

Estudio estadístico de datos de espectroscopía VNIR – SWIR

Javier García-Rivas (1, 2*), Mercedes Suárez (1), Emilia García-Romero (2, 3)

(1) Departamento de Geología. Universidad de Salamanca, Plaza de la Merced, 37008, Salamanca (España).

(2) IGEO. Universidad Complutense de Madrid- Consejo Superior de Investigaciones Científicas. C/Severo Ochoa 7. Edificio Entrepabellones 7 y 8. Ciudad Universitaria.28040 Madrid (España).

(3) Departamento de Mineralogía y Petrología. Universidad Complutense de Madrid. C/José Antonio Novais, s/n. 28040 Madrid.

* corresponding author: javiergr_89@usal.es

Palabras Clave: espectroscopía VNIR – SWIR, DRX, arcillas | **Key Words:** VNIR – SWIR spectroscopy, XRD, clay minerals

INTRODUCCIÓN

La espectroscopía infrarroja en el rango de longitudes de onda entre 350 – 2.500 nm (VNIR) está adquiriendo una importancia cada vez mayor debido a la gran cantidad de información que proporciona y al bajo tiempo de adquisición que se requiere para la obtención de los espectros, así como por su utilización en técnicas de exploración remota como la teledetección. Así mismo, esta técnica proporciona información estructural y química de materiales amorfos o con un grado de cristalinidad muy bajo, tales como las arcillas, por lo que el desarrollo de esta técnica es de gran importancia para el estudio de este tipo de materiales.

El objetivo de este trabajo es realizar un análisis estadístico comparativo entre los resultados obtenidos mediante difracción de rayos-X (DRX) y espectroscopía infrarroja VNIR en muestras poliminerálicas de suelos, con un contenido significativo en arcillas y otros minerales.

MATERIALES Y METODOLOGÍA

Este trabajo se ha realizado mediante el estudio de 41 muestras (TES8 – TES48) obtenidas en superficie en las proximidades de la localidad de Esquivias (Toledo), sobre las diferentes unidades estratigráficas que afloran en dicha área. Estos materiales presentan diversa composición mineralógica en función de las edades de las unidades estratigráficas a las que pertenecen, estando caracterizadas las unidades de edad Mioceno por la mayor abundancia de minerales de neoformación como yeso, carbonatos y arcillas magnésicas, mientras que las unidades de edad Cuaternario se caracterizan por la presencia de minerales de carácter detrítico.

La caracterización de las muestras se llevó a cabo mediante DRX tanto en muestras de polvo total como en Agregados Orientados, utilizando un difractómetro

Siemens D-500, dotado de un monocromador de grafito, utilizando radiación de Cu K α , siguiendo la metodología habitual para el estudio de arcillas. Los datos obtenidos a través de la DRX permitieron realizar una semicuantificación del contenido mineral de cada una de las muestras a través del método de los poderes reflectantes. Los espectros infrarrojos en el rango Visible – Infrarrojo Cercano – Infrarrojo de Onda Corta (VNIR – SWIR) (350 – 2.500 nm) se obtuvieron utilizando un espectrorradiómetro de campo ASD FieldSpec 4 Standard-Res promediando 25 espectros por muestra. La adquisición de los espectros se realizó sobre la fracción de campo de las muestras, sin separación granulométrica alguna, así como sobre la fracción molida empleada en DRX para la obtención de los difractogramas de roca total. La visualización y extracción de los espectros se realizó mediante el software ViewSpecPro.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La caracterización mediante DRX permite identificar los minerales presentes en las diferentes muestras estudiadas: calcita, cuarzo, dolomita, feldespato potásico, plagioclasa y yeso, así como diversos minerales arcillosos como caolinita, esmectita, illita y trazas de clorita. A través de la semi-cuantificación realizada a partir de los difractogramas, se obtiene una composición mineralógica acorde con la asignada en la hoja MAGNA (Rubio Pascual *et al.*, 2001) para cada una de las unidades estratigráficas muestreadas.

Los espectros se obtuvieron tanto sobre la muestra de campo como sobre la fracción molida, no observándose más diferencia entre ellos que la reflectancia total, más alta en la fracción molida. Esta última fracción se utilizó en la comparativa con los datos de DRX debido a que es exactamente la misma utilizada para dicha técnica.

En los espectros VNIR – SWIR se identifican los mismos minerales que se identificaron a través de la

DRX debido a la presencia de determinados rasgos de absorción característicos. La presencia de carbonatos está marcada por dos rasgos de absorción a 1905 y 2341 nm (Gaffey, 1986), la de yeso por los diferentes rasgos de absorción entre 1400 y 1550 nm, así como por los localizados a 1746 y 1945 nm (Cloutis *et al.*, 2006), y la presencia de diferentes tipos de arcillas se evidencia por la presencia de diversos rasgos de absorción a 1413, 1905, 2202, 2255 y 2295 nm (Bishop *et al.*, 2008), careciendo de bandas de absorción significativas en el rango VNIR – SWIR tanto el cuarzo como los feldespatos identificados.

La presencia de determinados rasgos de absorción, la morfología general y la reflectancia de los espectros se utilizaron como criterios para el establecimiento de una serie de grupos y subgrupos en los que fueron englobadas las muestras:

- Grupo 1: Subgrupo 1.a., Subgrupo 1.b.
- Grupo 2: Subgrupo 2.a., Subgrupo 2.b., Subgrupo 2.c.
- Grupo 3
- Grupo 4: Subgrupo 4.a., Subgrupo 4.b., Subgrupo 4.c.

Estos grupos están claramente marcados por la mineralogía, principalmente de aquellos cuya contribución en el rango VNIR – SWIR es mayor. La realización de un cluster multivariado (Fig.1) permite observar como los subgrupos 1.a, 1.b y 2.a se agrupan conjuntamente, debido a los mayores contenidos en calcita que presentan. De la misma manera, los subgrupos 2.b y 2.c se agrupan debido a su mayor contenido en yeso. Los subgrupos restantes, caracterizados por un mayor contenido en filosilicatos y en tectosilicatos, estos últimos sin rasgos de absorción en el rango en el cual se está trabajando, se agrupan de manera entremezclada.

El tratamiento estadístico de los grupos establecidos mediante los espectros VNIR – SWIR permite observar que estos grupos se corresponden con la mineralogía, sobre todo aquellos cuyos componentes minerales tienen una reflectancia y unos rasgos de absorción más marcados (yeso y calcita). Los grupos con un contenido mayor en filosilicatos y en tectosilicatos, cuya contribución al espectro es menor, no se diferencian claramente entre ellos. Así mismo, estos grupos y subgrupos permiten una clara asignación a las unidades estratigráficas muestreadas, permitiendo la posibilidad de identificarlas y cartografiarlas mediante técnicas de teledetección

Por otra parte, los valores de intensidades relativas obtenidos a través de la segunda derivada de los espectros se han comparado estadísticamente con los datos de semicuantificación obtenidos gracias a la DRX, realizando una matriz de correlación. Este tratamiento permite observar el grado de correlación de las diferentes

bandas de absorción identificadas con respecto de la mineralogía así como la nueva asignación de algunas bandas.

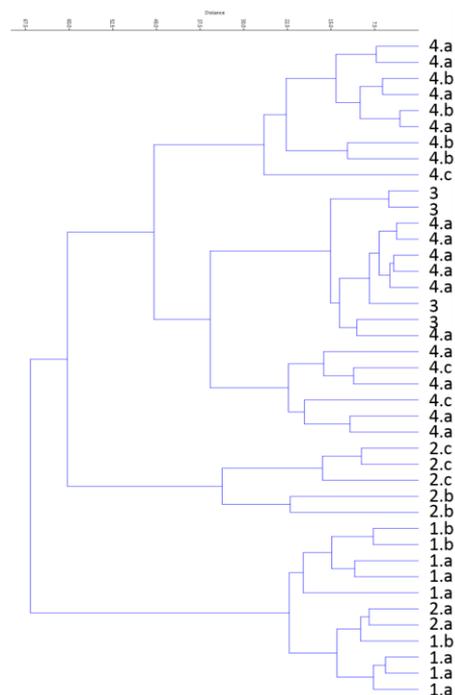


Fig 1. Cluster multivariado de las muestras, clasificadas por grupos, considerando toda su composición mineral.

Agradecimientos: El trabajo ha sido financiado por el proyecto CGL2016-77005-R del MINECO. Javier García-Rivas quiere agradecer el contrato predoctoral BES-2013-065092 del MINECO.

REFERENCIAS

Bishop, J.L., Lane, M.D., Dyar, M.D., Brown, A.J. (2008): Reflectance and emission spectroscopy study of four groups of phyllosilicates: smectites, kaolinite-serpentines, chlorites and micas. *Clay Minerals*, **43**, 35–54.

Cloutis, E.A., Hawthorne, F.C., Mertzman, S.A., Krenn, K., Craig, M.A., Marcino, D., Methot, M., Strong, J., Mustard, J.F., Blaney, D.L., Bell III, J.F., Vilas, F. (2006): Detection and discrimination of sulfate minerals using reflectance spectroscopy. *Icarus*, **184**, 121–157.

Gaffey, S.J. (1986): Spectral reflectance of carbonate minerals in the visible and near infrared (0.35–2.55 microns): calcite, aragonite, and dolomite. *American Mineralogist*, **71**, 151–162.

Rubio Pascual, F.J., Mediavila López, R., Portero Urroz, J., Sanz Montero, M.E., Rodríguez Aranda, J.P., Galán de Frutos, L.A., Vívar, V., Baltuille Martín, J.M. (2001): Mapa geológico y Memoria de la Hoja nº 605 (Aranjuez). Mapa Geológico de España E. 1:50.000 (MAGNA), Segunda Serie, Primera edición. Madrid: IGME. 78 p.