

WASSERSTOFF ALS SPURENELEMENT IN MINERALPHASEN DES ERDMANTELS

BERAN, A.

Institut für Mineralogie und Kristallographie, Universität Wien - Geozentrum, Althanstraße 14,
A - 1090 Wien

Die den Oberen Erdmantel aufbauenden Mineralphasen Olivin, Pyroxen und Granat können Wasserstoffspuren bis in den 100 ppm-Bereich in Form von OH-Gruppen strukturell einbauen (BELL & ROSSMAN, 1992). Wadsleyit, β -(Mg,Fe) $_2$ SiO $_4$ und (Mg,Fe)SiO $_3$ -Perowskit sind die wahrscheinlichsten »Wasserträger« der Übergangszone bzw. des Unteren Erdmantels. Wasserstoffspuren können die physikalischen Eigenschaften von Mineralphasen sehr stark beeinflussen und damit auch einen wesentlichen Einfluß auf die Eigenschaften des gesamten Erdmantels ausüben.

Auf der Grundlage polarisierter FTIR-spektroskopischer Untersuchungen wurde von BERAN & PUTNIS (1983) sowie LIBOWITZKY & BERAN (1995) ein Modell des OH-Einbaues in die Struktur des Olivins entwickelt. OH-Defekte geben im Olivin Anlaß zu einer Vielzahl von scharfen Absorptionsbanden im Bereich von 3670 bis 3220 cm $^{-1}$. Unter der Annahme von Si-Leerstellen liegen [O(OH) $_3$]- und [O $_2$ (OH) $_2$]-Tetraeder mit spezifischen Kombinationen der Wasserstoff-Positionen vor. Die O1 Sauerstoffe sind teilweise durch OH-Gruppen ersetzt, die in Richtung der leeren Si-Positionen zeigen. Weiters liegt ein Wasserstoff auf der »vertikalen« O3-O3' Tetraederkante, die senkrecht zur Symmetrieebene verläuft, und/oder auf der »horizontalen« O1-O2 Tetraederkante, in der Symmetrieebene, wobei dann jeweils O3 und O3' bzw. O1 und O2 als Donator- oder Akzeptor-Sauerstoffe fungieren können. Unter der Annahme von Leerstellen auf den M-Positionen, lassen sich [SiO $_3$ (OH)]- und [SiO $_2$ (OH) $_2$]-Tetraeder als strukturelle Einheiten ableiten. Dabei ist O3 Donator-Sauerstoff einer OH-Gruppe, die in Richtung einer M2-Leerstelle zeigt und O2 kann Donator-Sauerstoff einer OH-Gruppe sein, die entlang der O2-O3 Kante eines leeren M1-Oktaeders orientiert ist.

Polarisierte FTIR-Spektren eines unverzwilligten orthorhombischen CaTiO $_3$ -Perowskits der »Benitoite Gem Mine«, Kalifornien, sind durch das Auftreten von zwei OH-Absorptionsbanden mit Maxima bei 3394 und 3326 cm $^{-1}$ charakterisiert. Entsprechend dem pleochroitischen Verhalten dieser Banden wird von BERAN et al. (1996) ein Modell des OH-Defekteinbaues vorgeschlagen, bei der die OH-Dipolrichtung etwa parallel [110] verläuft. Der Mechanismus des Wasserstoffeinbaues, bei dem O2 den Donator-Sauerstoff darstellt, ist vor allem an das Auftreten von Ca-Leerstellen gebunden. Der Wasserstoffgehalt des untersuchten Perowskits liegt bei etwa 10 ppm. MEADE et al. (1994) haben Wasserstoff in synthetischem MgSiO $_3$ -Perowskit mit Hilfe von Synchrotron IR-Absorptionsmessungen nachgewiesen.

- BELL, D.R., ROSSMAN, G.R. (1992): Water in Earth's mantle: The role of nominally anhydrous minerals. - *Science* **255**, 1391-1397
- BERAN, A., PUTNIS, A. (1983): A model of the OH positions in olivine, derived from infrared-spectroscopic investigations. - *Phys. Chem. Minerals* **9**, 57-60
- BERAN, A., LIBOWITZKY, E., ARMBRUSTER, T. (1996): A single-crystal infrared spectroscopic and X-ray diffraction study of an untwinned San Benito perovskite containing structural OH groups. - *Can. Mineral.* (im Druck)
- LIBOWITZKY, E., BERAN, A. (1995): OH defects in forsterite. - *Phys. Chem. Minerals* **22**, 387-392
- MEADE, C., REFFNER, J.A., ITO, E. (1994): Synchrotron infrared absorbance measurements of hydrogen in MgSiO_3 perovskite. - *Science* **264**, 1558-1560