

XRF-studie av sedimentära borrkärnor– en metodikstudie av programvarorna Q-spec och Tray-sum

Anna Fouskopoulos Larsson

Examensarbeten i geologi vid Lunds universitet,
kandidatarbete, nr 472
(15 hp/ECTS credits)



Geologiska institutionen
Lunds universitet
2016

XRF-studie av sedimentära borrkärnor– en metodikstudie av programvarorna Q-spec och Tray- sum

Kandidatarbete
Anna Fouskopoulos Larsson

Geologiska institutionen
Lunds universitet
2016

Innehåll

1 Inledning	7
1.1 Bakgrund	7
1.2 Ölands berggrund	7
1.3 Borrkärnan från Segerstad, Öland	7
2 Röntgenfluorescens, XRF	7
2.1 XRF-spektrometern	10
2.2 Cox Analytical Systems– en kort företagspresentation	11
3 Syfte	11
3.1 Mål	11
4 Material och metodik	11
4.1 Litologisk förstudie	11
4.2 Teknisk specifikation	13
5 Resultat	13
5.1 Aluminiumoxid, kaliumoxid och uran	13
5.2 Svavel, järnoxid och arsenik	13
5.3 Tray-sum, modellerad presentation av avsnitt ut Segerstadsborrkärnan	13
5.3.1 Kalksten	13
5.3.2 Glaukonit	13
5.3.3 Skiffer	13
5.3.4 Kalksten med orstenslager	13
5.3.5 Lersten	13
5.4 Medelkoncentrationer av aluminiumoxid, kaliumoxid, uran, svavel, järnoxid och arsenik	15
6 Diskussion	19
7 Slutsats	19
8 Tack	20
9 Referenser	20

Abstrakt

ANNA FOUSKOPOULOS LARSSON

Fouskopoulos Larsson, A., 2016: XRF-studie av sedimentära borrhärdar. En metodikstudie av programmen Q-spec och Tray-sum. *Examensarbeten i geologi vid Lunds universitet*, Nr. 472, 18 sid. 15 hp.

Sammanfattning: Alunskiffern i Sverige har länge varit av intresse för forskning. Historiskt sett har den varit av intresse för industriellt bruk, senare under utredning för dess eventuella olje- och gasinnehåll. På senare år har alunskiffern varit föremål för forskning på grund av dess innehåll av tungmetaller, exempelvis uran, samt hur detta kan påverka grundvattenkvaliteten. På södra Öland finns några av Sveriges mäktigaste alunskifferformationer och på grund av det utgör Öland och dess berggrund ett intressant område för borrhärdning, undersökning och forskning. För att underlätta analys av alunskifferns kemiska sammansättning utförs, på prov, en XRF-skanning och en utvärdering av resultaten. Att skanna med XRF ger möjlighet att analysera de kemiska skiftningarna och förändringarna längs en borrhärd. Det kan möjliggöra analyser på exakta nivåer i berggrunden. Resultaten visar att XRF-analys tillsammans med Q-spec och Tray-sum ger goda möjligheter att analysera skiftningar i en borrhärd och påvisa trender i den kemiska sammansättningen.

Nyckelord: Alunskiffer, XRF, Öland, kemisk analys

Handledare: Mikael Erlström och Leif Johansson

Ämnesinriktning: Berggrundsgeologi

Anna Fouskopoulos Larsson, Geologiska institutionen, Lunds universitet, Sölvegatan 12, 223 62 Lund, Sverige. E-post: annalarsson1980@gmail.com

Abstract

ANNA FOUSKOPOULOS LARSSON

Fouskopoulos Larsson, A., 2016: XRF-studie av sedimentära borrhärnor. En metodikstudie av programmen Q-spec och Tray-sum. . *Dissertations in Geology at Lund University*, No. 472, 18 pp. 15 hp (15 ECTS credits) .

Abstract: The Swedish Alum Shale has long been of interest within research. Historically it has been used for industrial purposes, later because of its potential content of oil or gas. Recently it has come to be of interest due to its content of heavy metals, such as Uranium, and how this can affect the groundwater supplies and its quality. In the southern parts of Öland some of the greatest Alum Shale formations can be found. This makes this area and its bedrock of great interest for drilling and research. To facilitate the process of chemical analysis XRF-scanning has been applied and the results evaluated. XRF-scanning gives an opportunity to analyze the chemical differences within a drill core. This enables analyses on specific levels within the bedrock. The results show that XRF-analysis together with Q-spec and Tray-sum gives good possibilities to analyze chemical fluctuations in a drill core and detect trends in its chemical composition.

Keywords: Alum Shale, XRF, Öland, chemical analysis

Supervisor(s): Mikael Erlström and Leif Johansson

Subject: Bedrock Geology

Anna Fouskopoulos Larsson, Department of Geology, Lund University, Sölvegatan 12, SE-223 62 Lund, Sweden. E-mail: annalarsson1980@gmail.com

1 Inledning

1.1 Bakgrund

Större delen av Sveriges berggrund utgörs av prekambriskt urberg och endast en liten del av yngre sedimentära bergarter. Paleozoisk berggrund påträffas i Skåne, Öland, Gotland, delar av Närke och Östergötland (slätterna). Västergötlands högland samt Siljanringen i Dalarna (SGU, 2016). Berggrunden består främst av sandsten, kalksten och olika skifferar. De områden där det förekommer mörka skifferar, exempelvis alunskiffer, utgör mindre än cirka 1 % av Sveriges yta (Erlström, 2014). Alunskiffern har fått sitt namn eftersom den svarta skiffen varit råvara för framställning av alun. Den har även använts till framställning av rödfärg, brutits för sitt innehåll av svavel och uran samt använts som energikälla i fältugnar för kalkbränning (Hessland och Armands 1978).

Ur ett historiskt perspektiv är alunskiffern intressant då den låg till grunden för, dåtidens, första storindustri och var en av Sveriges största exportprodukter (Hessland och Armands 1978). Fortfarande är alunskiffern av industriellt intresse. Inte minst i samband med dess eventuella innehåll av skiffersgas. Även olika metaller och spårelement har gjort att det finns ett antal undersökningstillstånd i Sverige rörande detta, bland annat i Östergötland och på Öland (Erlström, 2014).

Avsättningen av de sediment som kom att bilda alunskifferformationen skedde under tidig paleozoisk tid och sträckte sig över en tid från 542 till 488,3 miljoner år (Hessland och Armands 1978). Skiffer består av sedimentpartiklar i lerfraktionen, lermineral, men även en del karbonat och mineraler i siltfraktionen. Förutsättningarna för att sediment ska kunna avsättas och skiffer, i förlängningen, ska kunna bildas är att sedimenten avsätts i en lugn miljö. För att mörka skiffer ska kunna bildas krävs att det råder syrefattiga förhållanden och god tillförsel av organiskt material. Dessa förhållanden finner man oftast i djupa hav, insjöar och laguner.

I slutet på prekambrium separerade Baltica, den kontinentplatta som Sverige tillhör, från superkontinenten Rodinia och kom att existera som en friliggande kontinent utan påverkan av tektonik. Marina skyddade miljöer på Baltica utgjorde gynnsamma områden för deponering av skiffersediment. Vid tiden för avsättning av alunskiffer befann sig Baltica ca 37°-47° söder om ekvatorn och var roterad 170° från dagens position (Bucharth et al. 1997; Cocks & Torsvik 2002). Enligt Thickpeny (1984) skulle avsättningsområdet sträcka sig över en yta på 2000×800 kilometer. I Sverige, idag, återfinns

den största utbredningen av alunskiffer i landets östliga delar och den största mäktigheten finns i Skåne där den uppnår ca 100 meter (se figur 1).

1.2 Ölands berggrund

Ölands berggrund utgörs till större delen av ordovicisk kalksten (se figur 2). Lagerföljderna har en svagt östlig stupning vilket gör att den äldsta blottade berggrunden finns i kustskärningar utmed Ölands västra kust (Erlström, 2014). Här påträffas huvudsakligen blottningar av mellankambrisk siltsten och lersten men det finns även mindre områden där alunskiffern går i dagen (se figur 2).

Alunskiffern påträffas över hela Öland och är som mäktigast i borrhningar på den södra delen. Där kan den uppnå en mäktighet på ca 20 meter (Hessland och Armands 1978) och omfattar här ett tidsspänn från yngre mellankambrium till tidig ordovicium. Ölands alunskiffer brukar delas in i två avsnitt, en övre del bestående av den ordoviciska alunskiffern och en undra del tillhörande övre kambrium. Mellankambrisk alunskiffer är endast lokalt påvisad i tunna lager på södra Öland (Westergaard 19XX). Dessa två skiljs åt av en orstensbädd som påträffas över hela Öland (Hessland & Armands, 1978).

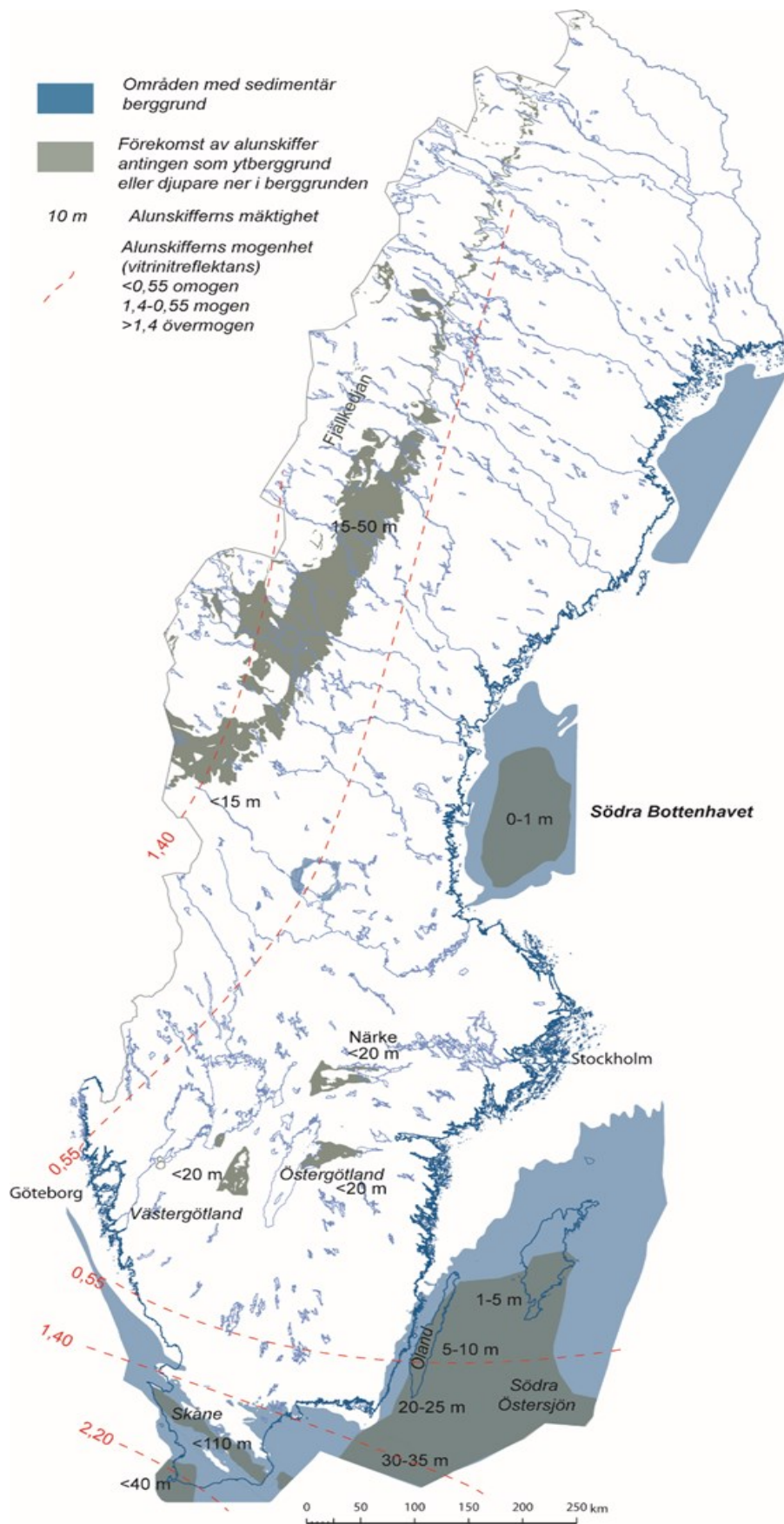
1.3 Borrhkärnan från Segerstad, Öland

Borrhningen vid Segerstads Fyr utfördes 1969 i samband med att SGU avslutade sina oljegeologiska arbeten i Sverige. Man utförde en kärnborrhning till 258 meters djup genom hela den ordoviciska och kambrika lagerföljden till man nådde urberget (Dahlman & Skoglund 1969). För att ytterligare bygga upp kunskap kring berggrundens kemiska och fysikaliska beskaffenhet på södra Öland utfördes även en ny kärnborrhning till 50,6 meters djup i anslutning till Mörbylånga kommuns vattentäkt i Grönhögen. Borrhningen utfördes våren 2015 av SGU och ämnar ge större kunskap om eventuella grundvattenproblem (Erlström, in press).

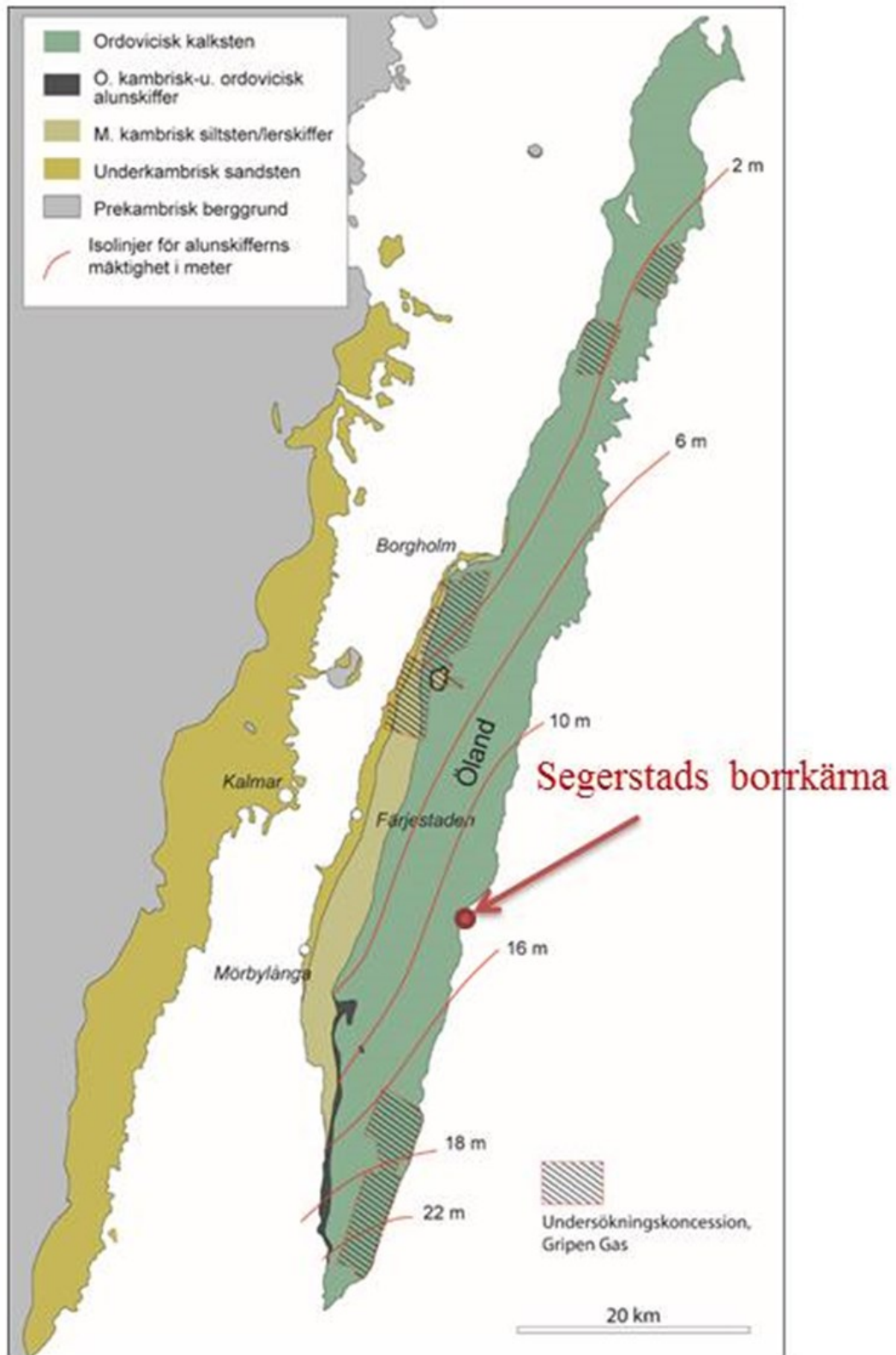
2 Röntgenfluorescens– XRF

För att förklara principen bakom XRF måste man använda begrepp från kvantmekaniken. Röntgenstrålar kan ses som elektromagnetiska vågor, eller som fotonstrålar med tillhörande energi som kan redovisas i enheten kilo elektronvolt, keV. I våglängd befinner de sig mellan ultraviolett ljus och γ -strålning med våglängder på 0,01-10 nm, vilket motsvarar energinivåer mellan 0,125-125 keV, se figur 3 nedan.

Röntgenstrålning har tre huvudsakliga sätt att interagera med materia. Dessa är genom fluorescens, Compton spridning samt Rayleigh spridning. När strålarna når ett medium kommer en del att absorberas och producera fluorescens, en del kommer att passera



Figur 1. Översiktskarta som visar förekomsten av fanerozoisk sedimentär berggrund i Sverige (Erlström 2014)



Figur 2. Schematisk berggrundkarta över Öland och dess alunskiffer samt mäktighet. Lokalen där Segerstads borrhäna är tagen är markerat med rött i figuren. (Erlström, 2014)

och en del kommer att spridas och studsas tillbaka. En atom består av en kärna med positivt laddade protoner samt neutralt laddade neutroner. Runt atomens kärna cirkulerar negativt laddade elektroner. Dessa är i sin tur placerade i olika orbitala banor runt kärnan. Den innersta banan, skalet, benämns K-skal som följs av L-skalet, M-skalet etc. Skalen har olika antal subskal, exempelvis har L-skalet tre subskal som betecknas LI, LII och LIII. K-skalet kan innehålla två, L-skalet åtta och M-skalet 18 elektroner och elektronens energi beror på vilket skal den tillhör och till vilket grundämne.

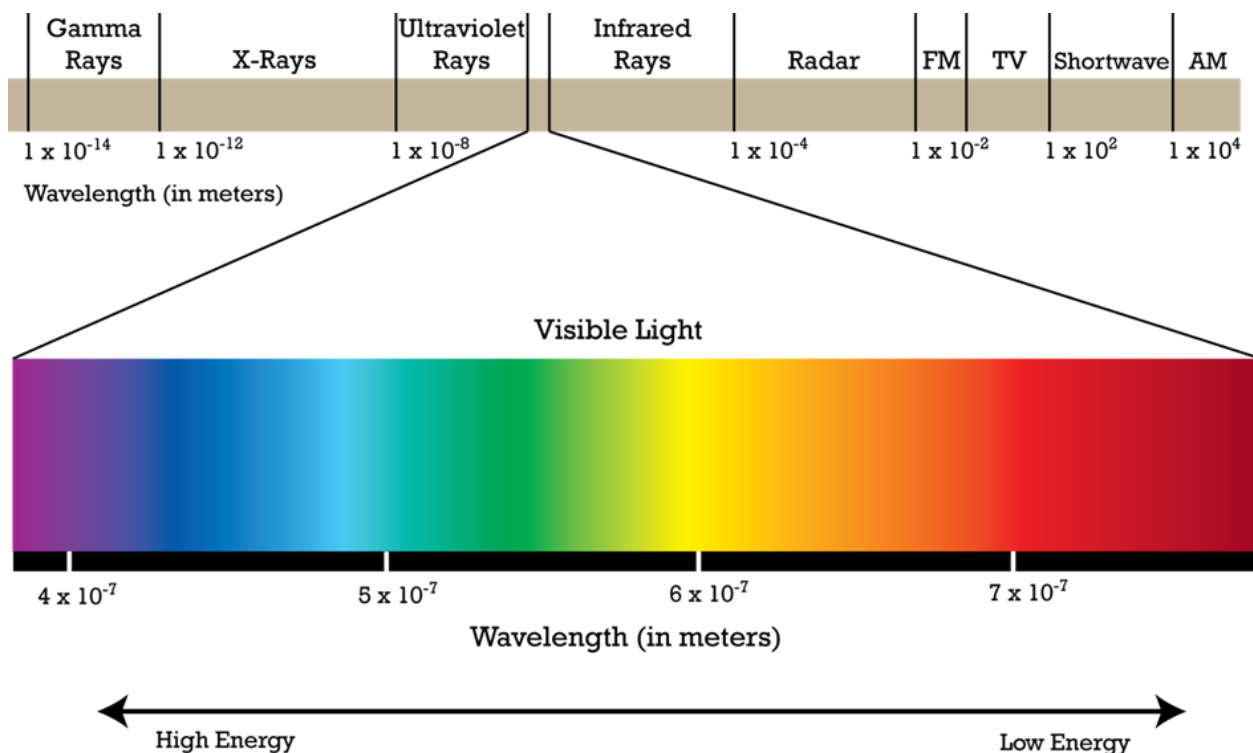
Genom att bestråla en atom med röntgenstrålar med tillräcklig energi kan man stöta bort en elektron från sin bana i atomen. När detta sker bildas det en vakans i skalet där elektronen stöttes bort ifrån vilket gör att atomen befinner sig i ett instabilt läge med högre energinivå. Eftersom atomen strävar efter jämvikt och sin originalkonfiguration kommer en elektron från ett yttre skal att "falla in" och fylla den lediga platsen. Elektroner i de yttre skalen har däremot en högre energinivå jämfört med de som finns närmre kärnan. Denna extra energi kommer att avges som röntgenstrålning. Den energimängd som avges beror på skillnaden i energinivå mellan skalen och den infallande elektronen. Detta sker för olika skal då olika vakanser uppstår och olika elektroner rör sig mellan skalen. Tillsammans ger dessa "energihopp" upphov till ett linjespektra. Varje atom har ett specifikt

linjespektra med specifika energinivåer. Detta ger atomen ett fingeravtryck och möjlighet ges att kunna bestämma grundämnet. På grund av absorption kommer den inkommande röntgenstrålningens energi att avta med djupet i materia och så småningom kommer den inte att kunna påverka elektronkonfigurationen mer. Detta ger möjlighet att analysera ett material på ytan men således inte på djupet. (Brouwer, 2003).

2.1 XRF-spektrometern

Som namnet avslöjar så bygger XRF-spektrometern på de fysikaliska begrepp som beskrivits ovan. Konceptet hos spektrometern bygger på en strålningskälla, ett prov och en detektor. Strålningskällan består ofta av ett röntgenrör men det finns även system som använder sig av en radioaktiv källa.

XRF-spektrometern delas in i två olika detektionssystem. EDXRF-systemet mäter energiskillnaderna direkt från provet medan WDXRF-systemet låter all strålning träffa en kristall och de olika typerna av strålning kommer att brytas åt olika håll, likt en prisma som bryter olika färger av ljus åt olika håll. Röntgenröret drivs av en strömkälla, ett filament, som avger fria elektroner. När dessa träffar en närliggande anod avges röntgenstrålning. Några av dessa fria elektroner kommer att träffa elektroner inne i atomen i anoden och det är detta som kommer att ge



Figur 3 Spektrum för olika elektromagnetiska strålningars våglängd (λ) samt energinivå (Lee, 2013).

den specifika strålningen som utgör ämnets fingeravtryck. (Brouwer, 2003).

2.2 Cox Analytical Systems– en kort företagspresentation

Cox analytical systems är ett svenskt företag, med kontor i Mölndal utanför Göteborg. Det grundades 1992 av en grupp fysiker från Chalmers tekniska högskola och jobbar idag primärt med Itrax XRF skannern. De bygger och utför teknisk support för denna samt utvecklar applikationer och tillhörande programvaror. I fokus ligger användningsområden inom analys av borrhärdar, sedimentkärnor samt trämaterial (Cox Analytical Systems, 2015).

Cox Analytical Systems har tillhandahållit nödvändig information och programvarulicens för denna studie. De har även bistått med assistans via e-post och möten.

3 Syfte

Arbetet är tänkt att vara en metodikstudie och med det att göra en analys till möjligheten att utföra kontinuerlig kemskanning samt ge detaljerad information om alunskiffens kemiska sammansättning. En litologisk förstudie utfördes för att söka och finna intressanta avsnitt i borrhärdan, med fokus på alunskiffen, för att i dessa kemianalytiska program kunna studera om det finns kemiskt olika sammansättningar inom alunskiffen. Arbetet syftar även att ligga till grund för en utvärdering av programvarorna Q-spec och Tray Sum, huruvida dessa är tillförlitliga för att göra mer djupgående kemiska analyser av borrhärdar och sediment.

Resultaten kommer att presenteras i olika delar. Först kommer det att presenteras diagram över aluminiumoxid, kaliumoxid, uran, svavel, järnoxid samt arsenik och hur dessa fluktuerar genom de mörka bergarterna i borrhärdan. Dess värden är baserade på ämnens medelkoncentration i de mörka bergarterna. Det har inte tagits någon hänsyn till övriga litologiska analyser utav borrhärdan. Således representeras även det lerstenslager samt orstenslager som beskrivs i den litostratigrafiska beskrivningen (se fig 4) inom de mörka bergarterna. Vidare inom samma avsnitt, i resultatdelen, presenteras koncentrationsförhållandena av berörda ämnen för var och en av de litologiskt analyserade bergarterna. Syftet är att se huruvida dessa särskiljer sig så pass från medelvärdena att de skulle kunna bekräftas enbart med hjälp av programmen Q-spec och Tray Sum.

Nästa resultatdel är av samma karaktär men här studeras förhållandet mellan svavel, järnoxid samt arsenik. Presentationen sker i samma följd som föregående. Valet av de kemiska ämnena är baserat på de litologier, skiffer, lersten samt orsten, som genom tidigare studier bekräftats.

3.1 Mål






Primärt vill studien visa användbarheten av XRF, Q-Spec och Tray-Sum. Målet är också att undersöka hur tillförlitliga de kemiska resultaten är från en XRF-analys när man skannar en sedimentär borrhärd.

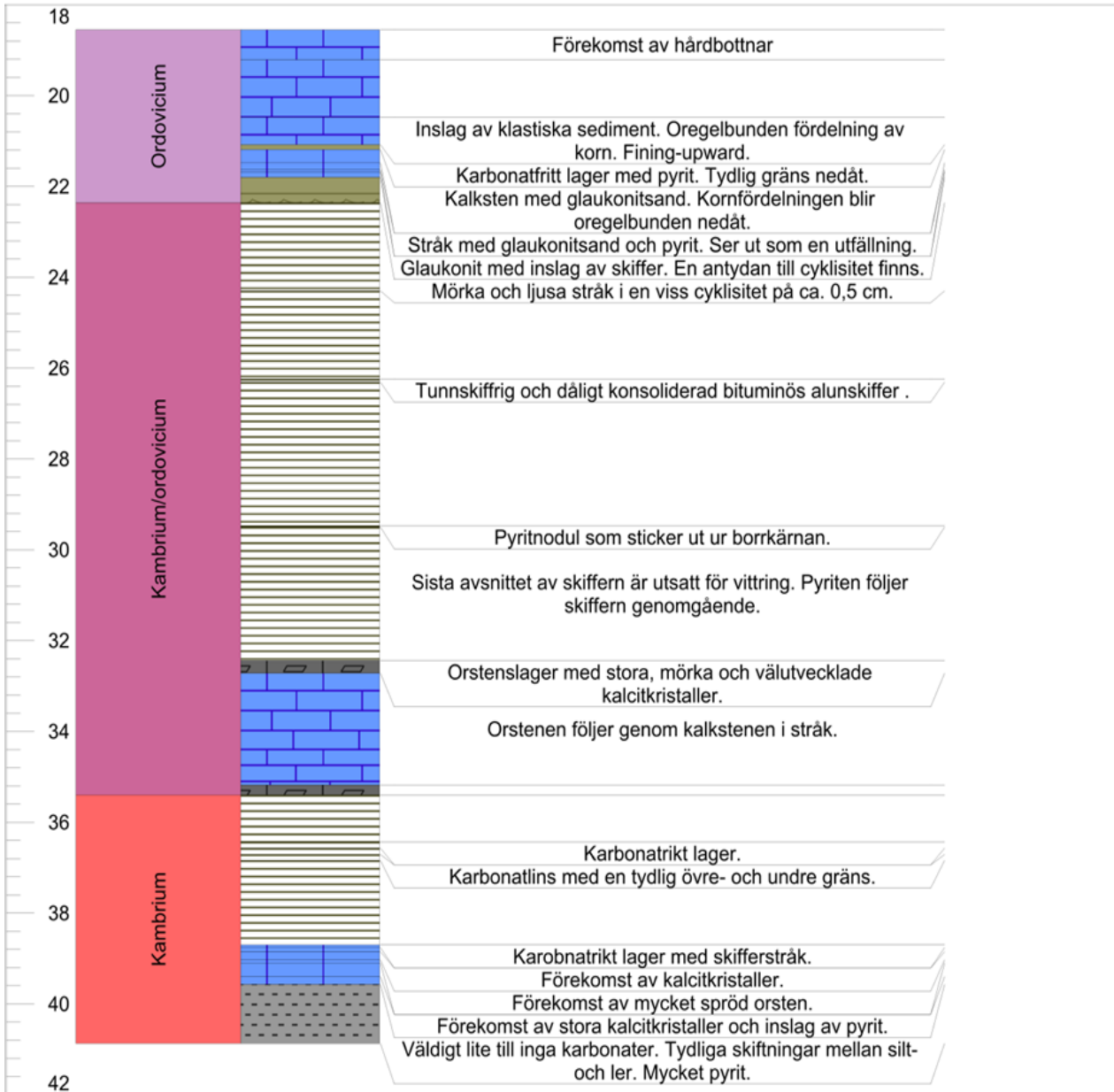
4 Material och metodik

I detta arbete har en 22 meter lång sedimentär borrhärd från Segerstad, Öland karterats och därmed har en första litologisk analys utförts. Loggningen ämnade ge en beskrivning av bergarter, lagergränser och övriga intressanta avsnitt. Detta skedde i samarbete med SGU, Sveriges Geologiska Undersökning, i Lund. Den litologiska analysen utfördes med hjälp av mikroskop, saltsyra samt grundläggande geologiska kunskaper. Efter detta sammanfattades borrhärdan i en litostratigrafisk logg, se figur 4 nedan. Kärnan hade sedan tidigare XRF-skannats med ITRAX core Scanner av ALS i Malå och kvantifierade resultat för varje centimeter av borrhärdan tillhandahölls av Cox Analytical Systems. Värden för grundämnen som bedömdes vara relevanta för de olika litologiska enheterna lästes av i Q-Spec för att sedan åskådliggöras jämte berörd litologi i dataprogramet Strater. I detta programmet skapades alla loggar till rapporten. Modellering för en vald sektion av borrhärdan och dess kemiska innehåll skapades i Tray-Sum. Efter detta jämfördes även medelvärden från två olika borrhärdar, som dock skär genom samma litologiska enheter. Den ena var analyserad genom traditionell bulk-analysmetodik och den andra genom skanning med ITRAX.

4.1 Litologisk förstudie

Under två dagar analyserades den ca 22 meter långa borrhärdan på SGU:s lokaler i Lund. I första skedet delades borrhärdan in i huvudsakligt förekommande bergarter. Nästföljande utfördes en mer detaljerad granskning av var det förekommer inslag av orstenslager, kalknoduler, hårdbottnar och utfällningar, se figur 4. Uppmätta mäktigheter och litologier samt anomalier bokfördes och lades in i Excel för att sedan användas som underlag till Strater där loggen modellerades.

Skala (m)	Geologisk tidsålder	Litologi	Beskrivning av lagerföljder	Legend	2016-04-16 Malmö, Sverige Utförd som en del av ett examensarbete inom geologi vid Lunds Universitet.
				<ul style="list-style-type: none">  Glaukonit  Kalksten  Orsten  Silt/lersten  Skiffer 	



Lunds Universitet, Lund, Sverige
Litostratigrafisk logg, Segerstad, Öland
Utförd av Anna Fouskopoulos Larsson i
samarbete med Lunds Universitet och
SGU



Figur 4 Litostratigrafisk logg över borkärna från Segerstad, Öland.

Tabell 1 Teknisk data för Itrax XRF- scanner. Källa: Cox Analytical Systems

Tube anode	Rh
Tube voltage	30 kV
Tube current	55 mA
Tube time	917 h
Sample thickness	1,0 cm

4.2 Teknisk specifikation

Nedan följer en tabell över de inställningar och tekniskt data som använts vid analysen av borrhärdarna med avseende Itrax core scanner. Skanningen utfördes på kärnlådefack som maximalt motsvarade 100 centimeter och endast sammanhängande delar av borrhärdarna kunde skannas

5 Resultat

En skanning med Itrax core scanner kan mäta på ppm-nivå. Begränsningar finns i metoden och skannern har svårt att kvantifiera resultat för lätta grundämnen. En annan begränsning är att skannern inte kan analysera partier av borrhärdarna som är fragmenterad eller har hög sprickighet. De avsnitt i följande diagram som når noll betyder således inte att ämnet inte finns där utan att dess koncentration är för låg eller att borrhärdarna varit för trasiga och därmed inte registreras. Itrax core scanner skannade borrhärdarna per centimeter men på grund av borrhärdarnas längd har dessa värden slagits samman till att motsvara femcentimetersintervall för de diagram som visas nedan. För sammanställning av diagrammen har intressanta och representativa avsnitt valts ut. För att undersöka om man kunde särskilja alunskifferna kemiska sammansättning från ler/siltstenen har dessa grupperats tillsammans i en logg, se figur 5 och 7.

5.1 Aluminiumoxid, kaliumoxid och uran

I figur 5 följer diagram över medelvärdena på aluminiumoxid, kaliumoxid och uran genomgående i de mörka bergarterna i borrhärdarna. I figur 6 följer diagram över aluminiumoxid, kaliumoxid samt uran i alunskiffer.

5.2 Svavel, järnoxid och arsenik

Figur 7 visar diagram för medelvärdena av svavel, järnoxider samt arsenik i de mörka bergarterna. Figur 8 visar ett diagram över svavel, järnoxider samt arsenik i de sektioner av borrhärdarna innehållande orstenslager.

5.3 Tray-sum- Modellerad presentation av avsnitt ur Segerstadsborrhärdarna

I figurer 9, 10, 11, 12 och 13 presenteras modeller från programmet Tray-sum. De blå fälten i figurerna betyder att borrhärdarna varit för fragmenterad för att skannas.

5.3.1 Kalksten

I figur 9 visas en sektion kalksten med innehållande glaukonitlager och den röda kurvan avser dess innehåll av kalcium. Det går tydligt att se hur kalciumnivåerna sjunker i glaukonitavsnitten.

5.3.2 Glaukonit

Figur 10 visar också ett lager med kalksten med glaukonit men här presenteras förekomsten av kalium, ett ämne som förekommer i högre halt i glaukonit än kalciumkarbonater (Erlström 2015).

5.3.3 Skiffer

I figur 11 presenteras halten av järn i en del alunskiffer. Nivåerna representeras av den röda kurvan. Ett utlåtande av skiftningar inom förekomsten av järn är dock svårt att ge då stora avsnitt av kärnan inte kunnat skannas (de blå fälten innebär en ofullständig skanning på grund av att borrhärdarna var för trasiga).

5.3.4 Kalksten med orstenslager

Figur 12 visar ett avsnitt med orstenslager. Kurvan representerar dess innehåll av svavel.

5.3.5 Lersten

Figur 13 illustrerar innehållet av järn i lersten.

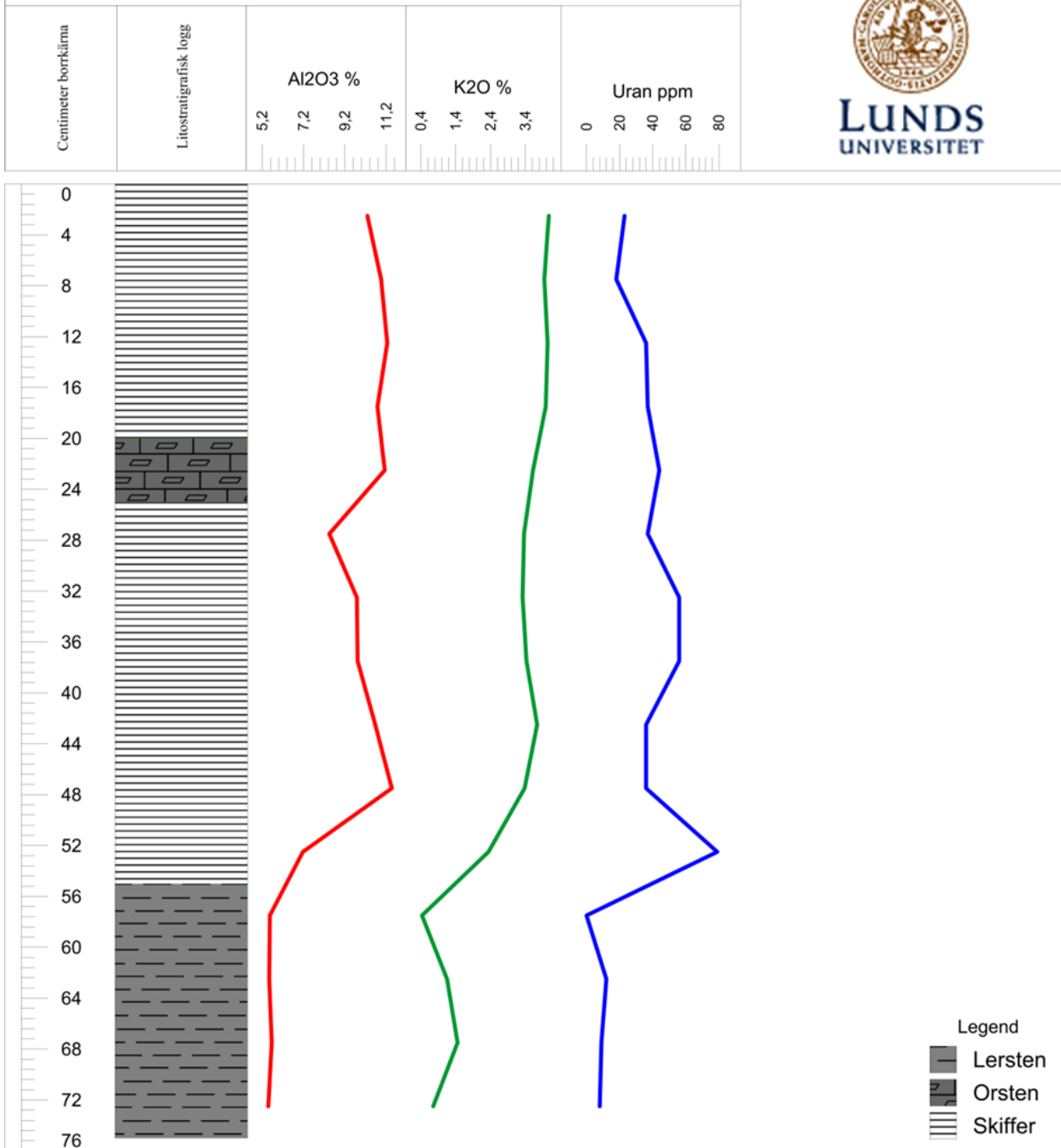
5.4 Medelkoncentrationer av aluminiumoxid, kaliumoxid, uran, svavel, järnoxid samt arsenik

Tabell 2 och 3 presenterar medelvärden för uran, järnoxid, svavel, arsenik, aluminiumoxid och kaliumoxid. Tabell 2 består av värden framtagna via bulkprov från en borrhärd vid Grönhögen, Öland. Denna kärna innehåller samma litologiska sekvenser men inte likadana mäktigheter. Dessa värden är tänkta att jämföras mot de medelvärden som Q-spec ger för samma litologiska enhet. Observera att alunskifferformationen är indelad i flera led i tabell 2. Dessa är inte loggade separat för tabell 3.

Medelkoncentration av aluminiumoxid, kaliumoxid och uran genomgående i de mörka bergarterna. Värdena är baserade på ITRAX XRF-scanning och analys i Q-Spec.

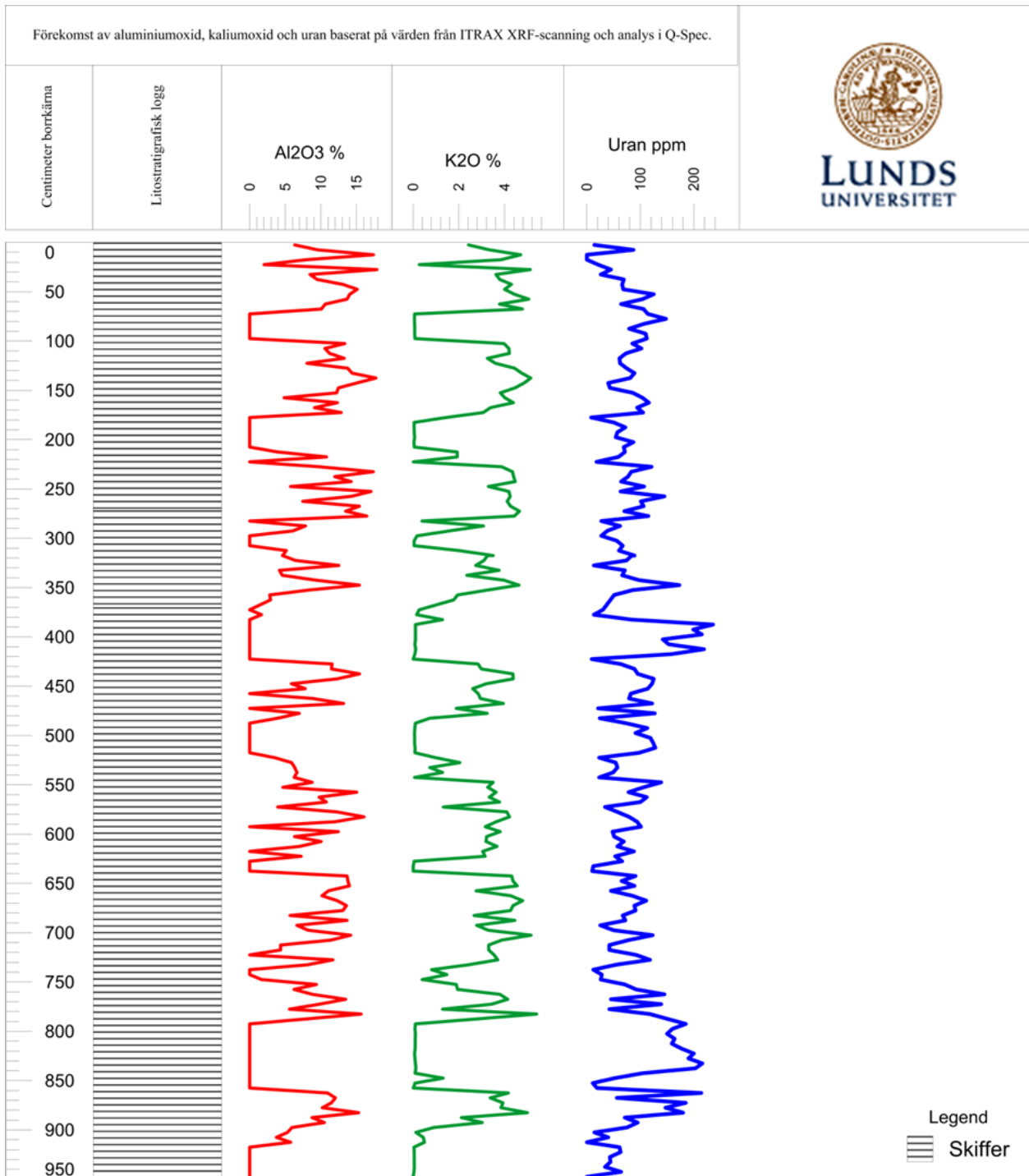


LUNDS
UNIVERSITET




Sammanställt av Anna Fouskopoulos Larsson i samarbete med SGU, Cox Analytical Systems och Lunds Universitet.

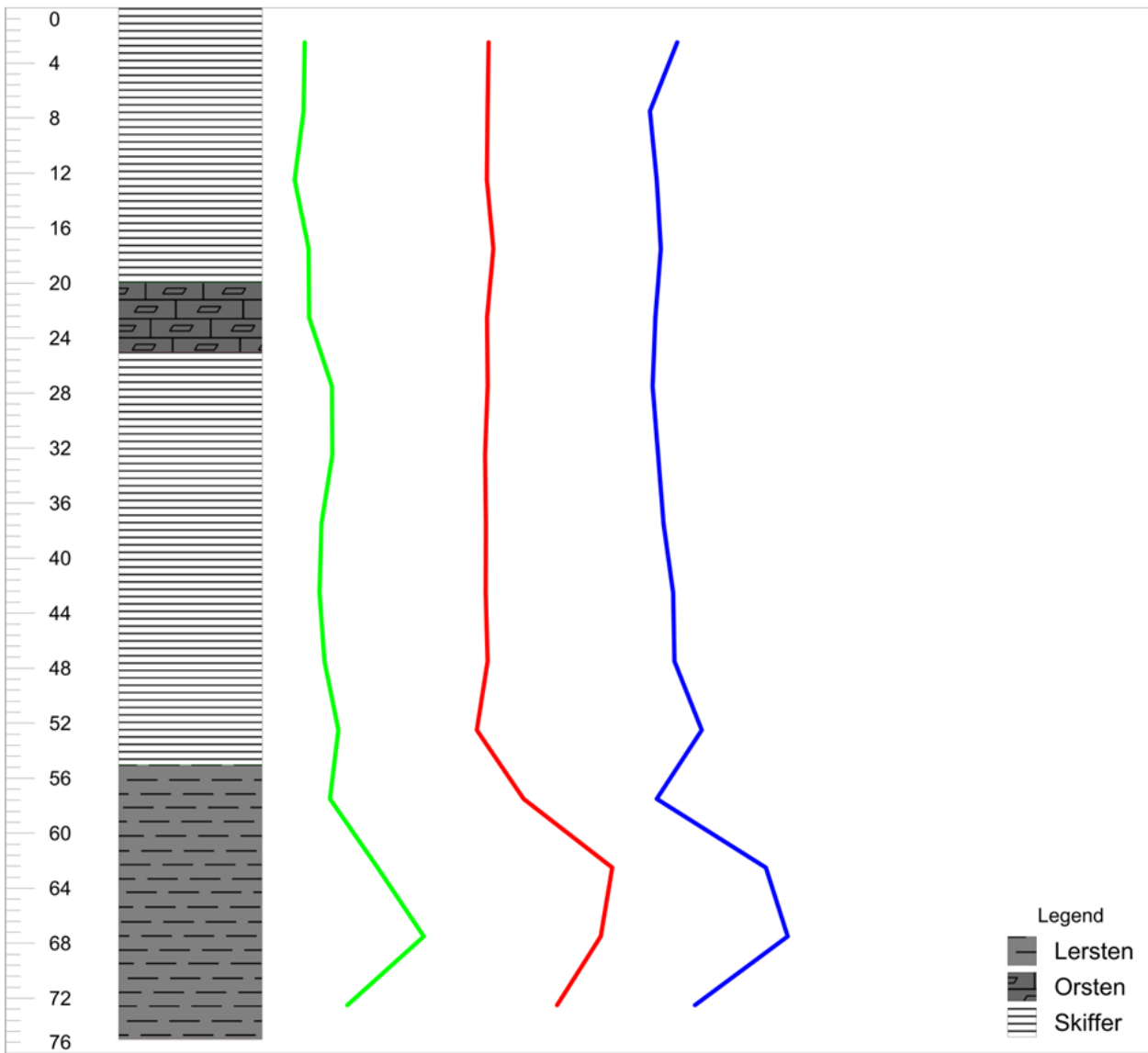
Figur 5 Sammanställning av kemidata för aluminiumoxid, kaliumoxid och uran genomgående i de mörka bergarterna. Data är baserat på ITRAX core scanner XRF-skanning och analys i Q-Spec. Observera att nollvärden i diagrammet motsvarar de avsnitt av borrkärnan som inte kunnats skanna.



Sammanställt av Anna Fouskopoulos Larsson i samarbete med SGU, Cox Analytical Systems och Lunds Universitet.

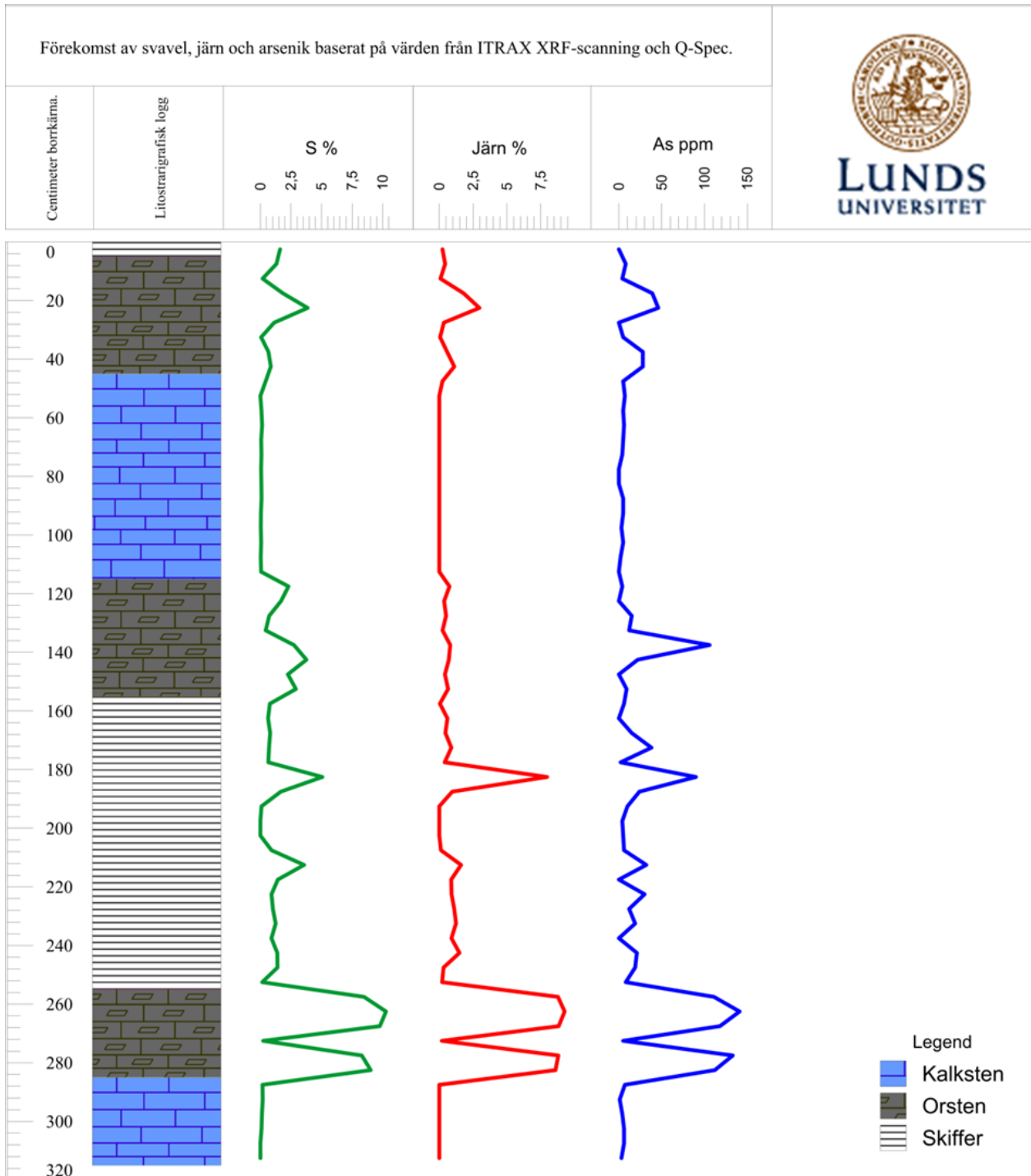
Figur 6 Sammanställning av förekomsten aluminiumoxid, kaliumoxid och uran i alunskiffer. Data är baserat på ITRAX core scanner XRF-skanning och analyserat i Q-Spec. Observera att nollvärden i diagramet motsvarar de avsnitt av borrkärnan som inte kunnats skanna.

Medelvärden för svavel, järnoxid och arsenik genomgående i de mörka bergarterna. Data baseras på ITRAX XRF-scanning och analys i Q-Spec.				 LUNDS UNIVERSITET
Centimeter borrkärna	Litostratigrafisk bogg	S % 1,6 3,6 5,6 7,6 9,6	Fe ₂ O ₃ % 2,8 4,8 6,8 8,8	



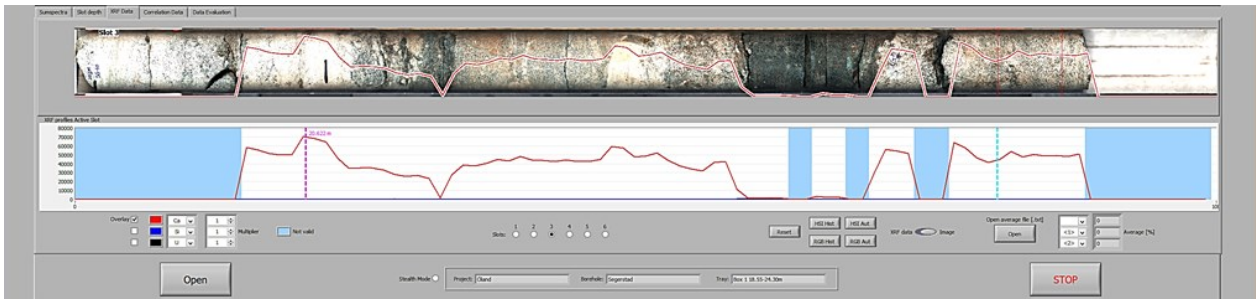
Sammanställt av Anna Fouskopoulos Larsson i samarbete med SGU, Cox Analytical Systems och Lunds Universitet.

Figur 7 Sammanställning av medelvärden för svavel, järnoxid och arsenik genomgående i de mörka bergarterna. Data är baserat på ITRAX core scanner XRF-skanning och analys i Q-Spec. Observera att nollvärden i diagrammet motsvarar de avsnitt av borrkärnan som inte kunnats skanna.

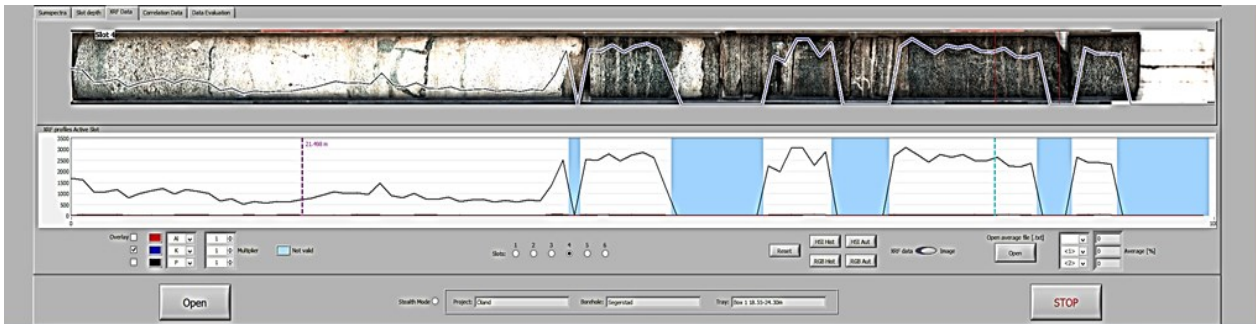


Sammanställt av Anna Fouskopoulos Larsson i samarbete med SGU, Cox Analytical Systems och Lunds Universitet.

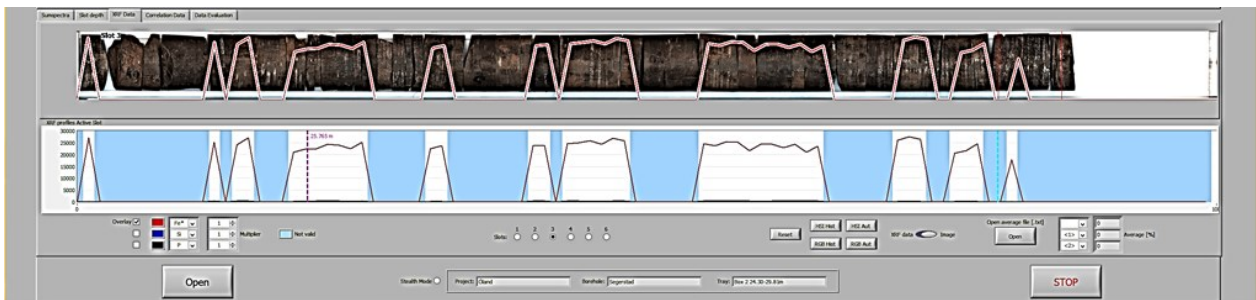
Figur 8 Sammanställning av kemidata i sektioner där orsten förekommer. Data är baserat på ITRAX core scanner XRF-skanning och analyserat i Q-Spec. Observera att nollvärden i diagrammet motsvarar de avsnitt av borrkärnan som inte kunnats skanna.



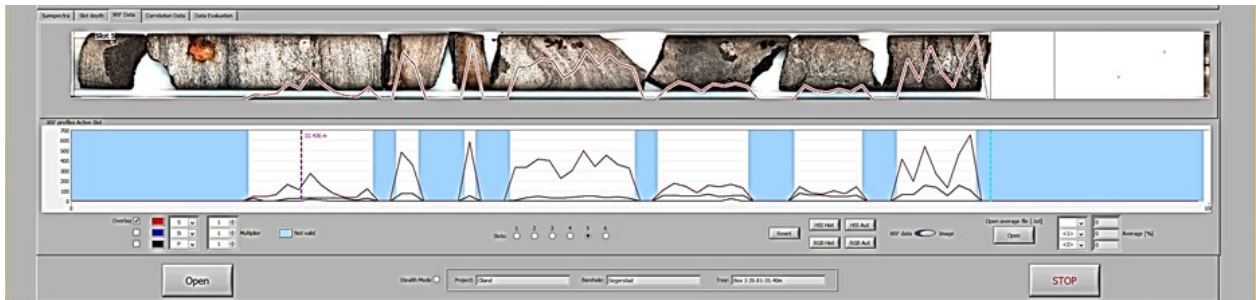
Figur 9 Modell från Tray-sum över en sektion kalksten med glaukonitlager. Den röda kurvan representerar innehållet av kalcium. Det tydligt vart avsnitt av glaukonit återfinns då halten kalcium minskar avsevärt.



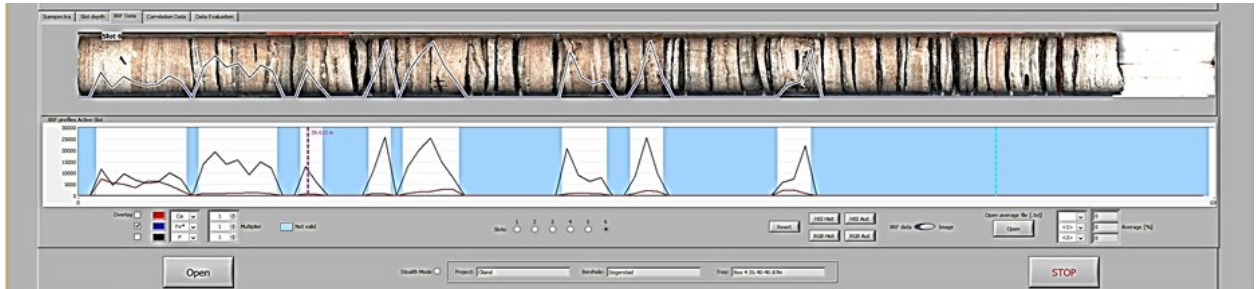
Figur 10 Modell från Tray-sum över en sektion innehållandes glaukonit. Den blå kurvan representerar innehållet av kalium.



Figur 11 Modell från Tray-sum över en sektion skiffer. Den röda kurvan representerar innehållet av järn.



Figur 12 Modell från Tray-sum över ett segment kalksten med orsten. Den röda kurvan representerar innehållet av svavel.



Figur 13 Modell från Tray-sum över ett segment lersten. Den blå kurvan representerar innehållet av järn.

Tabell 2 Medelprocentuell förekomst av valda kemiska element baserade på bulkprovs-analys av en borrhärna från Grönhögen, Öland. Tabellen är sammanställd baserat på värden tillhandahållna av Mikael Erlström, SGU, Lund.

Element	Kalksten	Glaukonit	Alunskiffer (Ceratomyg-skiffern)	Alunskiffer (Dictyonema-skiffern)	Alunskiffer	Orsten	Lersten
Al ₂ O ₃ %	1,02	4,99	15,8	15,4	13,9	1,85	19,1
K ₂ O %	0,57	3,52	4,64	5,34	0,57	0,76	5,01
Uran ppm	10,55	0,89	34,5	79,9	82,2	53,2	5,19
Svavel %	0,63	1,99	2,07	2,45	9,83	1,04	2,84
Fe ₂ O ₃ %	0,95	16,2	5,17	4,63	12,95	1,43	7,1
Arsenik ppm	12	71,3	43,7	69,7	216	26,5	26,2

Tabell 3 Medelprocentuell förekomst av valda kemiska element baserade på data från ITRAX core scanner och Q-spec.

Element	Kalksten	Glaukonit	Alunskiffen	Orsten	Lersten
Al ₂ O ₃ %	5,33	7,31	10,45	5,53	9,55
K ₂ O %	0,67	1,86	3,75	3,25	1,97
Uran ppm	0	0	39,5	26,5	0,5
Svavel %	0,1837	0,6405	3,1339	4,4613	2,1326
Fe ₂ O ₃ %	1,0991	7,0024	3,5401	3,1488	2,1764
Arsenik ppm	0	2,0	32,0	30,5	2,5

6 Diskussion

Att arbeta i Q-spec är relativt enkelt men man bör ha viss kunskap om XRF med sig för att kunna tolka det som studeras korrekt. XRF-metodiken har svårt att detektera korrekta värden för lätta grundämnen så dessa faller bort i analysen. Det kan leda till att analyser av, exempelvis, kalkstenar försvåras då både syret och kolet inte tas med i resultatet. En annan problematik kan vara förekomsten av inhomogena partier i en borrhärna. Eftersom metoden mäter på ytan kan värdena för ett avsnitt borrhärna bli missvisande, antingen för att inhomogeniteten är ansamlad på ytan eller gömd inuti. Trots detta ger XRF-metodiken, Q-spec och Tray-sum en god första analys och bidrar med ett underlag för hur och var vidare analyser ska utföras. Tekniskt sett finns det rum för utveckling och förfinande av maskinens kalibrering. Men det är en process som redan fortgår. ITRAX core scanner har förmågan att tillhandahålla en stor mängd kvantitativ kemisk data på kort tid. Metoden är användarvänligt och tillsammans med Q-spec och Tray-sum skapar de möjligheten att åskådliggöra de kemiska variationerna i en borrhärna på ett snyggt sätt. Med hjälp av Q-spec underlättas arbetet med att studera olika kemiska element på en detaljerad nivå, något som kan vara omständigt med traditionella metoder. Q-specs värden

korrelerar relativt väl med de olika loggade bergarternas förväntade kemiska sammansättning. Vad beträffar analys av medelvärden tycks dock en traditionell bulk-analys vara bättre då analysen görs per volymenhet borrhärna medan den här typen av skanning ger medelvärden för en yta. Ett problem med analys genom Q-spec är att en svårt fragmenterad borrhärna inte går att analysera fullständigt med XRF. XRF kräver en yta för att kunna registrera ett värde. Detta gör att stora partier förblir oanalyzerade och därmed ”missas” i medelvärdessanalysen.

7 Slutsats

ITRAX core scanner har möjlighet att tillhandahålla kvantitativa resultat på kort tid och utgör därför en god metod för en första analys av en borrhärnas kemiska sammansättning. Däremot är de genererade medelvärdena inte tillförlitliga då de ger värden på en yta och inte en volym. En kraftigt fragmenterad borrhärna ger också upphov till missvisande resultat. För att tolka resultaten korrekt bör man ha kunskap om vad röntgenfluorescens innebär, vad som kan skannas och vad som inte kan skannas. Q-spec ger goda möjligheter att analysera trender och anomalier i en lagerföljd. Tray-sums modellering underlättar att visualisera de kemiska fluktuationer som förekommer i en borrhärna.

8 Tack

Jag vill tacka Mikael Erlström och Leif Johansson för deras handledning och stöd genom hela projektet. De har tipsat om bra och relevant litteratur och har, genom olika diskussioner, inspirerat och berikat mina kunskaper. Vidare vill jag tacka Cox Analytical systems som tillhandahållit de programvaror som utgjort basen i detta arbete. Specifikt på Cox Analytical Systems vill jag tacka Anders Rindby. Han har tålmodigt svarat på mina frågor och guidat mig igenom programvarorna och XRF. Ett sista tack går till Hans Jeppsson som bistått som en extrahandledare och mentor under slutskedet på denna rapport.

9 Referencer

- Brouwer, P., 2003: *Theory of XRF*. PANalytical B. V. Almelo, Nederländerna, 71 s.
- Buchardt, B., Nielsen, A. T. & Schovsbo, N. H., 1997: Alun Skiferen i Skandinavien. *Geologisk Tidsskrift* 31– 30.
- Cocks, L. R. M & Torsvik, T. H., 2002: Earth geography from 500 to 400 million years ago; a faunal and paleomagnetic review. *Journal of the Geological Society of London* 159, 631– 644.
- Dahlman, B. & Skoglund, R., 1969: SGUs oljegeologiska arbeten 1968– 69. *Sveriges geologiska undersökning, opublicerad rapport*, (SGUs arkiv) 8 s.
- Erlström, M., 2014: Skiffergas och biogen gas i alunskiffern i Sverige, förekomst och geologiska förutsättningar - en översikt. *Sveriges geologiska undersökning rapport 2014:19*. 7–25.
- Erlström, M., (in press) Litologisk och geokemisk karaktärisering av berggrundsavsnitt på södra Öland - resultat från kärnbörning vid Grönhögen. *Sveriges geologiska undersökning rapport 2016:xx*, 35 s.
- Hessland, I. & Armands, G., 1978: *Alunskiffer: underlagsmaterial geologi. Vol. 1. Utredning från Statens industriverk*. SIND
- Lee, S., 2013: Hemsida, hämtad april 17, 2016
- Thickpenny, A., 1978: The sedimentology of the Swedish Alum Shales. In Stow, D.A.W. & Piper, D.J.W. (eds.): *Fine-grained Sediments: Deepwater Processes and Facies*, 511–525. Geological Society of London Special Publication 15.

**Tidigare skrifter i serien
”Examensarbeten i Geologi vid Lunds
universitet”:**

421. Martin, Ellinor, 2014: Chrome spinel grains from the Komstad Limestone Formation, Killeröd, southern Sweden: A high-resolution study of an increased meteorite flux in the Middle Ordovician. (45 hp)
422. Gabrielsson, Johan, 2014: A study over Mg/Ca in benthic foraminifera sampled across a large salinity gradient. (45 hp)
423. Ingvaldson, Ola, 2015: Ansvarsutredningar av tre potentiellt förorenade fastigheter i Helsingborgs stad. (15 hp)
424. Robygd, Joakim, 2015: Geochemical and palaeomagnetic characteristics of a Swedish Holocene sediment sequence from Lake Storsjön, Jämtland. (45 hp)
425. Larsson, Måns, 2015: Geofysiska undersökningsmetoder för geoenergisystem. (15 hp)
426. Hertzman, Hanna, 2015: Pharmaceuticals in groundwater - a literature review. (15 hp)
427. Thulin Olander, Henric, 2015: A contribution to the knowledge of Fårö's hydrogeology. (45 hp)
428. Peterffy, Olof, 2015: Sedimentology and carbon isotope stratigraphy of Lower–Middle Ordovician successions of Slemestad (Oslo-Asker, Norway) and Brunflo (Jämtland, Sweden). (45 hp)
429. Sjunnesson, Alexandra, 2015: Spårämnesförsök med nitrat för bedömning av spridning och uppehållstid vid återinfiltration av grundvatten. (15 hp)
430. Henao, Victor, 2015: A palaeoenvironmental study of a peat sequence from Iles Kerguelen (49° S, Indian Ocean) for the Last Deglaciation based on pollen analysis. (45 hp)
431. Landgren, Susanne, 2015: Using calcein-filled osmotic pumps to study the calcification response of benthic foraminifera to induced hypoxia under *in situ* conditions: An experimental approach. (45 hp)
432. von Knorring, Robert, 2015: Undersökning av karstvittring inom Kristianstadsslättens NV randområde och bedömning av dess betydelse för grundvattnets sårbarhet. (30 hp)
433. Rezvani, Azadeh, 2015: Spectral Time Domain Induced Polarization - Factors Affecting Spectral Data Information Content and Applicability to Geological Characterization. (45 hp)
434. Vasilica, Alexander, 2015: Geofysisk karaktärisering av de ordoviciska kalkstensenheter på södra Gotland. (15 hp)
435. Olsson, Sofia, 2015: Naturlig nedbrytning av klorerade lösningsmedel: en modellering i Biochlor baserat på en fallstudie. (15 hp)
436. Huitema, Moa, 2015: Inventering av föroreningar vid en brandövningsplats i Linköpings kommun. (15 hp)
437. Nordlander, Lina, 2015: Borrningsteknikens påverkan vid provtagning inför dimensionering av formationsfilter. (15 hp)
438. Fennvik, Erik, 2015: Resistivitet och IP-mätningar vid Äspö Hard Rock Laboratory. (15 hp)
439. Pettersson, Johan, 2015: Paleoeologisk undersökning av Triberga mosse, sydöstra Öland. (15 hp)
440. Larsson, Alfred, 2015: Mantelpolymer - realitet eller *ad hoc*? (15 hp)
441. Holm, Julia, 2015: Markskador inom skogsbruket - jordartens betydelse (15 hp)
442. Åkesson, Sofia, 2015: The application of resistivity and IP-measurements as investigation tools at contaminated sites - A

Tidigare skrifter i serien

”Examensarbeten i Geologi vid Lunds universitet”:

421. Martin, Ellinor, 2014: Chrome spinel grains from the Komstad Limestone Formation, Killeröd, southern Sweden: A high-resolution study of an increased meteorite flux in the Middle Ordovician. (45 hp)
422. Gabrielsson, Johan, 2014: A study over Mg/Ca in benthic foraminifera sampled across a large salinity gradient. (45 hp)
423. Ingvaldson, Ola, 2015: Ansvarsutredningar av tre potentiellt förorenade fastigheter i Helsingborgs stad. (15 hp)
424. Robygd, Joakim, 2015: Geochemical and palaeomagnetic characteristics of a Swedish Holocene sediment sequence from Lake Storsjön, Jämtland. (45 hp)
425. Larsson, Måns, 2015: Geofysiska undersökningsmetoder för geoenersystem. (15 hp)
426. Hertzman, Hanna, 2015: Pharmaceuticals in groundwater - a literature review. (15 hp)
427. Thulin Olander, Henric, 2015: A contribution to the knowledge of Fårö's hydrogeology. (45 hp)
428. Peterffy, Olof, 2015: Sedimentology and carbon isotope stratigraphy of Lower-Middle Ordovician successions of Slemestad (Oslo-Asker, Norway) and Brunflo (Jämtland, Sweden). (45 hp)
429. Sjunnesson, Alexandra, 2015: Spårämnesförsök med nitrat för bedömning av spridning och uppehållstid vid återinfiltration av grundvatten. (15 hp)
430. Henao, Victor, 2015: A palaeoenvironmental study of a peat sequence from Iles Kerguelen (49° S, Indian Ocean) for the Last Deglaciation based on pollen analysis. (45 hp)
431. Landgren, Susanne, 2015: Using calcein-filled osmotic pumps to study the calcification response of benthic foraminifera to induced hypoxia under *in situ* conditions: An experimental approach. (45 hp)
432. von Knorring, Robert, 2015: Undersökning av karstvittring inom Kristianstadsslättnens NV randområde och bedömning av dess betydelse för grundvattnets sårbarhet. (30 hp)
433. Rezvani, Azadeh, 2015: Spectral Time Domain Induced Polarization - Factors Affecting Spectral Data Information Content and Applicability to Geological Characterization. (45 hp)
434. Vasilica, Alexander, 2015: Geofysisk karaktärisering av de ordoviciska kalkstensenhetererna på södra Gotland. (15 hp)
435. Olsson, Sofia, 2015: Naturlig nedbrytning av klorerade lösningsmedel: en modellering i Biochlor baserat på en fallstudie. (15 hp)
436. Huitema, Moa, 2015: Inventering av föroreningar vid en brandövningsplats i Linköpings kommun. (15 hp)
437. Nordlander, Lina, 2015: Borrningsteknikens påverkan vid provtagning inför



LUNDS UNIVERSITET

Geologiska institutionen
Lunds universitet
Sölvegatan 12, 223 62 Lund

