

Ing. Lubomíra M e j s t ř í k o v á, VÚHU

Hana P e š t o v á, VÚHU

Popis a diskuse metody počítačového určení mineralogické skladby silikátových hornin a zemin na základě kvantitativní chemické analýzy

Úvod:

Je všeobecně známo, že další rozvoj těžeb v severočeském hnědouhelném revíru v devadesátých letech a po roce 2000 uvažuje s rozvojem povrchového dobývání v hlubokých částech pánve se složitou geologickou stavbou nadloží a intenzivně hlubinně přerubanou uhelnou slojí. S dalšími lomovými otvirkami se počítá též v bylansko-chomutovské oblasti pánve, t.j. v území s proměnlivým kvalitativním vývojem uhelných zásob.

Již nyní přecházejí velkolomy na skrývce i při dobývání uhlí do složitějších báňsko-geologických podmínek. Za této situace je nezbytné předhonorit některé stránky ložiskového průzkumu s cílem zajistit v maximálním předstihu požadované báňsko-geologické údaje, aby riziko báňské činnosti bylo co nejmenší. Se zřetelem na narůstající skrývkové poměry na lomech, nabývá při průzkumu ložiska na důležitosti informace o nadložních horninách, které podmiňují řešení skrývkového provozu.

Navržená metoda může přispět k podrobnější znalosti chemického a mineralogického složení u skrývkových hornin a přispět ke zvýšení přesnosti a spolehlivosti podkladů pro projekci báňského řešení dobývání skrývkových hmot. Příspěvek je rozdělen do dvou částí. P r v n í část se zabývá aplikací metody chemického rozboru popela na silikátové horniny, d r u h á část uvádí přepočty stanovených oxidů a ostatních složek na minerály s využitím počítače. Docílené výsledky jsou příznivé a verifikace metody vyžaduje provedení serií dalších analýz.

1/ Kvantitativní chemická analýza silikátových hornin a zemín

Ke stanovení chemického složení zemín a hornin bylo zkoušeno a studováno mnoho metod na fyzikálním a chemickém podkladě. Při volbě vhodné metody rozhoduje přesnost, správnost a rychlost stanovení a ekonomické náklady rozborů. Tyto předpoklady splňují především metody fyzikální. V analytické praxi existují takové přístroje, které umožňují stanovit řadu prvků, vyskytujících se v silikátových horninách. Požadavků zpracování velkých serií vzorků v krátkém čase s dostatečnou přesností by nejspíše vyhovovaly metody založené na atomové absorpční spektrofotometrii.

Tato oblast fyzikálně chemické analytiky je již značně propracována a zabezpečena celou řadou neustále se zdokonalujících přístrojů /např. Perkin-Elmer, Varian-Techtron, Beckmann, Pye-Unocem apod./.

V laboratorním oddělení petrografie jsou rozborů prováděny chemickou metodou, která byla propracována již před několika lety a která přihlížela k tehdejším možnostem. Je nutno konstatovat, že i nové a v tomto článku uvedené metody chemického rozboru hornin, již neodpovídají současným analytickým možnostem. Pro nedostatečné vybavení laboratoře zůstanou ještě nějaký čas jedinou možnou metodou klasické analytické metody vážkové, odměrné a kolorimetrické.

Kompletní chemická analýza vzorku, potřebná k určení mineralogické skladby, spočívá ve stanovení:

2 oxidů vážkově a to SiO_2 a SO_3

5 oxidů odměrně a to Fe_2O_3 , Al_2O_3 , CaO , MgO , FeO /ze zvláštní navážky/

3 oxidů kalorimetricky a to TiO_2 , MnO , P_2O_5

2 oxidů plamennou fotometrií a to Na_2O , K_2O

Dále stanovení ztráty žiháním při 1200°C , vlhkosti při 105°C .
C odměrnou metodou, S vážkově a CO_2 absorpční metodou.

Těchto 17 složek je výchozími daty pro výpočet mineralogického složení.

2/ Normativní přepočty stanovených oxidů a ostatních složek na minerály

Přepočítáváním chemických sedimentů na minerální složení se zabývalo již mnoho autorů, v posledních letech Avidon /1976/ a Pearson /1978/. Základní nevýhodou jejich přepočtů je, že jsou vypracovány pouze pro úzce vymezené typy hornin.

Avidon /1976/ vypracoval pro různé typy jílových hornin klasifikační diagram, do kterého horninu zařadí na podkladě dat z chemické analýzy a určí z něj příslušný minerál. Tato metoda umožňuje počítat též minerální složení méně obvyklých pelitů. Význačným rysem uvedeného přepočtu je značná pracnost. V dnešní době je nutné zpracovávat stále větší množství chemických analýz, proto se objevuje potřeba vypracovat programy pro počítačové zpracování těchto analýz.

U nejběžnějších sedimentárních hornin - pelitů znesnadňuje počítačové zpracování variabilita jílových minerálů. Pro výpočet na počítači je nutno vzorce jílových minerálů zjednodušit, což se pochopitelně odrazí na přesnosti výpočtu. Pro běžnou praxi je však tato přesnost většinou postačující a možnost zpracování analýzy na počítači je tudíž velmi výhodná.

2.1. Výběr minerálů

Do programu bylo zařazeno 20 minerálů, které se v pelitech vyskytují nejčastěji /viz tab. I./.

Tabulka I - Přehled použitých minerálů

goethit	FeO /OH/
pyrit	FeS ₂
apatit	Ca ₃ /PO ₄ / ₂
sádrovec	CaSO ₄ ·2H ₂ O
org. hmota	C
rutil	TiO ₂
kalцит	CaCO ₃
dolomit	CaCO ₃ ·MgCO ₃
siderit	FeCO ₃

anortit	$\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$
albit	$\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$
Fe - chlorit	$\text{Fe}_5\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}/\text{OH}/8$
Mg - chlorit	$\text{Mg}_5\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}/\text{OH}/8$
illit	$\text{KAl}_4/\text{AlSi}_7/\text{O}_{20}/\text{OH}/4$
kaolinit	$\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5/\text{OH}/4$
montmorillonit	$\text{Al}_2\text{Si}_4\text{O}_{10}/\text{OH}/2$
diaspor	$\text{AlO}/\text{OH}/$
křemen	SiO_2 H_2O

Mezi nejbohatší jílové minerály pelitů patří kaolinit, hydroslidy, montmorillonit, chlority. K nejílovému klasickému materiálu pelitů patří především křemen, živce, slidy a různé akcesorické minerály. K autigenním nejílovým minerálům patří zejména oxidy a hydroxidy Fe a Al, karbonáty /kalcit, siderit, dolomit, ankerit/, sírany /sádrovec, anhydrit/, fosfáty, různé modifikace SiO_2 , sulfidy /pyrit, markazit/, rozpustné soli /halit/. Vyskytuje se též organická směs. S rozpustnými solemi se v programu nepočítá.

2.2. Popis programu

Program pro přepočet chemických analýz na minerály byl vypracován pro počítač SM3 v jazyku BASIC /ing. J. Malý VÚHU/. Počítači je zadáno 17 vstupních složek : SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , FeO , MnO , MgO , CaO , Na_2O , K_2O , H_2O^+ , CO_2 , P_2O_5 , SO_3 , S, C, TiO_2 , H_2O^- /v procentech/.

Procenta jsou převedena na molekulární poměry /obsah oxidu v % je vydělen molekulární hmotností příslušného oxidu/.

S molekulárními poměry se pracuje v celém průběhu programu. Zpětný převod na procenta je proveden až při výpočtu jednotlivých minerálů. Program je rozdělen do tří částí. V první části je vypočten rutil, pyrit, goethit, apatit, sádrovec, v druhé části karbonáty, chlority a organická hmota. Ve třetí části je prováděn výpočet jílových minerálů. Řeší

se vzájemný vztah množství Al_2O_3 zbylého po předchozích minerálech a množství SiO_2 . Podle poměru Al_2O_3 a SiO_2 tiskne program dva výsledky jílových minerálů a křemene ze tří variant : montmorillonit - křemen, kaolinit - montmorillonit. Ve skutečnosti se v hornině vyskytují všechny tři minerály /kaolinit, montmorillonit i křemen/ zároveň a výše uvedené varianty tak představují pouze krajní možnosti pro obsahy jednotlivých minerálů. Skutečný vzájemný poměr těchto tří minerálů je nutno stanovit jinými metodami. Tím jsou vyčerpány všechny možnosti, kterými tento program disponuje.

V tabulce č. II a III jsou uvedeny výsledky počítačového zpracování 2 vzorků na základě kvantitativní chemické analýzy.

Tabulka II: Oxidové složení v procentech /lokalita Mariánské Radčice/

vzorek č.	1	2
SiO_2	52,13	43,39
Al_2O_3	10,86	23,76
Fe_2O_3	9,68	3,25
FeO	1,46	4,69
MnO	0,03	0,18
MgO	1,25	0,85
CaO	1,68	1,77
Na_2O	0,19	0,25
K_2O	0,15	0,25
H_2O	2,48	1,89
CO_2	14,90	9,34
P_2O_5	0,15	0,01
SO_3	0,01	0
S	0	0
C	7,65	3,78
H_2O	19,23	18,45
TiO_2	0,45	0,89

Tabulka III : Mineralogické složení v procentech

vzorek č.	1		2	
varianta	M+KR	K+KR	M+KA	KA+KR
goethit	10,19	10,03	3,34	3,28
pyrit	0	0	0	0
apatit	0,31	0,31	0,02	0,02
sádrovec	0,02	0,02	0	0
org. hmota	4,23	4,17	5,11	5,02
rutil	0,43	0,42	0,80	0,78
kalцит	0	0	0,92	0,90
dolomit	4,65	4,58	3,48	3,42
siderit	2,27	2,24	0	0
anortit	0	0	0	0
albit	1,52	1,50	1,89	1,86
ortoklas	0	0	0	0
Fe-chlorit	0	0	8,67	8,52
Mg-chlorit	0,46	0,45	0	0
illit	1,65	1,63	2,61	2,56
kaolinit	0	22,75	22,81	45,96
montmorillonit	32,26	0	34,83	0
dispor	0	0	0	0
křemen	22,35	35,54	0	11,42
H ₂ O	11,65	16,38	16,53	16,25

M - montmorillonit

KA - kaolinit

KR - křemen

Diskuse a závěr

Obsah SiO₂ v jednotlivých minerálech /kromě kaolinitu/ značně kolísá. Obsah Al₂O₃ je v jílových minerálech také proměnlivý. V programu je Fe³⁺ přiřazeno pyritu a goethitu, který je zde zástupcem oxidů a hydroxidů trojmocného železa.

Z Fe^{2+} se počítá siderit a Fe-chlorit. MnO se průběžně vyskytuje v horninách v nepatrných koncentracích. V programu se přičítá k FeO . Mg^{2+} se při výpočtu uvažuje jako součást dolomitu a Mg-chloritu. Ca^{2+} je přiřazen sádrovci, apatitu, kalcitu, dolomitu a případně anortitu. Na^+ je v programu přiřazen pouze albitu a K^+ se přiřazuje illitu a ortoklasu.

Díky vzájemnému zastoupení jednotlivých kationtů v molekulách jílových minerálů se mohou obsahy všech vypočtených minerálů poněkud lišit od skutečného složení horniny. Způsob určování složení sedimentů pomocí výpočetní techniky byl ve VÚHU zatím pouze rozpracován. Pro konečné zhodnocení je třeba zanalyzovat a přepočítat mnoho vzorků z různých lokalit SHR.

Je nutno připomenout, že touto problematikou se již po delší dobu zabývá doc. RNDr. Jan Šrámek z KU Praha.

Použitá literatura:

1. Avidon V.P. /1976/ Koeficienty dlja mineralogičeskich i petrochimičeskich peresčetov - Moskva
2. Pearson M.J. /1978/ Quantitative clay mineralogical analyses from the bulk chemistry of sedimentary rocks - Clay and Clay Minerals, 26,6, 423-433.

S h r n u t í

Popis a diskuse metody počítačového určení mineralogické skladby silikátových hornin a zemin na základě kvantitativní chemické analýzy

V článku je popisována metoda kvantitativního určení minerálů v silikátových horninách a zeminách. Práce je rozdělena do dvou částí. První část se zabývá aplikací metody chemické analýzy popela na silikátové horniny a zeminy. Druhá část obsahuje přepočet složek chemické analýzy na minerály.