

# Røntgendiffraktometri

## - en lille introduktion

Af cand. scient. Erik Karlsen

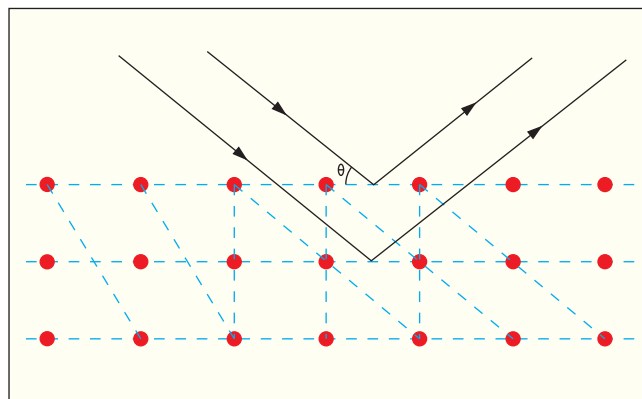
Blandt mange forskellige metoder til bestemmelse af en prøves mineralindhold udmærker røntgendiffraktometrien sig ved at kunne bestemme mineraler, der er for små til at kunne ses i mikroskop, og uden brug af kemiske metoder. Her skal der bringes en lille introduktion til, hvad det hele går ud på, hvad man kan med metoden, og hvilke begrænsninger den har.

Røntgendiffraktometri er en spektroskopisk metode, sådan at forstå at en prøve bestråles med elektromagnetiske bølger – i dette tilfælde røntgenstråler, og at der “i den anden ende” leveres et spektrum med karakteristiske kendetegn for de mineraler, der er i prøven. I denne metode hedder disse kendetegn gitterplansafstande, og det er dem, vi skal interessere os for her og ikke så meget den proces, der finder sted i det apparatur, der frembringer spektrene.

### Gitterplansafstande

Når man tænker på gitterplansafstande, kan man tænke på mineraler som opbygget af bittesmå terninger. Ved at betragte sådanne terninger vil man nemt kunne forestille sig, at de består af gitre, der er lagt oven på hin-

*Forskellige gitterplaner (stiplede linier) i et tænkt mineral. De røde punkter viser atomerne i gitteret, da det er afstanden mellem dem, der bestemmer afstanden mellem gitterplanerne. Den indgående røntgenstråling afbøjes i en bestemt vinkel  $\theta$ . (Grafik: Forfatteren)*



anden – men i en vis afstand – hvorved der fremkommer et tredimensionelt gitter. Nøjes man nu med at betragte en enkelt terning, vil man se, at den er opbygget af 6 sider, altså planer, som to og to er parallelle. Afstanden mellem disse planer er naturligvis alle ens i en ideel terning; men havde der nu været tale om sider, der ikke var lige lange, ville vi pludselig få 3 forskellige afstande mellem planerne.

Udvider vi nu terningen til at omfatte hele gitteret, ser vi, at vi kan danne andre planer ved at tegne streger mellem hjørnerne i terningerne. Jo flere planer vi kan lave i vores tredimensionelle gitter, desto flere gitterplansafstande får vi foræret. Forestiller man sig nu, at der findes en mængde tredimensionelle gitre med hver sine karakteristiske sidelængder, vil man også kunne finde gitterplansafstande, der er karakteristiske for netop det gitter, man ser på.

### Bragg's lov

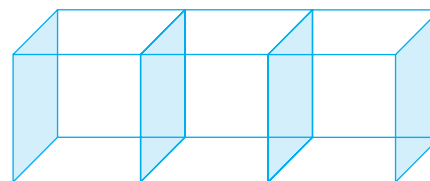
Det er jo meget godt; men vi skal jo også finde en tilgængelig måde at måle gitterplansafstandene på. Det er her, en ligning, der er kendt som Bragg's lov, kommer ind i billedet. Udtrykt i ord siger den, at bølglængden for den stråling, der rammer gitterplanet, er lig med den dobbelte gitterplansafstand ganget med sinus til vinklen mellem strålingen og gitterplanet. Foretrækker man det med matematiske symboler, hedder det  $n \cdot \lambda = 2 \cdot d \cdot \sin \theta$ , hvor  $n$  er et helt tal, der angiver en proportionalitetsfaktor.

Med denne lov i hånden har vi nu et redskab til at bestemme gitterplansafstande; men inden vi går i gang med ukendte prøver, må vi lige sikre os, at vi kender gitterplansafstandene for kendte mineraler. Heldigvis findes der et utal af opslagsværker; men

havde man været på bar bund, ville der ikke være andet at gøre end at starte med at undersøge prøver med fx ren kvarts, ren biotit, ren granat osv.

Det spektrum, man står med, når prøven har været en tur i røntgendiffraktometret, indeholder oplysninger om alle de gitterplansafstande, der er til stede i prøvens mineraler. På den vandrette akse ser man gitterplansafstandene, oftest angivet i Ångstrøm (forkortet Å), hvor 1 Å er  $10^{-10}$  m. Da de største gitterplansafstande sjældent bliver meget større end 10 Å, ser man let, hvilket umenneskeligt arbejde man ville stå overfor, hvis man skulle finde de samme i et mikroskop! På den lodrette akse vises intensiteten af den enkelte gitterplansafstande, og det gælder her om ikke at falde i to forskellige typer fælder.

For det første vil man se, at der tilsyneladende er et uendeligt antal målte afstande med ganske små intensiteter; men det meste af det vil oftest være forstyrrelser, og det gælder derfor om at skille færene fra bukke, så forstyrrelser sorteres fra, uden at sjældne mineralforekomster også ryger med. For det andet vil man i prøver med glimmermi-



*Tre terninger lagt ved siden af hinanden for at simulere gitterplaner. De fire farvede planer er parallelle og har en bestemt afstand mellem sig. Andre mulige planer er ikke taget med af hensyn til overskueligheden. (Grafik: Forfatteren)*

**Også vandværkerne har brug for at lade idéerne gro**

Gode idéer der udspringer af erfaring og ekspertise fører frem til frugtbare løsninger. Vand-Schmidt har specialiseret viden inden for:

- Vandforsyningsanlæg
- Brøndboring
- Ledningsanlæg
- Projektering/rådgivning
- Service

- ring og få gode råd og uforbindende tilbud



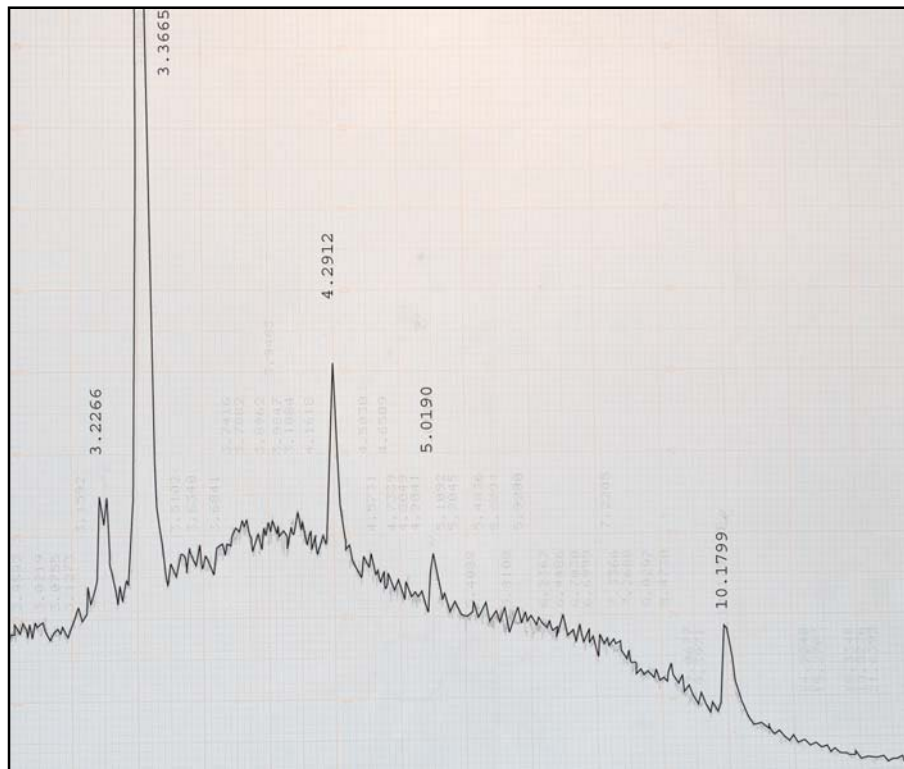
**Vand-Schmidt a/s**  
Jernbanegade 5 • 6070 Christiansfeld  
Tlf. 74 56 11 11 • Fax. 74 56 32 69

neraler ofte se, at prøver tilsyneladende indeholder meget store mængder af disse mineraler – også selv om man positivt ved, at den ikke gør. Men ved man nu ikke det, kunne man foranlediges til at tro, at der er langt mere glimmer i prøven, end der virkelig er. Det skyldes, at glimmer på grund af sin flade struktur (foretrukne orientering – også i knust tilstand) vil komme til at se ud af meget mere, end mineralerne egentlig er berettiget til. Det gælder også, selv om prøven altid knuses, inden den bliver analyseret. Under normale omstændigheder er røntgendiffraktometri altså ikke velegnet til at bestemme det procentvise indhold af et mineral.

Selv her har der dog været forsøg på at finde metoder til at lave om ikke nøjagtige analyser, så i det mindste hvad man kunne kalde halv-quantitative analyser. Det viser sig, at hvis man opslemmer sin prøve i vand og herefter lader den passe sig selv, vil selv en nedknust prøve lægge sig sådan, at glimmermineralerne vil få en foretrukken orientering. Men rører man den nu i stedet op i lim, vil mineralerne som følge af limens viskositet ikke kunne nå at falde til bunds, inden limen er størknet, og pludselig vil man (i mikroskop) kunne se en prøve, hvor kornene står i alle mulige retninger. Hermed er det dog ikke givet, at man nu vil kunne få en nøjagtig procentvis bestemmelse; men det giver dog et betydeligt bedre billede end før.

#### Anvendelse

Røntgendiffraktion er ikke alene et fortrinligt middel til mineralogiske bestemmelser. Også andre fagområder har opdaget teknikkens fordele. Således bruges den til kvalitetskontrol i den farmaceutiske industri, da den er



Udsnit af røntgendiffraktogram af en prøve fra et glacielt smeltevandsløb i Norge. Kurven er tegnet op for at gøre den tydeligere; herved er noget af støjen dog "forsvundet". At den største top er flad i toppen, skyldes, at den når højere end papirets udstrækning. Toppen kan både skyldes diverse feldspater, glimmermineraler m.m., så den er ikke så god til entydige bestemmelser. Toppen ved lidt over 4,2 Å er derimod en typisk kvarts-top, og toppen ved lidt over 10 Å er en typisk glimmer-top. Da prøven har været rørt op i lim, er glimmer-toppen noget mindre, end den ellers ville have været. (Grafik: Forfatteren)

meget hurtig og ikke skader prøverne. Man får derfor et reelt billede af indholdet. Et andet eksempel er den fotografiske industri, hvor nyudviklede materialer med fordel te-

stes ved hjælp af metoden. Endelig skal det nævnes, at det var vha. røntgendiffraktometri, at det i starten af 1950'erne lykkedes at afsløre DNA's molekylære struktur. ■

## Kort nyt

### Ingen grund til panik over gigantisbjerg

Lederen af den newzealandske antarktiskaforskningsstation siger, at det er for tidligt at trykke på "panikknappen" i forbindelse med den mulige risiko, der kan være for, at et kæmpe isbjerg blokerer basens frie adgang til det åbne hav.

Antarktika-eksperter i New Zealand har udtrykt bekymring over, at isbjerget, der er omkring 150 km langt og 25 km bredt, måske kan blokere forsyningsruter til de tre polare baser samt føre til titusinder af døde pingviner.

Isbjerget, kendt som B15A er en "rest" af et af de største isbjerger, der nogensinde er observeret. "Moderisbjerget" kælvende af Ross Ice Shelf I 2000 og begyndte at gå i mindre stykker sidste år.

Alene størrelsen på isbjerget har ændret på vind- og vandstrømme, der normalt skiller

pakisen på den tid af året i McMurdo-bugten, hovedvejen til de tre antarktiske baser, hhv. den newzealandske, den amerikanske og den italienske.

Julian Tangaere, lederen på den newzealandske base udtaler: "Scott mener dog, at der er tid til besindelse. Vi forestiller os, at det bliver et hårdt job af få forsyninger herved, men isen vil ikke forhindre, at forsyningssskibene kommer frem".

[www.terradayli.com](http://www.terradayli.com) /PBSJ

### Verdens længste offshore-brønd

Norsk Hydro har netop startet olieproduktionen fra verdens længste offshore-brønd, som er tilknyttet Oseberg B-olieplatformen i Nordsøen, 130 km nordvest for Bergen. Oseberg-brønden er 10.007 meter lang.

Oseberg-brønden har vist, at det er muligt at nå olielommer, som ligger langt væk

fra en olieplatform. Boreaktiviteterne i Oseberg-området har stået på i over 15 år, og med de vellykkede borer langt fra boreplatformen, Oseberg B, har Norsk Hydro udviklet ny know how, som vil blive nyttig i koncernens videre olieudvinding.

Brønden er boret i et fem meter tykt reservoirsand, som bliver tyndere og tyndere, jo længere man kommer ud i formationen. Der kræves høj præcision for at kunne bore i tynde olieholdige sandformationer.

Det succesfulde projekt, som har været en storteknisk udfordring, er blevet muliggjort af et vellykket teamwork bestående af boreingeniører, geologer og reservoiringeniører i Norsk Hydro. Koncernen håber, at det nye oliefund vil kunne levere mellem 15.000 og 20.000 tønder olie om dagen til Oseberg B-olieplatformen.

[www.hydro.com/SLJ](http://www.hydro.com/SLJ) ■