

**IR-SPEKTROSKOPISCHE UNTERSUCHUNGEN VON OH-DEFEKTEN IN
EISENHALTIGEN ($^{IV}\text{Fe}^{2+}$) SPINELLPHASEN**

M. M. Halmer, E. Libowitzky & A. Beran

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

Vorausgegangene experimentelle Untersuchungen haben gezeigt, dass Mg-Silikat-Spinellphasen, die bevorzugt in der Übergangszone des Erdmantels auftreten, beachtliche Mengen an Wasser (< 2.7 Gew.%) in Form von OH-Gruppen enthalten. Unsere Probenauswahl beinhaltet natürliche Spinellphasen aus unterschiedlichen geologischen Milieus (z.B. MgAl-Spinell, Franklinit, Gahnit), aber auch synthetische Spinelle (z.B. nicht-stöchiometrische Verneuil-MgAl-Spinelle). Die IR-Spektroskopie ist eine höchst empfindliche Methode, mit der geringste Spuren von an Sauerstoff gebundenem Wasserstoff in "trockenen" Mineralphasen gemessen werden können. Das Ziel der Studie ist, die Anwesenheit von OH-Defekten in Spinellen von natürlichen Paragenesen zu erkunden und Modelle über den strukturellen Einbau von Wasserstoff zu entwickeln. Mit IR-spektroskopischen Messungen an synthetischen Phasen wurden bereits positive Ergebnisse bezüglich des Wassergehalts in Spinellen erzielt. Diese nicht-stöchiometrischen Verneuil-MgAl-Spinelle sind durch zwei starke Banden mit unterschiedlichen Bandenintensitäten charakterisiert, die bei 3355 und 3540 cm^{-1} liegen und eine zusätzliche Schulter bei 3500 cm^{-1} aufweisen. Die Wassergehalte für die synthetischen Spinelle liegen zwischen 7 und 270 Gew.ppm. Die Werte wurden mit Hilfe der Kalibrierung von LIBOWITZKY & ROSSMAN [2] ermittelt. Natürlich vorkommende Franklinit- (ZnFe_2O_4) und Gahnitkristalle (ZnAl_2O_4) zeigen breite Absorptionen mit zwei Maxima in einem Wellenzahlbereich von 5500–3400 cm^{-1} . Diese Spektren erinnern an jene der synthetischen OH-haltigen Verneuil-MgAl-Spinelle, die eine geringe Menge Eisen enthalten. Nach SKOGBY & HÅLENIUS [1] können die zwei breiten Absorptionen den d-d Übergängen von $^{IV}\text{Fe}^{2+}$ zugeschrieben werden. Im Wellenzahlbereich mit geringeren Absorptionen (3600–3100 cm^{-1}) sind nur undeutlich OH-Banden zu erkennen, da diese von den Absorptionsbanden des Fe^{2+} stark überlagert bzw. teilweise verdeckt werden. Jedoch kann die Anwesenheit dieser schwachen Banden bei 3540 und 3500 cm^{-1} , die zuvor eindeutig OH-Banden im eisenhaltigen Verneuil-Spinellkristall zugeschrieben wurden, als ein Hinweis für die Existenz von OH-Defekten in natürlichem Franklinit interpretiert werden.

Diese Arbeit wurde teilweise von der EU mit dem "Human Potential Program" HPRN-CT-2000-0056 unterstützt.

Literatur

- [1] SKOGBY, H. & HÅLENIUS, U. (2003): An FTIR study of tetrahedrally coordinated ferrous iron in the spinel-hercynite solid solution. - American Mineralogist, (in press).
- [2] LIBOWITZKY, E. & ROSSMAN, G. R. (1997): An IR absorption calibration for water in minerals. - American Mineralogist, 82: 1111-1115.