

Kapitel 7

Zusammenfassung

Mit der vorliegenden Arbeit ist es gelungen, einen Datensatz der anisotropen Wärmetransporteigenschaften der wichtigsten trigonalen und orthorhombischen Karbonaten zu schaffen. Meist konnten die Wärmetransporteigenschaften auch als Funktion der Temperatur bestimmt werden. Dabei wurde festgestellt, dass zwischen den einzelnen Mineralien große Unterschiede in der Temperaturleitfähigkeit bestehen. Die größten Differenzen der Temperaturleitfähigkeit wurden in trigonalen Karbonaten festgestellt. Die maximale Temperaturleitfähigkeit wurde im Magnesit in Richtung c - Achse ($6,3 \text{ mm}^2/s$) und minimale Temperaturleitfähigkeit im Smithsonit in Richtung senkrecht zur Wachstumsrichtung ($1,2 \text{ mm}^2/s$) gemessen. Das ergibt eine Differenz von ca. $5,1 \text{ mm}^2/s$ innerhalb der trigonalen Karbonate. Bei den orthorhombischen Karbonaten wurden geringe Unterschiede der Temperaturleitfähigkeit festgestellt. Die höchste Temperaturleitfähigkeit in Witherit in Wachstumsrichtung ($1,6 \text{ mm}^2/s$) und geringste Temperaturleitfähigkeit in Cerussit in $[001]$ -Richtung ($0,6 \text{ mm}^2/s$) gemessen. Das ergibt eine Differenz von $1,0 \text{ mm}^2/s$, die sehr viel geringer ist als bei den trigonalen Karbonaten. Durch die Messung der Temperaturleitfähigkeit in Abhängigkeit von der Orientierung konnte die Anisotropie der Temperaturleitfähigkeit bestimmt werden. Die höchste Anisotropie wurde im Magnesit (128 %) und die geringste im Rhodochrosit (7 %) festgestellt.

Um die Temperaturabhängigkeit der Temperaturleitfähigkeit zu bestimmen, wurden zwei Modelle getestet: das Eucken-Modell und das Modell nach Roufosse and Klemens (1973, 1974). Mit einem geeigneten Modell kann das Verhalten der Temperaturleitfähigkeit bei hohen Temperatur abgeschätzt werden. Damit könnte die Temperaturleitfähigkeit der Phononen in Karbonaten bei Temperaturen oberhalb der Dissoziationstemperatur sinnvoll abgeschätzt werden. Die besten Ergebnisse wurden mit dem Modell von Roufosse and Klemens, 1973, 1974 erreicht. Mit diesem Modell ist auch eine physikalisch sinnvolle Beschreibung der Temperaturleitfähigkeit möglich. In den meisten Publikationen wird jedoch das Eucken-Modell zur Beschreibung der

Temperaturabhängigkeit verwendet, obwohl es eine rein empirische Anpassung darstellt.

Bei der Betrachtung der mittleren Temperaturleitfähigkeit in Abhängigkeit von den mittleren Kationengewichten der Minerale wird ein systematischer Zusammenhang beobachtet. Mit steigendem mittleren Kationengewicht sinkt die Temperaturleitfähigkeit der Karbonate. Innerhalb der trigonalen Karbonate ist dieser Zusammenhang stärker als bei den orthorhombischen Karbonaten. In erster Näherung gilt für die trigonalen Karbonate Gl. 7.1a und für die orthorhombischen ein linearer Zusammenhang nach Gl. 7.1b:

$$D_{tri} = 142 \left(\frac{mm^2 u}{s} \right) \frac{1}{m_{Kat}(u)} + 3.6 \times 10^{-4} \left(\frac{mm^2}{s u^2} \right) m_{Kat}^2(u^2) - 2.3 \left(\frac{mm^2}{s} \right) \quad (7.1a)$$

$$D_{ortho} = -4,0 \times 10^{-3} \left(\frac{mm^2}{s u} \right) m_{Kat}(u) + 1,6 \left(\frac{mm^2}{s} \right) \quad (7.1b)$$

Ein nichtlinearer Zusammenhang wird zwischen der mittleren Schallgeschwindigkeit und der mittleren freien Weglänge beobachtet. Nach Rayleigh (1896) ist die Streuwahrscheinlichkeit der Phononen in Karbonaten in der Hauptsache durch die Anwesenheit von Fehlstellen abhängig. Der Streuquerschnitt Γ zeigt nach Rayleigh eine nichtlineare Abhängigkeit von der mittleren Geschwindigkeit der Phononen v : $\Gamma \propto \frac{1}{v^2}$. Aus Gl. 2.14 folgt, dass mit steigenden mittleren Phononengeschwindigkeiten auch die mittleren freien Weglängen ansteigen.

Die Minerale Magnesit, Dolomit und Calcit bilden ein pseudobinäres System. Der Dolomit weist eine geordnete Struktur mit Wechsellagen von Magnesiumatomen und Kalziumatomen auf. Man kann die Temperaturleitfähigkeit des Dolomits mit Hilfe der Endglieder Magnesit und Calcit berechnen, wenn die strukturellen Details berücksichtigt werden. Bei einer Mittelung entlang der kristallographischen c -Achse lässt sich das System wie eine Serienschaltung in einem elektrischen System behandeln. Bei der Berechnung der mittleren Temperaturleitfähigkeit in Richtung der c -Achse muss das Reuss-Mittel aus den Werten der Endglieder gebildet werden. Senkrecht zur kristallographischen c -Achse verhält sich das System äquivalent einer elektrischen Parallelschaltung. In dieser kristallographischen Richtung muss dann das Voigt-Mittel zur Berechnung der mittleren Temperaturleitfähigkeit verwendet werden.

Bei der Untersuchung des Symmetrieeinflusses auf die Temperaturleitfähigkeit wurden die chemisch identischen Minerale Calcit (trigonal) und Aragonit (orthorhombisch) betrachtet. Die Ergebnisse zeigen, dass das Mineral mit der höheren Symmetrie, Calcit, eine höhere mittlere Temperaturleitfähigkeit ($1,9 \text{ mm}^2/s$) als das niedriger symmetrische Aragonit ($1,4 \text{ mm}^2/s$) aufweist. Die Differenz der Temperaturleitfähigkeit zwischen trigonaler und orthorhombischer Modifikation beträgt in diesem Fall $0,5 \text{ mm}^2/s$. Die Ursache liegt in dem geringen mittleren Atomabstand in Aragonit. Die Differenz der mittleren Atomabstände beträgt $0,02 \text{ \AA}$. Scheinbar führen solche geringe Differenzen in den mittleren Atomabständen zu relativ großen Unterschie-

den der thermischen Eigenschaften. Eine andere Ursache ist nicht erkennbar, da die chemische Zusammensetzung beider Minerale identisch ist.

