



## ANÁLISIS CINÉTICO DE LA DESHIDROXILACIÓN DE LA CAOLINITA: ESTUDIOS EXPERIMENTALES Y MEDIANTE SIMULACIONES COMPUTACIONALES

**Iván Polcowñuk**,<sup>1</sup> **Anabella Mocciaro**,<sup>1</sup> **Susana Conconi**,<sup>1</sup> **Gabriela Aurelio**,<sup>2</sup> **Nicolás M. Rendtorff**,<sup>1</sup> **Diego Richard**<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro de Tecnología de recursos Minerales y Cerámica (CETMIC, CICPBA-CONICET-UNLP). Camino Parque Centenario y 506, M. B. Gonnet, Argentina; <sup>2</sup>Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones, Centro Atómico Bariloche (CNEA), Av. Bustillo 9500, S. C. de Bariloche, Argentina.

Correo electrónico de contacto: [richard@fisica.unlp.edu.ar](mailto:richard@fisica.unlp.edu.ar)

El caolín es una arcilla natural cuya fase cristalina principal es la caolinita. Su uso como materia prima para la producción de cerámica tiene siglos, y actualmente tiene múltiples aplicaciones en diversas industrias [1]. En general, su desempeño tecnológico es dependiente de su procedencia debido a diferencias en composición, granulometría, cristalinidad, etc. A su vez, varias de sus aplicaciones requieren de la realización de tratamientos térmicos, y en el rango 400-650 °C la caolinita se deshidroxila dando lugar al metacaolín, el cual es un aluminosilicato no cristalino, por lo que el estudio de su estructura resulta un desafío experimental y teórico [2, 3].

En este trabajo estudiamos el proceso de deshidroxilación durante la producción de metacaolín y evaluamos la energía de activación ( $E_a$ ) del mismo. Se consideraron dos caolines: un estándar internacional bien cristalizado y otro nacional de uso industrial. Se aplicaron distintos modelos para el proceso analizado mediante mediciones termogravimétricas y de termodifracción de neutrones, obteniendo valores de  $E_a$  en el intervalo 40-60 kcal/mol.

Por otro lado, se modeló el proceso mediante cálculos de primeros principios, proponiendo distintas variantes para la extracción de una molécula de agua de la celda unidad de la estructura de la caolinita ideal, y se determinaron valores de  $E_a$  de unos 70 kcal/mol.

Los resultados obtenidos mediante esta metodología que combina experimentos y modelado computacional permiten comparar la energía de activación de distintos caolines y contrastar los valores con un valor de referencia proveniente de su modelización teórica. Asimismo, invitan a extender estos análisis a otros caolines, involucrando pretratamientos a estas materias primas, otras técnicas experimentales adicionales y también modelos más elaborados.

### Referencias

- [1] Schroeder, P. A.; Erickson, G. *Elements*, **2014**, 10, 177.  
[2] Izadifar, M.; Thissen, P.; Steudel, A.; Kleeberg, R.; Kaufhold, S.; Kaltenbach, J.; Schuhmann, R.; Dehn, F.; Emmerich, K. *Clay Clay Miner.*, **2020**, 68, 319.  
[3] Richard, D.; Martínez, J. M.; Mizrahi, M.; Andrini, L.; Rendtorff, N. M. *J. Electron Spectros. Relat. Phenomena*, **2022**, 254, 147128.