

Kristallografin i geologin

[Av Linus Brander, disputerad inom mineralogi och petrologi, forskare vid CBI, Cement och betonginstitutet]

Här beskriver en oorganisk kemist och geolog med vardera benet i två olika, men ändå lika världar, kemins och geologins – kristallografins roll i det praktiska geologiarbetet.

Mineral är jordklotets vanligaste typ av kemiska föreningar och är per definition kristallina till sin uppbyggnad.

Den kemiska sammansättningen i kombination med kristallstruktur tar sig inte bara uttryck i rent visuella egenskaper som kristallform, tvillingbildning, spaltbarhet, färg och lyster, utan också fysikaliska egenskaper såsom densitet, hårdhet, termisk ledningsförmåga och magnetism. Man behöver ju inte gå längre än till skolboksexemplet diamant och grafit för att inse hur mycket som beror av atomernas position relativt varandra och bindningstyp.

Denna artikel vill visa hur kristallografin kan användas i det praktiska geologiarbetet.

Vad är sten? Även om kristallografin (och mineralogin) revolutionerades av upptäckten och utvecklingen av röntgendiffraktion, finns naturligtvis en förhistoria där insikten om kristallografi gradvis växer fram.

Den äldsta bevarade skriftkällan, *Om stenar*, författades av greken Theofrastos någon gång under tredje århundradet f.Kr. Skriften handlar om malm, ädelstenar och bergarter som pimpsten, marmor och stenkol. Theofrastos vågar sig också på ett klassificeringssystem baserat på hur olika mineral beter sig vid upphettning.

Romaren Plinius den äldre ger år 77 e.Kr. ut en mineralogisk encyklopedi med fokus på malm, ädelstenar och färgpigment. Blott två år senare dör Plinius en geologirelaterad död av episka mått, då han tillsammans med Pompejborna begravs av Vesuvius aska.

Nästan ett och ett halvt millenium senare, på 1550-talet e.Kr., utkommer den tyske mångsysslaren Georgius Agricola med sitt verk *Mineralogisk textbok*, med bland annat mineralbeskrivningar och fysiska egenskaper, däribland hårdhet och spaltbarhet. Spaltbarhet innebär att de kemiska bindningarna längs vissa riktningar i kristallen är svagare, vilket kan leda till sprickbildning och en yttre kristallform

som härmar det interna mönstret (Figur 1).

Eftersom spaltplanen är kristallografiskt kontrollerade är de förutsägbara och ett unikt karaktärsdrag för ett visst mineral.

På sextonhundratalet påvisar dansken Nicholas Steno lagen om det konstanta vinkelförhållandet mellan specifika kristalltyper i exemplar av ett och samma mineral och är därmed inne och nosar på att varje mineral har en specifik och regelbunden uppbyggnad.

Vid skiftet 1700-/1800-talen bekräftar fransmannen René-Juste Haüy detta och föreslår att kristaller byggs upp genom att stapla identiska byggnadsblock (det vi idag kallar enhetsceller), och att den makroskopiska kristallens form och ytor står i relation till dessa.

Idag beskriver vi tack vare framstegen med röntgen- och neutrodiffraction mineral med begrepp som enhetscell, kristallsystem och kristallklass, och kan relativt enkelt strukturbestämna ett tidigare okänt mineral, om vi har turen att råka på ett sådant.

Fasbestämning med endast ögat till hjälp.

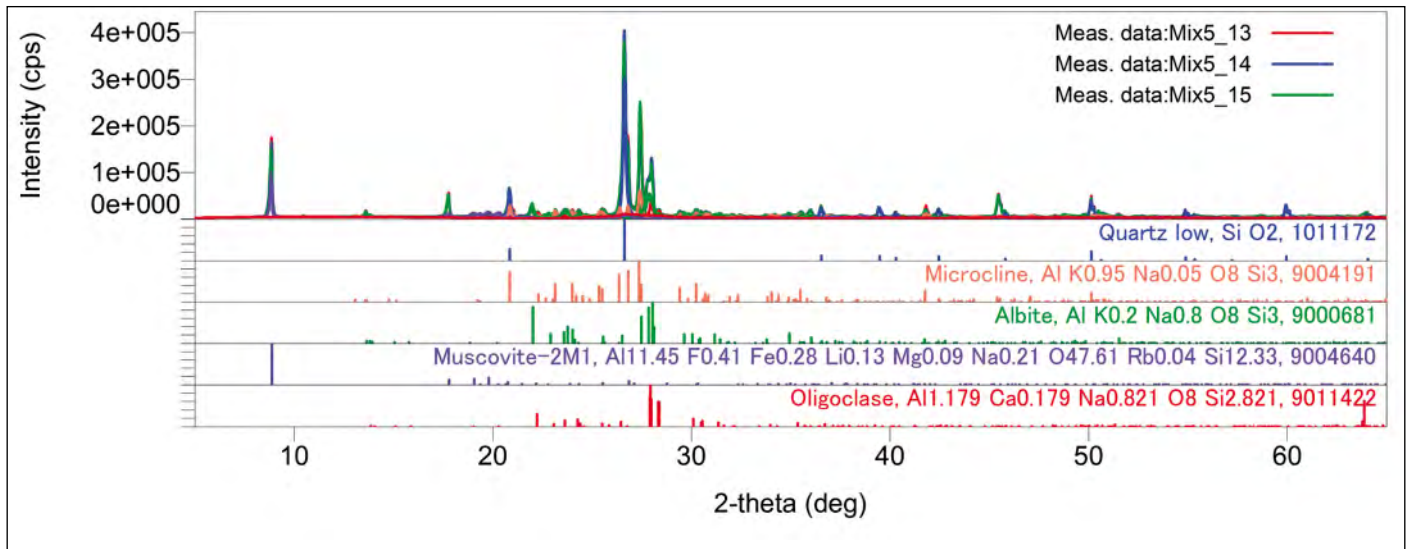
Mineralidentifikation är ett mycket kraftfullt verktyg för att etablera grundförutsättningarna inom i stort sett varje problemställning eller intresseområde där geologen verkar.

Efter någon minuts vridande och vändande på ett stenprov kan ju faktiskt besked ges om materialets kemiska sammansättning! I prospekteringssyfte är detta naturligtvis kritiskt för själva verksamheten, men även i sammanhang som naturmiljö, arbetsmiljö, materialprestanda och klassificering får man inte underskatta värdet av denna färdighet.

Tas kristallstruktur med i beaktande kan geologen redan i identifieringsögonblicket göra sig en första bild av hur bergarten bildats, då förekomst av bland annat olika polymorfer är ett direkt resultat av bild-



Kalifältspat i en av tre möjliga polymorfer – ortoklas.



Figur 4: Röntgendiffraktogram av bergart av granitisk sammansättning. Tre olika uttag från stenpulvret har analyserats. Notera speciellt muskovits karakteristiska topp vid ca 9°. Provpredparation och analys: Andreas Langenbach (examensarbetare).

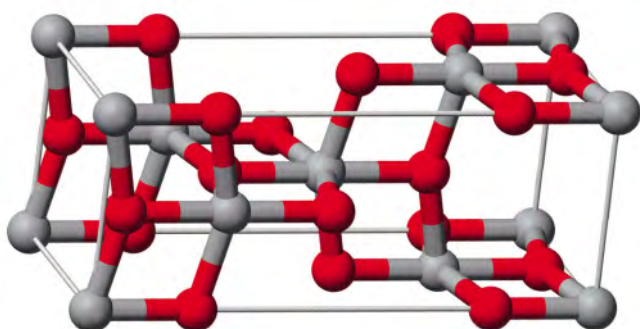
ningsförhållanden. Ett bra exempel är de tre Al_2SiO_5 -polymorferna. Dessa mineral dyker gärna upp i s.k. metapeliter, leriga sediment som genom metamorfos omvandlats till kristallina bergarter.

Bladformad blå kyanit avslöjar att trycket varit högt relativt temperaturen, ett förhållande som är typiskt för subduktionszoner, där jordskorpa dragits med ner i djupen vid en djuphavsgrav, men sedan skjuvats upp igen.

Fynd av fibrös gulaktig sillimanit indikerar dock det omvända: ovanligt hög temperatur i förhållande till trycket i jordskorpan. Sådana förhållanden råder bland annat där jordskorpan förtjockats i en kollisionszon mellan kontinenter.

Polymorfen vittnar på detta sätt om de storskaliga geologiska krafterna, som ett miljontals år gammalt eko av hur atomerna valt (tvingats?) att stöka om sina platser.

1800-talets high-tech! Det petrografiska mikroskopet. År 1828 lägger skotten William Nicol grunden till det petrografiska mikroskopet, då han uppfinnar det första polarisationsprismat. Nicolprisma utgörs av ett välkristalliserat och transparent exemplar av det trigonala/rombohedrala mineralet kalcit ($CaCO_3$).



Anatas, en av de tre mineralformerna för titandioxid, TiO_2

I dagens delvis automatiserade mikroskop används dock moderna polarisationsfilter, men icke desto mindre har själva mikroskopet förblivit mineralogens huvudsakliga verktyg.

I texten här intill kan du läsa hur mikroskopet fungerar.

Röntgendiffraktion i geologi. En del av geologarbetet handlar om att bestämma halter av olika mineral, t ex kvarts (SiO_2 , kristallklass 32). Tack vare kvarts höga termiska ledningsförmåga, önskas hög halt i markbädd för högspänningskabel, för att inte kabeln ska bli överhettad och kollapsa.

Är bergarten mycket finkornig och avsedd till betong ska kvartshalten istället vara låg, eftersom vissa SiO_2 -faser (däribland mycket finkornig kvarts) är relativt lösliga i basisk miljö (pH-värde i betong ~13).

Oönskade reaktioner mellan vatten, alkalier och hydroxidjoner i cement och löst SiO_2 från ballastmaterial kan bilda vattenabsorberande gel, som sväller och skapar sprickor, vilket förutom de uppenbara skadorna ger risk för armeringskorrosion.

Vanligtvis görs kvantifiering av mineralhalt i petrografiskt mikroskop, men det finns fall då detta är svårt eller till och med omöjligt. Anledningarna kan t ex vara dålig manifestering av kristallform i konkurrens med bergartens andra mineral eller extrem finkornighet (ca 50 μm).

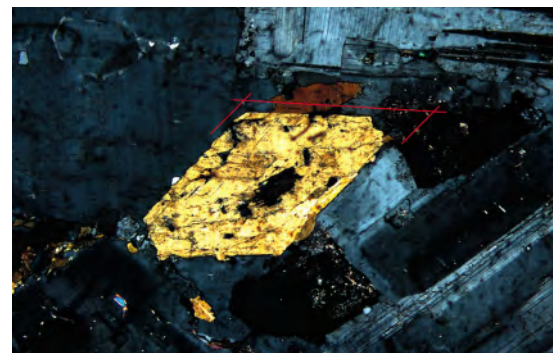


Foto Linus Brander

Figur 1: Hornblände - $(Na,K)_{0-1}Ca_2(Mg,Fe,Al)_5Al_{0.5-2}Si_{6-7.5}O_{22}(OH)_2$ - i petrografiskt mikroskop (med analysator). Förstoring 50x och bildstorlek 2 x 2 mm. c-axeln normal mot bilden. Röda linjer markerar {110}-spaltplanen som i hornblände möts i karakteristiska vinklar om 124° och 56°. Notera att spaltplanen inte bara bestämmer kristallens form, utan även syns som tunna sprickor inne i kristallen. Kringliggande grå mineral är plagioklas.

Tur då att kristallstrukturen arbetar på ångströmskala och att röntgendiffraktion (XRD) finns till hands! Med hjälp av pulver-XRD har vi möjlighet att identifiera och kvantifiera ingående mineral, dock inte helt problemfritt.

Bergarter är generellt flerfasmaterial, vilket innebär att varje diffraktogram är uppbyggt av alla de ingående fasernas diffraktionstoppar. De flesta bergarter innehåller två-tre huvudmineral, jämte en handfull mineral i halter om några % eller %o.

Kalifältspat ($KAlSi_3O_8$) förekommer dessutom i tre möjliga polymorfer - mikroklin, ortoklas och sanidin - medan plagioklas uppträder i en kontinuerlig lösningsserie mellan ändleden albit ($NaAlSi_3O_8$) och anortit ($CaAl_2Si_2O_8$). Även om det utifrån given bergartstyp går att grovjustera var man finner sig vad gäller fältspattyper, måste →

operatören ändå finjustera sig fram tills en så bra passning som möjligt erhålls.

Trots dessa svårigheter går det att med förvånande god noggrannhet bestämma halten kvarts i stenprover. I fem blandningar av egentillverkade bergarter, som vägts in utifrån rena mineralkoncentrat av mikroklin, plagioklas, kvarts och muskovit (ljus glimmer), blev noggrannheten 5-8 % och i ett par fall så bra som 1-2 %.

Diffraktogram från en av dessa blandningar kan beskådas i Figur 4, där speci-

ellt muskovits karaktäristiska (001)-topp vid $d = 10\text{\AA}$ sticker ut vid $2\theta = 9^\circ$.

I övrigt sammanfaller flera av diffraktionstopparna för kvarts och fältspaterna mer eller mindre, vilket är en utmaning i sammanhanget. Även om det finns mer att göra i termer av att välja lämpligaste pulverdiffraktionsfilen för respektive fas från databasen och att finjustera parametrarna i den Rietveld-förfiningsmetod vi använder för kvantifiering, är överensstämmelsen gott och väl tillräcklig för våra syften.

Tack vare XRD kan därmed rätt ballast hamna på rätt plats!

Polymorfer

Polymorfi (av grekiska polymorf, "månggestaltad") innebär att en kemisk förening kan skapa kristaller i minst två olika strukturer. Olika polymorfer har olika egenskaper som exempelvis färg, löslighet och smältpunkt. Polymorfism kan finnas i alla kristallina material, inklusive polymerer, mineraler och metaller.

Petrografiskt mikroskop

➔ Med ett petrografiskt mikroskop kan mineral identifieras i sitt sammanhang, genom att studera hur planpolariserat ljus interagerar med kristallstrukturen i den okända fasen. Det provpreparat som studeras kallas *tunnslip* och är en ca 30 μm tunn skiva av t ex mineral, berg eller betong, fastlimmad på glasskiva och täckt med täckglas.

Ett petrografiskt mikroskop är ett optiskt transmissionsmikroskop, där ljuskällan finns i mikroskopets fot och lyser genom tunnslipet innan det når operatörens ögon. Innan ljuset når tunnslipet planpolariseras det i en viss riktning i den nedre polarisatorn (Figur 2).

Efter tunnslipet finns ytterligare en polarisator, som är in- och uttagbar och kallas

analysator. Analysatorn är orienterad 90° mot den nedre polarisatorn, vilket innebär att om ett optiskt och därmed kristallografiskt isotropt mineral ligger i blickfånget blir detta helt svart (Figur 3).

ett isometriskt mineral är inte oväntat elektrondensiteten och därmed brytningsindex och ljushastighet den samma i alla riktningar, så med enkelhet avgör operatören alltså om mineral X är isometriskt eller om det tillhör något av de övriga kristallsystemen.

I alla andra kristallsystem är det nämligen skillnad i elektrondensitet och därmed brytningsindex i de olika kristallografiska riktningarna (förutom längs sk optiska axlar), varför ljuset, som innan inträdet i mineralet var planorienterat 90°

mot den övre polarisatorn, på sin resa genom mineralet delas upp i två mot varandra vinkelräta strålar: en snabb och en långsam. Efter mineralfärden förenas dessa och interfererar till en enda riktning igen, som (oftast!) inte längre oscillerar vinkelrät mot övre polarisatorn.

Den färg som mineralet på detta sätt får med övre polarisator inskjuten benämns *interferensfärg*, till skillnad från *mineralets* egenfärg som är den som syns med den övre polarisatorn uttagen (Figur 3). Såväl egenfärg som interferensfärg är mineralunika egenskaper och kan användas för beräkning av dubbelbrytning (skillnaden i brytningsindex mellan snabba och långsam-

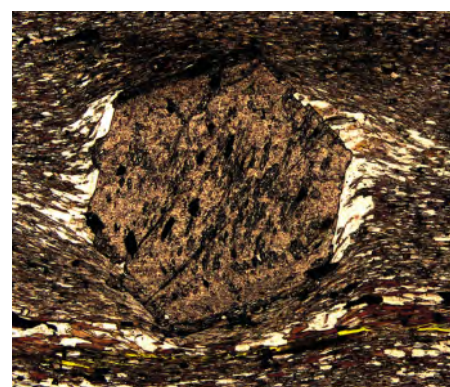


Foto Linus Brander

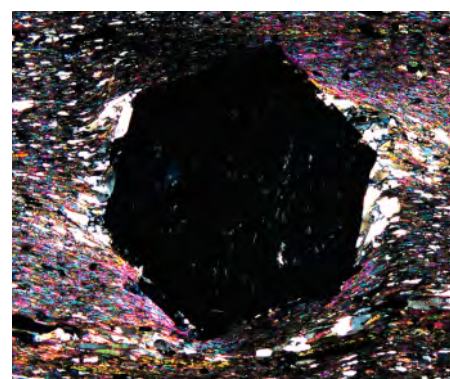


Foto Linus Brander

Figur 3: Bergart i petrografiskt mikroskop. Förstoring 50x och bildstorlek 2,8 x 2,1 mm. Övre bilden är tagen med analysator uttagen och visar därmed mineralens egenfärg. Nedre bilden är tagen med analysator inskjuten och visar därmed mineralens interferensfärg. Minalet som är helt svart är optiskt isotropt och tillhör därmed det isometriskt kristallsystemet. Här rör det sig om granat – $(\text{Ca,Fe,Mg,Mn})_3\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$. Övriga mineral hör till andra kristallsystem, eftersom de uppvisar interferensfärger. Korn med glada pastellfärgar i rosa, blått och grönt är glimmermineralet biotit – $\text{K}(\text{Mg,Fe})_3\text{AlSi}_3\text{O}_{10}(\text{OH})_2$ - medan fåtaliga vita och grå korn är kvarts och fältspat.

ma riktningen). Ur tabeller kan man nu lätt hitta aktuellt mineral!


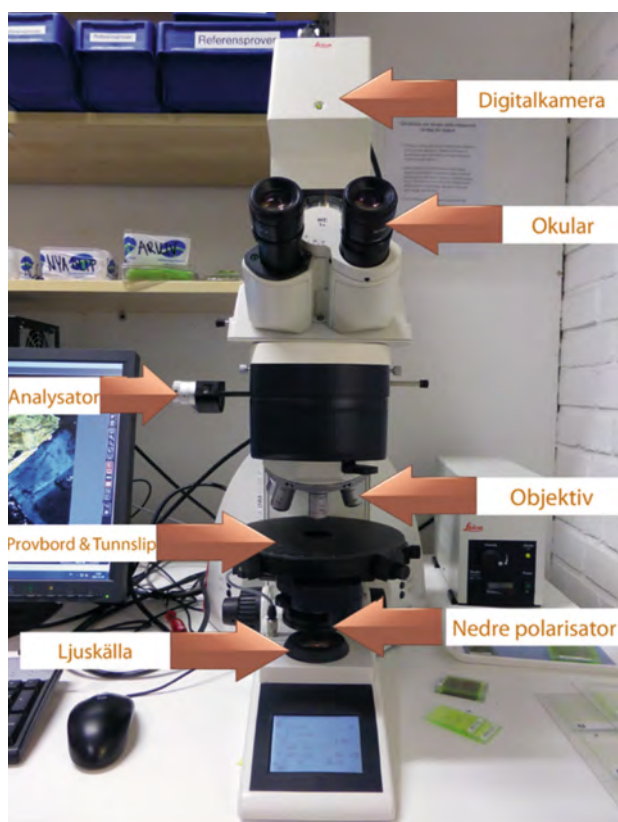
Samverkan mellan planpolariserat ljus och kristallografi ger operatören en uppsjö andra verktyg att använda, som det tyvärr inte finns plats här att fördjupa sig i. 

Foto Linus Brander



Figur 2: Petrografiskt mikroskop. Se text för beskrivning.