

TENDENCIAS ESTRUCTURALES Y MECANICAS DE MINERALES TIPO BASTNASITA QUE CONTIENEN ETR: UN ESTUDIO SISTEMATICO A TRAVES DE LA DFT

Julián Del Pla,¹ Nicolas Rendtorff,¹ Diego Richard¹

¹ Centro de Tecnología de recursos Minerales y Cerámica (CETMIC) –
Camino Parque Centenario 2499-2599

Correo electrónico de contacto: juliandelpla@quimica.unlp.edu.ar

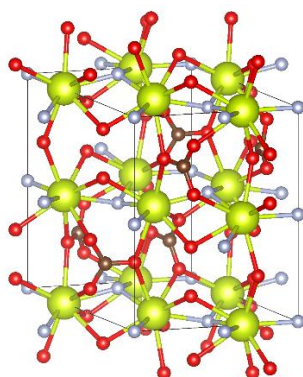


Figura 1. Estructura cristalina de la unidad celda de la bastnasita-(Ce). Átomos de Ce en amarillo, C en marrón, O en rojo y F en azul claro.

La bastnasita es un mineral compuesto por fluorocarbonatos de elementos de tierras raras (ETR). Debido a que se presenta en la naturaleza como una mezcla compleja de dichos elementos, su caracterización estructural y química resulta dificultosa. Su estudio es de gran importancia para la potencial explotación de ETR en la provincia de Buenos Aires. En la Figura 1 se puede observar un ejemplo de este tipo de estructura.

En este trabajo se realizó un estudio computacional sistemático, en el marco de la teoría del funcional densidad (DFT), de las propiedades estructurales y mecánicas de una serie de sistemas tipo bastnasita. En primera instancia se estudiaron estructuras que contienen un solo tipo de ETR ($X(\text{CO}_3)\text{F}$ con $X = \text{La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd}$ o Y) encontrando tendencias que se corresponden con el fenómeno de contracción lantánida, resultando en una disminución de los parámetros de celda y un aumento del módulo de compresibilidad, al disminuir el radio iónico del ETR.

Luego, se estudiaron estructuras de composición mixta variable de La y Gd, $\text{La}_{(1-x)}\text{Gd}_x(\text{CO}_3)\text{F}$, mostrando que las propiedades del sistema varían en forma aproximadamente lineal con la composición. En base a esto, se propuso una relación de tipo Vegard para predecir las propiedades de una estructura mixta que contiene La, Ce y Nd, obteniendo un muy buen acuerdo con la estructura explícitamente calculada.

Los cálculos DFT permitieron obtener tendencias y, a partir de ellas, construir relaciones cuantitativas de referencia que pueden ayudar a acotar y simplificar la interpretación de sistemas de tipo bastnasita complejos, a su vez que proveen una base para extender este tipo de estudios al resto de los minerales de la familia de la bastnasita como la sinquisita y la parisita.