

**MINWIEN 1999**

**28. AUGUST BIS 1. SEPTEMBER 1999**

**WIEN**

**NACHTRAG**



## Arsenpolybasit und Stephanit vom Silberberg bei Brixlegg, Tirol

Arlt, T.\* & Martinek, K.-P.\*\*

\* Bayerisches Geoinstitut, Universität Bayreuth, 95440 Bayreuth;

\*\* Guglöd 55, 94568 St. Oswald

Die Auswertung historischer Berichte über das Bergbauegebiet Silberberg-Geyer bei Brixlegg ergab Hinweise auf eine reiche Silbervererzung, die in neueren lagerstätten-kundlichen Arbeiten nicht erwähnt wird. Daraufhin durchgeführte Untersuchungen erbrachten den Nachweis einer Silbermineralparagenese aus ged. Silber, Akanthit, Proustit und Polybasit in triadischem Dolomit [1].

Weitere Messungen an Erzproben aus diesem Bergbauegebiet mit der Mikrosonde (Cameca SX50) lieferten den Nachweis von Arsenpolybasit neben Polybasit.

Nach heutigem Wissensstand lassen sich die beiden Mischreihen Arsenpolybasit-Polybasit und Pearceit-Antimonpearceit anhand ihrer Zellparameter [2] und ihres Kupfergehaltes [3] unterscheiden.

Die Bestimmung der Zellparameter am Einkristallröntgendiffraktometer ergab beim untersuchten Arsenpolybasit eine Verdoppelung der a- und b-Achse gegenüber Pearceit (a = 26.0 Å, b = 15.0 Å, c = 12.3 Å, β = 90.1°). Weiterhin zeigen die Analysen die Abwesenheit von Kupfer (Tab.).

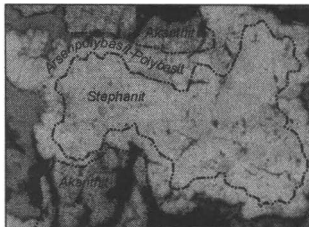
Als neues Mineral in der Paragenese konnte außerdem Stephanit nachgewiesen werden. Im Erzmikroskop erscheint Stephanit cremefarben als Relikt in hellgrauem Arsenpolybasit und stellt damit die älteste Phase dieser Paragenese dar.

Für Österreich ist Arsenpolybasit eine Neubeschreibung. Stephanit ist bisher nur aus der Lagerstätte Rotgülden (Salzburg) bekannt.

Tabelle: Mikrosondenanalysen (Gew.%) der Silberparagenese vom Silberberg.

	Ag	Cu	Sb	As	S	Total
Arsenpolybasit	78.7	0.0	3.4	4.2	14.1	100.4
Polybasit	77.7	0.0	6.6	2.4	14.4	101.1
Stephanit	70.3	0.0	15.6	0.1	15.6	101.6
Proustit	63.6	0.0	10.3	8.1	17.7	99.7

Im Rahmen dieser Untersuchung wurden auch Galenite von den Lokalitäten Silberberg ("Fuchsloch"), Bleiroan, Alte Zeche, Hötting und Obenberg analysiert. Keine der Proben zeigte Silbergehalte über der Nachweisgrenze der Mikrosonde (0.15 Gew.%).



Silbererzparagenese vom Silberberg in Tirol.  
Auflicht, Bildbreite 0.17 x 0.25 mm.

### Literatur:

- [1] Martinek, K.-P. (1994): Der Schatz im Silberberg. Geschichte und Vererzung der Bergbaue Silberberg-Geyer in Tirol. - Mineralienmagazin Lapis, 19, 7/8: 70-73.
- [2] Frondel, C. (1963): Isodimorphism of the polybasite and pearceite series. - Am. Mineral. 48: 565-572.
- [3] Hall, H.T. (1967): The pearceite and polybasite series. - Am. Mineral, 52: 1311-1321.

## Ist Calcit ferroelastisch ?

Bueble, S & Schmahl, W.W

Institut für Mineralogie, Ruhr-Universität Bochum, 44780 Bochum, Germany

Wir vergleichen die druckinduzierte Verzwilligung von Calcit mit ferroelastischem Verhalten und setzen eine virtuelle kubische m3m Prototyp-Phase voraus. Anhand dieses kubischen Bezugssystems werden alle Deformations-tensoren berechnet (Tabelle 1). Die kristallographischen Orientierungen der Zwillingwände werden dann aus der Gleichung

$$\sum_j (E_{j,1} - E_{j,2}) x_j = 0$$

nach Sapriel [1] erhalten. Die Lösungen dieser Gleichung entsprechen {100}- und {110}-Flächen, bezogen auf die morphologische Zelle von Calcit, welche dem Spaltrhomboeder entspricht (Tabelle 2). Die berechneten Zwillingwände entsprechen den bekannten r- bzw. e-Gesetzen der mechanischen Zwillinge in Calcit.

Domain state	I	II	III	IV
Compressional Axis	[1 1 1]	[1 1 1]	[1 1 1]	[1 1 1]
Strain tensor	$\begin{pmatrix} 0 & \bar{e} & \bar{e} \\ \bar{e} & 0 & \bar{e} \\ \bar{e} & \bar{e} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & e & \bar{e} \\ e & 0 & e \\ \bar{e} & e & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & e & e \\ e & 0 & \bar{e} \\ e & \bar{e} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \bar{e} & e \\ \bar{e} & 0 & e \\ e & e & 0 \end{pmatrix}$

Tabelle 1: Deformations-Tensoren für die Übergänge vom kubischen zum rhomboedrischen Kristallgitter mit der entsprechenden Kompressions-Achse.

	I	II	III	IV
I		(010)	(100)	(001)
II	(101)		(001)	(100)
III	(011)	(10̄0)		(010)
IV	(110)	(01̄0)	(10̄0)	

Tabelle 2: Zwillingwände zwischen jeweils einem Paar von Deformations-Zuständen I-IV aus Tabelle 1. Als Lösungen der obigen Gleichung schließen sich die beiden unterschiedlichen Orientierungen gegenseitig aus.

### Literature:

- [1] Sapriel, J. (1975): Domain-wall orientations in ferroelastics. Phys. Rev. B12, 5128-5140.

## Electrokinetic remediation of heavy metal contaminated organic rich sediments from the river Weiße Elster

Czegka, W.<sup>1</sup>, Preiß, S.<sup>1,2</sup> & Dulski, P.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>GeoForschungsZentrum, Telegrafenberg, D-14473 Potsdam (czegka@.....,dulski@gfz-potsdam.de)

<sup>2</sup>Kiefernring 41, D-14478 Potsdam (Stefan.Preisz@munr-lua-p-b.brandenburg.de)

Recently electrochemical methods of in-situ soil and sediment remediation are attracting increasing interest. The success of electrokinetic remediation has been shown by [1] and others in laboratory scale. This method is applicable to heavy-metal contaminated, fine-grained, organic rich soils and sediments that can hardly be remediated by the commonly applied processes. Various numeric models are available [2] to simulate the remediation process. The technical application has several disadvantages: high energy consumption, corrosion of the anodes and precipitation of heavy metal hydroxides in vicinity of the cathode.

The main processes of electrokinetic remediation are ion migration and electroosmosis. There is a maximum of electroosmotic flow in alkaline solutions. Unfortunately the most of heavy metals are not mobile in this pH-range. Therefore, the process has to be performed at an optimized pH. The pH influences the following parameters: zetapotential, electrical conductivity, surface conductivities and the ratio of ionic to solid species of the heavy metals. If the pH range is low the energy consumption is too high, caused by high mobility of hydrogen ions. At low pH range the ions are forming a complex which then moves to the anode instead of the cathode.

Our solution is the determination of electrokinetic parameters, calculation of the optimum pH and processing using this pH which is controlled by a circulation system at the electrodes.

### Literature:

[1] Hamed, J., Acar, Y.B. & Gale, R. (1991): J. Geotech. Eng., 117, 241-271.

[2] Choi, Y.S. & Lui, R. (1995): J. Haz. Mat., 44, 61-75.

## 30 years of Rietveld analysis: the next generation

Kern, A. & Coelho, A.

Bruker-AXS GmbH, Östliche Rheinbrückenstr. 50, D-76187 Karlsruhe

X-ray diffraction line profile fitting approaches, from single line fitting up to whole powder pattern fitting, with or without reference to a structural model, have been widely recognised to be the most important evaluation methods for material characterisation. In particular, the Rietveld structure refinement method has turned out to be uniquely valuable for (micro)structural analysis of nearly all classes of crystalline materials. Nevertheless, in spite of many exciting developments in the past 10 years, all recent profile-fitting approaches suffer severely from a number of disadvantages. Most of these fall into one of the following categories:

- poor modelling of all of the various contributions to the powder diffraction pattern. This is particularly true for the main objectives: Bragg peaks
- poor numerical stability as well as extended evaluation times due to poor calculation speed and unavoidable parameter turn-on sequences.

With a new program system (TOPAS) these problems have been successfully overcome. TOPAS is built around a general non-linear least squares system written specifically to integrate various types of X-ray diffraction analyses. This includes the ability to refine laboratory/synchrotron/neutron powder diffraction and single crystal data simultaneously. Depend on the refinement model supplied, with TOPAS individual line fitting, whole powder pattern fitting, whole powder pattern decomposition (Pawley method as well as LeBail method), up to Rietveld refinement can be performed. Remarkable is the ability to generate physically meaningful peak shapes using a new fundamental parameters approach with all parameters refinable [1,2]. There are various minimization routines including the Marquardt method of refinement plus line minimization and parameter extrapolation techniques. Sparse matrix methods are used when refining thousands of parameters e.g. for lattice parameter refinement or when extracting integrated intensities. A very powerful feature of TOPAS is the ability to solve structures by simulated annealing together with user defined penalty functions, rigid bodies and lattice energy minimization techniques including user defined force fields/equations. Rigid bodies take into account space group symmetry. They can be linked and rotated about any user-defined axes and hinges. The numerical speed of TOPAS is an order of magnitude faster than that of existing Rietveld programs. As in addition no more parameter turn-on sequence is needed Rietveld refinements can be performed up to 100 times faster!

### References:

[1] Cheary, R.W. & Coelho, A.A. (1992): J. Apl. Cryst., 25, 109-121.

[2] Kern, A.A. & Coelho, A.A. (1998): "Powder Diffraction", Allied Publishers Limited, ISBN 81-7023-881-1, 144-151.

## Feldspathoid mineral paragenesis in basalt of Badacsony-tördemic (Balaton Highland, Hungary)

Kitley, G. & Lovas, G.

Department of Mineralogy, Eötvös L. University,  
H-1088 Budapest, Múzeum körút 4/A.

On the surface of fissures in basalt of Badacsony-tördemic an interesting, white-gray coloured cover is to be found, which was described in details in 1948. Based on optical and chemical studies the paragenesis consisted of leucite, sanidine, nepheline and analcime as main mineral phases [1].

Our current goal was to strengthen the original description by applying up-to-date methods (TEM, XPD, EPMA), and searching the formation for additional phases. We used the original samples of Prof. Mauritz, which have been stored for documentation in the Mineral and Rock Collection of the Eötvös L. University.

XPD and TEM SAED proved the presence of leucite, K-feldspar, nepheline and analcime.

Polarized light microscopy and EPMA supported the previous results in case of leucite, analcime and K-feldspars, showed sodalite as a new phase in the paragenesis, but gave unclear results in case of nepheline. Crystals said to be nepheline by optical microscope showed high (7 wt.%) Cl content. The only Cl containing mineral that looks like nepheline in microscope is the rare davyne, but this phase could not be identified by XPD. Separation problems hinder the preparation of pure single crystals of that ambiguous phase.

### Literature:

[1] Mauritz, Béla (1948): Die Petrologischen Verhältnisse der Transdanubischen Basaltgesteine. – Földtani Közlöny, 78: 134-169. (in Hungarian with German abstract)

## Felsische Zusammensetzung kontinentaler Kruste als Produkt kontinuierlicher Delamination mafischer Unterkruste

Mengel K.\* & Wittenberg A.\*\*

\*TU Clausthal, D-38678 Clausthal-Zellerfeld

\*\*Universität Hannover, D-30167 Hannover

Der refraktionsseismisch erkennbare Anteil mafischer Unterkruste (MLC) im EGT-Mittelabschnitt beträgt ca. 18 %. Die geochemischen Daten von 206 MLC Proben des Varisikums (Wittenberg et al. 1999) belegen (restitische) Meta-Basalte und Meta-Kumulate als Edukte. Letztere sind entweder Px- oder Plag-dominiert. Die gewichtete Gesamtzusammensetzung dieser MLC hat 48.0 Gew.-% SiO<sub>2</sub>, Mg-# 65, 379 ppm Cr, 146 ppm Ni, La<sub>N</sub>/Lu<sub>N</sub> 2.2, Eu/Eu\* 1.1. Eine Massenbilanz mit den übrigen, felsischen Einheiten der varisischen Kruste ergibt eine tonalitische Gesamtzusammensetzung (Wedepohl, 1995). Die Bildung neuer kontinentaler Kruste erfolgt jedoch über die Intrusion mafischer Magmen aus dem Erdmantel. Als Magmen-Typen kommen Tholeiite bis basaltische Andesite (54.7 Gew.-% SiO<sub>2</sub>, Mg-# 63, Eu/Eu\* 1.0) und nicht Andesite in Betracht, da letztere nicht mit Mantel-Peridotiten (Ol<sub>F0.90</sub>) äquibriert sind. Unter der konservativen Annahme, daß die im wesentlichen post-archaische Gesamt-Kruste des Varisikums aus basaltischen Andesiten hervorgegangen ist, lassen sich über die Verteilung der chemischen Hauptkomponenten die Verhältnisse felsischer Kruste gegenüber mafischer Unterkruste als ca. 37:63 (Vol.-%) berechnen. Diese Mengenverhältnisse führen bei den Spurenelementen u.a. zur Abwesenheit einer Eu-Anomalie.

Da die heutige Gesamt-Kruste jedoch tonalitisch ausgebildet ist, müssen erhebliche Mengen (35 bis 60 km Mächtigkeit) MLC fehlen. Mafische Edukte der Krustenwurzeln können unter P-T-Bedingungen von Kollisionsorogenen zu Eklogiten reagieren. Da deren Dichte größer ist als die von Mantel-Peridotiten, können mafische Krustenwurzeln unter geeigneten mechanischen Bedingungen in den Erdmantel verfrachtet (delaminiert) werden. Eklogit-fazielle Gesteine ehemaliger MLC (einschließlich Plag- oder Px-dominierten Edukte) sind als Xenolithe zu beobachten.

### Literatur:

Wedepohl K.H. (1995): Geochim. Cosmoch. Acta 59, 1217.  
Wittenberg A., Vellmer C., Kern H. & Mengel K. (1999): Geol. Soc. London, Spec Publ, submitted.

## **AMPH-IMA97 - A Hypercard program for amphibole classification and nomenclature based on the 1997 International Mineralogical Association Scheme**

**Mogessie, A.\*, Ettinger, K.\*, Leake, B.E.\*\* & Tessadri, R.\*\*\***

\* Institut für Mineralogie-Kristallographie und Petrologie, Universität Graz, Universitätsplatz 2, 8010 Graz

\*\* Department of Earth Sciences, Cardiff University. P.O.Box 914, Cardiff, CF1 3YE, UK

\*\*\* Institut für Mineralogie und Petrographie, Universität Innsbruck, Innrain 52, 6020 Innsbruck

The IMA 78 amphibole nomenclature scheme [1] was computerized and shown on a classification chart [2]. Recently the IMA recommended a revised amphibole scheme [3] making it necessary to amend the EMP-AMPH program to the new rules. The AMPH-IMA97 program allows single input or automatic input of as many amphibole analyses as are available following a set input format. There are three options for dealing with each amphibole analysis: 1) wet chemical analyses can be calculated to 24(O,OH,F,Cl); 2) analyses with determined FeO and Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> but without H<sub>2</sub>O can be calculated to 23(O) and 3) electron microprobe analyses calculated to 23(O) with IMA 97-recommended normalisation for Fe<sup>2+</sup> and Fe<sup>3+</sup> values. Deer, Howie and Zussman's listing of over 500 analyses [4] have been typed into an Excel sheet, automatically imported and calculated by the three above options, in order to test the program. The first comprehensive test of the third option shows it to be very successful for estimating Fe<sup>2+</sup> ( $R^2 = 0.88$ ) but less successful for Fe<sup>3+</sup> ( $R^2 = 0.42$ ). Problems in the normalisation of electron microprobe analyses of sodic amphiboles for Mn<sup>2+</sup> - Mn<sup>3+</sup> and Fe<sup>2+</sup> - Fe<sup>3+</sup> emerged and because Mn<sup>3+</sup> is a classifying parameter, the program has been modified for sodic amphiboles. The program is accompanied by a new coloured amphibole classification chart.

### Literature:

- [1] Leake, B. E. (1978): Nomenclature of amphiboles, *Mineral. Mag.* 42: 533 - 563.
- [2] Mogessie, A., Tessadri, R. & Veltman, C. B. (1990): EMP-AMPH - A Hypercard program to determine the name of an amphibole from electron microprobe analysis according to the International Mineralogical Association Scheme. *Computers & Geosciences*, 16: 309-330.
- [3] Leake et al. (1997): Nomenclature of Amphiboles: Report of the Subcommittee on Amphiboles of the International Mineralogical Association Commission on New Minerals and Mineral Names. *Mineral. Mag.* 61: 295-321.
- [4] Deer, W.A., Howie, R. A. & Zussman, J. (1997): Double chain silicates. *The Geological Society, London*. 2B: 1-764.

## **Mineralogical aspects concerning the improvement of the critical current density of Ag-clad BPSCCO high T<sub>c</sub> superconducting multifilamentary tapes**

**Neubauer, J., Risch, A. & Göbbels, M.**

Institut für Geologie und Mineralogie, Lehrstuhl für Mineralogie, Schloßgarten 5a, 91054 Erlangen  
neubauer@geol.uni-erlangen.de

Industrial applications of the high T<sub>c</sub> superconductors discovered since 1986 [1] have emphasized the importance of the Bi-Pb-Sr-Ca-Cu-O system. Precursors with a chemical composition within this system, containing mainly Bi(Pb)-2212 and additional phases, are used to produce highly pure Bi(Pb)-2223 multifilamentary tapes by the powder-in-tube (PIT) technique [2]. Phase assemblage and microstructure in such superconducting tapes are responsible – among others – for the critical current density J<sub>c</sub>. But there is still a lack of suitable characterization tools for these attributes.

X-ray diffraction analysis combined with Rietveld refinement [3] was applied to fully processed Bi(Pb)-2223 multifilamentary tapes for quality control purposes. Rietveld refinement offers new possibilities for accurate quantitative phase analysis, description of preferred orientation and determination of crystallite size by X-ray powder diffraction within a few minutes.

Phase content of the Bi(Pb)-2223 and additional phases in fully processed tapes was investigated in dependence of various sintering times, temperatures and oxygen partial pressures. Additionally the degree of texture of the Bi(Pb)-2223 phase was evaluated by calculating the Lodgering factor with all observed intensities determined by Rietveld refinement. Influence of the crystallite size on the superconducting properties can be extracted from FWHM parameter.

### Literature:

- [1] Bednorz, J.G. & Müller, K.A. (1986): Possible High T<sub>c</sub> superconductivity in the Ba-Cu-O system. - *Z. Phys. B - Condensed Matter*, 64, 189-193.
- [2] Sandhage, K.H. Riley, G.N. & Carter, W. (1991): Critical Issues in the OPIT Processing of High J<sub>c</sub> BSCCO Superconductors. - *J. Metals*, 43, 21.
- [3] Rietveld, H.M. (1969): A profile refinement method for nuclear and magnetic structures. - *J. Appl. Cryst.*, 2, 65.

## Sinterversuche an Müllverbrennungsschlacken und an Gemischen aus Ofenschlacken und industriellen Nebenprodukten

G. Pfrang-Stotz<sup>1</sup> and J. Reichelt<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Forschungszentrum Karlsruhe (ITC/TAB), Postfach 3640, 76021 Karlsruhe

<sup>2</sup> Universität Karlsruhe (ISE), Postfach 3640, 76128 Karlsruhe

Höhere Anteile mechanisch stabiler Silikate führen in der Regel zu einer verbesserten Elutionsstabilität und zu besseren bautechnischen Eigenschaften der MV-Schlacken. Außerdem können durch eine Erhöhung des Versinterungsgrades innerhalb der Schlackematrix eine Stützkornstruktur aufgebaut und eine Reduktion des Porenvolumens der Schlackekomponenten erreicht werden.

Die Sinterversuche an Ofenschlacken erlauben eine Charakterisierung der mineralogisch-chemischen Prozesse, die im Verbrennungsraum die Bildung von MV-Schlacken auf dem Verbrennungsrost steuern, sowie eine Darstellung der geänderten mineralogischen Zusammensetzung von MV-Schlacken, die sich durch die verstärkte Produktion von silikatischen Mineralphasen im Mineralbestand von MV-Schlacken durch die Zudosierung industrieller Nebenprodukte während des Sinterprozesses ergeben. Sinterversuche an Ofenschlacken zeigen, daß mit steigender Sintertertemperatur, insbesondere bei 1.000°C, der Anteil der stabilen Silikate im Mineralbestand der MV-Schlacken zunimmt und dadurch bessere bautechnische Eigenschaften erreicht werden können.

Geringe Zugaben von Steinkohlenflugasche zu der Ofenschlacke während des Sinterprozesses erhöhen in erster Linie den silikatischen Feinanteil von MV-Schlacken. Da dieser im Falle von Steinkohlenflugasche puzzolanische Eigenschaften besitzt, kann durch die Zugabe von Steinkohlenflugasche das Alterationsverhalten (Ablagerungszeit, verstärkter Einbau von Schwermetallen) der MV-Schlacken verkürzt und das Verfestigungsverhalten der MV-Schlacken, z.B. durch die Bildung von CSH-Phasen, positiv beeinflusst werden.

Die Zugaben von Schmelzkammergranulat und Kesselsand zu der Ofenschlacke während des Sinterprozesses beeinflussen den Mineralbestand der Ofenschlacke positiv, indem es zu einer verstärkten Bildung von Silikaten kommt.

## Mineralogical-petrographical methods as a tool for culture historical investigations and conservation of monuments - Schloß Tirol

Recheis, A., Bidner, Th. & Mirwald, P.W.

Institut für Mineralogie und Petrographie, Universität Innsbruck, Innrain 52, A-6020 Innsbruck

Schloß Tirol above Meran/South Tyrol may be considered a key construction for the regional history since early medieval times. From this point of view an interdisciplinary research project has been started aiming at an elucidation of building history of the castle as well as finding a concept for its future use as a regional museum.

The task of the earth sciences in this project is:

- Mapping of the building materials (stone inventory, bricks, mortars etc.) for distinguishing the different periods of construction and reconstruction respectively.

- Studying of the two marble portals of outstanding historical importance with respect to the provenance of the material, the attribution to the regional stonemason-workshops and lastly their weathering state.

- Evaluation of the preservation states of the different building materials in order to predict the future progress of damages and to develop appropriate conservation strategies.

- An important safety aspect for the castle are the conditions of its underground, which consists largely of quaternary materials. The considerable erosivity of this material is documented by a partly collapse of the northeastern part of the castle in the 16<sup>th</sup> century.

Within that scope two objective of particular importance had to be addressed:

### i) The marble portals (11<sup>th</sup> and 12<sup>th</sup> century)

A detailed mapping has been performed in combination with an ultrasonic study of the material. The work reveals that possibly not all parts of the portals do come from one quarry source and may be of different quarrying age. This seems to agree with stylistic analyses (different stonemason workshops, reworking of spolic materials [1]) A detailed multi-methodical analysis, such as catho-deluminescence, trace elements, grain size distribution, isotopes etc. [2] on a few small drill cores of the valuable material is on the way.

### ii) The underground problem

The mapping of the subsoil revealed that the castle is built on a complex glacial series of moraine and sub- to periglacial sediments of different consistency. Surficial creeping/sliding phenomena on the NE-flank of the castle's mound suggest the necessity of a soil mechanical study.

### References:

[1] Seebach, G. (1995): Die romanischen Portale auf Burg Tirol - Eine bauhistorische Untersuchung. "Eines Fürsten Traum" - Katalog zur Tiroler Landesausstellung 1995, p. 79-93.

[2] Herz, N. & Waelkens, M. (1988): Classical Marble: Geochemistry, Technology, Trade. Series E: Applied Sciences - Vol. 153.

## Flugaschen als Einsatzstoff für bautechnische Zwecke

Sonn, E.A.

Universität Wien, Institut für Petrologie, UZAI, Althahnstraße 14; A-1090 Wien

Der Nutzung von Flugaschen als Rohstoff wird derzeit besondere Bedeutung zugemessen; nicht nur aus rein wissenschaftlichen, sondern auch aus technologischen und wirtschaftlichen Gründen. Eine industrielle Verwertung der Aschen ist jedoch im Hinblick auf massive Verschiedenartigkeiten von material-spezifischen chemisch/mineralogischen Reaktionsabläufen bei Abbindungsprozessen äußerst problematisch. Deshalb ist es eine Herausforderung, solche Vorgänge zu prüfen und bezüglich einer technischen Nutzung an ausgewählten Beispielen zu studieren.

Die gegenständliche Arbeit beinhaltet die detaillierte Untersuchung von Verwertungsmöglichkeiten von zwei Aschetypen, einer Restverbrennungsasche (RVA) in Verbindung mit einer Wirbelschichtfeuerungsasche (WSF), insbesondere im Hinblick auf innerbetrieblichen Straßenbau. Schwerpunkte dieses Projektes sind Geländearbeit (Testfeld) in Verbindung mit Labortätigkeit, wobei Prüfungen der physikalischen Eigenschaften (Druckfestigkeit, Tragfähigkeitsverhalten, Durchlässigkeit und Frostverhalten) und Untersuchungen der Umweltverträglichkeit (Elutionsanalytik) im Vordergrund des Interesses standen.

Eine sichere Beurteilung der Aschemischung kann nach den vorliegenden Ergebnissen hinsichtlich umweltrelevantem Auslaugverhalten aufgrund u. a. hoher Sulfatausträge nicht gegeben werden. Grund für die großen Schwankungsbreiten der Resultate liefert die RVA-Asche mit ihren stark heterogenen Ausgangschemismen, die mit abweichenden Verbrennungsbedingungen und variierenden Brennzusätzen in Verbindung gebracht werden kann.

Günstig hingegen sind die Werte einzustufen, die im Zuge der straßenbautechnischen Prüfungen ermittelt werden konnten.

## Interpretation der Mößbauer- und IR-Spektren von synthetischem Fe-Turmalin

Velickov, B. & Abs-Wurmbach, I.

Institut für Angewandte Geowissenschaften I, TU-Berlin, Ernst-Reuter-Platz 1, D-10587 Berlin

Email: veirdh@mailszr.zrz.tu-berlin.de

Noch heute werden die Platzbesetzungen durch Fe in Turmalinen  $\{XY_3Z_6[SiO_{18}(BO_3)_3(OH)_4]\}$  auf den zwei möglichen Oktaederpositionen Y und Z kontrovers diskutiert. Allgemein wurde bisher anhand der Interpretation von Mößbauerspektren angenommen, daß sich Fe überwiegend auf Y befindet, aber zum Teil auch die Z-Position besetzt [1]. Demgegenüber steht ein neueres Modell [2], wonach Fe ausschließlich die Y-Position besetzt.

Um zur Klärung dieses Problems beizutragen, wurde ein im Vergleich zu natürlichen Turmalinen chemisch einfach zusammengesetzter synthetischer Foitit [3] (ideale chemische Formel:  $\square(Fe_2Al) Al_6[Si_6O_{18}(BO_3)_3(OH)_4]$ ) mit Hilfe einer Strukturverfeinerung [4], als auch mit der IR- und Mößbauer-spektroskopie untersucht.

Die wichtigsten Informationen der einzelnen Methoden sind hier zusammengefaßt:

(1) Strukturverfeinerung: Fe befindet sich nur auf der Y-Position [4]; (2) Das IR-Spektrum läßt sich nur unter der Annahme interpretieren, daß die Kristallstruktur des Foitits aus "Clustern" aufgebaut ist, die aus verschiedene Kationen-Anordnungen um die O(1)-H-Gruppe abzuleiten sind. Das  $Fe^{2+}$  befindet sich dabei auf Y in den drei folgenden Konfigurationen um O(1)-H: FeFeFe, FeFeAl, FeAlAl auf Y. (3) Die Mößbauer-Spektroskopie dieses Foitits zeigt nur zweiwertiges Eisen, welches sich auf mindestens drei verschiedenen Subplätzen befindet (drei  $Fe^{2+}$ -Dubletts; s. Tab.1).

Diese Ergebnisse lassen nur einen Schluß zu: Drei verschiedene Umgebungen für das  $Fe^{2+}$ , auf die aus den Mößbauer-Spektren geschlossen wird, beruhen nur auf den in dem IR-Spektrum beobachteten verschiedenen Fe,Al-Konfigurationen um O(1)-H. Somit bestätigen wir das Modell nach [2].

Über Bindungswalenzbetrachtungen konnte abgeleitet werden, daß das Y-Oktaeder um so mehr entlang der O(1)H-O(3)H-Verbindungsline in den einzelnen Clustern gestreckt wird, je mehr YAl-Nachbarn das  $Fe^{2+}$  umgeben. Mit dieser Elongation des Y-Oktaeders sollte auch der elektrische Feldgradient, der für die Quadrupolaufspaltung verantwortlich ist, einhergehen und erklärt somit die sich aus den Mößbauerspektren ergebenden drei Umgebungen für das Eisen auf der Y-Position (siehe Tab.1).

	IS [mm/s]	QS [mm/s]	HW [mm/s]	"Cluster"
$Fe^{2+}(Y1)$	1.09(1)	2.42(2)	0.27(1)	$Fe^{2+}IO_4(OH)_2[Fe^{2+}Fe^{2+}]$
$Fe^{2+}(Y2)$	1.07(2)	2.09(5)	0.32(4)	$Fe^{2+}IO_4(OH)_2[Fe^{2+}Al]$
$Fe^{2+}(Y3)$	1.05(2)	1.48(5)	0.48(5)	$Fe^{2+}IO_4(OH)_2[AlAl]$

Tab.1: Mößbauer Parameter des synthetischen Foitits (gegen  $Fe^0$  kalibriert)

### Literatur:

- [1] Fuchs et al. (1998): Am.Min. 83, 525-534.
- [2] Piezka et al. (1997): Abstract volume zum "Tourmaline '97"-symposium, Czech Republik, S. 74-75.
- [3] Velickov et al. (1998): Terra Nova abstr. 10, 63.
- [4] Kahlenberg et al. (1999): Z. Krist. supplement No.16.