Ing. Josef S k á l a, VÚHU

Příspěvek k praktickému výpočtu množství jílových minerálů ze záznamů zhotovených na rentgenografickém difraktometru

Napsání příspěvku vyvolal článek /3/ uveřejněný v časopisu "Journal of Sedimentary Petrology".

1. Úvod

Ve většině vzorků nadložních hornin odebíraných v oblasti SHR a zpracovávaných v oddělení petrografie tvoří hlavní složku jílové minerály. Jsou to kaolinit /dále jen KL/, illit /IT/ a montmorillonit /MM/. Jejich přítomnost ve vzorku se dá nejrychleji ověřit pomocí analýzy na rentgenografickém /RTG/ difraktometru. Pro analýzu používáme tzv. přirozeně orientované /PO/ vzorky. Připravují se z většího kusu materiálu, např. části vrtného jádra, tak, že se z něho vyřízne destička o rozměrech přibližně 50x30x8 mm, jejíž největší plocha je rovnoběžná se sedimentační rovinou. Další důležitou podmínkou je, že vzorek nesmí vyschnout.

Záznam z RTG difraktometru patřící vzorku připravenému podle shora uvedeného postupu je na obr. 1. Z obrázku je patrné, že v použitém materiálu jsou zastoupeny všechny tři jmenované jílové minerály.

Podle Pierce - Siegla /1/ platí, že plochy ohraničené křivkami přiřazenými jednotlivým minerálům mají přímý vztah k množství těchto minerálů. Pro výpočet bylo doporučeno vzít za základ poměry u MM, kde převodní konstantu mezi naměřenou velikostí plochy a jeho množstvím volíme rovnou jedné. Abychom respektovali vzájemné vztahy MM a ostatních jílových minerálů, musíme plochu náležející IT násobit čtyřmi a plochu pro KL dvěma. Blíže se o tom rozepisuje Benešová ve /2/.

2. Stanovení velikosti ploch

K určení velikosti ploch pod křivkami jsme dříve uži-

vali planimetr. Jeho používání bylo poměrně pracné a přitom výsledky nepřesné. Ke stejnému závěru došli autoři článku /3/. Doporučují proto užití nové, tzv. trojúhelníkové metody, která je podle jejich mínění pro praktickou potřebu mnohem výhodnější.

Navrhují užití šablon, na kterých jsou narýsovány rovnostranné trojúhelníky o různých vrcholových úhlech s řadou základen různě vzdálených od vrcholu, jak ukazuje obr. 2. Pro každý vrcholový úhel tak dostaneme soustavu trojúhelníků o různě velkých plochách. Šablony se pak postupně přikládají na analyzovanou křivku tak dlouho, až souhlasí vrcholový úhel křivky s vrcholovým úhlem trojúhelníku na šabloně, nebo až se kryjí strany trojúhleníku s průběhem boků křivky. Interpolací mezi dvěma plochami, které jsou svou velikostí nejblíže ploše ohraničené křivkou a fiktivní základnou, odhadneme plochu hledanou. Plochy trojúhelníků nakreslených na šablonách jsou vyčísleny v tabulkách na každé šabloně včetně svých násobků respektujících jejich užití pro ten který minerál. Můžeme proto množství minerálu okamžitě odečíst z tabulky.

Také my jsme se před několika lety snažili tuto metodu zavést, ale nevžila se pro řadu nevýhod:

1. vyhledávání šablony s odpovídajícím trojúhelníkem bylo zdlouhavé
2. počet šablon musí být s ohledem na přesnost mnohem větší než uvádějí autoři /3/, neboť vrcholový úhel trojúhelníků záznamů se mění spojitěji a ve větším rozsahu než oni připouštějí
3. fiktivní základna trojúhelníku tvořeného křivkou není ve většině případů kolmá na spojnici vrcholu se středem základny. Autoři /3/ s touto eventualitou počítají pouze u MM, kde zaváději další korekci. Ve skutečnosti se tento jev musí brát v úvahu také u IT
4. u KL se počítá s trojúhelníkovým tvarem, takže se výběh spodní části křivky u základny může i v praxi zanedbat. Zcela jinak je tomu u IT, kde výběh křivky směrem k MM

označený na obr. 3 jako plocha IT_2 představuje smíšené struktury a musí se podle /2/ započítat do obsahu IT

5. nutnost užití korekce u MM /a podle nás také u IT/ prodlužuje čas potřebný k výpočtu.

Z uvedených důvodů jsme pro odečítání údajů ze záznamu RTG zavedli metodu nenáročnou na počet potřebných pomůcek /stačí jedna šablona/. Nevýhodou námi užívané metody je to, že vyžaduje následné početní zpracování tzn. vyvstává zde požadavek potřeby alespoň kapesního kalkulátoru s jednou pamětí. Ostatně ani autoři /3/ se v závěru při procentuelním stanovení množství jílových minerálů jak mezi sebou, tak k ostatním složkám ve vzorku, nevyhnou výpočtům. Proto jsme přesvědčeni, že naše metoda je výhodnější než metoda uvedená ve /3/.

3. Metoda užívaná v laboratoři petrografie

V tomto odstavci popíšeme postup prací při výpočtu podle metody užívané v naší laboratoři:

1. na RTG záznam přikreslíme ke všem křivkám fiktivní základny trojúhelníků. Jsou to vlastně rovnoběžky s tečnami úseků základní křivky. Tato křivka vznikne zaznamenáním odraženého RTG paprsku od destičky, která neobsahuje žádný z minerálů vyvolávajících reflexi ve sledovaném rozsahu. Příslušné úseky se pak vymezí přímkami proloženými boky té které křivky
2. další průsečík, který vznikne vzájemným protnutím přímek proložených boky křivky, vytvoří vrchol trojúhelníku. U většiny křivek jsou vrcholy zaoblené a stanovení jejich přesné polohy obtížné. Nově vytvořený bod značně usnadní postup výpočtu. Vzniklý rozdíl ve velikosti ploch /nová je větší/ bývá pro praktický výpočet zanedbatelný. Kromě toho se tato chyba objevuje rovněž u trojúhelníkové metody.
3. u křivky IT proložíme výběhem paty křivky směřujícím k MM další přímku. Získáme druhý trojúhelník IT_2, jehož jedna strana je tvořena částí strany trojúhelníka IT_1

4. pomocí šablony narýsované na průhledném materiálu /Obr.4/ odečteme délku základen a výšek všech trojúhelníků. Pro IT dostaneme dva páry údajů, pro KL a MM po jednom páru
5. údaje dosadíme do kalkulátoru a provedeme výpočet ploch. /Ve skutečnosti počítáme plochy obdélníků. Výsledek se tím neovlivní, avšak postup se značně urychlí/. Součet hodnot všech ploch představuje 100 %. Poměrné zastoupení jednotlivých jílových minerálů pak určíme porovnáme-li jim příslušné plochy s plochou celkovou. Při výpočtu nesmíme zapomenout násobit plochu KL dvěma a plochu IT čtyřmi. Máme-li k dispozici programovatelný kalkulátor, všechny operace se zjednoduší na pouhé vložení naměřených údajů na vstup. U programu výpočtu, který užíváme v oddělení petrografie, jsou respektovány případy, kdy jeden ze jmenovaných tří minerálů ve vzorku chybí /nejčastěji MM, někdy IT/, nebo kdy $IT_2 = 0$ /řídký případ/.

4. Příklad

Na obr. 3 je záznam rozboru vzorku č. 966/79 odebraného z vrtu Lb 188. Po zakreslení fiktivní základny u křivek a proložení přímek boky křivek, dostaneme obrazce /trojúhelníky/ o následujících parametrech:

MM - 59; 11
IT - 6; 34 a 14; 8
KL - 10; 19

Údaje byly zjištěny pomocí šablony narýsované na obr. 4. První z dvojice údajů je délka základny, druhý představuje výšku obrazce. U IT máme dva páry údajů. Všechny rozměry jsou v mm.

Plochy vypočtené z naměřených hodnot /pro jednoduchost počítáme s plochami obdélníků/ jsou:

MM - 649
IT - 1264 /včetně vynásobení převodní konstantou o hodnotě 4/
KL - 380 /včetně vynásobení převodní konstantou o hodnotě 2/
celková plocha - 2293

/všechny rozměry v mm^2/

Porovnáním údajů příslušejících jednotlivým minerálům s celkovou plochou dostaneme jejich zastoupení v procentech celkového množství jílových minerálů

MM - 28
IT - 55
KL - 17

Tyto údaje pak ještě redukujeme v poměru jílových minerálů ke všem minerálům, které analyzovaný vzorek obsahuje.

5. Závěr

Článek /3/ jasně dokazuje, že i v současné době, kdy lze provádět integraci např. pomocí elektronických zařízení, se setkáváme s postupy, které dávají přednost jednoduchosti a láci. Dostupnost zde převažuje dokonce nad přesností. Náš příspěvek chce ukázat, že je však možné i jednoduché a dostupné metody precizovat tak, aby mohly, co do přesnosti, v praxi konkurovat metodám používajícím složitá zařízení.

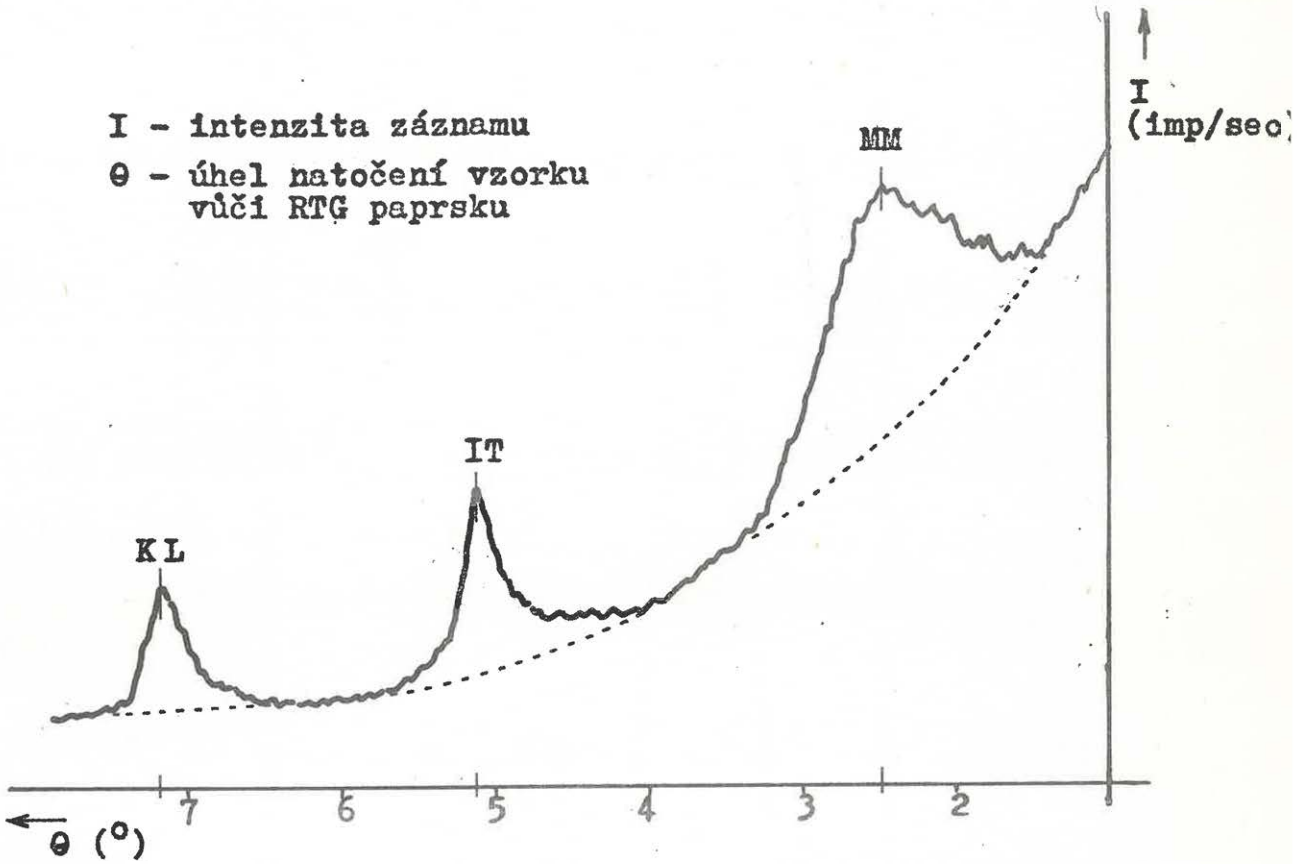
S h r n u t í

Příspěvek k praktickému výpočtu množství jílových minerálů ze záznamů zhotovených na rentgenografickém difraktometru

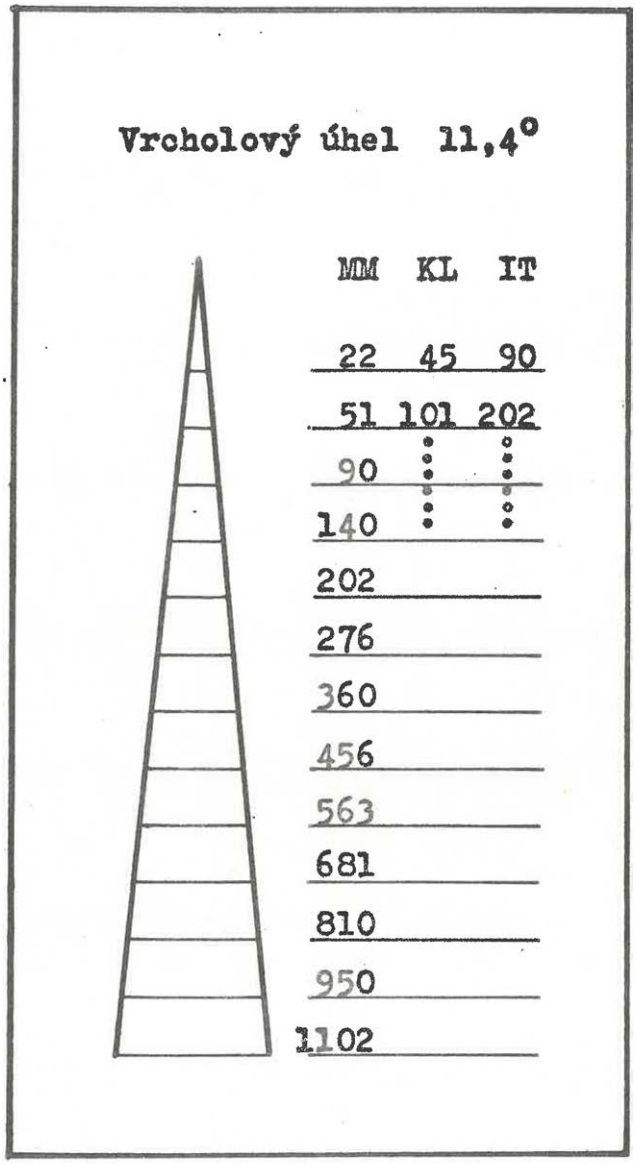
Příspěvek se zabývá srovnáním dvou metod grafické integrace, z nichž jednu užívá laboratoř petrografie VÚHU. V článku jsou zdůrazněny její výhody proti metodě navržené v /3/.

Literatura

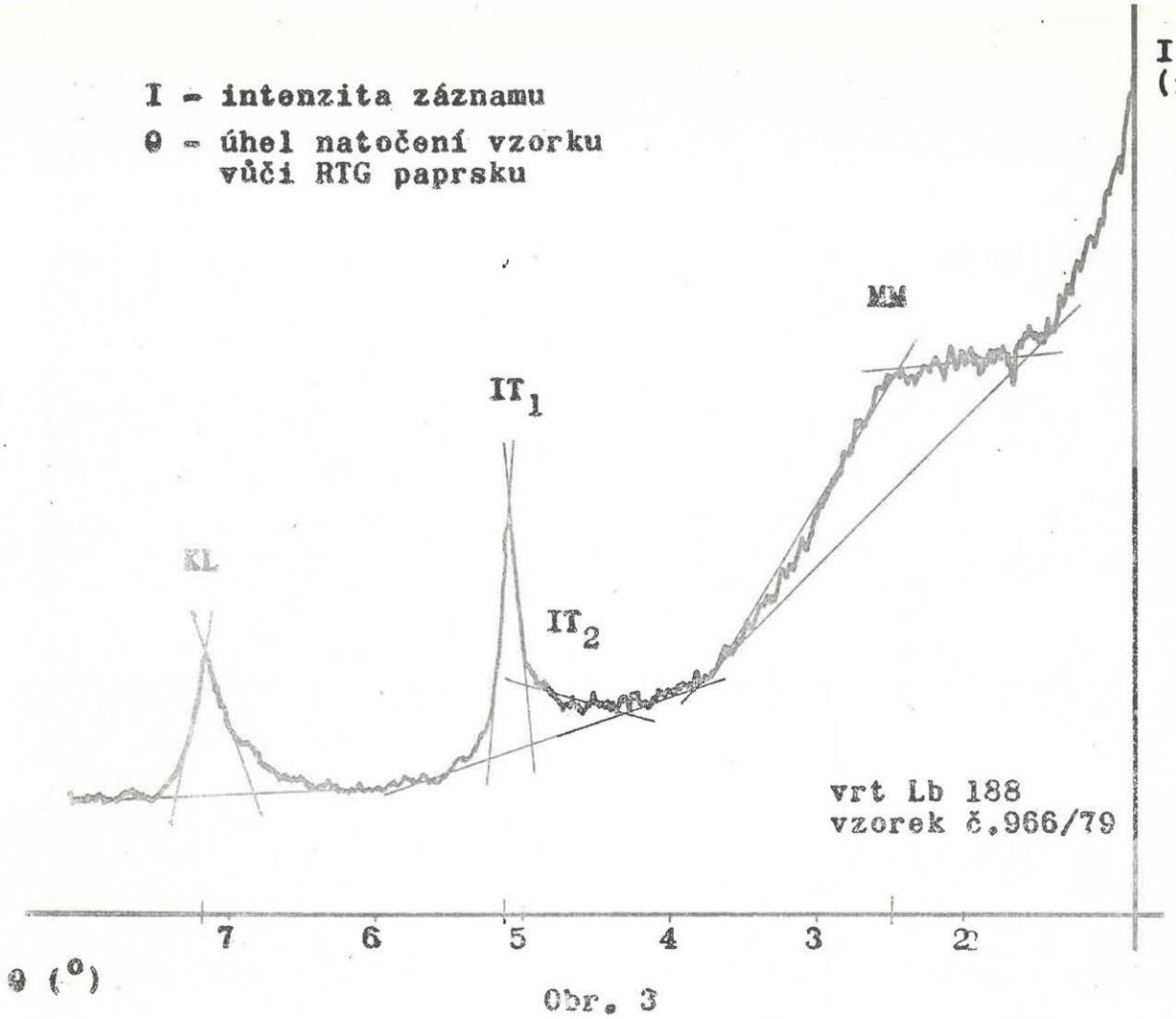
1. Pierce J., Siegel F., -"Quantification in Clay Mineral Studies of Sediments and Sedimentary Rocks", Journal of Sedimentary Petrology, Vol. 39, No 1, pp. 187 - 193, 1969


I - intenzita záznamu
Θ - úhel natočení vzorku vůči RTG paprsku
I (imp/sec)
MM
IT
KL
7
6
5
4
3
2
Θ (°)

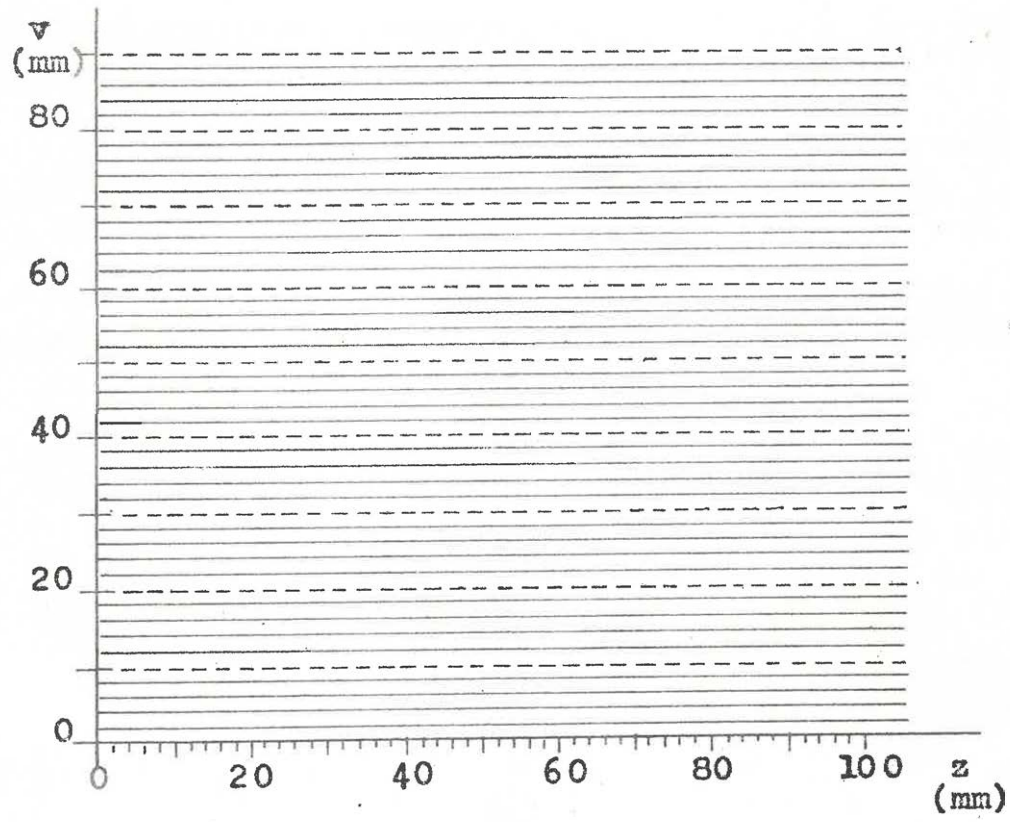
Obr. 1


Vrcholový úhel 11,4°
MM KL IT
22 45 90
51 101 202
90
140
202
276
360
456
563
681
810
950
1102

Obr. 2


I - intenzita záznamu
ϑ - úhel natočení vzorku vůči RTG paprsku
I (imp/sec
MM
IT1
IT2
KL
vrt Lb 188
vzorek č.966/79
7
6
5
4
3
2
ϑ (°)

Obr. 3


v (mm)
80
60
40
20
0
0
20
40
60
80
100
z (mm)

Obr. 4