

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON

**FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS
DIVISION DE ESTUDIOS SUPERIORES**



**ASPECTOS BASICOS DEL ANALISIS QUIMICO
DE MATERIALES GEOLOGICOS**

TESIS

**COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO
ACADEMICO DE MAESTRO EN CIENCIAS QUIMICAS
(ESPECIALIDAD EN QUIMICA ANALITICA)**

PRESENTA

FERNANDO VELASCO TAPIA

Monterrey, N. L.

Diciembre de 1996

MI. C. C. FERMINDO VERMASCOCO TRAPIA 1996

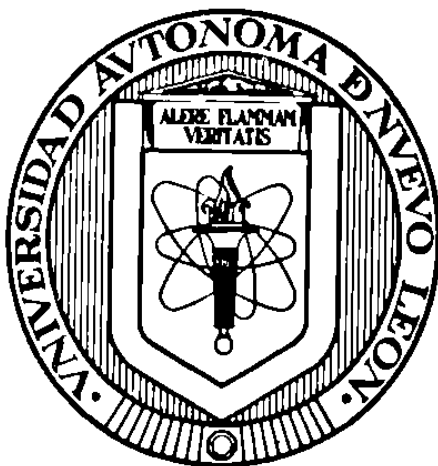
TM
QE515
V4
c.1



1080074508

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON

**FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS
DIVISION DE ESTUDIOS SUPERIORES**



**ASPECTOS BASICOS DEL ANALISIS QUIMICO
DE MATERIALES GEOLOGICOS**

T E S I S

**COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO
ACADEMICO DE MAESTRO EN CIENCIAS QUIMICAS
(ESPECIALIDAD EN QUIMICA ANALITICA)**

P R E S E N T A

FERNANDO VELASCO TAPIA

Monterrey, N. L.

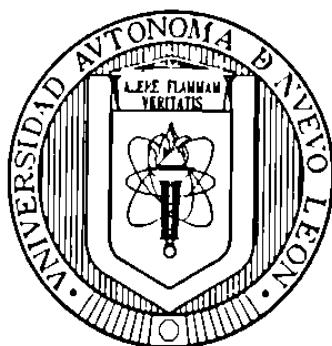
Diciembre de 1996

TM 15
QE
V4
2
Es



UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON

**FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS
DIVISION DE ESTUDIOS SUPERIORES**



**ASPECTOS BASICOS DEL ANALISIS QUIMICO
DE MATERIALES GEOLOGICOS**

T E S I S

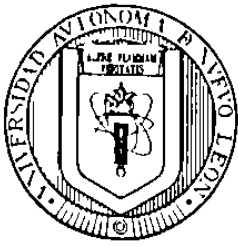
**COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO
ACADEMICO DE MAESTRO EN CIENCIAS QUIMICAS
(ESPECIALIDAD EN QUIMICA ANALITICA)**

P R E S E N T A

FERNANDO VELASCO TAPIA

MONTERREY, NUEVO LEÓN

DICIEMBRE 1996



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
DIVISION DE ESTUDIOS SUPERIORES**

Ing. José Manuel Martínez Delgado

Director de la Facultad de Ciencias Químicas, UANL

Presente.

La tesis elaborada por el Q.I. Fernando Velasco Tapia titulada **ASPECTOS BASICOS DEL ANALISIS QUIMICO DE MATERIALES GEOLOGICOS** ha sido aceptada como requisito parcial para optar al grado académico de **MAESTRO EN CIENCIAS QUIMICAS, CON ESPECIALIDAD EN QUIMICA ANALITICA**, en virtud de haber cumplido integralmente con el reglamento de tesis vigente en nuestra institución.

COMITE DICTAMINADOR DE LA TESIS

Dra. Ma. Teresa Orozco Esquivel

Dra. Leticia M. Torres Martínez

Dr. Antonio Fernández Fuentes

Dr. Juan Alonso Ramírez Fernández

Dr. Surendra P. Verma Jaiswal

Vo.Bo.

M.C. Martha A. Suárez Herrera

Coordinadora de la Escuela de Graduados en Ciencias

AGRADECIMIENTOS

A nuestra máxima casa de estudios la **Universidad Autónoma de Nuevo León**, y muy especialmente a la FCQ/UANL, por la formación académica y humana que he recibido durante estos años y que me hacen sentir **ORGULLOSAMENTE UNIVERSITARIO !!**.

Al **Dr. Surendra P. Verma**, por su desempeño como asesor durante este largo camino de preparación académica, y a su esposa, **Sra. Tere Aguilar de Verma**, por su apoyo y consejos. Gracias a ambos por haberme distinguido además con su amistad.

Al **Dr. Cosme Pola Simuta**, Director de la FCT/UANL, por apoyar en todo momento mi formación académica.

A los investigadores que han evaluado este trabajo de Tesis, **Dra. Ma. Teresa Orozco**, **Dra. Leticia Torres**, **Dr. Juan Alonso Ramírez** y **Dr. Antonio Fernández**, que con sus sugerencias y comentarios críticos me han dado la oportunidad de presentar un manuscrito de mejor calidad. A la **M.C. Martha Suárez**, Coordinadora de la Maestría en Ciencias FCQ/UANL, por su apoyo en el proceso de tramitación.

Al Instituto de Geología, UNAM, muy especialmente al **Quím. Rufino Lozano** y **Cand. M.C. Patricia Girón**, por las facilidades en el uso del equipo de FRX. Al personal de la Biblioteca del Instituto de Geofísica, UNAM (Arturo, gracias por todo !!).

Al **Dr. José Guadalupe López**, al **Dr. Francisco Medina** y al **Cand. Dr. Martín M. Rangel**, por su apoyo y sus consejos en los momentos críticos. Yo se que cuento con Uds. ... siempre !!!.

Al personal académico, estudiantes, personal técnico, administrativo y de apoyo de la FCT/UANL, especialmente a **Tec. Ana María Garza**, **M.P. Gustavo Avendaño** y **Cand. Ing. Federico Viera**.

A mis amigos, **Juan Carlos Montalvo**, **Efraín Alva**, **Oscar A. Barrios**, **Gabriel Chávez**, **Rolando Peterson**, **Cesar Cisneros**, **Olivia Rodríguez**, **Roberto Flores**, **Ma. Guadalupe Rodríguez**, **Ulises Rodríguez**, **Milton R. de la Peña**, **Omar Chávez**, **Ignacio Navarro**, **Enrique Prado**, **Reyes González**, **Eduardo Garza** y **Cesar Correa**. Gracias a cada uno, por los grandes momentos que tenido el gusto de compartir con Uds.

A **Jorge A. Andaverde** y a **Manuelita González de Villarreal** (MCC), por acompañarme en este viaje (abajo del cielo, pero encima del mundo) y ayudarme a descubrir la trascendencia de la amistad ... sin más palabras.

A todos aquellos que he olvidado, de manera involuntaria, y que han contribuido a mi desarrollo personal.

DEDICATORIA

A mis padres : Fernando y Ma. Guadalupe,

A mis hermanos : Cristina, Norma Andrea y Guillermo,

***A mi gran familia : Andreita, Ma. Rita, Chela, Roberto,
Blanca, Ricardo, Arturo y Ruth.***

. . . con el cariño de ayer, hoy y siempre.

Philosophia est cultura animi

Cicerón; Disputas Tusculanas, II: 13.

La investigación y el esfuerzo por llegar a la verdad y al conocimiento son las más elevadas cualidades humanas cuando se realizan como un servicio a la humanidad.

Albert Einstein; Discurso a la comunidad judía de Nueva York, Marzo 1939.

INDICE

	Página
LISTA DE FIGURAS	I
LISTA DE TABLAS	VI
RESUMEN	IX
1. INTRODUCCION	1
1.1 El análisis químico de materiales geológicos	2
1.2 Muestras Internacionales de Referencia Geoquímica (MIRG)	3
1.3 Los elementos mayores	5
1.4 El análisis químico de elementos mayores	6
1.5 Los elementos lantánidos	7
1.6 Propiedades químicas de lantánidos	7
1.7 Propiedades geoquímicas de lantánidos	9
1.8 El análisis químico de lantánidos	11
1.9 Objetivos	14
1.9.1 <i>Objetivo general</i>	14
1.9.2 <i>Objetivos específicos</i>	14
2. EVALUACION ESTADISTICA DE MIRG	15
2.1 Selección del grupo de MIRG	15
2.2 Búsqueda de literatura y construcción de bases de datos	17
2.3 Detección y eliminación de valores desviados	19
2.4 Estimación de la concentración más probable de lantánidos	21
2.5 Ejemplos de aplicación	22
2.5.1 <i>Ce en el basalto BCR-1</i>	24
2.5.2 <i>Lu en el basalto BCR-1</i>	27
2.5.3 <i>Lantánidos en el basalto BCR-1</i>	28

3. EVALUACION ESTADISTICA DE TECNICAS	41
3.1 Frecuencia de aplicación y detección de valores aberrantes	42
3.2 Evaluación de precisión inter-laboratorio	42
3.3 Evaluación de límites de detección inter-laboratorio	45
3.4 Evaluación de error sistemático entre técnicas analíticas	46
3.5 Aplicación de la metodología	47
3.5.1 Frecuencia de observaciones	47
3.5.2 Coeficientes de sesgo y aplastamiento	48
3.5.3 Precisión inter-laboratorio: método de comparación directa	50
3.5.4 Precisión inter-laboratorio: método de regresión simple	54
3.5.5 Precisión inter-laboratorio: método de regresión ponderada	60
3.5.6 Límites de detección inter-laboratorio	65
3.5.7 Error sistemático entre técnicas	68
4. ANALISIS DE LANTANIDOS POR CROMATOGRAFIA LIQUIDA DE PAR IONICO	71
4.1 Métodos cromatográficos en la determinación de lantánidos	71
4.1.1 Cromatografía de gases (GC)	71
4.1.2 Cromatografía líquida en capa fina (TLC)	72
4.1.3 Cromatografía líquida en columna (CLC)	72
4.2 Metodología de trabajo	75
4.2.1 Descripción del sistema cromatográfico	75
4.2.2 Condiciones de gradiente lineal binario y detección fotométrica	76
4.2.3 Descripción del proceso de calibración	77
4.3 Evaluación del método cromatográfico	79
4.3.1 Evaluación de parámetros cromatográficos	79
4.3.2 Mecanismo de separación	84
4.3.3 Mecanismo de detección	86
4.3.4 Linealidad y límites de detección: modelo de regresión	88

5. FLUORESCENCIA DE RAYOS-X	93
5.1 Principios básicos de la XF	93
5.2 Método de XF para el análisis de elementos mayores	96
5.2.1 Descripción del sistema XF y condiciones de medición	96
5.2.2 Preparación de las muestras	97
5.2.3 Curvas de calibración	97
5.2.4 Nuevos valores para MIRG	99
5.3 Resultados y discusión	99
6. ESTUDIO GEOQUIMICO DE ELEMENTOS MAYORES EN LA SIERRA DE CHICHINAUTZIN	104
6.1 La provincia del Cinturón Volcánico Mexicano	104
6.2 La Sierra de Chichinautzin (D.F.-Morelos-Edo. de México)	106
6.3 Estudio petrográfico	108
6.4 Análisis químico de elementos mayores por XF	109
6.5 Interpretación geoquímica	111
6.5.1 Diagrama TAS	111
6.5.2 Norma CIPW	114
6.5.3 Identificación de series magmáticas	116
6.5.4 Diagramas de Harker para TiO_2 , MgO , Al_2O_3 y CaO	120
6.5.5 Diagrama de Mullen	122
6.5.6 Comentaros finales	122
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	124
REFERENCIAS	126
ANEXO	A1
Anexo 1 Composición química de MIRG	A1
Anexo 2 Estadística	A2
Anexo 3 Valores de normalización (en ppm) para lantánidos	A5

LISTA DE FIGURAS

	Página	
Figura 1.1 :	Esquema que muestra las principales capas terrestres.	1
Figura 1.2 :	Clasificación de las técnicas analíticas aplicadas en Geoquímica (Velasco y Verma, 1996a).	3
Figura 1.3 :	Esquema general del análisis químico de materiales geológicos (Velasco y Verma, 1996a).	4
Figura 1.4 :	Variación del radio iónico (r^*) en la familia de lantánidos (Shanon, 1976).	8
Figura 1.5 :	Patrón de abundancias cósmicas para el grupo de lantánidos (Cameron, 1973).	10
Figura 1.6 :	Composición química promedio de lantánidos en la Tierra total y en la corteza, expresada en \log_{10} ppb (Cox, 1989).	11
Figura 1.7 :	Porcentaje de frecuencia acumulativa de lantánidos en veintiséis MIRG, como función de las técnicas analíticas aplicadas (Verma y Velasco, 1996).	13
Figura 2.1 :	Diagrama $\%Na_2O + \%K_2O$ vs. $\%SiO_2$ (referidos como porcentaje en peso), en que se grafican datos para las veinticuatro MIRG seleccionadas. El símbolo \square corresponde a rocas extrusivas, mientras que el símbolo \blacksquare a rocas intrusivas.	17
Figura 2.2 :	Histogramas iniciales y finales para datos de Ce (ppm) obtenidos por MS y NM en el basalto BCR-1.	26
Figura 2.3 :	Histogramas iniciales y finales para datos de Ce (ppm) obtenidos por ES y XF en el basalto BCR-1.	26
Figura 2.4 :	Histogramas iniciales y finales para datos de Lu (ppm) obtenidos por MS, NM y ES en el basalto BCR-1.	29
Figura 2.5 :	Número de observaciones iniciales compiladas para las técnicas más utilizadas en el análisis de lantánidos.	33
Figura 2.6 :	Coeficiente de sesgo inicial (Sk_i) para el grupo de lantánidos en el basalto BCR-1 de las técnicas principales. La línea $Sk_i = 0$ indica una condición ideal de normalidad en la distribución. Claves de técnicas analíticas: \square = MS, \diamond = NM, \circ = ES y \blacktriangle = XF.	33
Figura 2.7 :	Coeficiente de aplastamiento inicial (Ku_i) para el grupo de lantánidos en el basalto BCR-1 de las técnicas principales. La línea con $Ku_i = 0$ indica una condición ideal de normalidad en la distribución. Las claves de técnicas analíticas pueden ser consultadas en la Figura 2.6.	34

Figura 2.8 :	Coeficiente de sesgo final (Sk_r) para el grupo de lantánidos en el BCR-1 de las técnicas principales. La línea con $Sk_r = 0$ indica una condición ideal de normalidad en la distribución. Las claves de técnicas analíticas pueden ser consultadas en la Figura 2.6.	34
Figura 2.9 :	Coeficiente de aplastamiento final (Ku_r) para el grupo de lantánidos en el basalto BCR-1 de las técnicas principales. La línea con $Ku_r = 0$ indica una condición ideal de normalidad en la distribución. Las claves de técnicas analíticas pueden ser consultadas en la Figura 2.6.	35
Figura 2.10:	Porcentaje de datos eliminados por las pruebas Sk y Ku en las poblaciones iniciales de lantánidos para las diferentes técnicas. Las claves de técnicas analíticas pueden ser consultadas en la Figura 2.6.	35
Figura 2.11:	Diagramas normalizados tipo Masuda-Coryell de lantánidos para las técnicas principales. Valores de normalización condritica tomados de Haskin <i>et al.</i> (1968) y Nakamura (1974). Las claves de técnicas analíticas pueden ser consultadas en la Figura 2.6.	36
Figura 2.12:	Porcentaje de desviación estándar relativa final ($\%Rsd_r$) para las técnicas principales en el grupo de lantánidos. Las claves de técnicas analíticas pueden ser consultadas en la Figura 2.6.	37
Figura 3.1 :	Representación esquemática del cambio de la precisión de un método analítico con la concentración (Thompson, 1988). (a) La precisión expresada como la desviación estándar S_c que varía linealmente con la concentración C. Esta función es definida por el intercepto S_0 y la pendiente k. (b) La precisión es expresada como $\%Rsd$, en donde mantiene un valor constante a altas concentraciones pero aumenta de manera significativa al acercarse al limite de detección $C_L = 3S_0$, siguiendo un patrón logarítmico.	44
Figura 3.2 :	Tipos de error sistemático (línea continua con cuadros) que se presentan entre un método X y un método Y, comparados contra resultados con ausencia de "bias analítico" (línea discontinua): [a] de tipo constante o traslacional, [b] de tipo factorial o rotacional, y [c] de tipo mixto.	46
Figura 3.3 :	Número total de observaciones (N_{MIRG}) para lantánidos en el grupo de veinticuatro MIRG, como una función de las técnicas analíticas.	48
Figura 3.4 :	Porcentaje de observaciones aberrantes ($\%E_{MIRG}$) de lantánidos en el grupo total de MIRG, para las técnicas principales (MS, NM y ES). Simbología de las barras similar a la Figura 3.3.	49
Figura 3.5 :	Diagrama "box & whisker" del $\%Rsd$ para lantánidos analizados por MS, en el grupo total de MIRG. El gráfico incluye promedios (cuadros pequeños rellenos), límites de confianza superior e inferior (barra de extensión) y la desviación estándar (caja vacía).	52

Figura 3.6 :	Diagrama "box & whisker" del %Rsd para lantánidos analizados por NM, en el grupo total de MIRG. La simbología es similar a la presentada en la Figura 3.5.	53
Figura 3.7 :	Diagrama "box & whisker" del %Rsd para lantánidos analizados por ES, en el grupo total de MIRG. La simbología es similar a la presentada en la Figura 3.5.	53
Figura 3.8 :	Diagrama "box & whisker" del %Rsd para lantánidos analizados por XF, en el grupo total de MIRG. La simbología es similar a la presentada en la Figura 3.5.	54
Figura 3.9 :	Estimación de precisión para las técnicas MS, NM, ES y XF, aplicando un modelo de regresión simple en datos de La. Claves para datos : MS = cuadrados, NM = círculos, ES = rombos y FX = triángulos.	59
Figura 3.10:	Estimación de precisión para las técnicas MS, NM, ES y XF, aplicando un modelo de regresión ponderada en datos de La. Las claves son similares a las de la Figura 3.9.	64
Figura 3.11:	Límites de detección de las técnicas MS, NM y ES en la determinación de lantánidos, como una función de Z. Se incluye la composición propuesta para el basalto islándico BIR-1.	68
Figura 4.1 :	Diagrama que muestra las partes del sistema LC utilizado en la presente investigación. La descripción de cada una de las partes que componen el sistema , y numeradas del 1-13, se presenta en el texto.	76
Figura 4.2 :	Patrones normalizados con condrita para las soluciones estándares STD 1- 4. Los valores de condrita para la normalización son tomados de Haskin <i>et al.</i> (1968) y Nakamura (1974).	78
Figura 4.3 :	Separación de lantánidos para el estándar STD-2 (250 µl) por el método LC. Condiciones: fase estacionaria Nucleosil 100-5 C18; fase móvil, A = 0.05 M HIBA, 0.01 M OS (pH 3.8), B = 0.5 M HIBA, 0.01 M OS (pH 3.8); gradiente lineal de A a B en 25 min; reacción post-columna con Arsenazo III y detección en el VIS a 658 nm.	80
Figura 4.4 :	Pico cromatográfico asimétrico. Las distancias $a_{0,1}$, $b_{0,1}$ y 0.1h se definen en el texto.	81
Figura 4.5 :	Modelo general de retención para un especie que participa en un equilibrio químico secundario de tipo "par iónico". A^+ = especie iónica, B^- = modificador, A^+B^- = estructura de "par -iónico", k_{A^+} = constante de distribución para A^+ , $k_{(A^+B^-)}$ = constante de distribución para (A^+B^-) , y k_p = constante de equilibrio secundario de par iónico (Poole y Poole, 1991).	84
Figura 4.6 :	Mecanismo de retención en Cromatografía de "Par-lónico": modelo de par iónico (Bidleingmeyer, 1980). FM = Fase móvil y FE = Fase estacionaria.	85

Figura 4.7 :	Mecanismo de retención en Cromatografía de "Par-Iónico": modelo de intercambio iónico dinámico (Bidlingmeyer, 1980). Las claves se reportan en la Figura 4.6.	85
Figura 4.8 :	Mecanismo de retención en Cromatografía de "Par-Iónico": modelo de interacción iónica (Bidlingmeyer, 1980). Las claves se reportan en la Figura 4.6.	86
Figura 4.9 :	Estructura del agente quelatante Arsenazo III.	87
Figura 4.10:	Coordinación N,O,O del agente quelatante Arsenazo III con los lantánidos.	87
Figura 4.11:	Curva de calibración (concentración vs. área) para La.	88
Figura 4.12:	Curva de calibración (concentración vs. área) para Eu.	88
Figura 4.13:	Curva de calibración (concentración vs. área) para Lu.	89
Figura 4.14:	Modelo de estimación para límites de detección (LD, ng/ml). La línea continua gruesa representa la recta de regresión, líneas discontinuas gruesas representan las rectas de probabilidad al 95% y x es la intersección de la concentración "cero" con la línea de probabilidad al 95% superior.	91
Figura 5.1 :	Espectrómetro de XF, tipo dispersivo de longitud de onda (Cullity, 1978).	94
Figura 5.2 :	Espectrómetro de XF, tipo dispersivo de energía (Cullity, 1978).	95
Figura 6.1 :	Localización y actual ambiente tectónico del Cinturón Volcánico Mexicano (CVM; modificado de Verma, 1996). Claves: TMA = Trinchera mesoamericana; OFZ = Zona de fractura Orozco; CO = Placa de Cocos; NA = Placa norteamericana; M = Ciudad de México, C = Cuernavaca, Mor., SCN = Sierra de Chichinautzin. Las flechas representan esfuerzos tensionales. La posición de los sitios de muestreo en la SCN se indicará en la Tabla 6.1.	105
Figura 6.2 :	Mapa esquemático que presenta los sitios de muestreo y las estructuras volcánicas de tipo monogenético en la Sierra de Chichinautzin. Claves: □ = sitio de muestreo, ▲ = estructura volcánica de tipo monogenético.	108
Figura 6.3 :	Clasificación química de las rocas de la SCN, en base al diagrama TAS (Le Bas <i>et al.</i> , 1986; 1992). Claves: B = basalto, TB = traqui-basalto, BTA = andesita traqui-basáltica, BA = andesita basáltica, A = andesita y D = dacita; ■ = roca normativa en Ne + Ol, ○ = roca normativa en Hy + Ol, y ♦ = roca normativa en Hy + Q.	115
Figura 6.4 :	Diagrama %Hy-%Ne vs. %SiO ₂ , para las muestras colectadas en la SCN. Las claves asignadas a las rocas pueden consultarse en la Figura 6.3.	116

- Figura 6.5 :** Diagrama de variación $\%K_2O$ vs. $\%SiO_2$ para las muestras colectadas en la SCN. La línea frontera entre las series magmáticas son tomadas de Middlemost (1975). Claves: SA = serie alcalina y SSA = Serie subalcalina. Las claves asignadas a las rocas pueden ser consultadas en la Figura 6.3. 117
- Figura 6.6 :** Diagrama de variación $\%Na_2O$ vs. $\%SiO_2$ para las muestras colectadas en la SCN. Las líneas frontera entre las series magmáticas son tomadas de Middlemost (1975). Las claves de las series magmáticas pueden ser consultadas en la Figura 6.5, mientras que las asignadas a las rocas en la Figura 6.3. 118
- Figura 6.7 :** Diagrama de clasificación de series magmáticas ($\%K_2O$ vs. $\%SiO_2$) para las muestras de la SCN. Las líneas frontera son tomadas de Le Maitre *et al.* (1989) y Rickwood (1989). Claves: ST = Serie toleítica, SCA = Serie calcoalcalina y SCA-K = Serie calcoalcalina -K. Las claves asignadas a las rocas pueden ser consultadas en la Figura 6.3. 119
- Figura 6.8 :** Diagrama AFM (Irvine y Baragar, 1971) para las muestras de la SCN. Las líneas frontera entre las series magmáticas tomadas de Wimmenauer (1985). Las claves de las series magmáticas pueden ser consultadas en la Figura 6.7, mientras que las asignadas a las rocas pueden ser consultadas en la Figura 6.3. 119
- Figura 6.9 :** Diagrama de variación $\%TiO_2$ vs. $\%SiO_2$, para las muestras colectadas en la SCN. Las claves asignadas a las rocas pueden ser consultadas en la Figura 6.3. 120
- Figura 6.10:** Diagrama de variación $\%MgO$ vs. $\%SiO_2$, para las muestras colectadas en la SCN. Las claves asignadas a las rocas pueden ser consultadas en la Figura 6.3. 120
- Figura 6.11:** Diagrama de variación $\%Al_2O_3$ vs. $\%SiO_2$, para las muestras colectadas en la SCN. Las claves asignadas a las rocas pueden ser consultadas en la Figura 6.3. 121
- Figura 6.12:** Diagrama de variación $\%CaO$ vs. $\%SiO_2$, para las muestras colectadas en la SCN. Las claves asignadas a las rocas pueden ser consultadas en la Figura 6.3. 121
- Figura 6.13:** Diagrama de Mullen (1983) para las muestras de la SCN, con 45-54% en SiO_2 . Claves OIT = toleitas de isla oceánica, MORB = basaltos de dorsal oceánica, IAT = toleitas de arco, CAB = basaltos calcoalcalinos de zonas de subducción y OIA = basaltos alcalinos de isla oceánica. 123

Tabla 3.6 :	Coeficientes de regresión lineal simple para el modelo de precisión ($S_c = S_o + kC$) aplicado a datos de NM.	56
Tabla 3.7 :	Coeficientes de regresión lineal simple para el modelo de precisión ($S_c = S_o + kC$) aplicado a datos de ES.	57
Tabla 3.8 :	Coeficientes de regresión lineal simple para el modelo de precisión ($S_c = S_o + kC$) aplicado a datos de XF.	58
Tabla 3.9 :	Coeficientes de regresión lineal ponderada para el modelo de precisión ($S_c = S_o + kC$) aplicado a datos de MS.	61
Tabla 3.10:	Coeficientes de regresión lineal ponderada para el modelo de precisión ($S_c = S_o + kC$) aplicado a datos de NM.	62
Tabla 3.11:	Coeficientes de regresión lineal ponderada para el modelo de precisión ($S_c = S_o + kC$) aplicado a datos de ES.	63
Tabla 3.12:	Coeficientes de regresión lineal ponderada para el modelo de precisión ($S_c = S_o + kC$) aplicado a datos de XF.	64
Tabla 3.13:	Límites de detección (en ppm) para lantánidos en el grupo total de MIRG, evaluados como límite de detección de método (MDL) o límite de detección máximo de método (MMDL).	66
Tabla 3.14:	Límites de detección (en ppm) para lantánidos en MIRG extrusivas e intrusivas, evaluados como límite de detección de método (MDL) o límite de detección máximo (MMDL).	67
Tabla 3.15:	Evaluación de error sistemático entre MS y NM.	69
Tabla 3.16:	Evaluación de error sistemático entre MS y ES.	70
Tabla 4.1 :	Concentración (ng/ml) de lantánidos en los estándares STD 1 - 4.	78
Tabla 4.2 :	Parámetros de posición para la separación cromatográfica de lantánidos.	81
Tabla 4.3 :	Resolución entre pares de picos cromatográficos.	83
Tabla 4.4 :	Coeficientes de correlación y ecuaciones de regresión para las curvas de calibración LC de lantánidos.	90
Tabla 4.5 :	Límites de detección (ng) para el método LC para lantánidos, concentración C_1 (ppm) propuesta y nanogramos inyectados ($P_{2,1}$ para dos MIRG (BIR-1 y GSP-1).	92
Tabla 5.1 :	Condiciones de medición para elementos mayores del sistema XF.	96
Tabla 5.2 :	MIRG utilizadas en la calibración del equipo de XF.	98
Tabla 5.3 :	Intervalos de concentración (% peso) de las MIRG y MRI.	99
Tabla 5.4 :	Límites de detección (% peso) para el método de XF.	100
Tabla 5.5 :	Concentraciones promedio para elementos mayores en la dolerita WS-E.	102

Tabla 5.6 :	Concentraciones promedio para elementos mayores en el microgabro PM-S.	102
Tabla 6.1 :	Localización de los sitios de muestreo en la SCN.	107
Tabla 6.2 :	Resultados del análisis petrográfico de las rocas de la SCN.	110
Tabla 6.3 :	Química de elementos mayores y norma CIPW para las muestras de la SCN.	112

RESUMEN

El presente trabajo de tesis tuvo como objetivo el desarrollar aspectos básicos del análisis químico de materiales geológicos.

En principio, en el capítulo 1 se describe el propósito de la Geoquímica y la importancia de los datos analíticos en la resolución de diversos problemas en Ciencias de la Tierra. Así mismo, se presenta una clasificación del análisis químico de materiales geológicos y las técnicas de mayor aplicación, así como una discusión sobre las Muestras Internacionales de Referencia Geoquímica (MIRG). En el desarrollo de estos temas, se tiene una especial atención se tiene para el análisis de elementos mayores y el grupo de lantánidos.

En el capítulo 2 se presenta una metodología, con una base estadística, para establecer la composición más probable de lantánidos en MIRG. De manera particular, se describe el esquema de selección del grupo de MIRG, el método de búsqueda de literatura y la compilación de información. Así mismo, se detalla el procedimiento estadístico para la detección y eliminación de valores aberrantes y el cálculo de la concentración más probable. Finalmente, se presentan ejemplos de aplicación de la metodología en el basalto BCR-1, la MIRG más estudiada en la actualidad y que es distribuida por el Servicio Geológico de los EE.UU. (USGS, United States Geological Survey).

Posteriormente, en el capítulo 3 se presenta una metodología para la evaluación de las técnicas de mayor aplicación en el análisis de lantánidos. El procedimiento involucra la aplicación de modelos de regresión lineal entre las concentraciones promedio de un grupo de MIRG y los valores de desviación estándar asociados. Se describe el procedimiento para evaluar la frecuencia de aplicación, la precisión, los límites de detección y la presencia de errores sistemáticos entre las técnicas. Así mismo, se discuten los resultados obtenidos al aplicar la metodología a los datos compilados para un grupo de MIRG de tipo rocas ígneas.

En el capítulo 4 se presenta una breve reseña sobre el análisis de lantánidos aplicando métodos cromatográficos. Por otro lado, se describe la estandarización de un método de cromatografía líquida de alta eficiencia (LC) para estos elementos, que involucra un proceso de par-iónico. Adicionalmente, se presenta una discusión sobre el mecanismo de separación y detección de las especies, así como los principales parámetros cromatográficos del método.

A continuación, en el capítulo 5 se describen los principios básicos que gobiernan la técnica de Fluorescencia de Rayos-X (XF). Se presenta la metodología desarrollada para calibrar un sistema XF SIEMENS, utilizando un grupo de MIRG de tipo rocas ígneas. Se reportan los límites de detección y la precisión en la determinación analítica. Adicionalmente, se presentan los resultados de análisis para dos MIRG de reciente circulación y su comparación con datos reportados en la literatura.

En el capítulo 6 se presenta una descripción del Cinturón Volcánico Mexicano (CVM) y la Sierra de Chichinautzin (SCN). Se describe el estudio petrográfico y el análisis químico de elementos mayores, por XF, para muestras colectadas en la SCN. Finalmente, se presenta una discusión sobre la clasificación de las rocas, así como la interpretación geoquímica de los resultados obtenidos.