



## FTIR-Spektroskopie am Beispiel türkisfarbener Steine

Kommt man im Gemmologenkreis auf Türkis zu sprechen, so erntet man vorerst einmal ein „Oje!“ oder ein „...kann zur Verzweiflung führen!“. In der Folge weiß dann jeder sein „Türkis-Gschicht!“ zu erzählen und die Verunsicherung wird dabei nicht kleiner. Ein Blick in die Preistabelle für Gutachten von Kolleginnen und Kollegen bestätigt den bereits gehegten Verdacht: Der Türkis zählt gemmologisch zu den schwierigen Steinen!



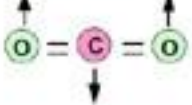
Türkis ist ein Stein, der wahrscheinlich schon vor unserer Zeitrechnung als Schmuckstein Verwendung fand. Obwohl heutzutage der Türkis, verglichen mit anderen Schmuck- und Edelsteinen, eher zu den preisgünstigeren Steinen zählt, gibt es unzählige natürliche und synthetische Ersatzsteine – und alle schauen sich sehr ähnlich. Gibt man auf einer bekannten Internet-Handelsplattform den Begriff „Türkis“ oder englisch „Turquoise“ ein, findet man manchmal bis zu 70.000 Angebote. Klickt man sich durch die Trefferliste, fällt sofort der Begriff „Howlith“ („Howlite“) als Ersatzstein auf, aber auch „Magnesit“ („Magnesite“) und „rekonstruierter Türkis“ („reconstituted Turquoise“). In Verbindung mit grünen Türkisen findet man die Begriffe „Variscit“ („Variscite“) und „Gaspéit“ („Gaspeite“) [1], [2].

Als Methode der Wahl, um Gewissheit über die wahre Natur des Steines zu erhalten, werden das Zerschneiden des Steines oder eine zerstörungsfreie, aber kostenintensive Röntgendiffraktionsuntersuchung angeführt [2], [3].

Ich möchte heute eine von unserem Labor angewandte, zerstörungsfreie und kostengünstige Methode am Beispiel türkisfarbener Steine vorstellen.

### Die Reflexions-FTIR-Spektroskopie

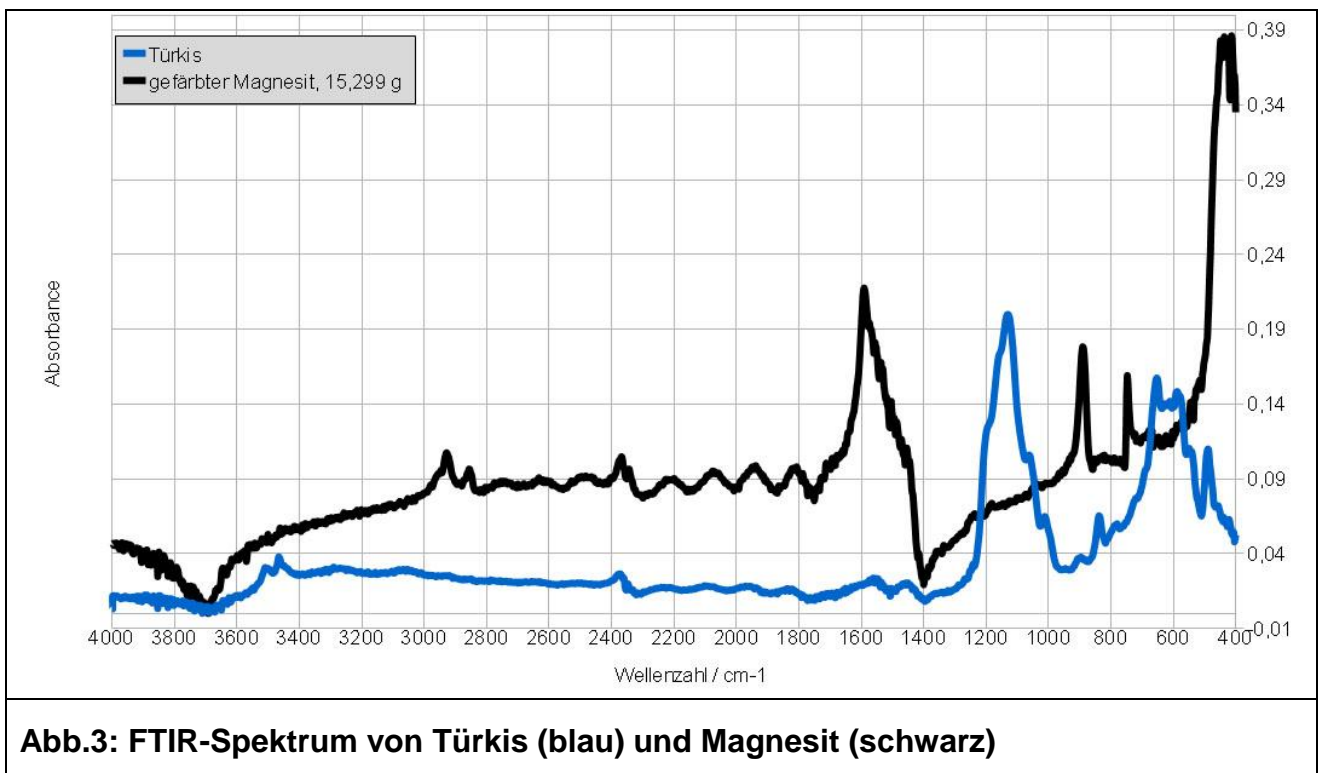
In der IR-Spektroskopie (IR steht für Infrarot, FT für Fourier-Transformation) wird jener Teil des elektromagnetischen Wellenlängenbereiches ausgenutzt, der auf das Rot im sichtbaren Bereich folgt. Die absorbierte Infrarot- oder Wärmestrahlung bewirkt die Anregung von Molekülschwingungen, wobei sich das Dipolmoment dieser Moleküle ändern muss. Am Beispiel des linear gebauten Kohlenstoffdioxides  $\text{CO}_2$  gibt es drei mögliche Schwingungen:

	Dipolmoment $\mu$ ändert sich NICHT → IR-inaktiv
	Dipolmoment $\mu$ ändert sich → IR-aktiv ( $2349 \text{ cm}^{-1}$ )
	Dipolmoment ändert sich → IR-aktiv ( $667 \text{ cm}^{-1}$ )



Im IR-Spektrum werden also zwei Banden erwartet (2) und (3), welche im Experiment bestätigt werden. Ganz allgemein kann man sagen, dass die Anzahl der möglichen Schwingungen von der Anzahl der im Molekül vorhandenen Atome abhängt – je mehr Atome umso mehr mögliche Schwingungen. Die Lage der Banden im Spektrum ist in erster Linie abhängig von der Masse der schwingenden Atome und von der Stärke der Bindung. In zweiter Linie wirkt sich auch die unmittelbare Nachbarschaft (Ionen, Kristallgitter,...) auf die Lage der Banden aus.


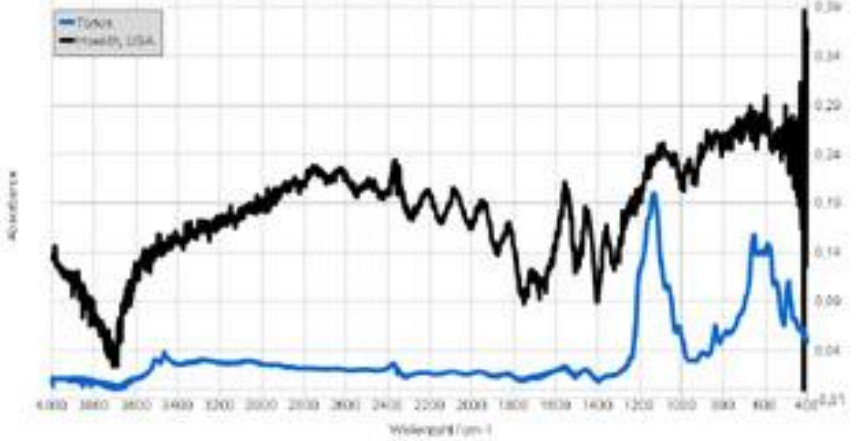
Magnesit (Mg-Carbonat) mit dem  $\text{CO}_3^{2-}$ -Ion sollte demnach ein einfacheres Spektrum zeigen als der Türkis mit der komplexen Summenformel  $\text{CuAl}_6(\text{PO}_4)_4(\text{OH})_8 \times 4 \text{H}_2\text{O}$ .



In der Tat sind beide IR-Spektren verschieden. Der gefärbte Magnesit besitzt ein völlig anderes FTIR-Spektrum als der Türkis.



Ebenso unterscheidet sich das FTIR-Spektrum eines Howliths mit der Summenformel  $\text{Ca}_2\text{B}_5\text{SiO}_9(\text{OH})_5$  sowohl vom Magnesit  $\text{MgCO}_3$  als auch vom Türkis  $\text{CuAl}_6(\text{PO}_4)_4(\text{OH})_8 \times 4 \text{H}_2\text{O}$ .

	
<b>Abb.4: Howlith</b>	<b>Abb.5: FTIR-Spektrum von Türkis (blau) und Howlith (schwarz)</b>


Als hilfreich erwies sich die (noch) frei zugängliche und kostenlose Datenbank des RRUFF-Project [4], wo zahlreiche Mineralien und ihre Spektren (FTIR, Raman, x-ray,...) gespeichert sind und als Vergleich herangezogen werden können.

Die Aufnahme eines Spektrums ist relativ einfach. Nach der Bestimmung des Hintergrundspektrums (background) kann der Stein ohne Probenvorbereitung direkt vermessen werden. Das Rohspektrum wird nach einem Algorithmus von Kramers und Kronig korrigiert, um es so mit anderen IR-Spektren nach anderen Aufnahmetechniken (Durchlicht, ATR-FTIR,...) besser vergleichbar zu machen. Es kann anschließend direkt ausgedruckt werden oder es wird zur besseren Archivierung in Prüfbefunde und Gutachten eingebunden und abgespeichert.

Neben losen Steinen können auch bereits in Schmuckgegenständen verarbeitete Steine vermessen werden, wodurch gerade bei undurchsichtigen und gefassten Steinen die gemmologischen Untersuchungen um eine weitere Methode ergänzt werden können.


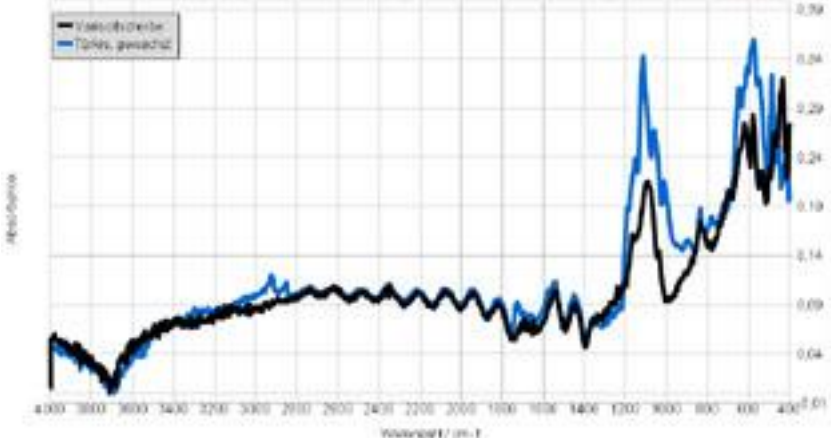
Als weiteres Beispiel möchte ich über die Ergebnisse der Untersuchung eines grünen Türkis, angebliche Herkunft China, berichten.

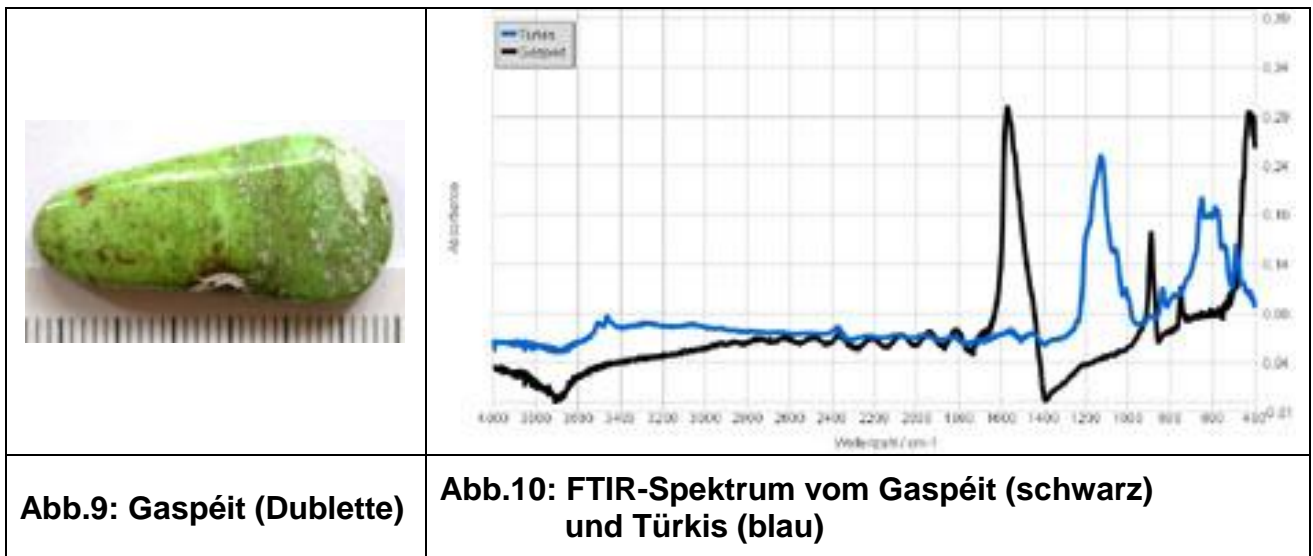


	Gemmologische Daten	
	Masse [g]	0,4819
	Dichte [g/cm <sup>3</sup> ]	2,05
	RI (Spotmethode)	~1,50 – 1,55 ±
	Einschlüsse	hellbraune Aderung, kein Pyrit, Risse, die wie abgedeckt ausschauen
	Chelsea-Filter	grünliches Blau, mittelstark
<b>Abb.6: grüner Türkis</b>	UV	inert

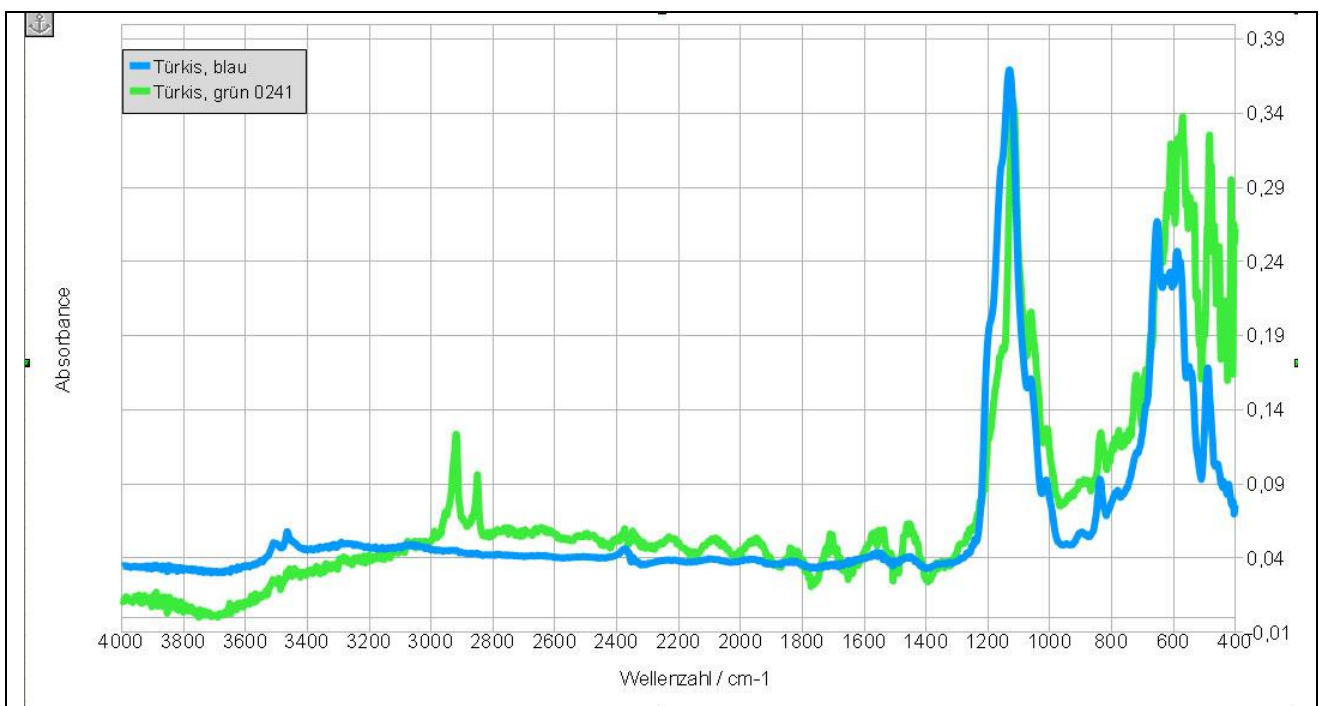
Besonders auffallend ist die geringe Dichte 2,05 g/cm<sup>3</sup> gegenüber den Literaturwerten von 2,60 bis 2,80 g/cm<sup>3</sup> [5], sowie der geringe Brechungsindex von ~1,50 (Spotmethode) gegenüber 1,61 bis 1,65 [6].

Als Vergleich wurden die FTIR-Spektren eines Variscits und eines Gaspéits aufgenommen. Da Gaspéit (NiCO<sub>3</sub>) ebenso ein Carbonat ist wie Magnesit (MgCO<sub>3</sub>), weisen diese beiden Steine auch ein sehr ähnliches FTIR-Spektrum auf. Die selbe Überlegung gilt für Türkis und Variscit: Beide sind Phosphate und die FTIR-Spektren sind sich wieder sehr ähnlich.

	
<b>Abb.7: Variscit</b>	<b>Abb.8: FTIR-Spektrum vom Variscit (schwarz) und Türkis - gewachst (blau)</b>



Ergebnisse der FTIR-spektroskopischen Untersuchung des grünen Türkis:



**Abb.11: FTIR-Spektrum eines blauen Türkis (blau) und des grünen Türkis (grün)**

Das FTIR-Spektrum ist eindeutig dem Türkis zuzuordnen. Banden bei  $2800-3000\text{ cm}^{-1}$  und  $1740\text{ cm}^{-1}$  weisen jedoch auf das Vorhandensein eines organischen Stoffes hin. Der grüne Türkis ist mit sehr viel Kunstharz (wahrscheinlich Polyester) imprägniert worden. Diese Kunstharzimprägnierung ist auch verantwortlich für die geringe Dichte. Im FTIR-Spektrum des gefärbten Magnesits (Abb.3) und des gewachsenen Türkis (Abb.8) sind diese Banden weniger stark. Es liegt hier eine Oberflächenbehandlung vor.



## Zusammenfassung

Mit der FTIR-Spektroskopie können zerstörungsfrei und kostengünstig Informationen über Edelsteine gewonnen werden. Es ist möglich zwischen verschiedenen Ersatzsteinen zu unterscheiden und Behandlungen mit Kunststoff zu erkennen, die nach CIBJO auszeichnungspflichtig sind [7].

## Literatur und Quellenverzeichnis

- [1] L. Rössler, Ö.Gem.G. Kurzinfo Nr.18,(11/2006).
- [2] L. Rössler, Ö.Gem.G. Kurzinfo Nr.23, (3/2009).
- [3] L. Rössler, G. Breisach, Undurchsichtige und durchscheinende Edel- und Schmucksteine, WIFI-Linz, (2004).
- [4] RRUFF-Datenbank, <http://rruff.info/>, (geöffnet April 2010 bis September 2010).
- [5] W. F. Eppler, Praktische Gemmologie, Rühle-Diebener-Verlag, 6.Auflage, (1999).
- [6] Handbook of Mineralogy,  
<http://www.handbookofmineralogy.org/pdfs/turquoise.pdf>, (geöffnet 30.08.2010).
- [7] CIBJO, The Gemstone Book,  
[http://download.cibjo.org/Gemstone\\_Book\\_2010.pdf](http://download.cibjo.org/Gemstone_Book_2010.pdf), (geöffnet 30.08.2010).

Dieser Artikel wurde auch in den Ö.Gem.G. Gemmo News 28, 10/2010 veröffentlicht,  
[www.gemmologie.at/mediaCache/A4\\_Gemmo\\_News\\_Nr\\_28\\_301110\\_v2\\_557543.pdf](http://www.gemmologie.at/mediaCache/A4_Gemmo_News_Nr_28_301110_v2_557543.pdf)

### Kontakt:

Dr. Siegfried Schmuck  
Analytisches Labor Schmuck, Kerscheckstraße 9, A-8302 Vasoldsberg  
[laborschmuck@aon.at](mailto:laborschmuck@aon.at) – <http://als.8ung.at>