

O MÉTODO DE RIETVELD EM ESTUDOS DE HERANÇA CULTURAL

E. A. Del Lama, F.R.D. de Andrade, F.M.S. Carvalho

Instituto de Geociências, Universidade de São Paulo, Brasil, Rua do Lago n. 562; cep 05508-080

A maior parte dos materiais usados em afrescos e argamassas, assim como os produtos de sua degradação (eflorescências), são materiais cristalinos, i.e. seus átomos estão organizados em um arranjo periódico em três dimensões, denominado de estrutura cristalina, cujo estudo pode ser feito por difratometria de raios X. Os raios X têm menor comprimento de onda e maior poder de penetração que a luz visível. Na difratometria de raios X, um feixe de raios X com comprimento de onda definido incide sobre a amostra. Os elétrons dos átomos passam a vibrar em uníssono com a frequência dos raios incidentes, e cada átomo passa a ser um novo centro de emissão de ondas. As ondas esféricas emitidas pelos átomos de uma estrutura cristalina interagem entre si e produzem feixes em direções privilegiadas (interações construtivas). Os ângulos dos feixes difratados são usados para medir as distâncias entre planos atômicos em estruturas cristalinas. Cada substância sólida cristalina tem um padrão característico de difração de raios X, uma impressão digital que permite sua identificação. O método de Rietveld é uma simulação matemática da difração. Através da teoria dos mínimos quadrados são feitas interações que buscam a aproximação entre o difratograma calculado e o difratograma real obtido para uma dada amostra. Uma vez atingida esta convergência, são obtidas informações indiretas sobre a amostra, como a proporção entre as fases cristalinas e os parâmetros cristalográficos de cada fase. Os princípios físicos, cristalográficos e matemáticos da difração de raios X e do Método de Rietveld estão disponíveis na literatura [1,2,3]. Um aspecto favorável da aplicação do Método de Rietveld em estudos de Herança Cultural é a pequena quantidade de amostra necessária para a realização da análise. Apesar de não ser um método de análise química tradicional, ele fornece uma estimativa da composição química através da identificação das fases cristalinas presentes e de suas proporções.

No presente estudo foram comparados dados químicos e difratométricos de uma argamassa antiga composta predominantemente por quartzo e calcita. Foram observadas pequenas discrepâncias entre os resultados dos dois tipos de análises, provavelmente em função do volume reduzido e da heterogeneidade da amostra. A amostragem representativa é um problema central no estudo de bens culturais com métodos de análise. Não obstante, a difratometria de raios X aliada ao Método de Rietveld permitem a obtenção de dados compostionais com boa precisão em pouco tempo e com baixo custo, representando uma ferramenta útil na avaliação de materiais históricos, tanto quanto ao seu estado de conservação, como quanto aos procedimentos de conservação e restauro.

Referências

- [1] Rietveld, H.M. (1969). *J.Appl. Cryst.*, 2, 65-71.
- [2] Jenkins, R. & Snyder, R.L. (1996). *Introduction to X-ray powder diffractometry*. Wiley, New York, 403 p.
- [3] Paiva-Santos, C.O. (2004). Caracterização de materiais pelo Método de Rietveld com dados de difração por policristais. <http://labcacc.iq.unesp.br/jornal/3edicao/index.htm>.

Palavras-chaves: Método Rietveld, Herança Cultural, argamassa
E-mail: edellama@usp.br