

CO₂-Gehaltsbestimmungen von Cordierit in Mineraleinblenden mittels Raman-Spektroskopie

Reinhard Kaindl^{1, 2}, Udo Haefeker¹ & Peter Tropper¹

1 Institut für Mineralogie und Petrographie, Universität Innsbruck, Innrain 52, A-6020 Innsbruck (reinhard.kaindl@uibk.ac.at)

2 Christian Doppler Laboratory for Advanced Hard Coatings am Institut für Mineralogie und Petrographie, Universität Innsbruck

Das in hochmetamorphen Krustengesteinen gesteinsbildend vorkommende Mineral Cordierit bildet parallel zur kristallographischen c-Achse Kanäle aus Silizium-Aluminium-Tetraeder-Ringen, in die große Moleküle wie CO₂ orientiert eingelagert werden können. Mittels konfokaler Mikro-Ramanspektroskopie kann der CO₂-Gehalt von Cordierit in Mineraleinblenden mit einer Volumenauflösung von etwa 5 µm³ und einer Genauigkeit von etwa ±0.11 Gew.-% semi-quantitativ bestimmt werden (Kaindl et al., in press). Die Koppelung des Spektrometers mit einem motorisierten, computergesteuerten XY-Tisch erlaubt es, Spektralparameter wie Linienposition und integrierte Bandenintensität von mehreren tausend Punktmessungen in einer zweidimensionalen Karte zu kombinieren und darzustellen.

Der Einfluss verschiedener experimenteller Parameter und unterschiedlicher Auswertemethoden auf die CO₂-Bestimmung wurde an granulit-faziell gewachsenen Cordierit-Einkristallen untersucht. Betrachtet man nur die integrierten Intensitäten der n₁ Grundschiwingung bei 1383 cm⁻¹ von in der Cordierit-Struktur gebundenem CO₂ eines Cordierit-Porphyroblasten in einem Einblende aus dem Saualpe/Österreich, zeigt sich eine unregelmäßige, fleckige, Patchwork-artige Verteilung. In einchlussfreien Bereichen variiert die Intensitätsverteilung aufgrund von Schwankungen der Laserintensität und des Fokus etwa 30% um einen Mittelwert. Streifenartige Variationen der Bandenposition im Bereich von ±2 cm⁻¹ werden durch die mechanische Ungenauigkeit des Gitterstellmotors hervorgerufen, die durch einen geeigneten Aufbau des Experimentes mit einer fixierten Spektrometerposition vermieden werden können. Um den Einfluss experimentell hervorgerufener Intensitätsschwankungen zu minimieren, wird die integrierte Intensität der CO₂ n₁ Grundschiwingung bei 1383 cm⁻¹ durch die Intensitäten zweier SiO₄-Tetraederschwingungen bei 972 und 1182 cm⁻¹ dividiert. Diese dabei gewonnenen relativen Intensitätsverhältnisse I_{1383/972} und I_{1383/1182} können zur semi-quantitativen Bestimmung von CO₂-Gehalten nach folgenden Gleichungen herangezogen werden:

$$\text{CO}_2^{I_{1383/972}} = 1.6659 \cdot (I_{1383/972}), \text{CO}_2^{I_{1383/1182}} = 2.1388 \cdot (I_{1383/1182})$$

(siehe Beitrag Haefeker et al. in diesem Band).

Unter Benutzung dieser beiden Gleichungen ergibt sich eine unregelmäßige, fleckige Variation der CO₂-Gehalte von 0.13 bis 0.26 Gew.% über den Cordierit-Kristall mit einem mittleren Gehalt von 0.14 Gew.%. Es konnte keine signifikante Änderung des CO₂-Gehaltes im Bereich von Rissen, Einschlüssen oder der Ränder festgestellt werden.

R. Kaindl, P. Tropper, I. Deibl (in press): A semi-quantitative technique for determination of CO₂ in cordierite by Raman spectroscopy in thin sections. Eur. J. Mineral.