

zugeordnet, welche mit Eigenschaften belegt werden. Damit werden Porosität, Permeabilität, thermische Leitfähigkeit und Kompetenz der jeweiligen Schicht in die Berechnung miteinbezogen.

Nachdem das Modell gerechnet wurde, lassen sich einerseits die Randbedingungen dahingehend verändern dass das Modell besser mit den Kalibrationsdaten übereinstimmt; andererseits gibt es Aufschluss über den Zeitraum der Kohlenwasserstoffgenese, Migrationswege und Migrationsverluste, Zusammensetzung der generierten Kohlenwasserstoffe (Gas/Öl-Verhältnisse, Stoffklassen, API) und über die Lage der Kohlenwasserstoffspeicher.

Generierte Massen und Volumen lassen sich durch die 2-dimensionale Darstellung nur bedingt abschätzen.

Die \pm Nord-Süd gerichteten Modelle zeigen, dass die Kohlenwasserstoffgenese auf die Bereiche unter der Alpenfront beschränkt sind und es dann zu lateraler Migration nach Norden gekommen ist. Der Vergleich mit bereits explorierten Bereichen erlaubt nun abzuschätzen, zu welchen Zeiten die Störungen permeabel oder impermeabel waren, um eine Lagerstätte so realistisch wie möglich zu füllen.

Damit wird es in Zukunft möglich sein, die gewonnenen Erkenntnisse auf eine 3D Modellierung des gesamten Beckens auszudehnen und so bisher noch unbekanntes Kohlenwasserstoffansammlungen zu finden.

Ramanspektroskopische Charakterisierung von synthetischen, wasserhaltigen Mg- und Fe-Cordieriten unter Berücksichtigung des Al-Si-Ordnungsgrades

HAEFEKER, U., KAINDL, R. & TROPPEL, P.

Institut für Mineralogie und Petrographie, Universität Innsbruck, Innrain 52, 6020 Innsbruck, Österreich

Cordierit wird aufgrund seines häufigen Vorkommens in hochmetamorphen Gesteinen als Geothermobarometer bzw. Geohyrometer eingesetzt. In die strukturellen Kanäle des Cordierits können Fluidmoleküle, z. B. H₂O und CO₂, eingebaut werden, welche die geothermobarometrischen Resultate stark beeinflussen. Mit Hilfe der Ramanspektroskopie lassen sich fluide Spezies identifizieren, eine Methode zur quantitativen Bestimmung von H₂O hingegen besteht derzeit nicht. Da bestimmte Schwingungsbanden im Raman-Spektrum von Cordierit vom Al/Si-Ordnungsgrad und vom Mg/Fe-Verhältnis beeinflusst werden, ist es für die Entwicklung einer Raman-basierten Quantifizierungsmethode für H₂O in Cordierit notwendig, diese Effekte genau zu charakterisieren.

Zu diesem Zweck wurde Mg-Cordierit mit einer Größe von >150 Mikrometern synthetisiert und untersucht. Als Ausgangsmaterial wurde aus den Oxiden SiO₂, Al₂O₃ und MgO ein Glas mit der stöchiometrischen Zusammensetzung des Mg-Cordierits Mg₂Al₄Si₅O₁₈ hergestellt. Der Chemismus des Glases wurde mit der Elektronenstrahlmikrosonde überprüft. Die Kristallisation erfolgte durch Temperaturbehandlung in einem mehrphasigen Prozess,

der Keimbildung, Wachstum von hexagonalem Cordierit und Umwandlung zu orthorhombischem Cordierit umfasst. Um größtmögliche Kristalle zu erhalten, wurde die Keimbildungsrate niedrig bei gleichzeitig hoher Keimwachstumsrate gehalten. Das Glasbruchstück wurde dazu vor der thermischen Behandlung im Ultraschallbad gereinigt, anschließend mit ca. 15 %-iger HF 5 Minuten lang oberflächlich geätzt und in einer Halterung aus Pt-Draht befestigt. Dadurch wurden Kontaktpunkte mit Fremdpartikeln, Unebenheiten der Oberfläche und Kontaktflächen zur Tiegelwand reduziert und damit die Keimbildungsrate gesenkt.

Die thermische Behandlung erfolgte in einem abgedeckten Korundtiegel in einem Carbolite HTF 1800-Ofen. Nach 25 Minuten bei 800 °C und 4,5 Stunden bei 975 °C waren unter dem Polarisationsmikroskop deutlich kristalline Strukturen (sog. μ -Cordierit) mit Durchmessern von >150 Mikrometern zu sehen.

Das Glasbruchstück mit den Cordieritkeimen wurde weitere 24 Stunden bei 1200 °C und danach 9 Tage lang bei 1400 °C getempert. Zunächst entstand hexagonaler Cordierit mit ungeordneter Verteilung von Si und Al. Durch weitere thermische Behandlung stieg der Ordnungsgrad. Mittels dieses Verfahrens konnten Kristalle in der Größenordnung von mehreren 10 bis mehreren 100 Mikrometern synthetisiert werden. Um H₂O in die strukturellen Kanäle des Cordierit einzubauen, wurden einzelne Kristalle aussortiert und in eine offene Platinkapsel eingebracht. Diese wurde zusammen mit Wasser in eine Goldkapsel eingeschweisst und für 7 Tage in einer Hydrothermalanlage bei 750 °C und 2 kbar gehalten.

Ramanspektroskopische Untersuchungen an den Kristallen wurden mit einem konfokalen LabRAM-HR800 (HORIBA JOBIN-YVON™) Spektrometer durchgeführt. Die Ramanspektren belegen sowohl die für orthorhombischen Cordierit typische Peak-Aufspaltung im Bereich von 550 cm⁻¹ und 600 cm⁻¹ als auch die Schwingungsbande von in der Cordieritstruktur gebundenem H₂O bei 3600 cm⁻¹. Weitere Untersuchungen mit Hilfe von Pulverröntgendiffraktometrie bzw. Röntgenbeugung am Einkristall werden den genauen Grad der Al-Si-Ordnung der synthetisierten Kristalle zeigen.

Ramanmessungen mit polarisiertem Laserlicht an orientierten orthorhombischen Cordierit-Kristallen sollen weiters die Richtungsabhängigkeit des H₂O in den Kanälen erfassen. Der Einfluss des Eiseneinbaus auf die Positionen und Halbwertsbreiten einzelner Ramanpeaks wird an synthetisierten Mg/Fe-Cordieritmischkristallen untersucht.

Diese Arbeit wird vom Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF), Projekt Nr. P 22013-N21, gefördert. Vielen Dank an Jürgen Konzett für die Unterstützung bei den Experimenten.