

# IR-spektroskopische und chemische Untersuchungen an Rutil von Modriach/Steiermark

Von Vera M. F. HAMMER

## Zusammenfassung

Rutile von Modriach zeigen im IR-Spektralbereich neben der für Rutil charakteristischen OH-Absorptionsbande bei  $3280\text{ cm}^{-1}$  eine typische breite Schulter mit zwei Maxima bei  $3010$  und  $2920\text{ cm}^{-1}$ . Mit Hilfe von Deuterierungs- und Erhitzungsversuchen sowie Mikrosondenanalysen werden diese zusätzlichen Banden diskutiert.

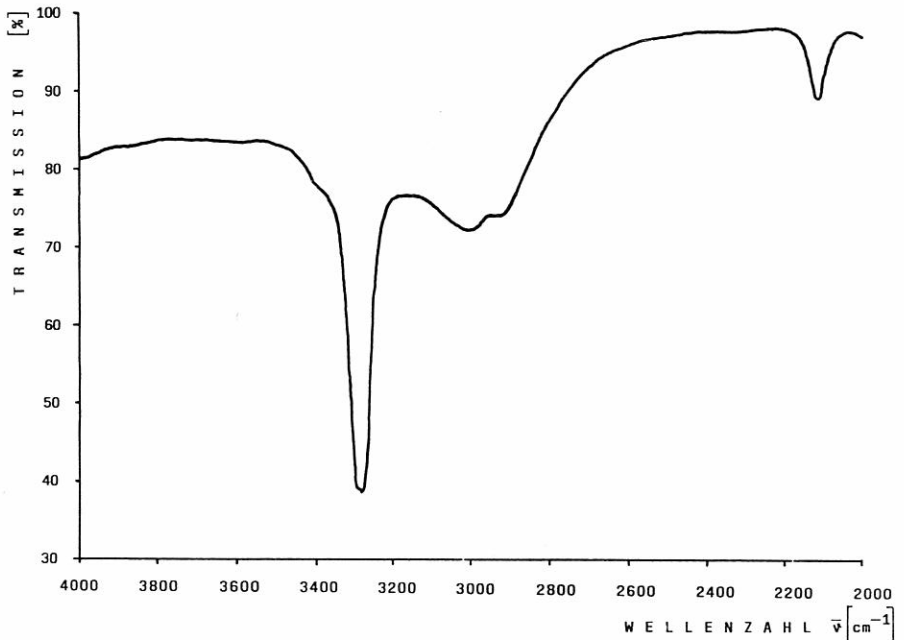
## Summary

Rutile show a characteristic OH-absorption band in the IR region at  $3280\text{ cm}^{-1}$ . Crystals from Modriach are characterized by a typical broad shoulder with maxima centered at  $3010$  and  $2920\text{ cm}^{-1}$ . Deuteration and annealing experiments as well as microprobe analyses were used to discuss these additional bands.

Schon von altersher ist das Vorkommen von Modriach/Steiermark für seine großen und gut ausgebildeten Rutilkristalle bekannt (HINTZE, 1898). Nach MEIXNER (1961) kommen Rutil in Pegmatiten und Quarzpegmatiten als primäre Komponenten vor, die an Gneisglimmerschiefer und Gneise der Koralpe gebunden sind (WEISSENBACH, 1963). Einen großen Überblick über die Mineralfundstellen im Raum Pack, Koralpe und der Weststeiermark gibt MEIXNER (1965).

Die IR-Untersuchungen an natürlichen Rutilen wurden durch die Arbeit von BERAN & ZEMANN (1971) eingeleitet. An Rutilen von Modriach bestimmten sie eine durch die OH-Streckschwingung verursachte Absorptionsbande bei  $3270\text{ cm}^{-1}$ , deren Zuordnung durch Deuterierungsversuche bewiesen wurde. Ebenfalls wurde durch Messung mit polarisierter IR-Strahlung die Lage des OH-Dipols in der Struktur festgelegt. Die OH-Dipole liegen in der Ebene (001) ungefähr senkrecht auf die „Ti-Dreiecke“ um die Sauerstoffe.

Im Zuge einer umfangreichen IR-spektroskopischen Bearbeitung von Rutilen verschiedener Vorkommen und Paragenesen zeigte sich neben der Bande bei  $3280\text{ cm}^{-1}$  eine breite Schulter mit zwei Absorptionsmaxima bei  $3010$  und  $2920\text{ cm}^{-1}$  für die Rutilen von Modriach als typisch (Abb. 1) (HAMMER, 1989). Messungen mit polarisierter Strahlung lassen einen zur OH-Absorptionsbande bei  $3280\text{ cm}^{-1}$  gleichlaufenden Absorptionspleochroismus mit maximaler Absorption senkrecht [001] erkennen.



**Abb. 1:**

Rutil, Modriach: IR-Spektrum (fünfmal akkumuliert) einer (hk0)-Platte,  $d = 0,030$  cm, mit einer OH-Absorptionsbande bei  $3280\text{ cm}^{-1}$  und einer breiten Schulter mit zwei Maxima bei  $3010$  und  $2920\text{ cm}^{-1}$ .

Durch eine einwöchige Hydrothermalbehandlung in Stahlbomben mit  $\text{D}_2\text{O}$  bei  $350^\circ\text{ C}$  bildet sich für die bei  $3280\text{ cm}^{-1}$  auftretende Bande eine entsprechende OD-Bande bei  $2440\text{ cm}^{-1}$ . Die charakteristische Linienverschiebung  $\nu_{\text{OH}}/\nu_{\text{OD}}$  beträgt 1,34. Erst bei länger dauernder Behandlung (bis zu drei Wochen) zeigt sich auch für die Bande bei  $3010\text{ cm}^{-1}$  ein OD-Äquivalent. Die Bande bei  $2920\text{ cm}^{-1}$  ließ sich selbst nach dieser Zeit nicht deutlieren (Abb. 2). Auf Grund der Deuterierung lassen sich für die zusätzlichen Banden bei  $3010$  und  $2920\text{ cm}^{-1}$  keine eindeutigen Zuordnungen im Sinne weiterer strukturspezifischer OH-Gruppen treffen. Mögliche Ursachen wären teilweise orientierte Einschlüsse OH-hältiger Minerale, wie zum Beispiel von Eisenoxyhydraten. Auflichtuntersuchungen der Rutilen von Modriach ließen jedoch keine limonitischen Minerale erkennen. Da die in Dünnschliffuntersuchungen beobachteten netzartigen opaken Phasen auch bei Rutilen aus anderen Vorkommen auftreten, die keine zusätzlichen Absorptionen zeigen, können sie nicht zur Erklärung dieser breiten Banden verwendet werden.

Schrittweises Erhitzen des Rutilen und jeweils anschließende Aufnahme eines IR-Spektrums lassen erkennen, daß bei  $600^\circ\text{ C}$  die breiten Banden bei etwa  $3010$  und  $2920\text{ cm}^{-1}$  verschwinden, während die OH-Bande bei  $3280\text{ cm}^{-1}$  noch vorhanden ist (Abb. 3).

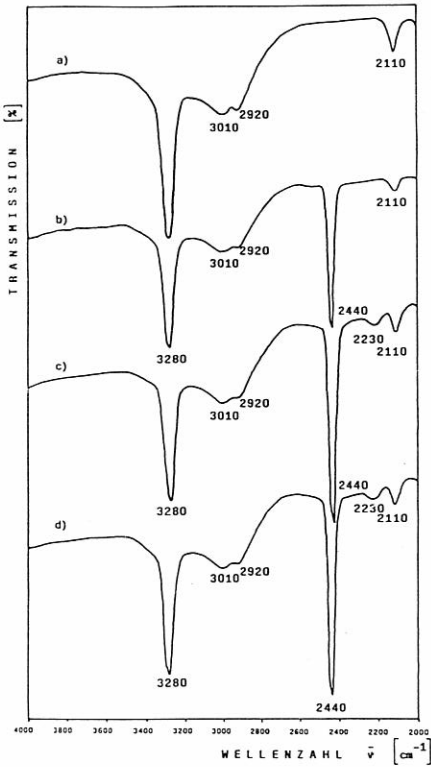


Abb. 2

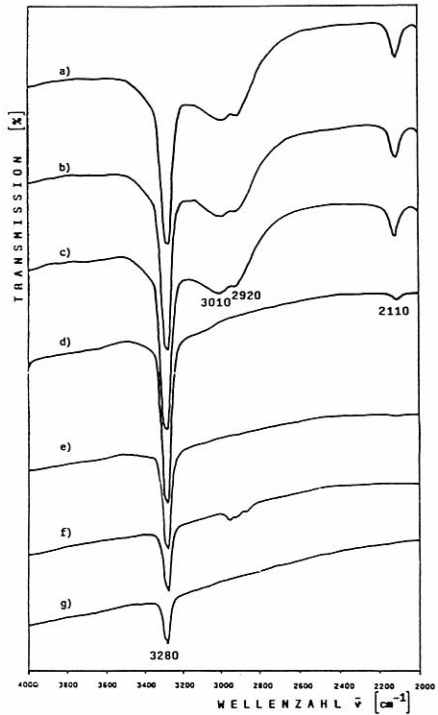


Abb. 3

**Abb. 2:**

Rutil, Modriach: Deuterierungsversuch, IR-Spektren (fünfmal akkumuliert),  $d = 0,029 \text{ cm}$ .

- a) Originalmaterial mit Absorptionsbanden bei  $3280, 3010$  und  $2920 \text{ cm}^{-1}$ .
- b) Probe bei  $350^\circ \text{ C}$ /eine Woche mit  $\text{D}_2\text{O}$  behandelt: Es entsteht eine OD-Bande bei  $2440 \text{ cm}^{-1}$ .
- c) Probe bei  $350^\circ \text{ C}$ /zwei Wochen mit  $\text{D}_2\text{O}$  behandelt: zusätzliche Bande bei  $2230 \text{ cm}^{-1}$ .
- d) Probe bei  $350^\circ \text{ C}$ /drei Wochen mit  $\text{D}_2\text{O}$  behandelt: keine Veränderungen bemerkbar.

**Abb. 3:**

Rutil, Modriach: Erhitzungsversuch, IR-Spektren (fünfmal akkumuliert).

- a) Originalmaterial; b)  $400^\circ \text{ C}$ /zwei Stunden; c)  $500^\circ \text{ C}$ /zwei Stunden; d)  $600^\circ \text{ C}$ /zwei Stunden; e)  $700^\circ \text{ C}$ /30 Minuten; f)  $800^\circ \text{ C}$ /30 Minuten; g)  $900^\circ \text{ C}$ /30 Minuten.

Der analytische Wassergehalt wurde mit einer auf dem Beer'schen Gesetz beruhenden IR-spektroskopischen Mikromethode bestimmt. An einer Standardprobe besonders reiner Qualität (Rutil von Capao do Lana/Brasilien) wurde der Wasserstoffgehalt zunächst mit einem thermochemischen Verfahren bestimmt. Der daraus berechnete Extinktionskoeffizient beträgt für die OH-Bande bei  $3280 \text{ cm}^{-1}$  in Rutil  $6540 \text{ l.Mol}^{-1}.\text{cm}^{-1}$ . Der berechnete Hydroxylgehalt der Rutil

von Modriach beträgt 0,10 äquiv. Gew.% H<sub>2</sub>O und steht mit Gehalten von Rutilen aus anderen pegmatitischen Vorkommen in guter Übereinstimmung. Die Mikrosondenanalyse (Tab. 1) ergab im Vergleich mit Rutilproben anderer Vorkommen keine Besonderheiten in der Zusammensetzung. Nach Mössbauer-Untersuchungen der vorher erwähnten Standardprobe kann das Fe im Rutil als Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> angegeben werden. Die Größenordnung des Nb-Gehaltes dürfte für Rutilite aus pegmatitischen Paragenesen typisch sein.

**Tabelle 1**

Rutil Modriach: Mikrosondenanalyse, Mittelwerte aus fünf Punktmessungen, Standardabweichung in runder Klammer. Die Werte für Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, ZrO<sub>2</sub>, SnO<sub>2</sub> und Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> liegen unter der Nachweisgrenze von etwa 0,02 Gew.%.

	Gew. %
TiO <sub>2</sub>	98,1 (8)
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0,57 (5)
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0,07 (1)
V <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0,12 (3)
Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0,08 (2)
Nb <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0,25 (4)
Summe	99,20

### Literatur:

- BERAN, A. & ZEMANN, J., 1971: Messung des Ultrarot-Pleochroismus von Mineralen. XI. Der Pleochroismus der OH-Streckfrequenz in Rutil, Anatas, Brookit und Cassiterit. — *Tschermaks Mineral. Petrogr. Mitt.*, 15, 71–80.
- HAMMER, V. M. F., 1989: IR-spektroskopisch bestimmte OH-Gehalte von Rutil und Titanit aus unterschiedlichen Paragenesen. — *Mitt. Österr. Miner. Ges.* 134, 7–16.
- HINTZE, C., 1898: *Handbuch der Mineralogie*. I. Bd., 2. Hälfte, 1585–1623. — Walter de Gruyter & Co., Berlin–Leipzig.
- MEIXNER, H., 1961: Genetische Bemerkungen zum neuen Phosphatvorkommen von Modriach. — *Der Karinthin*, 42, 154.
- MEIXNER, H., 1965: Der Vivianitfund von Modriach im Rahmen der Mineralvorkommen des Raumes Pack–Ligist, südlich Köflach, Koralpe, Weststeiermark. — *Der Karinthin*, 52, 120–136.
- WEISSENBACH, N., 1963: Die geologische Neuaufnahme des Saualpen-Kristallins (Kärnten) V. — *Carinthia II*, 153./73., 5–23.

Mein Dank gebührt Herrn Prof. Dr. J. Zemann für die Anregung zur Bearbeitung des interessanten Themas und Herrn Prof. Dr. A. Beran, der mir jederzeit mit zielführender Diskussion zur Verfügung stand. Für die Hilfe bei der Durchführung der Mikrosondenanalysen bedanke ich mich bei Herrn Dr. H. Dietrich.

Anschrift der Verfasserin:  
 Dr. Vera M. F. HAMMER  
 Institut für Petrologie der Universität Wien  
 Dr.-Karl-Lueger-Ring 1  
 A-1010 Wien

# ZOBODAT - [www.zobodat.at](http://www.zobodat.at)

Zoologisch-Botanische Datenbank/Zoological-Botanical Database

Digitale Literatur/Digital Literature

Zeitschrift/Journal: [Mitteilungen der Abteilung für Mineralogie am Landesmuseum Joanneum](#)

Jahr/Year: 1990

Band/Volume: [58](#)

Autor(en)/Author(s): Hammer Vera M.F.

Artikel/Article: [IR-spektroskopische und chemische Untersuchungen an Rutil von Modriach/Steiermark 11-14](#)