveld*.
- GEOCATMIN. INGEMMET.** [En línea]
- GIACOVAZZO.** (1992) *Fundamentals of Crystallography*.
- GLOSARIO TECNICO MINERO.** (2001) Ministerio de Energía y Minas. 2001. Bogotá : s.n.
- GOMEZ, CASANOVA.** (2015) *Análisis Cuantitativo de fases por difracción de rayos x del material de referencia Zecuar-2 para su certificación*. Sexta convención cubana de ciencias de la tierra, Geociencias., Cuba.
- GOOGLE EARTH PRO.** [En línea]
- GRAJALES, TEVNI.** (2000) *Tipos de investigación*.
- HUAYPAR GABRIEL, Y.** (2012) *Aplicación de la técnica de difracción de rayos x (DRX) en la industria minera*. Colegio de Ingenieros del Perú. Capítulos de Ingenieros del Perú., Lima : Capítulos de Ingeniería de Minas, Geológica y Metalúrgica.
- HUAYPAR GABRIEL, E.** (2012) *Aplicación de la técnica de difracción de rayos x (DRX) en la industria minera*. Lima : Capitulo de Ingenierías de Minas, Geológica y Metalurgica.
- HUYGENS, CHRISTIAN.** (1680) (*Principio de Huygens*) *Difracción de ondas*.
- INGEMMET.** 15, 2003.
- INGEMMET.** 2010.
- INGEMMET. INGEMMET.** [En línea]
- LIRA HERRERA, HECTOR.** (2005).*Actualización del modelo geologico conceptual del yacimiento geotermic..*
- MATE JR ZEFERINO, ALBERTO.** (2022) *Análisis de propiedades de producción a través de diferentes substratos provenientes de mercado grossita..*
- MAZUELAS ESTEBAN, ÁNGEL.** (2002)*Caracterización por difracción de rayos X de heteroestructuras de semiconductores III-V: aplicación al diseño de superredes tensadas para epitaxia de GaAs-Si*. Madrid : Servicio de Publicaciones., ISBN.
- MELGAREJO, J. C., Y OTROS.** (2010) *Técnicas de caracterización mineral y su aplicación en exploración y explotación minera*. Mexico [online] : Bol. Soc. Geol., ISSN.
- MINERO, SERVICIO GEOLOGICO.** (1999).*Cuarzo*. Argentina : s.n.
- Montevive: la desconocida y estratégica mina de celestina de la cuenca de Granada.*
- ARIZA RODRÍGUEZ, NOEMI.** (2022) España : Revista Minerals.



MORENO RAMON, H., SARA IBAÑEZ, ASENSIO Y BLANQUER GISBERT, JUAN MANUEL. 2011*Haluros.*

PAZ SALADO, NATALIA. (2022) *Clorita, temas de biología y geología del NOA.*

RODRIGUEZ CARBAJAL, J. (1993) *PROGRAMA FULLPROF.*

QUILLE, RUBEN. (2006) *Caracterización de arcillas de la provincia de Morropon por técnicas físicas y químicas.* Lima: Revista de Investigación Física.,. ISSN 1605-7744.

QUIROGA AGUARTO, MAURO. (2021) *Evaluación del efecto térmico en arcillas por difracción de rayos X : análisis cuantitativo de fases por el método de Rietveld.* Lima : Repositorio institucional Cybertesis UNMSM.,.

QUIROS DIAZ, CATHERINA. (2004) *Diatomeas de pequeños ríos andinos y su utilización como indicadores de condiciones ambientales.*

RAQUEJO JARAMILLO, DANIELA. (2015) Desarrollo de un protocolo para la aplicación del método rietveld y del estándar interno en la caracterización de materiales cerámicos con contenidos de amorfos..

RIPOLL MARTINEZ, MARTIN. (2015)*Cristalografía.*

SANCHEZ, ESTEBAN, ET AL. (2018) *Análisis mineralógico y multielemental de la ceniza volcánica, producto de la erupción del Cotopaxi en 2015, por difracción de rayos x (DRX) y espectrometría de masas con plasma aclopadado inductivamente (ICP-MS) y sus posibles aplicaciones e impactos.* Ecuador : infoANALÍTICA.,

SILVA ARCE, DANIEL SALVADOR. (2023)"*Estudio de pretratamiento de mineral refractario de oro con altos contenidos de sulfuro de hierro (PIRITOSO), mediante tostación oxidante: caracterización por difracción de rayos X, variación de temperatura, tiempo, tamaño de partícula*". Universidad Nacional de San Agustín de Arequipa. Arequipa : s.n. pág. 184.

TUESTA VASQUEZ, ERIKA. (2012) *Aplicación de la técnica de difracción de rayos X (DRX) en la industria minera.*

VENEGAS AVELINO, ACOSTA. (2018) *Selección del método de explotación para el yacimiento minero salinas Cachihuancaray.*

VERA BURAI, MARIA ALEJANDRA. (2016) "*Aplicación del método de difracción de rayos x para la identificación y cuantificación de minerales de alteración hidrotermal sobre la concesión minera del proyecto la Bomita - subumbios*". Escuela Superior Politécnica de Litoral, Guayaquil, Ecuador.

ZARATE, ANDRES. (2018) *Modelo matemático de convolución y el patrón de difracción.*

.



ANEXOS



Anexo A:

Tabla 5- Matriz de Consistencia.

PROBLEMA	OBJETIVOS	HIPÓTESIS	VARIABLES	INDICADORES	METODOLOGIA
<p>Problema general</p> <p>¿Cómo influye la composición mineralógica y estructural de las muestras de sal de la mina Puca - Cachi en la provincia de Andahuaylas 2024, determinada mediante la técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y el método de refinamiento de Rietveld con FullProf, en la optimización de la explotación de recursos minerales?</p>	<p>Objetivo general</p> <p>Determinar la composición mineralógica y estructural de las muestras de sal de la mina Puca-Cachi en la provincia de Andahuaylas 2024, utilizando la técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y el método de refinamiento de Rietveld con software FullProf para optimizar la explotación de recursos minerales.</p>	<p>Hipótesis general</p> <p>La aplicación de la técnica de Difracción de Rayos X (DRX) y el método de refinamiento de Rietveld con FullProf revelará la composición mineralógica y estructural compleja en las muestras de sal de la mina Puca-Cachi, que incluye minerales no previamente identificados, lo cual permitirá desarrollar métodos más eficientes y sostenibles para la explotación de los recursos minerales de la región.</p>	<p>Variable Independiente</p> <p>Técnica de Difracción de Rayos X (DRX).</p>	<p>Granulometría (mm). tiempo de molienda (min).</p>	<p>Tipo: Aplicada Diseño: Experimental Población/muestra Mina de Sal Puca-Cachi Técnica: Difracción de Rayos X (DRX).</p>

Problema específico	Objetivos específicos	Hipótesis específico	Variable Dependiente	Intensidad de los picos de difracción, índices de bondad de ajuste del refinamiento (por ejemplo, Rwp, Rp, χ^2).
<p>¿Qué minerales principales y secundarios se pueden identificar y cuantificar en las muestras de sal de la mina Puca - Cachi mediante la técnica de Difracción de Rayos X (DRX), y cómo contribuye este perfil mineralógico detallado a la comprensión y mejora de la explotación de la mina?</p> <p>¿Cómo permite el método de refinamiento de Rietveld, utilizando el software FullProf, obtener una interpretación precisa de los patrones de Difracción de Rayos X (DRX) para determinar la estructura</p>	<p>Identificar y cuantificar los minerales principales y secundarios presentes en las muestras de sal de la mina Puca-Cachi, aplicando la técnica de Difracción de Rayos X (DRX), para establecer un perfil mineralógico detallado.</p> <p>Aplicar el método de refinamiento de Rietveld con el software FullProf para obtener una interpretación precisa de los patrones de DRX, lo que permitirá determinar la estructura cristalina y</p>	<p>La identificación y cuantificación de los minerales principales y secundarios mediante DRX en las muestras de sal de la mina Puca-Cachi mostrará una predominancia de halita (NaCl), acompañada de diversos minerales de sulfato y cloruro, lo que proporcionará un entendimiento integral de la calidad y la pureza de la sal, facilitando así la implementación de técnicas de extracción y procesamiento.</p> <p>El uso del método de refinamiento de Rietveld con el software FullProf permitirá una caracterización detallada de la estructura cristalina de los minerales en las muestras de sal de la mina Puca-Cachi, revelando la presencia de impurezas</p>	<p>Caracterización Mineralógica de muestras de Mina de Sal Puca-Cachi Provincia de Andahuaylas.</p>	

<p>cristalina y las posibles impurezas en las muestras de la mina Puca – Cachi?</p> <p>¿De qué manera el conocimiento de la composición mineralógica de la mina de sal Puca Cachi y estructura incide en mejorar en mejorar los procesos de extracción y purificación mineral?</p>	<p>posibles impurezas en las muestras.</p> <p>Evaluar de qué manera la composición mineralógica contribuye en mejorar los procesos de extracción y purificación mineral.</p>	<p>específicas y variaciones estructurales que, una vez identificadas, mejorarán significativamente la eficiencia de los métodos de extracción y purificación mineral.</p> <p>Con el conocimiento de la composición mineralógica de la sal de la mina Puca Cachi mejoraran significativamente la eficiencia de los métodos de extracción y purificación del mineral.</p>			
--	--	--	--	--	--

Tabla 6-Cuadro comparativo "Índice de espectrometría con masas y Difracción de rayos X".

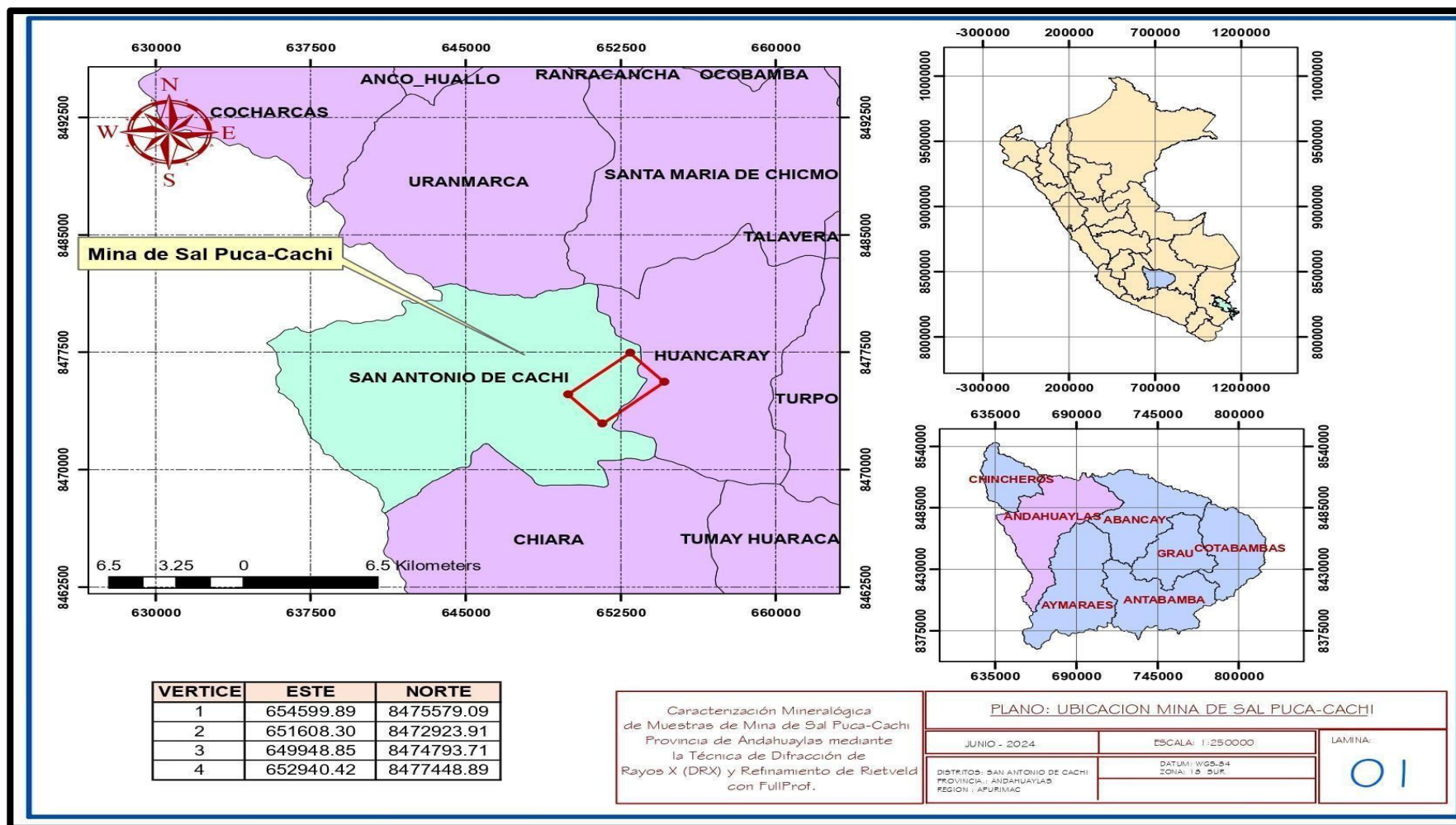
CUADRO COMPARATIVO	
INDICE DE ESPECTROMETRIA CON MASAS (ICP-MS)	DIFRACCIÓN DE RAYOS X (DRX)
<ul style="list-style-type: none"> ✓ Técnica de espectrometría de masas que utiliza un plasma de alta temperatura para ionizar átomos y moléculas. ✓ Se utiliza para analizar la composición elemental de muestras, especialmente para detectar metales y elementos traza. ✓ Proporciona información sobre la concentración de elementos en una muestra. ✓ Se enfoca en la composición elemental. 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Técnica de difracción que utiliza rayos X para determinar la estructura cristalina de materiales. ✓ Se utiliza para identificar fases cristalinas, determinar la estructura atómica y analizar la cristalinidad de materiales. ✓ Proporciona información sobre la estructura cristalina y la composición de fases en una muestra. ✓ Se enfoca en la estructura cristalina.
FUENTE: propia	

Tabla 7- Ventajas y desventajas de la técnica de difracción de rayos X.

TECNICA DE DIFRACCIÓN DE RAYOS X (DRX)	
VENTAJAS	DESVENTAJAS
<ul style="list-style-type: none"> ✓ Determinación de estructura cristalina: DRX es una técnica poderosa para determinar la estructura cristalina de materiales. ✓ Identificación de fases: Permite identificar fases cristalinas presentes en una muestra. ✓ Análisis no destructivo: La técnica es no destructiva, lo que significa que la muestra no se altera durante el análisis. ✓ Información detallada: Proporciona información detallada sobre la estructura atómica y la cristalinidad de materiales. ✓ Amplia aplicabilidad: Se puede aplicar a una amplia variedad de materiales, incluyendo metales, cerámicas, polímeros y biomateriales. 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Requiere muestras cristalinas: La técnica requiere que las muestras tengan una estructura cristalina bien definida. ✓ Limitaciones en muestras amorfas: No es adecuada para analizar materiales amorfos o con estructura cristalina desordenada. ✓ Requiere preparación de muestras: La preparación de muestras puede ser laboriosa y requiere cuidado para evitar alterar la estructura cristalina. ✓ Interpretación de resultados: La interpretación de los resultados puede ser compleja y requiere experiencia en cristalografía. ✓ Equipo especializado: Requiere equipo especializado y costoso, lo que puede ser una limitación para algunos laboratorios.
FUENTE: propia	

Anexo B

PLANO DE UBICACIÓN DE MINA DE SAL PUCA CACHI

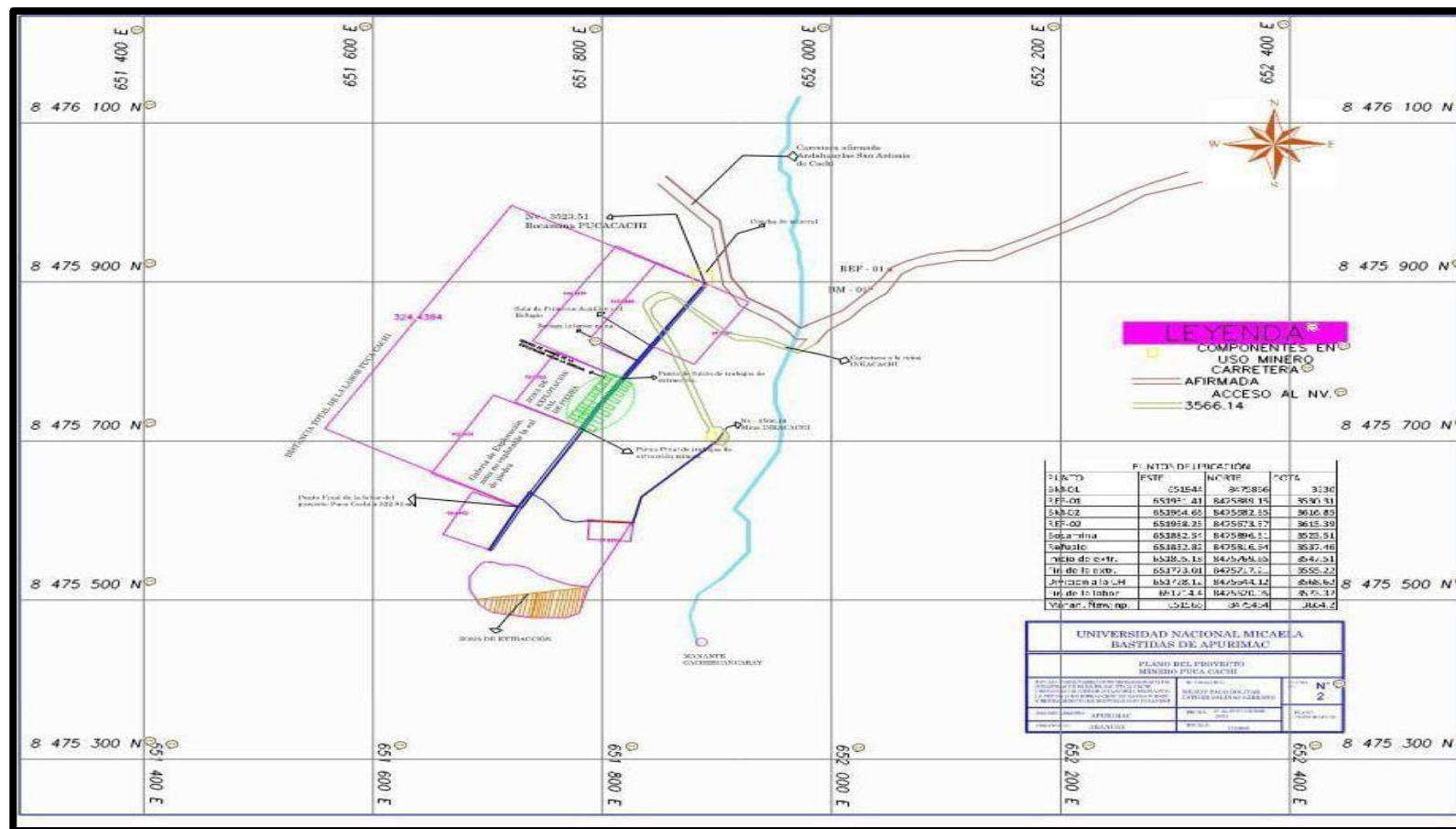


Fuente: elaboración propia

Figura 45- Plano de ubicación mina de sal Puca Cachi.

Anexo C

PLANO HORIZONTAL DE MINA DE SAL PUCA CACHI



Fuente: Elaboración propia.

Figura 46-Plano horizontal de la mina de sal Puca Cachi.

ANEXO D: RESULTADOS DEL REFINAMIENTO DE RIETVEL CON EL SOFTWARE FULLPROF

File 1 : "D:\ING MINASTESIS\EYW\roca.raw"

Range Number: 1

R-Values

Rexp : 2.51 Rwp : 14.66 Rp : 9.79 GOF : 5.85

Rexp` : 3.33 Rwp` : 19.49 Rp` : 15.60 DW : 0.27

Quantitative Analysis - Rietveld

Phase 1 : Halite	91.756 %
Phase 2 : Quartz	3.522 %
Phase 3 : Grossite	2.075 %
Phase 4 : "Chlorite Iib"	2.648 %

Structure 1

Phase name	Halite
R-Bragg	7.043
Spacegroup	225
Scale	0.0191725434
Cell Mass	233.771
Cell Volume (Å ³)	179.72735
Wt% - Rietveld	91.756
Crystallite Size	
Cry size Lorentzian (nm)	347.0
Crystal Linear Absorption Coeff. (1/cm)	164.621
Crystal Density (g/cm ³)	2.160
Preferred Orientation (Dir 1 : 0 0 2)	0.5407654
Lattice parameters	
a (Å)	5.6433639

Site	Np	x	y	z	Atom Occ	Beq
s1	4	0.00000	0.00000	0.00000	NA+1 1	1.667
s2	4	0.50000	0.50000	0.50000	CL-1 1	1.4



Structure 2

<u>Phase name</u>	<u>Quartz</u>
R-Bragg	5.493
Spacegroup	154
Scale	0.000802416715
Cell Mass	180.252
Cell Volume (Å ³)	113.28783
Wt% - Rietveld	3.522
Crystallite Size	
Cry size Lorentzian (nm)	48.2
Crystal Linear Absorption Coeff. (1/cm)	95.144
Crystal Density (g/cm ³)	2.642
Lattice parameters	
a (Å)	4.9176071
c (Å)	5.4093488

Site	Np	x	y	z	Atom Occ	Beq
s1	3	0.47000	0.00000	0.66667	SI+4 1	0.56
s2	6	0.41500	0.26800	0.78600	O-2 1	0.96

Structure 3

<u>Phase name</u>	<u>Grossite</u>
R-Bragg	7.400
Spacegroup	15
Scale	2.94693073e-005
Cell Mass	1039.999
Cell Volume (Å ³)	594.38009
Wt% - Rietveld	2.075
Crystallite Size	
Cry size Lorentzian (nm)	285.6
Crystal Linear Absorption Coeff. (1/cm)	150.846
Crystal Density (g/cm ³)	2.905
Preferred Orientation (Dir 1 : 3 -1 -1)	0.5754957
Lattice parameters	

Site	Np	x	y	z	Atom	Occ	Beq
s1	2	0.00000	0.00000	0.00000	MG+2	1.037e-006	1
					FE+2	1	1
s2	4	0.00000	0.66780	0.00000	MG+2	0.7134	1
					FE+2	0.2866	1
s3	4	0.31500	0.00000	0.92570	O-2	1	1
s4	8	0.18900	0.16670	0.07740	O-2	1	1
s5	8	0.22480	0.16690	0.19370	SI+4	0.66	1
					AL+3	0.34	1
s6	4	0.80300	0.00000	0.76430	O-2	1	1
s7	8	0.51100	0.22800	0.23630	O-2	1	1
s8	4	0.82800	0.00000	0.57110	O-2	1	1
s9	8	0.13100	0.34630	0.42850	O-2	1	1
s10	4	0.00000	0.83360	0.50000	MG+2	0.1807	1
					FE+2	0.8193	1
s11	2	0.00000	0.50000	0.50000	AL+3	0.96	1
s12	4	0.28870	0.00000	0.85520	H	1	2
s13	4	0.83770	0.00000	0.63390	H	1	2
s14	8	0.15860	0.33590	0.36980	H	1	2



Anexo E

PANEL FOTOGRAFICO



Figura 46—Visualización de personal de la mina AMA PUCA CACHI.



Figura 47—Visualización de muestras extraídas de sal.



Figura 48—Laboratorio de Física -UNMSM, moliendo la muestra.



Figura 49—Visualización de colocación de muestra en la porta acero.



Figura 50—Visualización de equipo Difractómetro de rayos X.