

Die Frankenwälder Querzone:

**Entwicklung
einer
thermischen Anomalie
im
Saxothuringikum**

Inaugural-Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften
der Justus-Liebig-Universität Gießen
(Fachbereich Geowissenschaften und Geographie)

vorgelegt von

Volker Kunert

Gießen, Juni 1999

1. Berichterstatter: Prof. Dr. W. Franke

2. Berichterstatter: Privatdozent Dr. L. N. Warr

Tag der mündlichen Prüfung:

ZUSAMMENFASSUNG

In der Frankenhälder Querzone (FQZ) kann in anschaulicher Weise das metamorphe Muster aus einer komplizierten Überlagerung von regionaler Metamorphose und einer lokalen Wärmeflußanomalie gezeigt und verschiedenen geologischen Ereignissen zugeordnet werden.

Die FQZ ist eine thermische Anomalie in den saxothuringischen Varisciden, die erst seit der variscischen Deformation nachweisbar ist. Als NW-SE gerichtete asymmetrische Horstzone quert sie die tektonischen Großstrukturen der saxothuringischen Platte. Während der variscischen Deformation und Metamorphose bildete das Gebiet das Vorland zur aktiven, sich nach NW bewegenden Platte des Teplá-Barrandiums im SE. Die Verkipfung und Heraushebung der FQZ wird einem postvariscischen Stadium zugeordnet. Dies belegen Metamorphoseabschätzungen in den pelitischen Gesteinen der unterkarbonischen Grauwacken-Pelit-Wechselagerungen in Verbindung mit struktureologischen Beobachtungen. Die Metamorphoseabschätzungen basieren auf Illit- und Chloritkristallinitäts-Untersuchungen sowie, mit Einschränkungen, auf Vitritreflexions-Messungen.

Vom SW-Rand des Unterkarbons der Teuschnitzer und Nailaer Mulde kann in Richtung auf die FQZ im NE eine deutliche Zunahme der thermischen Metamorphose von hochdiagenetischen auf epizonale Bedingungen beobachtet werden. Devonische Metabasite im Liegenden des Kulms zeigen in der FQZ lokal Grünschieferfazies an (BRAND, 1980). In der FQZ reagierten die Gesteine durch die erhöhten Temperaturen duktil, so daß sie während der variscischen Deformation stärker tektonisch verformt werden konnten als in den kälteren Nachbargebieten. Anstelle der üblichen Bruchschieferung und des aufrechten Faltenbaus wurden eine penetrative Dachschieferung und liegende Falten ausgebildet, deren Faltenachsenebenen subparallel zu den Schieferungsflächen orientiert sind (FRANKE, 1984; SCHROEDER, 1958). Daher konzentrieren sich die thüringischen Dachschiefergruben und -tagebaue auf den Bereich der FQZ.

An der NE-Flanke der FQZ und in den sich im NE anschließenden Gebieten erreichte die thermische Metamorphose die höhere Anchi- bis Epizone. Im NW-Teil dieser nordöstlichen Gebiete, in der Ziegenrücker Mulde, sind zwar hohe Temperaturen, jedoch keine stärkere Verformung der Gesteine zu erkennen. Dagegen ist im SE-Teil (Greizer Querzone, östliche Mehltheurer Mulde), wie in der FQZ die stärkere Metamorphose mit einem erhöhten Strain gekoppelt.

Die Metamorphosedrucke wurden mit Hilfe des Röntgendiffraktometers mit dem druckabhängigen $6d_{(33-1,060)}$ -Parameter des Illit-Kristallgitters abgeschätzt. Die Druckabschätzungen

zeigen nach der Klassifikation von GUIDOTTI & SASSI (1986), für Temperaturen unter 300 °C, für das gesamte Arbeitsgebiet Drucke ≤ 2 kbar an. Aus der einheitlichen Versenkung der unterkarbonischen Pelite läßt sich ein Anstieg der Isothermen in der FQZ und den östlich anschließenden Gebieten ableiten.

Das Hochtemperaturereignis überdauerte die variscische Deformationsphase. Das belegen eine Reihe posttektonischer Granite in der FQZ. In der Tiefe läßt eine deutliche negative Schwereanomalie auf die Existenz eines größeren granitischen Körpers schließen, dessen Oberfläche von SEHM et al. (1989) nach geophysikalischen Befunden modelliert wurde. Die Kontaktwirkung dieses Modellgranites auf das unterkarbonische Nebengestein wurde von Dr. Georg Kosakowski am Institut für Geowissenschaftliche-Gemeinschaftsaufgaben (GGA) in Hannover mit Hilfe einer numerischen 2D-Modellierung für ein Profil durch den SW-Flügel der FQZ mit variablen geologischen und geophysikalischen Parametern berechnet. Die Temperaturergebnisse aus den Modellen wurden mit den Temperaturabschätzungen aus den Probenanalysen verglichen. Hierzu wurde, auf Literaturdaten basierend, eine empirische Beziehung zwischen Illitkristallinität und Temperatur bestimmt. Die Temperaturen wurden in diesen Arbeiten mit Phasenanalysen, Smektit-Illit-Umwandlungen und anderen temperaturabhängigen Parametern abgeschätzt. Für den SW-Flügel der FQZ, in der Teuschnitzer und Nailaer Mulde, wurde die beste Anpassung an die Temperaturabschätzung für die folgenden Bedingungen erreicht:

- eine Granitintrusion mit einer Oberfläche, die nach NE und SW abtaucht und in 5 km Tiefe eine maximale NE-SW-Ausdehnung von 20 km erreicht, entsprechend dem Modell von SEHM et al. (1989);
- eine Intrusionstemperatur von 700 °C und eine Gesteinsüberdeckung von 6,5 km über dem Dach des Plutons;
- ein überwiegend konduktiv gesteuerter Wärmetransport;
- eine asymmetrische Horstzone, die erst nach der Intrusion verkippt wurde.

Da es in der FQZ keine Hinweise auf einen fluidgesteuerten Wärmetransport während der variscischen Deformation gibt und eine tiefere Versenkung der Gesteine ausgeschlossen werden kann, wird der Granitkörper im Untergrund der FQZ als eine größtenteils syntektonische Intrusion interpretiert.

In der Ziegenrucker Mulde (NW-Teil des NE-Flügels der FQZ) reicht die Kontaktwirkung des Modellgranites nicht aus, die nach NE anhaltend erhöhte Metamorphose zu erklären. Hier muß aufgrund einer fehlenden stärkeren Verformung der Gesteine im E-Teil der Mulde eine zusätzliche posttektonische Wärmequelle gefordert werden. Als Wärmequelle wird der von SEHM et al. (1989) modellierte Granit im Untergrund von Auma diskutiert.

In der Greizer Querzone erinnert die Kombination von erhöhter Metamorphose und intensiver Deformation an die FQZ. Es gibt in den unterkarbonischen Tonschiefern im Gegensatz zur FQZ jedoch keine Hinweise auf eine posttektonische Kontaktmetamorphose. Die Interpretation des Schwerebildes von SEHM et al. (1989) zeigt auch im Untergrund der Greizer Querzone einen Granitkörper, der im Falle einer syntektonischen Intrusion als syndeformative Wärmequelle in Frage kommt.

DANKSAGUNG

Die vorliegende Arbeit wurde bei Prof. Dr. W. Franke am Institut für Geowissenschaften und Lithosphärenforschung angefertigt. Ihm gilt mein Dank für die Anregung zu dieser Arbeit, das stete Interesse am Fortschritt des Projektes und die immerwährende Diskussionsbereitschaft. Er hat es mir während der letzten fünf Jahre ermöglicht, zunächst im Rahmen eines DFG-Projektes und dann als wissenschaftlicher Mitarbeiter finanziell abgesichert am Institut diese Dissertation durchzuführen. Auch möchte ich mich bei ihm für das offene und freundschaftliche Arbeitsverhältnis bedanken, das zu einer angenehmen und konstruktiven Arbeitsatmosphäre beitrug.

Herrn Dr. C. Clauser vom GGA in Hannover gilt ebenfalls mein bester Dank für das Interesse an einem Kooperationsprojekt zur thermischen Modellierung der Frankenwälder Querzone. Er hat mit dem Computerprogramm, der Manpower, den finanziellen Mitteln und dem starken eigenen Interesse dazu beigetragen, daß dieser Teil des Projektes erfolgreich durchgeführt werden konnte.

Bei Dr. Clausers Manpower, Dr. Georg Kosakowski, möchte ich mich besonders bedanken. Es ist nicht einfach, wenn die Weltanschauungen eines Geophysikers und eines Geologen aufeinander treffen. Springt jedoch der Funke über, kann sich daraus eine echte Freundschaft entwickeln.

Stephan Herlitzius möchte ich ausdrücklich dafür danken, daß er mir seine noch unveröffentlichten Vitritreflexions-Meßergebnisse aus dem W-Teil der FQZ zur Verfügung gestellt hat.

Auch die DFG hat einen wichtigen Beitrag zum Gelingen dieser Dissertation geleistet, indem sie das Projekt großzügig finanziell unterstützt hat (Projekt FR 668 / 15-1 / 2).

Dr. Rainer Petschick vom Geologisch-Paläontologischen Institut in Frankfurt ist eine Person, bei der ich mich ganz besonders bedanken muß. Er half mir mit seinen Ratschlägen und seiner steten Diskussionsbereitschaft die Methodik zur Illitkristallinität am IGL dem modernen Standard anzugleichen, und, meine Dissertation in großen Schritten voranzutreiben. Auch stellte er mir mit seinem RDA-Analyseprogramm MacDiff eine Software zur Verfügung, die fast keine Wünsche mehr offen ließ.

Herrn Dr. „Ecki“ Stein gilt ebenfalls mein Dank. Mit seinen guten regionalgeologischen und strukturgeologischen Kenntnissen war er für mich ein wichtiger und konstruktiver Diskussionspartner (und mehr).

Janina Schastok, Herbert Kirch und Frau B. Becker-Lins möchte ich für ihre technischen Hilfestellungen danken.

Bei meinen beiden „Hiwis“ Stefan Röhl und Brigitte Rotthaus möchte ich mich für ihre tatkräftige Unterstützung bedanken, die mit einem Diplomthema „belohnt“ wurden. Hier seien auch Dr. Wolfgang Dörr, Dr. Jürgen Streit und Prof. Dr. Mark Handy erwähnt, die mir des öfteren nicht nur fachlich zur Seite standen sowie Susanne Palm, die mich in guten wie in schlechten Zeiten als Zimmergenosse ertragen mußte. Dem „Rest“ der Erdgeschoßmannschaft und den Rittern der Kaffeerunde möchte ich für die angenehme Zeit am Institut danken.

Die Crew des ersten Stocks soll hier ebenfalls erwähnt werden. Herrn Prof. Dr. E. Hinze gilt mein Dank für die stets freundliche und unbürokratische Bereitstellung des Röntgen-diffraktometers. Unserem „C 5“ Alexander Seifert habe ich zu verdanken, daß dieser Röntgen-diffraktomter meinen Anweisungen gefolgt ist, und Marianne Grünhäuser möchte ich für die unkomplizierte Hilfe bei Laborfragen danken.

Den größten Dank schulde ich aber meiner Freundin Stephanie Pöttgens, die mich trotz der Erfahrungen, die sie während meiner Diplomarbeit mit mir sammeln konnte, mich auch in diesem Projekt wieder tatkräftig unterstützte.

INHALTSVERZEICHNIS

| | | |
|----------|---|-----------|
| | ZUSAMMENFASSUNG | I |
| | DANKSAGUNG | IV |
| | INHALTSVERZEICHNIS | VI |
| | EINLEITUNG | 1 |
| 1 | GEOLOGISCHER RAHMEN | 3 |
| 1.1 | Plattentektonisches Konzept | 3 |
| 1.2 | Saxothuringikum | 7 |
| 1.2.1 | Lithostratigraphische Entwicklung | 7 |
| 1.2.2 | Deformation und Metamorphose | 10 |
| 1.2.2.1 | Großräumige Entwicklung | 10 |
| 1.2.2.2 | Tektonometamorphe Anomalien | 14 |
| 2 | METHODIK | 19 |
| 2.1 | Illitkristallinität (IK) | 19 |
| 2.1.1 | Definition der Illitkristallinität | 19 |
| 2.1.2 | Aufbau der Tonminerale und Glimmer | 19 |
| 2.1.3 | Die Umwandlung von Smektit in Illit / Muskovit | 23 |
| 2.1.4 | Der Einfluß geologischer Faktoren auf die Illitkristallinität | 25 |
| 2.1.5 | Bestimmung der Illitkristallinität mit dem Röntgen- diffraktometer (RDA) | 26 |
| 2.1.5.1 | Weaver-Index („sharpness ratio“) | 26 |
| 2.1.5.2 | Kübler-Index (Halbhöhenbreite = FWHM) | 27 |
| 2.1.5.3 | Weber-Index (relative Halbhöhenbreite) | 27 |
| 2.1.5.4 | Integralbreite | 28 |
| 2.1.6 | Eichung der Illitkristallinität | 28 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 2.1.6.1 | „Frey“-Standard | 29 |
| 2.1.6.2 | Crystallinity-Index-Standard | 30 |
| 2.1.7 | Probenauswahl | 32 |
| 2.1.8 | Aufbereitung der Gesteinsproben | 34 |
| 2.1.8.1 | Anfertigung der Meßpräparate zur RDA-Messung | 35 |
| 2.1.9 | Apparative Bedingungen und Meßverfahren | 36 |
| 2.1.9.1 | Interne Standards | 36 |
| 2.1.10 | Phasenanalyse | 38 |
| 2.1.10.1 | Qualitative Phasenanalyse | 38 |
| 2.1.10.2 | Halbquantitative Phasenanalyse | 43 |
| 2.1.11 | Reproduzierbarkeit der Illitkristallinitäts-Messungen | 44 |
| 2.1.11.1 | Fehler in der Probenaufbereitung | 44 |
| 2.1.11.2 | Variationen am Röntgendiffraktometer | 50 |
| 2.1.11.3 | Geologisch Varianz | 51 |
| 2.1.11.4 | Ergebnisse der Varianz-Untersuchungen | 52 |
| 2.1.12 | Möglichkeiten und Grenzen der Methode | 53 |
| 2.2 | Chloritkristallinität (CK) | 56 |
| 2.2.1 | Reproduzierbarkeit der Chloritkristallinitäts-Messungen | 57 |
| 2.2.2 | Vergleich zwischen Chlorit- und Illitkristallinität | 60 |
| 2.3 | $6d_{(33-1,060)}$ -Geobarometer | 63 |
| 2.4 | Inkohlung | 66 |
| 2.4.1 | Vitrinitreflexion | 66 |
| 2.4.2 | Probenahme, Aufbereitung und Messung (S. Herlitzius) | 68 |
| 3 | ERGEBNISSE | 69 |
| 3.1 | Illit- und Chloritkristallinität | 69 |
| 3.2 | Geobarometrischen Abschätzungen $6d_{(33-1,060)}$ | 74 |
| 3.3 | Inkohlungsmessungen | 78 |
| 3.4 | Diskussion der paläo-thermobarometrischen Ergebnisse | 80 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 4 | MODELLRECHNUNGEN | 87 |
| 4.1 | Umwandlung der Illitkristallinität in Paläotemperatur | 87 |
| 4.2 | Modellierung der thermischen Aufheizung von Kontaktgestein durch einen abkühlenden Intrusionskörper (Modellrechnungen von G. Kosakowski) | 91 |
| 4.2.1 | Modellgeometrie und Modellparameter | 91 |
| 4.3 | Vergleich der Modelltemperaturen mit den Temperaturabschätzungen aus der Teuschnitzer und Nailaer Mulde | 98 |
| 4.4 | Vergleich der Modelltemperaturen mit den Temperaturabschätzungen aus der Ziegenrucker und Mehltheuerer Mulde | 104 |
| 4.5 | Vergleich der modellierten Inkohlungswerte (EASY % R ₀) mit den % R ₀ -Meßwerten für das NE SW-Profil | 106 |
| 4.6 | Diskussion der Ergebnisse aus dem Vergleich der Modellierungen mit den Meßwerten | 109 |
| 5 | SCHLUSSFOLGERUNGEN | 111 |
| | LITERATURVERZEICHNIS | 113 |
| | ANHANG | 1 |

EINLEITUNG

In den mitteleuropäischen Varisciden westlich der Elbezone streichen die übergeordneten tektonischen Strukturen NE / SW. Diese werden von NW / SE-gerichteten Querstrukturen gekreuzt, die vor allem durch spät- bis posttektonische Granitintrusionen in ein hohes Krustenstockwerk gekennzeichnet sind. Dazu gehören z.B. der Eibenstöcker Granit, der Leuchtenberger-Falkenberger Granit, der die Suture Saxothuringikum / Moldanubikum schneidet, sowie die Granite im Oberpfälzer Wald, im Bayerischen Wald und im Mühlviertel. Die Granite reflektieren möglicherweise eine Extension in einem NW / SE-gerichteten horizontalen Streiffeld (FRANKE et al., 1995a).

Nordwestlich des Münchberger Deckenstapels ist ein ähnliches Element, die Frankenwälder Querzone (FQZ), aufgeschlossen. Sie ist eine NW / SE-streichende Horstzone (SCHWAN, 1968), die durch eine relativ hohe, bis in die Grünschieferfazies reichende syntektonische Metamorphoseanomalie gekennzeichnet ist. In der FQZ erreichen die unterkarbonischen Tonschiefer bei einer mehrphasigen Deformation Dachschieferqualität (SCHROEDER, 1965; FRANKE 1984) und eine erhöhte Illitkristallinität (FRANKE, 1984), während in den schwächermetamorphen Nachbargebieten nur eine Bruchschieferung entwickelt ist. Indexminerale in den devonischen Metabasiten im Südteil der FQZ bilden grünschieferfazielle syntektonische Metamorphosebedingungen ab (BRAND, 1980). In die FQZ intrudierten posttektonische Granite (Thüringer Granitlinie), die sie kontaktmetamorph überprägten.

Ziel der Arbeit war es, die von FRANKE (1984) im bayerischen Westteil der FQZ begonnene Metamorphosekarte um den thüringischen Ostteil zu ergänzen, die Form der Metamorphoseanomalie zu rekonstruieren und damit einen Hinweis auf ihre Ursache zu erhalten. Dabei sollten die Messungen von FRANKE (1984) methodisch aktualisiert wiederholt werden.

Die FQZ sollte als kleinmaßstäbliches Fallbeispiel für die Niederdruck-Hochtemperatur-Metamorphose am SW-Rand der Böhmisches Masse dienen, die ihren Höhepunkt während der Spätphase der variscischen Kollision von moldanubischer und saxothuringischer Kruste hatte und zu einer Krustenverdickung führte (FRANKE et al., 1995a). Die Niederdruck-Hochtemperatur-Metamorphose wird maßgeblich auf einen erhöhten geothermischen Gradienten zurückgeführt, der über die variscische Deformation hinaus bis ins Perm anhielt. Ihm werden auch die voluminösen Granitintrusionen im späten Unterkarbon und Namur zugeordnet, die aber meist erst nach der duktilen Deformation des Wirtsgesteins erfolgten (EISBACHER et al., 1989; KROHE, 1992; FRANKE et al., 1995a). Als Wärmequelle in dieser Phase der Orogenese kommt eine vermehrte radiogene Wärmeproduktion in der verdickten kontinentalen Kruste (GERDES et al., 1996; O'BRIEN, 1997, 1999) und die

Intrusion von Mantelschmelzen in die Unterkruste bzw. in die Krustenbasis in Betracht (BEHRMANN et al., 1994).

Zur Abschätzung der Metamorphosebedingungen wurden im Arbeitsgebiet Illit- und Chloritkristallinitätsuntersuchungen an unterkarbonischen Peliten durchgeführt. Zusätzlich flossen die Vitrinitreflexions-Meßergebnisse aus den unterkarbonischen Tonschiefern des Frankenswaldes ein, die von Dipl.-Geol. Stephan Herlitzius (Rheinberg) durchgeführt und mir freundlicherweise zur Verfügung gestellt wurden. Diese wurden mit den Illitkristallinitätswerten und mit den Ergebnissen aus der EASY % R0-Modellierung verglichen und diskutiert. Zur Druckabschätzung in den unterkarbonischen Peliten wurde der Illit / Muskovit-Kristallgitterparameter $6d_{(33-1,060)}$ von GUIDOTTI & SASSI (1986) verwendet.

Um den möglichen Einfluß der in die FQZ intrudierten Granite auf das Metamorphosemuster im Arbeitsgebiet abschätzen zu können, wurde von Dr. Georg Kosakowski am Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA) in Hannover mit Hilfe einer numerischen 2D-Modellierung die maximal mögliche Temperatur berechnet, die im unterkarbonischen Nebengestein durch die Kontaktwirkung des Plutons erreicht werden kann. Als geometrische Grundlage diente die von SEHM et al. (1989) auf der Basis von Bouguer Schweremessungen und Bohrlochuntersuchungen modellierte Granitoberfläche im Untergrund der FQZ. Die Berechnungen wurden mit dem Programm SHEMAT (CLAUSER, 1988; CLAUSER & VILLINGER, 1990) durchgeführt. Da in der FQZ keine Anzeichen für einen bedeutenden Wärmetransport über Kluftsysteme zu finden sind, wurde für die Modellierung ein quasi-poröser Rechenansatz verwendet. Das Programm erlaubt die Berechnung des instationären, gekoppelten Wärme- und Fluidtransportes in porösen Medien mit anisotropen und temperaturabhängigen Parametern. Die geologischen Rahmenbedingungen und Variationsmöglichkeiten für die Modellberechnung auf der Basis der geologischen Daten wurden von mir vorgegeben. Die 2D-Modellierung wurde für die Teuschnitzer Mulde im norwestlichen Teil des Arbeitsgebietes gerechnet, da dort die Metamorphosekontraste am stärksten entwickelt sind.

Die modellierten Temperaturen wurden anschließend mit den Temperaturen verglichen, die aus den Illitkristallinitätswerten abgeschätzt wurden. Diese Abschätzung basiert auf der empirischen Auswertung von Literaturdaten. Das Modell mit der größten Annäherung der berechneten Temperaturen an die abgeschätzten Temperaturen ergab die bestmögliche Einschränkung der Variationsmöglichkeiten der geologischen und geophysikalischen Rahmenbedingungen. Aufgrund der symmetrischen Oberfläche des Granits konnten die Modellergebnisse mit Einschränkungen auf die anderen Bereiche des Arbeitsgebietes übertragen (Ziegenrucker und Mehltheuerer Mulde) und mit den dortigen Temperaturabschätzungen verglichen werden.

1 GEOLOGISCHER RAHMEN

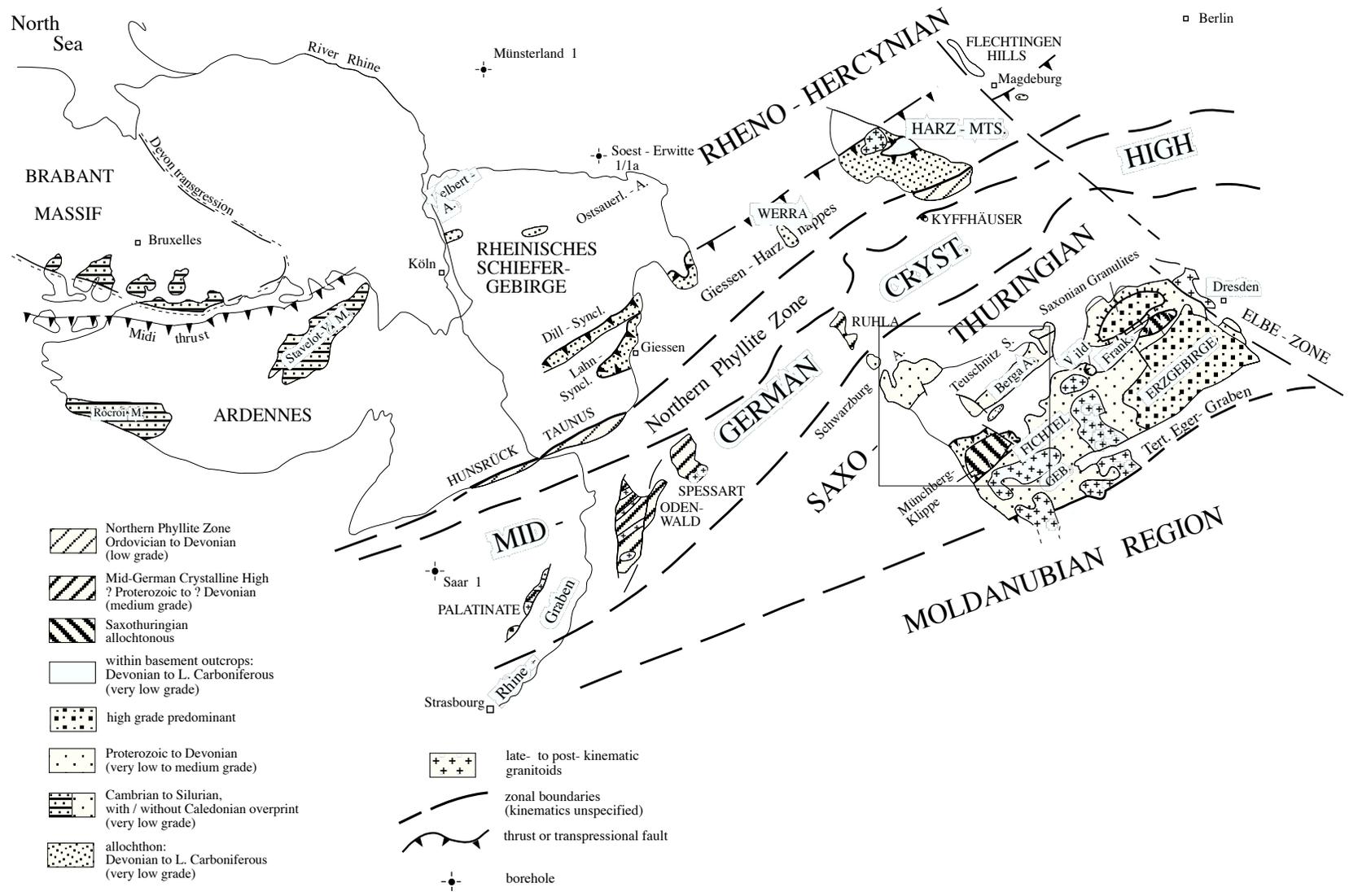
1.1 Plattentektonisches Konzept

Der zentraleuropäische Variscische Falteingürtel wird seit KOSSMAT (1927), SCHOLTZ (1930) und SUESS (1912) von NW nach SE in folgende Zonen unterteilt (Abb. 1): das Rhenohercynikum als Externzone des Orogens, die Nördliche Phyllitzone, das Saxothuringikum mit seinem nordwestlichen Kristallingürtel (Mitteldeutsche Kristallinschwelle), die schwachmetamorphen Sedimente des Saxothuringischen Beckens und die zentralvariscische Kristallzone (Moldanubikum). Für die Entstehung dieses Gebirgsgürtels wurde u. a. von TAIT et al. (1997) auf der Grundlage von paläomagnetischen, paläobiogeographischen und von FRANKE et al. (1995a) auf der Grundlage geologischer Untersuchungen ein plattentektonisches Konzept entwickelt, das hier kurz skizziert werden soll.

Der europäische Teil des Variscischen Falteingürtels besteht aus einer Kollage von Terranes, die ursprünglich zu Gondwana gehörten. Im frühen Paläozoikum lösten sie sich von der N-Grenze Gondwanas und bewegten sich in Richtung N, um mit den nördlich gelegenen Kontinenten Laurentia und Baltika zu kollidieren (VAN DER VOO, 1979). Die Terranes bildeten zwei Mikroplatten Avalonia und Armorika (TRENCH & TORSVIK, 1991), die durch ihr cadomisches Basement charakterisiert sind. Armorika wird als Terrane-Vergesellschaftung angesehen, die ursprünglich ein Teil Nordafrikas war, während Avalonia möglicherweise Südamerika angehörte. Die Grenze zwischen Avalonia (N) und Armorika (S) wird heute an den S-Rand der Nördlichen Phyllitzone gelegt (ANDERLE et al. 1995; FRANKE & ONKEN, 1995). Armorika besteht aus einer Vergesellschaftung von Terranes mit einer ähnlichen Driftgeschichte und entspricht nach TAIT et al. (1997) den europäischen Varisciden südlich der Rhenohercynischen Zone.

Paläomagnetische Daten, der Beginn des kalkalkalinen Vulkanismus in Avalonia im Tremadoc und die endemischen Faunen zeigen an, daß sich im frühen Ordovizium Avalonia in Richtung N von Gondwana entfernte, das über dem Südpol lag (Abb. 2a). Während im NE der Tornquist Ozean nach S subduziert wurde, bildete sich zwischen Avalonia und Gondwana der Rheische Ozean aus (MC KERROW et al. 1991). Im Ordovizium driftete Armorika ebenfalls in Richtung N. Zwischen Armorika und Gondwana entwickelte sich als Folge der Massif Central- / Moldanubikum-Ozean (MATTE et al., 1990) (Abb. 2b). Im unteren Silur kollidierte Avalonia mit Baltika, und der Japetus Ozean zwischen Laurentia und Baltika schrumpfte.

Abb. 1: Geologische Übersichtskarte der europäischen Varisciden (aus FRANKKE, 1995a). Der Rahmen in der Karte zeigt das Arbeitsgebiet an.

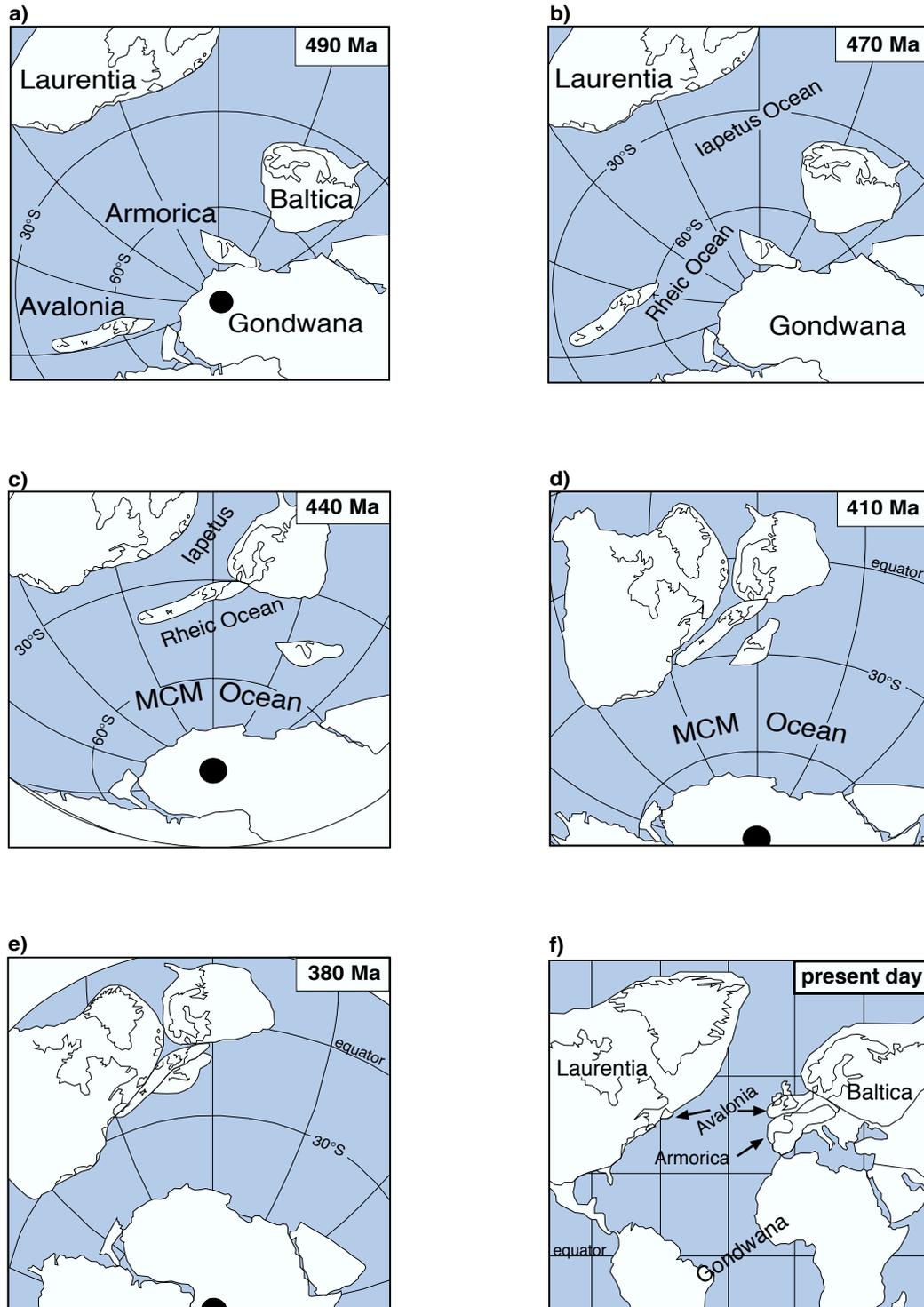


Die Schließung des Japetus erfolgte scherenartig. In Skandinavien ist sie schon im mittleren Silur belegt (ROBERTS, 1988), in den Appalachen erst im Devon (MC KERROW et al., 1991). Im oberen Silur schloß sich der Rheische Ozean (Abb. 2d + e; ANDERLE et al., 1995; FRANKE & ONKEN, 1995; FRANKE et al., 1995a). Im Unterdevon wurde diese Suture jedoch wieder geöffnet, wobei ein relativ enger Riftbogen, das Rhenohertzynische Becken, gebildet wurde (FRANKE & ONKEN, 1995). Es dünnte sich in seinem Zentrum so weit aus, daß eine ozeanische Kruste mit MORB-Typ-Basalten entstehen konnte. Während dieser Zeit (vor 380 Ma) drehte sich das Teplá-Barrandium um 140° gegen den Uhrzeigersinn, noch vor der Konsolidierung mit dem Saxothuringikum im späten Devon. Im Gegensatz zum Teplá-Barrandium sind im Saxothuringikum keine Anzeichen einer solchen Rotation zu erkennen (KÖSSLER et al., 1996), so daß die saxothuringische kontinentale Kruste, auf der das Arbeitsgebiet liegt, als separate Mikroplatte betrachtet wird. Ihre Bewegungsgeschichte gleicht jedoch der des Teplá-Barrandiums. Das Rhenohertzynische Becken wurde zwischen dem Oberdevon und Unterkarbon geschlossen (FRANKE & ENGEL, 1986).

Es ist noch unsicher, ob in dem Zeitraum vom mittleren bis oberen Devon zwischen den nördlichen Kontinenten (Old-Red-Kontinent) und Gondwana ein Ozean existierte. Im Rahmen der Konsolidierung der Platten zur heutigen Konfiguration der zentraleuropäischen Varisciden fand eine großmaßstäbliche Scherung mit transpressiven Bewegungen statt, die zur Öffnung kleinerer Meeresbecken führte (FRANKE, 1989a, b; MATTE, 1991; QUESADA, 1991), verbunden mit einer großräumigen Rotation und Deformation des variscischen Gürtels (HIRT et al., 1992; RIES & SHACKLETON, 1976; TAIT et al., 1994).

Da das Arbeitsgebiet im Saxothuringikum liegt, wird in den nächsten Kapiteln auf dessen lithostratigraphische und tektonometamorphe Entwicklung näher eingegangen. Das Saxothuringische Becken entwickelte sich auf der ausgedünnten kontinentalen cadomischen Kruste der Saxothuringischen Mikroplatte und wird auf ein kambro-ordovizisches Rift-System zurückgeführt (FRANKE, 1984; 1989a, b).

Abb. 2a - f: Abfolge der plattentektonischen Entwicklung vom Ordovizium bis in das Devon (aus TAIT et al., 1997).



1.2 Saxothuringikum

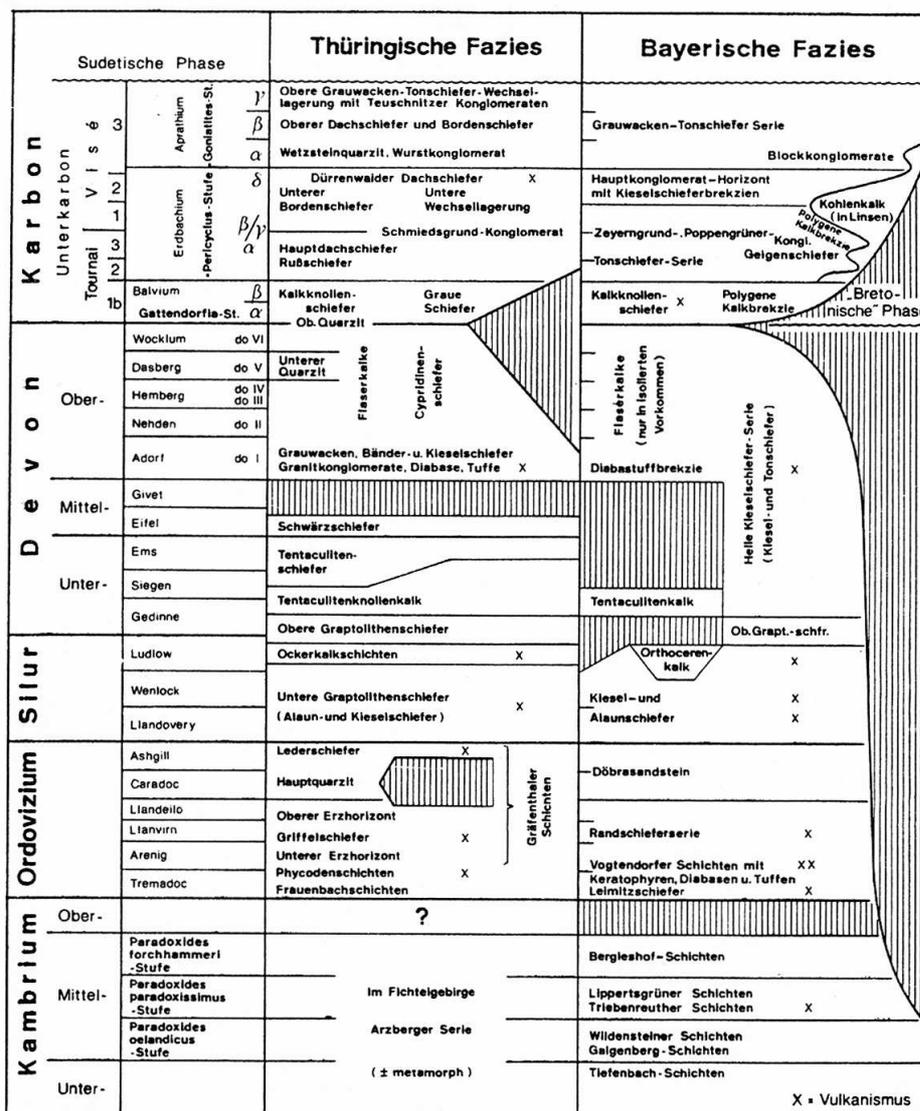
1.2.1 Lithostratigraphische Entwicklung

Das Saxothuringische Becken kann in zwei unterschiedliche Faziesbereiche unterteilt werden, in die Thüringische und in die Bayerische Fazies (WURM, 1925). Die Gesteine des Kambriums und Ordoviziums der Thüringischen Fazies repräsentieren nach FRANKE (1984) einen küstennahen Sedimentationsbereich (Schelfbereich), während die Einheiten der Bayerischen Fazies äquivalenten Alters einem küstenferneren Ablagerungsbereich (Kontinentalhang?) zugeordnet werden können (Tab. 1 + Abb. 4).

In der Bayerischen Fazies belegen seit dem mittleren Ordovizium pelagische Tonschiefer, Radiolarite und Turbidite eine fortschreitende Vertiefung des Sedimentationsraumes. Ordovizischer bimodaler Vulkanismus ist aus beiden Faziesreihen bekannt. In der Thüringischen Fazies deutet sich erst im obersten Ordovizium ein Wechsel zu pelagischen Ablagerungsverhältnissen an.

Im Silur ist sowohl die Bayerische Fazies als auch die Thüringische Fazies aus schwarzen Lyditen und Alaunschiefern aufgebaut. Aus beiden Faziesbereichen sind basaltische Tuffe bekannt. Im geringmächtigen Silur der Thüringischen Fazies sind zusätzlich Flaserkalke mit pelagischen Faunen und sandigen Einschaltungen aufgeschlossen (FRANKE, 1984). Im Silur der Bayerischen Fazies treten neben den schwarzen Lyditen und Alaunschiefern Orthocerenkalke (benthonische Fauna) auf.

In der Bayerischen Fazies leiten die silurischen Lydite lückenlos in die devonischen Kieselschiefer über, wobei die größte Wassertiefe erreicht wird. Den hellen Lyditen und Tonschiefern sind zum Teil Grauwacken zwischengeschaltet. Eine weitere Fazies bilden die unterdevonischen Tentakulitenkalke und die oberdevonischen Flaserkalke (pelagische Fauna), die jedoch nur als Olistolithe im Unterkarbon Bayerischer Fazies erhalten sind. In der Thüringischen Fazies wurden bis in das Unterdevon Graptolithenschiefer abgelagert, die von geringmächtigen Tentakuliten-Knollenkalken überlagert werden, gefolgt von Tentakulitenschiefern und Nereitenquarziten. Aus dem NW des Saxothuringikums sind häufig klastische Einschaltungen belegt. Ab dem tiefen Mitteldevon der Thüringischen Fazies folgen über den Tentakulitenschiefern die Schwarzschiefer, die stratigraphisch von oberdevonischen Diabasen, Tuffen und untergeordnet von Keratophyren abgelöst werden. Den Vulkaniten eingeschaltet bzw. in deren Hangendem sind grobklastische Granit- oder Diabas-Konglomerate (Reitzensteiner Konglomerat und dessen Äquivalente) aufgeschlossen,



Tab. 1: Stratigraphische Tabelle für das Paläozoikum im westlichen Saxothuringikum (aus GANDL, 1981).

die einem Liefergebiet südlich des Bergaer Sattels zugeordnet werden (EIGENFELD, 1938; WEISE, 1972). Im stratigraphisch Hangenden der Vulkanite und Konglomerateinschlüssen folgen Tonschiefer und Flaserkalk mit Conodonten und Cephalopoden (Oberdevon).

Die Sedimentation des Unterkarbons der Thüringischen Fazies setzt mit den Hangenberg-Quarziten und -Schiefern ein (FRANKE, 1984), gefolgt von den Hangenbergkalken bzw. Kalkknollen-Schiefern. Im mittleren Tournai wird der liegende Alaunschiefer (Rußschiefer) abgelagert. Während das gesamte Unterkarbon der Bayerischen Fazies nahezu vollständig in Flysch-Fazies ausgebildet ist, setzt die Flyschsedimentation in der Thüringischen Fazies erst im cuII / γ - δ ein (GANDL, 1981).

Das Bayerische Unterkarbon ist an der Basis des invers-metamorphen Münchberger Deckenstapels aufgeschlossen. Es besteht aus grobkörnigen, synorogenen, klastischen Sedimenten (Flysch): resedimentierten Konglomeraten, grobkörnigen Grauwacketurbiditen, Schlammströmen und Gleitschollen. Diese Vergesellschaftung weist auf einen „inner fan- bzw. slope“-Bereich hin, während der Thüringische Flysch aus distalere Ablagerungen aufgebaut ist (BEHR et al., 1982, FRANKE, 1984). Der allochthone Flysch der Bayerischen Fazies ist von der Deckentektonik stark zerschert und daher lithostratigraphisch nur schlecht zu untergliedern (Tab. 1).

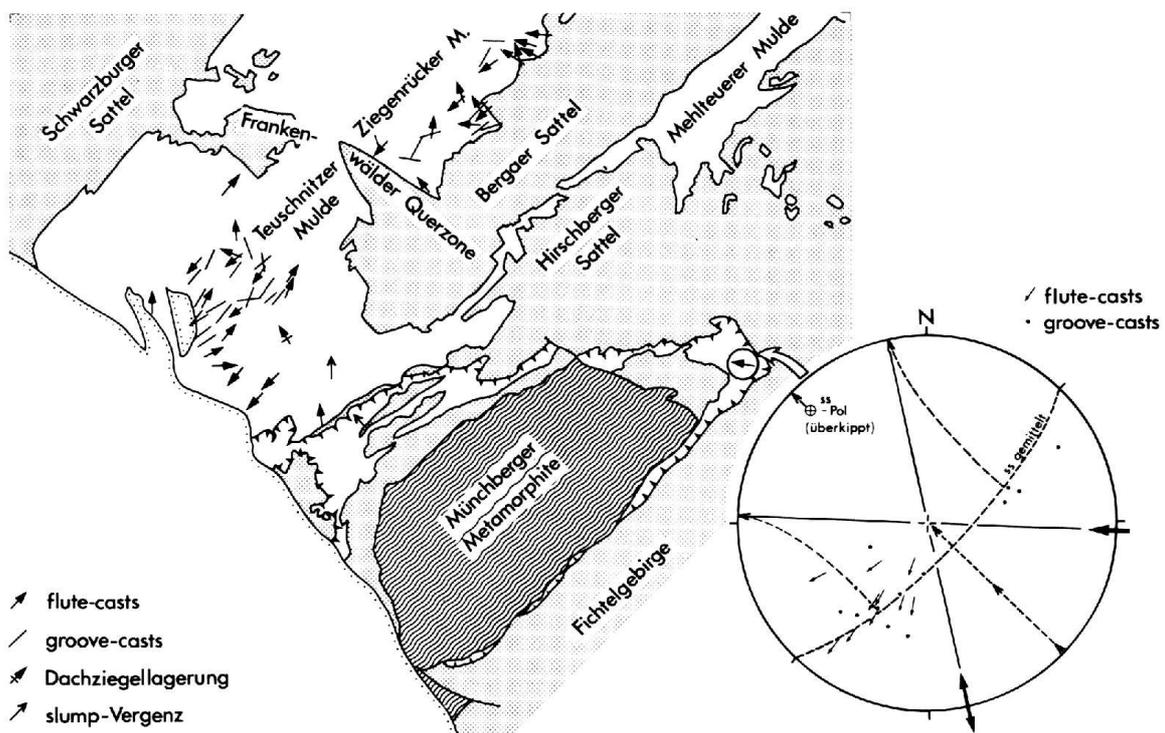


Abb. 3: Verteilung der Strömungsrichtungen im Unterkarbon-Flysch des Saxothuringikums (aus FRANKE, 1984). Signaturen: weiß = Flysch, Punktraster = Prä-Karbon. Zusammenstellung nach GRÄBE & WUCHER (1967); LAMBELET et al. (1967); diverse GK 1:25.000 des Bayerischen Geologischen Landesamtes mit Erläuterungen; FRANKE (1984). Rechts: Raumlage und Rückrotation von Sohlmarken am S-Ausgang von Trogenau (GK Bobenneukirchen). Falten und Kippungsachsen liegen etwa horizontal; die einfache Horizontierung der Schichten führt daher zu einem realistischen Wert für die Strömungsrichtung (Flute-casts ESE, groove-Casts unipolar in ESE und SSE-Richtung).

Die unterkarbonischen Flyschsedimente der Thüringischen Fazies sind in der Ziegenrücker und Teuschnitzer Mulde am mächtigsten. Sie erreichen nach Lambelet et al. (1967) und Pfeiffer et al. (1995) eine Mächtigkeit von etwa 3600 m. Sie bestehen aus einer eintönigen Wechselfolge von Tonschiefern, Quarziten, Grauwacken und Grauwacken-Konglomeraten (Tab. 1). Der untere Kulm, dessen Hangendgrenze nach Lambelet et al. (1967) der obere Dachschiefer ist (Visé 3 β , nach GANDL, 1981) ist etwa 1000 m mächtig. Hier dominieren die

Tonschiefer. Gröberklastische Einschaltungen sind fast ausschließlich als reine Sandsteine oder Quarzite entwickelt, Grauwacken sind selten. Der obere Kulm besteht aus einer Wechsellagerung von Tonschiefern und Grauwacken, in die mehrere Konglomerathorizonte eingeschaltet sind. Das Teuschnitzer Konglomerat bildet hier den wichtigsten Leithorizont, der die Struktur der Teuschnitzer Mulde nachzeichnet (Abb. 7).

Die richtungsanzeigenden Sedimentstrukturen im unterkarbonischen Flysch wurden von Franke (1984) zusammengefaßt und diskutiert. In der Teuschnitzer und Ziegenrücker Mulde wurden hauptsächlich Anzeichen für einen NE / SW-gerichteten Transport gefunden. In der Teuschnitzer Mulde konnte auch eine nach NE gerichtete Strömungsrichtung beobachtet werden. Es treten aber Strömungsrichtungen auf, die zwischen einem E und S gerichteten Transport liegen. Schließlich gibt es noch Anzeichen für einen N bis NW gerichteten Transport. Generell zeigt sich, daß die turbidity currents im saxothuringischen Becken zum größten Teil parallel zu den heutigen tektonischen Großstrukturen (NE / SW) verlaufen. In sehr proximalen, energiereichen Schüttungskörpern läßt sich der direkte Einstrom vom Liefergebiet nach N bis NW belegen (Abb. 3). Die Ausrichtung der Strömungsmarken sprechen für ein Liefergebiet am SE-Rand des saxothuringischen Beckens (FRANKE, 1984). Gerölluntersuchungen im Flysch des Saxothuringikums von J. SCHÄFER et al. (1997) zeigen an, daß bereits im obersten Devon die kristallinen Gesteine vom Typ der Münchberger Decken an der Sedimentation des Flyschs beteiligt waren und im höheren Visé auch das saxothuringische Vorland (Thüringische Fazies) in das Liefergebiet einbezogen wurde.

1.2.2 Deformation und Metamorphose

1.2.2.1 Großräumige Entwicklung

Im Saxothuringischen Becken liegen hochgradig metamorphe Gesteine (Münchberger Gneismasse und deren Analoge Wildenfels und Frankenberg) auf engstem Raum neben fossilführenden Sedimenten (FRANKE, 1984). Die Ursache liegt in der tektonischen Entwicklung des Saxothuringischen Beckens, die in der neueren Literatur unter anderem von FRANKE et al. (1995b), J. SCHÄFER et al. (1997), zusammenfassend dokumentiert wurde.

Nach der kambro-ordovizischen Riftphase wurde ab dem älteren Devon saxothuringischer Ozeanboden in Richtung Süden unter den aktiven Nordrand des Moldanubikums subduziert (Abb. 4). Die so neu entstandenen Metamorphite und das unmetamorphe Paläozoikum Bayerischer Fazies wurden anschließend in einem transpressiven Regime tektonisch gestapelt und auf das unmetamorphe Vorland nach N überschoben. Reste dieses Deckenstapels sind in den tektonischen Klippen von Münchberg, Wildenfels und Frankenberg erhalten (Abb. 1).

Diese Überschiebung hat die Metamorphose überdauert, so daß heute eine inverse Stapelung der stratigraphischen Schichten und eine inverse Metamorphoseabfolge (eklogitfaziell bis anchimetamorph) vorliegt.

Ab dem älteren Oberdevon beginnt die kontinentale Kollision zwischen der saxothuringischen Kruste und dem Teplá-Barrandium. Im Laufe des höheren Devons und Unterkarbons schreitet die tektonische Stapelung fort (Abb. 5+ 6). Die Sedimente der Bayerischen und Thüringischen Fazies werden ebenfalls an den aktiven Plattenrand angegliedert. Spätestens seit Beginn des Visé wurde am SE-Rand des saxothuringischen Beckens ein Akkretionskeil aufgebaut, der das Vorlandbecken mit Flyschsedimenten beliefert hat. Im Thüringischen Unterkarbon setzte nach FRANKE (1984) die variscische Orogenese mit dem Beginn der Flyschsedimentation nach der Ablagerung des Rußschiefers ein. Dieser Rußschiefer entspricht dem liegenden Alaunschiefer. Zirkone aus einem Tuffhorizont in der unterkarbonischen *texanus*-Zone des Harzes wurden mit U-Pb-Einzelzirkon-Messungen auf ein radiometrisches Alter von 334 ± 1 Ma datiert (TRAPP et al., 1998). Im Endstadium der Orogenese wurde die unterkarbonische Füllung des Vorlandbeckens in die tektonische Stapelung einbezogen. Dabei wurde der stärker anchimetamorphe (tiefer versenkte) Flysch der Bayerischen Fazies nach NW auf den schwächer anchimetamorphen Flysch der Thüringischen Fazies überschoben (J. SCHÄFER et al., 1997).

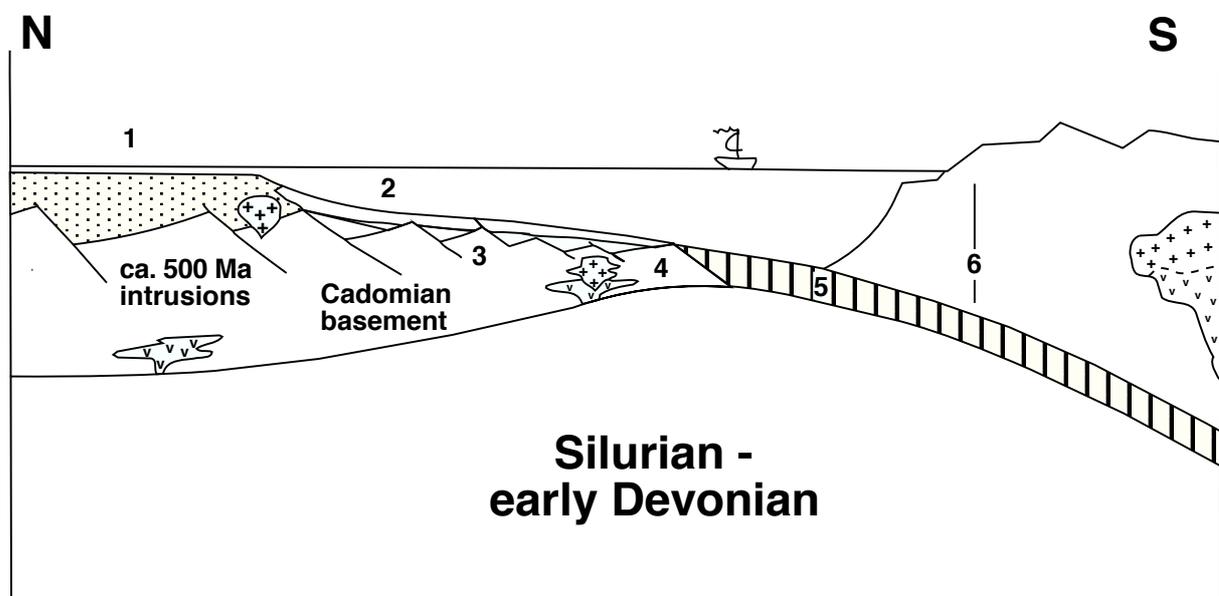


Abb. 4: Paläogeographisch-tektonische Rekonstruktion des saxothuringischen Beckens und des Münchberger Deckenstapels. 1 = Thüringische Fazies, küstennaher Ablagerungsraum (Schelf); 2 = Bayerische Fazies, küstenfernerer Ablagerungsbereich (kontinentaler Hang ?); 3 = Randamphibolit + Phyllit-Prasinit-Serie (Teil des cadomischen Basements?); 4 = Liegendserie (Teil des cadomischen Basements); 5 = Eklogit (ehemaliger saxothuringischer Ozeanboden); 6 = Hangendserie (Teplá-Barrandium ?) (aus FRANKE et al., 1995b).

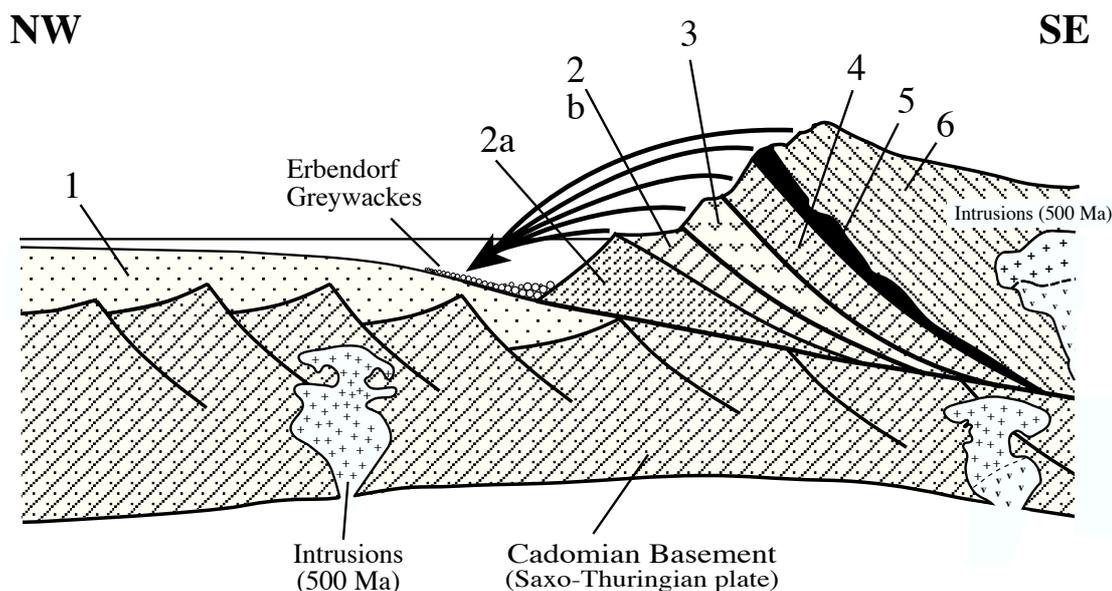


Abb. 5: Skizze zur paläogeographisch-tektonischen Situation an der aktiven Grenze der teplá-barrandischen Mikroplatte während des Famennes (370 Ma); aus J. SCHÄFER et al., 1997. 1 = Thüringische Fazies; 2a = Silur/Devon der Bayerischen Fazies; 2b = Randschiefer-Serie der Bayerischen Fazies; 3 = Randa Amphibolit- und Phyllit-Prasinit-Serie. 4 = Liegendserie (saxothuringische Kruste); 5 = Eklogite (saxothuringischer Ozeanboden); 6 = Hangend-Serie (teplá-barrandische Mikroplatte).

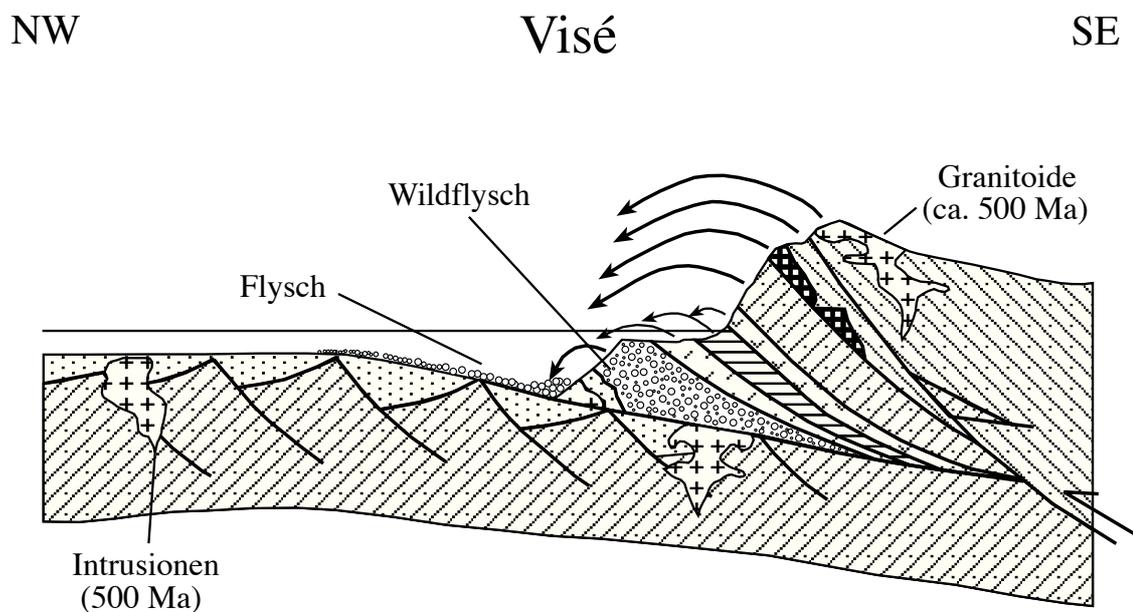


Abb. 6: Vereinfachte paläogeographisch-tektonische Rekonstruktion der Situation am aktiven Plattenrand des Saxothuringikums zur Zeit des Visé. Dargestellt ist ein Zeitabschnitt für das Niveau des Teuschnitzer Konglomerates (aus J. SCHÄFER, 1996).

Nach F. SCHÄFER (1997) wurden die Strukturen des nordwestlichen saxothuringischen Beckens von einem nach SE propagierenden Falten- und Überschiebungsgürtel bzw. Orogenkeil gebildet. Dieser wird als "Retrokeil" der Mitteldeutschen Kristallinschwelle interpretiert, der nach der NW-vergente Hauptdeformation entstanden ist. Letztere wird großräumig einem Prokeil zugeordnet, der sich im Saxothuringikum, an der nach SE unter das Teplá-Barrandium einfallenden Subduktionszone gebildet hat. Die Strukturen des Pro- und Retrokeils sind im anchimetamorphen Paläozoikum des Münchberger Deckenstapels und seines nordwestlichen Vorlandes erhalten. FRANKE (1984) ordnete die ältere Phase (D1), einem NW-gerichteten Deckentransport auf flachen Bahnen zu und interpretierte die jüngere Phase (D2) als eine südvergente Überfaltung. Das nordwestliche Vorland wird aus weitspannigen Falten aufgebaut. Sie werden aus den mit unterkarbonischen Metasedimenten gefüllten Synklinen (Teuschnitz-Ziegenrücker und Nailaer-Mehltheuerer Mulde) und den aus silurischen bis devonischen Metasedimenten und Metabasiten aufgebauten Antiklinen (Schwarzburger und Bergaer Sattel) gebildet (Abb. 7). Im NW, in der Teuschnitz-Ziegenrücker Mulde, ist nach FRANKE (1984) die erste Deformation mit dem charakteristischen NW-vergente Faltenbau nicht entwickelt.

Der Bereich des Bergaer Sattels wurde von F. SCHÄFER (1997) als Interferenzzone bezeichnet. Hier ist eine ältere Faltengeneration (F1) zu beobachten, die von dem oben beschriebenen Deformationsereignis überprägt wurde. Diese F1-Falten weisen eine NW-Vergenz auf und sind nur im Bereich des Bergaer Sattels sowie südlich davon bekannt. Sie zeigen häufig starke Verdrehungen der b-Achsen um bis zu 90 ° (PAECH, 1966; SCHROEDER et al., 1965; FRANKE, 1984). Südöstlich des Bergaer Sattels nimmt die Intensität der SE-vergente D2-Deformationsgefüge ab, bis sie mit der Annäherung an die Basisüberschiebung der Münchberger Decken ganz ausklingen. Südlich des Münchberger Deckenstapels, im Fichtelgebirge, ist die D2-Faltungsphase wieder deutlich entwickelt (STEIN, 1988).

Das Ende der variscischen Deformation markiert die kohleführende intramontane Molasse von Borna-Hainchen. Sie wurde diskordant auf dem älteren Paläozoikum und dem Kristallin des Frankenberger Deckenstapels, einem Äquivalent des Münchberger Deckenstapels (Abb.1) abgelagert. In der intramontanen Molasse sind nur noch Anzeichen für eine extensionsbezogene Tektonik zu erkennen (HAHN, 1997 in GAITSCH, 1998). Die Molasse setzt die Obergrenze des Alters für die jüngsten Flyschsedimente fest (FRANKE, 1984). Das biostratigraphische Alter der Makroflora (HARTUNG, 1938) und Sporomorphen-Assoziationen (BEK, 1997 in GAITSCH, 1998) liegt im hohen Visé (V3 β), bei etwa 330 Ma. Die Grenze Visé / Namur wurde von GRADSTEIN & OGG (1996) bei 327 Ma festgelegt.

1.2.2.2 Tektonometamorphe Anomalien

Das Arbeitsgebiet, die Frankenwälder Querzone (FQZ), ist eine NE-SW streichende asymmetrische Horstzone, die eine Metamorphoseanomalie abbildet. In ihrem südöstlichen Teil schneidet die FQZ im Südwesten das parautochthone Basement der Münchberger Decken ab, im NW wird sie durch den Schwarzburger Sattel begrenzt. Die FQZ quert das relativ einheitliche Bild der tektonischen Großstrukturen im Saxothuringikum (Abb. 7 + 8). Die Anlegung der asymmetrischen Horstzone (Gräfenthaler und Lobensteiner Horst) führte zu einer Heraushebung stratigraphisch tieferer Einheiten gegenüber dem südwestlichen Nachbargebiet (Teuschnitzer Mulde). In der Horstzone ragen lokal Schichten des Ordoviziums, Silurs und Devons aus der unterkarbonischen Überdeckung heraus. Diese Schichten tauchen nach SW ab. Nach EIGENFELD (1938), SCHWAN (1958) und FRANKE (1984) gibt es in der Thüringischen Hauptmulde (Teuschnitz-Ziegenrucker Mulde) im frühen Unterkarbon keine Anzeichen für ein „herzynisch streichendes Sattelgebiet“ bzw. eine Schwelle. Folglich wurde die Horstzone frühestens nach der unterkarbonischen Flyschsedimentation angelegt.

Die FQZ wurde folglich erst während der variscischen Hauptdeformation als Störungszone aktiviert. Sie unterscheidet sich in ihrem tektonischen Gefüge von ihren Nachbargebieten durch eine mehrphasige Deformation („Phyllittektonik“ nach SCHROEDER, 1958) und einer veränderten Ausbildung der tektonischen Strukturen. So nimmt die Intensität der Hauptschieferung (nördlich des Bergaer Sattels S2, südlich davon S1) von einer schwach entwickelten Bruchschieferung bis hin zu einer penetrativen Dachschieferung zu. Lokal ist noch eine dritte Deformationsphase mit flachliegender Schieferung (S3) zu erkennen (FRANKE, 1984; SCHROEDER, 1958; 1993). Auch die F1- und F2-Falten werden mit Annäherung an die FQZ enger und flacher, bis im Zentrum der FQZ Faltenachsebenen und Schieferungen subhorizontal liegen.

Die von FRANKE (1984) auf bayerischem Gebiet ausgewerteten Illitkristallinitäts-Daten (IK) der großräumig aufgeschlossenen Kulm-Tonschiefer (Nailaer- und Teuschnitzer-Synkline) ergaben eine Erhöhung der IK-Werte von der Fränkischen Linie in Richtung der FQZ bis an die Grenze der Methode. LUDWIG (1972) führte an ordovizischen Griffelschiefern phasenpetrologische Untersuchungen und Illit- sowie Chloritkristallinitäts-Messungen durch. Auch wenn das Ordovizium im Arbeitsgebiet nicht flächendeckend verbreitet ist, korrelieren die Ergebnisse von LUDWIG (1972) in den vergleichbaren Gebieten mit den Ergebnissen von FRANKE (1984). Die Griffelschiefer wurden nach LUDWIG (1972), am SW-Rand der Nailaer Mulde nur anchizonal überprägt, wohingegen sie im südlichen Teil der FQZ (Raum

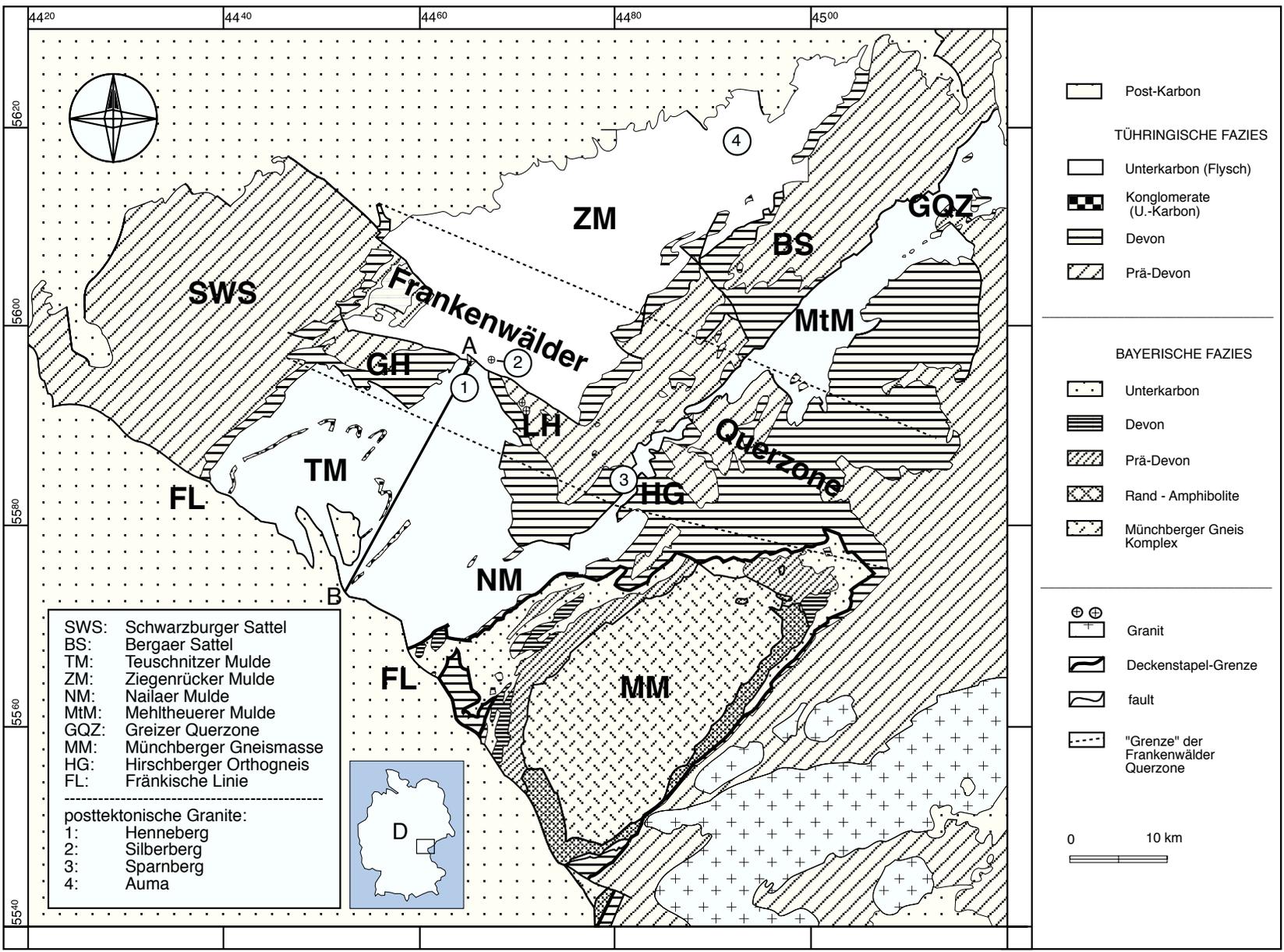


Abb. 7: Geologische Übersichtskarte für das Arbeitsgebiet - Frankenwälder Querzone. A-B: Profillinie des schematischen Profils in Abb. 8.

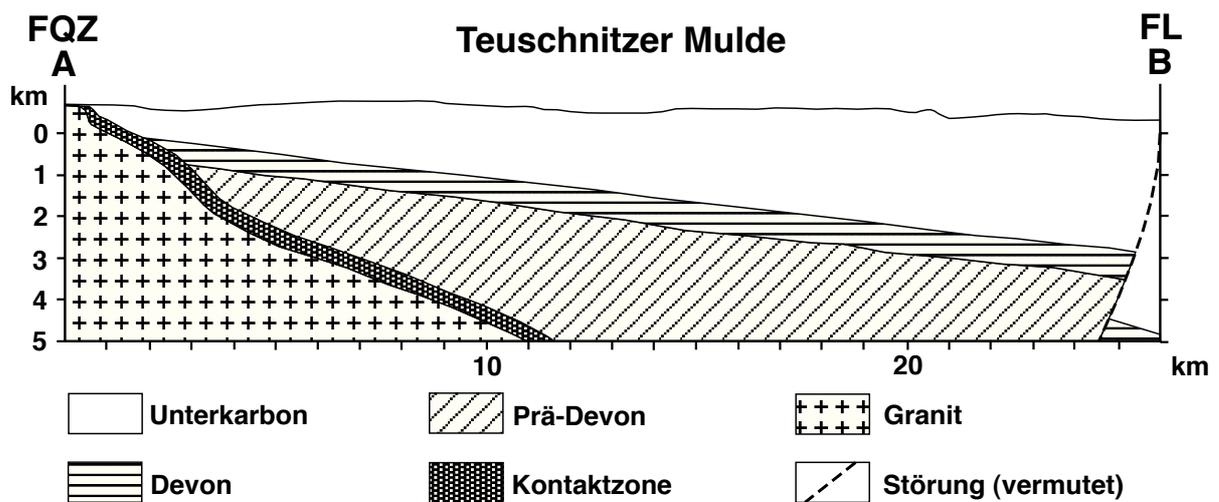


Abb. 8: Schematischer NE / SW-Profileschnitt entlang der Teuschnitzer Mulde.

Hirschberg und SW-Rand des Bergaer Sattels) und im nördlichen Bereich der FQZ (Gräfenthaler Horst) eine epizonale Metamorphose abbildet. Phasenpetrologische Untersuchungen an devonischen Metabasiten in dem südwestlichen zentralen Teil der Anomalie zeigen einen Metamorphosewechsel hin zur Grünschieferfazies, indikativ für 250 bis 350 °C und 1,5 bis 3 kbar (BRAND, 1980).

Die Remagnetisierung der devonischen Spilite im Unterperm (KIM & SOFFEL, 1982) ist ein Hinweis auf eine spätvariscische Aufheizung der Gesteine. Entlang der Querzone sind einige kleinere Apophysen von Graniten aufgereiht („Thüringische Granitlinie“ der älteren Literatur), die zum Teil an der Oberfläche angeschnitten, oder durch ihre Kontaktaureolen zu erkennen sind (Abb. 7). Die Granite sind undeformiert, und ihre Rahmengesteine zeigen ein statisches, posttektonisches Mineralwachstum (MEINEL, 1972; RÖLL, 1998), Anzeichen für eine posttektonische Intrusion. Von zwei posttektonisch intrudierten Graniten wurde mit modernen radiometrischen Datierungsmethoden das Intrusionsalter bestimmt. LOTH et al. (1997) datierten mit der U-Pb-SHRIMP II-Methode Zirkone aus dem Henneberg Granit auf ein konkordantes Alter von 299 ± 5 Ma. Einzelzirkone aus dem Silberberg Granit wurden von KUNERT et al. (1998) auf ein U-Pb-Alter von maximal $320 + 10 / - 8$ Ma datiert. Die posttektonischen Granite und der unterkarbonische Flysch der FQZ werden von magmatischen Gängen unterschiedlichster Zusammensetzung (Lamprophyr, Trachytdiorit, Kersantit) durchschlagen, die im allgemeinen NW-SE, parallel zur FQZ streichen. Die Ergebnisse intensiver geophysikalischer Untersuchungen (SEHM et al., 1989) weisen auf einen größeren zusammenhängenden Granitkörper im Untergrund der Querzone hin.

Die posttektonischen Granitintrusionen entlang des FQZ-Störungssystems und die parallel zur FQZ verlaufenden postgranitischen Gangintrusionen sowie der gestörte Henneberg Granit-

körper zeigen in der FQZ eine NE-SW gerichtete Extension, die mit einer thermischen Aktivität gekoppelt ist und mindestens bis ins hohe Oberkarbon andauerte.

Das Metamorphosebild in der FQZ ist das Ergebnis verschiedener, sich addierender Faktoren. Die Metamorphosegeschichte beginnt mit der Sedimentation des unterkarbonischen Flyschs, der in Abhängigkeit von seiner Mächtigkeit und dem geothermischen Gradienten in einer Versenkungsdiagenese resultiert. Die Versenkungsdiagenese wird während der variscischen Deformation in Abhängigkeit von den Temperatur- und Druckbedingungen prograd metamorph überprägt, wobei durch eine tektonische Überlagerung die Mächtigkeit des Flysch erhöht werden kann bzw. eine erhöhte thermische Aktivität die Metamorphose beeinflussen kann. Die syntektonische Metamorphose wird in der FQZ wiederum von der Kontaktmetamorphose überprägt, als Ergebnis posttektonischer Granit- und Gangintrusionen. Die Abschiebung des NE-Teils des Henneberg Granits zeigt an, daß die Verkippung der Horstzone, die zu SW-abtauchenden Schichten in der FQZ führt, nach dem posttektonischen Magmatismus erfolgte. Diese Verkippung südwestlich der FQZ kann einen Effekt auf die Steigung des Metamorphosegradientes haben.

Die Metamorphose in den unterkarbonischen Gesteinen wird neben der Temperatur auch vom Druck, d.h. von ihrer Versenkungstiefe gesteuert. Letztere ist zum einen abhängig von der Verteilung der Sedimentmächtigkeiten im saxothuringischen Flyschbecken, zum anderen von der Anwesenheit und Mächtigkeit einer tektonischen Überlagerung. Die frühkarbonischen Flysche sind die jüngsten in diesem Gebiet abgelagerten Sedimente. Ihre Mächtigkeit wird von LAMBELET et al. (1967) und PFEIFFER et al. (1995) mit etwa 3600 m angegeben. Petrologische Untersuchungen an Kontaktgesteinen des Sparnberger Granits geben Drucke von ≤ 2 kbar an (RÖLL, 1998), was einer Mächtigkeit ≤ 7 km entspricht. Da die FQZ quer zur Beckenachse und zu den tektonischen Überlagerungsstrukturen verläuft, ist eine tiefere Versenkung der Gesteine der FQZ unwahrscheinlich (Kapitel 1.2.1).

Die intensive Schieferungsbildung, das Auftreten von Granitkörpern, der phasenpetrologische Nachweis für grünschieferfazielle Bedingungen, die Neueinstellung von radioaktiven Zerfallssystemen und eine erhöhte Illitkristallinität sprechen aber für eine Temperaturerhöhung in den unterkarbonischen Tonschiefern der FQZ. Als Ursache für die erhöhten Temperaturen können verschiedene Mechanismen in Betracht gezogen werden:

- a) Ein großräumig stark erhöhter geothermischer Gradient heizte das Sediment auf. Im Bereich der FQZ wurden durch die nachträgliche Anlegung der Horstzone in Verbindung mit der Erosion die tiefer und höher temperierten Schichten freigelegt.
- b) Ein in der FQZ lokal erhöhter Wärmefluß (FRANKE, 1984).

- c) Eine Überlagerung der FQZ durch Ausläufer des Münchberger Deckenstapels.
- d) Eine Verschuppung des Unterkarbons durch eine SE gerichtete Retrokeiltektonik (F. SCHÄFER, 1997). Als Resultat wurden höher metamorphe, also tiefere Einheiten gleicher Stratigraphie durch die später folgende asymmetrische Horststruktur (Querzone) freigelegt.

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt in der großflächigen Kartierung der Metamorphose der unterkarbonischen Tonschiefer in der Teuschnitz-Ziegenrucker und Naila-Mehltheuer Mulde. Zur relativen Temperaturabschätzung dienten die Illit- und Chloritkristallinität, die Druckabschätzungen wurden mit Hilfe der Illit/Muskovit-Gitterparameter $6d_{(33-1,060)}$ durchgeführt. Zusätzlich wurden für einen methodischen Vergleich mit der Illit- und Chloritkristallinität aus dem Westteil der FQZ Inkohlungs-Messungen herangezogen, die von Dipl.-Geol. Stephan Herlitzius durchgeführt wurden. Diese Daten dienten, zusammen mit der Modellierung der Granitoberfläche im Untergrund der FQZ von SEHM et al. (1989), zur Berechnung des thermischen Einflusses der sich abkühlenden Intrusionen auf das Nebengestein. Diese Berechnungen wurden von Dr. Georg Kosakowski durchgeführt. Der Vergleich der Illit- und Chloritkristallinitätsdaten mit den berechneten, maximal erreichbaren Temperaturen im Nebengestein der sich abkühlenden Intrusionen sollte zeigen, inwieweit die Granite die FQZ thermisch beeinflusst haben könnten und welcher Wärmetransportmechanismus dabei primär eine Rolle spielte.

2 METHODIK

2.1 Illitkristallinität (IK)

2.1.1 Definition der Illitkristallinität (IK)

Ursprünglich prägten GRIM et al. (1937) den Begriff "Illit" für sehr feinkörnige, glimmer-ähnliche Minerale. GRIM (1953) präzierte den Term weiter: Illite sind Minerale, die im wesentlichen Ton-Korngröße aufweisen und eine c-Periodizität von ungefähr 10 Å zeigen. Mittlerweile können daraus einige Varietäten unterschieden werden. In der Regel werden aber die verschiedenen "Illit"-Phasen in den Proben für die IK-Untersuchungen nicht exakt identifiziert. Zu den Illiten werden auch Glimmer mit phengitischen oder quellfähigen Komponenten gezählt (siehe auch SRODON, 1984 und SRODON & EBERL, 1984). Der Begriff "Kristallinität" wurde von KÜBLER (1967a) als ein Synonym für den Ordnungsgrad in einem Kristallgitter bezeichnet. Was jedoch unter Ordnung zu verstehen ist, wurde nicht genauer beschrieben. Neuere Untersuchungen (FLEHMIG, 1973; LEE et al., 1985; MERRIMAN et al., 1990; NIETO & SANCHEZ-NAVAS, 1994; ÁRKAI et al., 1997 und JIANG et al., 1997) zeigten, daß die Illitkristallinität, ausgedrückt als Peakbreite der (001)-Interferenz der Röntgendiffraktogramme, im wesentlichen eine Funktion der Größe der kohärent beugenden Gitterbereiche (= Kristallite / Kristalldomänen) und der in diesen auftretenden Dislokationen ist. WEAVER (1960) zeigte als erster, daß der mit Hilfe des Röntgendiffraktometers bestimmte Kristallisationsgrad der Illite dazu geeignet ist, den relativen Diagenese- / Metamorphosegrad von Tonschiefern zu bestimmen.

2.1.2 Aufbau der Tonminerale und Glimmer

In diesem Kapitel soll der grundlegende Aufbau der Phyllosilikate, im wesentlichen nach BAILEY (1984), kurz skizziert werden.

Prinzipiell werden Schichtsilikate (z.B. Tonminerale und Glimmer) aus tetraedrigen und oktaedrigen Schichten aufgebaut. Die grundlegende Einheit der Tetraederschicht ist T_2O_5 (T = tetraedrisches Kation (Si, Al,...)). Drei Basis-Sauerstoff (O)-Atome werden mit den benachbarten Tetraedern geteilt, so daß die Tetraeder durch gemeinsame O-Atome über Spitzen miteinander verbunden sind und ein hexagonales Netz bilden. Das vierte O-Atom eines jeden Tetraeders, der Apikalsauerstoff, zeigt in eine Richtung senkrecht zur Schicht und

bildet gleichzeitig einen Teil der oktaedrischen Schicht. In diesem Schichttyp steht das oktaedrische Kation in oktaedrischer Koordination mit den O_2 und OH^- -Ionen. Hier müssen nicht alle Oktaederplätze besetzt sein. Die einzelnen Oktaeder sind lateral miteinander verbunden, indem sie sich die oktaedrischen Ecken teilen.

Die Glimmer können nach BAILEY (1984) mit Hilfe der Lagenladung (x) pro Formeleinheit in zwei Gruppen eingeteilt werden. Die Klassifikation erfolgt in echte oder biegsame Glimmer, mit einer Idealladung von $x = -1.0$ (kompensiert im wesentlichen durch monovalente Zwischenschicht-Kationen) und in die Sprödglimmer mit $x = -2.0$ (kompensiert hauptsächlich durch divalente Zwischenschicht-Kationen). Die beiden Gruppen können in zwei weitere Untergruppen unterteilt werden, in trioktaedrische und in dioktaedrische Glimmer. Die kleinste Struktureinheit enthält drei Oktaeder. Sind alle drei Oktaeder mit einem oktaedrischen Kation in ihrem Zentrum besetzt, so ist die Schicht trioktaedrisch. Sind nur zwei der drei Oktaeder besetzt, ist sie dioktaedrisch (BAILEY, 1984, Seite 3, Tab. 1). Die Glimmerspezies wird auf der Basis der Zusammensetzung der idealen Endglieder unterschieden. In den natürlichen Glimmern sind die tetraedrischen Kationen (Z) Si, Al und Fe^{3+} (selten Be^{2+}). Die Zwischenschicht-Kationen (X) in den echten Glimmern sind K oder Na (selten Rb, Cs, NH_4 oder H_3O) und in den Sprödglimmern Ca oder Ba (selten Sr). Die oktaedrischen Kationen (Y) sind Mg, Al, Fe^{2+} und Fe^{3+} , aber auch andere mittelgroße Kationen wie Li, Ti, V, Cr, Mn, Co, Ni, Cu und Zn können eingebaut werden. Die Strukturformel für Glimmer lautet wie folgt:

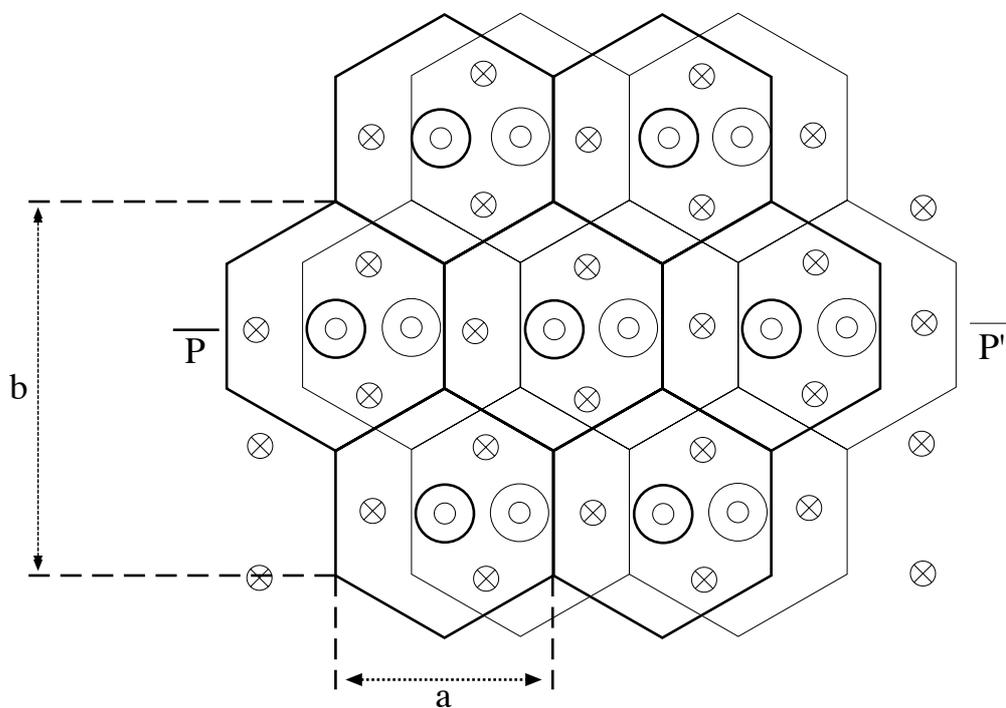


Die Schichtladung setzt sich aus der Kombination vier wesentlicher Austauschreaktionen zusammen (R = Kation):

- (1) Substitution von R^{3+} (gewöhnlich Al oder Fe^{3+})
oder R^{2+} (Be) für Si^{4+} in den Tetraederpositionen;
- (2) Austausch von R^{1+} oder R^{2+} für R^{2+} oder R^{3+} auf den Oktaederplätzen;
- (3) Freie Plätze auf den Oktaederplätzen;
- (4) Dehydroxylierung von OH nach O.

Die einfachste Struktur der Phyllosilikate zeigt der Kaolinit, dessen Basisabstand (Abstand zwischen den Basisflächen zweier aufeinander folgender identischer Tetraederschichten) sich lediglich aus einer tetraedrischen und einer dioktaedrischen Schicht zusammensetzt. Alle anderen Glimmer, wie zum Beispiel Smektit, Illit und Muskovit werden aus einer 2:1-Lage

(zwei tetraedrische und eine oktaedrische Schicht) gebildet. In solch einer Lage umschließen die oberen und unteren Anionen eine oktaedrische Schicht. Sie bilden gleichzeitig die gewöhnlichen Verbindungsflächen zu den zwei gegensätzlich ausgerichteten tetraedrischen Schichten. Die 2:1-Lagen werden durch große, positiv geladene Kationen in den Zwischenschichten gebunden und kompensiert. Das Zwischenschicht-Kation sitzt im Hohlraum eines Sechseringes, wo zwei tetraedrische Schichten sich gegenüber liegen. Die 2:1-Lagen überlagern sich in dieser Region (BAILEY, 1984), so daß die hexagonalen Ringe der angrenzenden Basisoberflächen die Zwischenschicht-Kationen aufreihen und einschließen.



- X-Ionen unter der Basisschicht liegend (K, Na, Ca)
 - X-Ionen über der oberen Schicht liegend (K, Na, Ca)
 - Zusätzliche Hydroxyl-Ionen
 - ⊗ oktaedrisch koordinierte Kationen (hauptsächlich Mg, Al oder Fe)
- Dicke Linien: Basisschicht $(\text{Si, Al})_2 \text{O}_5$
Dünne Linien: obere Schicht $(\text{Si, Al})_2 \text{O}_5$

Abb. 9: Glimmerstruktur (trioctaedrisch) parallel der a,b-Ebene im primitiven (P-)Translationsgitter.

Das hexagonale Netzwerk ist nach RADOSLOVICH (1960) oftmals verdreht, hin zu einer ditrigonalen Ausbildung. In den meisten Spezies werden die angrenzenden Schichten durch die Zwischenschicht-Kationen leicht verschoben. Durch die tetraedrische Rotation (siehe unten) wird jeder andere Basal-Sauerstoff in das Zentrum eines jeden Rings verschoben und dabei die Größe der Öffnung reduziert. Das Zwischenschicht-Kation hat jetzt nur noch sechs nächste Sauerstoff-Nachbarn anstatt der zwölf, die für die ideale hexagonale Symmetrie notwendig wären. Der daraus resultierende Basisgitterabstand wird ein wenig größer als die Mächtigkeit der Lage selbst, wobei die Basissauerstoff-Oberflächen nicht in Kontakt miteinander stehen. Da die Zwischenschicht-Kationen die angrenzenden Lagen miteinander verbinden, ist die strukturelle Variation der Glimmerschichten begrenzt.

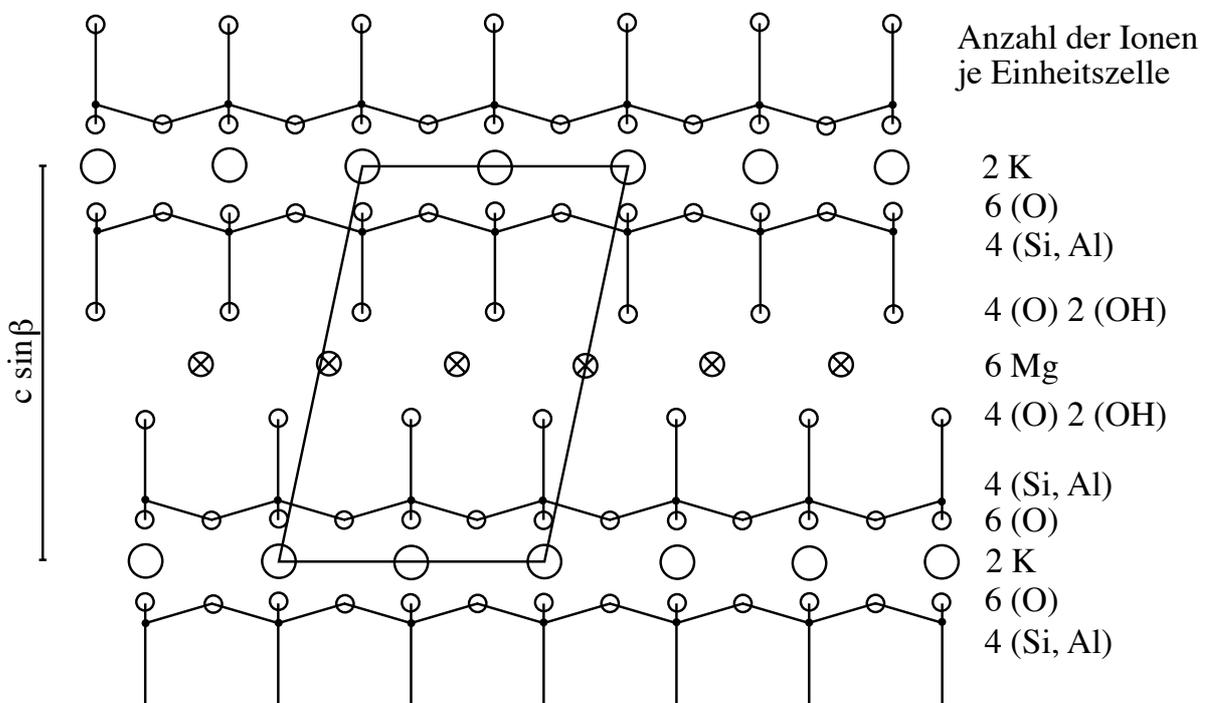


Abb. 10: Glimmerstruktur (trioctaedrisch) parallel zur a,c-Ebene, mit der Einheitszelle. $c \sin \beta =$ Basisgitterabstand.

In jeder 2:1 Lage ist die obere tetraedrische Schicht in Bezug zur unteren mit $a/3$ gestapelt (tetraedrische Rotation), um eine oktaedrische Koordination um die oktaedrischen Kationen zu ermöglichen. Die Stapelung kann auf allen drei kristallographischen Achsen in positiver oder negativer Richtung auf dem pseudo-hexagonalen Netzwerk erfolgen. Ändert sich die Stapelungsrichtung von Lage zu Lage regelmäßig, auch wenn die Lagen selbst durch Zwischenschicht-Kationen verbunden sind, so wird die Periodizität entlang der Z-Richtung ein vielfaches von 10 \AA betragen und Polytypie zeigen. Schichtstrukturen, die sich bei

gleicher Zusammensetzung nur in den Schichtsequenzen unterscheiden, werden als Polytype bezeichnet und haben eine unterschiedliche Symmetrie und c-Periodizität.

HEWITT & WONES (1972) zeigten, daß der Austausch von unterschiedlich großen R^{2+} Kationen in den Oktaedern nur den b-Parameter beeinflußt, aber in Verbindung mit einer höheren Kationenladung auch den Basisgitterabstand $c \sin \beta$. Generell werden in allen Glimmern die tetraedrischen Schichten verdickt und die oktaedrischen ausgedünnt, damit sie sich verbinden können. SMITH & YODER (1956) fanden nur sechs Standard- oder Idealglimmertypen, die mit einer Periodizität zwischen einer und sechs Lagen gebildet werden können. In einem gegebenen Kristall mit trioktaedrischer Zusammensetzung: $1M$, $2Or$, $2M_1$, $2M_2$, $3T$ und $6H$ (Bezeichnung nach RAMSDELL, 1947) ist dabei nur ein Zwischenschicht-Stapelungswinkel (positiv oder negativ) erlaubt. Die resultierende Bewegung von $1M$ und $2Or$ erfolgt entlang nur einer Achse, die von $2M_1$ und $2M_2$ entlang von zwei Achsen und die von $3T$ und $6H$ entlang von drei Achsen. $3T$ kommt nur sehr selten in der Natur vor, und $6H$ wurde noch nicht gefunden. Aufgrund der durch die Zusammensetzung kontrollierten Stapelung sind viele der natürlich vorkommenden Glimmerstrukturen weder echt polytyp noch echt polymorph untereinander.

2.1.3 Die Umwandlung von Smektit in Illit / Muskovit

VELDE & NICOT (1985) verglichen zwei jurassische Sandstein-Einheiten im Nordsee-Vikinggraben in ihrer Diagenese-Entwicklung. Sie kamen zu dem Schluß, daß zwei Faktoren einen starken Einfluß auf die Entwicklung der Tonminerale haben: der offene Porenraum in den Sedimenten, der mit verantwortlich ist für das Verhältnis von hydrostatischem zu lithostatischem Druck und die $K - H^+$ Aktivität der Lösungen, die durch das poröse Sediment fließen. Am Beispiel der Golfküsten-Sedimente zeigte AWWILLER (1993), daß die Tonsteine während der Diagenese ein offenes System bildeten, in dem während der Illitisierung der Smektite Kalium aus den Kalifeldspäten der Sandsteine den Tonssteinen zugeführt wurde. Ebenfalls für die Golfküsten-Sedimente definierte EBERL (1993) den Begriff der Versenkungsdiagenese in drei Stadien: Die Bildung nicht quellender, illitähnlicher 2:1-Smektit-schichten, welche durch eine Kalium-Zwischenschicht getrennt werden, die Neubildung von größeren Domänen mit kaliumreichen Phasen und die Auflösung der Smektite durch organische Säuren und schließlich die Rekristallisation von Illit.

JABOYEDOFF & THELIN (1996) konnten für die Gesteine der Briançonnais-Zone in den Schweizer Voralpen zeigen, daß der Anteil an quellfähigem Smektit als Zwischenschicht im Illit an der Grenze von Diagenese zu Anchizone bereits auf 2 bis 4 % zurückgeht. Die

Umwandlung von Smektit in Illit wird im wesentlichen über das Auflösen von kleineren Kristalldomänen zugunsten von größeren Neubildungen (Ostwald-Reifung) gesteuert (ESSENE & PEACOR, 1995). Die Umwandlungsreaktionen von Smektit in Illit sind nach VELDE (1992) und Velde & VASSEUR (1992) bei hohen Aktivierungsenergien abhängig von der Temperatur und bei niedrigen Aktivierungsenergien zeitabhängig (Abb. 11). Der Einfluß der kinetischen Reaktionen nimmt mit zunehmender Versenkungstiefe zu. Die wichtigsten Parameter, die die Transformation von Smektit in Illit kontrollieren, sind nach HUANG et al. (1993) die Temperatur, die Zeit und die Kaliumkonzentration.

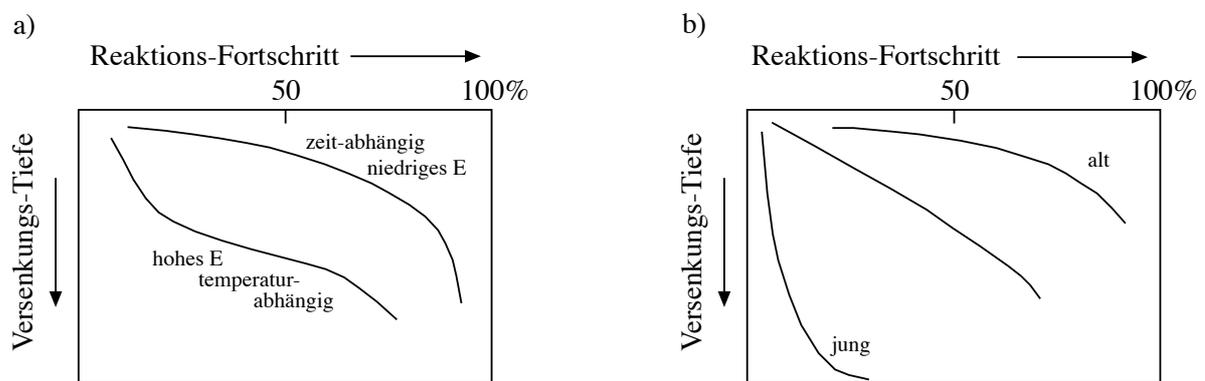


Abb. 11: Dargestellt ist der Reaktionsfortschritt der Smektit-Illit-Umwandlung in Abhängigkeit von der Versenkungstiefe. a) Die Aktivierungsenergie bestimmt den Verlauf der Reaktionsfortschrittskurve. b) Hier ist der Reaktionsfortschritt im Bezug zur Reaktionszeit (Alter des Sediments) in einer versenkten Einheit dargestellt (aus VELDE, 1992).

Die Reifung des Illits von einem relativ ungeordneten, subkristallinen $1M_d$ Illit hin zu einem $2M_1$ Illit/Muskovit wird gesteuert von der Anreicherung von Kalium, verbunden mit einem Wasserverlust in den Zwischenschichten. Während dieser Umwandlung entstehen Illite mit besser geordneten Kristallen, die subparallele und teilweise zusammengewachsene Pakete bilden. Diese werden schließlich durch defektfreie größere Kristalle des $2M_1$ Illits ersetzt. Während dieses Prozesses wachsen die Kristalle zumindest teilweise lateral zusammen, indem die Dislokationen parallel zu den Lagen migrieren. Dabei findet eine lokal auf diese Defektbereiche konzentrierte Lösung und Rekristallisation statt (JIANG et al., 1997). In der Fraktion $< 2 \mu m$ beginnt die Umwandlung bei etwa $150^\circ C$ (HUNZIKER et. al., 1986) und erreicht bei einer Temperatur von $260^\circ C$ (höhere Anchizone) über 85 % des $2M_1$ Muskovits. YODER & EUGSTER (1955) stellten fest, daß der $2M_1$ Hellglimmer bei erhöhten Temperaturen stabil ist, und VELDE (1965) erkannte, daß die $2M_1$ Muskovite die ideale Zusammensetzung von Muskovit besitzen. Sie stellen über einen größeren Metamorphosebereich die einzig stabile Form dar. Die Zunahme der relativen Menge von $2M_1$ Muskoviten steht in Verbindung mit einem Ansteigen von Temperatur und Druck während der Versenkung (MAXWELL & HOWER, 1967), dem Grad der Metamorphose (WEAVER &

BROEKSTRA, 1984) und der Intensität der hydrothermalen Alteration (DI MARCO et al., 1989). Nach DALLA TORRE & FREY (1997) sind an der Grenze von Diagenese zu Anchizone noch maximal 40 % 1M Illite vorhanden. Unter anchizonalen Bedingungen beträgt der Gehalt der 2M₁ Varietät schon 70 bis 90 % und erreicht zu Beginn der Epizone 100 %.

Aus den zitierten Untersuchungen läßt sich folgern, daß die Umwandlung von Smektit in Illit während der Versenkungsdiagenese im Wesentlichen von der Aktivierungsenergie und damit von der Temperatur bzw. der Zeit, der Kaliumkonzentration in den Fluiden und der Zusammensetzung der Sedimente sowie deren offenem Porenraum (Druck) abhängt.

2.1.4 Der Einfluß geologischer Faktoren auf die Illitkristallinität

Die Temperatur ist nach dem heutigen Wissensstand der entscheidende physikalische Parameter, der die Illitkristallinität beeinflusst (KÜBLER, 1967a + b, 1968). Dies wurde unter anderem von SCHAER & PERSOZ (1976) in kontaktmetamorphen Aureolen belegt und durch hydrothermale Experimente (z. B. KRUMM, 1984) nachgewiesen. Die Rolle anderer Faktoren wie Zeit, Fluid-Druck und Stress ist nicht zufriedenstellend geklärt (FREY, 1987). Zumindest für die Umwandlung von Smektit in Illit ist bei niedriger Reaktions-Aktivierungsenergie auch die Zeit ein wichtiger Faktor (VELDE, 1992; VELDE & VASSEUR, 1992). Die Porosität des Gesteins, die Zusammensetzung der Porenlösung (Kaliumgehalt) und die Illitdegradation (z.B. durch Verwitterung) können die Illitkristallinität beeinflussen (HUNZIKER et al., 1986). Eine Verkieselung sowie ein hoher Anteil bituminöser oder kalkiger Substanzen verringern den offenen Porenraum im Gestein. Der Transport von Ionen, die für die Entwicklung des Illitgitters wichtig sein können, wird dadurch behindert (WEBER, 1972a und b). So können verschiedene Lithologien aufgrund eines geänderten Stoffbestandes oder auch Porenraumes bei gleicher Metamorphosegeschichte zu unterschiedlichen Illitkristallinitäts-Werten führen (siehe auch ÁRKAI, et al. 1981 und VELDE & NICOT, 1985). Synmetamorphe Deformation (Schieferung) beschleunigt das Wachstum der Kristalldomänen und führt zu einem bevorzugten Wachstum der größeren auf Kosten der kleineren Körner (MERRIMAN et al., 1990; 1995 und ROBERTS et al., 1991). Eine Korrelation zwischen Illitkristallinität und dem Gitterstrain konnte nicht festgestellt werden, aber generell nimmt der Gitterstrain mit zunehmender Kristallitgröße ab (ÁRKAI et al., 1997).

Der wichtigste, bereits von DUNOYER DE SEGONZAC (1970) erkannte Störfaktor ist die Anwesenheit detritischer Glimmer. Haben diese umgelagerten Hellglimmer in ihrem Liefergebiet eine höhere Kristallinität erlangt als die Neubildungen, so überlagern sich die ererbten

Illitkristallinitäten mit den zu untersuchenden. Mit abnehmender Korngröße, d.h. wachsender relativer Oberfläche, reagiert der Detritus zunehmend auf die Einwirkung der Diagenese. Das reicht von Überwachungen bis zur Auflösung bzw. Rekristallisation. Daraus folgt, daß es wichtig ist, möglichst keine großen unempfindlichen Glimmer durch die Aufbereitung zu zerkleinern und eine möglichst kleine Korngröße zu analysieren. Dieser mit zunehmender Korngröße verstärkende Einfluß der ererbten Illitkristallinität ist von REUTER (1985) auch geochronologisch nachgewiesen worden. Deshalb wird die Bestimmung der Illitkristallinität generell an Korngrößen $< 2 \mu\text{m}$ durchgeführt. Jedoch ist bei kleinen Korngrößen ebenfalls mit einer Vermischung von detritischem Altbestand, Neuwachstum und Degradation durch Verwitterung zu rechnen. Aber auch die Probenaufbereitung, Meßbedingungen und Analysen (z.B. sich überlagernde Basalreflexionen) können einen Einfluß auf die Illitkristallinität haben (FREY, 1987; siehe auch Kapitel 2.1.11).

2.1.5 Bestimmung der Illitkristallinität mit dem Röntgendiffraktometer (RDA)

Zur Ableitung der Illitkristallinitäts-Werte aus einem Röntgendiffraktogramm gibt es verschiedene Methoden. Die wichtigsten sollen hier kurz vorgestellt werden.

2.1.5.1 Weaver-Index ("sharpness ratio")

WEAVER (1960) war der erste, der die Schärfe des 10 \AA Illit-Diffraktionspeaks in Beziehung zum Metamorphosegrad der Schiefer gesetzt hat. Dazu definierte er den Begriff der "sharpness ratio". Es stellt das Intensitätsverhältnis zwischen $10,0 \text{ \AA}$ und $10,5 \text{ \AA}$ (Peakhöhe bei $10,0 \text{ \AA}$ / Peakhöhe bei $10,5 \text{ \AA}$) dar. Der Zahlenwert der "sharpness ratio" nimmt mit steigender Kristallinität zu. Werte niedriger als 2,3 zeigen die diagenetische Zone an, Werte von 2,3 bis 12,1 die Anchizone und Werte größer als 12,1 die Epizone (WEAVER, 1960; KÜBLER, 1968). Der Fehler in der Bestimmung des Weaver-Index nimmt mit zunehmender Illitkristallinität zu, d.h. mit steigender Metamorphose und damit steiler werdenden Flanken der Peaks wird diese Methode ungenauer. Der Weaver-Index ist folglich für Gesteine ungeeignet, die überwiegend anchimetamorph überprägt worden sind.

2.1.5.2 Kübler-Index (Halbhöhenbreite = FWHM)

Die Halbhöhenbreite wird als Mittelwert der inneren und äußeren Grenzen des (001)-Illit-Peaks auf halber Strecke zwischen Untergrund und Peakmaximum berechnet. Der englische Begriff "Full Width at Half Maximum" (FWHM) beschreibt den Meßbereich exakter als der deutschsprachige "Halbhöhenbreite". In den Grafiken dieser Arbeit wird die Abkürzung für den englischen Ausdruck FWHM verwendet. Die Maßeinheit für die Halbhöhenbreite ist die Differenz in Winkelgrad ($\Delta^{\circ}2\Theta$). Sie wurde erstmals von KÜBLER (1968) angewendet. Der Zahlenwert des Kübler-Index nimmt mit zunehmender Kristallinität ab. Die Grenzwerte, die von KÜBLER (1984, Seite 578) benutzt wurden, liegen für die niedriggradige und hochgradige Grenze der Anchizone bei 0,42 und 0,25 $\Delta^{\circ}2\Theta$ CuK $_{\alpha}$. Mit zunehmender Illitkristallinität nimmt der Fehler in der Bestimmung der Halbhöhenbreite ab (KÜBLER, 1968). Die Halbhöhenbreite wird mit Hilfe der Scherrer-Gleichung (SCHERRER, 1918; KLUG & ALEXANDER, 1974) wie folgt definiert:

$$\text{FWHM} = \Delta^{\circ}2\Theta = K * \lambda / N * d * \cos\Theta$$

| | | | |
|------|-----------|---|--|
| mit: | FWHM | = | Halbhöhenbreite in rad 2Θ |
| | K | = | Konstante; Werte von 0,89 und 0,94 (KLUG & ALEXANDER, 1974) |
| | λ | = | Strahlungs-Wellenlänge |
| | d | = | Abstand der Gitterebenen |
| | N | = | Anzahl der Flächen |
| | N*d | = | Größe kohärenter Diffraktionsdomänen |
| | Θ | = | Bragg-Winkel einer bestimmten Reflexion. |

Der Kübler-Index ist im Vergleich zu anderen Methoden der Peakanalyse relativ unempfindlich gegen Schwankungen in der Untergrundkorrektur (KRUMM, 1992). Er hat sich international durchgesetzt und wird deshalb auch in dieser Arbeit bevorzugt.

2.1.5.3 Weber-Index (relative Halbhöhenbreite)

Die dimensionslose relative Halbhöhenbreite wurde von WEBER (1972a, b) eingeführt. Sie soll den Einfluß unterschiedlicher Meßparameter ausgleichen. Der Weber-Index ergibt sich aus dem Quotient der Halbhöhenbreite (siehe Kapitel 2.1.5.2) des Illit-(001)-Peaks zum Quarz-(100)-Peak, multipliziert mit 100. Bei früheren Arbeiten wurden natürliche, texturierte Quarzstandards verwendet, die eine Eichung erschweren.

2.1.5.4 Integralbreite

Die Integralbreite ist ein Maß für die Breite einer Röntgeninterferenz. Sie wird definiert als der Quotient der integrierten Peakintensität und der Intensität am Scheitelpunkt der Interferenz (WILSON, 1965). Der Vorteil dieser Methode liegt darin, daß im Gegensatz zur Halbhöhenbreite die gesamte Peakfläche mit in die Bestimmung eingeht, also auch Verbreiterungen an den Peakflanken mit erfaßt werden. Die Ergebnisse dieser Analysemethode sind in den Tabellen IV bis VI im Anhang aufgeführt.

2.1.6 Eichung der Illitkristallinität

Da die Illitkristallinitäts-Messungen von Institut zu Institut variieren, können die von Kübler etablierten Meßwerte für die Ober- und Untergrenze der Anchimetamorphose nicht direkt auf andere Institute übertragen werden. Deshalb ist eine Eichung erforderlich. Die Abweichungen resultieren im Wesentlichen aus den verschiedenen Aufbereitungs- und Präparationsverfahren sowie den unterschiedlichen Geräteeinstellungen für die Messungen. Daher wurden die Illitkristallinitäts-Messungen im IGL der Universität Gießen an zwei verschiedenen Standardgruppen geeicht. Eine Eichreihe bestand aus bereits fertig aufbereitetem Gesteinspulver in Tonfraktion. Diese zwölf Standardproben stammten von Prof. Frey (Basel). Hier mußten aus dem Pulver nur noch die Meßpräparate nach der in Gießen verwendeten Methode hergestellt werden. Der Vorteil dieser „Frey“-Standards besteht darin, daß die Eichung an Präparaten erfolgt, die nach dem jeweiligen Institutsverfahren hergestellt wurden und nicht an polierten Gesteinsanschliffen, wie es früher üblich war. Ein weiterer Vorteil ist, daß diese Proben in den Instituten von Prof. Kübler und von Prof. Frey direkt geeicht wurden. Nachteilig ist, daß der Einfluß der unterschiedlichen Aufbereitungsmethoden der verschiedenen Institute hier nicht berücksichtigt werden kann. Die zweite Eichreihe, der sogenannte CIS-Standard, besteht aus Probenmaterial von WARR & RICE (1994). Diese sechs Proben wurden in Form von grob gebrochenem Gesteinsmaterial (< 2 cm) verschickt. Der Vorteil dieses Standards ist, daß neben der Herstellung der Meßpräparate auch die Aufbereitung nach dem Verfahren des jeweiligen Instituts erfolgt. D.h., hier fließen die wichtigsten Variablen wie Aufbereitung, Präparatherstellung und Geräteeinstellung in die Eichmessungen ein. Auch wird dieser Standard mittlerweile an vielen Instituten verwendet. Ein Nachteil dieser Methode ist, daß diese Eichung an den Werten von WARR & RICE (1994) erfolgt, die wiederum ihre Werte mit Hilfe von polierten Gesteinsanschliffen dieser Proben mit dem Labor von Prof. Kisch korreliert haben. Kisch stellte zusätzlich noch eine Standardabweichung zu den Küblerwerten fest. Dieses Verfahren benötigt zwei Korrelationen

mehr als der „Frey“-Standard. In dieser Arbeit werden beide Standards nebeneinander verwendet und miteinander verglichen.

2.1.6.1 „Frey“-Standard

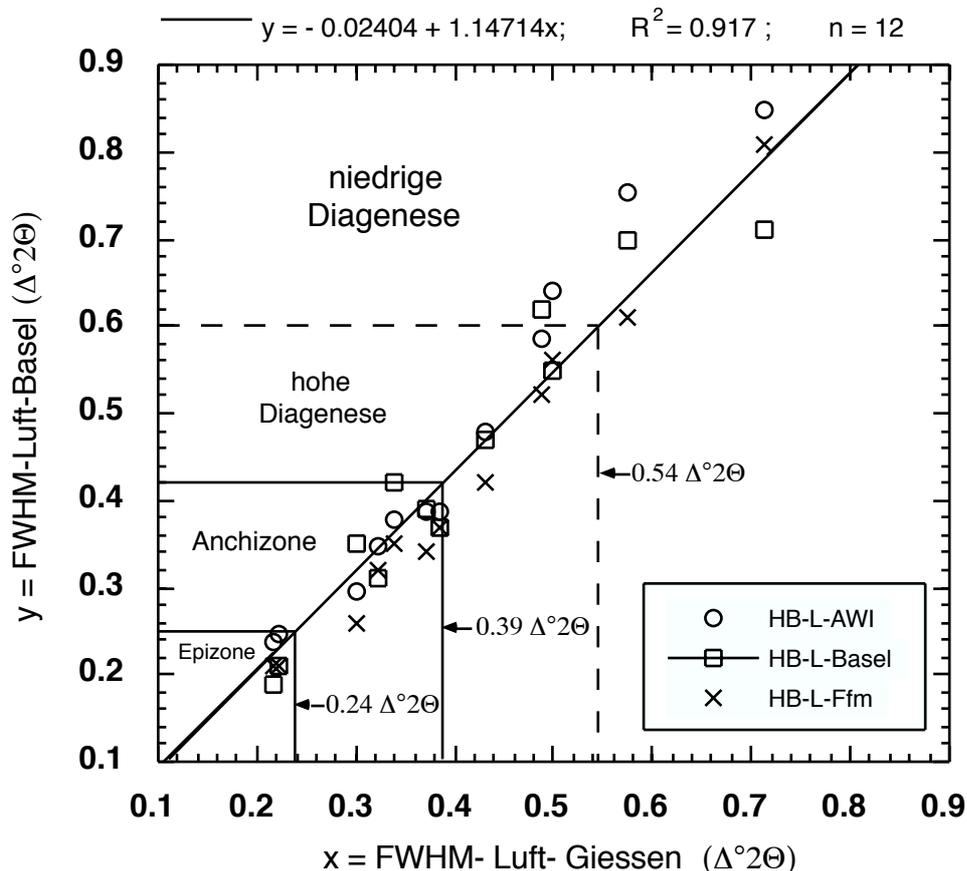


Abb. 12: Korrelation der Illitkristallinität mit dem „Frey“-Standard. Dieses Diagramm zeigt die $FWHM_{Luft}$ -Werte der 12 Standardproben der Institute in Basel, AWI-Bremerhaven und Frankfurt, aufgetragen gegen die Werte des IGL in Gießen. Die durchgezogene Linie stellt die Regressionsgrade (Formel wie oben abgebildet) für den Vergleich der Gießener und der Baseler Messungen dar.

Die Ober- und Untergrenze der Anchimetamorphose ist nach KÜBLER et al. (1979, Tab. 3) und nach FREY et al. (1980) bei $0,42 \Delta^\circ 2\theta$ und $0,25 \Delta^\circ 2\theta$ Halbhöhenbreite (FWHM) definiert und wird ausschließlich durch die Illitkristallinität festgelegt. Die zwölf Gesteinsproben, die von Herrn Prof. Martin Frey, Universität Basel stammen, wurden freundlicherweise von Herrn Dr. Rainer Petschick, Geologisch-Paläontologisches Institut in Frankfurt am Main, zur Verfügung gestellt. Das Probenmaterial war ein trockenes Gesteinspulver der Kornfraktion $< 2 \mu\text{m}$. Die Pulverproben wurden nach dem oben beschriebenen Verfahren sedimentiert. Die Korrelation der Meßwerte aus Gießen und Basel (Abb. 12) ist sehr gut und führt nur zu einer geringfügigen Verschiebung der Grenzwerte für die Anchizone auf

0,39 $\Delta^2\Theta$ und 0,24 $\Delta^2\Theta$. Die Unterteilung der Diagenese-Zone in eine niedrigere und eine höhere liegt nach HESSE & DALTON (1991) bei 0,60 $\Delta^2\Theta$, bzw. 0,54 $\Delta^2\Theta$ in dieser Korrelation.

2.1.6.2 Eichung der Illitkristallinität am Crystallinity Index Standard (CIS)

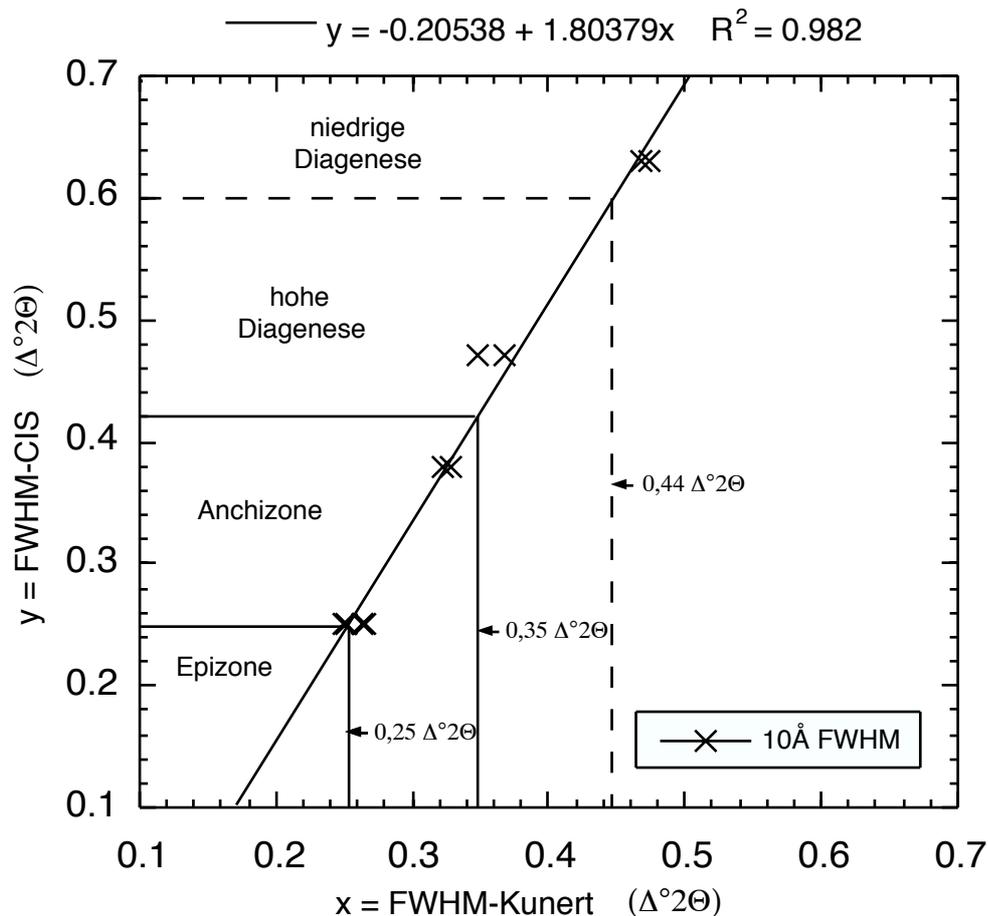


Abb. 13: Korrelation der Illitkristallinität an dem CIS-Standard. Dargestellt sind die Messungen von zehn luftgetrockneten Präparaten, die aus vier Standardproben hergestellt wurden.

Der CIS-Standard wurde von WARR & RICE (1994) entwickelt und soll dazu beitragen, eine bessere Kalibrierung der Messungen zwischen den verschiedenen Labors zu ermöglichen. Die Illitkristallinitäten wurden unter Verwendung von polierten Gesteinsanschliffen mit den Werten von Kisch korreliert und somit an den von Kisch und Kübler etablierten Grenzen der Anchimetamorphose (KISCH, 1980, 1990) geeicht. Die CIS-Standardproben stammten aus einem Profil des Very Low-Grade Metamorphosegürtels von Nord-Cornwall, SW-England. Die regionale Metamorphose wurde von verschiedenen Autoren intensiv untersucht. Es konnten mit Hilfe petrologischer Analysen unterschiedliche Metamorphosestadien bestimmt werden, für die auch Illitkristallinitätsdaten analysiert wurden. Die CIS-Proben wurden in

Heidelberg nach den Empfehlungen der IGCP 294 IC Arbeitsgruppe aufbereitet (KISCH, 1991). Das Standardmaterial wird in Form von grob gebrochenem (< 2 cm) Gesteinsmaterial verschickt. Dieses Material soll dann von dem jeweiligen Labor nach der eigenen Methode aufbereitet werden, so daß die verschiedenen Aufbereitungsmethoden in die Eichung der Illitkristallinität mit einfließen.

Tab. 2: Metamorphosegrenzen nach der Korrelation mit verschiedenen Standards ausgedrückt in ($\Delta^{\circ}2\Theta$).

| Metamorphose | 10 Å Illit Frey-Standard ($\Delta^{\circ}2\Theta$) | 10 Å Illit CIS-Kunert ($\Delta^{\circ}2\Theta$) | 10 Å Illit CIS-Standard (Kübler-Werte) ($\Delta^{\circ}2\Theta$) |
|---------------------------|--|---|--|
| niedrige Digenese | > 0,54 | > 0,44 | > 0,60 |
| hohe Diagenese | 0,39 < 0,54 | 0,35 < 0,44 | 0,42 < 0,60 |
| niedrige Anchizone | 0,32 < 0,39 | 0,30 < 0,35 | 0,34 < 0,42 |
| hohe Anchizone | 0,24 < 0,32 | 0,25 < 0,30 | 0,25 < 0,34 |
| Epizone | < 0,24 | < 0,25 | < 0,25 |

Leider stand für die Aufbereitung nur sehr wenig Probenmaterial zur Verfügung, so daß der Einfluß der verschiedenen in Gießen angewendeten Aufbereitungsmethoden nicht getestet werden konnte. Die Messungen wurden aufgrund des geringen Probenvolumens an mit H₂O₂ dispergierten Präparaten durchgeführt. Nur die Probe SW6 konnte auch als ein mit Ultraschall dispergiertes Präparat gemessen werden. Die Meßwerte zeigen eine sehr gute lineare Korrelation mit einem Korrelationskoeffizienten von $R^2 = 0,98$ (Abb. 13). Die Ergebnisse der CIS-Standardmessungen sind im Anhang, Tabelle Ib₂ präsentiert.

An diesem Standardisierungsversuch kann kritisiert werden, daß zunächst eine Kalibrierung des Heidelberger Labors mit dem des Beer Sheva Instituts (Kisch) zwar mit den CIS-Standards, aber anhand von polierten Gesteinsdickschliffen erfolgte und nicht, wie verlangt, an texturierten Pulverpräparaten < 2 µm. Ein weiterer Kritikpunkt ist, daß nicht die Werte von Kisch angegeben wurden, sondern die korrelierten von Warr, die dann wieder mit den eigenen Messungen korreliert werden mußten. Die statistische Genauigkeit dieses CIS-Standards ist nicht ausreichend, da nur vier Proben zur Verfügung stehen. Die Metamorphosegrenzen für die beiden verschiedenen Standards sind in Tabelle 2 aufgeführt. Für

diese Arbeit wurde die Anchizone in ihrer Mitte nach HESSE & DALTON (1991) in einen hohen und einen niedrigen Bereich unterteilt.

2.1.7 Probenauswahl

Für die Auswahl der Gesteinsproben sind zwei entscheidende Kriterien zu beachten. Zum einen die geologische Fragestellung bzw. Zielsetzung und zum anderen die Möglichkeiten und Grenzen, die die gewählte Methode zur Analyse der Proben erlaubt. Die Auswahl der Gesteinsproben mußte so getroffen werden, daß mit Hilfe der Methode der Illitkristallinität die erwartete thermische Anomalie möglichst ohne störende geologische Einflüsse ausgearbeitet werden konnte. Dazu war es notwendig, über einen möglichst großen Bereich des Arbeitsgebietes flächendeckend ein dichtes Netz von Proben annähernd gleicher Zusammensetzung zu nehmen.

Es wurden nur Illitkristallinitätswerte von Proben aus einer stratigraphischen Einheit mit einheitlicher lithologischer Zusammensetzung verglichen. Dadurch sollten Schwankungen in der Illitkristallinität vermieden werden, die von einer unterschiedlichen Gesteinszusammensetzung oder einem variierenden Porenvolumen, d.h. letztendlich von einer unterschiedlichen Kaliumzufuhr, bzw. Über- oder Untersättigung herrühren könnten. Das zu vergleichende Material sollte die gleiche Korngröße sowie das gleiche Festigkeits- und Bruchverhalten besitzen, damit die Proben während der mechanischen Aufbereitung keine Unterschiede zeigen, die sich wiederum auf die Illitkristallinität auswirken könnten. In dieser Studie wurden nur Pelite aus der Tonschiefer-Grauwacken-Wechselagerung des Unterkarbons (Kulm) beprobt, wobei pelitreiche Lagen bevorzugt wurden. Diese stratigraphische Einheit ist über einen großen Bereich der Frankenwälder Querzone aufgeschlossen. Die Sedimente stammen aus dem selben südlichen Liefergebiet (J. SCHÄFER, 1996) und wurden alle von Suspensionsströmen transportiert. Die Tonfraktion von Sedimenten, die aus Trübeströmen abgelagert wurden, enthalten mit großer Wahrscheinlichkeit wechselnde Anteile verschiedenartiger detritischer Glimmer. Jedoch ist die Beprobung einer paläogeographisch einheitlichen Flyschserie in der Praxis für dieses Arbeitsgebiet die beste denkbare Näherung an ein Ausgangsmaterial einheitlicher Zusammensetzung.

In dieser Arbeit wurden 199 Tonschieferproben aus dem Unterkarbon untersucht. Die Lage der Proben und ihre Probennummer sind in der Karte (Abb. 14) dargestellt; genaue Angaben sind in der Tabelle II im Anhang zu finden.

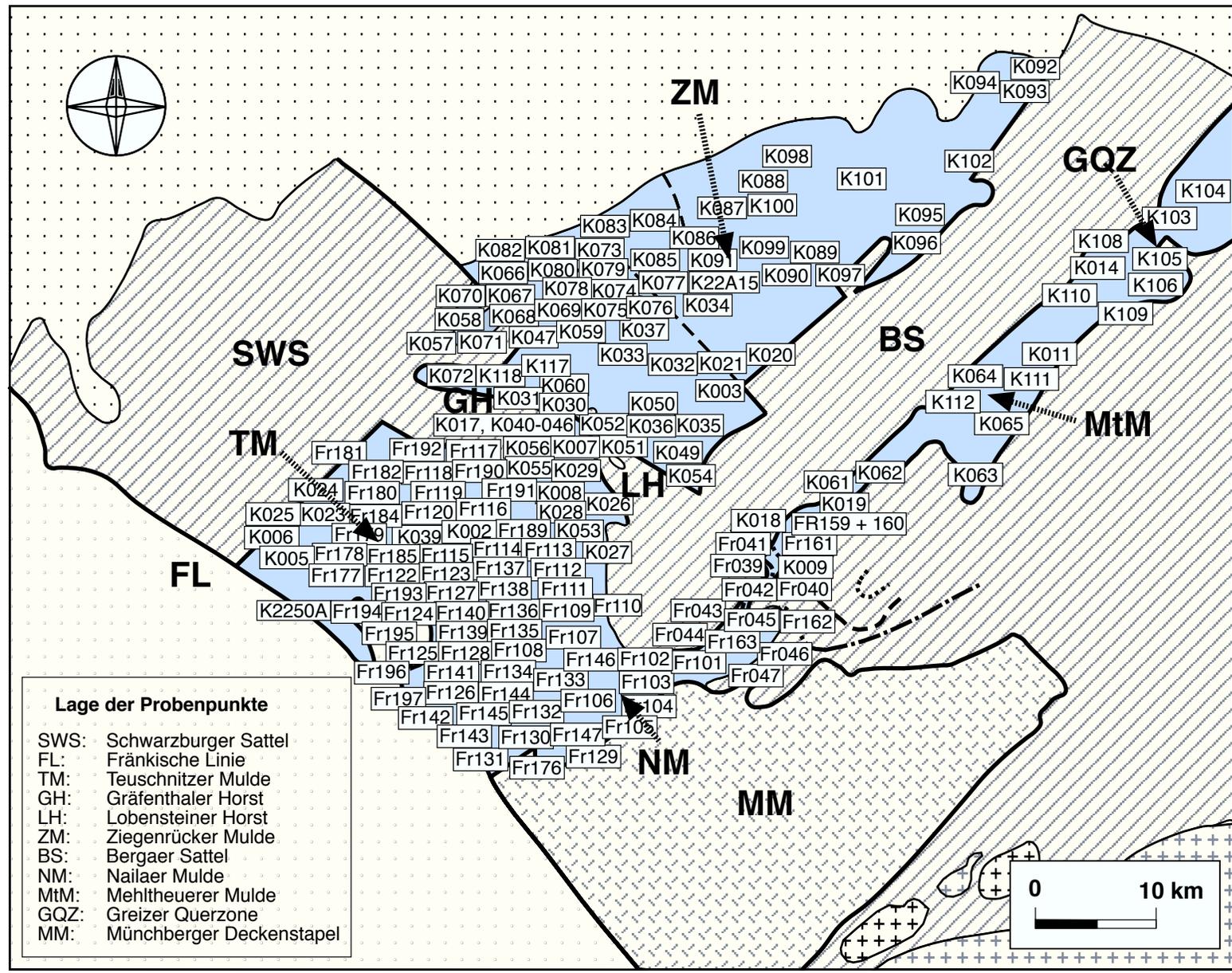


Abb. 14: Geologische Karte: Nummer und Lage der Probenahmeepunkte.

2.1.8 Aufbereitung der Gesteinsproben

Um die Einflüsse der Probenaufbereitung und der angewendeten Meßmethoden auf die Illitkristallinität gering zu halten, wurden die geltenden Richtlinien des IGCP 294 (KISCH, 1991) als Grundlage verwendet.

Die Gesteine wurden zuerst gewaschen. Anschließend wurden die makroskopisch sichtbaren verwitterten Bereiche, die Entfärbungsaureolen sowie die mineralisierten Klüfte entfernt. Ein entscheidender und äußerst schwieriger Punkt der Probenaufbereitung ist die Tonfraktion aus dem festen Gesteinsverband zu lösen, ohne den kristallinen Zustand der Phyllosilikate zu verändern und ohne die Minerale künstlich auf Tonkorngröße zu verkleinern. Aus diesem Grund wurden die Proben „nur“ mit einem Backenbrecher zerkleinert. Auf ein anschließendes Mahlen des Gesteinszerreibsels wurde völlig verzichtet. Das Material wurde auf einer mittleren Stufe zerkleinert. Danach wurde das Backenbrecherklein mit einem Sieb (< 0,63 mm) von dem Gesteinsmehl getrennt, um den Abrieb mit der restlichen Verwitterungskruste zu entfernen. Daraufhin wurde das Backenbrecherklein mit einer kleineren Stufe weiter zerkleinert, um schließlich die kleinste Stufe fünfmal zu durchlaufen. Von der zerkleinerten Gesteinsprobe wurde mit einem Sieb die Fraktion < 0,63 mm abgetrennt und zur weiteren Verarbeitung zu Tonpräparaten bereitgestellt.

In dieser Arbeit wurden zur Aufbereitung der Feinfraktion, insbesondere zur Auflösung von Illitagglomeraten, die eine größere Korngröße vortäuschen können, drei unterschiedliche Verfahren gegenübergestellt und deren Einfluß auf die Illitkristallinität getestet. Für jedes dieser Verfahren wurden ca. 100 g der Fraktion < 0,63 mm aus einer Probe verwendet:

a) Behandlung mit Wasserstoffperoxid (H_2O_2)

Mit diesem Verfahren sollten die organischen Bestandteile aus der Probe durch Oxidation entfernt (WEBER, 1972b) und die eventuell vorhandenen Kornaggregationen aufgelöst werden. 100 g Probenmaterial wurden mit 250 ml 35prozentigem H_2O_2 aufgegossen und die Suspension mehrmals täglich aufgeschüttelt. Nach dem Abklingen der Reaktion erfolgten eine Neutralisation der Suspension mit NH_3 und eine anschließende 30minütige Behandlung in einer Ultraschallwanne (80 - 160 W, 220 V, 350 kHz).

b) Behandlung nur mit Ultraschall (US)

Der Ultraschall sollte die eventuell vorhandenen Kornaggregate auflösen. Dazu wurden 100 g Probe 30 min in einer Ultraschallwanne dispergiert.

c) 100 g der Feinfraktion wurden nicht behandelt.

Zur Analyse der Illitkristallinität wird üblicherweise die Kornfraktion mit einem Äquivalenzdurchmesser $< 2 \mu\text{m}$ verwendet. Diese Tonfraktion wurde mit Hilfe des Atterbergverfahrens gewonnen (fünf Durchläufe). Die Anreicherung der Dispersion mit Calciumchlorid diente zur Kationensättigung in den Smektiten und in den quellfähigen Zwischenschichten. Diese reagieren sehr empfindlich auf einen Ladungsaustausch, der durch die Fluidumgebung gefördert wird. Die Smektitlagen in den Illit-Smektit-Wechselagerung sind in vielen Gesteinen überwiegend Ca-gesättigt bzw. können durch schwach saure Lösung Ca-gesättigt werden. Deshalb bevorzugen die meisten Autoren (u.a. Kübler, Kisch und Frey) den Einsatz von Calciumchlorid zur Kationensättigung von Illiten aus einer Ca-defizitären Umgebung (KISCH, 1991), z.B. Na-reiche und K-defizitäre Schwarzschiefer, deren quellfähige Lagen zu einer Na-Sättigung tendieren (KÜBLER, 1990). Nach der Kationensättigung wurden die Proben mit einer Zentrifuge (5000 upm, $T = 30 \text{ min}$, Temperaturschalter bei $25 \text{ }^\circ\text{C}$) weiter konzentriert.

2.1.8.1 Anfertigung der Meßpräparate zur RDA-Messung

Für die Bestimmung der Illitkristallinität mit dem Röntgendiffraktometer (RDA) ist es notwendig, texturierte Präparate herzustellen, deren Tonminerale in ihrer kristallographischen Vorzugsrichtung eingeregelt sind. Damit wird erreicht, daß die Auflösung der RDA-Reflexionen der eines „Pseudo-Monokristalls“ entspricht. Bisher wurde in Gießen ein Absaugverfahren verwendet, bei dem die Probensubstanz auf einen Zellulosenitrat-Filter gezogen wurde. Das Verfahren zur Präparatherstellung wurde nun geändert, um einen Datenvergleich zwischen verschiedenen Labors zu gestatten. Es wurden Texturpräparate durch einfache Sedimentation hergestellt. KRUMM (1992) empfahl eine Belegungsdichte von nur $0,25 \text{ mg / cm}^2$, mit der sich schon ein Plateau in der Halbhöhenbreite einstellen soll. KISCH (1991) hingegen empfahl eine Belegungsdichte von mindestens 3 mg / cm^2 und ÁRKAI (1991) eine von $1 - 3 \text{ mg / cm}^2$. Mit dieser Belegungsdichte wird eine maximale Intensität im Röntgendiffraktogramm (Plateau) erreicht, die wiederum die Halbhöhenbreite beeinflußt (KISCH, 1991). LEZZERINI et al. (1995) empfahlen eine Belegungsdichte, die auf jeden Fall $> 0,5 \text{ mg / cm}^2$ sein sollte, da unterhalb dieses Grenzwertes die Illitkristallinitäts-Werte steil abfallen würden. Nach EBERL et al. (1987) sollte die Belegungsdichte nicht geringer als 1 mg / cm^2 sein, da sonst die quellfähigen Tone nicht vollständig expandieren können. Es wurden Texturpräparate mit einer Belegungsdichte von 2 mg / cm^2 hergestellt. Mit dieser Belegungsdichte ist sichergestellt, daß sowohl das Intensitätsplateau erreicht als auch die quellfähigen Komponenten erfaßt werden. Gleichzeitig kann die nötige Tonmaterialmenge gering gehalten werden.

Um ein Texturpräparat mit einer bestimmten Belegdicke anfertigen zu können, muß zunächst der Feststoffgehalt der Suspension bestimmt werden. Dazu wurde das Naß-Wägeverfahren nach KRUMM (1984) eingeführt. Der Suspension wurde ein bestimmtes Aliquot entnommen, eingetrocknet und ausgewogen. Mit den Daten wurde die Menge an Suspension berechnet, die notwendig war, um die gewünschte Präparatdicke von 2 mg / cm^2 zu erzielen. Diese wurde so aufbereitet, daß $1000 \text{ } \mu\text{l}$ Suspension die entsprechende Belegdicke ergaben. Diese definierte Suspensionsmenge garantiert eine gleichbleibende Sinkhöhe für die Illite und somit eine gleichmäßige Qualität der Texturierung. Die Suspension wurde in Metallzylindern, die mit einer Gummiringdichtung auf den Objektträger aufgesetzt wurden, bei max. $50 \text{ } ^\circ\text{C}$ im Trockenschrank eingetrocknet.

2.1.9 Apparative Bedingungen und Meßverfahren

| | |
|---|--------------------------|
| Generator..... | Siemens D500 |
| Anregungsspannung und Heizstromstärke..... | 40 kV / 30 mA |
| Strahlung..... | Cu $K\alpha$ |
| Aperturdiaphragmen..... | 1° |
| Detektordiaphragmen..... | 1° |
| Divergenzblende..... | $0,5^\circ$ |
| Graphit-Monochromator | |
| Zeitkonstante..... | 2 s |
| Scanbereich..... | 2 bis $50^\circ 2\theta$ |
| Schrittweite..... | $0,01^\circ$ |

Die Messungen liefen computergestützt mit dem Programm Difftract 3000 (Siemens), und die Peakprofile wurden mit dem Programm MacDiff 3.3 (Petschick) untersucht.

2.1.9.1 Interne Standards

Interne Standards werden verwendet, um zum einen die RDA und die Intensität der Röntgenröhre zu justieren und zum anderen, um die Lage der Peaks im Röntgendiffraktogramm der Meßpräparate zu korrigieren. Als Standard diente ein industriell gewonnenes Quarzpulver (Merck, Art. 7536, 99,9 % SiO_2) und ein Präparat, das aus eigenem Probenmaterial hergestellt wurde. Die Quarzpräparate dienen zur Korrektur des nutzungsbedingten Abfalls der Intensität der CuK_α -Röntgenröhre. Das Quarzpulver wurde in der Scheibenschwingmühle gemahlen und anschließend im gleichen Verfahren wie die Illitproben aufbereitet und

präpariert bzw. in Tablettenform gepreßt. Neben den eigenen Quarzmessungen wurden jeden Monat Kontrollmessungen durchgeführt sowie eine Justierung des Geräts vorgenommen.

Zur Eichung der Peakpositionen in den Röntgendiffraktogrammen der Meßpräparate der Proben des Arbeitsgebietes konnte der Quarzpeak (001) bei $d = 4.26 \text{ \AA}$ verwendet werden. Mit dem wesentlich intensitätsstärkeren Quarzpeak (100) bei $d = 3.31 \text{ \AA}$ konnte keine Korrektur vorgenommen werden, weil dieser von Peaks aus anderen Mineralphasen (vorwiegend Illit) überlagert wird. Da eine ausreichende Menge an natürlichem Quarz in den Meßpräparaten vorhanden war, wurde darauf verzichtet, zusätzlich Quarzpulver in das Präparat einzubringen. Eine Anreicherung von Quarz hätte die Texturierung der Präparate verschlechtert.

Ein abnutzungsbedingter Abfall der Intensität der Röntgenröhre von etwa 1100 Counts auf nur 600 Counts verursachte keine Änderung in der Halbhöhenbreite des 10\AA Illitpeaks (Abb. 15). Für den internen Standard variierte die Halbhöhenbreite über den gesamten Meßzyklus um 5 %.

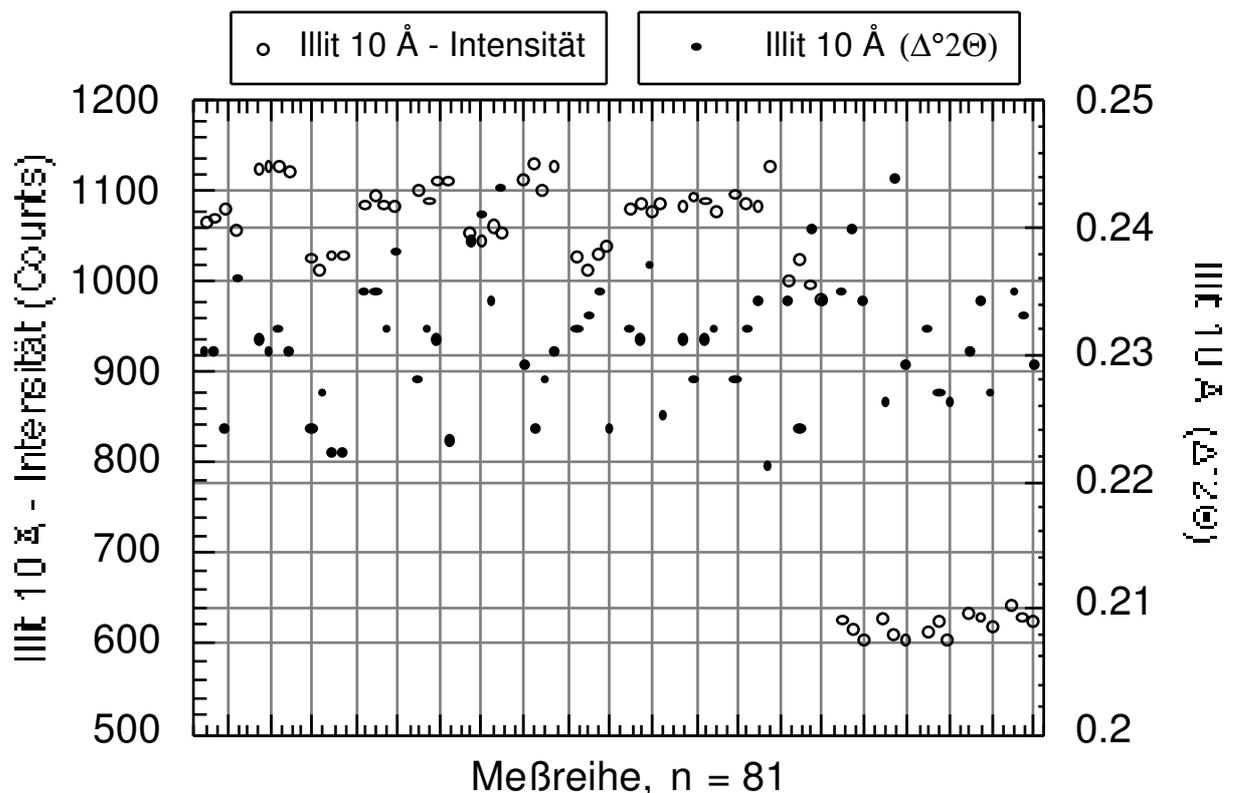


Abb. 15: Interner Meßstandard zur Überprüfung der Abweichung der FWHM während der Meßkampagne. Aufgetragen sind die Intensitäten und die Halbhöhenbreiten für die einzelnen Standardmessungen.

2.1.10 Phasenanalyse

2.1.10.1 Qualitative Phasenanalyse

Die Qualitative Phasenanalyse wurde an den Röntgen diffraktogrammen mit Hilfe der ICPDS-Datei (International Centre for Diffraction Data) durchgeführt. Die Proben wurden im luftgetrockneten Zustand sowie nach einer Ethylen-Glycol-Behandlung mit dem Röntgen diffraktometer gemessen. Anschließend wurden die Peakprofile verglichen, um eventuell vorhandene, quellfähige Tonminerale von den nicht quellenden unterscheiden zu können.

A) Quellfähige- und Wechsellagerungsminerale

a) Diskreter Smektit

Diskreter Smektit (Montmorillonit) ist nach der Ethylen-Glycol-Behandlung im Röntgen diffraktogramm an einem eigenständigen Peak bei 17 \AA erkennbar. Er hat seinen Stabilitätsbereich in der Diagenesezone, wird aber bei $70 - 120 \text{ }^\circ\text{C}$ bereits instabil (BRAUKMANN, 1984; DUNOYER DE SEGONZAC, 1970; VELDE, 1977). Im Arbeitsgebiet konnte mit der RDA kein diskreter Smektit nachgewiesen werden.

b) Illit-Smektit

Als Illit-Smektite bezeichnete SRODON (1984) unregelmäßig geordnete Wechsellagerungsminerale. Sie zeigen nach der Ethylen-Glycol-Behandlung, je nach Anteil der quellfähigen Lagen, ihre stärkste Interferenz zwischen 12 \AA und 10 \AA . Auch im Bereich der anchizonalen Metamorphose können Illit-Smektite, ohne daß sie nach der Glykolierung durch eine Linienverschiebung im Diffraktogramm erkennbar sind, bis zu 10% am Reflex des 10 \AA Illitpeaks beteiligt sein (BRAUKMANN, 1984). Nach der Ethylen-Glycol-Behandlung ist in diesem Fall eine Intensitätsabnahme, verbunden mit einer geringeren Halbhöhenbreite, festzustellen.

Bei höheren Smektitgehalten $\geq 15 \%$ geben Reflexe bei $6-8 \Delta^2\Theta$ und $33 - 35 \Delta^2\Theta$ eindeutige Hinweise auf das Vorhandensein von Wechsellagerungsmineralen (SRODON, 1984). Der $6 - 8 \Delta^2\Theta$ Reflex bildet oft eine Schulter am $8.89 \Delta^2\Theta$ (10 \AA) Illitreflex aus und eignet sich selten für genauere Smektitbestimmungen. Nach der Ethylen-Glykol-Behandlung ist eine Verschiebung zu 11 \AA bis 12 \AA typisch. Sind der BB1-Index (Basisbreite des (001)-Reflexes bei etwa 10 \AA) und der BB2-Index (Basisbreite des (004)-Reflexes bei 35 \AA) $> 4^\circ$, so handelt es sich nach SRODON (1984) um irreguläre Illit-Smektite (IS). Sind die Indizes $< 4^\circ$, so ist von einer Quellfähigkeit $< 15 \%$ auszugehen. Die RDA-Analysen ergaben für Proben aus dem hochdiagenetischen bis schwach anchizonalen Metamorphosebereich eine Intensitätsabnahme

des 10 Å Peaks, verbunden mit einer schmalen Halbhöhenbreite. Das ist ein Hinweis auf einen Smektitgehalt von maximal 10 %. Auch die BB1- und BB2-Indizes zeigen eine Quellfähigkeit < 15 %.

c) Chlorit-Smektite

Chlorit-Smektite (Corrensit-Illit-Wechselagerungen) bilden reguläre Wechselagerungen mit Reflexen bei $2,9 \Delta^2\Theta$ bis $3,1 \Delta^2\Theta$, $6,2 \Delta^2\Theta$, $9,2 \Delta^2\Theta$, $12,2 \Delta^2\Theta$, und bei $30 \Delta^2\Theta$ im luftgetrockneten Zustand. Nach einer Ethylen-Glycol-Behandlung verschieben sich die Linien im Diffraktogramm in höhere Winkelbereiche. Die Chlorit-Smektite sind eine diagenetische Vorstufe der 7 Å Chlorite. BRAUKMANN (1984) beschrieb eine Umwandlung mit zunehmender Temperatur: Montmorillonit/Vermiculit → Corrensit → Chlorit. Chlorit-Smektite konnten in den eigenen RDA-Analysen nicht mehr identifiziert werden, dafür jedoch deutliche Reflexe der 7 Å Chlorite.

B) Diskreter Illit / Muskovit

Die qualitative Bestimmung des Illit / Muskovit wird in diesem Abschnitt schrittweise beschrieben.

a) Illit-Modifikationen

Mit zunehmendem Diageneseegrad ist eine Umwandlung der Illit-Modifikationen in den Sedimenten in folgender Richtung zu erwarten: $1M_d \rightarrow 1M \rightarrow 2M$ (YODER & EUGSTER, 1955). VELDE (1965) betrachtete die $1M_d$ - und $1M$ -Hellglimmer als metastabile Phasen, die sich mit zunehmender Zeit, Temperatur und steigendem Druck in die stabile $2M$ -Modifikation umwandeln. Die Polytype können durch das Auftreten charakteristischer Reflexe unterschieden werden. Nach YODER & EUGSTER (1955) kann die $1M$ -Modifikation durch den 3,66 Å-Peak und den 3,07 Å-Peak und der $2M_1$ -Polytyp durch die 2,80 Å-Interferenz nachgewiesen werden. Leider besteht das Problem, daß verschiedene Minerale mit den unterschiedlichen Peaks koinzidieren: Albit (3,66 Å), Graphit (3,35 Å), Pyrophyllit (3,07 Å), Chlorit, Magnesit und Kalifeldspat bei 2,80 Å sowie Chlorit, Kaolin, Smektit und Paragonit bei 2,58 Å. In den Röntgendiffraktogrammen der eigenen Proben waren die oben genannten Ordnungslinien für den $1M$ -Illit so schwach ausgeprägt, daß ein $1M$ -Polytyp nicht bestimmt werden konnte. Der 2,8 Å Peak des $2M_1$ -Illites war deutlich zu erkennen und ließ sich meist gut vom 2,82 Å Chloritpeak unterscheiden. Folglich ist in den Proben im wesentlichen $2M$ -Illit / Muskovit vorhanden.

b) Esquevin-Index

Mit dem Esquevin-Index ($5 \text{ \AA} / 10 \text{ \AA}$ -Intensitätsverhältnis) lassen sich Al- und K- sowie Mg- und Fe-betonte Illite bzw. Muskovite grob unterscheiden (ESQUEVIN, 1969; DUNOYER DE SEGONZAC, 1970). In allen Proben war es möglich, diesen Quotienten zu berechnen. 10 % der analysierten Proben hatten einen Index $< 0,3$. Sie zeigten somit eine muskovitisch-phengitische Zusammensetzung $\text{KAl}(\text{Mg,Fe})(\text{Si}_4)\text{O}_{10}(\text{OH})_2$. 90 % der Proben zeigten dagegen einen Index $> 0,4$ und damit eine muskovitische Zusammensetzung $[\text{KAl}_2(\text{Si}_3\text{Al})\text{O}_{10}(\text{OH})_2]$ (Abb. 16). In Abbildung 17 ist eine deutliche Abhängigkeit des Esquevin-Indexes von der Halbhöhenbreite zu erkennen. Die kontinuierliche Entwicklung von einem Fe / Mg-betonten Illit mit großer Halbhöhenbreite hin zu einem Al-betonten Illit mit kleiner Halbhöhenbreite ist typisch für metamorph gebildete Illite. Sie ist in diesen Proben ein deutliches Anzeichen für überwiegend metamorph neu gebildete Illite.

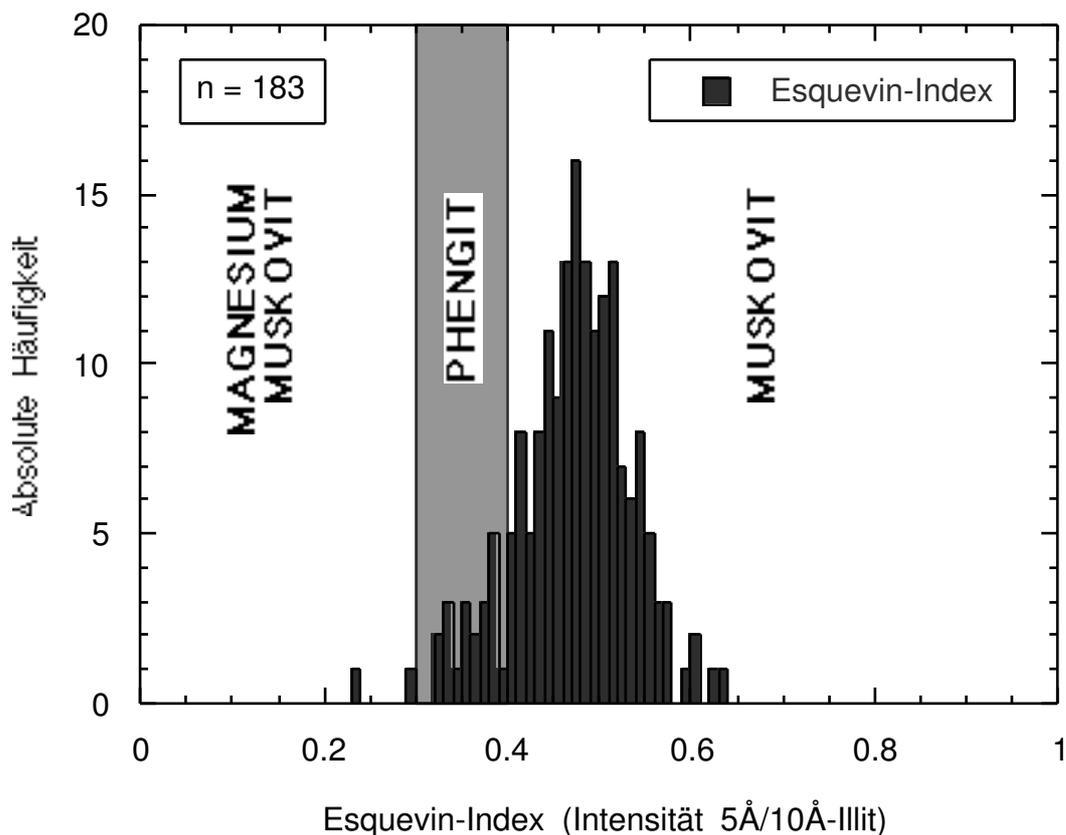


Abb. 16: Dargestellt ist in absoluter Häufigkeit die Lage der unterkarbonischen Tonsiltschiefer in Bezug zum Muskovit bzw. Phengitfeld nach dem Esquevin-Index.

c) Nach SRODON & EBERL (1984) und SRODON (1984) gibt es noch weitere Möglichkeiten, mit Hilfe der RDA den Illit qualitativ zu bestimmen:

- Beträgt der $d_{(002)}$ -Reflex $10 \pm 0,5 \text{ \AA}$, so ist das ein Indiz für Kalium als dominierendes Zwischenschicht-Kation im Illitgitter. Das trifft für fast alle analysierten Proben zu. Nur wenige liegen mit ihrem Wert leicht darüber.

- Liegt der $d_{(060/33-1)}$ -Peak im Meßbereich von $1,50 \text{ \AA} \pm 0,01 \text{ \AA}$, so spricht das für einen dioktaedrischen Glimmer. Die Werte aller gemessenen Proben befinden sich in dem Toleranzbereich von $d_{(060/33-1)}$ für dioktaedrische Glimmer.

- Mit Hilfe des Intensitätsverhältnisses (Intensity-Ratio (Ir)) kann der Smektitgehalt in den Wechsellagerungen der Illite bestimmt werden. Dabei wird das Verhältnis aus der Intensität des $d_{(001)}$ und des $d_{(003)}$ Illitpeaks im luftgetrockneten sowie im mit Ethylen-Glycol behandelten Zustand gebildet und das Ergebnis des ersten durch das des zweiten Quotienten geteilt. Ist das ermittelte Intensitätsverhältnis > 1 , so sind quellfähige Schichten im Illit enthalten. Leider wurde in unseren Mischpräparaten der $d_{(003)}$ -Peak von Peaks anderer Mineralphasen überlagert, so daß diese Methode verfälschte Ergebnisse lieferte.

C) Diskreter Chlorit

Chlorit war neben Illit ein Hauptbestandteil aller Tonfraktionen im Kulm des Arbeitsgebietes. Orientierte Präparate charakterisieren die Chloritgruppe mit Reflexen bei 14 \AA . Bei Interferenzen von $14,1$ bis $14,2 \text{ \AA}$ ($d_{(001)}$) handelt es sich meist um (Ortho-) Chlorit (ÁRKAI, 1991). Nach BROWN (1961) haben eisenreiche Chlorite kleinere $d_{(001)}$ - und $d_{(003)}$ - und größere $d_{(002)}$ - und $d_{(004)}$ -Reflexe als magnesiumreiche Chlorite. Ist der Quotient des Intensitätsverhältnisses $14 \text{ \AA} / 7 \text{ \AA}$ kleiner als $0,33$, so ist dies ein erstes Indiz auf einen eisenreichen Chlorit (BROWN 1961; BRINDLEY & BROWN, 1980). Chlorite verwittern sehr schnell und sind im Sedimentationszyklus instabil. Eisenreiche Chlorite werden im Gegensatz zu den magnesiumreichen als diagenetische Neubildung angesehen (FLEHMIG & GEHLKEN, 1989). Aber auch magnesiumreiche Chlorite können authigener Herkunft sein (BROWN, 1961; VELDE, 1977). In 95 % der Proben konnten eisenreiche Chlorite identifiziert werden.

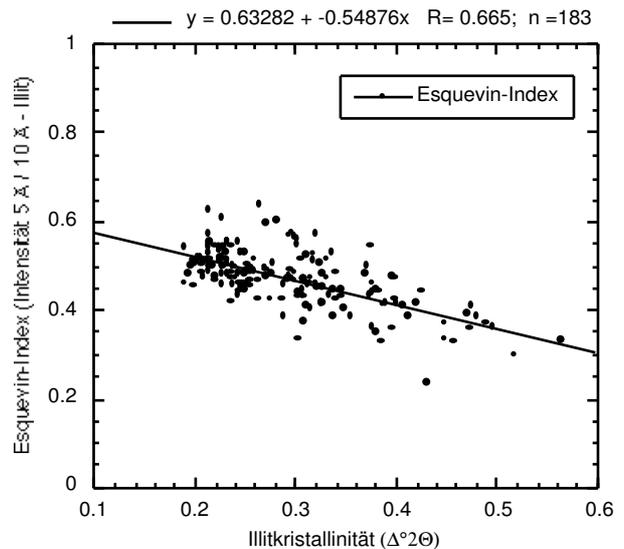


Abb. 17: Dargestellt ist der Esquevin-Index in Bezug zur Illitkristallinität.

Sie sind typisch für anchizonale Metamorphosebedingungen. War der Wert $> 0,33$, so war das meist an schlecht ausgebildete Chloritpeaks gebunden.

D) Kaolinit

Kaolinit (im weitesten Sinne) konnte in den Proben nicht gefunden werden.

E) Quarz

Quarz war neben Illit / Muskovit und Chlorit ebenfalls deutlich in den Diffraktogrammen der untersuchten Proben zu erkennen. Zwei charakteristische Peaks sind der $d_{(100)}$ Peak bei $4,26 \text{ \AA}$ und der $d_{(101)}$ bei $3,343 \text{ \AA}$.

F) Feldspäte

An Feldspäten ließ sich Albit anhand der Reflexe der $4,03 \text{ \AA}$ und $3,2 \text{ \AA}$ Linien erkennen. Der Orthoklasreflex ($3,25 \text{ \AA}$) läßt sich erahnen. Die beiden anderen Alkalifeldspatreflexe $4,23 \text{ \AA}$ und $3,37 \text{ \AA}$ wurden von Illit- und Chloritreflexen überlagert. In diesen Präparaten ließen sich die Feldspäte nicht genauer differenzieren.

G) Zusammenfassung

Der Vergleich der Diffraktogramme von Proben, die im lufttrockenen und im mit Ethylen-Glycol behandelten Zustand gemessen wurden, zeigte keine Linienverschiebung der Illit- und Chloritpeaks durch quellfähige Wechsellagerungen. In den Diffraktogrammen der niedrigstgradig metamorphen Proben, aus dem Grenzbereich der Diagenese zur Anchimetamorphose, war eine geringfügige Abnahme der Halbhöhenbreite im glykolierten Zustand durch eine Verschiebung der koinzidierenden Wechsellagerungen vom Typ Smektit-Illit an der Flanke des 10 \AA Illitpeaks zu erkennen (siehe oben).

Die unter Kapitel B) beschriebenen RDA-Analysen zeigen, daß in den Illiten der Tonfraktion der untersuchten Kulmproben die dioktaedrische 2M-Modifikation des Illits / Muskovits dominiert. Sie besitzen Al-reiche Oktaederschichten, und in ihren Zwischenschichten ist hauptsächlich Kalium eingebaut. Der Anteil an quellfähigen Komponenten liegt unter 15 %. Auch die analysierten Chlorite sind frei von Wechsellagerungen mit quellfähigen Mineralen. Alle untersuchten Proben in der Korngrößenfraktion $< 2 \text{ \mu m}$ setzen sich aus einem sehr ähnlichen Hauptmineralbestand zusammen: Fe-reicher Chlorit, Illit / Muskovit (2M), Quarz und Feldspat. Eine genauere Unterteilung der Mineralgruppen war nicht möglich, da zum einen die JCPDS-Datei für nicht texturierte Präparate erstellt wurde und es sich hier um gut texturiertes Probenmaterial handelt. Zum anderen überlagern sich die Peaks der einzelnen

Mineralgruppen (z.B. der Chlorite und Feldspäte). Sie konnten nur unzureichend getrennt werden oder ihr Anteil war unter der RDA-Nachweisgrenze.

2.1.10.2 Halbquantitative Phasenanalyse

Für untexturierte Präparate ist eine quantitative Mineralphasenanalyse mit Hilfe der RDA prinzipiell möglich. Hierbei gilt, daß die Reflexintensitäten proportional zur Konzentration des Minerals sind. In der Praxis ist das Resultat dieser Analysemethode jedoch nur als eine Näherung zu betrachten, da die das Ergebnis beeinflussenden Faktoren von Probe zu Probe nicht konstant sind und nicht immer erfaßt werden können. So nehmen der Massenschwächungskoeffizient der Minerale, ihre chemische Zusammensetzung und die der Gesamtprobe, die Kristallinität der Minerale, ihre Polytypie sowie die quellfähigen Anteile bei Tonmineralen und auch die Texturierung Einfluß auf die Reflexintensität der Minerale. Zur Bestimmung der Absolutkonzentrationen können innere Standards mit der gleichen Mineralogie und Chemie wie das zu bestimmende Mineral verwendet werden. Dies ist für die stark variierenden Tonminerale jedoch nicht durchführbar. Mit Hilfe von gleichbleibenden Präparationsbedingungen können aber die Präparatdicke, die Korngrößenverteilung und die Kornsortierung relativ konstant gehalten werden.

Nach FERREIRO MÄHLMANN (1994) nimmt mit der Verbesserung des Ordnungsgrades des Illitgitters auch die Reflexintensität zu. Reine Illitpräparate weisen, bei gleicher Illitmenge, mit zunehmender Metamorphose höhere Intensitäten auf, d.h. die röntgen-diffraktometrisch bestimmten Intensitätsverhältnisse können nur als relative Mengenverhältnisse verwendet werden.

Mit der von BRAUKMANN (1984) überarbeiteten halbquantitativen Methode, die ursprünglich von JOHNS et al. (1954) entwickelt und von BISCAYE (1965) erweitert wurde, lassen sich die Mengenverhältnisse der Tonminerale ermitteln. Dazu werden die Präparate glykolisiert und die Peakflächen der jeweils ersten Peaks mit Hilfe des MacDiff 3.3 Programms bestimmt. BRAUKMANN (1984) gab für die halbquantitative Methode folgende Korrekturfaktoren an:

| | | |
|---------------------------|--------|--------|
| - Illit-Smektit (glyc.) | 17,0 Å | x 0,25 |
| - Chlorit-Smektit (glyc.) | 15,5 Å | x 0,33 |
| - Illit/Muskovit | 10,0 Å | x 1,00 |
| - Chlorit | 07,0 Å | x 0,50 |

Da quellfähige Tonminerale in den Präparaten nicht direkt nachgewiesen werden konnten bzw. deren Anteil als Wechsellagerungsmineral im Illit < 10 % - 15 % war, sollten nur Illit / Muskovit und Chlorit an der Zusammensetzung der Tonminerale beteiligt sein. 80 % der Proben hatten einen Illit-Anteil an Tonmineralen von 60 bis 90 %, der Rest bestand im Wesentlichen aus Chlorit (Tabelle III, im Anhang).

2.1.11 Reproduzierbarkeit der Illitkristallinitäts-Messungen

Auf der Basis des standardisierten Verfahrens zur Bestimmung der Halbhöhenbreite soll in diesem Abschnitt die Reproduzierbarkeit der Illitkristallinitäts-Meßwerte untersucht werden. ROBINSON et al. (1990) unterteilten die Faktoren, die diese Reproduzierbarkeit beeinflussen, in drei Gruppen. Sie unterschieden zwischen Fehlern in der Aufbereitungsmethode, Fehlern durch die Bestimmung der jeweiligen Illitkristallinitäts-Meßgröße ("intra sample variance") und den geologischen Fehlern ("inter sample variance").

2.1.11.1 Fehler in der Probenaufbereitung

A) Varianz durch die Anwendung unterschiedlicher Dispersionsverfahren

Je nach Zusammensetzung des Gesteins wird eine unterschiedliche Aufbereitung empfohlen. So soll z.B. in karbonatreichen Gesteinen mit Hilfe von Salzsäure der Karbonatanteil entfernt werden und in kohlenstoffreichen tonigen Gesteinen (z.B. Schwarzschiefern) der Kohlenstoff durch die Anwendung von H_2O_2 oxidiert werden. Der Einsatz dieser Zusätze birgt das Problem, daß ihr Einfluß auf das Kristallgitter der Illite nicht zufriedenstellend geklärt ist.

Die Untersuchungen beschränkten sich auf siltige Tonschiefer, die keinen Kalzit, dafür aber Kohlenstoffpartikel enthielten. In dieser Arbeit wurde an 26 Proben der Einfluß von drei unterschiedlichen Verfahren zur Dispersion (Auflösung von Kornaggregaten) der Tonminerale auf die Illitkristallinität untersucht (siehe Kapitel 2.1.8). Dem Ausgangsmaterial wurde vor dem Atterbergvorgang H_2O_2 zugesetzt. Nach Ablauf der Reaktion wurde es zusätzlich mit Ultraschall in einer Ultraschallwanne behandelt. Im zweiten Verfahren wurde das gleiche Ausgangsmaterial nur mit Ultraschall (US) untersucht. Im dritten Verfahren wurde das Material unbehandelt (NADA) im Atterbergzylinder getrennt. Zusätzlich wurde an sechs Proben getestet, wie die Illitkristallinitäten sich nach einer Langzeitbehandlung (> vier Wochen) mit H_2O_2 verhalten.

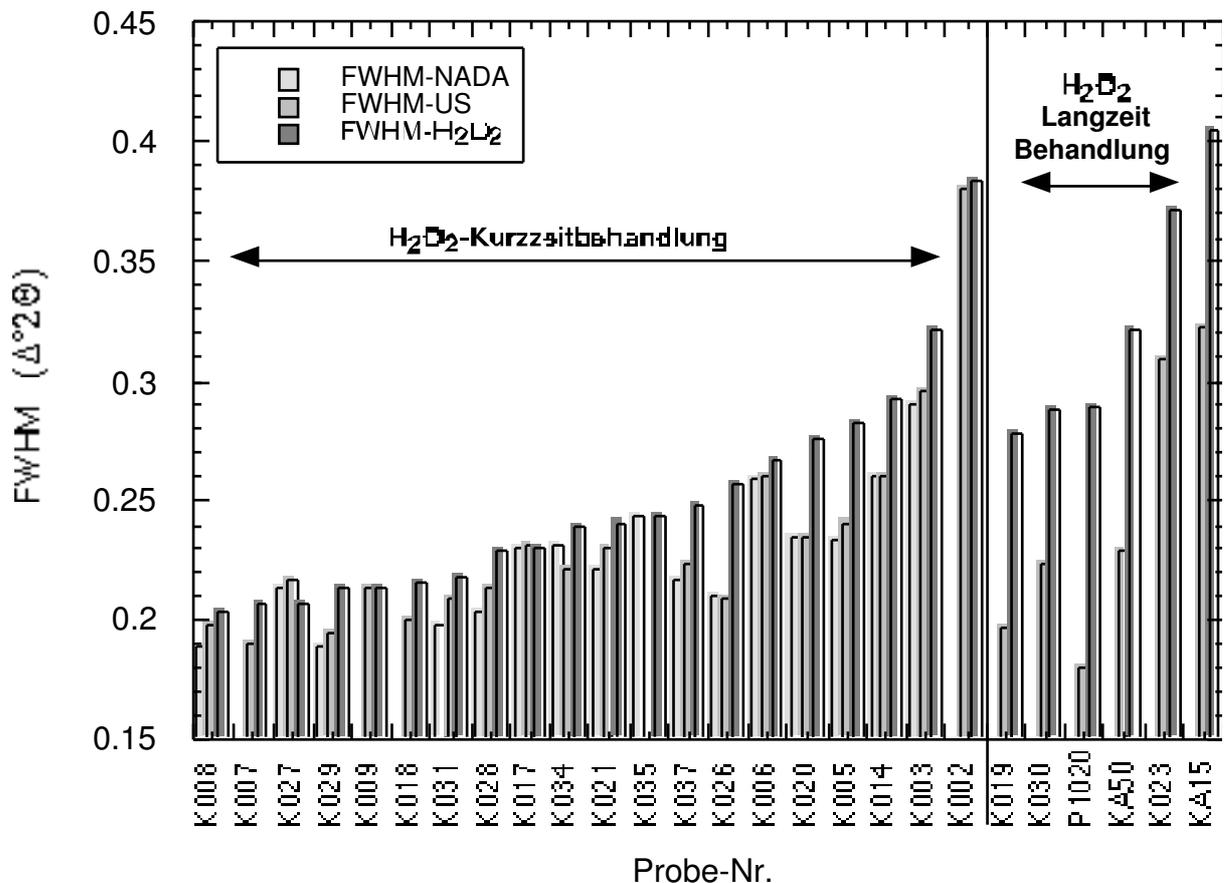


Abb. 18: In diesem Diagramm sind die Auswirkungen der unterschiedlichen Dispersionsverfahren auf die Illitkristallinität dargestellt. Es wird zusätzlich zwischen kurzer und langer H₂O₂-Einwirkungszeit unterschieden.

Durch den Zusatz einer bestimmten Menge H₂O₂ reagierten bei gleicher Anwendungsdauer die verschiedenen Proben unterschiedlich heftig und lange. Die Reaktion war meist mit einer mäßigen bis heftigen, aber kurzen Wärmeentwicklung (80 °C) verbunden. Das Resultat war eine Erhöhung der Intensität und der Halbhöhenbreiten des Illits im Röntgendiffraktogramm. Das Ergebnis ist im Balkendiagramm (Abb. 18) dargestellt. Auf den ersten Blick ist zu erkennen, daß sich die Halbhöhenbreiten der unbehandelten Proben (FWHM-NADA) und der mit Ultraschall behandelten Proben (FWHM-US) nur geringfügig unterscheiden. Sie liegen durchschnittlich 2 % unter dem FWHM-US Wert. Auch besteht eine sehr gute Korrelation zwischen den FWHM-NADA und FWHM-US-Messungen, mit $n = 15$ und $R^2 = 0,96$ (Abb. 19a).

Abb. 19a:

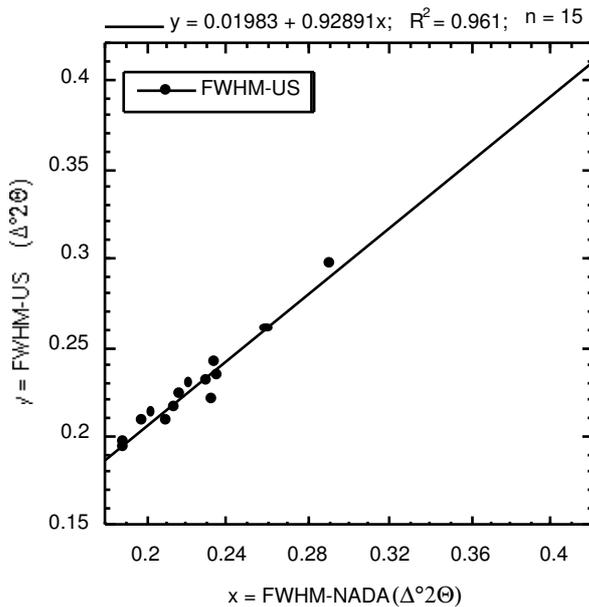


Abb. 19b:

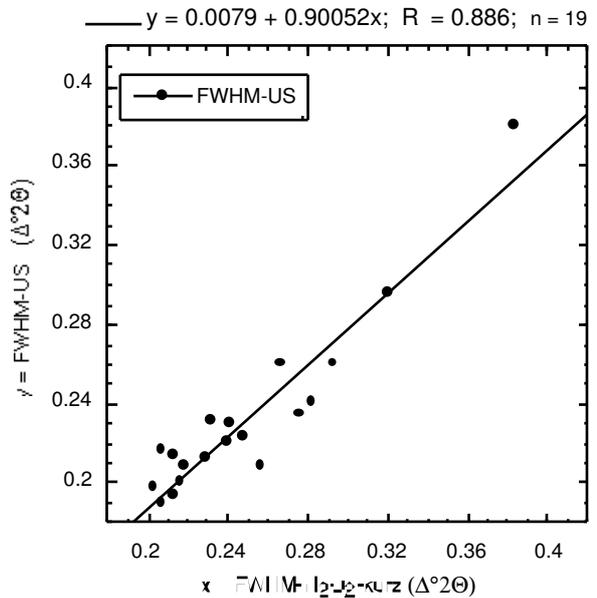


Abb. 19c:

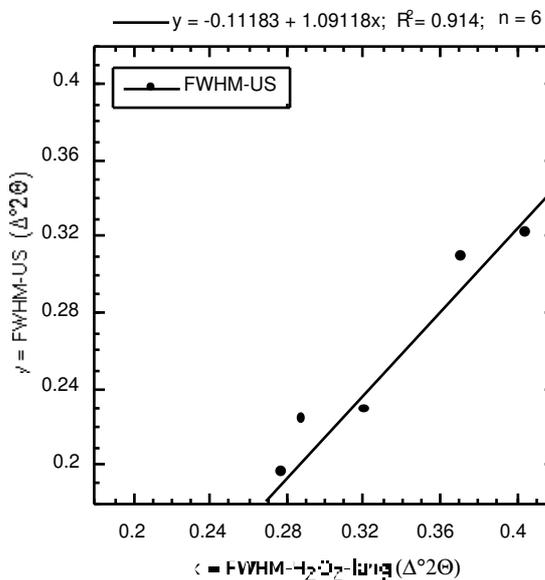


Abb. 19d:

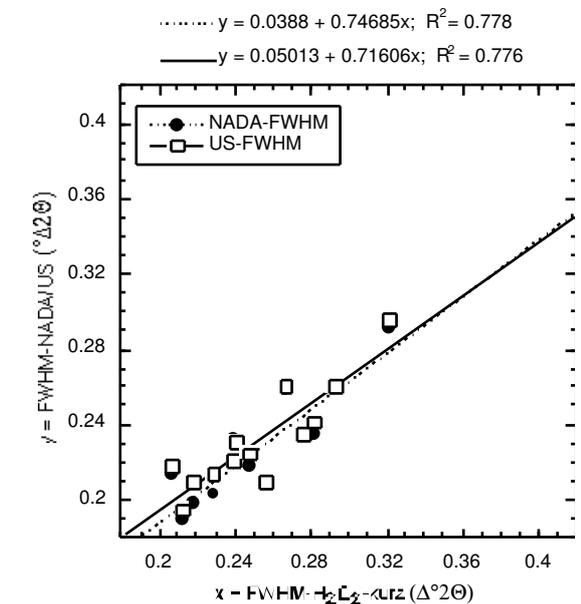


Abb. 19a - d: In den Graphen sind die Illitkristallinitäten der verschiedenen Dispersionsverfahren gegeneinander aufgetragen. Die Abkürzung US steht für Ultraschallbehandlung, NADA für unbehandelte Proben, H₂O₂-kurz für eine kurze Einwirkungsdauer von H₂O₂, und H₂O₂-lang steht für eine lange Einwirkungsdauer von H₂O₂.

Die Korrelation zwischen den FWHM- H_2O_2 -kurz- und den FWHM-US-Werten (Abb. 19b) ist ebenfalls relativ gut ($n = 19$; $R^2 = 0,89$). Hier liegt der FWHM- H_2O_2 -kurz-Wert aber durchschnittlich 7,5 % höher als die FWHM-US-Werte. FWHM- H_2O_2 -lang und FWHM-US korrelieren gleichfalls gut (Abb. 19c: $n = 6$, $R^2 = 0,91$). Der Wert von FWHM- H_2O_2 -lang liegt jedoch im Mittel 36 % über dem von FWHM-US.

In Abb. 19d ist die Halbhöhenbreite (FWHM) der Dispersionsmethoden NADA und US gegen H_2O_2 -kurz aufgetragen. Es besteht eine gute Korrelation zwischen den verschiedenen Parametern. FWHM- H_2O_2 zeigt aber generell eine deutlich schlechtere Illitkristallinität an.

Das Intensitätsverhältnis zwischen den drei Parametern zeigt ebenfalls eine gute Korrelation, wobei eine Peakintensitätssteigerung von den NADA-Proben über die US- hin zu den H_2O_2 -Proben zu beobachten ist. Die Untersuchung zeigt, daß unabhängig vom gewählten Dispersionsverfahren der Trend in der Entwicklung der Halbhöhenbreiten erhalten bleibt. Ob die Illite einer Ultraschallbehandlung in einer Wanne unterzogen wurden oder nicht, wirkte sich nur gering auf die Illitkristallinität aus. Eine H_2O_2 -Behandlung wirkte sich jedoch, je nach Dauer, z. T. beträchtlich auf die Halbhöhenbreite aus. WEBER (1972a) gab die Zeit der H_2O_2 -Behandlung mit mehreren Stunden an. In dieser Arbeit wurde die Fraktion $< 0,63$ mm so lange dem H_2O_2 ausgesetzt, bis die sichtbare Oxidation abgeschlossen war. Dabei wurden unterschiedlich heftige Reaktionen mit unterschiedlichen Reaktionszeiten beobachtet. Dies führte z.B. bei Probe K026 zu einer wesentlich schlechteren Illitkristallinität gegenüber der NADA- oder US-Behandlung. Eine über mehrere Wochen über die sichtbare Reaktionszeit hinaus andauernde Einwirkung des H_2O_2 auf die Tonminerale machte sich in der Halbhöhenbreite deutlich bemerkbar. Sie war durchschnittlich über 30 % höher als es die Messungen nach den anderen Behandlungsmethoden zeigten.

Die Zunahme der Intensität durch eine H_2O_2 -Behandlung, verbunden mit einer Abnahme der Illitkristallinität wurde auch von KRUMM (1992) beobachtet. Er vermutete als Ursache eine bevorzugte Freisetzung kleinerer und schlechter geordneter Körner. WEBER (1972b) führte die schwächere Illitkristallinität darauf zurück, daß durch eine H_2O_2 -Behandlung ein Teil der

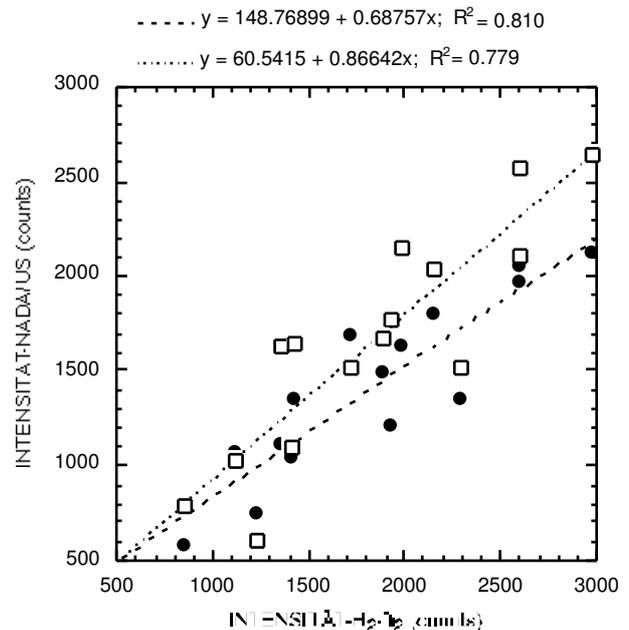


Abb. 19e: Aufgeführt ist die Intensität (in Counts) der unbehandelten bzw. mit Ultraschall behandelten gegen die mit H_2O_2 behandelten Proben.

hydrophoben organischen Substanzen, die die Illite einschließen, gelöst werden. Durch H_2O_2 -Behandlung soll der vor der Metamorphose bzw. Porenlösung besser geschützte und deshalb schwächer kristalline Illit freigesetzt werden. Schon FÜCHTBAUER & GOLDSCHMIDT (1963) hatten beobachtet, daß Tonminerale aus bituminösen Sedimenten einen geringeren Diageneseegrad anzeigen als aus vergleichbaren bitumenfreien Sedimenten. KÜBLER (1968) wies darauf hin, daß in Sedimenten, die reich an bituminösen bzw. kohligen Substanzen sind, der Aufbau des Illit-Gitters verzögert wird.

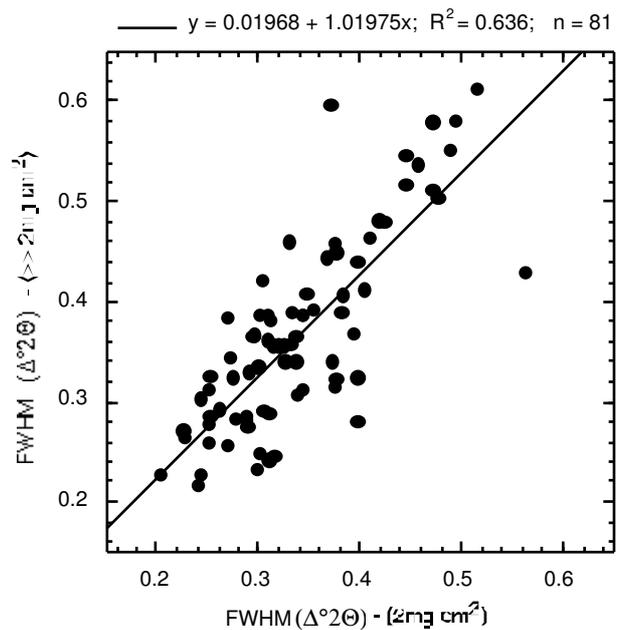
Die Beobachtungen führen zu der Frage, ob die Dispersion der Tonminerale mit H_2O_2 eine kontrollierbare Reaktion zur Folge hat, die in verschiedenen Proben angewendet, zu Meßwerten führt, die miteinander verglichen werden dürfen. Es ist unklar, warum nach einer Langzeiteinwirkung von H_2O_2 die Illitkristallinitäten schwächer werden. Nach diesen Untersuchungen hatte ich mich für eine Dispersion der Tonminerale nur mit Ultraschall in einer Ultraschallwanne entschieden, die eine schonendere und auch besser kontrollierbare Methode darstellt. Nach dieser Form der Dispersion war die Intensität der Peaks im Röntgendiffraktogramm etwas geringer als nach einer H_2O_2 -Behandlung, aber deutlich höher als für unbehandelte NADA-Proben (Abb. 19e).

B) Einfluß der Belegungsichte

Die Belegungsichte der Texturpräparate wurde für diese Arbeit auf $2 \text{ mg} / \text{cm}^2$ festgelegt. Mit dieser Belegungsichte wird zum einen das Intensitätsplateau und damit eine reproduzierbare Halbhöhenbreite erreicht, zum anderen können die quellfähigen Komponenten erfaßt werden, die bei einer geringeren Belegungsichte nicht voll expandieren können. Ein weiterer Vorteil ist die geringe Menge an Tonmaterial, die für die Untersuchung notwendig ist (siehe auch Kapitel 2.1.8.1).

Der Schwankungsbereich der Belegungsichte beträgt maximal $0,5 \text{ mg} / \text{cm}^2$. Dies entspricht nach der Auswertung von LEZZERINI et al. (1995) einer Standardabweichung (σ) von 2,5 % der Halbhöhenbreite. Vergleicht man die Messungen der Illitkristallinität von FRANKE (1984) mit einer nicht konstanten Belegungsichte $\gg 2 \text{ mg} / \text{cm}^2$ mit den Messungen an dem gleichen Probenmaterial, aber mit einer definierten Belegungsichte von $2 \text{ mg} / \text{cm}^2$ (Abb. 20), so bleibt der generelle Trend der Metamorphoseentwicklung erkennbar. Jedoch ist die Streuung der Werte relativ groß. Aus den Untersuchungen folgt, daß für die Bestimmung der Illitkristallinität die Belegungsichte der Präparate auf einen Wert $> 1 \text{ mg} / \text{cm}^2$ definiert sein sollte. Die Metamorphosegrenzen können nur mit Hilfe von Referenzmessungen definiert werden, wobei die Referenzpräparate die gleiche Belegungsichte haben sollten wie die zu untersuchenden Präparate.

Abb. 20: Gegenüberstellung der Illitkristallinitäten derselben Proben, einmal mit einer schwankenden Belegdichte der Meßpräparate $\gg 2 \text{ mg / cm}^2$ (FRANKE, 1984) und einmal mit einer festgelegten Belegdichte von 2 mg / cm^2 .



C) Qualität der Texturierung

Werden mehrere Präparate aus einer homogenen Gesteinsprobe hergestellt, so können die Halbhöhenbreiten der Illite zwischen den Präparaten variieren. Grund dafür kann eine schwankende Qualität der Texturierung, der Belegdichte oder der Beschaffenheit und Größe der Illit-Kristalldomänen sein. Der Fehler in der Präparatherstellung läßt sich durch einen drehenden RDA-Meßtisch minimieren. Es wurde versucht, Präparate herzustellen, die sich in ihrer Qualität gleichen. Die durchgeführten Tests zeigten keine statistische Abhängigkeit zwischen den Schwankungen in der Präparatqualität und der Illitkristallinität. Es wurde in einer Testreihe versucht, die Qualität der Texturierung der Präparate mit einem Texturgoniometer zu bestimmen. Dazu wurden vier Präparate der Probe K17 in Basel von Dr. Stünitz gemessen. Die untersuchten Präparate zeigten alle eine gute Texturierung. Jedoch eignet sich diese Methode nicht für einen qualitativen Vergleich von unterschiedlichen Proben. Hier besteht das Problem, daß neben der Texturierung der Illite auch deren Reifegrad d.h. die Größe der Kristalldomänen einen nicht bekannten Einfluß auf die Messungen haben. Eine weitere Möglichkeit, die Texturierung eines Präparates abzuschätzen, ist das Intensitätsverhältnis der $d_{(110)}$ und $d_{(001)}$ -Illitpeaks, das in allen Proben eine gute Texturierung anzeigt.

2.1.11.2 Variationen am Röntgendiffraktometer

A) Variationen durch Schwankungen in der Meßeinrichtung

Die Abweichungen im Meßergebnis, die auf die Meßeinrichtung zurückzuführen sind, werden durch Schwankungen von Röhrenspannung und -strom oder durch Funktionsänderungen des Detektors oder der Zählleinrichtung hervorgerufen. Hier fließen auch eine abweichende Lage des Präparates von der Horizontalen im Probenhalter und die Variation in der Präparathöhe ein. Die Fehler lassen sich abschätzen, wenn man das Präparat auf den Meßtisch legt und mehrfach hintereinander mißt und wenn man das Präparat mehrfach auf den Probenhalter montiert und wiederum jeweils mißt. Jedes Präparat wurde nach der Montage auf den Probenhalter dreimal nacheinander gemessen. Die Mehrfach-Meßprofile wurden anschließend mit Hilfe des Analyseprogrammes übereinandergelegt. Damit wurde ein gemittelttes Röntgendiffraktogramm für jedes Präparat erstellt. In den Wiederholungsmessungen zeigten, je nach Dispersionsverfahren, 95 % der jeweiligen Proben folgende Standardabweichung (σ_1) vom arithmetischen Mittelwert ihrer Halbhöhenbreite:

| | |
|---|-------------------|
| unbehandelte Proben (NADA) | $\sigma_1 < 6 \%$ |
| mit Ultraschall behandelte Proben | $\sigma_1 < 4 \%$ |
| mit H ₂ O ₂ behandelte Proben | $\sigma_1 < 6 \%$ |

B) Abweichung in der Bestimmung der Peakbreite

Eine genaue und reproduzierbare Festlegung des Untergrundes eines Röntgendiffraktogrammes wirkt sich stark auf die zu bestimmende Peakbreite aus. Die rechnerische Bestimmung der Untergrundkurve ist einer empirischen Nachzeichnung überlegen (KRUMM, 1992). Der Fehler bei der Bestimmung der Peakbreite kann durch mehrere wiederholte Auswertungen einer Messung eingegrenzt werden (siehe oben). Der Peakbreitenfehler überlagert die Fehler, die durch Schwankungen in der Meßeinrichtung entstehen. Zur Bestimmung der Peakbreite wurde in Gießen das Programm MacDiff 3.3 (entwickelt von Dr. R. PETSCHICK / Frankfurt) verwendet. Dieses Programm ermöglicht es, die Untergrundkorrektur für alle Analysen gleich zu definieren. Es wurden die Rohdaten mehrerer Proben insgesamt fünfmal analysiert. Die Ergebnisse waren identisch. Somit konnte ausgeschlossen werden, daß eine Schwankung der Analysewerte durch die Anwendung des Analyseprogrammes hervorgerufen wurde. Im allgemeinen zeigten die RDA-Peakprofile im Arbeitsgebiet einen relativ einheitlichen Verlauf, so daß gut mit der automatischen Untergrundkorrektur gearbeitet werden konnte. Wichen Meßprofile stark von dem durchschnittlichen

Peakprofil der Proben des Arbeitsgebietes ab, mußte die automatisierte Untergrundkorrektur zusätzlich von Hand angeglichen werden. Auf diese manuelle Anpassung der automatischen Untergrundkorrektur reagiert die Halbhöhenbreite gegenüber den anderen RDA-Meßmethoden wie die Integralbreite oder die Varianz (KRUMM, 1992) relativ unempfindlich.

2.1.11.3 Geologische Varianz

Die geologische Varianz, d.h. der Einfluß der Lithologie auf die Illitkristallinität, wurde bereits in den Kapiteln 2.1.4 und 2.1.7 ausführlich beschrieben. Zur Vollständigkeit dieses Kapitels ist sie hier nochmals erwähnt.

A) Varianz im Schichtkörper

Die geologischen Faktoren können schon in einer Probenlokalität, in der gleichen lithologischen Einheit, eine große Streuung der Halbhöhenbreiten verursachen. Diese Schwankungen können durch eine Beprobung in einem vertikalen und einem horizontalen Profil entlang des Schichtkörpers erfaßt werden. Die Varianz der Illitkristallinität im Schichtkörper wurde im Aufschluß A45 der Schiefergrube Schmiedebach untersucht. Das Gestein stammte aus einem unverwitterten "Blauschiefer"-Horizont der Grube Schmiedebach, bürgt folglich für einen niedrigen Gehalt an Kohlenstoff und eine gleichbleibende Feinkörnigkeit. Es wurden vier Proben, in einem Abstand von je zwei Metern, parallel zur Hauptfoliationsfläche und fünf Proben, vertikal zur Hauptfoliationsfläche, in einem Abstand von je einem Meter genommen. Für die Horizontale, also entlang einer Foliationsfläche, ergab sich eine Standardabweichung vom arithmetischen Mittelwert $\sigma_1 = 3 \%$; für die Vertikale $\sigma_1 = 15 \%$. Insgesamt resultiert ein $\sigma_1 \approx 10 \%$ für alle Proben.

B) Fehler durch die Probenheterogenität

Selbst innerhalb einer Probe besteht eine Heterogenität, die die IK-Werte streuen läßt. Sie kann durch das Messen mehrerer Präparate, die aus dem gleichen Material einer Probe hergestellt werden, erfaßt werden. In Abb. 21 ist das Ergebnis einer solchen Meßreihe aufgetragen. Die Präparate stammen ebenfalls von einer Probe aus dem Blauschieferhorizont der Schiefergrube Schmiedebach. Die Graphik zeigt unbehandelte (NADA) und mit Ultraschall (US) behandelte Präparate. Die Streubreite ist relativ groß (für K017-NADA von 0,214 - 0,235 $\Delta^{\circ}2\Theta$; $\sigma_1 = 2,15 - 2,77 \%$ und für K017-US von 0,228 - 0,265 $\Delta^{\circ}2\Theta$; $\sigma_1 = 3,59 - 6,5 \%$). Die gestrichelten Linien verbinden die Mehrfachmessungen der Präparate miteinander, die erneut im Probenchip montiert wurden. Die Schwankungen lagen jedoch im Rahmen der vorher beschriebenen Streubreite.

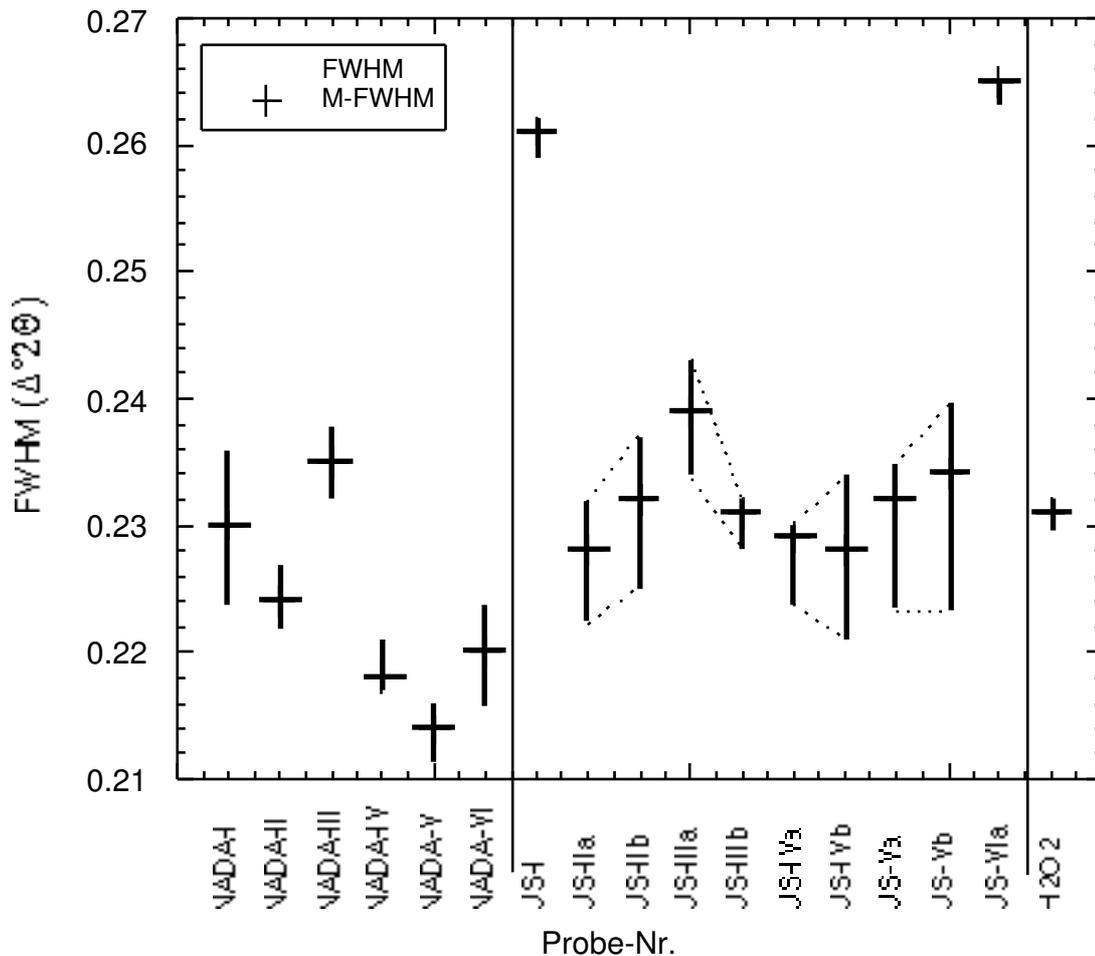


Abb. 21: Es sind 17 Meßvorgänge von Präparaten der Probe K17 dargestellt. In jedem Meßvorgang erfolgten drei Messungen. Die ultraschallbehandelten (US) Präparate durchliefen jeweils zwei Meßvorgänge. Die Messungen sind nach Präparatnummern sortiert. Die kleinen Buchstaben zeigen Messungen nach wiederholter Montage auf dem Probenhalter an, und die gestrichelten Linien verbinden die Doppelmessungen des jeweiligen Präparates. Dargestellt sind der analysierte Mittelwert (+) und die Varianz der Meßwerte als vertikaler Balken.

2.1.11.4 Ergebnisse der Varianz-Untersuchungen

Die Ergebnisse dieser Teiluntersuchung zeigen, daß die Reproduzierbarkeit der Illitkristallinitäts-Messungen im wesentlichen von der geologischen Varianz abhängt. Alle anderen hier beschriebenen Einflüsse, die durch exaktes Arbeiten relativ gering gehalten werden können, werden von ihr überlagert. Generell sind die untersuchten Fehlerquellen stark miteinander verflochten, und ihr Anteil ist in Abhängigkeit von anderen Faktoren variabel. Eine Fehlerfortpflanzungsrechnung führt deshalb nicht zu einer Abschätzung der generellen Genauigkeit der Illitkristallinitäts-Methode (KRUMM, 1992). In seiner Größenordnung kann aber der Fehler in der Reproduzierbarkeit durch die in Tabelle 3 angegebenen Werte abgeschätzt werden. Diese Tabelle wurde von KRUMM (1992) aufgestellt und durch eigene

Werte ergänzt. Der von KRUMM (1992) angegebene Fehler (σ 1) liegt zwischen 15 und 22 Prozent. In dieser Arbeit liegt der Fehler (σ 1) bei 10 Prozent für höhermetamorphe Proben.

Tab. 3: Fehlerquellen und ihre Auswirkung auf die Reproduzierbarkeit der Halbhöhenbreiten. Angaben in σ 1 (%-Standardabweichung).

| Fehlerquelle | Methode zur Fehlerabschätzung | Blenkinsop (1988) | Robinson et al. (1990) | Krumm (1992) | diese Arbeit |
|--|--------------------------------------|-----------------------|--|--|---|
| A: Bestimmung der Peakbreite | wiederholte Auswertung einer Methode | 0.70 % - 3.50 % | Computer "neglegible" | Computer 0.2 - 1.2 % | Computer 0 % |
| B: A) + Maschinenvariationen Zählstatistik | wiederholte Messung eines Präparates | 3.60 % - 7.00 % | 3.9 - 4.4 % (Schiefer) 7.6 - 11.7 % (smear) | 5.7 % (480 cps) 0.8 % (450000cps) | 0.44 % - 5.45 % (Sed.-Präp) |
| C: A) + B) + Probenheterogenität | reorientierte Präparate | 0.99 % - 4.40 % | 10.0 % - 11.4 % | | 2.15 % - 2.77 % |
| | völlig neu präparierte Proben | | | 10.8 % (3.5 Δ ² θ) 6.8 % (Schiefer) | 3.59% - 6.5 % |
| D: A) + B) + C) + geologischer Fehler | mehrere Proben eines Aufschlusses | | 9.0 % - 12.7 % | 15 % (0.24 Δ ² θ) 22 % (0.45 Δ ² θ) | 10 % (0.24 Δ ² θ) |

2.1.12 Möglichkeiten und Grenzen der Methode

In tonreichen Metasedimenten des sehr niedriggradigen Metamorphosebereiches (Diagenese bis Epizone) läßt sich die Illitkristallinität, unter Beachtung bestimmter Voraussetzungen, für eine relative, aber nicht für eine absolute Abstufung der thermischen Metamorphose einsetzen.

Die Illitkristallinität basiert auf der Umwandlung der metastabilen Tonminerale (< 2 μ m) der Smektit-Gruppe in metastabile Illit-Modifikationen bzw. in den stabilen „metamorphen“ Muskovit. Durch diese unter Gesteinsbedeckung irreversiblen Reaktionen werden mit zunehmender Metamorphose Kationen im Kristallgitter ausgetauscht und Dislokationen behoben. Dabei nimmt der Basisgitterabstand ab, bis er im Endglied Muskovit sein Minimum erreicht hat. Dieser Prozeß wird im wesentlichen von der Temperatur, der Gesteinszusammensetzung, dem offenen Porenraum und der Zusammensetzung des vorhandenen Fluides gesteuert. Deshalb sollten nicht die Illitkristallinitäten von Tonsteinen mit denen von Sandsteinen oder die von Tonschiefern mit denen von Grauwacken verglichen werden. Auch

ist der Vergleich der Illitkristallinitäten von kalkigen mit kieseligen Tonschiefern aufgrund des unterschiedlichen Stoffbestandes problematisch.

Die Illitkristallinität ist ein Maß für die Größe der Kristalldomänen und deren Defekte. Da bei der Aufbereitung die verschiedenen Smektit- und Illitmodifikationen nicht getrennt werden können, zum einen weil es die Technik nicht zuläßt, zum anderen weil die verschiedenen Phasen in den Wechsellagerungsmineralen miteinander verwachsen sind, sind in einem Präparat immer verschiedene Modifikationen enthalten. Dazu gehören der detritische Altbestand, die diagenetisch-metamorphen Neubildungen und die durch Verwitterung alterierten Illite. Die aus einem Röntgendiffraktogramm ermittelte Halbhöhenbreite (FWHM = volle Breite bei halbem [Intensitäts-] Maximum) ist somit ein Mischwert, der sich aus der Überlagerung von RDA-Peaks aus unterschiedlichen Illitgenerationen zusammensetzt.

Generell nimmt der Einfluß des Detritus auf die Illitkristallinität mit abnehmender Korngröße ab. Kleinere Körner bieten eine relativ größere Oberfläche und sind somit anfälliger für diagenetische Einflüsse, die zu einer Auflösung, einer Überwachsung oder einer Re-kristallisation der Tonminerale führen können. Größere detritische Muskovite sind wesentlich stabiler und können bis in den epizonalen Bereich erhalten bleiben. Deshalb ist es notwendig, unverwitterte Proben mit möglichst wenig erkennbarem Detritus zu verwenden. Um die Illitkristallinitäten vergleichen zu können, ist es vorteilhaft, wenn die Proben eine ähnliche Lithologie besitzen und, wenn möglich, aus derselben stratigraphischen Einheit stammen.

Die Aufbereitung der Gesteine hat schonend nach den Richtlinien des IGCP Projektes 294 (KISCH, 1991) zu erfolgen. Hierbei ist es wichtig, für die Proben die notwendigen und optimalen Arbeitsschritte auszuwählen und diese exakt zu befolgen. Dies gilt auch für die Durchführung der Präparation und für die Einhaltung der Meßbedingungen:

Eine gleichbleibend gute Texturierung und eine definierte Belegdichte der Meßpräparate sind wichtige Voraussetzungen für einen Vergleich der Ergebnisse. Vor allem größere Abweichungen in der Belegdichte können zu weit streuenden Meßwerten führen (Kapitel 2.1.11.1B).

Unterschiedliche Dispersionsverfahren können ebenfalls, je nach Dauer und Verfahren, einen großen Einfluß auf die Illitkristallinität haben. Das H_2O_2 sollte nur so lange einwirken, bis die sichtbare Oxidation abgelaufen ist. Steht die Tonsuspension länger mit dem H_2O_2 in Verbindung, so kann sich die Illitkristallinität erheblich verschlechtern (Kapitel 2.1.11.1A). Es ist nicht geklärt, inwieweit die Anwendung von H_2O_2 das Kristallgitter der Illite verändert, d.h. die Illitkristallinität nachträglich künstlich verschlechtert. Ein Vergleich der 10 Å Peak-Intensitäten der verschiedenen Dispersionsverfahren zeigt, daß die unbehandelten Proben die niedrigsten Intensitäten und die mit H_2O_2 behandelten Proben die höchsten zeigen. Die

Proben, die eine Ultraschallbehandlung erfahren haben, liegen mit ihren Werten relativ nahe an den Intensitäten der mit H_2O_2 dispergierten Proben. Die Untersuchungen in Kapitel 2.1.11 lassen den Schluß zu, daß der Einsatz von Ultraschall als Dispersionsverfahren sich besser eignet als der von H_2O_2 , weil der Ultraschall zwar die Kornaggregate zerkleinert, nicht aber die Illite künstlich verändert.

Für die Analyse der Illitkristallinität wurde in den Untersuchungen dieser Arbeit das Ultraschall-Dispersionsverfahren als Standardverfahren verwendet. Es mußte jedoch aus zwei Gründen auf Proben zurückgegriffen werden, die mit H_2O_2 dispergiert wurden: Zum einen wurde im W des Arbeitsgebietes Probenmaterial verwendet, das schon für vorhergehende Untersuchungen mit H_2O_2 dispergiert wurde. Zum anderen wurde bei sehr geringer Probenmenge auf die H_2O_2 -Dispersion zurückgegriffen, um eine größere Ausbeute an Illiten der Tonfraktion zu erhalten. Die in diesen Proben gemessene Illitkristallinität mußte danach mit folgender Formel auf den Illitkristallinitäts-Standard korrigiert werden, der auf Proben basiert, die mit dem Ultraschallverfahren behandelt wurden (Abb. 19c).

$$FWHM_{(Ultraschall)} = 0.90052 * FWHM_{(H_2O_2)} + 0.0079$$

Die verschiedenen Quellen, die für eine Variation der Meßergebnisse am Röntgendiffraktometer verantwortlich sind, wurden eingehend in Kapitel 2.11.1 beschrieben.

Bei gleichbleibender Qualität der Probenaufbereitung und Präparatherstellung summieren sich alle Fehlerquellen in der geologischen Varianz. Diese erreicht für die Halbhöhenbreite eine Standardabweichung von 10 Prozent, bei KRUMM (1992) sogar über 22 Prozent. Aufgrund der großen Varianz ist es notwendig, diese Methode statistisch zu betreiben.

Mit Hilfe des Esquevin-Index konnte gezeigt werden, daß in den Illiten der untersuchten Tonschiefer der Al- auf Kosten des Fe / Mg-Gehaltes mit zunehmender Illitkristallinität steigt (Kapitel 2.1.10.1B). Dies ist ein indirekter Hinweis für die überwiegend diagenetisch-metamorphe Neubildung der untersuchten Tonminerale. Es kann folglich mit einem geringen Anteil an Detritus in der Tonmineralfraktion der Meßpräparate gerechnet werden.

2.2 Chloritkristallinität (CK)

Die Chloritkristallinität ist, wie auch die Illitkristallinität (IK), ein temperaturabhängiger Parameter für den niedrigstgradigen Metamorphosebereich. Sie ist als Halbhöhenbreite der röntgendiffraktometrisch ermittelten 14 \AA -($d_{(001)}$) und 7 \AA - ($d_{(002)}$) Chloritpeaks definiert. Die diagenetische Bildung und Entwicklung des Chlorits verläuft analog der des Illits (ÁRKAI, 1991). Entsprechend der Illitkristallinität nehmen mit steigendem Metamorphosegrad die Werte der Chloritkristallinität ab (z.B. MERRIMAN et al., 1990). Nach ÁRKAI et al. (1995) wird der Grund in einer zunehmenden Durchschnittsgröße der Chlorit-Gitterdomänen und der damit einhergehenden Abnahme der Gitterverformung sowie einer zunehmenden Homogenisierung der Chloritzusammensetzung gesehen.

Die Entwicklung der Illit- (10 \AA) und der Chloritkristallinität (14 \AA und 7 \AA) während der Anchimetamorphose resultiert nach YANG & HESSE (1991) aus einer abnehmenden Zahl quellfähiger Lagen in diesen Mineralen. Die Wechsellagerungsminerale sollen im Gegensatz zum Chlorit- 14 \AA -Peak auf den Chlorit- 7 \AA -Peak nur einen geringen Einfluß haben. ÁRKAI et al. (1995) unterteilten die polyphasen Chlorite generell in zwei Entwicklungskategorien. Die Chlorite mit verwachsenen diskreten Phasen oder Wechsellagen werden als Entwicklungstyp I bezeichnet und dem diagenetischen Metamorphosebereich zugeordnet. Die diskreten Chlorite dagegen werden als Typ II bezeichnet und sollen der Anchi- bis Epizone entsprechen.

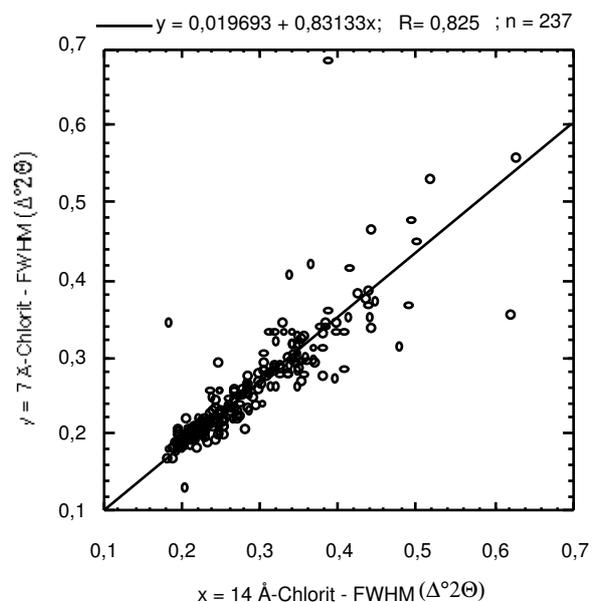
Die Chloritkristallinität wurde mittlerweile von verschiedenen Bearbeitern bestimmt und mit den Werten der Illitkristallinität aus den gleichen Proben verglichen (u. a. SCHAER & PERSONOZ, 1976; BRAUKMANN, 1984; ÁRKAI, 1991; ÁRKAI et al., 1995; WARR, 1996). Dabei wurde generell eine gute lineare Korrelation zwischen beiden Methoden festgestellt. Die Chloritkristallinität läßt sich zwar gut mit der Illitkristallinität korrelieren, reagiert aber auf die Metamorphoseentwicklung wesentlich unsensibler als der Kübler-Index (ÁRKAI et al., 1995). Da bei der Interpretation der Illitdaten gewisse Unsicherheiten bestehen können (z. B. durch das Vorkommen von detritischen di- und trioktaedrischen Glimmern, von paragonitischen Phasen oder von Margarit und Pyrophyllit), schlugen ÁRKAI et al. (1995) vor, an den jeweiligen Probenpräparaten eine Bestimmung der Illit- und Chloritkristallinität gleichzeitig vorzunehmen. Weichen die analysierten Kristallinitäten des Präparats stark vom allgemeinen Trend ab, so sollte die Probe verworfen werden, da ein unbekannter weiterer Faktor eine unterschiedliche Entwicklung der Chlorit- bzw. Illitkristallinität verursacht hat.

In dieser Arbeit wurden aus allen Röntgendiffraktogrammen, die für die Illitkristallinität erstellt wurden, gleichzeitig die Halbhöhenbreiten der 14 Å- und 7 Å-Chlorite bestimmt (siehe Tabelle V und VI im Anhang). Dies ermöglichte einen direkten Vergleich der Halbhöhenbreiten der Chlorite mit denen der Illite aus demselben Meßprofil. Für die Methodik bedeutet das, daß die Gesteinsproben und deren Aufbereitung, die Anfertigung der Meßpräparate, die apparativen Meßbedingungen, die internen Standards bis hin zu den erstellten Röntgendiffraktogrammen identisch sind.

2.2.1 Reproduzierbarkeit der Chloritkristallinitäts-Messungen

Alle Röntgendiffraktogramme der untersuchten Proben zeigen einen 14 Å-Chloritpeak, der gegenüber dem 7 Å-Chlorit eine deutlich geringere Intensität und eine deutlich breitere Basis aufweist. Daraus resultiert eine ungenauere Analyse des 14 Å-Chlorits. In dem Diagramm in Abbildung 22 sind die Kristallinitäten der 7 Å-Chlorite gegenüber den 14 Å-Chloriten in einem Bereich kleiner $0,5 \Delta^2\Theta$ dargestellt. Dieser Bereich wurde für alle in diesem Kapitel aufgenommenen Diagramme gewählt, um die Darstellungen besser miteinander vergleichen zu können. Trotz des wesentlich diffuseren 14 Å-Chloritpeaks ergibt sich eine gute lineare Korrelation mit generell größeren Halbhöhenbreiten der 14 Å-Chlorite. Gleichzeitig ist mit zunehmender Halbhöhenbreite eine größere Streuung der Meßwerte zu beobachten.

Abb. 22: Korrelationsdiagramm zwischen den Halbhöhenbreiten (FWHM) des 7 Å-Chlorits und des 14 Å-Chlorits im luftgetrockneten Zustand.



Um mögliche Einflüsse der unterschiedlichen Dispersionsmethoden H_2O_2 , Ultraschall- (US) und ohne Behandlung (NADA) - siehe Kapitel 2.1.8 - auf die Chloritkristallinität feststellen zu können, wurden die Kristallinitäten der 7 Å- und 14 Å-Chlorite nach ihrer unterschiedlichen Aufbereitung in zwei Blockdiagrammen dargestellt (Abb. 23 + 24). Die Auswirkungen auf das relative Verhältnis der Halbhöhenbreiten durch die verschiedenen Dispersionsmethoden sind für den 7 Å- und 14 Å-Chlorit und auch für den 10 Å-Illit (vergl. Kapitel 2.1.11.1, Abb. 18) gleich. Die Diagramme zeigen, daß die H_2O_2 -Halbhöhenbreiten generell größer sind als die US- bzw. NADA-Halbhöhenbreiten. Noch größer wird der Unterschied durch eine H_2O_2 -Langzeitbehandlung. Hingegen gibt es zwischen den US- und NADA-Halbhöhenbreiten nur geringe Abweichungen. Die Vergleiche lassen den Schluß zu, daß die hier verwendeten unterschiedlichen Aufbereitungsmethoden auf die Kristallinität von Illit und Chlorit die gleichen Auswirkungen haben.

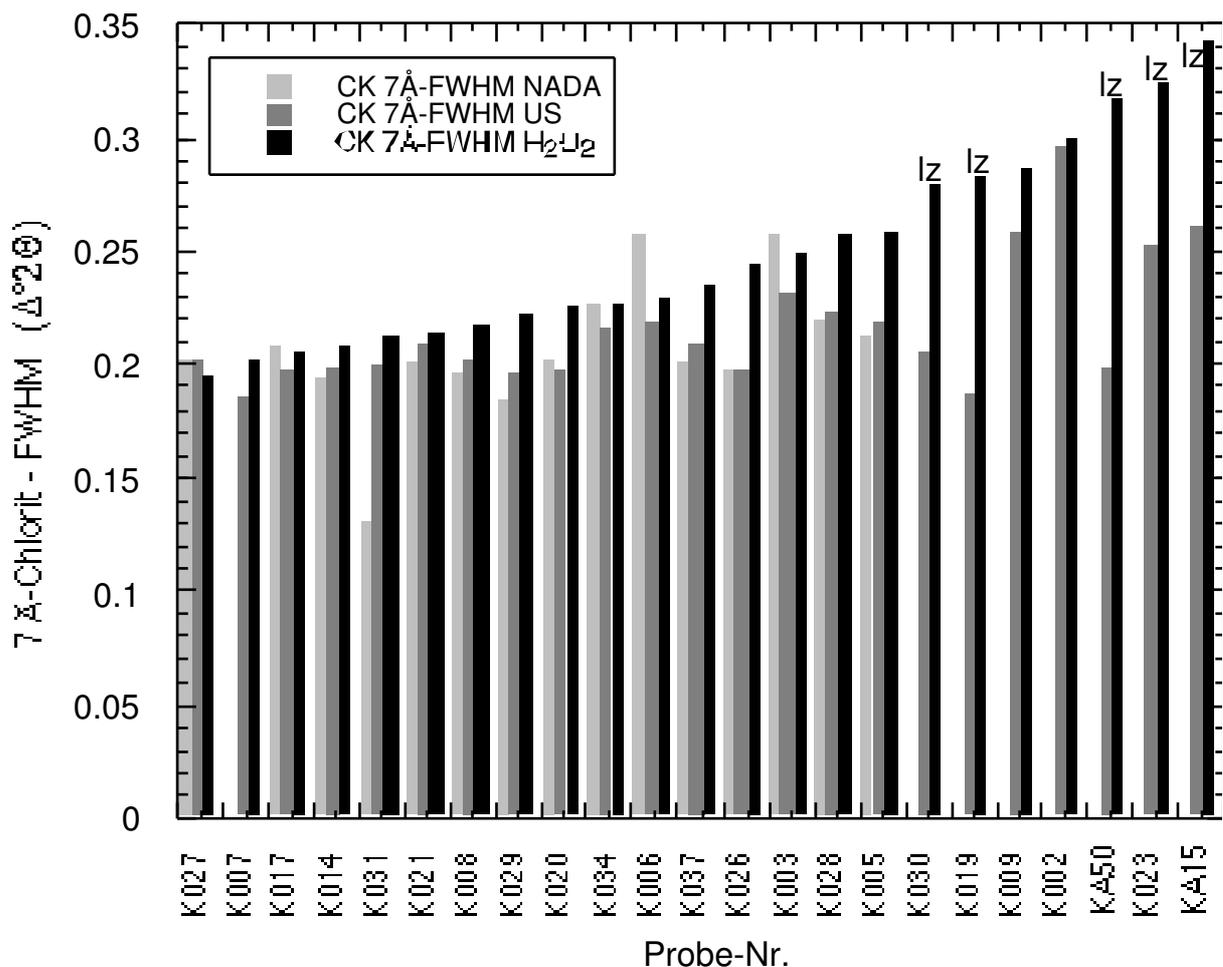


Abb. 23: 7 Å-Chlorit - Halbhöhenbreite (FWHM) in Abhängigkeit der unterschiedlichen Dispersionsverfahren. n = 23; lz = Langzeitbehandlung mit H_2O_2 .

In dieser Arbeit wurden die Kristallinitätswerte der 10 Å-Illite und 7 Å- bzw. 14 Å-Chlorite, die mit Ultraschall behandelt wurden verwendet. Die Meßwerte der Proben, die nur mit H₂O₂ dispergiert wurden, wurden mit den folgenden Formeln in entsprechende US-Chloritkristallinitäten umgewandelt (Abb. 25a + b):

$$\text{FWHM}_{(7\text{\AA-US})} = 0,80134 * \text{FWHM}_{(7\text{\AA-H2O2})} + 0,02774$$

$$\text{FWHM}_{(14\text{\AA-US})} = 0,78348 * \text{FWHM}_{(14\text{\AA-H2O2})} + 0,02901$$

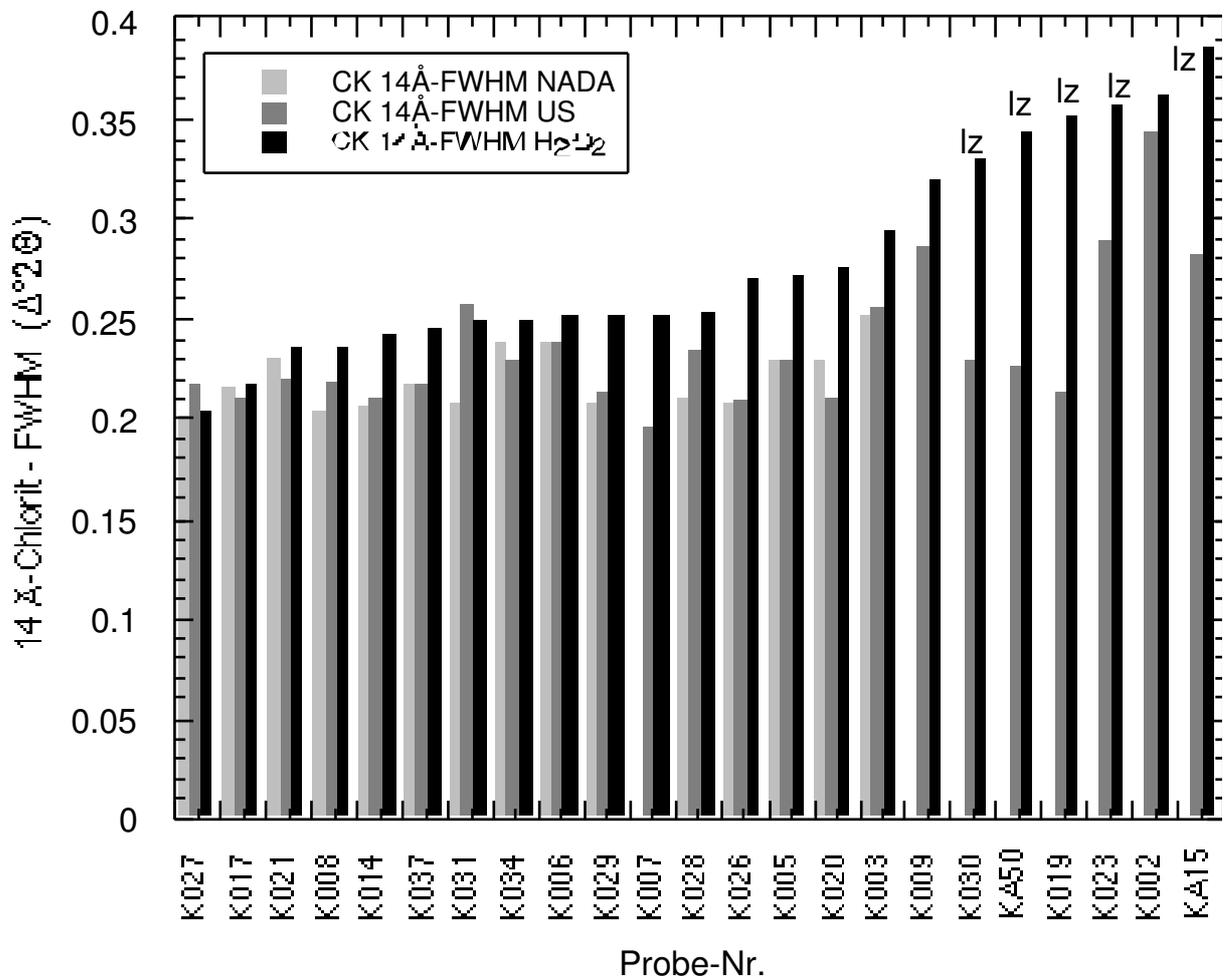


Abb. 24: 14 Å-Chlorit-Halbhöhenbreite (FWHM) in Abhängigkeit der unterschiedlichen Dispersionsverfahren. n = 23; lz = Langzeitbehandlung mit H₂O₂.

Abb. 25a

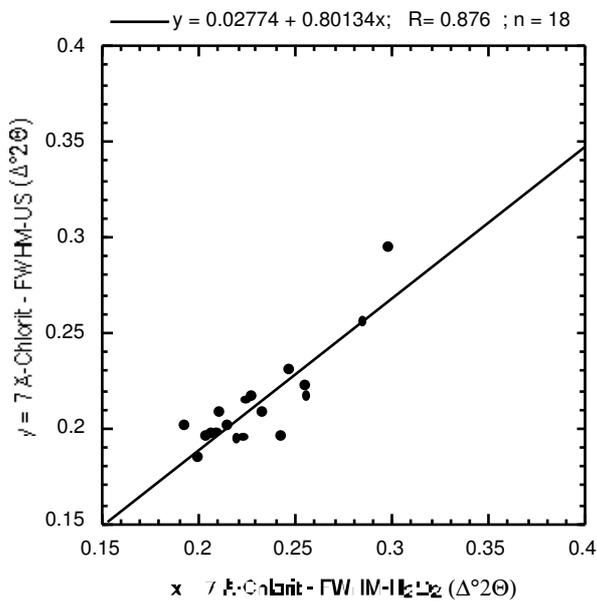


Abb. 25b

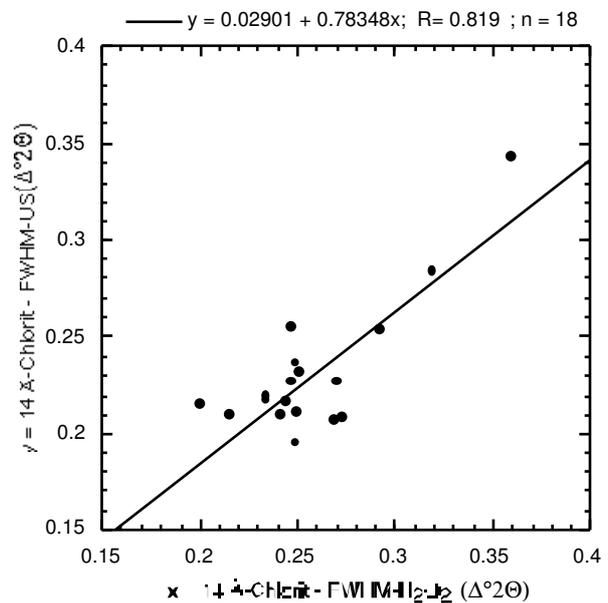


Abb. 25a + b: Korrelation der Halbhöhenbreiten für US mit H_2O_2 für den 7 Å-Chlorit (a) und den 14 Å-Chlorit (b).

2.2.2 Vergleich zwischen Chlorit- und Illitkristallinität

Die Vergleiche von Illit- und 7 Å- bzw. 14 Å-Chloritkristallinitäten ergeben jeweils eine sehr gute lineare Korrelation (Abb. 26a und b). ÁRKAI et al. (1997) dokumentierten, daß die Chlorit-, wie auch die Illitkristallinität im wesentlichen durch die Kristallitgröße beeinflusst werden. Die Größe ist der wesentliche Faktor, der sich in der Kristallinität der beiden Minerale ausdrückt. Die Domänengröße nimmt in beiden Mineralen mit steigendem Metamorphosegrad zu. Aufgrund der guten Korrelation von Illit- und Chloritkristallinität ist es daher möglich, auch deren Metamorphosegrenzen zu korrelieren.

Das Diagramm (Abb. 26b) zeigt trotz guter Korrelation eine relativ breite Streuung der Werte, besonders im niedrigstgradigen Metamorphosebereich. Im Vergleich zu den 10 Å-Illit- und 7 Å-Chloritpeaks hat der 14 Å-Chloritpeak eine geringe Intensität. Das führt zu einer relativ ungenauen Bestimmung der Halbhöhenbreiten. Der 7 Å-Chloritpeak hingegen zeigt in den Röntgendiffraktogrammen eine ähnlich gute Intensität wie der 10 Å-Illitpeak. Hier ist die Bestimmung der Halbhöhenbreite wesentlich genauer. Für die Korrelation der beiden Diagramme wurden Proben, die einen zu schwachen Illit- bzw. Chloritpeak zeigten, eine deutliche Überlagerung verschiedener Mineralphasen abbildeten oder völlige „Ausreißer“ darstellten nicht berücksichtigt. Letztere zeigen nach ÁRKAI et al. (1995) einen weiteren

unbekannten Einfluß auf die Kristallinitäten und sollten aussortiert werden. Aufgrund der Ungenauigkeit der Halbhöhenbreiten der 14 Å-Chlorite wurden diese zur Metamorphosebestimmung nicht weiter herangezogen. In der Tabelle 4 sind die korrelierten "Frey"- und CIS-Metamorphosegrenzen dargestellt. Die Metamorphosegrenzen für den 7 Å-Chlorit liegen in beiden Fällen bei etwas niedrigeren Werten als für den 10 Å Illit.

Abb. 26a

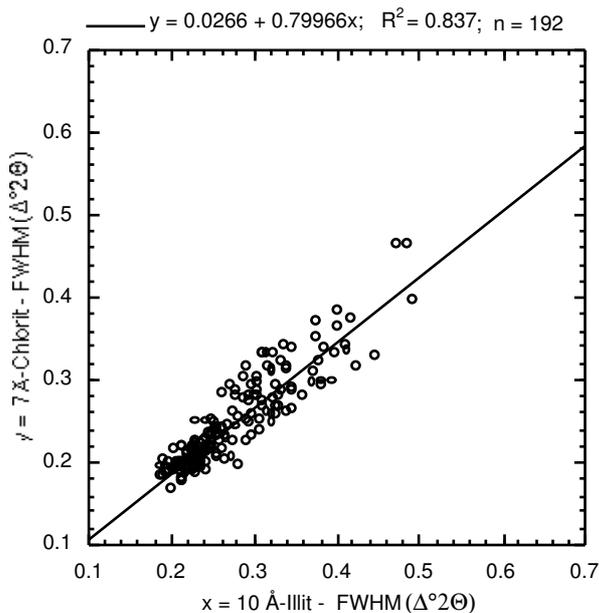


Abb. 26b

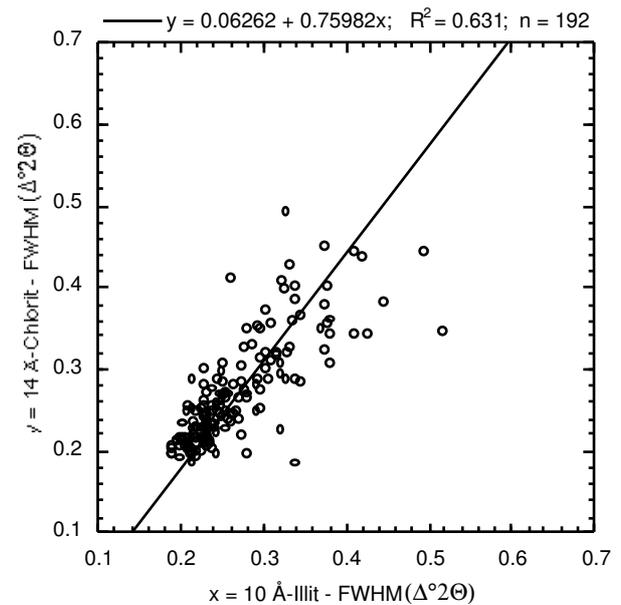


Abb. 26a + b: Korrelationsdiagramm der Halbhöhenbreite (FWHM) des 10 Å-Illits gegen die des 7 Å-Chlorits (a) und des 14 Å-Chlorits (b)

Untersuchungen von MERRIMAN et al. (1995) an metamorphen Illiten und Chloriten zeigen, daß während der höheren Diagenese das Kristallwachstum der Illite und Chlorite im Wesentlichen von deren Polytypie und Phasenumwandlung gesteuert wird. Das Ergebnis ist eine gleiche Kristallgrößenverteilung, die den typischen Ostwald-Reifungskurven entspricht. Unter anchizonalen und epizonalen Bedingungen wächst der Illit schneller als der Chlorit. Das Kristallgitter des Illits kann die tektonische Strainenergie besser aufnehmen und kann sich von der Subkornbildung schneller erholen als das des Chlorits. Die Kristallit-Dickenverteilung der Illite entspricht jetzt nicht mehr der typischen Ostwald-Reifung. Die Chlorite, die unter denselben Bedingungen wie die Illite wachsen, entwickeln bei hohen Strainraten Subkorn Grenzen, die sich dann bei niedrigen Strainraten nur zum Teil wieder erholen. Die Dislokationen im Kristallgitter bleiben deshalb erhalten, und die Kristallitdicke ist folglich kleiner als die der Illite. Diese Unterschiede im straininduzierten Kristallwachstum bei einer niedriggradigen Metamorphose, die eng an eine Schieferungsentwicklung gekoppelt ist, resultiert in deutlichen Unterschieden in der Illit- und Chloritkristallinität (MERRIMAN et al., 1995).

Tab. 4: Metamorphosegrenzwerte der 10 Å-Illit- und 7 Å-Chloritkristallinitäten für den „Frey“- und den CIS-Standard.

| Metamorphose | 10 Å-Illit "Frey"- Standard ($\Delta^{\circ}2\Theta$) | 10 Å-Illit CIS-Standard ($\Delta^{\circ}2\Theta$) | 7 Å-Chlorit "Frey"- Standard ($\Delta^{\circ}2\Theta$) | 7 Å-Chlorit CIS-Standard ($\Delta^{\circ}2\Theta$) |
|-----------------------|--|---|---|--|
| niedrige Diagenese | > 0,54 | > 0,44 | > 0,46 | > 0,38 |
| hohe Diagenese | 0,39 < 0,54 | 0,35 < 0,44 | 0,34 < 0,46 | 0,31 < 0,38 |
| niedrige Anchizone | 0,32 < 0,39 | 0,30 < 0,35 | 0,28 < 0,34 | 0,27 < 0,31 |
| hohe Anchizone | 0,24 < 0,32 | 0,25 < 0,30 | 0,22 < 0,28 | 0,23 < 0,27 |
| Epizone | < 0,24 | < 0,25 | < 0,22 | < 0,23 |

Im Arbeitsgebiet zeigt die mit Hilfe der RDA ermittelte Chloritkristallinität generell eine deutlich geringere Halbhöhenbreite (Abb. 26a) als die der Illite. Die Kristallinität der Illite und Chlorite gibt indirekt deren Kristallitgröße an (ÁRKAI et al., 1997). Daraus läßt sich schließen, daß die Chlorite im Arbeitsgebiet eine größere Kristallitgröße besitzen. Das wiederum würde nach der Untersuchung von MERRIMAN et al. (1995) für den Bereich der FQZ bedeuten, daß dort kein straininduziertes Wachstum der Tonminerale durch die Halbhöhenbreiten abgebildet wird und somit die Kristallinitäten im wesentlichen durch eine deformationsfreie Temperung eingestellt wurden. Jedoch geht aus der Literatur nicht hervor, wie sich das Verhältnis von Illit- zu Chloritkristallinität bei strainfreiem bzw. straininduziertem Kristallwachstum in absoluten Werten unterscheidet.

2.3 $6d_{(33-1,060)}$ -Geobarometer

Der $6 \times d_{(33-1,060)}$ -Parameter ist ein Kristallgitterparameter des kaliumreichen $2M_1$ -Illit / Muskovit. Er kann mit Hilfe eines Röntgendiffraktometers bestimmt werden. Ursprünglich trug dieser Geobarometer die Bezeichnung b_0 , da er den Gitterabstand der Kristallfläche $d_{(060)}$ abbilden sollte (z.B. CIPRIANI et al., 1968). FREY et al. (1983) hatten jedoch beanstandet, daß im Röntgendiffraktogramm für den $2M_1$ -Muskovit der $d_{(060)}$ -Peak nicht eindeutig vom $d_{(33-1)}$ -Peak unterschieden werden kann. In einer Untersuchung von RIEDER et al. (1992) wurde darauf hingewiesen, daß diese Peaküberlagerung keine ernsthafte Verfälschung des b_0 -Wertes bedeutet. Sie empfahlen jedoch, den Ausdruck b_0 durch $d_{(33-1,060)}$ zu ersetzen. Da der b_0 -Wert aber durch die Multiplikation von $6 \times d_{(33-1,060)}$ errechnet wird, wurde der Parameter in dieser Arbeit als $6d_{(33-1,060)}$ bezeichnet.

CIPRIANI et al. (1968) zeigten, daß es möglich ist, den relativen Celadonit- bzw. Phengitgehalt des Muskovits mit diesem Kristallgitter-Parameter zu bestimmen. Daraufhin stellten CIPRIANI et al. (1971) fest, daß unter grünschieferfaziellen Bedingungen der Celadonitgehalt im kaliumreichen Hellglimmer mit abnehmendem Druck abgebaut wird. Sie hielten andere Einflüsse wie Temperatur und die Gesamtzusammensetzung des Gesteins für vernachlässigbar. Deshalb hielten sie es für möglich, den relativen Metamorphosedruck über den Vergleich der $6d_{(33-1,060)}$ -Werte der Kalium-Hellglimmer zu bestimmen. SASSI (1972) gelang es, Muskovite und Phengite anhand des $6d_{(33-1,060)}$ -Parameters zu unterscheiden. SASSI & SCOLARI (1974) konnten mit Hilfe dieses Parameters im grünschieferfaziellen Metamorphosebereich Faziesgebiete entsprechend ihrer unterschiedlichen Metamorphosedrucke bestimmen. PADAN et al. (1982) wendeten diese Methode auch an subgrünschieferfaziellen Gesteinen erfolgreich an. Sie empfahlen, den Metamorphosebereich der mittleren Anchizone nicht zu unterschreiten.

Bei gleichbleibender Temperatur wird durch die Zunahme des Druckes im Kristallgitter des Illits / Muskovits, im wesentlichen auf den Oktaederplätzen, Al^{+3} durch Fe^{+2} und Mg^{+2} ausgetauscht. Entsprechend wird Al^{+3} auf den Tetraederplätzen von Si^{+4} substituiert, um die Ladung wieder auszugleichen. Daraus resultiert eine Zunahme des Celadonitgehaltes. GUIDOTTI & SASSI (1986) bestimmten für Phyllite der Grünschieferfazies die nach den von MIYASHIRO (1961) definierten Faziesgrenzen, wie folgt:

| | | | |
|---|---|--------------------------------|--|
| $6d_{(33-1,060)} < 9.000 \text{ \AA}$ | = | Niederdruck-Faziesserie | ($> 35 \text{ }^\circ\text{C km}^{-1}$) |
| $9.000 \text{ \AA} < 6d_{(33-1,060)} < 9.040 \text{ \AA}$ | = | Mitteldruck-Faziesserie | ($25 - 35 \text{ }^\circ\text{C km}^{-1}$) |
| $9.040 \text{ \AA} < 6d_{(33-1,060)}$ | = | Hochdruck-Faziesserie | ($< 25 \text{ }^\circ\text{C km}^{-1}$) |

Mit Hilfe ihrer $6d_{(33-1,060)}$ -Daten konstruierten GUIDOTTI & SASSI (1986) ein empirisches Druck-Temperatur-Diagramm. Sie wiesen jedoch darauf hin, daß das Diagramm aufgrund der schwächeren Datendichte im höhermetamorphen Bereich nur zur qualitativen Analyse verwendet werden sollte.

Die Anwendung der Methode wird von GUIDOTTI & SASSI (1976) bestimmten Einschränkungen unterworfen: Am besten sind phyllitische Gesteine mit der Mineralvergesellschaftung von Mu - Pa - Qz, Mu - Pa - Ab - Qz oder Mu - Ab - Kf - Qz geeignet, welche die KNASH Grenzvergesellschaftungen darstellen. Es ist aber auch die Verwendung von Proben mit der wesentlich häufiger vorkommenden Mineralvergesellschaftung von Muskovit + Albit + Quarz (\pm Chlorit \pm Kalzit \pm Graphit) erlaubt. Die Vergesellschaftung von Mu - Ab - Qz ist abhängig von der Gesteinszusammensetzung. Deshalb wurden weitere Einschränkungen vorgegeben. Die zu untersuchenden Metapelite sollten kein Paragonit, Margarit oder Pyrophyllit enthalten, dafür reichlich Muskovit. Kalifeldspat sollte fehlen, da sonst der $6d_{(33-1,060)}$ -Wert zu hoch liegen würde. Proben mit sehr hohem Quarz- und / oder Chloritgehalt sollten ebenfalls nicht verwendet werden, da in diesem Material der Anteil an Al_2O_3 am Gesamtgestein zu gering sei und deshalb der Muskovit einen erhöhten Celadonitgehalt haben würde. Karbonatreiche Proben sollten gemieden werden, weil hier der $6d_{(33-1,060)}$ -Wert zu niedrig sei. Hämatit- und magnetitreiche Proben sollten ausgeschlossen werden, da sie einen erhöhten Fe^{+3} Gehalt in den Muskoviten verursachen würden. FREY (1987) merkte an, daß das Mineralgleichgewicht, das den Celadonit-Gehalt im Muskovit kontrolliert - also auch $6d_{(33-1,060)}$ - durch Dehydrationsreaktionen hervorgerufen wird, die von der Aktivität des Wassers in der fluiden Phase abhängen.

Die $6d_{(33-1,060)}$ -Methode ist eine statistische Methode. Deshalb ist eine große Anzahl von Messungen einer Population nötig, um eine qualitative Aussage über die Druckverhältnisse machen zu können. Die Messungen der Populationen werden üblicherweise in einer kumulativen Häufigkeitskurve nebeneinander dargestellt. Der Mittelwert aller Messungen einer Metamorphosefazies ist entscheidend SASSI & SCOLARI (1974).

Detritische Glimmer können, wie bei der Illitkristallinität, auch das Ergebnis dieser Methode verfälschen. Der $d_{(33-1,060)}$ -Gitterparameter liegt senkrecht zum Basisgitterabstand $d_{(002)}$, der zu Illitkristallinitäts-Messungen verwendet wird. Daraus folgt, daß texturierte Sedimentations-

Präparate für die Messung völlig ungeeignet sind. Gesteinsanschliffe, die senkrecht zur Foliation angefertigt werden, haben zwar die richtige Schnittlage, enthalten aber einen gewissen Anteil an Detritus und sind deshalb für geobarometrische Bestimmungen nicht geeignet. Um die detritische Komponente gering zu halten, wurden texturfreie RDA-Pulverpräparate mit einer Kornfraktion $< 2 \mu\text{m}$ hergestellt. Diese Kornfraktion wurde auch zur Bestimmung der Illit- und Chloritkristallinität verwendet. Die Analysen wurden mit dem Siemens D500 Röntgendiffraktometer durchgeführt. Es wurde der Winkelbereich von 59 bis $63 \Delta^{\circ}2\Theta$ im Stepscan-Verfahren gemessen, mit einer Zeitkonstante von $9,6$ Sekunden. Alle anderen apparativen Bedingungen entsprachen den im Kapitel 2.1.9 beschriebenen.

2.4 Inkohlung

Dipl.-Geol. S. Herlitzius (Rheinberg) stellte mir freundlicherweise die Vitrinitreflexions-Werte seiner Proben aus dem Frankenwald, die aus seinem nicht beendeten Dissertations-Projekt (Prof. Dr. W. Franke, IGL, Justus-Liebig-Universität Giessen) stammen, zur Verfügung. Er war für die Probenahme, Aufbereitung und Präparatherstellung verantwortlich. Die Vitrinitreflexions-Messungen wurden von S. Herlitzius am Geologischen Institut der Georg-August-Universität in Göttingen durchgeführt. Das Projekt wurde finanziell von der DFG unterstützt.

2.4.1 Vitrinitreflexion

Organisches Material reagiert sehr sensibel auf ein Ansteigen der Temperatur und weniger empfindlich auf den des Druckes im umgebenden Gestein. Mit Hilfe von Licht-Reflexionsmessungen kann der Reife- oder Inkohlungsgrad der organischen Partikel bestimmt werden. Der Inkohlungsgrad nimmt mit zunehmender Diagenese zu und ist ein irreversibler Prozeß. Er ist in erster Linie von der maximalen Temperatur und der Erwärmungsdauer abhängig.

Das organische Material in Sedimenten und Kohlen ist heterogen zusammengesetzt. Die Mazerale in den Kohlen können als Analogie zu den Mineralen in den anorganischen Gesteinen betrachtet werden. Ein Mazerale ist definiert als ein mikroskopisch identifizierbare, in sich einheitlicher Bestandteil, der keine Mineralsubstanzen enthält (International Handbook of Coal Petrography, 1971, 1985). Die Mazerale werden in drei Hauptgruppen, die Vitrinite (Huminite), die Liptinite und die Inertinite eingeteilt. Die Gruppen werden nach den unterschiedlichen Ausgangsmaterialien, den verschiedenen Erhaltungsformen und den unterschiedlichen chemischen und physikalischen Eigenschaften unterteilt. Ausgangsprodukte der Liptinite sind z. B. Wachse und Cuticulen, der Vitrinite Zellulose und Lignin und der Inertinite oxidierte kohlige Bestandteile. Generell führt die zunehmende Aromatisierung von organischen Makromolekülen und die Kondensation der aromatischen Gruppen zu einer Erhöhung der Vitrinit-Reflexion. Die verschiedenen Mazeralegruppen zeigen aber bei gleicher prograder Diageneseentwicklung einen unterschiedlichen Inkohlungspfad (Abb. 27). Vitrinit zeigt im Gegensatz zu Liptinit und Inertinit einen linearen Inkohlungspfad und wird deshalb zur Bestimmung des Inkohlungsgrades verwendet.

Die Reflexion wird definiert als die prozentuale Intensität eines Lichtstrahls, der von einer polierten Oberfläche reflektiert wird (BUSTIN et al., 1989). In der Praxis wird das von einem

Mazeral reflektierte Licht mit einem Fotomultiplier gemessen und mit dem reflektierten Licht eines optischen Standards mit bekannter Reflexion verglichen. Die Reflexion in Öl eines Mazerals bezieht sich auf die Refraktions- und Absorptionsindizes der Mazerale nach der Gleichung von BEER (in TEICHMÜLLER, 1987):

$$R = \frac{(n - n_0)^2 + n^2 k^2}{(n + n_0)^2 + n^2 k^2}$$

Wobei n und k die Refraktions- (Brechungs-) und Absorptionsindizes eines Mazerals sind und n_0 der Refraktionsindex (Brechungsindex) des Immersionsöls. Der Refraktionsindex n ist eine Funktion der Atomdichte und nimmt mit dem Grad der Aromatisierung zu. Der Absorptionsindex k ist abhängig von der Zahl der freien Elektronen, da deren Beweglichkeit die Absorption von elektromagnetischen Wellen erleichtert. Die Beweglichkeit der Elektronen nimmt mit der Größe der aromatischen Lamellen und Komplexe, d.h. dem Grad der Kondensation zu (TEICHMÜLLER, 1987).

Vitrinit verhält sich optisch anisotrop. Mit zunehmender Inkohlung steigen der Aromatisierungs-, der Kondensierungs- und der Ordnungsgrad der aromatischen Ringe der Vitrinite parallel zur Einbettungsebene. Bei einfachem Überlagerungsdruck entstehen optisch uniaxial anisotrope Vitrinite. Bei scherender Verformung hingegen bilden sich optisch biaxial anisotrope Vitrinite aus, die offensichtlich von der Orientierung des Spannungsfeldes abhängig sind (siehe LEVINE & DAVIS, 1984). Daraus folgt ein maximales Reflexionsvermögen ($\% R_{\max}$) des Vitrinites parallel zur Foliation in x -Richtung des Strain-Ellipsoids und ein minimales Reflexionsvermögen ($\% R_{\min}$) senkrecht dazu.

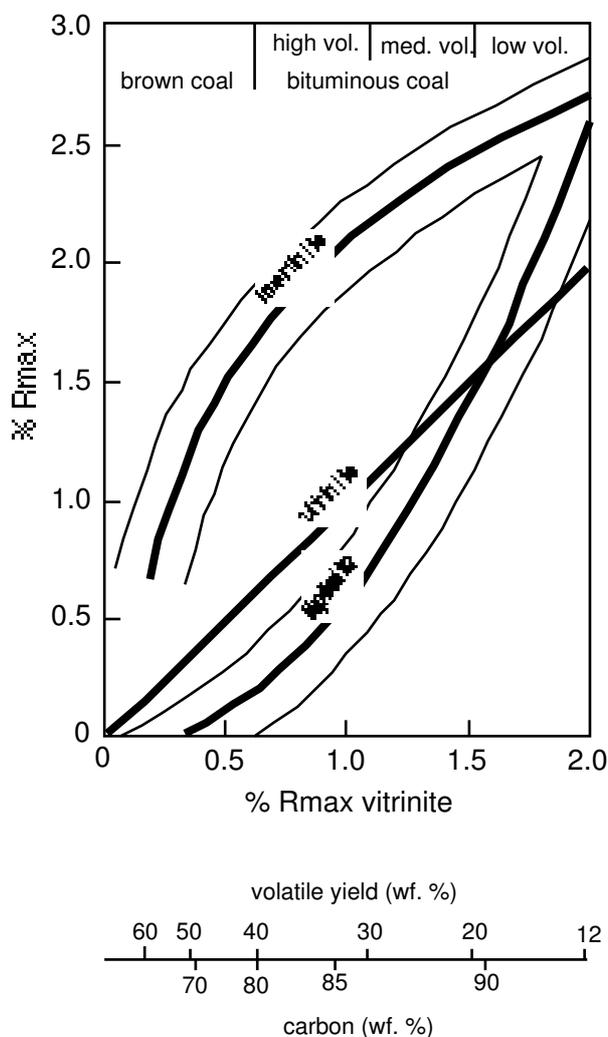


Abb. 27: Inkohlungspfade dargestellt als Maximum-Reflexionswerte für die drei Mazeralkategorien (aus TEICHMÜLLER, 1987).

Zur Bestimmung der Vitrinit-Reflexion werden 100 Messungen je Präparat empfohlen, mit 50 Messungen je Präparat ist jedoch schon eine ausreichende statistische Sicherheit gegeben. Die Vitrinit-Reflexion kann entweder mit der maximalen Reflexion in polarisiertem Licht an gerichteten Vitriniten oder mit der durchschnittlichen Reflexion in unpolarisiertem Licht an unorientierten Vitriniten bestimmt werden. Die erste Meßmethode ist exakter, eignet sich aber nur bei Anschliffen mit ausreichend großen ($\geq 2\mu\text{m}$) Kohlepartikeln. Die zweite Methode wird im wesentlichen an Proben angewendet, die nicht ausreichend und zu kleine Kohlepartikel führen. Hier wird die kohlige Substanz angereichert, und die Körner werden unorientiert in ein Präparat eingebettet.

2.4.2 Probenahme, Aufbereitung und Messung (S. Herlitzius)

Für diese Arbeit wurden von S. Herlitzius Kulm-Tonschiefer westlich der Frankenwälder Querzone beprobt. Die Probenpunkte waren mit denen der Illit- und Chlorit-Kristallinität bzw. denen der Druckparameter identisch. Damit war ein direkter Vergleich der Ergebnisse möglich. Der Anteil der organischen Substanz war in allen Proben so gering, daß Konzentrate hergestellt werden mußten.

Zur Probenaufbereitung wurden die Tonschiefer im Backenbrecher auf 2 bis 3 mm Größe zerkleinert. Anschließend wurden etwa 100 g einer Probe mit konzentrierter Salzsäure behandelt, nach 24 Stunden neutralisiert und dann mit konzentrierter Flußsäure versetzt. Danach wurde das Material erneut mit konzentrierter Salzsäure unter geringer Wärmeeinwirkung behandelt und nach der Neutralisation im Ultraschallbad kurz gesiebt. Das Feinstmaterial ($< 3\mu\text{m}$) wurde über einen Filter mit Hilfe einer Unterdruckpumpe abgezogen. Der auf den Filtern verbliebene Rest wurde in Kunstharz eingebettet, wobei auf eine möglichst planparallele Oberfläche geachtet wurde. Die Präparate wurden anschließend poliert.

Gemessen wurde die mittlere Reflexion ($\% R_m$). Für die statistische Sicherheit der Ergebnisse der Vitrinitreflexionsbestimmung sind mindestens 50 Meßpunkte je Präparat notwendig. Diese Anzahl an Meßpunkten wurde in unseren Meßpräparaten nicht erreicht, da trotz Konzentration zu wenig meßbares Material zur Verfügung stand. Es konnten lediglich 20 bis 25 Vitrinite pro Präparat gemessen werden. Das hat zur Folge, daß durch die wenigen Meßpunkte die statistische Genauigkeit der Vitrinitreflexionswerte stark herabgesetzt ist. Reflexionswerte, die auf weniger als 20 Meßpunkten basierten, wurden in der Auswertung nicht berücksichtigt.

3 ERGEBNISSE DER THERMO-BAROMETRISCHEN UNTERSUCHUNGEN

3.1 Illit- und Chloritkristallinität

Die 10 Å-Illitkristallinitätswerte sind in der geologischen Karte der Abb. 28 und 29 dargestellt. In Abb. 28 wurden sie nach dem „Frey“-Standard und in Abb. 29 nach dem CIS-Standard umgerechnet. Entsprechend wurden die 7 Å-Chloritkristallinitätswerte in Abb. 30 als „Frey“-Werte und in Abb. 31 als „CIS“-Werte dargestellt. Aufgrund der besseren Übersichtlichkeit wurde darauf verzichtet, die einzelnen Meßwerte anzugeben. Sie können der Tabelle III im Anhang entnommen werden. Stattdessen wurden die Illit- und Chloritkristallinitäten den verschiedenen Metamorphosebereichen zugeordnet. Die Metamorphosestufen wurden als Kreise mit einer unterschiedlichen Füllung dargestellt. Der komplett gefüllte Kreis entspricht dem Bereich der Epizone, (Subgrünschieferfazies), eine 3/4-Füllung entspricht dem Bereich der hohen Anchizone, eine 1/2-Füllung dem der niedrigen Anchizone, eine 1/4-Füllung dem der hohen Diagenese und die nicht gefüllten (weißen) Kreise stehen als Symbol für die niedrige Diagenese. Die Grenzwerte der verschiedenen Metamorphosebereiche der Illite und Chlorite sind in Tabelle 4 aufgeführt. Die Messungen wurden für 192 Probenpunkte ausgewertet.

Generell zeigen alle Parameter mit geringen Unterschieden das gleiche Metamorphosemuster: Ein Maximum wird in der FQZ abgebildet. Nach SW nimmt die Metamorphose bis zur Diagenese im Bereich der Fränkischen Linie ab. Ausgehend von der FQZ in Richtung NE bleibt die Illitkristallinität auf einem hohen Niveau, im Grenzbereich zwischen Anchi- und Epizone, mit einem leichten Minimum im Zentrum der Ziegenrücken- und Mehltheurer Mulde (untere bis höhere Anchizone). Südwestlich der FQZ existieren zwei starke Metamorphoseminima, eines im Zentrum der Teuschnitzer Mulde (niedrige Diagenese) und ein zweites im Zentrum der Nailaer Mulde (höhere Diagenese). Zwischen den beiden Muldenkernen, in der „Abschiebungszone“ (FRANKE, 1984), steigt die Metamorphose wieder auf anchizonale Bedingungen an. Auch im direkten nördlichen Anschluß an die Münchberger Decken ist ein leichter Metamorphoseanstieg zu verzeichnen. Südlich des Schwarzburger Sattels steigt die Metamorphose ebenfalls deutlich an.

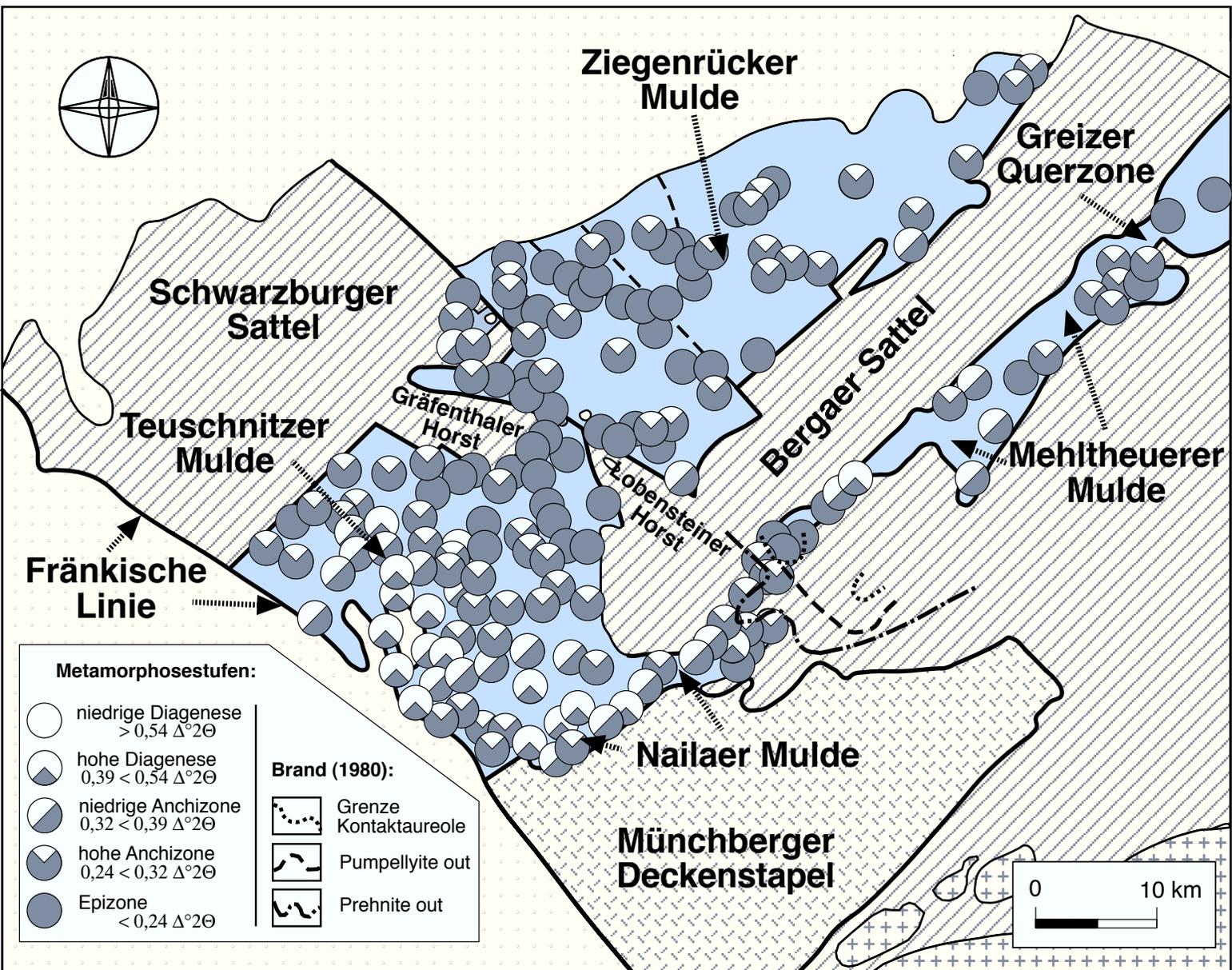


Abb. 28: Geologische Karte der FOZ mit den Metamorphosegrenzen der Illitkristallinitätswerte definiert nach dem „Frey“-Standard.

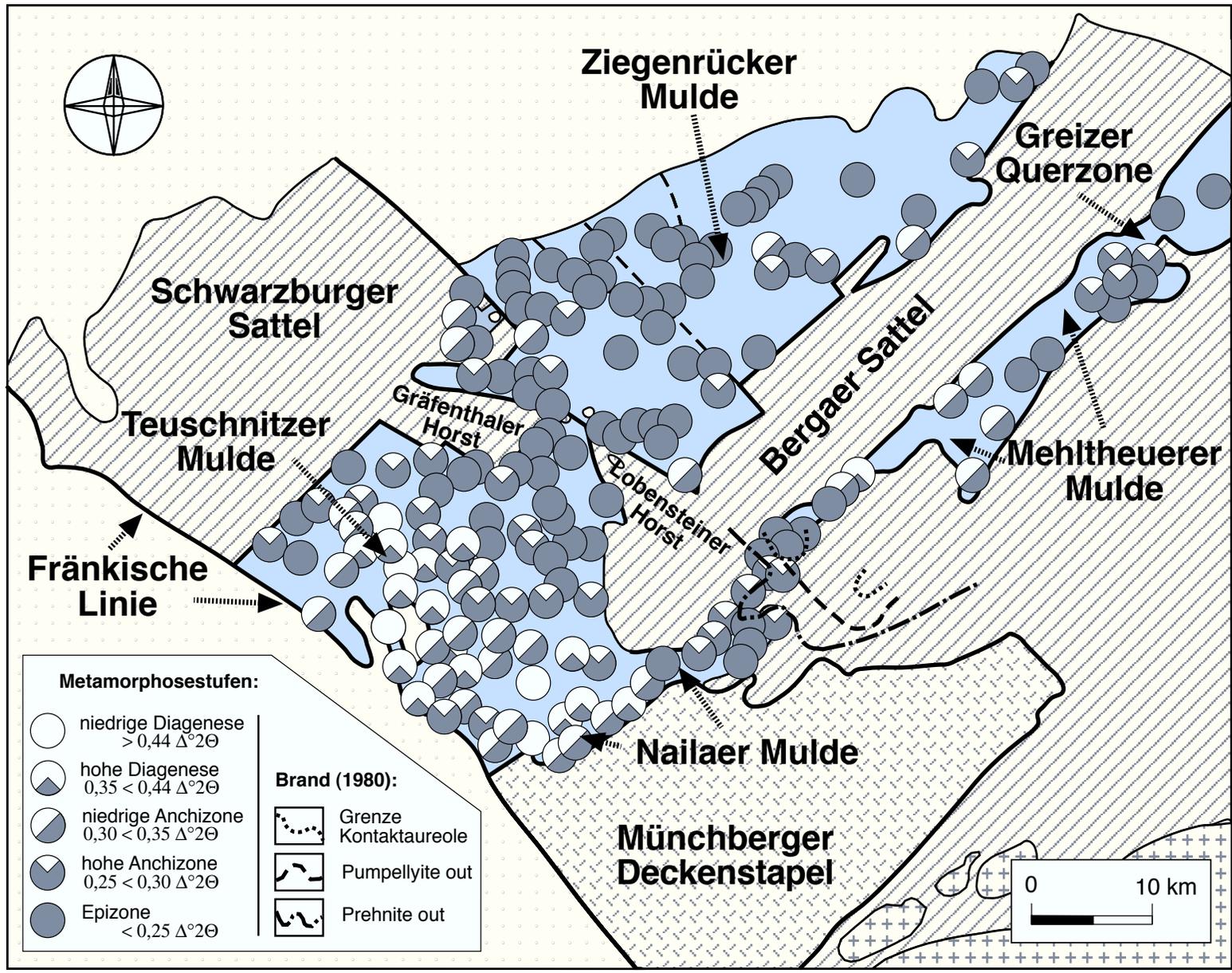


Abb. 29: Geologische Karte der FOZ mit den Metamorphosegrenzen der Illitkristallinitätswerte definiert nach dem „CIS“-Standard

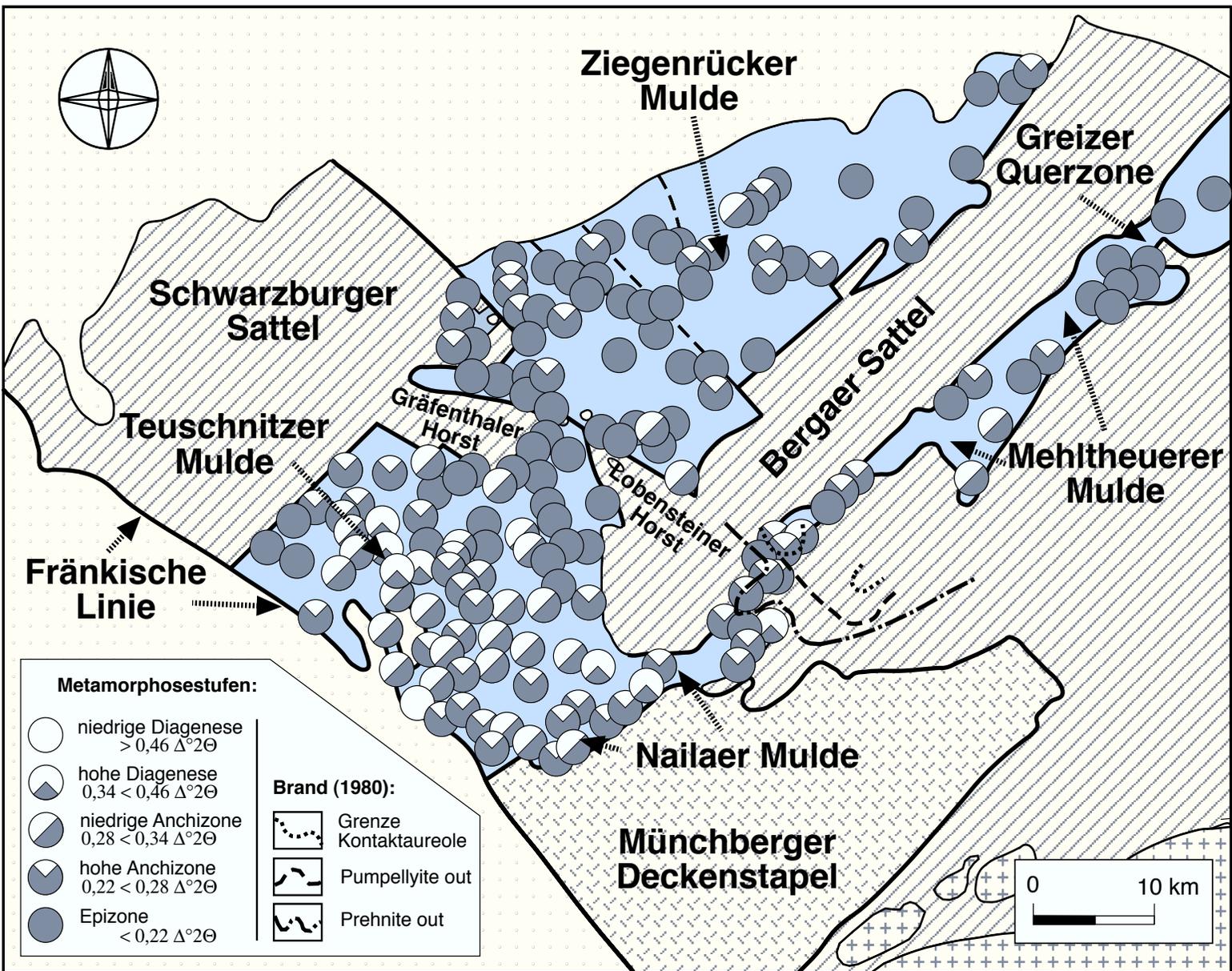


Abb. 30: Geologische Karte der FJZ mit den Metamorphosegrenzen der 7 Å-Chloritkristallinitäts-
werte definiert nach dem „Frey“-Standard.

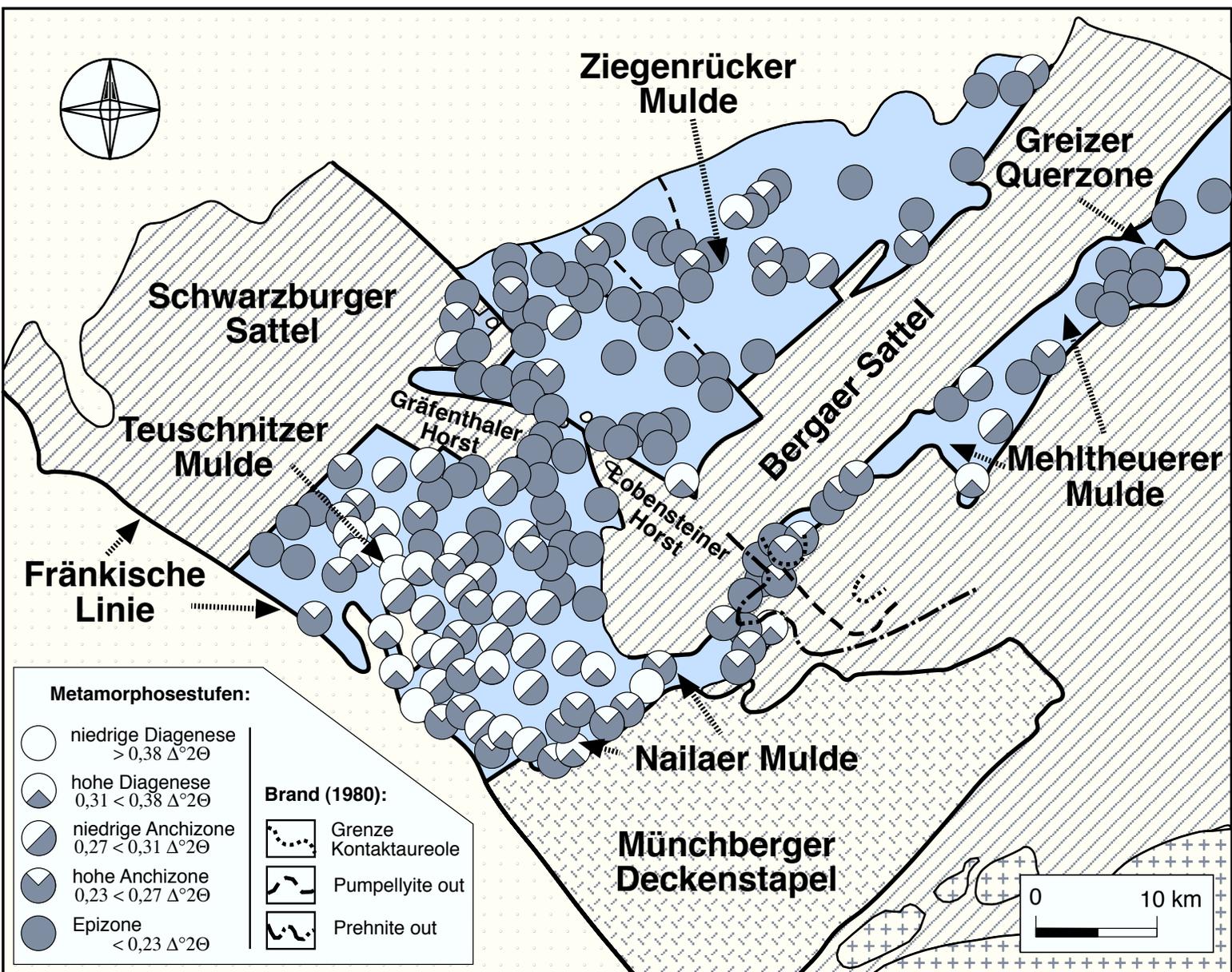


Abb. 31: Geologische Karte der FOZ mit den Metamorphosegrenzen der 7 Å-Chloritkristallinitäts-
werte definiert nach dem „CIS“-Standard.

3.2 Geobarometrische Abschätzungen ($6d_{(33-1,060)}$)

In den unterkarbonischen Peliten des Arbeitsgebietes wurden die $6d_{(33-1,060)}$ -Kristallgitterflächen-Abstände an 174 Proben mit dem Röntgendiffraktometer gemessen. Der Mittelwert aller Messungen beträgt $6d_{(33-1,060)} = 8,991$ mit einer Standardabweichung von $\sigma_1 = 0,018$ (Abb. 32). Daraus ergibt sich ein einheitliches Druckverhältnis im Arbeitsgebiet. Legt man die von GUIDOTTI & SASSI (1986) erstellten Korrelationen der metamorphen Faziesbereiche von MIYASHIRO (1961) mit den $6d_{(33-1,060)}$ -Gitterwerten zugrunde, so entspricht die Metamorphose der unterkarbonischen Pelite einer Niederdruckfazies mit Drucken < 2 kbar bei Temperaturen < 300 °C (Abb. 33).

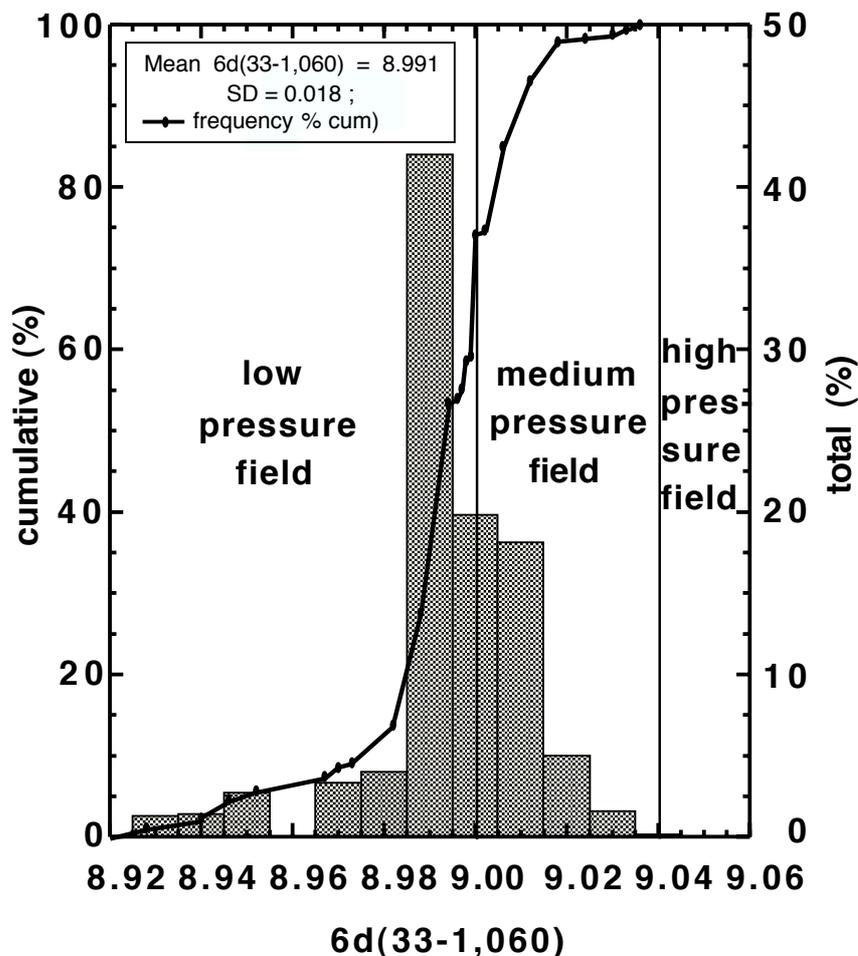


Abb. 32: Kumulative Häufigkeitskurve der 174 $6d_{(33-1,060)}$ -Werte aus dem Arbeitsgebiet. Druckfelder nach GUIDOTTI & SASSI (1986).

Da der $6d_{(33-1,060)}$ -Druckparameter auf einer statistischen Auswertung basiert, sollten die Meßwerte nicht einzeln gewichtet werden. Die statistische Verteilung der Meßwerte im Arbeitsgebiet zeigt jedoch deutliche Unterschiede. Deshalb wurden die $6d_{(33-1,060)}$ -Werte den von GUIDOTTI & SASSI (1986) definierten Druckbereichen zugeordnet und auf der geologischen Karte (Abb. 34) dargestellt. In dieser Abbildung stehen die Punkte mit weißer Füllung für den Meßbereich $6d_{(33-1,060)} < 9.010$. Das entspricht Drucken im Übergangsbereich von Niedrig- zu Mitteldruck-Metamorphose oder dem Bereich darunter. Die halb und halb grau-weiße Füllung entspricht dem Mitteldruckbereich ($6d_{(33-1,060)} = 9.010 < 9.040$) und die grau gefüllten Punkte dem Hochdruckbereich ($6d_{(33-1,060)} \geq 9.040$); siehe Kapitel 2.3.

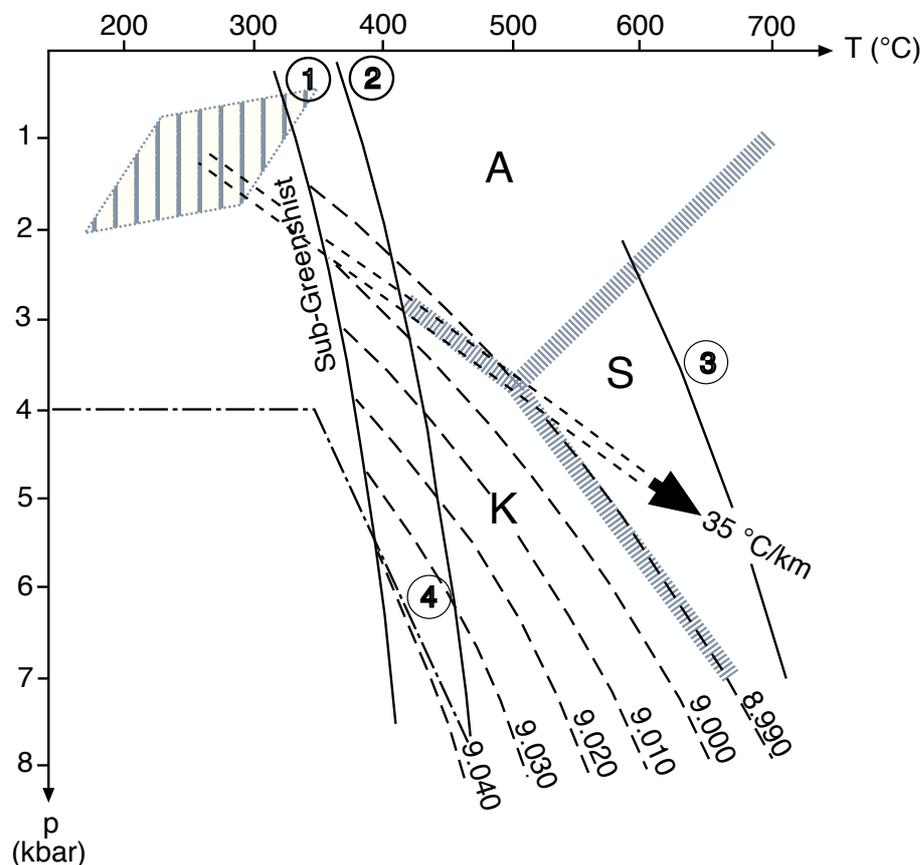


Abb. 33: Qualitative Darstellung der Illit/Muskovit $6d_{(33-1,060)}$ -Werte im Vergleich mit einigen wichtigen Reaktionskurven in Tonschiefern (GUIDOTTI & SASSI, 1986). Gestrichelte Linien sind Kurven der $6d_{(33-1,060)}$ -Werte. Die Kurven 1 bis 4 werden wie folgt beschrieben: Die dicken, quergestreiften Linien zeichnen die Grenzen der Alumosilikate nach: Andalusit (A), Kyanit (K) und Sillimanit (S) (HOLDAWAY, 1971). Der Pfad des geothermischen Gradienten (35 °C/km) wird durch den Pfeil dargestellt. 1. $Kln + Qtz = Prp + H_2O$ (aus Abb. 2a, GREENWOOD, 1976). 2. $Prp = Al\text{-Silikat} + Qtz + H_2O$ (aus Abb. 2a, GREENWOOD, 1976). 3. $St + Qtz + Ms = Bt + H_2O$ (aus Abb. 2a, GREENWOOD, 1976). 4. Maximum-Stabilität für Glaukophan (MARESCH, 1977). Hellgrau gestreiftes Feld: ungefähres Druck-Temperatur-Feld im Arbeitsgebiet, jedoch ist der subgrünschieferfazielle Metamorphosebereich in diesem Diagramm nicht geeicht.

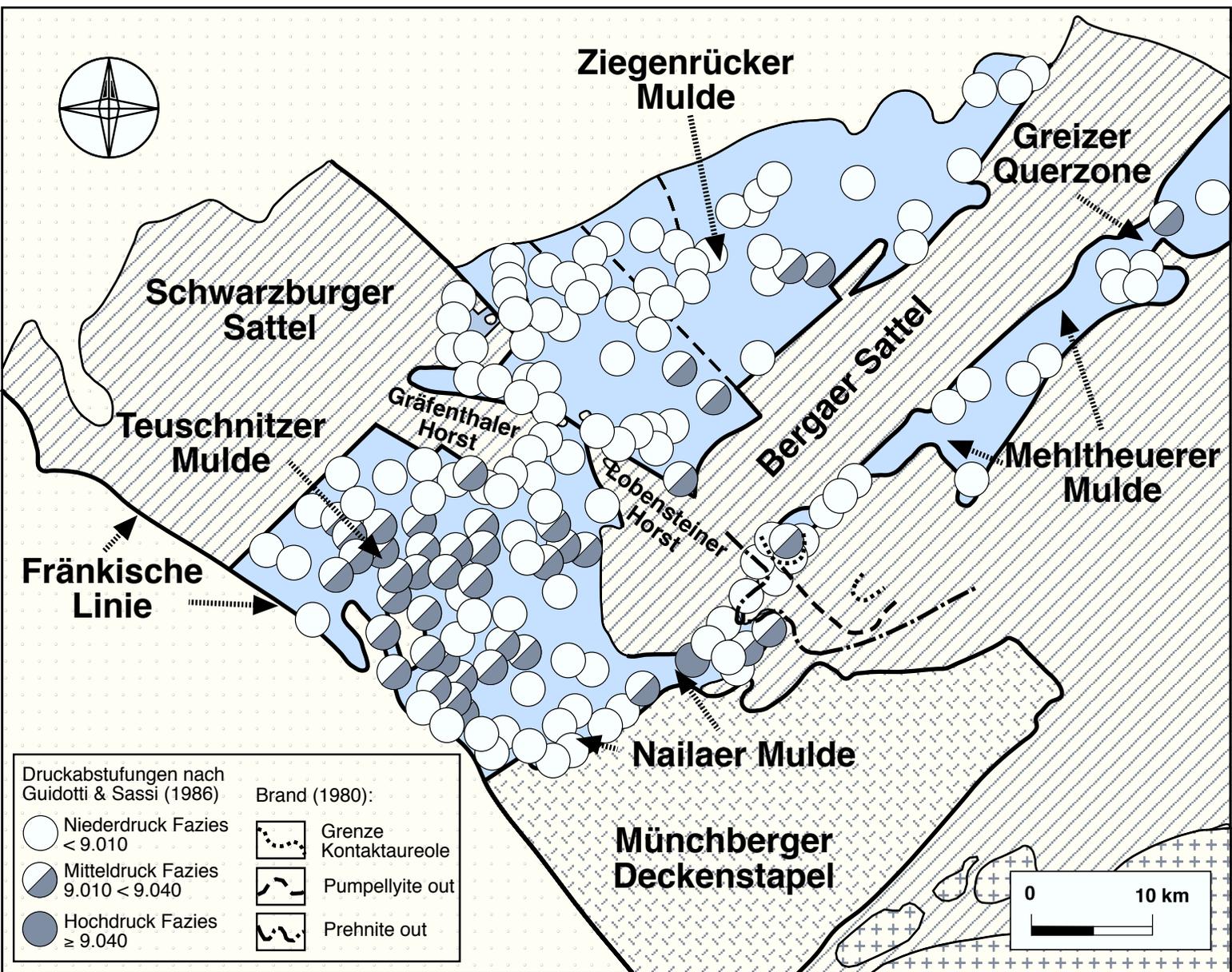


Abb. 34: Geologische Karte mit 6d₃₃^{1.000}-Druckparametern auf der Grundlage der Grenzen von GUIDOTTI & SASSI (1986) in drei Faziesbereiche untergliedert.

In der FQZ und in der Ziegenrücker und Mehltheuerer Mulde dominieren die $6d_{(33-1,060)}$ -Werte der Niederdruck-Fazies. Hingegen überwiegen im Zentrum der Teuschnitzer Mulde deutlich die Werte der Mitteldruck-Fazies. Im Zentrum der Teuschnitzer Mulde sind die stratigraphisch jüngsten unterkarbonischen Einheiten des Arbeitsgebietes aufgeschlossen, die gleichzeitig die niedrigste thermische Metamorphose (Kapitel 3.1 und 3.3) und die höchsten $6d_{(33-1,060)}$ -Werte bzw. die höchsten Drucke anzeigen. Die abweichenden Werte im Kern der Teuschnitzer Mulde deuten an, daß dieser Bereich von der Temperaturanomalie nicht erfaßt wurde.

3.3 Inkohlungsmessungen

Die Vitrinitreflexions-Messungen wurden von S. Herlitzius nur an Proben der unterkarbonischen Tonschiefer des Frankenwaldes durchgeführt, da das Thüringische Schiefergebirge für westdeutsche Wissenschaftler im Untersuchungszeitraum nicht zugänglich war.

Ein direkter Vergleich zwischen Illitkristallinitäts- und Vitrinitreflexionswerten führt zu einer relativ schlechten linearen Korrelation ($R = 0,58$; Abb. 35). Werden jedoch die mittleren Reflexionswerte der Vitrinite ($\% R_m$) nach den Metamorphosegrenzen von KÜBLER (1975, in ÁRKAI, 1991) den unterschiedlichen Metamorphosestufen zugeordnet, so liefern sie eine bessere Übereinstimmung (Abb. 36). Die Metamorphosegrenze der Diagenese- zur Anchizone wurde bei $2,7 \% R_m$ definiert, die der Anchi- zur Epizone bei $4,1 \% R_m$. In Abb. 36 wurden die Diagenese- und die Anchizone nochmals in eine niedrige und hohe Stufe unterteilt. Die Darstellung der verschiedenen Metamorphosezonen in Abb. 36 erfolgte entsprechend denen der Illitkristallinität in Form von unterschiedlich gefüllten Kreisen.

Die niedrigste Metamorphose wird sowohl von den Inkohlungs- als auch von den Illitkristallinitätsdaten im SW-Teil der Teuschnitzer Mulde abgebildet. Die Vitrinitreflexionswerte entsprechen hier der niedrigen bis hohen Diagenese, während sich die Illitkristallinitätswerte schon im Metamorphosefeld der hohen Diagenese und niedrigen Anchizone befinden. In den übrigen Bereichen westlich der FQZ stimmen die Metamorphoseabstufungen der Vitrinitreflexion und der Illitkristallinität relativ gut überein (vergleiche Kapitel 3.1, Abb. 28). Vom niedrigstgradigen Bereich der Metamorphosekarte im SW-Teil der Teuschnitzer Mulde in Richtung FQZ zu den höhergradigen Bereichen suggerieren die Vitrinitreflexionswerte einen Metamorphosesprung, während die Illitkristallinitäten im gleichen Profil eine kontinuierliche Zunahme der Metamorphose in Richtung FQZ bis zu epizonalen Bedingungen anzeigen. Die Vitrinitreflexionswerte sind im Anhang Tabelle VII aufgeführt.

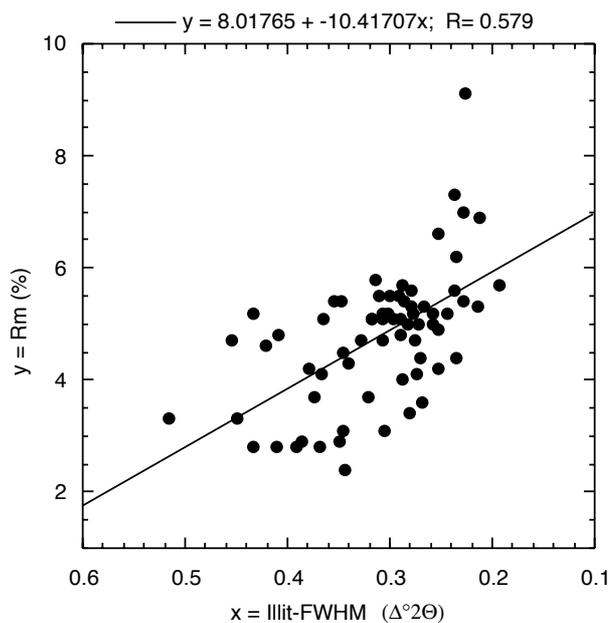


Abb. 35: Lineare Korrelation zwischen Illitkristallinität und Vitrinitreflexion.

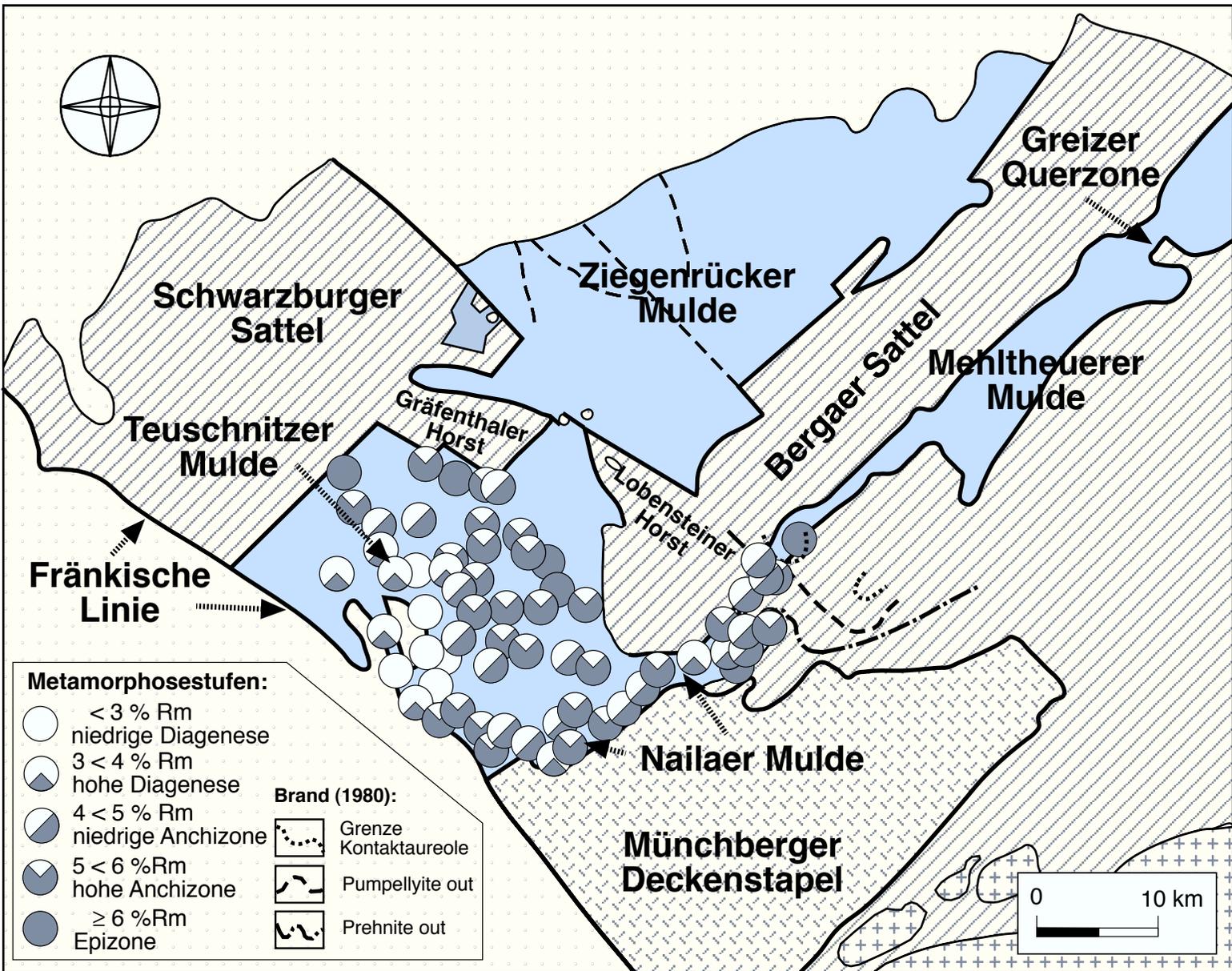


Abb. 36: Geologische Karte mit Metamorphosestufen nach den Vitrinitreflexionsmessungen.

3.4 Diskussion der paläo-thermobarometrischen Ergebnisse

Die neuen Illit- und Chloritkristallinitäts-Untersuchungen in den unterkarbonischen Peliten der FQZ bilden im Arbeitsgebiet ein komplexes Metamorphosemuster ab. Prägend ist das Metamorphosehoch (Epizone) in der FQZ. Die Metamorphose nimmt nach SW (Fränkische Linie) auf diagenetische bis niedrig-anchizonale Bedingungen ab. Von der FQZ nach NE (Ziegenrücker und Mehltheurer Mulde) gehen die Metamorphosewerte jedoch nur leicht zurück (Abb. 38). Wie auf den nächsten Seiten diskutiert wird, muß mit der folgenden Metamorphoseentwicklung gerechnet werden:

- Diagenese durch stratigraphische Versenkung;
- syntektonische Anchimetamorphose, z.T. erhöht durch synkinematische Granitintrusionen;
- Aufheizung durch posttektonische Magmenintrusionen.

Bei der Interpretation der Daten zur Metamorphoseabschätzung muß beachtet werden, daß das heutige Metamorphosebild aus einer Addition verschiedener Metamorphoseereignisse entstanden ist. Die Gefahr einer Verfälschung der Kristallinitätswerte durch einen Eintrag des Abriebs großer detritischer Muskovit- und Chloritkörner in die gemessene Tonfraktion kann aufgrund der vorsichtigen Aufbereitung (z.B. des Verzichts auf eine Scheibenschwingmühle) als gering eingeschätzt werden (Kapitel 2.1.12). Der Esquevin-Index weist deutlich auf metamorphe Illitneubildungen hin (Kapitel 2.1.10.1).

Die relativ schlechte Korrelation der Illitkristallinitäten mit den Vitrinitreflexionswerten (Kapitel 3.3, Abb. 35) ist im wesentlichen auf die bei der Vitrinitreflexions-Messung verwendete Methodik zurückzuführen. Die Vitrinitreflexion

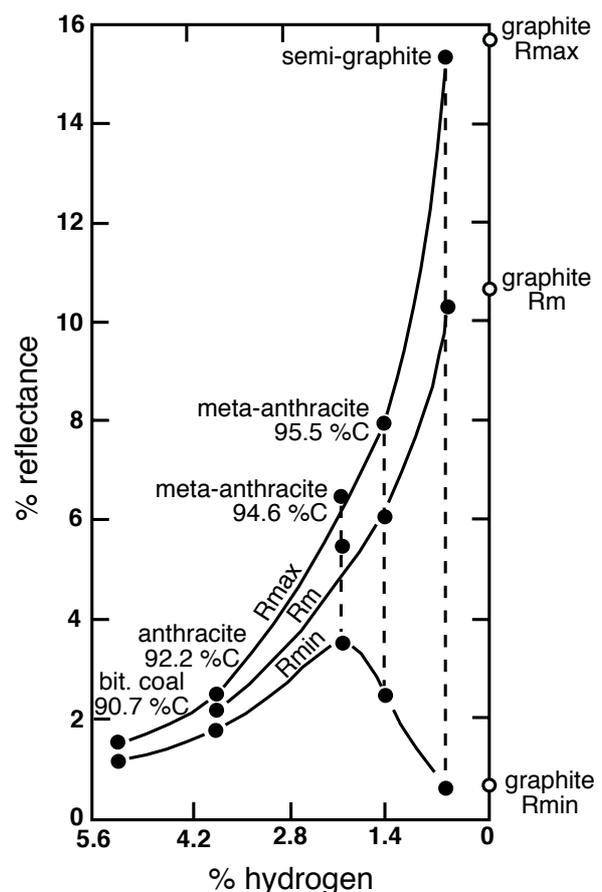


Abb. 37: maximale (% R_{\max}), mittlere (% R_m) und minimale Reflexion (% R_{\min}) in Abhängigkeit vom Wassergehalt bei höherer Inkohlung nach RAGOT (1977).

wurde an Mazeralkonzentraten gemessen, in denen die Mazerale ungeordnet in Harz eingebettet sind. In den Konzentraten kann folglich nur die „ungeordnete“ mittlere Reflexion ($\% R_m$) gemessen werden. Diese ungeordnete mittlere Reflexion entspricht bis zu einem Reflexionswert von $< 1 \% R_{max}$ der maximalen Reflexion des Vitriniten. Ab einem Reflexionswert $> 1 \% R_{max}$ setzt bei den Vitriniten eine deutliche Reflexions-Asymmetrie ein, die mit steigendem Inkohlungsgrad zunimmt (TEICHMÜLLER, 1987). Hier reicht es nicht aus, die mittlere Reflexion an ungeordneten Vitriniten zu messen, da der $\% R_m$ -Wert nicht definierbar zwischen $\% R_{max}$ und $\% R_{min}$ liegt und damit je nach Inkohlungsgrad stark streuen kann (Abb. 37). Deshalb sollte zur Bestimmung des Inkohlungsgrades bei höher inkohlten Proben immer die maximale Vitrinitreflexion an orientierten Gesteinsanschliffen bestimmt werden.

Trotz der methodisch bedingten starken Streuung der ungeordneten $\% R_m$ -Werte entspricht das Metamorphosebild südwestlich der FQZ im wesentlichen dem der Illit- und Chloritkristallinitäts-Untersuchungen (vergleiche Abb. 28, 30 und 36). Aufgrund der zu ungenauen Messungen und der zu geringen Probandichte bzw. der fehlenden Messungen im östlichen Teil des Arbeitsgebietes werden jedoch die Ergebnisse der Vitrinitreflexion in diesem Kapitel nicht weiter diskutiert.

Die FQZ unterscheidet sich neben der erhöhten Metamorphose, die durch die Illit- und Chloritkristallinität gekennzeichnet ist, auch durch ihr tektonisches Inventar deutlich von ihren südwestlichen und nordöstlichen Nachbargebieten. FRANKE (1984) konnte zeigen, daß südwestlich der FQZ ein offener, aufrechter Faltenbau mit einer weitständigen Bruchschieferung dominiert. Mit der Annäherung an die FQZ fallen die Faltenachsebenen flacher ein, und die Schieferung ist intensiver ausgebildet. Im Zentrum der FQZ liegen die Faltenachsebenen subparallel zur flach einfallenden Hauptfoliation, die als penetrative Dachschieferung entwickelt ist. Im thüringischen Teil der FQZ konnten SCHROEDER (1958, 1966a); HEMPEL (1964), SCHWAN (1958; 1968) und MEINEL (1972) ebenfalls eine stärkere Verformung und eine erhöhte Metamorphose feststellen („Phyllittektonik“).

Im Dachschieferbruch Schmiedebach, im nördlichen Teil der FQZ, sind graphitbelegte, quarzreiche, faltenachsenflächen-parallele Scherbänder aufgeschlossen. Die Graphitbildung in Scherbändern setzt unter grünschieferfaziellen syndeformativen Metamorphosebedingungen bei etwa 300 °C ein (BUSTIN, 1983; SCHÜLLER, 1961; TAYLOR, 1971). Entsprechende Ergebnisse (250 - 350 °C, 1,5 bis 3 kbar) resultierten aus BRANDs (1980) phasenpetrologischen Untersuchungen in den devonischen Metabasiten im S-Teil der FQZ.

Der folgende Ansatz soll es ermöglichen, den Einfluß der Versenkungsdiagenese und -metamorphose, die durch die Sedimentation und eine mögliche tektonische Überlagerung

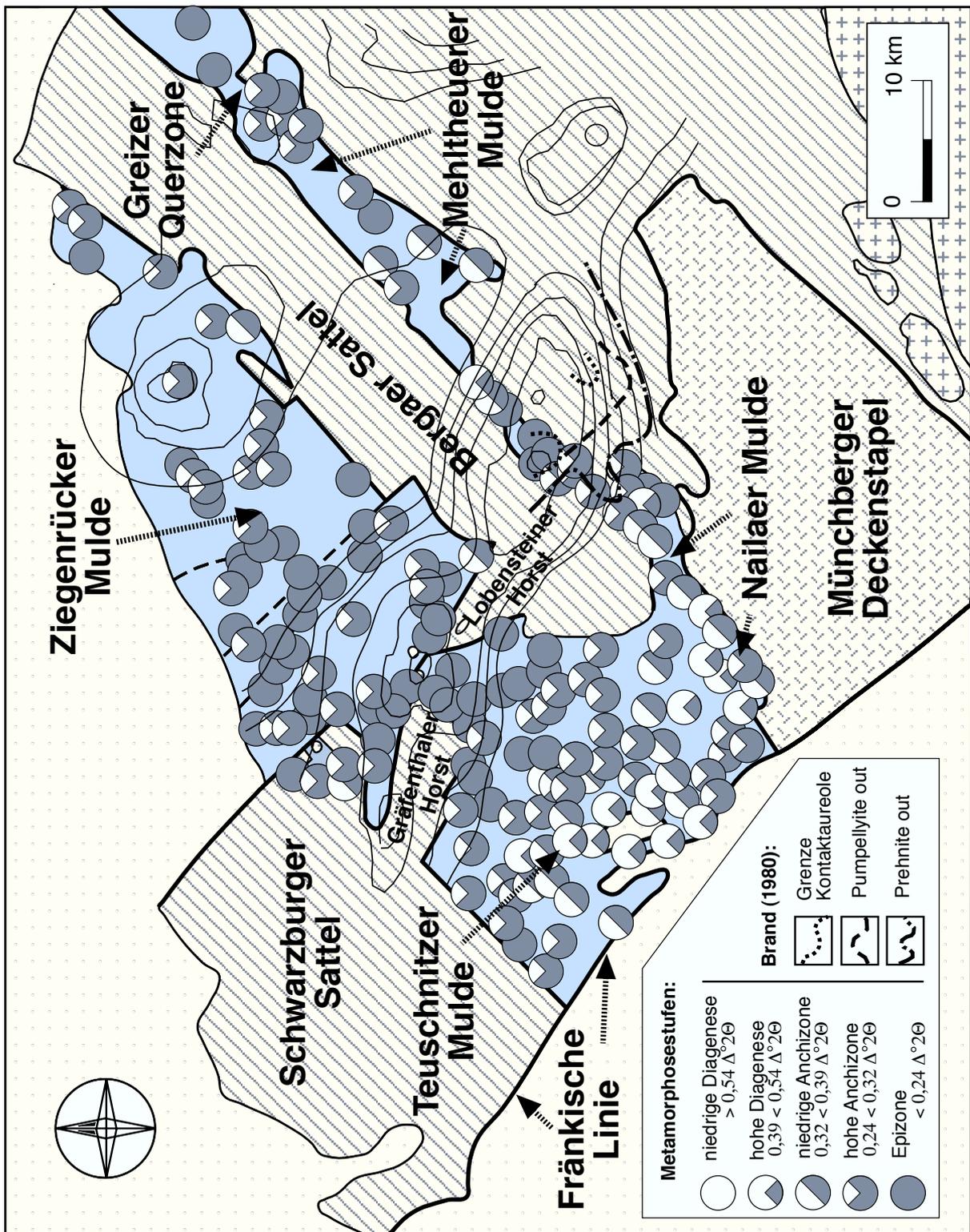


Abb. 38: Geologische Karte mit Metamorphose-Abstufungen, die mit Hilfe der Illitkristallinität bestimmt wurden. Die Metamorphosegrenzen der Kristallinitäten wurden nach dem "Frey"-Standard bestimmt. Die dünnen Linien zeigen die Oberfläche der Granite im Untergrund in 1000 m-Schritten bis maximal 5000 m Tiefe an, modelliert von SEHM et al., 1989.

verursacht wurde, und die Auswirkung der syn- und posttektonischen thermischen Metamorphose auf das heutige Metamorphosebild abzuschätzen. Die Sedimentmächtigkeit des Unterkarbons beträgt nach PFEIFFER et al. (1995) mindestens 3,6 km. BRAND (1980) schätzte im südlichen Teil der FQZ für die syntektonische Memorphose in den devonischen Metabasiten Drucke von 1,5 bis 3 kbar ab. RÖLL (1998) gibt für die devonischen Kontaktgesteine des posttektonisch intrudierten Sparnberger Granits in direkter Nachbarschaft zu Brands Untersuchungsgebiet Drucke von ≤ 2 kbar an. Eigene Druckabschätzungen an unterkarbonischen Tonschiefern ergeben für das gesamte Arbeitsgebiet relativ gleichbleibende Drucke im Niederdruck-Faziesbereich, die nach der Klassifizierung von GUIDOTTI & SASSI (1986) ≤ 2 kbar betragen (Kapitel 3.2). Folglich liegen die Drucke im Arbeitsgebiet für den Zeitraum zwischen dem syntektonischen Metamorphosemaximum und der posttektonischen Granitintrusion bei ≤ 2 kbar. Gleiche Drucke bedeuten aber auch eine gleichmäßige Versenkungstiefe der unterkarbonischen Tonschiefer, die bei 2 kbar an der Basis des Unterkarbons maximal 7 km entspricht.

Die Druckabschätzungen zeigen keine Erhöhung in der FQZ. Auf ein tieferes tektonisches Stockwerk, wie es von STEIN (1988) gefordert wurde, gibt es keine geologischen Hinweise. Die Heraushebung eines tieferen Stockwerkes in der FQZ würde einen Metamorphosesprung erfordern, der nicht zu beobachten ist. Eine tektonische Überlagerung der FQZ ist ebenfalls unwahrscheinlich, weil dazu ein langer, schmaler Deckensporn nach NW aus der saxothuringischen Deckenfront über der FQZ herausgeragt haben müßte. Deshalb ist die Existenz eines syndeformativ erhöhten Wärmeflusses zu fordern, wie ihn bereits FRANKE (1984) postuliert hat.

Die synkinematisch erhöhte Temperatur in der FQZ kann verschiedene Ursachen haben. Eine Möglichkeit ist eine fluidgesteuerte Aufheizung der Gesteine. Jedoch ergaben geochemische Untersuchungen an Spurenelementen unterkarbonischer Tonschiefer westlich der FQZ keine Hinweise auf Fluide (BIRKELBACH, 1989). Eine syntektonische Magmenintrusion könnte ebenfalls eine Wärmequelle darstellen. Dieser Ansatz wird durch eine Modellierung der Oberfläche der Granitkörper im Untergrund der FQZ gestützt (SEHM et al. 1989). Sie modellierten auf der Grundlage von Bouguer-Schweremessungen und Bohrlochuntersuchungen einen größeren zusammenhängenden Granitkörper im Untergrund der FQZ. Da in der FQZ nur posttektonische Granite aufgeschlossen sind, muß gefolgert werden, daß diese syntektonische Intrusion bis heute nicht freigelegt wurde. Unterstützt wird diese Theorie durch den nach KROHE et al. (1994) während der variscischen Deformation intrudierten Leuchtenberger Granit, der südlich der Münchberger Decken an der Grenze Saxothuringikum / Moldanubikum aufgeschlossen ist. Die U / Pb-Zirkonalter des Leuchtenberger Granits liegen zwischen 333 ± 5 Ma (ABDULLAH et al., 1994) und 342 ± 3 Ma (KÖHLER & HÖLZL, 1996).

K / Ar-Altersdatierungen an der authigenen Illitfraktion $< 0,2 \mu\text{m}$ ergaben in der FQZ (Schigru1, Lehesten: $293,1 \pm 7,1 \text{ Ma}$) in der Teuschnitzer Mulde (WZ 138, nördlich Förtschendorf: $311,7 \pm 6,7 \text{ Ma}$) und in der Ziegenrücker Mulde (Döbritz 2, SE-Flanke des Schwarzburger Sattels: $291,0 \pm 6,1 \text{ Ma}$) deutlich posttektonische Alter (NEUROTH, 1997). Die Alter entsprechen denen der posttektonischen Granite (Henneberg $299 \pm 5 \text{ Ma}$, LOTH et al., 1997; Silberberg, $320 + 10 / -8 \text{ Ma}$, KUNERT et al., 1998) und sind Indiz für eine weit in die Teuschnitzer und Ziegenrücker Mulde reichende posttektonische Kontaktmetamorphose, die mit dem Granitkörper von SEHM et al. (1989) kompatibel ist. Es ist jedoch nicht bekannt, welchen jeweiligen Anteil die prä- syn- und posttektonischen Intrusionen an diesem Intrusionskörper haben.

Südwestlich der FQZ, in der Teuschnitzer Mulde, sind die niedrigst-metamorphen unterkarbonischen Tonschiefer aufgeschlossen. Diese hoch-diagenetisch bis niedrig-anchizonalen Tonschiefer wurden stratigraphisch dem oberen Kulm zugeordnet, der nach HOFMANN (1961) durch das Teuschnitzer Konglomerat nochmals unterteilt wird. Das Teuschnitzer Konglomerat ist über die gesamte Teuschnitzer Mulde zu verfolgen und zeichnet die Muldenform in etwa nach. LAMBELET et al. (1967) schätzen die heutige Mächtigkeit des Unterkarbons in der Teuschnitzer Mulde auf etwa 3,6 km. Die heutige Geländeoberfläche lag folglich bei einer Überdeckung der Kulmbasis von 7 km in einer Tiefe von etwa 3, 5 km, was selbst bei einem erhöhten geothermischen Gradienten von $40 \text{ }^\circ\text{C} / \text{km}$ maximal zu Bedingungen der Versenkungsdiagenese führt, die auch im oberen Oberkulm der Teuschnitzer Mulde von der Illit- und Chloritkristallinität sowie von der Vitrinitreflexion abgebildet werden (Abb. 38). Der Kern der Teuschnitzer Mulde liegt folglich außerhalb des thermischen Einflusses der FQZ. Hier ist also keine zusätzliche Wärmequelle zu erwarten. Nach NE, in Richtung auf die FQZ, nimmt die Metamorphose in der Teuschnitzer Mulde zu. Hier addieren sich die Einflüsse der nach SW abtauchenden Strukturen, die nach NE ansteigende synkinematische thermische Metamorphose und die Auswirkungen der postkinematischen Granitintrusionen in der FQZ.

Vom Kern der Teuschnitzer Mulde in Richtung NW nimmt die Metamorphose bis an den SE-Rand des Schwarzburger Sattels deutlich auf höher anchizontale bis epizonale Metamorphosebedingungen zu. Da hier die thermischen Metamorphosebedingungen wesentlich höher sind, als es die Abschätzung zur stratigraphischen Versenkungsmetamorphose erlaubt (siehe oben), kann die Metamorphosezunahme nicht alleine auf einen tieferen stratigraphischen Anschnitt zurückgeführt werden. Die erhöhte Metamorphose am SE-Rand des Schwarzburger Sattels könnte durch eine verstärkte tektonische Überlagerung durch die Ausläufer tektonischer Schuppen verursacht worden sein, die durch die Retrokeil-Tektonik der Mitteldeutschen Kristallinschwelle aktiviert wurden (F. SCHÄFER, 1997). Während im Kern des Schwarzburger Sattels Drucke von 3 bis 5 kbar bestimmt wurden (F. Schäfer, 1997), liegen die Drucke

im Unterkarbon südöstlich des Schwarzburger Sattels deutlich niedriger (Kapitel 3.2). Das widerspricht jedoch einer tieferen tektonischen Versenkung. Auf die Ursache der erhöhten thermischen Metamorphose gibt es deshalb keine Hinweise.

Am SE-Rand der Teuschnitzer Mulde, in Richtung Bergaer Sattel, nimmt die Metamorphose auf niedrig-anchizontale Bedingungen zu. Diese Zunahme geht einher mit einem erneuten Anstieg des Faltenpiegels am Übergang zur NW-Flanke des Bergaer Sattels, verbunden mit einem tieferen stratigraphischen Anschnitt des Unterkarbons. In diesem, von FRANKE (1984) als Abschiebungszone bezeichneten Bereich, läßt sich die Metamorphose mit einer einfachen Versenkungsmetamorphose erklären.

Die Illit- und Chloritkristallinitätswerte des Unterkarbons in der südwestlichen Verlängerung des Bergaer Sattels, sowie in der sich südöstlich anschließenden Nailaer Mulde, zeigen eine uneinheitliche diagenetische bis anchizontale Metamorphose an, die durch keinen bekannten stratigraphischen oder tektonischen Effekt erklärt werden kann. Für eine genauere Analyse ist in diesem Gebiet eine deutlich höhere Probendichte notwendig.

Nordöstlich der FQZ, im Unterkarbon der Mehltheuerer Mulde, nehmen Illit- und Chloritkristallinität wieder von epizonalen auf anchizontale Metamorphosebedingungen ab. Diese immerhin anchizontale und nicht nur diagenetische Prägung kann damit erklärt werden, daß im Gegensatz zur Teuschnitzer Mulde alle Proben aus den Schichten des unteren Unterkarbons stammen. Folglich reicht auch hier eine rein stratigraphische Versenkung zur Erklärung des Metamorphosegrades aus.

Im nordöstlichen Teil der Mehltheuerer Mulde steigt die Metamorphose wieder auf epizonale Bedingungen an. Dieses Gebiet liegt in der Greizer Querzone, die parallel zur FQZ angelegt ist, - die ähnlich wie diese - durch erhöhte Metamorphose und stärkere tektonische Verformung geprägt wurde. In der Greizer Querzone sind phyllitische Tonschiefer mit Schieferungsqualitäten aufgeschlossen, die nach der Einteilung von MERRIMAN & PEACOR (1999) epizonalen Metamorphosebedingungen zugeordnet werden können. Die Greizer Querzone wurde von F. SCHÄFER (1997) aufgrund ihrer Strukturen und der damit einhergehenden erhöhten tektonometamorphen Prägung der NW-vergente „Prokeil“-Tektonik zugeordnet, die vor allem die Platznahme der Münchberger Decken bewirkt hat. Die phyllitisierten Gesteine sollen als Schuppeneinheit an der Front der paläozoischen Gesteine zusätzlich akkretioniert worden sein. Damit ist zwar eine stärkere Deformation im Kulm zu erreichen, jedoch keine höhere thermische Metamorphose bei niedrigen Drucken, es sei denn, die Gesteine wurden vor der Akkretionierung einem erhöhten Wärmefluß ausgesetzt. Als Ursache kann, entsprechend der FQZ, eine syndeformativ erhöhte Temperatur durch eine Magmenintrusion gefordert werden. Aufgrund der Modellierung von SEHM et al. (1989) können - wie für die FQZ - auch für dieses Gebiet Granitintrusionen erwartet werden. Jedoch

haben die aufgeschlossenen Granite bei Greiz / Neumühle ein präkarbonisches $^{206}\text{Pb} / ^{207}\text{Pb}$ Intrusionsalter (368 ± 5 Ma) geliefert (GEHMLICH et al., 1997), folglich kommen sie als Ursache der Metamorphose in den unterkarbonischen Gesteinen nicht in Frage. Es gibt aber auch keine Hinweise für eine erhöhte Fluidzufuhr. Deshalb wird auch für die Greizer Querzone eine synkinematische Granitintrusion gefordert, die noch im Untergrund verborgen ist.

Nordwestlich des Bergaer Sattels, nordöstlich der FQZ, schließt sich die Ziegenrücker Mulde an. Hier fällt auf, daß die epizonale Metamorphose aus der FQZ weit in die Ziegenrücker Mulde hineinreicht. Erst in der östlichen Hälfte der Ziegenrücker Mulde sinkt der Metamorphosegrad auf höher-anchizontale Bedingungen ab. Im Gegensatz zur Teuschnitzer Mulde im SW ist die Ziegenrücker Mulde nicht verkippt. Die Proben stammten alle aus Schichten des unteren Unterkarbons. Die stratigraphische Lage der Proben erlaubt nach meinen Abschätzungen zwar anchizontale Bedingungen, nicht aber eine höher-anchizontale oder gar epizonale Metamorphose. Im Gegensatz zur FQZ zeigt das Unterkarbon der Ziegenrücker Mulde trotz der höheren Metamorphose keine der FQZ entsprechenden tektonische Strukturen (z.B. Dachschieferung) an. Die erhöhte Metamorphose muß also vor oder nach der Faltung entstanden sein. Die einzige denkbare Wärmequelle für eine prä-kinematische Metamorphose ist der sächsische Granulit, der nach FRANKE & STEIN (1999) als $1000\text{ }^{\circ}\text{C}$ heißer, niedrig viskoser Festkörper in den Untergrund des Saxothuringikums intrudiert ist. Der Scheitel der Granulit-Struktur liegt jedoch südlich der Ziegenrücker Mulde, am S-Rand des Bergaer Sattels DEKORP & OROGENIC PROCESSES WORKING GROUPS (im Druck). Wahrscheinlicher ist eine posttektonische Aufheizung der Ziegenrücker Mulde: in ihrem Westteil belegen einige NW-streichende basische Gänge eine gewisse magmatische Aktivität, und im Ostteil weist das Schwerebild auf einen verborgenen „Pluton von Auma“ hin (LORENZ, 1957; SCHIED, 1986; SEHM et al., 1989).

4 MODELLRECHNUNGEN

Die Ergebnisse der Metamorphoseuntersuchungen aus dem ersten Teil dieser Arbeit lassen den Schluß zu, daß die thermische Anomalie in der FQZ, so wie sie heute abgebildet ist, von unterschiedlichen Metamorphoseereignissen geprägt wurde. Die Versenkungsdiagenese / -metamorphose wurde überprägt durch die variscische Deformationsphase, die mit einem erhöhten Wärmefluß in der FQZ verbunden war. Dieser folgte die posttektonische Kontaktmetamorphose, verursacht durch Granit- und Gangintrusionen in die FQZ. Der jeweilige Einfluß der verschiedenen Metamorphoseereignisse auf das heutige Metamorphosemuster läßt sich nur schwer abschätzen. Der zweite Teil der Arbeit beschreibt deshalb die Untersuchungen zum Einfluß der Granitintrusionen an dem Metamorphosebild im Arbeitsgebiet. Es wurde die Ausbreitung der Temperaturfront der abkühlenden Granitintrusion im unterkarbonischen Nebengestein berechnet und mit den Illitkristallinitätswerten verglichen. Die Modellierung soll Aufschluß über die Ausbreitung der Kontaktmetamorphose und über den Mechanismus des Wärmetransportes (überwiegend advektiv oder konduktiv) geben.

Die Berechnungen wurden von Dr. Georg Kosakowski unter der Leitung von Dr. Christoph Clauser, Geophysiker der Abteilung Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA) des Niedersächsischen Landesamtes für Bodenforschung (NLfB) durchgeführt. Er übernahm auch die Wärmeleitfähigkeitsmessungen an den Gesteinen. Meine Aufgabe war es, den geologischen Ansatz mit den geologischen und geometrischen Parametern für die verschiedenen Modelle auszuarbeiten und aus der Illitkristallinität Metamorphose-Temperaturen abzuleiten, damit diese mit den berechneten Temperaturen verglichen werden konnten. Auf der Grundlage des „best-fit“-Modells führte ich eine EASY % R_0 -Modellierung der Inkohlung durch, um sie mit den Vitrinitreflexionswerten zu vergleichen.

4.1 Umwandlung der Illitkristallinität in Paläotemperatur

Um im Arbeitsgebiet einen Vergleich zwischen den Illitkristallinitäts-Metamorphosemuster mit Modelltemperaturen zu ermöglichen, müssen die Illitkristallinitätswerte in Temperaturwerte umgewandelt werden. Da die Illitkristallinität neben der Temperatur von anderen Faktoren wie Lithologie, Gesteinsporosität, Fluidzusammensetzung, Illitchemie und untergeordnet auch Stress und Zeit abhängt (FREY, 1986), kann nur ein komplexes Modell, ähnlich dem EASY % R_0 -Programm, das von SWEENEY & BURNHAM (1990) für die Vitrinitreflexion entwickelt wurde, eine Umwandlung in Temperaturen ermöglichen. Ein solches

Modell wurde bisher noch nicht entwickelt. Deshalb erfolgt hier eine Temperaturabschätzung auf empirischer Basis anhand von Literaturdaten. Aus einer großen Anzahl von Publikationen wurden vier Arbeiten herausgesucht, deren Temperaturabschätzungen auf verschiedenen Parametern beruhen (siehe z. B. Auflistung in KISCH, 1987). Im Gegensatz zu vielen anderen Arbeiten versuchten die unten zitierten Autoren auch Temperaturen unter- und oberhalb der Anchizone abzuschätzen. Da die Untersuchungen in verschiedenen Arbeitsgebieten mit entsprechend unterschiedlicher Lithologie und Metamorphosegeschichte durchgeführt wurden, erhöht sich die Varianz der Ergebnisse (Abb. 39).

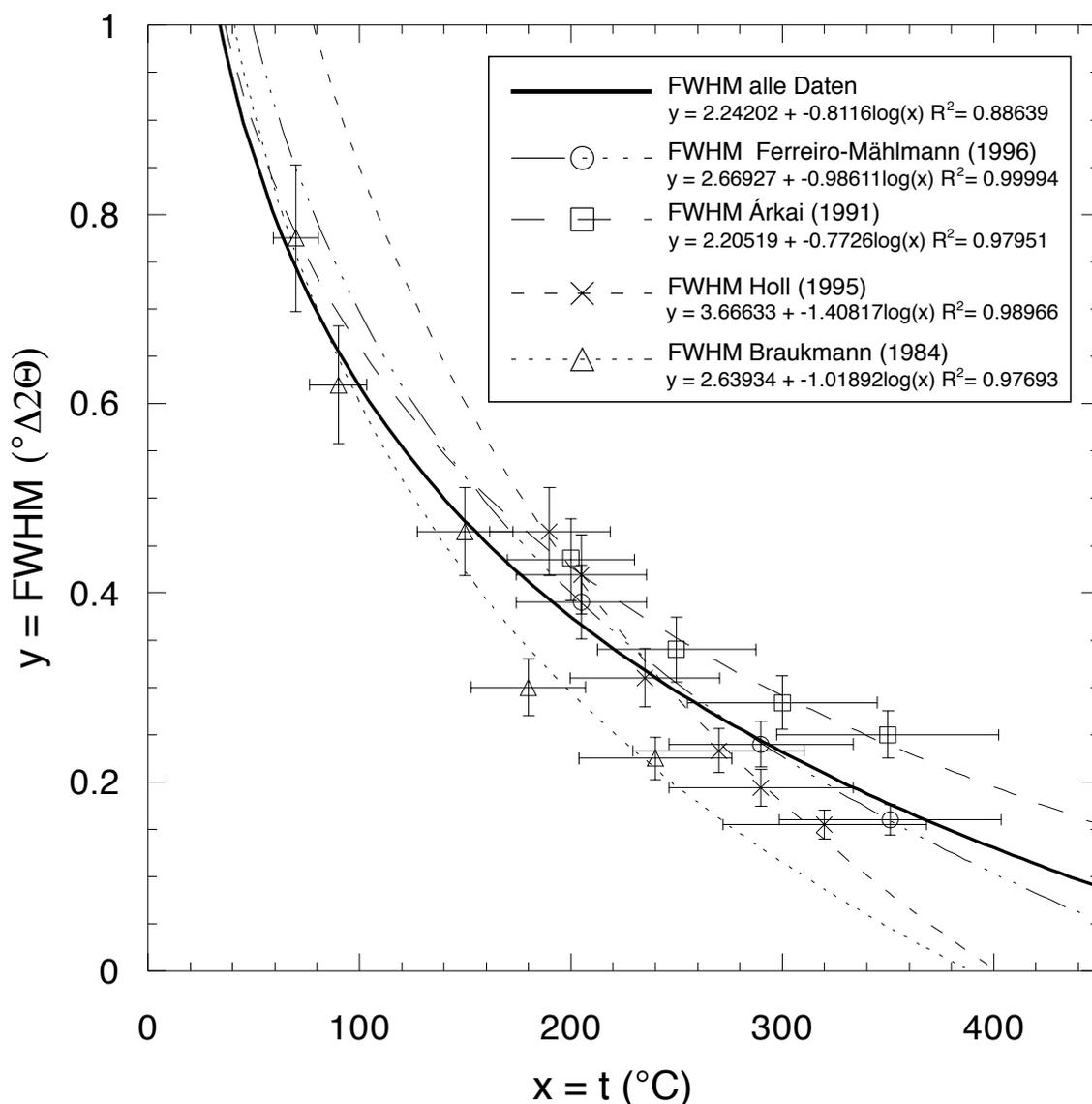


Abb. 39: In diesem Diagramm ist aus verschiedenen Arbeiten die Halbhöhenbreite (FWHM) gegen die Temperatur ($^{\circ}\text{C}$) aufgetragen (nähere Erläuterungen, siehe Text).

ÁRKAI (1991) untersuchte paläozoische und mesozoische Pelite im Nordosten Ungarns. Er korrelierte verschiedene Parameter, wie Illit- und Chloritkristallinität, Illit-Smektit-Umwandlungen, Vitritreflexionsdaten, Conodonten Farbindex und die Mineralfazies von Metabasiten. Die Temperaturgrenzen der Anchizone (200 °C bzw. 300 °C) wurden von FREY (1986) übernommen, der sie mit Fluideinschluß-Untersuchungen bestimmt hat. Die 250 °C und 350 °C Temperaturmarken wurden von ÁRKAI & FÓRTIZS (in ÁRKAI, 1991) mit Hilfe des Calcit-Dolomit-Geothermometers bestimmt.

BRAUKMANN (1984) arbeitete im Muschelkalk des Brahmische- und Vlotho-Massivs (Rheinisches Schiefergebirge), der kontaktmetamorph überprägt wurde. Er korrelierte die Illitkristallinität mit der Vitritreflexion. Die Temperaturen wurden mit Hilfe des „empirischen Inkohlungs-Geothermometers“ von WASSOJEWITSCH et al. (1969), des $\delta^{18}\text{O}$ -Quarz-Illit-Geothermometers, der Fluideinschluß-Untersuchungen und der Illit-Smektit-Umwandlungen abgeschätzt.

FERREIRO MÁHLMANN (1996) kartierte ein Metamorphosemuster in den karbonatisch-pelitischen Gesteinen des Austroalpins und in den Ophiolithen des Südpenninikums in Mittelbünden und Oberhalbstein (Schweiz). Dabei gelang es ihm, Inkohlungsparameter, Illit-Smektit-Umwandlungen, Mineralparagenesen und Illitkristallinitätswerte zu korrelieren. Die Temperaturabschätzungen erfolgten im wesentlichen über die Stabilitätsgrenzen der analysierten Minerale.

HOLL (1995) arbeitete an siliklastischen Gesteinen im Unterdevon des Rheinischen Schiefergebirges. Er korrelierte die Illitkristallinität mit der Vitritreflexion. Zur Temperaturabschätzung wurden verschiedene „empirische Inkohlungs-Geothermometer“ von WASSOJEWITSCH et al. (1969), TEICHMÜLLER & TEICHMÜLLER (1981) und BAKER & GOLDSTEIN (1990) verwendet.

Die Ergebnisse der einzelnen Autoren wurden im Diagramm (Abb. 39) eingetragen und die Regressionskurven für die jeweilige Studie berechnet. Aus allen Daten, die in das Diagramm einfließen, wurde eine weitere Regressionskurve ermittelt, die zur Umrechnung der Illitkristallinitäten dieser Arbeit in absolute Temperaturen (°C) diene. Zum Teil mußten die Illitkristallinitätswerte, die als relative Halbhöhenbreiten (Hb_{rel}) angegeben wurden (Weber-Index), in Halbhöhenbreiten (FWHM = Kübler-Index) umgerechnet werden. Die Hb_{rel} wurde nach der Formel von WEBER (1972) in FWHM umgerechnet:

$$FWHM_{[(001)\text{-Illit}]} = Hb_{rel} * FWHM_{[(100)\text{-Quarz}]}$$

Aus der Korrelation der Illitkristallinität mit der Temperatur (Abb. 39) ergibt sich eine nicht-lineare, logarithmische Funktion:

$$\text{FWHM} = -0,8116 \log (t) + 2.24202$$

mit einem Korrelationskoeffizienten von $R^2 = 0,89$.

Bei hoher Temperatur reagiert die IK zunehmend unempfindlicher auf eine Temperaturerhöhung. In den niedrigen Metamorphosebereichen ist der geologische Fehler, z.B. durch den Einfluß des Detritus und die Illite mit wechselnden Anteilen an quellfähigen Lagen noch relativ groß. Mit zunehmender Metamorphose nimmt der Schwankungsbereich der Illitkristallinität stetig ab, aber er wird gegen den Einfluß der Temperatur unempfindlicher. Bei etwa 300 bis 350 °C ist der Illit vollständig in $2M_1$ -Muskovit umgewandelt, die Halbhöhenbreite erreicht an der Grenze der Methode ihr Minimum.

Die Fehlerbetrachtung für diese Temperaturabschätzung ist sehr schwierig. In den zitierten Arbeiten wurde keine Fehlerabschätzungen beschrieben. Deshalb wurde für die Illitkristallinität auf die Fehlerbetrachtung in dieser Arbeit (Kapitel 2.1.11) zurückgegriffen. KRUMM (1992) gibt relative Fehler von ± 15 bis 20 % an, wobei der Fehler mit schlechter werdener IK zunimmt. In der vorliegenden Arbeit beträgt der Fehler innerhalb des Aufschlußbereiches ± 10 % im epizonalen Metamorphosebereich (Tab. 3). In Abbildung 39 wurde durchgehend für die Illitkristallinität ein Fehler von ± 15 % eingesetzt.

In den zitierten Arbeiten wurden für bestimmte Werte der Metamorphoseparameter Temperaturbereiche bzw. für bestimmte Temperaturen Streubereiche für die Parameter angegeben. Daraus wurde das arithmetische Mittel und die Fehlerabweichung berechnet. In Abb. 39 wurde für die Temperatur durchgehend ein relativer Fehler von ± 15 % eingesetzt.

4.2 Modellierung der thermischen Aufheizung von Kontaktgestein durch einen abkühlenden Intrusionskörper

(Modellrechnung von G. Kosakowski)

Modelliert wurde der thermische Einfluß des abkühlenden „FQZ-Intrusionskörpers“ auf das Nebengestein. Das Ergebnis der Modellierung diente zum Vergleich mit den abgeschätzten Paläotemperaturen (Kapitel 4.1). Ziel der Modellierung war es, die geologische Interpretation im ersten Teil dieser Arbeit (Kapitel 3.4) mit Hilfe der in die Modellierung einfließenden physikalischen Gesetzmäßigkeiten zu überprüfen und zu verbessern.

Zur Modellrechnung wurde das mit Finiten-Elementen arbeitende Programm SHEMAT verwendet, das in CLAUSER (1988) und CLAUSER & VILLINGER (1990) detailliert beschrieben ist. Da in der FQZ keine Anzeichen für einen bedeutenden Wärmetransport über Kluftsysteme zu finden sind, wurde für die Modellierung ein quasi-poröser Rechenansatz verwendet. Das Programm erlaubt die Berechnung des instationären, gekoppelten Wärme- und Fluidtransports in porösen Medien mit anisotropen und temperaturabhängigen Parametern.

4.2.1 Modellgeometrie und Modellparameter

Der Intrusionskörper in der FQZ hat nach SEHM et al. (1989) einen nahezu symmetrischen Aufbau (Abb. 40). Die Längsachse des Körpers verläuft NW-SE, parallel zur FQZ. Die Orientierung des 2D-Modell-Profileschnittes (AB) ist NE-SW, 90° zur FQZ. Das Profil beginnt in der FQZ und verläuft zur Fränkischen Linie. Es wurde speziell dieses Profil modelliert, da hier das größte Gefälle in den Paläotemperaturen bestimmt werden konnte. Die Länge des Profils beträgt 30 km, die Mächtigkeit variiert, je nach modellierter Intrusionstiefe zwischen 12 km und 15 km (Abb. 41). Das Modell in Abbildung 41 wurde in drei Zonen mit unterschiedlichen Materialeigenschaften eingeteilt: in den Intrusionskörper, in ein Basement und in ein etwa 10 km mächtiges, zu modellierendes Schichtpaket, das aus Metasedimenten besteht.

Für die unterschiedlichen Schichten wurden verschiedene hydraulische und thermische Parameter bestimmt bzw. festgelegt (Tab. 5 + Abb. 41). Die Wärmeleitfähigkeit wurde an charakteristischen Gesteinen der drei Modellschichten gemessen. Für das Basement (devonischer Metabasit) und für den Intrusionskörper (Granit) beträgt die Wärmeleitfähigkeit $\lambda = 2,5 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Für das zu modellierende Metasediment-Schichtpaket wurden die Wärmeleitfähigkeits-Messungen der stark anisotropen unterkarbonischen Schiefer verwendet. Sie ergaben eine Wärmeleitfähigkeit parallel zur Schieferung von $\lambda_{\parallel} = 3,7 - 4,7 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ und

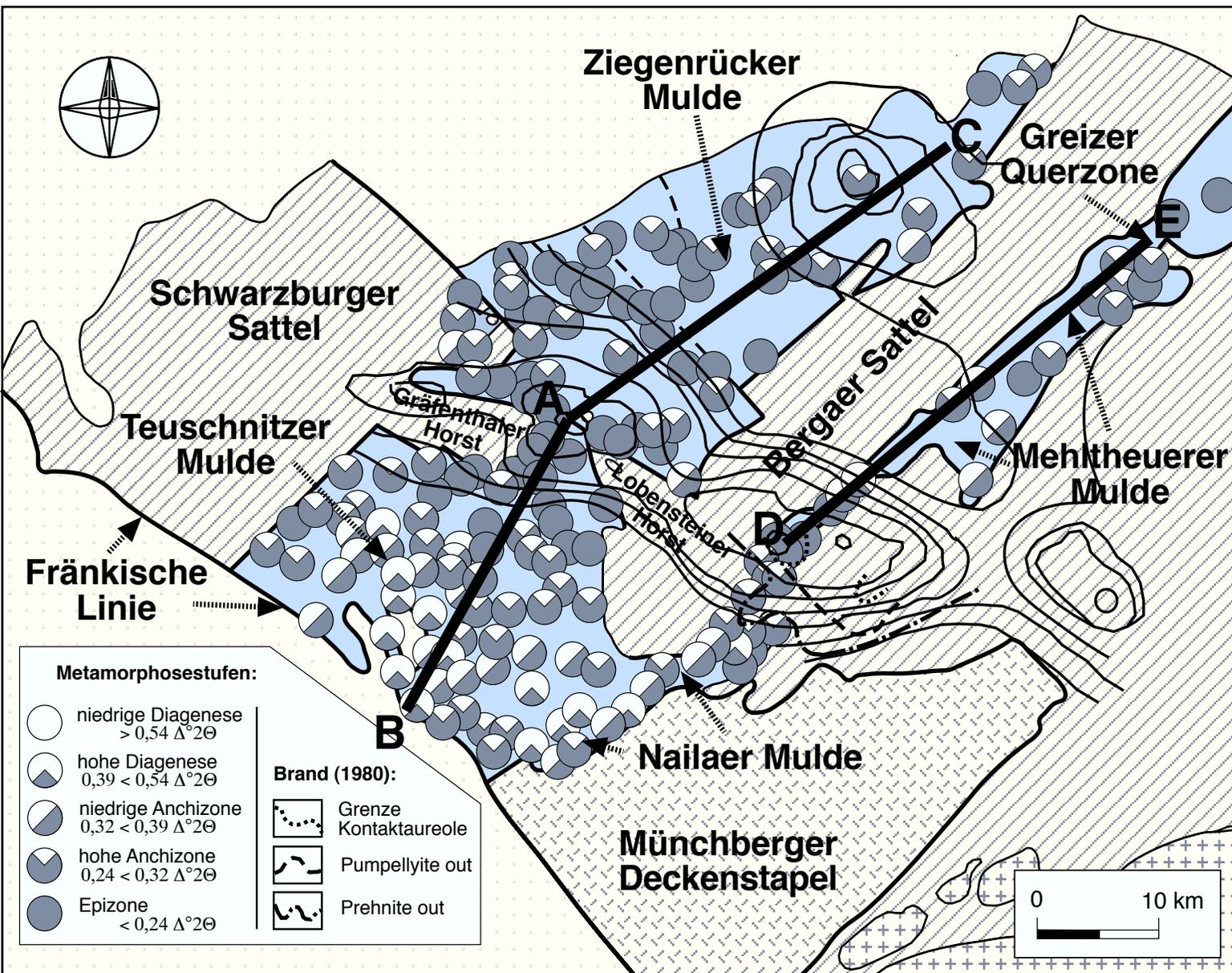


Abb. 40: Geologische Karte mit den Profillinien AB, AC und DE, die für den Vergleich der Illitkristallinitätswerte („Frey“-Standard) mit den Modelltemperaturen verwendet werden. Die dünnen Linien bilden die Granitoberfläche im Untergrund der FQZ in 1000 m Schritten bis maximal 5000 m Tiefe ab.

senkrecht zur Schieferung von $\lambda_{\perp} = 1.1 - 1,6 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Die hydraulische Permeabilität wurde für die Modellbasis und den Intrusionskörper auf $10 \times 10^{-20} \text{ m}^2$ festgelegt. Das entspricht einem rein konduktiven Wärmefluß in diesen Bereichen. Für die zu modellierende Schicht wurde die hydraulische Permeabilität systematisch zwischen $5 \times 10^{-15} \text{ m}^2$ (dominierender advektiver Wärmetransport) und $1 \times 10^{-18} \text{ m}^2$ (dominierender konduktiver Wärmetransport) variiert. Für die Porosität wurde in allen Schichten der gleiche Durchschnittswert von 1 % angenommen. Die radiogene Wärmeproduktionsrate wurde für den Intrusionskörper auf $2 \mu\text{Wm}^{-3}$ festgelegt. Die Wärmeflußdichte an der Basis entspricht konstant $60 \text{ mW} / \text{m}^2$. Die Oberflächentemperatur lag bei konstant $13 \text{ }^{\circ}\text{C}$. Das hydraulische Potential wurde für den Intrusionskörper und die Basisschicht als nahezu undurchlässig angenommen. Oberhalb des Granitkörpers mußte modellbedingt ein hydraulisches Potential von 0,8 km festgelegt werden. Die Initialtemperatur des Plutons wurde anhand von Zirkon-Sättigungs-Temperaturen (WATSON & HARRISON, 1983) verschiedener Granitproben aus dem Dach des Plutons, entlang der FQZ, von RÖLL (1998) auf $700 - 800 \text{ }^{\circ}\text{C}$ abgeschätzt. Zirkon-typologische Untersuchungen nach PUPIN (1980) ergaben ähnliche Temperaturen (RÖLL, 1998). Diese Temperaturen sprechen für eine relativ schnelle Platznahme des Plutons. Der Abkühlungszeitraum des Magmas beträgt im Modell 10 Ma. Während dieser Zeit ändert sich die geometrische Situation im Modell (z.B. durch tektonische Bewegung) nicht.

Tab. 5: Hydraulische und thermische Parameter für die in der Modellierung verwendeten Gesteinspakete (siehe Abb. 41).

| Parameter | Granit | Basement | Metasediment |
|--|------------|------------|------------------------------------|
| Wärmeleitfähigkeit ($\text{Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$) | 2,5 | 2,5 | 4,5 (horizontal) 1,5 (vertikal) |
| Porosität (%) | 1,0 | 1,0 | 1,0 |
| Permeabilität (m^2) | 10^{-20} | 10^{-20} | 10^{-18} |
| konduktives Modell | | | |
| advektives Modell | 10^{-20} | 10^{-20} | 5×10^{-15} |
| Wärmeproduktion | 2,0 | | |
| Wärmeflußdichte (mW/m^2) | 60 | | |
| Oberflächentemperatur ($^{\circ}\text{C}$) | 13 | | |

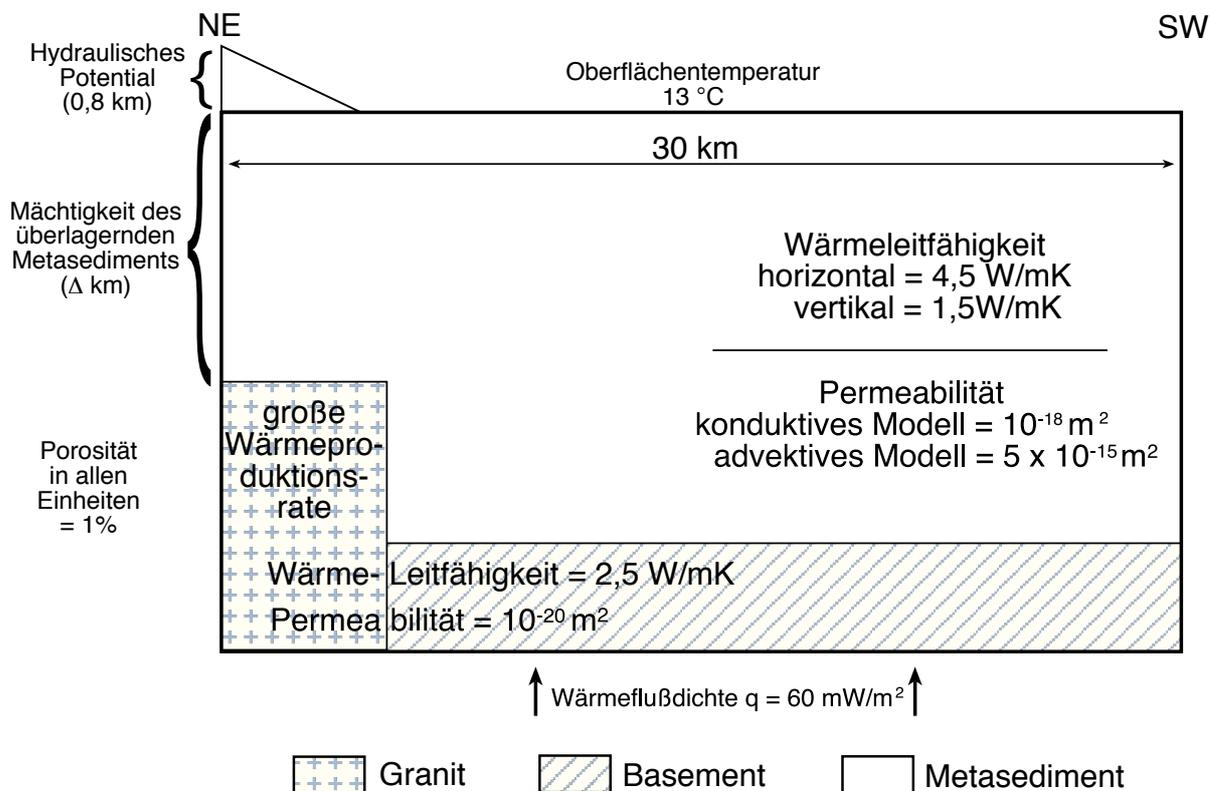


Abb. 41: Modellparameter der 2D-Modellierung

Die beschriebenen Parameter bilden die Rahmenbedingungen für die Modellierungen, andere wurden variiert. Es wurden Modelle mit unterschiedlich geformten Intrusionskörpern als Wärmequelle gerechnet. Ein blockförmiger Körper (Abb. 42) wurde als Äquivalent für eine gangförmige Intrusion verwendet, wie sie von MEINEL (1993) postuliert wurde, und eine keilförmige Wärmequelle wurde als Äquivalent für die von SCHIED (1986) und SEHM et al. (1989) modellierte Granitoberfläche eingesetzt (Abb. 43). Die Intrusionstiefen bzw. die Mächtigkeit des den Granit überlagernden Gesteinspaketes wurden ebenfalls variiert. Die Intrusion erreichte die Basis des Unterkarbons (z.B. Henneberg Granit und Silberberg Granit). Die Mindestmächtigkeit des Unterkarbons beträgt nach PFEIFFER et al. (1995) $3,6\text{ km}$. Petrologische Untersuchungen am direkten Kontaktgestein des Silberberg Granites ergaben Drucke von maximal 2 kbar . Das entspricht einer maximalen Überlagerung von etwa 7 km . Diese beiden Werte geben die Unter- und Obergrenze der Mächtigkeit des überlagernden Gesteins an. Sie flossen ebenfalls in die Modellierung ein (Abb. 42 + 43).

Die Proben zur Bestimmung der Paläotemperaturen wurden von der heutigen Geländeoberfläche, dem rezenten Erosionsniveau genommen. Die Oberkante des Modells entspricht

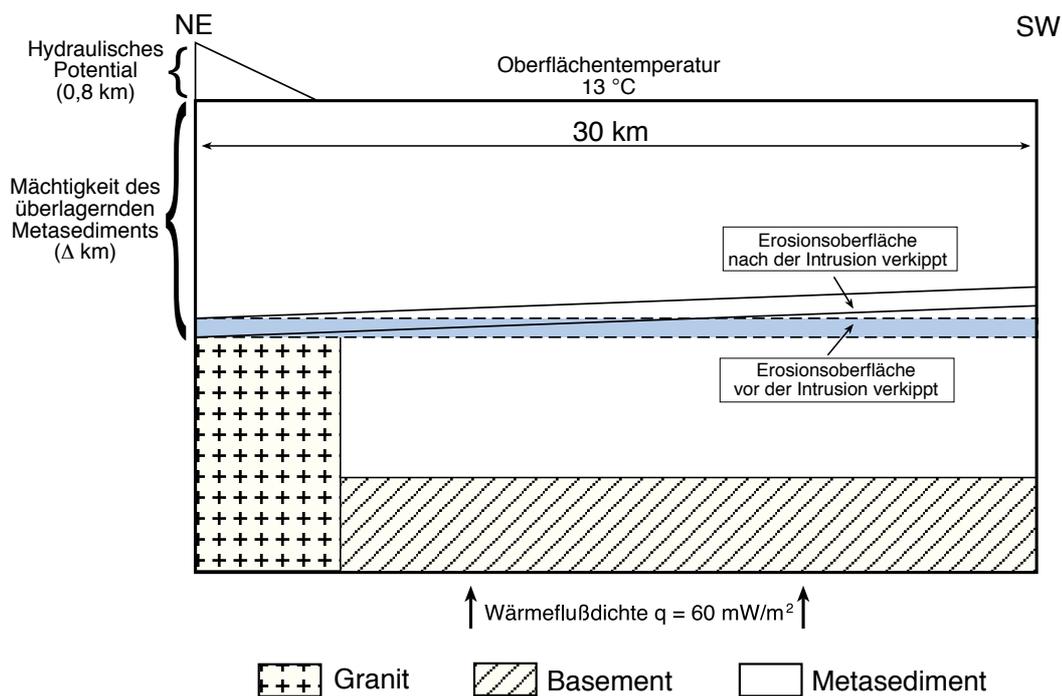


Abb. 42: Schematisches Profil der geometrischen Parameter, die in die numerische Modellierung einfließen; hier für einen block- oder gangförmigen Intrusionskörper (Erläuterungen im Text).

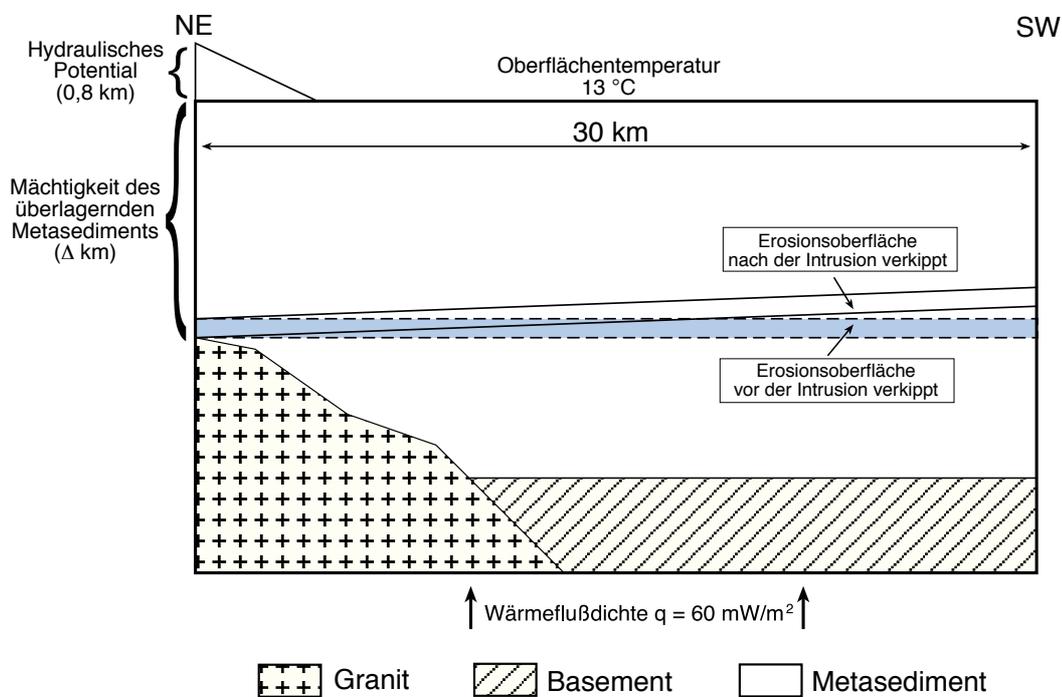


Abb. 43: Schematisches Profil mit den geometrischen Parametern, die in die numerische Modellierung einfließen; hier für einen keilförmigen oder diapirartigen Intrusionskörper (Erläuterungen im Text).

aber der Geländeoberfläche zur Zeit der Intrusion. Die Modelle wurden für den Zeitpunkt 10 Ma nach der Intrusion berechnet, der der geschätzten Abkühlungsdauer des Plutons entspricht. Zu diesem Zeitpunkt lag die heutige Geländeoberfläche wahrscheinlich noch mehrere tausend Meter über der heutigen. Für den Vergleich der Meßwerte mit dem Modell mußte deshalb die Tiefen- und Raumlage der heutigen Geländeoberkante zum Zeitpunkt der Kontaktmetamorphose rekonstruiert werden und als Profillinie in das Modell übertragen werden. Zur Bestimmung der rezenten Geländeoberfläche im Modellprofil mußte ebenfalls berücksichtigt werden, daß die Strukturen heute in südwestliche Richtung abtauchen.

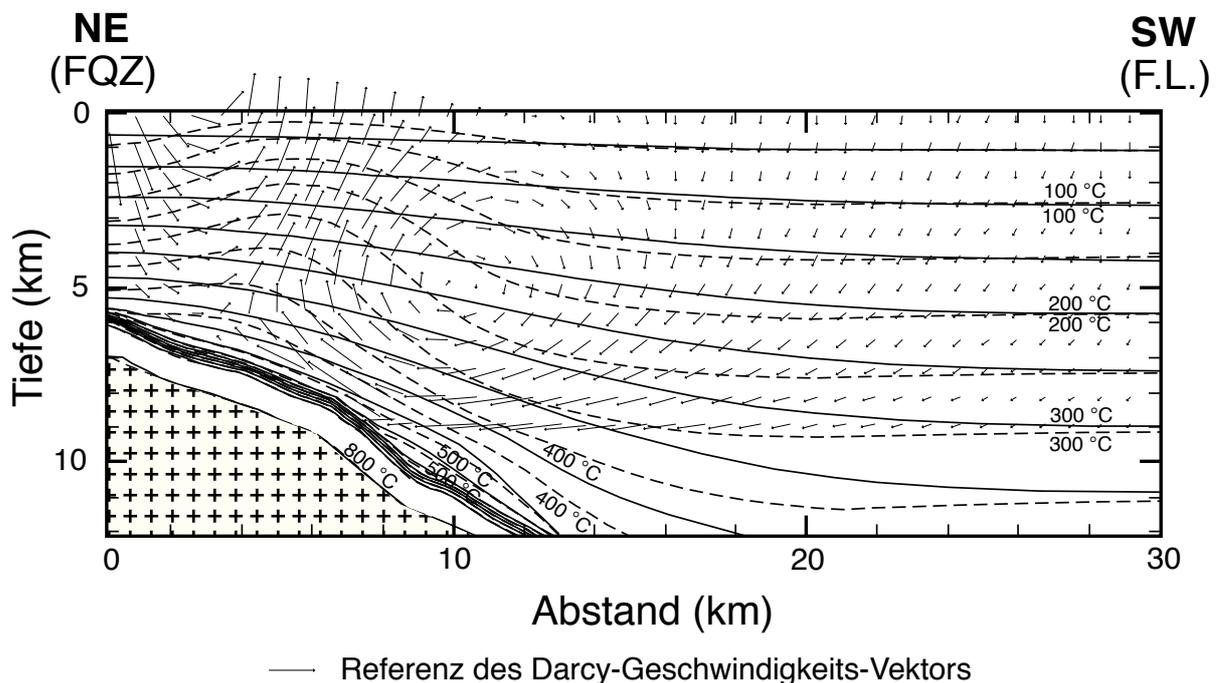


Abb. 44: Modellierte Isolinien der maximal erreichbaren Temperaturen im Nebengestein des abkühlenden, keilförmigen Plutons. Abkühlungsdauer: 10 Ma, Intrusionstiefe 6 km, durchgezogene Linien = konduktiver Wärmetransport, gestrichelte Linien = advektiver Wärmetransport. Erläuterungen, siehe Text.

Die Lage der rezenten Profillinie AB im Modell wurde anhand der beiden Endpunkte des Profils fixiert (Abb. 8 + 40). Das Profil beginnt am Punkt A in in der FQZ und schneidet die Basis des Unterkarbons mit der Granitoberfläche (Henneberg Granit). Das Profilende (Punkt B) liegt südwestlich der FQZ an der Fränkischen Linie. Hier hat das Unterkarbon rezente Mächtigkeit von maximal 3,6 km (LAMBELET et al. 1967). Die Verkipfung der Teuschnitzer Mulde beträgt entlang der Profilstrecke von 30 km etwa 7°. Es stellte sich die Frage, ob die Scholle schon zum Zeitpunkt der Intrusion verkippt war oder ob sie erst nach der Intrusion verkippt wurde. Für diese beiden Fälle wurde die Lage der Geländeoberfläche im Modell variiert (Abb. 42 und 43). Um für den Vergleich der Meßdaten mit den Modelltemperaturen die Datendichte zu erhöhen, wurden alle Illitkristallinitätswerte im 90°-Winkel

zur Profilstrecke AB in das Profil projiziert. Deshalb floß auch die Variation des Tops des Granitmodellkörpers entlang der FQZ um 1000 m in die Modellberechnungen mit ein. Je nach Modell wurden zwischen 36.000 und 45.000 Knotenpunkte im Abstand von 100 m berechnet.

In Abbildung 44 ist der thermische Einfluß von unterschiedlichen Wärmetransportmechanismen auf das Nebengestein am Beispiel einer keilförmigen bzw. diapirartigen Intrusion in 6 km Tiefe nach einer Abkühlungsdauer von 10 Ma dargestellt. Es sind die Isolinien für die modellierte maximale Aufheizung des Nebengesteins für einen konduktiv dominierten Wärmetransport (durchgezogene Isolinien) und für einen überwiegend advektiv dominierten Wärmetransport (gestrichelte Isolinien) abgebildet. Im konduktiven Fall verläuft das Maximum-Temperaturfeld bei niedrigen Sedimentpermeabilitäten subparallel zur Granitoberfläche und wird nicht verzerrt. Das advektive Modell bildet eine Beule im Maximum-Temperaturfeld über der Granitflanke aus. Diese Wärmebeule entsteht durch zwei Mechanismen. Nach der Platznahme des Plutons wird das Fluid über dem Pluton erhitzt, die Fluidichte nimmt ab, das Fluid kann aufsteigen und bildet eine Konvektionszelle. Zusätzlich strömt aufgrund der erhöhten Topographie über dem Pluton kaltes Oberflächenwasser in das Metasediment, wird aufgeheizt und steigt wieder nach oben. Diese beiden unterschiedlichen Fließsysteme werden von einer gut definierten Grenzfläche an der Flanke des Plutons begrenzt, an der die warmen Fluide aufsteigen, die die Wärmebeule bilden. Die Fließrichtung der Fluide ist in der Abbildung 44 durch Darcy-Geschwindigkeits-Vektoren dargestellt.

4.3 Vergleich der Modelltemperaturen mit den Temperatur-Abschätzungen aus Teuschnitzer und Nailaer Mulde

Auf der Grundlage der beschriebenen Modellgeometrien und -parameter (Kapitel 4.2) wurden die maximalen kontaktmetamorphen Paläotemperaturen für die heutige Geländeoberfläche des Kulms berechnet, einmal für eine vor der Intrusion verkippte Oberfläche und ein zweites Mal für eine nach der Intrusion verkippte Oberfläche (Abb. 42 + 43). Aus dem Vergleich der Modelltemperaturen der beiden Schnittlagen im Profil mit den Meßwerten der Proben geht hervor, daß die Meßwerte von der heutigen Geländeoberkante die beste Annäherung an jene Modelltemperaturen zeigen, die eine Schollenverkipfung nach der Intrusion simulieren. Deshalb wurden die folgenden Modellvergleiche auf eine rezente Geländeoberfläche bezogen, die erst nach der Intrusion verkippt wurde und deren Temperaturen in südwestlicher Richtung entsprechend niedriger sind.

Das Temperaturprofil in Abbildung 45 resultierte aus der Berechnung der Maximum-Temperaturfelder für eine blockförmige Wärmequelle in Annäherung an eine gangförmige Intrusion, wie sie von MEINEL (1993) postuliert wurde. Für dieses Modell wurde, entsprechend der Abschätzungen der Überlagerungsmächtigkeiten (Kapitel 4.2), eine mittlere Intrusionstiefe von 5 km festgelegt. Auf der y-Achse des Graphen ist die im Nebengestein erreichte Maximumtemperatur aufgetragen, auf der z-Achse die Entfernung vom Intrusionskörper entlang des AB-Profiles (Abb. 40). Die grau unterlegte Zone zeigt den berechneten Temperaturbereich an, in Abhängigkeit der Lage der Plutonoberfläche in Bezug zum heutigen Erosionsniveau, wie sie von SEHM et al. (1989) dargestellt wurde. Die obere Grenze dieses Bereiches bilden die errechneten Maximumtemperaturen, in Abhängigkeit von der Entfernung zum Intrusionskörper für einen Modellanschnitt ab, der einer rezenten Geländeoberfläche entspricht, die den Granit schneidet. Die untere Grenze der grau unterlegten Zone gilt für den Fall, daß die Erosionsoberfläche 1 km über dem Granitkörper liegt. Die Zone selbst bildet den möglichen Temperaturbereich in diesen Grenzen ab. Diese auf der heutigen Morphologie basierende Variationsbreite floß auch in die anderen beiden Modellrechnungen ein (Abb. 46 + 47). Die schwarzen Punkte bilden die Temperaturen ab, die aus den Illitkristallinitätsmessungen an Proben von der heutigen Geländeoberfläche abgeschätzt wurden. Die beiden gestrichelten Linien geben einen Vertrauensbereich von 90 % der Werte an.

Neben der Illitkristallinität wurden die Ergebnisse aus zwei weiteren Metamorphose-Untersuchungen zum Vergleich mit der Modellierung herangezogen. Beide Arbeiten wurden im Süden der FQZ, im Raum Hirschberg durchgeführt. BRAND (1980) untersuchte Mineralphasen-Gleichgewichte in den devonischen Metabasiten im Kontaktbereich des Granits.

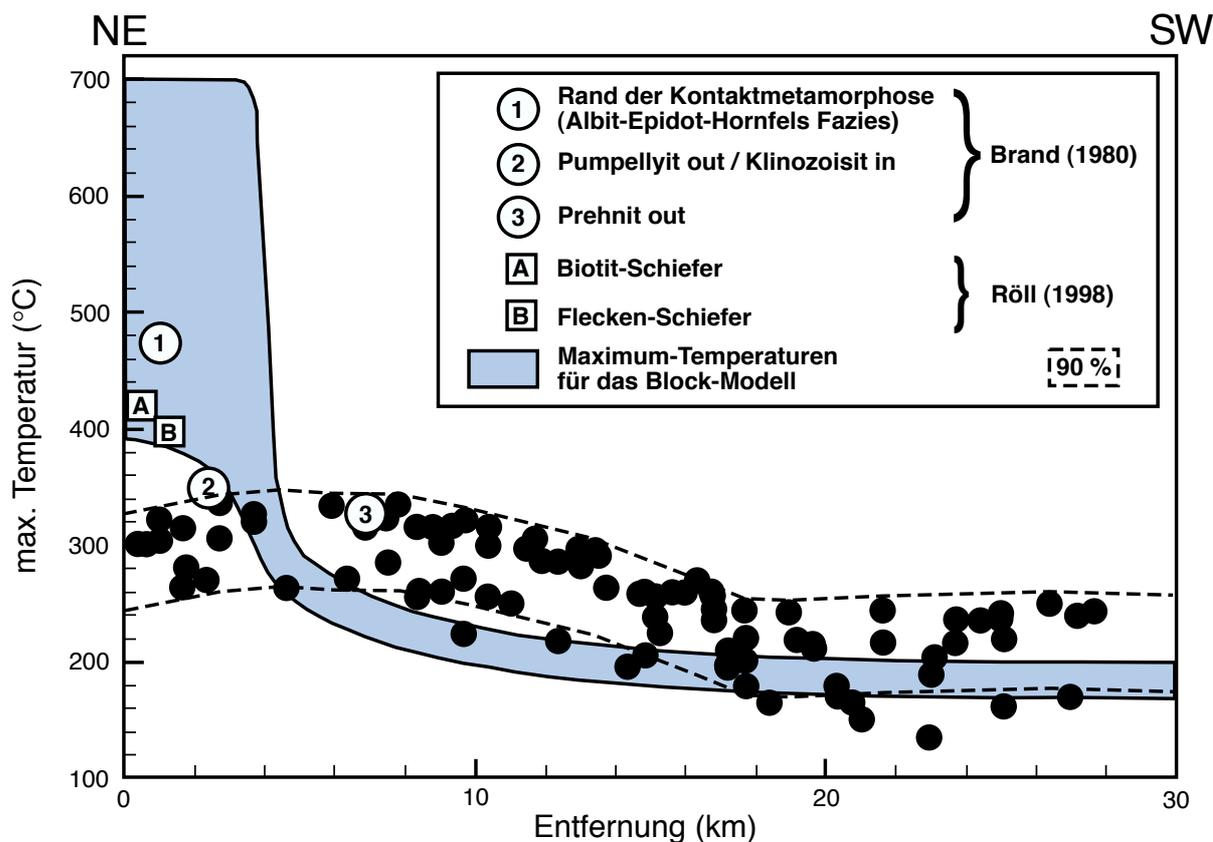


Abb. 45: Temperaturprofil, modelliert für die rezente Geländeoberfläche, für den Fall, daß sie nach der Intrusion verkippt wurde, mit einem gangförmigen Intrusionskörper, dessen Dach in einer Tiefe von 5 km liegt. Der grau unterlegte Bereich entspricht der Variationsbreite der Temperatur zwischen einer Oberfläche, die den Pluton schneidet (untere Grenze) und einem Profilschnitt, der 1 km über dem Pluton liegt (obere Grenze). Die Punkte stehen für die gemessenen Temperaturen, die schwarzen Punkte bilden die aus der Illitkristallinität abgeschätzten Paläotemperaturen ab. Die gestrichelten Linien zeigen den Vertrauensbereich der Meßwerte von 90 % an.

RÖLL (1998) studierte das Mineralphasen-Gleichgewicht an Bohrkernen aus dem Bereich des Sparnberger Granits (Bohrung Sp 1/57 und Sp 15/60) und in den kontaktmetamorphen unterkarbonischen Tonschiefern an der Oberfläche. Die Ergebnisse lieferten zusätzliche Temperaturen aus dem Bereich der Kontaktzone, in dem die Illitkristallinität an ihre methodischen Grenzen stößt, die bei 300 °C bis 350 °C mit der ausschließlichen Bildung von Muskovit erreicht sind. Die Illitkristallinitäts-Meßwerte wurden aus der gesamten Breite des Kulmbeckens südwestlich der FQZ zum Vergleich mit der Modellierung herangezogen, um die Datendichte zu erhöhen. Daraus entstand aber kein Nachteil für die Genauigkeit der Methode, denn auch wenn schmalere NW/SE-Segmente ausgewählt werden, bleibt die Streuung der Daten ähnlich groß. Die in Temperaturen umgewandelten Illitkristallinitäten bilden bis zu einer Entfernung von 8 km ein Plateau bei im Mittel 300 °C ab, das der Obergrenze der Methode entspricht. Von 8 km bis zu einer Entfernung von 20 km nimmt die mittlere Temperatur auf etwas über 200 °C ab, und verharrt mit zunehmender Entfernung auf diesem Niveau. Die Modelltemperaturen bilden bis zu einer Entfernung von etwa 4 km vom

Zentrum des Plutons ein Temperaturplateau ab, das oberhalb der Nachweisgrenze der Illitkristallinität liegt. Dann fallen sie sehr steil in das Illitkristallinitäts-Temperaturfeld ab um sich mit einem sanften Kurvenverlauf bei 10 km Entfernung bei 200 °C einzupendeln. Zwischen 5 km und 16 km zeigt die Illitkristallinität deutlich höhere Temperaturen an, als die Modellrechnung erlaubt.

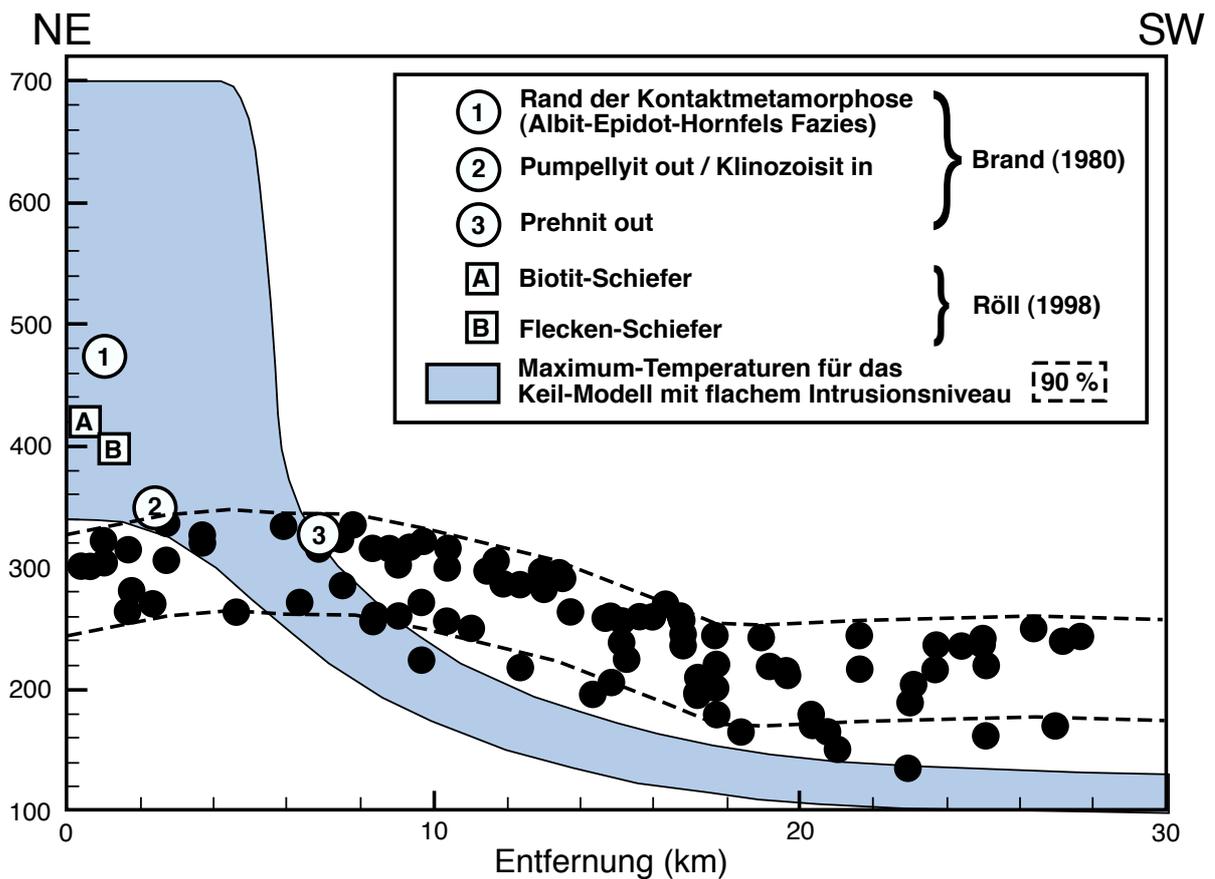


Abb. 46: Temperaturprofil, modelliert für die rezente Geländeoberfläche, für den Fall, daß sie nach der Intrusion verkippt wurde, mit einem diapirförmigen Intrusionskörper, dessen Dach in einer Tiefe von 3,5 km liegt. Der grau unterlegte Bereich entspricht der Variationsbreite der Temperatur zwischen einer Oberfläche, die den Pluton schneidet (untere Grenze) und einem Profilschnitt, der 1 km über dem Pluton liegt (obere Grenze). Die Punkte stehen für die gemessenen Temperaturen, die schwarzen Punkte bilden die aus der Illitkristallinität abgeschätzten Paläotemperaturen ab. Die gestrichelten Linien zeigen den Vertrauensbereich der Meßwerte von 90 % an.

Für die Abbildungen 46 und 47 wurde in der Modellierung die Form der Wärmequelle geändert. Die Blockform wurde durch eine Keilform ersetzt, die der Modellgeometrie des Diapirs von SEHM et al. (1989) entspricht. Die beiden Rechenmodelle der beiden Abbildungen unterscheiden sich in ihrem Intrusionsniveau. In Abbildung 46 ist das Temperaturfeld für ein flaches Intrusionsniveau dargestellt mit einer maximalen Metasediment-Überlagerung von 3,5 km, wie sie von PFEIFFER et al. (1995) für das Unterkarbon angegeben wurde. Der gerechnete Maximum-Temperaturbereich (grau unterlegte

Zone) für das Keil-Modell mit flachem Intrusionsniveau unterscheidet sich von dem des Block-Modells (Abb. 45) durch eine zu Beginn weiter reichende Hochtemperaturphase, die bei etwa 6 km Entfernung von der Wärmequelle erst steil, dann moderat bis auf 100 °C bei 22 km abnimmt. Das modellierte Temperaturfeld liegt im Profil im temperatur-sensitiven Bereich der Illitkristallinität deutlich unter den abgeschätzten Temperaturen.

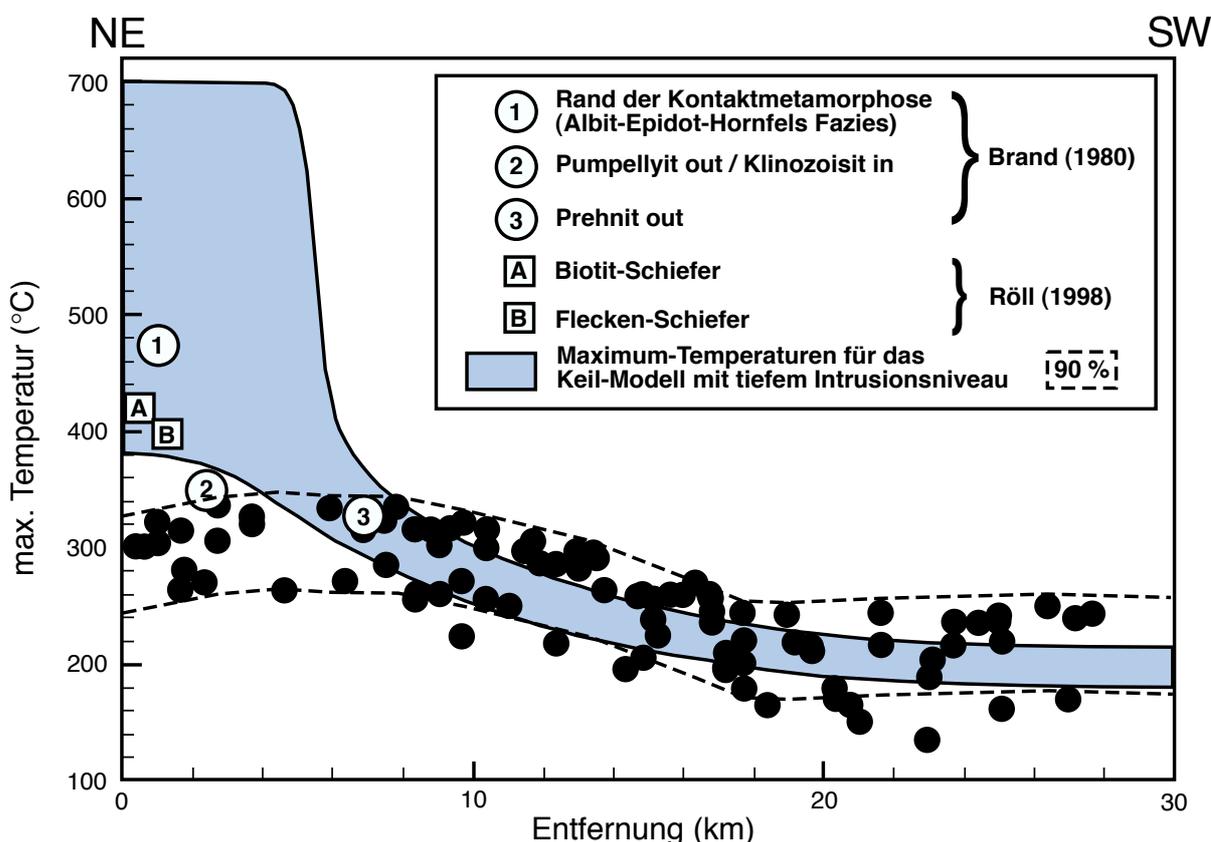


Abb. 47: Temperaturprofil, modelliert für die rezente Geländeoberfläche, für den Fall, daß sie nach der Intrusion verkippt wurde, mit einem diapirförmigen Intrusionskörper, dessen Dach in einer Tiefe von 3,5 km liegt. Der grau unterlegte Bereich entspricht der Variationsbreite der Temperatur zwischen einer Oberfläche, die den Pluton schneidet (untere Grenze) und einem Profilschnitt, der 1 km über dem Pluton liegt (obere Grenze). Die Punkte stehen für die gemessenen Temperaturen, die schwarzen Punkte bilden die aus der Illitkristallinität abgeschätzten Paläotemperaturen ab. Die gestrichelten Linien zeigen den Vertrauensbereich der Meßwerte von 90 % an.

Das Keil-Modell für das tiefe Intrusionsniveau von 6,5 km (Abb. 47), das aus den Druckabschätzungen von BRAND (1980) und RÖLL (1998) resultiert, zeigt die beste Annäherung an die Paläotemperatur-Abschätzungen aus den Illitkristallinitäten. Die modellierten Temperaturen liegen im temperatur-empfindlichen Bereich der Illitkristallinität des Profils vollständig im Streuungsbereich der Illitkristallinität.

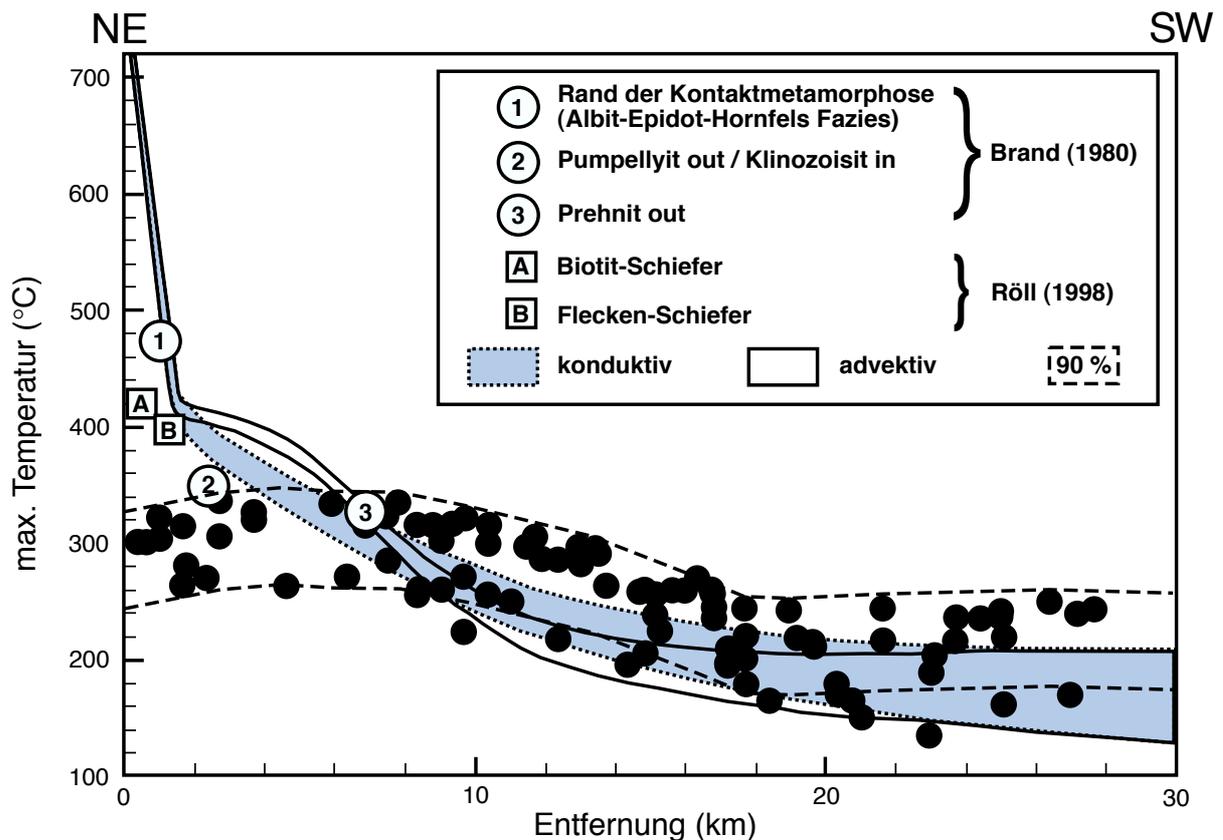


Abb. 48: Vergleich zwischen konduktivem (grau unterlegter Bereich) und advektivem (Bereich zwischen den durchgezogenen Linien) Wärmetransport. Intrusionstiefe 6 km; die obere Grenze der beiden Zonen steht für einen nach der Intrusion verkippten Erosionsanschnitt, die obere Grenze für eine nach der Intrusion verkippte Geländeoberfläche. Der Vertrauensbereich der aus der Illitkristallinität abgeschätzten Temperaturwerte beträgt 90 %.

Zur Bestimmung des dominierenden Wärmetransport-Mechanismus – konduktiv oder advektiv – wurde ein weiteres numerisches Modell gerechnet. Die Ergebnisse sind in Abbildung 48 dargestellt. Die Kurven wurden für einen keilförmigen Intrusionskörper berechnet, dessen Dach sich in 6 km Tiefe befindet. Die modellierte heutige Oberfläche schneidet den Intrusionskörper am Top. In das Diagramm sind die Ergebnisse aus vier verschiedenen Berechnungen eingeflossen:

- 1) Das grau unterlegte Feld bildet den Temperaturbereich für den konduktiv dominierten Wärmetransport ab.
- 2) Der Raum zwischen den beiden durchgezogenen Linien steht für den Temperaturbereich, der durch einen advektiven Wärmetransport dominiert wurde.
- 3) Die obere Grenze der beiden Temperatur-Kurvenfelder entspricht dem Modellschnitt eines Erosionsniveaus, das nach der Intrusion in Richtung SW verkippt wurde.

- 4) Die untere Grenze steht jeweils für eine heutige Geländeoberfläche, die schon vor der Intrusion verkippt wurde.

Die aus der Illitkristallinität abgeschätzten Temperaturen sind auf den ersten Blick im Durchschnitt höher als die der Modellkurven. Die Lage der Wärmebeule der advektiven Temperaturkurve in den ersten 8 km des Profils wird entscheidend von der Form der Wärmequelle gesteuert (siehe Kapitel 4.2, Abb. 44). Für diese ersten km existieren leider keine ausreichend abgesicherten Temperaturabschätzungen mit statistischer Relevanz, weil die aus den Illitkristallinitäten abgeleiteten Temperaturen für den kritischen Bereich der ersten 8 km methodisch bedingt keine höheren Temperaturen als 300 °C bis 350 °C anzeigen. In den folgenden Profilkilometern fallen die advektiven Temperaturkurven stärker ab als die konduktiven, so daß das konduktive Temperaturfeld die bessere Annäherung an die Temperaturabschätzungen zeigt. Die obere Grenze des konduktiven Temperaturfeldes zeigt für dieses Modell die deutlich beste Annäherung an die Temperaturabschätzungen an. D. h., das Temperatur-Modell eines keilförmigen Plutons, dessen Dach eine Tiefe von 6 km erreicht hat, und dessen überlagerndes Metasediment erst nach der Intrusion verkippt wurde, zeigt für einen konduktiv dominierten Wärmetransport die beste Übereinstimmung mit den Temperaturabschätzungen aus der Illitkristallinität.

4.4 Vergleich der Modelltemperaturen mit den Temperatur-Abschätzungen aus der Ziegenrücker und Mehltheurer Mulde

Der thermische Einfluß der FQZ-Granitintrusion auf die Gesteine der Ziegenrücker und Mehltheurer Mulde wurde nicht modelliert. Da jedoch nach SEHM et al. (1989) der Granitkörper unter der FQZ quasi-symmetrisch aufgebaut ist, lassen sich die Modellrechnungen auch für dieses SW-NE Profil verwenden, um den möglichen kontaktmetamorphen Einfluß des FQZ-Granites auf das Nebengestein abzuschätzen. In Abbildung 49 und 50 ist der Vergleich der modellierten Maximaltemperaturen im Nebengestein mit den Temperaturabschätzungen aus den Illitkristallinitäten dargestellt. Dazu wurde die Modellierung eines keilförmigen Plutons verwendet, dessen Dach eine Tiefe von 6,5 km erreicht hat und dessen umgebende Metasedimente erst nach der Intrusion verkippten wurden.

In der Ziegenrücker Mulde (AC-Profil, Abb. 40) zeigen die Paläotemperatur-Abschätzungen von der Illitkristallinität keine Übereinstimmung mit den Modelltemperaturen (Abb. 49). Die abgeschätzten Temperaturen liegen im gesamten Profil im Mittel an der methodischen Grenze der Illitkristallinität von etwa 300 °C. Im Gegensatz dazu nehmen die Modelltemperaturen nach etwa 6 km in einer steilen Kurve ab, um dann mit einem flachen Gefälle nach 20 km die 200 °C Grenze zu erreichen.

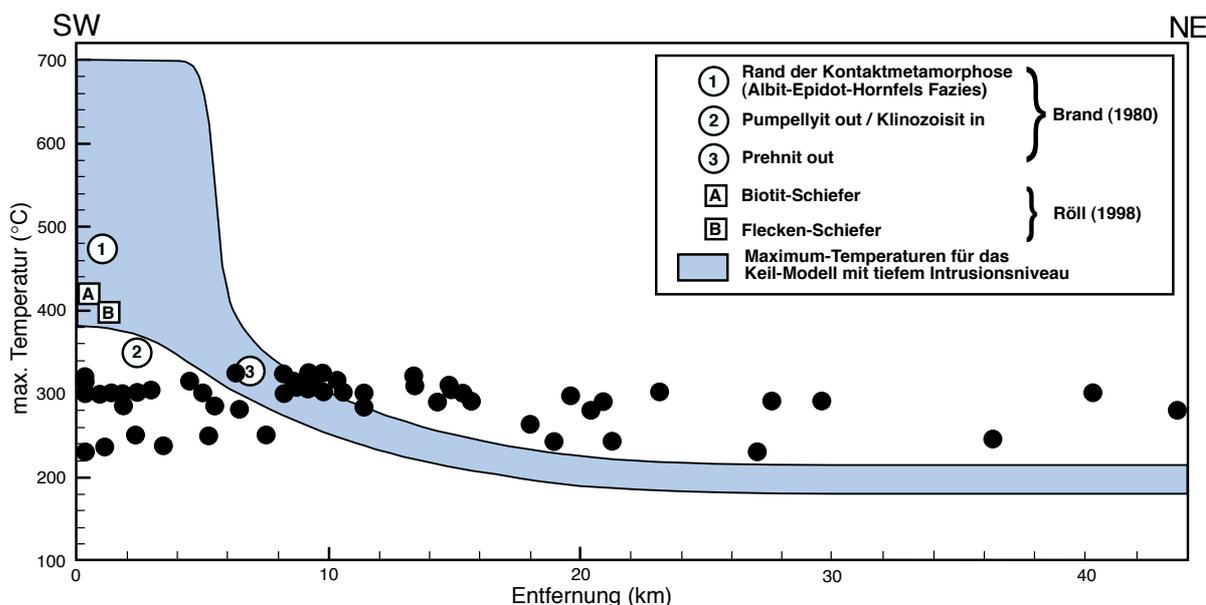


Abb. 49: SW (FQZ-Pluton) - NE (Auma-Pluton) Temperaturprofil, berechnet für die rezente Erosionsoberfläche im Unterkarbon der Ziegenrücker Mulde im Vergleich zu den abgeschätzten Temperaturen. Keilmodell, Intrusionstiefe (FQZ) 6,5 km.

Für die Mehltheurer Mulde (DE-Profil, Abb. 40) wurde dasselbe Modell wie für die Ziegenrucker Mulde zum Vergleich mit den Paläotemperatur-Abschätzungen verwendet (Abb. 50). Auch hier ist keine Übereinstimmung zwischen den Modell-Temperaturkurven und den abgeschätzten Temperaturen zu finden. Letztere sind zu Beginn des Profils (zwischen 8 km und 10 km) eher zu niedrig, und steigen dann über die Modelltemperaturen hinaus weiter an. Für dieses Profil erschwert die geringe Datendichte zusätzlich die Aussage.

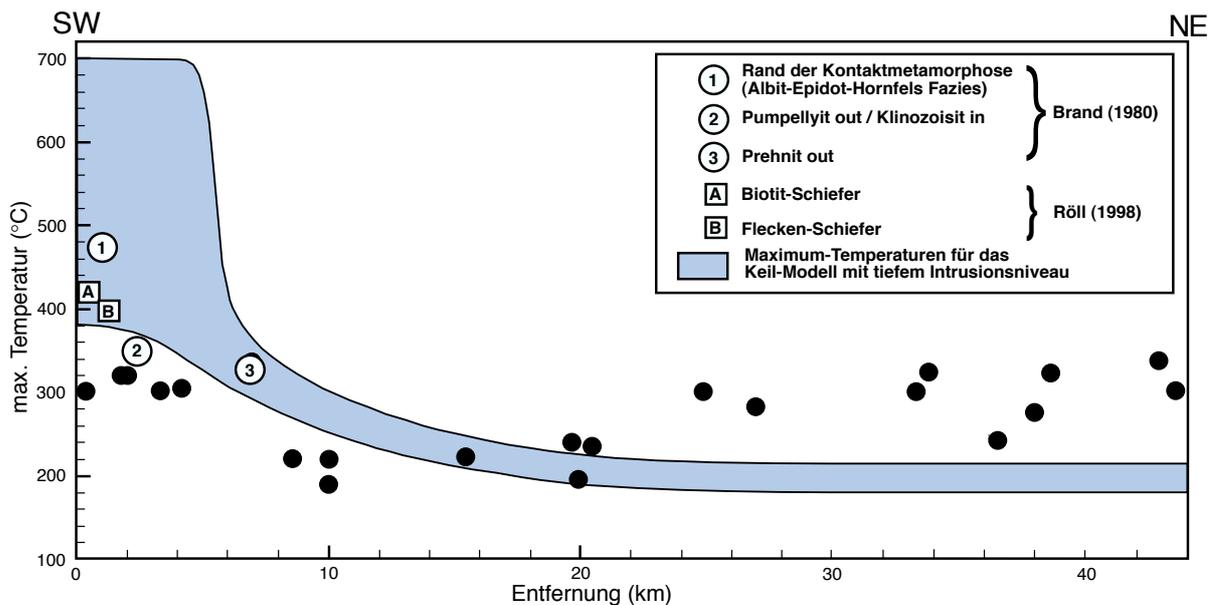


Abb. 50: SW (FQZ-Pluton) - NE (Greizer Querzone) Temperaturprofil, berechnet für die rezente Erosionsoberfläche im Unterkarbon der Mehltheurer Mulde im Vergleich zu den abgeschätzten Temperaturen. Keilmodell, Intrusionstiefe (FQZ) 6,5 km.

4.5 Vergleich der modellierten Inkohlungswerte (EASY % R_0) mit den % R_0 -Meßwerten für das NE / SW-Profil

Die Modellierung der Vitrinitreflexionen wurde mit dem EASY % R_0 -Programm von SWEENEY & BURNHAM (1990) durchgeführt. Dieses Programm berücksichtigt sowohl die Temperatur in Abhängigkeit von der Zeit, als auch den Einfluß der chemischen Parameter. Grundlage der Berechnung ist die Abspaltung der quantitativ wichtigsten, bei der Reifung von Vitrinit abgegebenen flüchtigen Bestandteile: Wasser, Kohlendioxid, Methan und höhere Kohlenwasserstoffe. Jede dieser Abspaltungen wird der Arrhenius-Gleichung folgend durch den Frequenzfaktor (10^{13} sec^{-1}) und die Aktivierungsenergie (34 bis 72 kcal/Mol) reaktionskinetisch beschrieben. Die große Spannbreite in der Aktivierungsenergie wurde gewählt, um der Heterogenität in dem sedimentären organischen Material gerecht zu werden. Aus den Aktivierungsenergien und der Temperaturgeschichte eines Sediments wird ein Faktor F errechnet, der den Grad der Abspaltung flüchtiger Bestandteile angibt und mit dessen Hilfe der Easy % R_0 -Wert ermittelt wird. Das kinetische Modell ist bis zu Vitrinitreflexionswerten von 4,69 % R_0 definiert. Höhere Werte sind nach SWEENEY & BURNHAM (1990) theoretisch berechenbar, es müssen dann jedoch zusätzliche Daten für hohe Aktivierungsenergien in das Modell eingebaut werden, für die aber brauchbare Kalibrierungen fehlen.

Als Grundlage für die EASY % R_0 -Modellierung dienten die Parameter jenes Modells aus der thermischen Modellierung des abkühlenden Granitkörpers in Kapitel 4.3, das die beste Annäherung an die Temperatur-Abschätzungen hatte, die mit Hilfe der Illitkristallinitäten durchgeführt wurden. Das „Best-Fit“-Modell wurde für einen Granit gerechnet, dessen Dach eine Tiefe von 6,5 km erreicht hat, mit einem Probenahme-Horizont (heutige Geländeoberfläche), der erst nach der Intrusion verkippt wurde. In das EASY % R_0 -Modell flossen die Maximaltemperaturen aus dem „Best-Fit“ Modell der thermischen Modellierung in Abhängigkeit von der Entfernung zum Intrusionskörper für dessen Abkühlungszeitraum von 10 Ma ein. Als maximaler Versenkungszeitraum wurden 335 Ma angenommen, wobei eine Änderung des Versenkungszeitraumes um 50 Ma die Inkohlungswerte um maximal 0,3 % R_m verschiebt. Der geothermische Gradient wurde zwischen 25 °C / km, 40 °C / km, 50 °C / km und 60 °C / km variiert, wobei für 60 °C / km die Maximaltemperaturen aus der thermischen Modellierung nicht berücksichtigt wurden, da sie zu niedrig waren. Die Oberflächentemperatur des EASY % R_0 -Modells entspricht der des thermischen Modells von 13 °C.

Die Ergebnisse der EASY % R_0 -Modellierung sind in den Abbildungen 51 und 52 dargestellt. Die unterschiedlichen Kurven zeigen die berechneten mittleren Reflexionswerte (% R_m), in Abhängigkeit von der Entfernung zum Pluton, für die verschiedenen geothermischen Gradienten. In der NE-Hälfte des Modells bilden die berechneten Werte bei 4,69 % R_m ein

Plateau ab, das der oben beschriebenen methodischen Obergrenze des kinetischen Modells entspricht. Die schwarzen Punkte entsprechen den Vitritreflexions-Meßwerten, die mit den Modellwerten verglichen wurden.

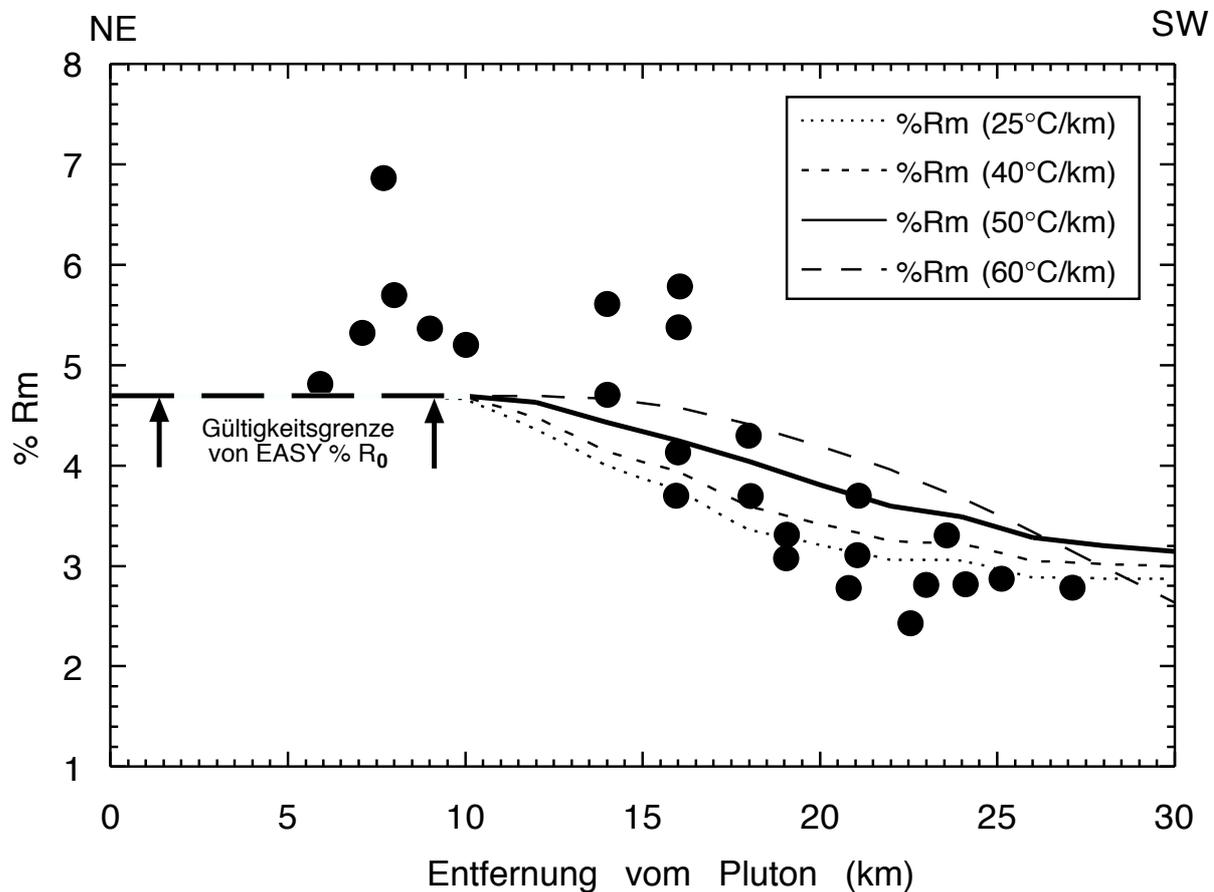


Abb. 51: Vergleich der modellierten Vitritreflexionswerte (Linien) mit den Meßwerten (schwarze Punkte), in Abhängigkeit von der Entfernung zum Intrusionskörper für die Teuschnitzer Mulde. Die verschiedenen Modellkurven bilden Berechnungen für unterschiedliche geothermische Gradienten ab.

In Abbildung 51 sind die Vitritreflexions-Meßwerte aus der Teuschnitzer Mulde gegen die modellierten Vitritreflexionswerte aufgetragen. Die Meßwerte stammen aus einem Korridor, dessen Grenze etwa 3 km südöstlich der AB-Profillinie (Abb. 40) und 12 km nordwestlich dieser Linie liegen. Trotz der großen Streuung der Meßwerte ist in der Teuschnitzer Mulde eine deutliche Zunahme der % R_m-Meßwerte von SW nach NE zu erkennen. Im Vergleich zu den Modellwerten zeigen die Meßwerte im Mittel einen etwas steileren Verlauf als die Modellkurven südwestlich des Plateaus. Die mit einem geothermischen Gradienten von 60 °C / km berechneten % R_m-Werte liegen deutlich über den Meßwerten.

Abbildung 52 zeigt die modellierten Vitritreflexionswerte im Vergleich zu den Meßwerten für den Bereich südöstlich des Teuschnitzer Korridors, der Abschiebungszone, der südwest-

lichen Verlängerung des Bergaer Sattels und der Nailaer Mulde. Die Vitritreflexions-Meßwerte zeigen keine Übereinstimmung mit den Modellkurven. Auch eine weitere Unterteilung dieses Bereiches in kleinere NE / SW streichende Zonen zeigt kein besseres Ergebnis.

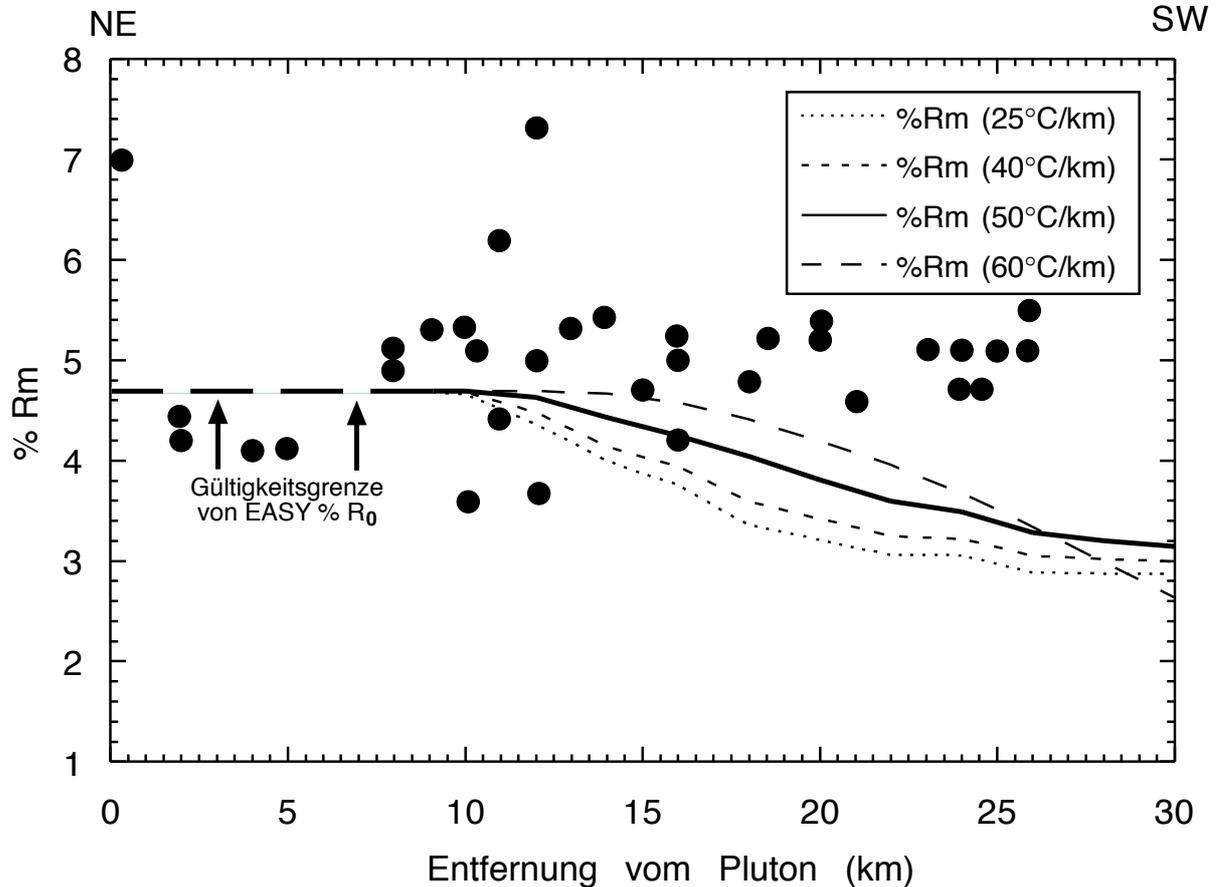


Abb. 52: Vergleich der modellierten Vitritreflexionswerte (Linien) mit den Meßwerten (schwarze Punkte), in Abhängigkeit von der Entfernung zum Intrusionskörper für den Bereich südöstlich der Teuschnitzer Mulde. Die verschiedenen Modellkurven bilden Berechnungen für unterschiedliche geothermische Gradienten ab.

4.6 Diskussion der Ergebnisse aus dem Vergleich der Modellierungen mit den Temperaturabschätzungen

Die thermische Modellierung für den W-Teil der FQZ (AB-Profil, Abb. 40) wurde von G. Kosakowski durchgeführt. Sie zeigt die beste Anpassung an die Temperaturabschätzungen aus der Illitkristallinität für das Granit-Keilmmodell mit einem tiefen Intrusionsniveau (Kapitel 4.2 und 4.3). Die Geometrie des Keilmodells ist der Oberfläche des Modellgranits von SEHM et al. (1989) im Untergrund der FQZ angenähert. Die Wärmeabstrahlung des Magmenkörpers reicht unter den Modellbedingungen aus, um mit einer einphasigen Intrusion bei einem Abkühlungszeitraum von 10 Ma die mit der Illitkristallinität abgeschätzte Metamorphoseanomalie an der W-Flanke der FQZ zu verursachen. Da die syntektonische Metamorphose in der FQZ das dominierende thermische Ereignis (FRANKE, 1984) ist und die in der FQZ aufgeschlossenen posttektonischen Granite und deren Kontaktaureolen klein sind, wird eine großvolumigie syntektonische Hauptintrusionsphase in der FQZ gefordert, der eine relativ geringe posttektonische Intrusionsphase folgt, die entlang von Störungen bis an die heutige Oberfläche aufgedrungen ist. Der Anteil von präkarbonischem Granit am Schwerekörper muß vernachlässigbar sein, damit das thermische Modell seine Gültigkeit behält. Außer einem kleinen Vorkommen im S-Teil der FQZ (Hirschberg) gibt es in der FQZ keine Hinweise auf präkarbonische Granite.

Für die SW / NE-Profile durch die Ziegenrücker (AC-Profil, Abb. 40) und Mehltheurer Mulde (DE-Profil, Abb. 40) wurden keine thermischen Modelle gerechnet. Jedoch konnte das Temperaturmodell von G. Kosakowski zum Vergleich mit den aus der Illitkristallinität abgeschätzten Temperaturen der Ziegenrücker- und Mehltheurer Mulde herangezogen werden. Dazu wurde es an der FQZ-Achse (NW / SE) gespiegelt. Der Vergleich des gespiegelten Temperaturmodells mit den Temperaturabschätzungen ist legitim, da nach SEHM et al. (1989) die Oberfläche des Granitkörpers im Untergrund der FQZ quasi-symmetrisch aufgebaut ist (Abb. 40). Die Rahmenbedingungen des Temperaturmodells entsprechen dem „best-fit“-Modell der Teuschnitzer Mulde. Dieses Modell wurde für eine Intrusion gerechnet, deren Platznahme vor der Anlage der asymmetrischen Horstzone erfolgte. Die Strukturen der Ziegenrücker und Mehltheurer Mulde wurden aber nicht in dieser Art und Weise verkippt. Deshalb sind die Modelltemperaturen im nordöstlichen Profilbereich theoretisch etwas zu hoch. Der Kurvenverlauf der gerechneten Temperaturen müßte folglich steiler sein (Abb. 49 und 50). In der Ziegenrücker Mulde liegen die gespiegelten Modelltemperaturen im Vergleich zu den aus der Illitkristallinität abgeschätzten Temperaturen ab 12 km Entfernung vom südwestlichen Profilbeginn (Profilpunkt A, Abb. 40) deutlich zu niedrig (Abb. 49). Die aus der IK abgeschätzten Temperaturen verharren auf einem Niveau an der methodischen Obergrenze der Illitkristallinität. Der Modellgranit reicht folglich nicht aus, um das Metamorphosehoch im E-

Teil der FQZ zu erklären. Die Modellierung ist mit der Interpretation in Kapitel 3.4. vereinbar, in der eine weitere, posttektonische Wärmequelle in der Ziegenrucker Mulde gefordert wird.

In der Mehltheurer Mulde (DE-Profil) gibt es keine Übereinstimmung zwischen den Temperaturen des gespiegelten Modells und den Temperaturabschätzungen aus der Illitkristallinität (Abb. 50). Im W-Teil des Profils liegen die Temperaturabschätzungen gegenüber den Modelltemperaturen deutlich niedriger. Die abgeschätzten Temperaturen nehmen jedoch in Richtung NE stetig zu und liegen in der NE-Hälfte des Profils deutlich über den Modelltemperaturen. Eine mögliche Erklärung für die im SW-Teil der Ziegenrucker Mulde gegenüber dem Modell zu geringen Temperaturen ist, daß die negative Schwereanomalie in diesem Bereich durch präkarbonische Granite mit verursacht ist, die aber keinen Einfluß mehr auf die Metamorphose im Unterkarbon ausüben konnten. Die Entstehung der Metamorphoseanomalie der Greizer Querzone wurde bereits in Kapitel 3.4 diskutiert.

Der Vergleich der modellierten Vitritreflexion (Kapitel 4.5) mit den Vitritreflexionsmeßwerten zeigt für das Profil der Teuschnitzer Mulde (Abb. 51) einen einheitlichen Trend, für das Profil der Nailaer Mulde (Abb. 52) gibt es jedoch keine Annäherung. In beiden Fällen streuen die Meßwerte beträchtlich. Dieses Ergebnis unterstützt die Interpretation in Kapitel 3.4, daß die schlechte Korrelation der Illitkristallinität mit der Vitritreflexion auf die Qualität der Vitritreflexionsmessungen zurückzuführen ist.

5 SCHLUSSFOLGERUNGEN

Die Illit- und Chloritkristallinität sind bewährte und weitverbreitete Methoden zur Abschätzung der sehr niedriggradigen Metamorphose in Tonschiefern. Sie erlauben eine höhere Auflösung des Anchimetamorphen Bereiches. Die Voraussetzungen für eine erfolgreiche Anwendung sind:

- eine methodische Gleichbehandlung der Proben nach den Richtlinien des IGCP 294 (KISCH, 1991),
- die Verwendung von Standards (WARR & RICE, 1994);
- die Reproduzierbarkeit der Messungen (KRUMM, 1992);
- da eine statistische Auswertung, eine ausreichend große Probenzahl;
- eine möglichst einheitliche Zusammensetzung des Probenmaterials.

Anhand von Literaturdaten läßt sich, wenn auch nur sehr ungenau, eine logarithmische Funktion zwischen der Illitkristallinität und der Temperatur ableiten.

In dieser Arbeit lieferten die Illit- und Chloritkristallinität ein übereinstimmendes Metamorphosebild, das für den W-Teil des Arbeitsgebietes durch die Vitrinitreflexion wenigstens qualitativ bestätigt werden konnte. Die Defizite der Vitrinitreflexion sind zum einen auf eine zu geringe Probendichte, zum anderen auf ein für den bearbeiteten Metamorphosebereich ungeeignetes Präparations- und Meßverfahren zurückzuführen. Die Druckabschätzungen mit dem $6d_{(33-1,060)}$ -Geobarometer zeigen nach der Einteilung von GUIDOTTI & SASSI (1986) einheitliche Drucke an der Grenze der Niedrig- zur Mitteldruckfazies.

Mit der Illit- und Chloritkristallinität kann für den Bereich westlich der FQZ von der Fränkischen Linie in Richtung auf die FQZ eine deutliche Zunahme der thermischen Metamorphose von hochdiagenetischen auf epizonale Bedingungen beobachtet werden. Die tektonischen Gefüge zeigen in der FQZ gegenüber den südwestlichen und nordöstlichen Nachbargebieten eine stärkere duktile Deformation an, die bei einheitlichen Drucken auf eine thermische Anomalie in der FQZ schließen läßt. Da in der FQZ auch posttektonische Granite aufgeschlossen sind, sind eine syn- und eine posttektonische Temperaturerhöhung zu erwarten. Als Ursache für die syntektonisch erhöhte Temperatur wird ein synkinematisch intrudierter Granit gefordert, der im Untergrund der FQZ verborgen ist. Hinweise auf einen größeren Granitkörper im Untergrund der FQZ liefert das gravimetrische Schwerebild, mit dessen Hilfe die Oberfläche des Plutons von SEHM et al. (1989) modelliert wurde.

Der Kern der Teuschnitzer Mulde, westlich der FQZ, liegt außerhalb des thermischen Einflusses der FQZ. Hier kann die Metamorphose alleine mit einer stratigraphischen Versenkung erklärt werden.

Die Illit- und Chloritkristallinität in der Ziegenrücker Mulde (nordöstliche Verlängerung der Teuschnitzer Mulde) bilden eine gleichbleibend hohe, hochanchizontale bis epizonale Metamorphose ab, die nicht nur auf den thermischen Einfluß der FQZ zurückgeführt werden kann. Die tektonischen Strukturen geben keine Hinweise auf eine synkinematisch erhöhte Metamorphosetemperatur. Hier ist eine posttektonische Aufheizung der Ziegenrücker Mulde wahrscheinlich: in ihrem W-Teil belegen einige NW-streichende Gänge eine gewisse magmatische Aktivität, und im E-Teil weist das Schwerebild auf einen verborgenen „Pluton von Auma“ hin.

Im W-Teil der Mehltheurer Mulde kann die Abnahme der Metamorphose von der FQZ in Richtung E auf den mit zunehmender Entfernung schwindenden Einfluß der Temperaturanomalie der FQZ zurückgeführt werden. Der Wiederanstieg der Metamorphose im E-Teil der Mehltheurer Mulde wurde von der Metamorphoseanomalie in der Greizer Querzone gesteuert, die parallel zur FQZ angelegt ist und ähnlich wie diese durch ein syntektonisches Metamorphosehoch geprägt wurde. Das syntektonische Metamorphosehoch wurde wahrscheinlich, wie in der FQZ, durch einen im Untergrund verborgenen, synkinematisch intrudierten Granit verursacht. Hier gibt es keine Hinweise auf eine posttektonische Kontaktmetamorphose.

Für den W-Teil der FQZ wurde eine 2D Modellierung durchgeführt, die die Kontaktwirkung eines Granitkörpers in der FQZ auf das unterkarbonische Nebengestein simuliert, der eine ähnliche Oberfläche hat, wie sie aus dem gravimetrischen Schwerebild von SEHM et al (1989) modelliert wurde. Die thermische Modellierung zeigt die beste Annäherung an die von der Illitkristallinität abgeleiteten Metamorphosetemperaturen für einen Granitkörper mit einer Oberfläche, die nach SW und NE abtaucht und der heute in einer Tiefe von 5 km eine maximale NE-SW-Ausdehnung von 20 km erreicht. Die Intrusionstemperatur beträgt etwa 700 °C, die ursprüngliche Gesteinsüberdeckung über dem Dach des Plutons 6,5 km. Das Modell läßt einen überwiegend konduktiv gesteuerten Wärmetransport erwarten. Die nach SW abtauchende asymmetrische Horstzone wurde im Modell erst nach der Intrusion verkippt.

Die Ergebnisse der Illit- und Chloritkristallinität sollten in Folgeprojekten mit anderen Metamorphoseparametern wie Vitrinitreflexion und Fluid-Einschlußmessungen überprüft werden. Möglicherweise kann mit K / Ar- oder Ar / Ar-Altersdatierung an Illiten die syn- von der posttektonischen Metamorphose unterschieden und auskartiert werden. Großflächig verbreitete syntektonische Metamorphosealter würden die Interpretation einer syntektonischen Granit-intrusion im Untergrund der FQZ unterstützen.

LITERATURVERZEICHNIS

- ABDULLAH, N., GRAUERT, B. & KROHE, A. (1994): U-Pb- und Rb-Sr-Untersuchungen von Metagraniten der Mylonitzone von Foss-Altenhammer und einer Probe des Leuchtenberger Granits. - Abstract of the 7th colloquium of the German Continental Deep-Drilling Project (KTB), 2-3 June 1994, Giessen.
- ANDERLE, H.J., FRANKE, W. & SCHWAB, M. (1995): III.C.1 Stratigraphy - In: Dallmeyer, R.D., Franke, W. & Weber, K. (eds.): Pre-Permian Geology of Central and Eastern Europe. 604 S., Springer, Berlin.
- ÁRKAI, P., HORVÁTH, Z.A. & TÓTH, M. (1981): Transitional very low- and low-grade regional metamorphism of the Paleozoic formations, Uppony Mountains, NE-Hungary: mineral assemblages, illite crystallinity, θ and vitrinite reflectance data. - Acta Geologica Academiae Scientiarum Hungaricae, 24:285-294.
- ÁRKAI, P. (1991): Chlorit crystallinity: an empirical approach and correlation with illite crystallinity, coal rank and mineral facies as exemplified by Palaeozoic and Mesozoic rocks of northeast Hungary. - J. metamorphic Geol., 9:723-734.
- ÁRKAI, P., BALOGH, K. & DUNKL, I. (1995): Timing of low-temperature metamorphism and cooling of the Paleozoic and Mesozoic formations of the Býkkium, innermost Western Carpathians, Hungary. - Geol. Rundsch., 84:334-343.
- ÁRKAI, P., BALOGH, K. & FREY, M. (1997): The effects of tectonic strain on crystallinity, apparent mean crystallite size and lattice strain of phyllosilicates in low temperature metamorphic rocks. A case study from the Glarus overthrust, Switzerland. - Schweiz. Mineral. Petrogr. Mitt., 77:27-40.
- AWWILLER, D.N. (1993): Illite / Smectite formation and potassium mass transfer during burial diagenesis of mudrocks: a study from the Texas gulf coast Paleocene - Eocene. - J. sed.-petrol., 63:3:501-512.
- BAILEY, S.W. (1984): Classification and Structures of the Micas. S. 1-12. - In: Bailey, S.W. (ed.), Micas, Reviews in Mineralogy, Vol. 13, 584 S., Mineral Society of America, Washington, D.C.
- BAKER, C.E. & GOLDSTEIN, R.H. (1990): Fluid-inclusions technique of determining maximum temperature in calcite and its comparison to the vitrinite reflectance geothermometer. - Geology, V. 18:1003-1006.

- BANKWITZ, P. & SCHROEDER, E. (1962): Tektonische Studien in Schiefer- und Phyllitgebieten Thüringens. - Geol. Rundsch., 52:365-376.
- BEHR, H.J., ENGEL, W. & FRANKE, W. (1982): Variscan Wildflysch and Nappe Tectonics in the Saxothuringian Zone (Northeast Bavaria, West Germany). - Amer. J. Soci., 282:1438-1470.
- BEHRMANN, J., SCHUSTER, J., TANNER, D.C. & O'BRIEN, P. (1994): Wärme und Bewegung während der variscischen Orogenese in den moldanubischen Gneisen Ostbayerns, II. Kinematik metamorpher Reaktionen. - Göttinger Arb. Geol. Paläont., Sb1, 163-164.
- BIRKELBACH, M. (1989): Untersuchungen zur möglichen Mobilität von Elementen aus Tonschiefern beim Übergang von der Diagenese zur niedriggradigen Metamorphose am Beispiel der unterkarbonischen Tonschiefer des Frankenwaldes. - Unveröffentl. DFG-Abschlußbericht über die Tätigkeit vom 1.05.1988 bis 30.4.1989.
- BISCAJE, P.E. (1965): Mineralogy and sedimentation of recent deep sea clay in the Atlantic Ocean and adjacent seas and oceans. - Geol. Soc. Amer. Bull., 76:803-832.
- BLENKINSOP, T.G. (1988): Definition of low-grade metamorphic zones using illite crystallinity. - J. metamorphic Geol., 6:623-636.
- BRAND, R. (1980): Die niedriggradige Metamorphose einer Diabas-Assoziation im Gebiet Berg / Frankenwald. - N. Jb. Miner. Abh., 139:1:82-101.
- BRAUKMANN, F.J. (1984): Hochdiagenese im Muschelkalk der Massive von Bramsche und Vlotho. - Bochumer geol. u. geotechn. Arb., 14:195 S.
- BRINDLEY, G.W. & BROWN, G. (1980): Crystal Structures of Clay Minerals and their X-ray identification. - Min. Soc., Monograph, 5:1-495, London.
- BROWN, G. (1961): The X-ray identification and crystal-structures of clay minerals. - Min. Soc. 1961, Clay Minerals Group, 544 S., London.
- BUSTIN, R.M. (1983): Heating during thrust faulting in the Rocky Mountains: friction or fiction? - Tectonophysics, 95:309-328.
- BUSTIN, R.M., CAMERON, A.R., GRIEVE, D.A. & KALKREUTH, W.D. (1989): Coal Petrology: Its Principles, Methods and Applications - Short Course Notes Volume 3 - Geological Association of Canada, 230 S.

- CIPRIANI, C., SASSI, F.P. & VITERBO-BASSANI, C. (1968): La composizione delle miche in rapporto con le costanti reticolari e col grado metamorfico. *Rend. Soc. Ital. Miner. Petr.*, 24:153-187.
- CIPRIANI, C., SASSI, F.P. & SCOLARI, A. (1971): Metamorphic white micas: definition of paragenetic field. - *Schweiz. Miner. Petr. Mitt.*, 51:259-302.
- CLAUSER, C. (1988): Untersuchungen zur Trennung der konduktiven und konvektiven Anteile im Wärmetransport in einem Sedimentbecken am Beispiel des Oberrheingrabens. - *Fortschritt-Berichte VDI*, VDI-Verlag Düsseldorf, 19:28.
- CLAUSER, C. & VILLINGER, H. (1990): Analysis of conductive and convective heat transfer in a sediment basin, demonstrated for the Rheingraben. - *Geophysical Journal International*, 100:393-414.
- DALLA TORRE, M. & FREY, M. (1997): The evolution from Ad to ordered 2M₁ white K-mica polytype in low-temperature metamorphosed sedimentary rocks. - *Schweiz. Mineral. Petrolgr. Mitt.*, 77:149-159.
- DEKORP and OROGENIC PROCESSES Working Groups (in press): Structure of the Saxonian Granulites - geological and geophysical constraints on the exhumation of HP /HT-rocks. - *Tectonics* (in press).
- Di MARCO, M.J., FERREL, JR. & LOWE, D.R. (1989): Polytypes of 2:1 dioctahedral micas in silicified volcaniclastic sandstones, Warrawoona Group, Pilbara Block, Western Australia. - *Amer. J. Sci.*, 289:649-660.
- DUNOYER DE SEGONZAC, G. (1970): The transformation of clay minerals during diagenesis and low-grade metamorphism: a review. - *Sedimentology*, 15:281-346.
- EBERL, D.D, SRODON, J. LEE, M., NADEAU, P.H. & NORTHROP, H.R. (1987): Sericite from the Silverstone caldera, Colorado: Correlation among structure, composition, origin, and particle thickness. - *Am. Mineral.*, 72:914-934.
- EBERL, D.D. (1993): Three zones for illite formation during burial diagenesis and metamorphism. - *Clays & Clay Minerals*, 41:1:26-37.
- EIGENFELD, R. (1938): Die granitführenden Konglomerate des Oberdevons und Kulms im Gebiet altkristalliner Sattelanlagen in Ostthüringen, Frankenwald und Vogtland. - *Abh. Math. Phys. Klasse Sächs., Akad. Wiss.*, 42:1-129, Leipzig.
- EISBACHER, G.H., LÜSCHEN, E. & WICKERT, F. (1989): Crustal-scale thrusting and

- extension in the Hercynian Schwarzwald and Vogeses, Central Europa. - *Tectonics*, 8:1-21.
- ESQUEVIN, J. (1969): Influence de la composition chimique des illites sur la cristallinité. - *Bull. Centre Rech. Peau., S.N.A.*, 3/1:147-154.
- ESSENE, E.J. & PEACOR, D.R. (1995): Clay mineral thermometry - a critical perspective. - *Clays & Clay Minerals*, 43:5:540-553.
- FERREIRO MÄHLMANN, R. (1994): Zur Bestimmung von Diagenesehöhe und beginnender Metamorphose - Temperaturgeschichte und Tektogenese des Austroalpins und südpenninikums in Voralberg und Mittelbünden. - *Frankfurter geowiss. Arb., Serie C*, 14:1-498.
- FERREIRO MÄHLMANN, R. (1996): Das Diagenese-Metamorphose-Muster von Vitritreflexion und Illit-"Kristallinität" in Mittelbünden und im Oberhalbstein - Teil 2: Korrelation kohlepetrographischer und mineralogischer Parameter. - *Schweiz. Mineral. Petrogr. Mitt.*, 76:23-46.
- FLEHMIG, W. (1973): Kristallinität und Infrarotspektroskopie natürlicher dioktaedrischer Illite. - *N. Jb. Miner. Mh.*, 7/8:351-361.
- FLEHMING, W. & GEHLKEN, P.L. (1989): Zum Celadonitmolekül in Illiten paläozoischer Sedimente, seiner genetischen Beziehung und mineralogischen Auswirkung. - *Z. dtsh. geol. Ges.*, 140:343-353.
- FRANKE, W. (1984): Variszischer Deckenbau im Raume der Münchberger Gneismasse - abgeleitet aus der Fazies, Deformation und Metamorphose im umgebenden Paläozoikum. - *Geotekt. Forschungen*, 68, 253 S.
- FRANKE, W. (1989a): Tectonostratigraphic units in the Variscan belt of central Europe. - *Geol. Soc. Am., Special Paper*, 230:67-90.
- FRANKE, W. (1989b): Variscan plate tectonics in Central Europe - current ideas and open questions. - *Tectonophysics*, 169:221-228.
- FRANKE, W. (1993): The Saxonian granulites: a metamorphic core complex? - *Geol. Rundsch.* 82:505-515.
- FRANKE, W. (1995a): III.B.1 Stratigraphy. - In: Dallmeyer, R.D., Franke, W. & Weber, K. (eds.): *Pre-Permian Geology of Central and Eastern Europe*. 604 S., Springer, Berlin.

- FRANKE, W. (1995b): Exhumation of the Saxon Granulites: Orogenic collapse vs. rifting. - Terra abstracts, Abstract supplement No. 1 to Terra Nova, vol. 7. EUG 8, Strasbourg, France, April 1995, Oral and Poster presentation abstracts: 120.
- FRANKE, W. & ENGEL, W. (1986): Synorogenic sedimentation in the Variscan belt of Europe. - Bull. Soc. Géol. France, 1:25-33.
- FRANKE, W. & ONKEN, O. (1995): Zur prädevonischen Geschichte des Rhenohercynischen Beckens. - Nova Acta Leopoldina NF, 71:291:53-72.
- FRANKE, W. & STEIN, E. (1999): Contrasting modes of exhumation of the Saxothuringian Belt. - EUG Abstract volume, Terra Abstracts, 4:1.11:84
- FRANKE, W., DALLMEYER, R.D. & WEBER, K. (1995a): XI Geodynamic Evolution - In: Dallmeyer, R.D., Franke, W. & Weber, K. (eds.): Pre-Permian Geology of Central and Eastern Europe. 604 S., Springer, Berlin.
- FRANKE, W, KREUZER, H. OKRUSCH, M. SCHÜSSLER, U. & SEIDEL, E. (1995b): V.C.1 Stratigraphy, Structure, and Igneous Activity; S. 277-308. - In: Dallmeyer, R.D., Franke, W. & Weber, K. (eds.): Pre-Permian Geology of Central and Eastern Europe. 604 S., Springer, Berlin.
- FREY, M., TEICHMÜLLER, M., TEICHMÜLLER, R., MULLIS, J., KÜNZI, B., BREITSCHMID, A., GRUNER, U. & SCHWITZER, B. (1980): Very Low-Grade metamorphism in external parts of the Central Alps: Illite crystallinity, coal rank and fluid inclusion data. - *Ecligogae geol. Helv.*, 73:173-203.
- FREY, M. (1986): Very low-grade metamorphism of the Alps - an introduction. - *Schweiz. Miner. Petrogr. Mitt.*, 66:63-65.
- FREY, M. (1987): 2. Very low-grade metamorphism of clastic sedimentary rocks. S. 9-58. - In: *Low temperature Metamorphism*, Frey, M. (ed), 351 S., Blackie, Glasgow.
- FREY, M., HUNZIKER, J.C., JÄGER, E. & STERN, W.B. (1983): Regional distribution of white K-mica polymorphs and their phengite content in the Central Alps. - *Contrib. Miner. Petrol.* 83:185-197.
- FÜCHTBAUER, H. & GOLDSCHMIDT, H. (1963): Beobachtungen zur Tonmineral-Diagenese. - *Intern. Clay Conf.*, Stockholm, Pergamon Press, 1:99-111.
- GAITZSCH, B.G. (1998): Flysch und Frühmolassen im östlichen Saxothuringikum und im Saxolugikum. - *Terra Nostra*, 2:49-52.

- GANDL, J. (1981): Exkursion in das Paläozoikum des Frankenwaldes (Gebiet nordwestlich der Münchberger Gneismasse). - Jber. Mitt. oberrhein. geol. Ver., N.F. 63:63-73, Stuttgart.
- GEHMLICH, M., TICHOMIROVA, M., LINNEMANN, U., LÜTZNER, H & BOMBACH, K. (1997): Kalibrierung und Korrelation des saxothuringischen Ordoviziums durch die Einzelzirkon-Evaporationsmethode. - SPP-Kolloquium Orogene Prozesse, ihre Quantifizierung und Simulation am Beispiel der Varisciden, 13. - 14.3.1997, Bayreuth. - Terra Nostra, 97/5:43-46.
- GERDES, A., WÖRNER, G. & FINGER, F. (1996): Mantelquellen in variscischen Granitoiden? - Terra Nostra, 96:2:75-78.
- GUIDOTTI, C.V. & SASSI, F.P. (1976): Muscovite as a petrogenetic indicator mineral in pelitic schists. - N. Jb. Miner. Abh., 127:97-142.
- GUIDOTTI, C.V. & SASSI, F.P. (1986): Classification and Correlation of metamorphic facies series by means of muscovite b₀ data from low-grade metapelites. - N. Jb. Miner. Abh., 153:363-380.
- GRADSTEIN, F.M. & OGG, J. (1996): Geological Timescale. - Episodes, 19:1+2.
- GREENWOOD, H.J. (1976): Metamorphism at moderate temperatures and pressures. - In: Bailey, D.K. & Macdonald, R. (eds.): The evolution of the crystallin rocks. - Academic Press, New York, 187-259.
- GRIM, R.E., BREY, R.H. & BRADLEY, W.F. (1937): The mica in argillaceous sediments. - Amer. Min., 22:813-829.
- GRIM, R.E. (1953): Clay Mineralogy. - Mc Graw-Hill, New York, N.Y., 384 S.
- HARTUNG, W. (1938): Flora und Altersstellung des Karbons von Hainchen-Ebersdorf und Borna bei Chemnitz. - Abh. Sächs. Geol. L.-A. Freiberg, 18:5-140.
- HEMPEL, G. (1964): Gefügeerscheinungen im Ostthüringischen Schiefergebirge. - Abh. dt. Akad. Wiss. Berlin, Kl. Bergbau, Hüttenwesen und Montangeologie, 2:221-258.
- HESSE, R. & DALTON, E. (1991): Diagenetic and low-grade metamorphic terranes of Gaspe Peninsula related to the geological structure of the Taconian and Acadian orogenic belts, Quebec, Appalachians. - J. metamorphic Geol., 9:775-790.
- HEWITT, D.A. & WONES, D.R. (1972): The effect of cation substitutions on the physikal property of trioctahedral micas. - Am. Mineral., 57:103-129.

- HIRT, A.M., LOWRIE, W., JULIVERT, M. & ARBOLEYA, M.L. (1992): Paleomagnetic results in support of a model for the origin of the Asturian arc. - *Tectonophysics*, 213:321-339.
- HOFMANN, R. (1961): Tektonische Beobachtungen in der Teuschnitzer Kulm-Mulde (Frankenwald). - *Geol. Jb.*, 78:819-856.
- HOLDAWAY, M.J. (1971): Stability of andalusite and sillimanite and the aluminium silicate phase diagram. - *Am. Jour. Sci.*, 271:97-131.
- HOLL, H.-G. (1995): Die Siliziklastika des Unterdevon im Rheinischen Trog (Rheinisches Schiefergebirge) - Detrituseintrag und P,T-Geschichte. - *Bonner Geow. Schriften*, 163 S.
- HUANG, W.-L., LONGO, J.M. & PEVAR, D.R. (1993): An experimental derived model for smectite to illite conversion and its use as a geothermometer. - *Clays & Clay Minerals*, 41:2:162-177.
- HUNZIKER, J.C., FREY, M., CLAUER, N., DALLMEYER, R.D., FRIEDRICHSEN, H., FLEHMING, W., HOCHSTRASSER, K., ROGGWILER, P. & SCHWANDER, H. (1986): The evolution of illite: mineralogical and isotopic data from the Glarus Alps, Switzerland. - *Contrib. Mineral. Petrol.*, 92:157-180.
- INTERNATIONAL COMMITTEE OF COAL PETROLOGY (ed) (1971, 1985): *International Handbook of Coal Petrography*. - Centre National de la Recherche Scientifique, Paris.
- JABOYEDOFF, M. & THELIN, P. (1996): New data on low-grade metamorphism in the Briançonnais domain of the Prealps, Western Switzerland. - *Eur. J. Mineral.*, 8:577-592.
- JIANG, W.-T., PEACOR, D.R., ÁRKAI, P., TOTH, M. & KIM, J.W. (1997): TEM and XRD determination of crystallite size and lattice strain as a function of illite crystallinity in pelitic rocks. - *J. metamorphic Geol.*, 15:267-281.
- JOHNS, W.D., GRIM, R.E. & BRADLEY, W.F. (1954): Quantitative estimations of clay minerals by diffraction methods. - *J. Sed. Petrol.*, 24:242-251.
- KIM, I.-S. & SOFFEL, H.C. (1982): Palaeomagnetic results from Lower Paleozoic diabases and pillow lavas from the Frankenwald area (northwestern edge of the Bohemian Massif). - *J. Geophys.*, 51:1:24-28, Berlin.
- KISCH, H.J. (1980): Incipient metamorphism of Cambro-Silurian clastic rocks from Jämtland Supergroup, central Scandinavian Caledonides, western Sweden: illite crystallinity and "vitrinite" reflectance. - *Journal of the Geological Society*, 137:271-288, London.

- KISCH, H.J. (1987): Correlation between indicators of very low-grade metamorphism. - In: Frey, M. (ed.) 1987: Low temperature metamorphism, Blackie, 227-299.
- KISCH, H.J. (1990): Calibration of the anchizone: a critical comparison of illite "crystallinity" scales used for definition - J. metamorphic Geol., 8:31-46.
- KISCH, H.J. (1991): Illite crystallinity: recommendations on sample preparation, x-ray diffraction settings, and interlaboratory samples. - J. metamorphic Geol., 9:665-670.
- KLUG, H.P. & ALEXANDER, L.E. (1974): X-ray Diffraction Procedures. 2nd edn., Wiley, New York.
- KÖHLER, H. & HÖLZL, S. (1996): The age of the Leuchtenberger granite (NE Bavaria, Germany) a revision on account of new U-Pb zircon ages. - N. Jahrb. Mineral. Mh., 212-222.
- KOSSMAT, F. (1927): Gliederung des varistischen Gebirgsbaues. - Abh. Sächs. Geol. L.-A., 1, 39 S., Leipzig.
- KÖSSLER, P., SCHÄTZ, M., SOFFEL, H., TAIT, J., BACHTADSE, V. & LINNEMANN, U. (1996): New Paleozoic sequences in the Thuringer Wald, Saxo-Thuringia. - Annales Geophys. EGS (abstr), 14:1:C86.
- KRUMM, H. (1984): Anchimetamorphose im Anis und Ladin (Trias) der Nördlichen Kalkalpen zwischen Arlberg und Kaisergebirge - ihre Verbreitung und deren baugeschichtliche Bedeutung. - Geol. Rundsch., 73:223-257.
- KRUMM, S. (1992): Illitkristallinität als Indikator schwacher Metamorphose - Methodische Untersuchungen, regionale Anwendungen und Vergleiche mit anderen Parametern. - Erlanger geol. Abh., 120:1-75.
- KÜBLER, B. (1967a): La cristallinité de l' Illite et les zones tout a fait superieures du métamorphisme. - In: Colloque Etages Tectoniques. A la Baconniere: 105-122, Neuchatel.
- KÜBLER, B. (1967b): Anchimétamorphisme et schistosité. - Bull. Centre Rech. Pau - S.N.P.A, 1:259-278.
- KÜBLER, B. (1968): Evaluation quantitative du métamorphisme par la cristallinité de l' illite. - Etat des progrès réalisés ces dernières années. - Bull. Centre Rech. Peau, S.N.P.A, 2:385-397.

- KÜBLER, B. (1975): Diagenese - anchimétamorphisme et métamorphisme. - Institut national de la recherche scientifique - Pétrole, Quebec.
- KÜBLER, B., PITTON, J.L., HEROUX, Y., CHAROLLAIS, J. & WEIDMANN, M. (1979): Sur le pouvoir reflecteur de la vitrinite dans quelques roches du Jura, de la Molasse et des Nappes prealpines, helvetiques et penniniques. - *Eclogae geol. Helv.*, 72:347-373.
- KÜBLER, B. (1984): Les indicateurs des transformations physiques et chimiques dans la diagenèse, température et calorimétrie. In: *Thermométrie et barométrie géologiques*. - Lagache, M. (ed.), Soc. Franç. Minér. Crist., Paris, 489-596.
- KÜBLER, B. (1990): « Cristallinité » de l'illite et mixed-layers: brève révision. - *Schweiz. Mineral. Petrogr. Mitt.*, 70:89-93.
- KUNERT, V., RÖLL, S., ROTTHAUS, B. & FRANKE, W. (1998): Heat Advection in a Fault Zone - the Case of the Frankenwald Transverse Zone. - *Acta Universitatis Carolinae, Geologica*, 42:2:293-294.
- KROHE, A. (1992): Structural evolution of intermediate-crustal rocks in a strike-slip and extensional setting (Variscan Odenwald, SW Germany): differential upward transport of metamorphic complexes and changing deformation mechanisms. - *Tectonophysics*, 205:357-386.
- KROHE, A., ABDULLAH, N. & GRAUERT, B. (1994): Mikrogefügeuntersuchungen am Leuchtenberger Granit und an Metagraniten der Mylonitzone von Floss-Altenhammer. - *KTB Rep.* 38: 94-2.
- LAMBELET, E., MROZEK, H. & SAMTLEBEN, C. (1967): Petrostratigraphie, Fazies und Sedimentationsverhältnisse des Kulms an der Südostflanke der Teuschnitzer Mulde (Frankenwald). - *Mitt. Geol. Staatsinst. Hamburg*, 36:131-168, Hamburg.
- LEE, J.H., AHN, J.H. & PEACOR, D.R. (1985): Textures in layered silicates: progressive changes through diagenesis and low-temperature metamorphism. - *Jour. sed. petrol.*, 55:4:532-540.
- LEVINE, J.R. & DAVIS, A. (1984): Optical anisotropy of coals as an indicator of tectonic deformation, Broad Top Coal Field, Pennsylvania. - *Bull. Geol. Soc. Amer.*, 95:100-108.
- LEZZERNI, M., SARTORI, F. & TAMPONI, M. (1995): Effect of amount of material used on sedimentation slides in the control of illite "crystallinity" measurements. - *Eur. J. Mineral.*, 7:819-823.

- LORENZ, W. (1957): Die Schwereanomalie von Auma. Tektonisch-gefügekundliche Untersuchungen im ostthüringischen Schiefergebirge. - Freiburger Forschungshefte, C 39, 74 S.
- LOTH, G., HÖLL, R., RITTER, A. & KENNEDY, A. (1997): U-Pb-SHRIMP-dating of zircons from the Henneberg intrusion (Thuringia). - Tagungsband zur 149. Tagung der Deutschen Geologischen Gesellschaft, 78 S.
- LUDWIG, V. (1972): Die Paragenese Chlorit, Muscovit, Paragonit und Margarit im „Griffelschiefer“ des Ordoviziums in NE-Bayern (Mit einem Beitrag zum Problem der Illit-Kristallinität). - N. Jahrb. f. Geol. u. Paläont. Monatsh. 546-560.
- MARESCH, W.V. (1977): Experimental studies on glaucophane: An analysis of present knowledge. - Tectonophysics, 43:109-125.
- MATTE, P. (1991): Accretionary history and crustal evolution of the Variscan belt in western Europe. - Tectonophysics, 177:25-56.
- MATTE, P., MALUSKI, H., RAJLICH, P. & FRANKE, W. (1990): Terrane boundaries in the Bohemian massif: result of large-scale Variscan shearing. - Tectonophysics, 177:151-170.
- MAXWELL, D.T. & HOWER, J. (1967): High-grade diagenesis and low-grade metamorphism of illite in the Precambrian Belt series. - Amer. Min., 52:843-856.
- MC KERROW, W.S., DEWEY, J.F., SCOTese, C.F. (1991): The Ordovician and Silurian development of Iapetus Ocean. Paleontology, 44:165-178.
- MEINEL, G. (1972): Petrographische und petrochemische Untersuchungen zum Charakter der synorogenen Metamorphose im Ostthüringer Schiefergebirge. - Chemie der Erde, 1:31:1-92.
- MEINEL, G. (1993): Die Bildung der Gangmineralisationen Thüringens. - Geow. Mitt. v. Thüringen, 1:1-111, Weimar.
- MERRIMAN, R.J., ROBERTS, B. & PEACOR, D.R. (1990): A transmission electron microscope study of white mica crystallite size distribution in a mudstone to slate transitional sequence, North Wales, UK. - Contrib. Mineral Petrol., 106:27-40.
- MERRIMAN, R.J., ROBERTS, B., PEACOR, D.R. & HIRSONS, S.R. (1995): Strain-related differences in the crystal growth of white mica and chlorite: a TEM and XRD study of the development of metapelitic microfabrics in the Southern Uplands thrust terrane, Scotland.

- J. metamorphic Geol., 13:559-576.
- MERRIMAN, R.J. & PEACOR, D.R. (1999): 2. Very low-grade metapelites: mineralogy, microfabrics and measuring reaction progress. - In: Frey, M. & Robinson, D. (1999): Low-Grade Metamorphism. 313 S., Blackwell Science.
- MIYASHIRO, A. (1961): Evolution of metamorphic belts. - J. Petrology, 2: 277-311.
- NEUROTH, H. (1997): K / Ar-Datierungen an detritischen Muskoviten - „Sicherungskopien“ orogener Prozesse am Beispiel der Varisciden. GAGP, 72:1-143.
- NIETO, F. & SANCHEZ-NAVAS, A. (1994): A comparative XRD and TEM study of the physical meaning of the white mica "crystallinity" index. - Eur. J. Mineral., 6:611-621.
- O'BRIEN, P.J. (1997): HP Granulites of the Variscides: product or cause of the regional HT-LP metamorphism. - Terra Nostra, 79:5:116-120.
- O'BRIEN, P.J. (1999): Variscan high temperature metamorphism: possible causes, consequences of different models, and compatibility with the rocks. - Terra Nostra, 99:1:158.
- OKRUSCH, M., SEIDEL, E., SCHÜSSLER, U. & RICHTER, P. (1989): Geochemical characteristics of metabasites in different tectonic units of the northeast Bavarian crystalline basement. - In: Emmermann, R. & Wohlenberg, J. (Hrsg.): The German Continental Deep Drilling Program (KTB): 67-81.
- ONKEN, O. (1997): How to transform a magmatic arc and a orogenic root - material paths in oblique collision and the Mid-German Crystallin Rise. - Geol. Rundschau, 86:2-20.
- PADAN, A., KISCH, H.J. & SHAGAM, R. (1982): Use of the lattice parameter b_0 of dioctahedral illite / muscovite for the characterization of P / T gradients of incipient metamorphism. - Contr. Mineral. Petrol., 79:85-95.
- PEACH, H.-J. (1966): Zur Tektonik des Ostthüringischen Schiefergebirges im Raum Schleiz - Mühltröf. - Geologie, 15:981-988.
- PETSCHICK, R. (1989): Zur Wärmeentwicklung im Kalkalpin Bayerns und Nordtirols (Inkohlung und Illitkristallinität). - Frankfurter geowiss. Arb., Serie C, Bd. 10, 259 S.
- PFEIFFER, H. (1970): Zum inneren Bau des Ostthüringischen Kulm-Synklinoriums. - Jb. Geol. Mitt. Zentr. Geol. Inst. Berlin 5/6:165-173.
- PFEIFFER, H., BLUMENSTENGEL, H. & WIEFEL, H. (1995): Kapitel 4.3.5 Dinant

- (Unterkarbon) S. 147-166. - In: Seidel, G. (ed.) Geologie von Thüringen, 556 S., Schweizerbart, Stuttgart.
- PUPIN, J.P. (1980): zircon and granite petrology. - *Contrib. Mineral. Petrol.* 73:207-220.
- QUESADA, C. (1991): Geological constrains on the Paleozoic tectonic evolution to tectonostratigraphic terranes in the Iberian massif. - *Tectonophysics*, 185:225-245.
- RADOSLOVICH, E.W. (1960): The structure of muscovite, $KAl_2(Si_3Al)O_{10}(OH)_2$. - *Acta Crystallogr.* 13:919-932.
- RAGOT, J.P. (1977): Contribution à l'étude de l'évolution des substances carbonées dans les formations géologiques. - Thèse Univ. P. Sabatier, Toulouse.
- RAMSDELL, L.S. (1947): Studies on silicon carbide. - *Am. Mineral.* 32:64-82.
- REUTER, A. (1985): Kornabhängigkeit von K-Ar Datierungen und Illit-Kristallinität anchizonaler Metapelite und assoziierter Metatuffe aus dem östlichen Rheinischen Schiefergebirge. - *Göttinger Arb. Geol. Paläont.* 27:1-91.
- RIEDER, M., GUIDOTTI, C.V., SASSI, F.P. & WEISS, Z. (1992): Muscovites: d_{060} versus $d_{33-1,060}$ spacing: its use for geobarometric purposes. - *Eur. J. Mineral.*, 4:843-845.
- RIES, A.C. & SCHACKLETON, R.M. (1976): Patterns of strain variation in arcuate fold belts. - *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A.*, 283:281-288.
- ROBERTS, D. (1988): Timing of Silurian to middle Devonian deformation in the Caledonides of Scandinavia, Svalbard and E Greenland. - In: Harris, A.L., Fettes, D.J. (eds): *The Caledonian-Appalachian orogen.* - *Geol. Soc. Spec. Publ.*, 38:429-436.
- ROBERTS, B., MERRIMAN, R.J. & PRATT, W. (1991): The influence of strain, lithology and stratigraphical depth on white mica (illite) crystallinity in mudrocks from the vicinity of the Corris Slate Belt, Wales: implications for the timing of metamorphism in the Welsh Basin. - *Geological Magazine*, 128:633-645.
- ROBINSON, D., WARR, L.N. & BEVINS, R.E. (1990): The illite 'crystallinity' technique: a critical appraisal of its precision. - *J. metamorphic Geol.*, 8:333-344.
- RÖLL, S. (1998): Granitoide und deren Kontaktgesteine in der Frankenwälder Querzone - Petrographische und zirkontypologische Untersuchungen. - Unveröffentlichte Diplomarbeit, IGL-Gießen.
- SASSI, F.P. (1972): The petrologic and geologic significance of the b_0 value of potassic

- white micas in low-grade metamorphic rocks. An application to the Eastern Alps. - *Tschermaks Min. Petr. Mitt.*, 18:105-113.
- SASSI, F.P. & SCOLARI, A. (1974): The b_0 value of the potassic white micas as a barometric indicator in low-grade metamorphism of pelitic schist. - *Contr. Mineral. Petrol.*, 45:143-152.
- SCHAER, J.P. & PERSOZ, F. (1976): Aspects structuraux et petrographiques du Haut Atlas calcaire de Midet (Maroc). - *Bull. Soc. geol. France*, 18:1239-1250.
- SCHÄFER, F. (1997): Krustenbilanzierung eines variscischen Retrokeils im Saxothuringikum. - Unveröffentlichte Dissertation, 129 S., FU-Berlin.
- SCHÄFER, J. (1996): Mikrosondenuntersuchungen an Geröllen und detritischen Mineralen im Flysch des Saxothuringikums: Ein Beitrag zur Exhumierungsgeschichte des Liefergebietes. - Unveröffentlichte Dissertation, 221 S., J.-L. Universität, Gießen.
- SCHÄFER, J. (1997): Electron microprobe study of detrital amphiboles from Famennian synorogenic clastic sediments of the Saxothuringian belt (Erbendorf Paleozoic, NE-Bavaria, Germany): Consequences for provenance and geotectonic development. - *Geodynamica Acta*, 10:4:125-136, Paris.
- SCHÄFER, J., NEUROTH, H. AHRENDT, H. DÖRR, W. & FRANKE, W. (1997): Accretion and exhumation at a Variscan active margin, recorded in the Saxothuringian flysch. - *Geol. Rundsch.*, 86:599-611.
- SCHERRER, P. (1918): Bestimmung der Größe und der inneren Struktur von Kolloidteilchen mittels Röntgenstrahlen. *Göttinger. - Nachr. Math. Phys.*, 2:98-100.
- SCHIED, G. (1986): Komplexbericht Thüringisch-Vogtländisches Schiefergebirge. - Report VEB Kombinat Geophysik Leipzig, 151 S.
- SCHOLTZ, R. (1930): Das varistische Bewegungsbild entwickelt aus der inneren Tektonik eines Profils von der Böhmischen Masse bis zum Massif von Brabant, - *Fortschr. Geol. Paläont.* 8:25:235-316.
- SCHROEDER, E. (1958): Schiefergebirgstektonik und Grundgebirgstektonik in der Hirschberg-Greizer Zone (Ostthüringen). - *Geologie*. 7:465-483.
- SCHROEDER, E. (1965): Schieferungsstudien in Ostthüringen. - *Mber. dtsh. AdW.*, 7:1:57-62, Berlin.

- SCHROEDER, E., BANKWITZ, P. & PEACH, H.J. (1965): Zur Tektonik des Thüringisch-Vogtländischen Schiefergebirges. - Ber. Geol. Ges. DDR, 10:3:265-278.
- SCHROEDER, E. (1966a): Beiträge zur Schiefergebirgstektonik in Ostthüringen. - Abh. z. Geotektonik, 23, 23 S.
- SCHROEDER, E. (1966b): Zur tektonischen Zonen- und Stockwerksgliederung des Thüringisch-Vogtländischen Schiefergebirges. - Geologie, 15:8:973-980.
- SCHROEDER, E. (1993): Subhorizontale Gefüge im Thüringisch-Vogtländischen Schiefergebirge. - Z.geol. Wiss., 21:1/2:225-229, Berlin.
- SCHÜLLER, A. (1961): Die Druck-, Temperatur- und Energiefelder der Metamorphose. - Neues Jb. Min. Abh., 96:250-290.
- SCHWAN, W. (1958): Untervorschiebungen und Aufbruchfalten. - N.Jb. Geol. Paläont. Mh. 356-377, Stuttgart.
- SCHWAN, W. (1968): Zur Kinematik einiger Hauptstrukturen im nordostbayerischen Variszikum (Frankenwälder Querstörungen, Thüringer Untervorschiebungen, Münchberger Gneismasse). - Jber. Mitt. oberr. geol. Ver., 50:127-141, Stuttgart.
- SEHM, K. et al. (1989): Einschätzung Rohstoffführender Grundgebirgseinheiten S-Teil DDR, 1:100000 - Abschlußbericht G4 - Thüringisch Vogtländisches Schiefergebirge. Report. - BGR-Archiv Nr. 1004690, Zentrales Geologisches Institut, Berlin.
- SMITH, J.V. & YODER, H.S., Jr. (1956): Experimental and theoretical studies of the mica polymorphs. - Mineral. Mag. 31:209-235.
- SRODON, J. (1984): X-ray powder diffraction identification of illitic materials. - Clays & Clay Minerals, 32/5:337-349.
- SRODON, J. & EBERL, D.D. (1984): Illite - In: micas, Bailey, S.W. (ed), Reviews in Mineralogy, 13:495-544.
- STEIN, E. (1988): Die strukturgeologische Entwicklung im Übergangsbereich Saxothuringikum/Moldanubikum in NE-Bayern. - Geologica Bavarica, 92:5-131.
- SUESS, F.-E. (1912): Vorläufige Mitteilung über die Münchberger Deckscholle. Sitzungsbericht Akad. Wiss., Wien, Math.-Naturwiss. K121, Abt. Iia, 10:253.
- SWEENY, J.J. & BURNHAM, A.K. (1990): Evaluation of a Simple Model of Vitrinite Reflectance Based on Chemical Kinetics. - Am. Ass. of Petrol. Geol. Bull., 74:10:1559-

- 1570.
- TAIT, J.A., BACHTADSE, V., SOFFEL, H.C. (1994): Silurian palaeogeography of Armorica: new paleomagnetic data from central Bohemia. - *J. Geophys. Res.*, 99:2897-2907.
- TAIT, J.A., BACHTADSE, V., FRANKE, W. & SOFFEL, H.C. (1997): Geodynamic evolution of the European Variscan fold belt: paleomagnetic and geological constrains. - *Geol. Rundsch.*, 86:585-598.
- TAYLOR, G.H. (1971): Carbonaceous matter: a guide to the genesis and history of ores. - *Soc. Min. Geol. Japan, Spec. Issue 3, Tokyo*, 283-288.
- TEICHMÜLLER, M. & TEICHMÜLLER, R. (1981): The significance of coalification studies to geology - a review. - *Bull. Centre Rech. Expl. - Prod. ELF-Aquitaine*, 5:491-534.
- TEICHMÜLLER, M. (1987): Organic material and very low-grade metamorphism. 114 - 161. - In: *Low temperature metamorphism*, Frey, M. (ed.), 351 S., Blackie, Glasgow.
- TRAPP, E., ZELLMER, H., BAUMANN, A., METZGER, K. & WACHENDORF, H. (1998): Die Kieselgesteinsfazies des Unterkarbons im Harz - Biostratigraphie, U-Pb-Einzelzirkon-Alter, Petrographie und Sedimentologie. - *Terra Nostra*, 3/V368.
- TRENCH, A. & TORSVIK, T.H. (1991): A revised Paleozoic apparent polar wander path for southern Britain (eastern Avalonia). - *Geophys. J. Int.*, 104:227-233.
- VAN DER VOO, R. (1979): Paleozoic assembly of Pangea: a new plate tectonic model for the Taconic, Caledonian and Hercynian orogenies. - *EOS Trans Am. Geophys. Union* 60:241.
- VELDE, B. (1965): Experimental determination of muscovite polymorph stabilities. - *Amer. Journ.*, 262:886-913.
- VELDE, B. (1977): *Clays and Clay Minerals in Natural and Synthetic Systems.- Developments in Sedimentology 21*, Elsevier, Amsterdam.
- VELDE, B. & NICOT, E. (1985): Diagenetic clay mineral composition as a function of pressure, temperature and chemical activity. - *Jour. Sed. Petrology*, 55:4:541-547.
- VELDE, B. (1992): *Introduction to clay minerals*. - Chapman & Hall, 198 S.
- VELDE, B. & VASSEUR, G. (1992): Estimation of the diagenetic smectite to illite

- transformation in time-temperature space. - *Americ. Mineralogist*, 77:967-976.
- WARR, L.N. & RICE, H.N. (1994): Interlaboratory standardization and calibration of clay mineral crystallinity and crystallite size data. - *J. metamorphic Geol.*, 12:141-152.
- WARR, L.N. (1996): Standardized clay mineral crystallinity data from the very low-grade metamorphic facies rocks of southern New Zealand. - *Eur. J. Mineral.*, 8:115-127.
- WASSOJEWITSCH, N.B., KORTSCHAGINA, J.I., LOPATIN, N.W., TSCHERNYSCHEW, W.W. & TSCHERNIKOW, K.A. (1969): Die Hauptphase der Erdölbildung. - *Z. angew. Geol.*, 15:611-621.
- WATSON, E.B. & HARRISON, T.M. (1983): Zircon saturation revisited: temperature and composition effects in a variety of crustal magma types. - *Earth Planet. Sci. Lett.*, 64:295-304.
- WEAVER, C.E. (1960): Possible uses of clay minerals in search for oil. *Bull. Amer. Assoc. Petrol. Geol.*, - 44:1505-1518.
- WEAVER, C.E. & BROEKSTRA, B.R. (1984): Illite-mica. - In: *Shale-Slate Metamorphism in Southern Appalachians*. (eds Weaver, C.E. et al.), *Developments in Petrology*, 10:1441-152, Elsevier, Amsterdam.
- WEBER, K. (1972a): Kristallinität des Illits in Tonschiefern und andere Kriterien schwacher Metamorphose im nordöstlichen Rheinischen Schiefergebirge. - *N. Jb. Paläont. Abh.*, 141:3:333-363.
- WEBER, K. (1972b): Notes on determination of illite crystallinity. - *N. Jb. Min. Monatsh.*, 267-276.
- WEISE, G. (1972): Gneisgerölle in tiefoberdevonischen Konglomeraten des Vogtlandes und ihre paläogeographische Bedeutung. - *Geologie*, 21:69-83, Berlin.
- WILSON, A.J.C. (1965): Röntgenstrahl-Pulverdiffraktometrie - Mathematische Theorie. - 139 S., Philips Technische Bibliothek, Eindhoven.
- WURM, A. (1925): Geologie von Bayern. 1. Nordbayern, Fichtelgebirge, Frankenwald. - In: *Hdb. Bodenschätze Deutschlands*, II. Abt. 2. Bd., IX, 373 S., Borntraeger, Berlin.
- YANG, C. & HESSE, R. (1991): Clay minerals as indicators of diagenetic and anchimetamorphic grade in an overthrust belt, External Domain of southern Canadian Appalachians. - *Clay Minerals*, 26:211-231.

-
- YODER, H.S. & EUGSTER, H.P. (1955): Synthetic and natural muscovites. - *Geochi. Cosmochi. Acta*, 1955:8:225-280.

ANHANG**Tabellen:**

| | | |
|------------|---|-----------|
| Ia | „Frey“-Standards: Probenverzeichnis, RDA-Meßwerte zur Illit- und Chloritkristallinität | 2 |
| Ib | CIS-Standards: Probenverzeichnis, RDA-Meßwerte zur Illit- und Chloritkristallinität | 3 |
| II | Probenverzeichnis, Hoch- und Rechtswerte, stratigraphische Lage, Halbhöhenbreite des 10 Å-Illits, Paläotemperatur, Druckparameter, Vitrinitreflexionswerte. | 4 |
| III | Probenverzeichnis, Aufbereitungsart, Tonmineralverhältnis, 10 Å-Illit und 7 Å-Chlorit: Halbhöhenbreite, und deren Umrechnung in „Frey“- und CIS-Werte | 8 |
| IV | RDA-Meßwerte - 10 Å-Illit: Proben-Nr., Aufbereitungsart, Anzahl der Messungen, Halbhöhenbreite, Standardabweichung, Peaklage, Peakintensität, Integralbreite, BB1-Index, Esquevin-Index | 13 |
| V | RDA-Meßwerte - / Å-Chlorit: Proben-Nr., Aufbereitungsart, Anzahl der Messungen, Halbhöhenbreite, Standardabweichung, Peaklage, Peakintensität, Integralbreite, BB1-Index, Esquevin-Index | 18 |
| VI | RDA-Meßwerte - 14 Å-Chlorit: Proben-Nr., Aufbereitungsart, Anzahl der Messungen, Halbhöhenbreite, Standardabweichung, Peaklage, Peakintensität, Integralbreite, BB1-Index, Esquevin-Index | 23 |
| VII | Vitrinitreflexionsmessungen, RDA-Meßwerte für 5 Å-Illit und 4,26 Å Quarz | 28 |

| Proben Nummer | 10 Å - Illit - Peak | | | | | | | | | |
|---------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|--------|------------|-------------------------|-----------------------|------------|--------|
| | FWHM | FWHM | FWHM | FWHM | Meß- | | Integral- | Peak- | Peak- | Peak- |
| | AWI | Basel | Frankfurt | IGL | werte | s1 | Breite | Lage | Intensität | Fläche |
| | $\Delta^{\circ}2\theta$ | $\Delta^{\circ}2\theta$ | $\Delta^{\circ}2\theta$ | $\Delta^{\circ}2\theta$ | n | % | $\Delta^{\circ}2\theta$ | Å | Counts | Counts |
| ALL73-113 | 0,847 | 0,710 | 0,810 | 0,732 | 3 | 0,950 | 0,864 | 10,095 | 1328 | 114681 |
| G33 | 0,386 | 0,390 | 0,340 | 0,372 | 3 | 0,948 | 0,490 | 10,015 | 2138 | 104687 |
| G34 a | 0,379 | 0,420 | 0,350 | 0,350 | 3 | 0,925 | 0,464 | 10,015 | 2259 | 104709 |
| G34 b | - | - | - | 0,333 | 4 | 0,287 | 0,438 | 10,003 | 2258 | 98824 |
| G 36-6 | 0,641 | 0,550 | 0,560 | 0,505 | 3 | 0,575 | 0,632 | 10,118 | 2579 | 163063 |
| G36-21a | 0,478 | 0,470 | 0,420 | 0,453 | 3 | 0,460 | 0,571 | 10,049 | 1712 | 97703 |
| G36-21b | - | - | - | 0,414 | 4 | 0,497 | 0,530 | 10,000 | 1438 | 76243 |
| G36-35 a | 0,585 | 0,620 | 0,520 | 0,517 | 3 | 0,993 | 0,656 | 10,083 | 3220 | 211327 |
| G36-35 b | - | - | - | 0,475 | 4 | 1,634 | 0,617 | 10,072 | 3602 | 222106 |
| G37-1 a | 0,297 | 0,350 | 0,260 | 0,303 | 3 | 2,472 | 0,401 | 10,003 | 846 | 33936 |
| G37-1 b | - | - | - | 0,296 | 4 | 2,792 | 0,390 | 9,992 | 756 | 29454 |
| G37-7 | 0,755 | 0,700 | 0,610 | 0,570 | 3 | 1,457 | 0,701 | 10,152 | 1657 | 116139 |
| MF993 | 0,248 | 0,210 | 0,210 | 0,223 | 4 | 1,560 | 0,294 | 10,003 | 1600 | 47094 |
| MF996a | 0,236 | 0,190 | 0,210 | 0,207 | 3 | 1,004 | 0,285 | 0,000 | 2521 | 71897 |
| MF996 b | - | - | - | 0,226 | 4 | 3,330 | 0,298 | 0,000 | 2041 | 60916 |
| MF1030 | 0,347 | 0,310 | 0,320 | 0,321 | 4 | 1,174 | 0,416 | 10,037 | 2598 | 107974 |
| MF1031 a | 0,387 | 0,370 | 0,370 | 0,369 | 3 | 1,133 | 0,479 | 10,037 | 2595 | 124386 |
| MF1031 b | - | - | - | 0,395 | 4 | 2,509 | 0,360 | 10,037 | 2731 | 135535 |
| Proben Nummer | 7 Å - Chlorit- Peak | | | | | | | 5 Å - Illit - Peak | | |
| | FWHM | Meß- | | Integral- | Peak- | Peak- | Peak- | Peak- | Peak- | |
| | IGL | werte | s1 | Breite | Lage | Intensität | Fläche | Lage | Intensität | |
| | $\Delta^{\circ}2\theta$ | n | % | $\Delta^{\circ}2\theta$ | Å | Counts | Counts | Å | Counts | |
| ALL73-113 | 0,256 | 3 | 1,624 | 0,374 | 7,093 | 1491 | 55859 | 4,997 | 526 | |
| G33 | 0,233 | 3 | 0,899 | 0,302 | 7,093 | 1207 | 39010 | 4,986 | 1315 | |
| G34 a | 0,222 | 3 | 1,639 | 0,292 | 7,098 | 951 | 27100 | 4,986 | 1570 | |
| G34 b | 0,222 | 4 | 0,432 | 0,308 | 7,093 | 821 | 23807 | 4,983 | 1309 | |
| G 36-6 | 0,246 | 3 | 0,242 | 0,330 | 7,087 | 5349 | 170711 | 4,991 | 1535 | |
| G36-21a | 0,256 | 3 | 1,563 | 0,399 | 7,076 | 1035 | 37875 | 4,991 | 1032 | |
| G36-21b | 0,214 | 4 | 2,250 | 0,289 | 7,087 | 1257 | 34973 | 4,997 | 713 | |
| G36-35 a | 0,279 | 3 | 3,154 | 0,332 | 7,087 | 411 | 16170 | 5,005 | 1510 | |
| G36-35 b | 0,225 | 4 | 2,765 | 0,320 | 7,081 | 727 | 21472 | 5,003 | 1752 | |
| G37-1 a | 0,244 | 3 | 1,709 | 0,328 | 7,093 | 1485 | 46367 | 4,989 | 512 | |
| G37-1 b | 0,239 | 4 | 2,115 | 0,327 | 7,081 | 1380 | 43436 | 4,986 | 395 | |
| G37-7 | 0,235 | 3 | 0,426 | 0,326 | 7,087 | 3411 | 108454 | 4,994 | 797 | |
| MF993 | 0,205 | 4 | 2,463 | 0,268 | 7,087 | 1996 | 52845 | 4,994 | 755 | |
| MF996a | 0,206 | 3 | 2,427 | 0,277 | 7,098 | 519 | 14315 | 4,983 | 1012 | |
| MF996 b | 0,213 | 4 | 6,131 | 0,282 | 7,093 | 382 | 10280 | 4,994 | 764 | |
| MF1030 | 0,244 | 4 | 1,546 | 0,331 | 7,081 | 1830 | 59182 | 5,005 | 1231 | |
| MF1031 a | 0,265 | 3 | 0,582 | 0,322 | 7,093 | 1687 | 62915 | 4,997 | 1309 | |
| MF1031 b | 0,290 | 4 | 0,048 | 0,360 | 7,093 | 1209 | 43511 | 0,005 | 1110 | |
| Proben Nummer | 14 Å - Chlorit- Peak | | | | | | | 4,26 Å - Quarz - Peak | | |
| | FWHM | Meß- | | Integral- | Peak- | Peak- | Peak- | Peak- | Peak- | |
| | IGL | werte | s1 | Breite | Lage | Intensität | Fläche | Lage | Intensität | |
| | $\Delta^{\circ}2\theta$ | n | % | $\Delta^{\circ}2\theta$ | Å | Counts | Counts | Å | Counts | |
| ALL73-113 | 0,359 | 3 | 10,430 | 0,417 | 14,210 | 182 | 7593 | 4,261 | 699 | |
| G33 | 0,248 | 3 | 3,086 | 0,323 | 14,187 | 337 | 10900 | 4,261 | 269 | |
| G34 a | 0,216 | 3 | 3,645 | 0,283 | 14,210 | 256 | 7244 | 4,261 | 298 | |
| G34 b | 0,222 | 4 | 5,786 | 0,294 | 14,187 | 271 | 7973 | 4,261 | 276 | |
| G 36-6 | 0,254 | 3 | 3,816 | 0,328 | 14,165 | 976 | 32016 | 4,261 | 79 | |
| G36-21a | 0,268 | 3 | 3,911 | 0,329 | 14,210 | 158 | 5206 | 4,261 | 424 | |
| G36-21b | 0,244 | 4 | 4,687 | 0,293 | 14,165 | 243 | 7118 | 4,261 | 566 | |
| G36-35 a | 0,305 | 3 | 13,627 | 0,316 | 14,074 | 79 | 2494 | 4,261 | 137 | |
| G36-35 b | 0,226 | 4 | 11,951 | 0,290 | 14,119 | 128 | 3710 | 4,261 | 180 | |
| G37-1 a | 0,297 | 3 | 5,379 | 0,398 | 14,233 | 327 | 13027 | 4,261 | 174 | |
| G37-1 b | 0,281 | 4 | 5,983 | 0,362 | 14,187 | 339 | 12284 | 4,261 | 191 | |
| G37-7 | 0,272 | 3 | 2,407 | 0,354 | 14,187 | 597 | 21159 | 4,261 | 112 | |
| MF993 | 0,218 | 4 | 4,441 | 0,292 | 14,210 | 426 | 12431 | 4,261 | 97 | |
| MF996a | 0,234 | 3 | 5,604 | 0,300 | 14,210 | 128 | 3835 | 4,261 | 149 | |
| MF996 b | 0,235 | 4 | 17,124 | 0,293 | 14,187 | 110 | 3219 | 4,261 | 131 | |
| MF1030 | 0,256 | 4 | 2,987 | 0,330 | 14,142 | 407 | 13435 | 4,261 | 181 | |
| MF1031 a | 0,320 | 3 | 6,131 | 0,406 | 14,210 | 232 | 9420 | 4,261 | 90 | |
| MF1031 b | 0,347 | 4 | 7,485 | 0,496 | 14,165 | 194 | 7998 | 4,261 | 77 | |

| Proben- Nummer | Auf- bereitung | 10 Å - Illit - Peak | | | 7 Å - Chlorit - Peak | | |
|-------------------|-------------------|-------------------------|---------------|---------------------|-------------------------|---------------|---------------------|
| | | FWHM | Peak- Lage | Peak- Intensität | FWHM | Peak- Lage | Peak- Intensität |
| | | $\Delta^{\circ}2\Theta$ | Å | Counts | $\Delta^{\circ}2\Theta$ | Å | Counts |
| SW1a | H2O2 | 0,473 | 10,026 | 531 | 0,349 | 7,098 | 353 |
| SW1b | H2O2 | 0,467 | 10,026 | 535 | 0,347 | 7,115 | 357 |
| SW1-CIS | Warr | 0,630 | 10,146 | 533 | 0,340 | 7,131 | 326 |
| SW2a | H2O2 | 0,348 | 10,049 | 648 | 0,308 | 7,173 | 137 |
| SW2b | H2O2 | 0,367 | 10,037 | 638 | 0,329 | 7,167 | 130 |
| SW2-CIS | Warr | 0,470 | 10,101 | 627 | 0,300 | 7,198 | 104 |
| SW4a | H2O2 | 0,322 | 9,992 | 1356 | 0,283 | 7,081 | 1136 |
| SW4b | H2O2 | 0,328 | 9,981 | 1388 | 0,286 | 7,070 | 1176 |
| SW4-CIS | Warr | 0,380 | 10,081 | 853 | 0,320 | 7,124 | 616 |
| SW6a | H2O2 | 0,263 | 9,981 | 1100 | 0,251 | 7,065 | 1518 |
| SW6b | H2O2 | 0,265 | 10,003 | 1105 | 0,255 | 7,081 | 1513 |
| SW6c | US | 0,249 | 10,037 | 1182 | 0,249 | 7,093 | 1745 |
| SW6d | US | 0,252 | 10,026 | 1179 | 0,250 | 7,081 | 1748 |
| SW6-CIS | Warr | 0,250 | 10,082 | 585 | 0,250 | 7,106 | 886 |

Anhang: Tabelle II

| Probe-Nr. | Hochwert | Rechtswert | Stratigraphie | $\Delta^{\circ}2\Theta$ | ($^{\circ}\text{C}$) | 6d(33-1,060) | Rm % |
|-----------|----------|------------|---------------|-------------------------|------------------------|--------------|------|
| K2 | 558450 | 445755 | - | 0,380 | 195 | 8,99 | - |
| K3 | 559850 | 447800 | sCd2 | 0,296 | 250 | 9,00 | - |
| K5 | 558645 | 444327 | tCd1 | 0,241 | 290 | 8,99 | - |
| K6 | 558740 | 444093 | tCd1 | 0,260 | 275 | 8,99 | - |
| K7 | 559345 | 446535 | wCd2 | 0,190 | 335 | 8,99 | - |
| K8 | 558935 | 446360 | tCd1 | 0,198 | 325 | 8,99 | - |
| K9 | 558520 | 448340 | CT1 | 0,214 | 315 | 9,00 | - |
| K11 | 560220 | 450580 | wCd2 | 0,251 | 285 | 8,99 | - |
| K14 | 560720 | 450900 | fCd1 | 0,260 | 275 | 8,99 | - |
| K17 | 559480 | 446250 | fCd1 | 0,228 | 305 | 8,99 | - |
| K18 | 558640 | 448187 | kfCd1 | 0,202 | 320 | 8,99 | - |
| K19 | 558900 | 448600 | fCd1 | 0,196 | 335 | 8,99 | - |
| K20 | 560065 | 448212 | tCd1 | 0,235 | 300 | 9,00 | - |
| K21 | 559955 | 447685 | tCd1 | 0,230 | 300 | - | - |
| K22A15 | 560860 | 447510 | tCd1 | 0,229 | 300 | 9,01 | - |
| K22-50A | 558055 | 444490 | wCd2 | 0,322 | 235 | 8,99 | - |
| K23 | 558510 | 444670 | wCd2 | 0,307 | 245 | 9,02 | - |
| K24 | 559005 | 444500 | tCd1 | 0,286 | 260 | 8,99 | - |
| K25 | 559000 | 444300 | tCd1 | 0,228 | 300 | - | - |
| K26 | 559040 | 446965 | tCd1 | 0,209 | 320 | 8,99 | - |
| K27 | 558590 | 446760 | tCd1 | 0,217 | 315 | 9,00 | - |
| K28 | 558805 | 446415 | tCd1 | 0,213 | 315 | 9,01 | - |
| K29 | 559135 | 446300 | fCd1 | 0,194 | 335 | 9,00 | - |
| K30 | 559670 | 446620 | tCd1 | 0,224 | 305 | 8,99 | - |
| K31 | 559840 | 446315 | tCd1 | 0,209 | 320 | 9,00 | - |
| K32 | 559940 | 447280 | tCd1 | 0,206 | 325 | 9,01 | - |
| K33 | 560130 | 446890 | wCd2 | 0,250 | 285 | 8,99 | - |
| K34 | 560640 | 447535 | wCd2 | 0,221 | 310 | 8,99 | - |
| K35 | 560500 | 447410 | tCd1 | 0,227 | 305 | 8,99 | - |
| K36 | 560480 | 446300 | tCd1 | 0,250 | 285 | - | - |
| K37 | 560270 | 446210 | tCd1 | 0,224 | 305 | 9,00 | - |
| K39 | 558520 | 445415 | cug5 | 0,281 | 260 | 9,01 | - |
| K41a+b | 559480 | 446250 | fCd1 | 0,233 | 300 | 8,95 | - |
| K42-1 | 559480 | 446250 | fCd1 | 0,227 | 305 | - | - |
| K42-2 | 559480 | 446250 | fCd1 | 0,215 | 315 | 8,95 | - |
| K43 | 559480 | 446250 | fCd1 | 0,221 | 310 | 8,95 | - |
| K45a+b | 559480 | 446250 | fCd1 | 0,264 | 275 | 8,95 | - |
| K46 | 559480 | 446250 | fCd1 | 0,214 | 315 | 8,95 | - |
| K47 | 560255 | 446210 | tCd1 | 0,317 | 235 | 8,98 | - |
| K49 | 559305 | 447255 | tCd1 | 0,236 | 300 | 8,98 | - |
| K50 | 559470 | 447100 | tCd1 | 0,233 | 300 | 8,99 | - |
| K51 | 559420 | 446965 | tCd1 | 0,230 | 300 | 8,99 | - |
| K52 | 559510 | 446860 | tCd1 | 0,214 | 315 | 9,00 | - |
| K53 | 558555 | 446545 | wCd2 | 0,203 | 325 | 9,01 | - |
| K54 | 559070 | 447480 | tCd1 | 0,324 | 230 | 9,01 | - |
| K55 | 559170 | 445970 | fCd1 | 0,213 | 315 | 8,99 | - |
| K56 | 559560 | 446180 | fCd1 | 0,205 | 325 | 8,99 | - |
| K57 | 560110 | 445535 | tCd1 | 0,330 | 225 | 8,99 | - |
| K58-1 | 560375 | 445525 | tCd1 | 0,316 | 235 | 8,99 | - |
| K58-2 | 560330 | 445665 | tCd1 | 0,327 | 230 | - | - |
| K59 | 560376 | 446480 | tCd1 | 0,295 | 250 | 8,99 | - |

| Probe-Nr. | Hochwert | Rechtswert | Stratigraphie | $\Delta^{\circ}2\Theta$ | ($^{\circ}\text{C}$) | 6d(33-1,060) | Rm % |
|-----------|----------|------------|---------------|-------------------------|------------------------|--------------|------|
| K60 | 560010 | 446400 | tCd1 | 0,294 | 250 | 8,99 | - |
| K61 | 558970 | 448670 | fCd1 | 0,341 | 220 | 8,99 | - |
| K62-1 | 559205 | 448930 | fCd1 | 0,390 | 190 | 8,98 | - |
| K62-2 | 559205 | 448930 | fCd1 | 0,346 | 220 | - | - |
| K63 | 559202 | 449930 | tCd1 | 0,335 | 225 | 8,99 | - |
| K64 | 559900 | 449775 | tCd1 | 0,383 | 195 | 8,99 | - |
| K65 | 669700 | 450500 | tCd1 | 0,321 | 235 | - | - |
| K66 | 560704 | 446060 | tCd1 | 0,249 | 285 | 8,99 | - |
| K67 | 560800 | 446060 | tCd1 | 0,255 | 280 | 8,99 | - |
| K68 | 560475 | 446080 | tCd1 | 0,213 | 315 | 9,00 | - |
| K69 | 560460 | 446220 | tCd1 | 0,229 | 300 | 9,00 | - |
| K70 | 560470 | 445680 | tCd1 | 0,233 | 300 | 8,99 | - |
| K71 | 560170 | 445750 | tCd1 | 0,244 | 290 | 8,99 | - |
| K72 | 560010 | 445670 | tCd1 | 0,274 | 265 | 8,99 | - |
| K73 | 560885 | 446660 | tCd1 | 0,250 | 285 | 8,97 | - |
| K74 | 560730 | 446645 | tCd1 | 0,207 | 325 | 8,99 | - |
| K75 | 560775 | 446770 | tCd1 | 0,227 | 305 | 8,93 | - |
| K76 | 560755 | 446900 | tCd1 | 0,228 | 300 | 8,95 | - |
| K77 | 560550 | 447110 | wCd2 | 0,228 | 300 | 9,00 | - |
| K78-1 | 560650 | 446600 | tCd1 | 0,213 | 315 | 9,00 | - |
| K78-2 | 560650 | 446600 | tCd1 | 0,215 | 315 | 9,00 | - |
| K79 | 560735 | 446520 | tCd1 | 0,204 | 325 | 8,94 | - |
| K80 | 560770 | 446410 | wCd2 | 0,224 | 305 | 8,97 | - |
| K81 | 560910 | 446425 | tCd1 | 0,213 | 315 | 8,97 | - |
| K82 | 560900 | 446035 | tCd1 | 0,206 | 325 | 8,97 | - |
| K83 | 560965 | 446810 | tCd1 | 0,209 | 320 | 8,94 | - |
| K84 | 560940 | 447160 | wCd2 | 0,241 | 290 | 8,99 | - |
| K85 | 560990 | 447180 | tCd1 | 0,223 | 310 | 8,99 | - |
| K86 | 560970 | 447220 | tCd1 | 0,226 | 305 | 8,99 | - |
| K87 | 561210 | 447810 | wCd2 | 0,238 | 295 | 8,99 | - |
| K88 | 561340 | 448010 | tCd1 | 0,248 | 285 | 9,00 | - |
| K89 | 560990 | 448270 | tCd1 | 0,254 | 280 | 9,03 | - |
| K90 | 560830 | 448070 | tCd1 | 0,274 | 265 | 8,97 | - |
| K91 | 560830 | 447565 | wCd2 | 0,246 | 290 | 8,97 | - |
| K92 | 562560 | 450415 | tCd1 | 0,224 | 305 | 9,00 | - |
| K93 | 562485 | 450315 | wCd2 | 0,255 | 280 | 9,00 | - |
| K94 | 562410 | 449830 | wCd2 | 0,236 | 300 | 9,00 | - |
| K95 | 561365 | 449480 | tCd1 | 0,243 | 290 | 8,99 | - |
| K96 | 561045 | 449430 | tCd1 | 0,326 | 230 | 8,99 | - |
| K97 | 560895 | 448530 | tCd1 | 0,304 | 245 | 9,01 | - |
| K98 | 561410 | 448080 | tCd1 | 0,228 | 300 | 9,00 | - |
| K99 | 561200 | 448040 | wCd2 | 0,309 | 240 | 9,00 | - |
| K100 | 561240 | 447910 | wCd2 | 0,246 | 290 | 8,99 | - |
| K101 | 561540 | 448735 | wCd2 | 0,243 | 290 | 9,00 | - |
| K102 | 561750 | 449815 | tCd1 | 0,299 | 245 | 8,99 | - |
| K103 | 561375 | 451395 | tCd1 | 0,190 | 335 | 8,99 | - |
| K104 | 561480 | 451860 | tCd1 | 0,237 | 300 | 8,99 | - |
| K105 | 560980 | 451240 | tCd1 | 0,263 | 275 | 8,99 | - |
| K106 | 560775 | 451120 | tCd1 | 0,199 | 325 | 8,99 | - |
| K108 | 560990 | 450880 | tCd1 | 0,304 | 245 | 8,99 | - |
| K109 | 560600 | 450980 | tCd1 | 0,236 | 300 | - | - |

Anhang: Tabelle II

6

| Probe-Nr. | Hochwert | Rechtswert | Stratigraphie | $\Delta^2\Theta$ | (°C) | 6d(33-1,060) | Rm % |
|-----------|----------|------------|---------------|------------------|------|--------------|------|
| K110 | 560600 | 450780 | tCd1 | 0,287 | 260 | - | - |
| K111 | 559920 | 450200 | tCd1 | 0,232 | 300 | 9,00 | - |
| K112 | 559770 | 449610 | tCd1 | 0,309 | 240 | 8,99 | - |
| K117 | 559950 | 446310 | tCd1 | 0,232 | 300 | 8,99 | - |
| K118 | 559970 | 445920 | tCd1 | 0,233 | 300 | 8,99 | - |
| FR 039 | 558460 | 448210 | cu1d | 0,270 | 270 | - | - |
| FR 040 | 558460 | 448210 | cu1d | 0,287 | 260 | 8,99 | 4,0 |
| FR 041 | 558470 | 448170 | cu1dt | 0,253 | 280 | 8,93 | 4,2 |
| FR 042 | 558245 | 448040 | cu1d | 0,274 | 265 | 8,99 | 4,1 |
| FR 043 | 557990 | 447790 | cu1d | 0,283 | 260 | 8,98 | 5,0 |
| FR 044 | 557880 | 447685 | cu3 | 0,347 | 215 | 9,00 | - |
| FR 045 | 557950 | 447920 | cu3 | 0,252 | 285 | - | 4,9 |
| FR 046 | 557805 | 447930 | cu4 | 0,235 | 300 | 9,01 | 4,4 |
| FR 047 | 557710 | 447865 | cu4 | 0,214 | 315 | 8,99 | 5,3 |
| FR 101 | 557745 | 447515 | tot | 0,349 | 215 | 9,04 | 3,7 |
| FR 102 | 557725 | 447285 | cutb | 0,244 | 290 | - | 5,2 |
| FR 103 | 557600 | 447280 | cu3g | 0,328 | 225 | 9,01 | 4,7 |
| FR 104 | 557363 | 447100 | cuWq | 0,410 | 180 | 8,98 | 4,8 |
| FR 105 | 557255 | 446860 | cu2tb | 0,354 | 210 | 8,99 | 5,4 |
| FR 106 | 557345 | 446668 | cutb3 | 0,434 | 170 | 8,98 | 5,2 |
| FR 107 | 557665 | 446605 | cu2tg | 0,379 | 195 | 8,99 | 4,2 |
| FR 108 | 557690 | 446430 | cucw | 0,346 | 215 | 9,01 | 5,4 |
| FR 109 | 558005 | 446525 | cu | 0,292 | 255 | 9,01 | 5,5 |
| FR 110 | 558025 | 446825 | cu3tb | 0,258 | 280 | 9,02 | 5,0 |
| FR 111 | 558200 | 446575 | cu2tb | 0,237 | 295 | 9,02 | 7,3 |
| FR 112 | 558400 | 446400 | cutb3 | 0,235 | 295 | 9,01 | 6,2 |
| FR 113 | 558550 | 446220 | cutb3 | 0,257 | 280 | 9,00 | 5,2 |
| FR 114 | 558475 | 445995 | cutb3 | 0,237 | 295 | 9,00 | 5,6 |
| FR 115 | 558435 | 445775 | cutg4 | 0,286 | 255 | 9,00 | 5,4 |
| FR 116 | 558763 | 445933 | cutg4 | 0,228 | 305 | 9,01 | 5,4 |
| FR 117 | 559370 | 445705 | cug5 | 0,192 | 335 | 9,01 | 5,7 |
| FR 118 | 559175 | 445570 | cut5 | 0,213 | 315 | 8,99 | 6,9 |
| FR 119 | 559070 | 445560 | cut5 | 0,234 | 300 | 9,00 | - |
| FR 120 | 558795 | 445450 | cug5 | 0,276 | 265 | 9,02 | 4,7 |
| FR 122 | 558370 | 445355 | cut5 | 0,386 | 195 | 9,01 | 2,9 |
| FR 123 | 558375 | 445685 | cutg5 | 0,281 | 260 | 9,02 | 3,4 |
| FR 124 | 558090 | 445405 | cug5 | 0,410 | 180 | 9,01 | 2,8 |
| FR 125 | 557685 | 445395 | cuwq | 0,344 | 220 | 9,01 | 2,4 |
| FR 126 | 557460 | 445430 | cug4 | 0,349 | 215 | 9,01 | 2,9 |
| FR 127 | 558085 | 445780 | cutb3 | 0,341 | 220 | 9,00 | 4,3 |
| FR 128 | 557635 | 445575 | cug4 | 0,392 | 190 | 9,02 | 2,8 |
| FR 129 | 556980 | 446600 | cutb2 | 0,318 | 235 | 8,99 | 5,1 |
| FR 129a | 556980 | 446600 | cutb2 | 0,307 | 240 | - | 5,2 |
| FR 130 | 557000 | 446330 | cuwqt | 0,455 | 160 | 8,99 | 4,7 |
| FR 131 | 556975 | 445995 | cutb3 | 0,309 | 240 | 8,99 | 5,1 |
| FR 132-1 | 557160 | 446140 | cutb3 | 0,311 | 240 | - | 4,7 |
| FR132-2 | 557160 | 446140 | cutb3 | 0,303 | 245 | 8,99 | - |
| FR 133 | 557420 | 446340 | cutg2 | 0,473 | 150 | 8,99 | - |
| FR 134 | 557485 | 446075 | cuwq | 0,346 | 215 | 9,02 | 4,5 |
| FR 135 | 557760 | 446175 | cugw | 0,311 | 240 | 9,02 | 5,5 |
| FR 136 | 558020 | 446255 | cuwg | 0,272 | 270 | 9,00 | 5,0 |

Anhang: Tabelle II

7

| Probe-Nr. | Hochwert | Rechtswert | Stratigraphie | $\Delta^{\circ}2\Theta$ | ($^{\circ}\text{C}$) | 6d(33-1,060) | Rm % |
|-----------|----------|------------|---------------|-------------------------|------------------------|--------------|------|
| FR 137 | 558263 | 446035 | cutb3 | 0,314 | 235 | 9,01 | 5,8 |
| FR 138 | 557930 | 446010 | cutb3 | 0,302 | 245 | 9,00 | 5,2 |
| FR 139 | 557770 | 445820 | cuwq | 0,306 | 245 | 8,99 | 3,1 |
| FR 141 | 557540 | 445695 | cutb3 | 0,367 | 205 | 9,00 | - |
| FR 142 | 557240 | 445475 | cutb2 | 0,301 | 245 | 9,00 | 5,5 |
| FR 144 | 557345 | 445800 | cutb3 | 0,319 | 235 | 9,01 | 5,1 |
| FR 145 | 557160 | 445905 | cutb3 | 0,297 | 250 | 9,01 | 5,1 |
| FR 146 | 557550 | 446765 | cu3tb | 0,290 | 255 | 8,99 | 5,1 |
| FR 147 | 557225 | 446495 | cutb3 | 0,420 | 175 | 8,98 | 4,6 |
| FR 158 | 558320 | 448970 | og1 | 0,283 | 260 | 8,98 | - |
| FR 159 | 558501 | 448375 | cu | 0,226 | 305 | 8,99 | 9,1 |
| FR 160 | 558561 | 448353 | cu | 0,229 | 300 | 8,99 | 7,0 |
| FR 161 | 558537 | 448293 | CT1 | 0,395 | 190 | 9,00 | - |
| FR 162 | 557950 | 448220 | cu4 | 0,267 | 270 | 9,01 | 5,3 |
| FR 163 | 557790 | 447875 | cu4 | 0,268 | 270 | 9,00 | 3,6 |
| FR 176 | 556875 | 446490 | CUWq | 0,321 | 235 | 8,99 | 3,7 |
| FR 177 | 558495 | 444810 | cug5 | 0,346 | 215 | 9,01 | 3,1 |
| FR 178 | 558660 | 444870 | cutg5 | 0,356 | 210 | 9,01 | - |
| FR 179 | 558833 | 444810 | cutg4 | 0,319 | 235 | 9,01 | - |
| FR 180 | 559010 | 444780 | cutb3 | 0,279 | 260 | 9,00 | 5,6 |
| FR 181 | 559345 | 444735 | cutg2 | 0,252 | 285 | 8,99 | 6,6 |
| FR 182 | 559285 | 445050 | cuWqg | 0,293 | 250 | 8,99 | - |
| FR 183 | 559150 | 445125 | cug5 | 0,277 | 265 | 8,99 | 5,2 |
| FR 184 | 558795 | 445120 | cug5 | 0,367 | 205 | 9,02 | 4,1 |
| FR 185 | 558520 | 445125 | cutg5 | 0,374 | 200 | 9,01 | 3,7 |
| FR 189 | 558760 | 446220 | cuwqg | 0,288 | 255 | 8,99 | 5,7 |
| FR 190 | 559260 | 445850 | cutg5 | 0,365 | 205 | 9,00 | 5,1 |
| FR 191 | 559157 | 445880 | cutg4 | 0,289 | 255 | 9,00 | 4,8 |
| FR 192a | 559265 | 445355 | cutg5 | 0,280 | 260 | 8,99 | 5,3 |
| FR 192b | 559265 | 445355 | cutg5 | 0,436 | 170 | - | - |
| FR 193 | 558345 | 445175 | cug5 | 0,449 | 165 | 9,01 | 3,3 |
| FR 194 | 558200 | 445145 | - | 0,439 | 165 | - | - |
| FR 195 | 557915 | 445025 | - | 0,516 | 135 | 9,01 | 3,3 |
| FR 196 | 557660 | 445075 | cutg5 | 0,368 | 205 | 9,01 | 2,8 |
| FR 197 | 557485 | 445175 | cutb3 | 0,433 | 170 | 8,99 | 2,8 |

| Probe-Nr. | Auf- bereitung | Illit/Chlorit Verhältnis (Illit %) | 10 Å- | | | 7 Å- | | |
|-----------|-------------------|--|--------------------------------|--|--|--------------------------------|--|--|
| | | | CIS $\Delta^{\circ}2\theta$ | Illit Frey $\Delta^{\circ}2\theta$ | (FWHM) Meßwert $\Delta^{\circ}2\theta$ | CIS $\Delta^{\circ}2\theta$ | Chlorit Frey $\Delta^{\circ}2\theta$ | (FWHM) Meßwert $\Delta^{\circ}2\theta$ |
| K2 | US | 65 | 0.480 | 0.380 | 0.380 | 0.295 | 0.294 | 0.294 |
| K2 | H2O2 | 68 | 0.431 | 0.353 | 0.383 | 0.272 | 0.267 | 0.298 |
| K3 | NADA | 69 | 0.320 | 0.291 | 0.291 | 0.262 | 0.255 | 0.255 |
| K3 | US | 69 | 0.329 | 0.296 | 0.296 | 0.241 | 0.230 | 0.230 |
| K3 | H2O2 | 74 | 0.330 | 0.297 | 0.321 | 0.238 | 0.226 | 0.247 |
| K5 | NADA | 73 | 0.217 | 0.234 | 0.234 | 0.225 | 0.210 | 0.210 |
| K5 | US | 72 | 0.229 | 0.241 | 0.241 | 0.231 | 0.217 | 0.217 |
| K5 | H2O2 | 76 | 0.267 | 0.262 | 0.282 | 0.244 | 0.233 | 0.256 |
| K6 | NADA | 72 | 0.262 | 0.259 | 0.259 | 0.262 | 0.255 | 0.255 |
| K6 | US | 77 | 0.264 | 0.260 | 0.260 | 0.231 | 0.217 | 0.217 |
| K6 | H2O2 | 80 | 0.243 | 0.248 | 0.267 | 0.225 | 0.210 | 0.228 |
| K7 | NADA | 61 | 0.291 | 0.275 | 0.275 | 0.269 | 0.263 | 0.263 |
| K7 | US | 66 | 0.137 | 0.190 | 0.190 | 0.203 | 0.184 | 0.184 |
| K7 | H2O2 | 70 | 0.145 | 0.194 | 0.207 | 0.206 | 0.188 | 0.200 |
| K8 | NADA | 67 | 0.136 | 0.189 | 0.189 | 0.211 | 0.194 | 0.194 |
| K8 | US | 69 | 0.152 | 0.198 | 0.198 | 0.217 | 0.201 | 0.201 |
| K8 | H2O2 | 67 | 0.139 | 0.191 | 0.203 | 0.216 | 0.200 | 0.215 |
| K9 | US | 60 | 0.181 | 0.214 | 0.214 | 0.263 | 0.256 | 0.256 |
| K9 | H2O2 | 58 | 0.155 | 0.200 | 0.213 | 0.263 | 0.256 | 0.285 |
| K11 | H2O2 | 59 | 0.247 | 0.251 | 0.270 | 0.237 | 0.225 | 0.246 |
| K14 | NADA | 49 | 0.264 | 0.260 | 0.260 | 0.210 | 0.192 | 0.192 |
| K14 | US | 47 | 0.264 | 0.260 | 0.260 | 0.214 | 0.197 | 0.197 |
| K14 | H2O2 | 61 | 0.285 | 0.272 | 0.293 | 0.211 | 0.194 | 0.207 |
| K17 | NADA | 53 | 0.209 | 0.230 | 0.230 | 0.222 | 0.207 | 0.207 |
| K17 | NADA II | 60 | 0.199 | 0.224 | 0.224 | 0.209 | 0.191 | 0.191 |
| K17 | NADA III | 59 | 0.219 | 0.235 | 0.235 | 0.221 | 0.206 | 0.206 |
| K17 | NADA IV | 56 | 0.188 | 0.218 | 0.218 | 0.206 | 0.187 | 0.187 |
| K17 | NADA V | 59 | 0.181 | 0.214 | 0.214 | 0.199 | 0.179 | 0.179 |
| K17 | NADA VI | 58 | 0.191 | 0.220 | 0.220 | 0.210 | 0.192 | 0.192 |
| K17 | US | 54 | 0.265 | 0.261 | 0.261 | 0.251 | 0.242 | 0.242 |
| K17 | US II | 65 | 0.206 | 0.228 | 0.228 | 0.213 | 0.196 | 0.196 |
| K17 | US ii | 63 | 0.213 | 0.232 | 0.232 | 0.217 | 0.201 | 0.201 |
| K17 | US III | 63 | 0.226 | 0.239 | 0.239 | 0.224 | 0.209 | 0.209 |
| K17 | US iii | 60 | 0.211 | 0.231 | 0.231 | 0.218 | 0.202 | 0.202 |
| K17 | US IV | 66 | 0.208 | 0.229 | 0.229 | 0.211 | 0.193 | 0.193 |
| K17 | US iv | 58 | 0.206 | 0.228 | 0.228 | 0.218 | 0.202 | 0.202 |
| K17 | US V | 65 | 0.213 | 0.232 | 0.232 | 0.214 | 0.197 | 0.197 |
| K17 | US v | 61 | 0.217 | 0.234 | 0.234 | 0.217 | 0.201 | 0.201 |
| K17 | US VI | 65 | 0.273 | 0.265 | 0.265 | 0.244 | 0.233 | 0.233 |
| K17 | H2O2 | 61 | 0.184 | 0.216 | 0.231 | 0.209 | 0.191 | 0.204 |
| K18 | US | 82 | 0.155 | 0.200 | 0.200 | 0.620 | 0.684 | 0.684 |
| K18 | H2O2 | 84 | 0.160 | 0.202 | 0.216 | 0.642 | 0.710 | 0.852 |
| K19 | US | 69 | 0.148 | 0.196 | 0.196 | 0.205 | 0.186 | 0.186 |
| K19 | H2O2 | 69 | 0.260 | 0.258 | 0.278 | 0.260 | 0.253 | 0.281 |
| K20 | NADA | 63 | 0.219 | 0.235 | 0.235 | 0.217 | 0.201 | 0.201 |
| K20 | US | 63 | 0.219 | 0.235 | 0.235 | 0.212 | 0.195 | 0.195 |
| K20 | H2O2 | 71 | 0.257 | 0.256 | 0.276 | 0.222 | 0.207 | 0.224 |
| K21 | NADA | 45 | 0.193 | 0.221 | 0.221 | 0.216 | 0.199 | 0.199 |
| K21 | US | 51 | 0.209 | 0.230 | 0.230 | 0.223 | 0.208 | 0.208 |
| K21 | H2O2 | 50 | 0.200 | 0.225 | 0.241 | 0.214 | 0.197 | 0.211 |
| K22A15 | US | 74 | 0.208 | 0.229 | 0.229 | 0.265 | 0.258 | 0.258 |
| K22A15 | H2O2 | 76 | 0.406 | 0.339 | 0.339 | 0.335 | 0.342 | 0.342 |
| K22-50A | US | 73 | 0.375 | 0.322 | 0.322 | 0.214 | 0.197 | 0.197 |
| K22-50A | H2O2 | 79 | 0.476 | 0.378 | 0.411 | 0.283 | 0.280 | 0.315 |
| K23 | US | 63 | 0.348 | 0.307 | 0.307 | 0.259 | 0.251 | 0.251 |
| K23 | H2O2 | 59 | 0.423 | 0.348 | 0.378 | 0.288 | 0.286 | 0.322 |
| K24 | H2O2 | 76 | 0.311 | 0.286 | 0.309 | 0.226 | 0.212 | 0.230 |
| K25 | H2O2 | 85 | 0.205 | 0.228 | 0.244 | 0.215 | 0.198 | 0.213 |
| K26 | NADA | 65 | 0.173 | 0.210 | 0.210 | 0.213 | 0.196 | 0.196 |

| Probe-Nr. | Auf- bereitung | Illit/Chlorit Verhältnis (Illit %) | 10 Å- | | | 7 Å- | | |
|-----------|-------------------|--|--------------------------------|--|--|--------------------------------|--|--|
| | | | CIS $\Delta^{\circ}2\theta$ | Illit Frey $\Delta^{\circ}2\theta$ | (FWHM) Meßwert $\Delta^{\circ}2\theta$ | CIS $\Delta^{\circ}2\theta$ | Chlorit Frey $\Delta^{\circ}2\theta$ | (FWHM) Meßwert $\Delta^{\circ}2\theta$ |
| K26 | US | 69 | 0.172 | 0.209 | 0.209 | 0.213 | 0.196 | 0.196 |
| K26 | H2O2 | 70 | 0.226 | 0.239 | 0.257 | 0.235 | 0.222 | 0.243 |
| K27 | NADA | 63 | 0.181 | 0.214 | 0.214 | 0.217 | 0.201 | 0.201 |
| K27 | US | 67 | 0.186 | 0.217 | 0.217 | 0.217 | 0.201 | 0.201 |
| K27 | H2O2 | 63 | 0.145 | 0.194 | 0.207 | 0.202 | 0.182 | 0.193 |
| K28 | NADA | 83 | 0.161 | 0.203 | 0.203 | 0.231 | 0.218 | 0.218 |
| K28 | US | 82 | 0.179 | 0.213 | 0.213 | 0.235 | 0.222 | 0.222 |
| K28 | H2O2 | 80 | 0.181 | 0.214 | 0.229 | 0.243 | 0.232 | 0.255 |
| K29 | NADA | 78 | 0.136 | 0.189 | 0.189 | 0.202 | 0.183 | 0.183 |
| K29 | US | 78 | 0.145 | 0.194 | 0.194 | 0.211 | 0.194 | 0.194 |
| K29 | H2O2 | 64 | 0.155 | 0.200 | 0.213 | 0.220 | 0.204 | 0.220 |
| K30 | US | 58 | 0.199 | 0.224 | 0.224 | 0.220 | 0.204 | 0.204 |
| K30 | H2O2 | 72 | 0.277 | 0.267 | 0.288 | 0.258 | 0.250 | 0.277 |
| K31 | NADA | 76 | 0.152 | 0.198 | 0.198 | 0.157 | 0.129 | 0.129 |
| K31 | US | 71 | 0.172 | 0.209 | 0.209 | 0.215 | 0.198 | 0.198 |
| K31 | H2O2 | 75 | 0.163 | 0.204 | 0.218 | 0.213 | 0.196 | 0.210 |
| K32 | H2O2 | 69 | 0.166 | 0.206 | 0.220 | 0.214 | 0.198 | 0.212 |
| K33 | H2O2 | 73 | 0.246 | 0.250 | 0.250 | 0.229 | 0.215 | 0.215 |
| K34 | NADA | 60 | 0.213 | 0.232 | 0.232 | 0.237 | 0.225 | 0.225 |
| K34 | US | 60 | 0.193 | 0.221 | 0.221 | 0.228 | 0.214 | 0.214 |
| K34 | H2O2 | 63 | 0.199 | 0.224 | 0.240 | 0.223 | 0.208 | 0.225 |
| K35 | H2O2 | 70 | 0.204 | 0.227 | 0.243 | 0.219 | 0.203 | 0.219 |
| K36 | US | 84 | 0.246 | 0.250 | 0.250 | 0.229 | 0.215 | 0.215 |
| K37 | NADA | 73 | 0.186 | 0.217 | 0.217 | 0.216 | 0.199 | 0.199 |
| K37 | US | 71 | 0.199 | 0.224 | 0.224 | 0.223 | 0.208 | 0.208 |
| K37 | H2O2 | 76 | 0.212 | 0.231 | 0.248 | 0.228 | 0.214 | 0.233 |
| K39 | NADA | 68 | 0.301 | 0.281 | 0.281 | 0.215 | 0.198 | 0.198 |
| K41a+b | NADA | 67 | 0.215 | 0.233 | 0.233 | 0.215 | 0.198 | 0.198 |
| K42-1 | NADA | 62 | 0.204 | 0.227 | 0.227 | 0.209 | 0.191 | 0.191 |
| K42-2 | NADA | 63 | 0.182 | 0.215 | 0.215 | 0.206 | 0.187 | 0.187 |
| K43 | NADA | 68 | 0.193 | 0.221 | 0.221 | 0.207 | 0.189 | 0.189 |
| K45a+b | NADA | 65 | 0.271 | 0.264 | 0.264 | 0.219 | 0.203 | 0.203 |
| K46 | NADA | 60 | 0.181 | 0.214 | 0.214 | 0.200 | 0.180 | 0.180 |
| K47 | NADA | 87 | 0.366 | 0.317 | 0.317 | 0.213 | 0.196 | 0.196 |
| K49 | NADA | 61 | 0.220 | 0.236 | 0.236 | 0.219 | 0.203 | 0.203 |
| K50 | NADA | 67 | 0.215 | 0.233 | 0.233 | 0.219 | 0.203 | 0.203 |
| K51 | NADA | 63 | 0.209 | 0.230 | 0.230 | 0.226 | 0.212 | 0.212 |
| K52 | NADA | 70 | 0.181 | 0.214 | 0.214 | 0.211 | 0.193 | 0.193 |
| K53 | NADA | 58 | 0.161 | 0.203 | 0.203 | 0.208 | 0.190 | 0.190 |
| K54 | NADA | 68 | 0.379 | 0.324 | 0.324 | 0.326 | 0.331 | 0.331 |
| K55 | NADA | 60 | 0.179 | 0.213 | 0.213 | 0.201 | 0.181 | 0.181 |
| K56 | NADA | 57 | 0.164 | 0.205 | 0.205 | 0.215 | 0.198 | 0.198 |
| K57 | US | 67 | 0.390 | 0.330 | 0.330 | 0.283 | 0.280 | 0.280 |
| K58-1 | US | 81 | 0.365 | 0.316 | 0.316 | 0.268 | 0.262 | 0.262 |
| K58-2 | US | 70 | 0.384 | 0.327 | 0.327 | 0.265 | 0.258 | 0.258 |
| K59 | US | 74 | 0.327 | 0.295 | 0.295 | 0.282 | 0.279 | 0.279 |
| K60 | US | 74 | 0.325 | 0.294 | 0.294 | 0.278 | 0.274 | 0.274 |
| K61 | US | 62 | 0.410 | 0.341 | 0.341 | 0.269 | 0.263 | 0.263 |
| K62-1 | US | 66 | 0.498 | 0.390 | 0.390 | 0.284 | 0.281 | 0.281 |
| K62-2 | US | 57 | 0.419 | 0.346 | 0.346 | 0.270 | 0.264 | 0.264 |
| K63 | US | 73 | 0.399 | 0.335 | 0.335 | 0.320 | 0.324 | 0.324 |
| K64 | US | 82 | 0.485 | 0.383 | 0.383 | 0.284 | 0.281 | 0.281 |
| K65 | US | 83 | 0.374 | 0.321 | 0.321 | 0.303 | 0.304 | 0.304 |
| K66 | US | 80 | 0.244 | 0.249 | 0.249 | 0.243 | 0.232 | 0.232 |
| K67 | US | 74 | 0.255 | 0.255 | 0.255 | 0.246 | 0.236 | 0.236 |
| K68 | US | 35 | 0.179 | 0.213 | 0.213 | 0.241 | 0.230 | 0.230 |
| K69 | US | 80 | 0.208 | 0.229 | 0.229 | 0.223 | 0.208 | 0.208 |
| K70 | US | 64 | 0.215 | 0.233 | 0.233 | 0.188 | 0.166 | 0.166 |
| K71 | US | 73 | 0.235 | 0.244 | 0.244 | 0.208 | 0.190 | 0.190 |

| Probe-Nr. | Auf- bereitung | Illit/Chlorit Verhältnis (Illit %) | 10 Å- | | | 7 Å- | | |
|-----------|-------------------|--|--------------------------------|--|--|--------------------------------|--|--|
| | | | CIS $\Delta^{\circ}2\theta$ | Illit Frey $\Delta^{\circ}2\theta$ | (FWHM) Meßwert $\Delta^{\circ}2\theta$ | CIS $\Delta^{\circ}2\theta$ | Chlorit Frey $\Delta^{\circ}2\theta$ | (FWHM) Meßwert $\Delta^{\circ}2\theta$ |
| K72 | US | 86 | 0.289 | 0.274 | 0.274 | 0.222 | 0.207 | 0.207 |
| K73 | US | 92 | 0.246 | 0.250 | 0.250 | 0.246 | 0.235 | 0.235 |
| K74 | US | 79 | 0.168 | 0.207 | 0.207 | 0.213 | 0.196 | 0.196 |
| K75 | US | 85 | 0.204 | 0.227 | 0.227 | 0.231 | 0.218 | 0.218 |
| K76 | US | 73 | 0.206 | 0.228 | 0.228 | 0.235 | 0.222 | 0.222 |
| K77 | US | 70 | 0.206 | 0.228 | 0.228 | 0.211 | 0.193 | 0.193 |
| K78-1 | US | 70 | 0.179 | 0.213 | 0.213 | 0.216 | 0.200 | 0.200 |
| K78-2 | US | 83 | 0.182 | 0.215 | 0.215 | 0.214 | 0.197 | 0.197 |
| K79 | US | 79 | 0.163 | 0.204 | 0.204 | 0.210 | 0.192 | 0.192 |
| K80 | US | 88 | 0.199 | 0.224 | 0.224 | 0.231 | 0.217 | 0.217 |
| K81 | US | 79 | 0.179 | 0.213 | 0.213 | 0.224 | 0.209 | 0.209 |
| K82 | US | 79 | 0.166 | 0.206 | 0.206 | 0.210 | 0.192 | 0.192 |
| K83 | US | 76 | 0.172 | 0.209 | 0.209 | 0.214 | 0.197 | 0.197 |
| K84 | US | 70 | 0.229 | 0.241 | 0.241 | 0.229 | 0.215 | 0.215 |
| K85 | US | 72 | 0.197 | 0.223 | 0.223 | 0.219 | 0.203 | 0.203 |
| K86 | US | 66 | 0.202 | 0.226 | 0.226 | 0.214 | 0.197 | 0.197 |
| K87 | US | 77 | 0.224 | 0.238 | 0.238 | 0.326 | 0.332 | 0.332 |
| K88 | US | 69 | 0.242 | 0.248 | 0.248 | 0.260 | 0.252 | 0.252 |
| K89 | US | 39 | 0.253 | 0.254 | 0.254 | 0.224 | 0.209 | 0.209 |
| K90 | US | 79 | 0.289 | 0.274 | 0.274 | 0.269 | 0.263 | 0.263 |
| K91 | US | 79 | 0.238 | 0.246 | 0.246 | 0.245 | 0.234 | 0.234 |
| K92 | US | 75 | 0.199 | 0.224 | 0.224 | 0.285 | 0.282 | 0.282 |
| K93 | US | 68 | 0.255 | 0.255 | 0.255 | 0.223 | 0.208 | 0.208 |
| K94a | US | 81 | 0.220 | 0.236 | 0.236 | 0.223 | 0.208 | 0.208 |
| K95 | US | 61 | 0.233 | 0.243 | 0.243 | 0.200 | 0.180 | 0.180 |
| K96 | US | 63 | 0.383 | 0.326 | 0.326 | 0.274 | 0.269 | 0.269 |
| K97 | US | 82 | 0.343 | 0.304 | 0.304 | 0.296 | 0.295 | 0.295 |
| K98 | US | 73 | 0.206 | 0.228 | 0.228 | 0.234 | 0.221 | 0.221 |
| K99 | US | 78 | 0.352 | 0.309 | 0.309 | 0.272 | 0.267 | 0.267 |
| K100 | US | 64 | 0.238 | 0.246 | 0.246 | 0.231 | 0.218 | 0.218 |
| K101 | US | 75 | 0.233 | 0.243 | 0.243 | 0.216 | 0.200 | 0.200 |
| K102 | US | 87 | 0.334 | 0.299 | 0.299 | 0.219 | 0.203 | 0.203 |
| K103 | US | 79 | 0.137 | 0.190 | 0.190 | 0.219 | 0.203 | 0.203 |
| K104 | US | 72 | 0.222 | 0.237 | 0.237 | 0.210 | 0.192 | 0.192 |
| K105 | US | 73 | 0.269 | 0.263 | 0.263 | 0.201 | 0.181 | 0.181 |
| K106a | US | 56 | 0.154 | 0.199 | 0.199 | 0.190 | 0.168 | 0.168 |
| K106b | US | 55 | 0.177 | 0.212 | 0.212 | 0.196 | 0.176 | 0.176 |
| K108 | US | 77 | 0.343 | 0.304 | 0.304 | 0.215 | 0.198 | 0.198 |
| K109 | US | 71 | 0.220 | 0.236 | 0.236 | 0.236 | 0.223 | 0.223 |
| K110 | US | 69 | 0.312 | 0.287 | 0.287 | 0.201 | 0.182 | 0.182 |
| K111 | US | 72 | 0.213 | 0.232 | 0.232 | 0.231 | 0.217 | 0.217 |
| K112 | US | 88 | 0.352 | 0.309 | 0.309 | 0.214 | 0.197 | 0.197 |
| K117 | US | 72 | 0.213 | 0.232 | 0.232 | 0.206 | 0.187 | 0.187 |
| K118 | US | 80 | 0.215 | 0.233 | 0.233 | 0.210 | 0.192 | 0.192 |
| FR 039 | H2O2 | 71 | 0.282 | 0.270 | 0.291 | 0.240 | 0.229 | 0.251 |
| FR 040 | H2O2 | 69 | 0.312 | 0.287 | 0.310 | 0.267 | 0.261 | 0.291 |
| FR 041 | H2O2 | 61 | 0.251 | 0.253 | 0.272 | 0.223 | 0.208 | 0.225 |
| FR 042 | H2O2 | 81 | 0.288 | 0.274 | 0.295 | 0.238 | 0.226 | 0.248 |
| FR 043 | H2O2 | 84 | 0.304 | 0.283 | 0.305 | 0.265 | 0.259 | 0.288 |
| FR 044 | H2O2 | 99 | 0.421 | 0.347 | 0.377 | - | - | - |
| FR 045 | H2O2 | 62 | 0.249 | 0.252 | 0.271 | 0.228 | 0.214 | 0.233 |
| FR 046 | H2O2 | 72 | 0.218 | 0.235 | 0.252 | 0.246 | 0.236 | 0.260 |
| FR 047 | H2O2 | 61 | 0.181 | 0.214 | 0.229 | 0.244 | 0.233 | 0.256 |
| FR 101 | H2O2 | 99 | 0.424 | 0.349 | 0.379 | - | - | - |
| FR 102 | H2O2 | 80 | 0.234 | 0.244 | 0.262 | 0.262 | 0.255 | 0.283 |
| FR 103 | H2O2 | 69 | 0.386 | 0.328 | 0.355 | 0.390 | 0.408 | 0.475 |
| FR 104 | H2O2 | 78 | 0.535 | 0.410 | 0.447 | 0.257 | 0.249 | 0.276 |
| FR 105 | H2O2 | 80 | 0.433 | 0.354 | 0.384 | 0.256 | 0.248 | 0.275 |
| FR 106 | H2O2 | 82 | 0.577 | 0.434 | 0.473 | 0.269 | 0.263 | 0.293 |

| Probe-Nr. | Auf- bereitung | Illit/Chlorit Verhältnis (Illit %) | 10 Å- | | | 7 Å- | | |
|-----------|-------------------|--|--------------------------------|--|--|--------------------------------|--|--|
| | | | CIS $\Delta^{\circ}2\theta$ | Illit Frey $\Delta^{\circ}2\theta$ | (FWHM) Meßwert $\Delta^{\circ}2\theta$ | CIS $\Delta^{\circ}2\theta$ | Chlorit Frey $\Delta^{\circ}2\theta$ | (FWHM) Meßwert $\Delta^{\circ}2\theta$ |
| FR 107 | H2O2 | 84 | 0.478 | 0.379 | 0.412 | 0.297 | 0.297 | 0.336 |
| FR 108 | H2O2 | 79 | 0.420 | 0.346 | 0.376 | 0.285 | 0.283 | 0.318 |
| FR 109 | H2O2 | 78 | 0.321 | 0.292 | 0.315 | 0.294 | 0.293 | 0.331 |
| FR 110 | H2O2 | 64 | 0.260 | 0.258 | 0.278 | 0.236 | 0.223 | 0.244 |
| FR 111 | H2O2 | 68 | 0.221 | 0.237 | 0.254 | 0.228 | 0.214 | 0.232 |
| FR 112 | H2O2 | 68 | 0.218 | 0.235 | 0.252 | 0.231 | 0.218 | 0.237 |
| FR 113 | H2O2 | 78 | 0.259 | 0.257 | 0.277 | 0.263 | 0.256 | 0.285 |
| FR 114 | H2O2 | 73 | 0.221 | 0.237 | 0.254 | 0.226 | 0.212 | 0.230 |
| FR 115 | H2O2 | 76 | 0.311 | 0.286 | 0.309 | 0.256 | 0.248 | 0.275 |
| FR 116 | H2O2 | 67 | 0.205 | 0.228 | 0.244 | 0.226 | 0.211 | 0.229 |
| FR 117 | H2O2 | 57 | 0.140 | 0.192 | 0.204 | 0.208 | 0.190 | 0.202 |
| FR 118 | H2O2 | 75 | 0.179 | 0.213 | 0.228 | 0.218 | 0.202 | 0.217 |
| FR 119 | H2O2 | 76 | 0.217 | 0.234 | 0.251 | 0.219 | 0.203 | 0.219 |
| FR 120 | H2O2 | 67 | 0.293 | 0.276 | 0.298 | 0.246 | 0.235 | 0.259 |
| FR 122 | H2O2 | 73 | 0.491 | 0.386 | 0.420 | 0.322 | 0.327 | 0.373 |
| FR 123 | H2O2 | 68 | 0.301 | 0.281 | 0.303 | 0.259 | 0.251 | 0.279 |
| FR 124 | H2O2 | 51 | 0.535 | 0.410 | 0.447 | 0.293 | 0.291 | 0.329 |
| FR 125 | H2O2 | 85 | 0.415 | 0.344 | 0.373 | 0.281 | 0.277 | 0.311 |
| FR 126 | H2O2 | 74 | 0.424 | 0.349 | 0.379 | 0.294 | 0.293 | 0.331 |
| FR 127 | H2O2 | 71 | 0.410 | 0.341 | 0.370 | 0.271 | 0.266 | 0.297 |
| FR 128 | H2O2 | 75 | 0.501 | 0.392 | 0.426 | 0.284 | 0.281 | 0.316 |
| FR 129 | H2O2 | 80 | 0.368 | 0.318 | 0.344 | 0.352 | 0.363 | 0.418 |
| FR 129a | H2O2 | 80 | 0.348 | 0.307 | 0.332 | 0.327 | 0.332 | 0.380 |
| FR 130 | H2O2 | 75 | 0.615 | 0.455 | 0.496 | 0.307 | 0.308 | 0.350 |
| FR 131 | H2O2 | 77 | 0.351 | 0.309 | 0.334 | 0.265 | 0.258 | 0.287 |
| FR 132-1 | H2O2 | 98 | 0.356 | 0.311 | 0.337 | 0.302 | 0.303 | 0.343 |
| FR132-2 | H2O2 | 98 | 0.342 | 0.303 | 0.328 | 0.317 | 0.320 | 0.365 |
| FR 133 | H2O2 | 78 | 0.649 | 0.473 | 0.517 | 0.275 | 0.270 | 0.302 |
| FR 134 | H2O2 | 69 | 0.420 | 0.346 | 0.376 | 0.321 | 0.326 | 0.372 |
| FR 135 | H2O2 | 84 | 0.356 | 0.311 | 0.337 | 0.301 | 0.301 | 0.341 |
| FR 136 | H2O2 | 82 | 0.285 | 0.272 | 0.293 | 0.285 | 0.282 | 0.317 |
| FR 137 | H2O2 | 71 | 0.361 | 0.314 | 0.340 | 0.282 | 0.279 | 0.313 |
| FR 138 | H2O2 | 62 | 0.340 | 0.302 | 0.327 | 0.269 | 0.263 | 0.293 |
| FR 139 | H2O2 | 87 | 0.347 | 0.306 | 0.331 | 0.251 | 0.242 | 0.267 |
| FR 141 | H2O2 | 81 | 0.457 | 0.367 | 0.399 | 0.262 | 0.255 | 0.284 |
| FR 142 | H2O2 | 80 | 0.337 | 0.301 | 0.325 | 0.258 | 0.250 | 0.277 |
| FR 144 | H2O2 | 80 | 0.369 | 0.319 | 0.345 | 0.265 | 0.258 | 0.287 |
| FR 145 | H2O2 | 86 | 0.330 | 0.297 | 0.321 | 0.282 | 0.279 | 0.313 |
| FR 146 | H2O2 | 87 | 0.317 | 0.290 | 0.313 | 0.349 | 0.359 | 0.413 |
| FR 147 | H2O2 | 82 | 0.553 | 0.420 | 0.458 | 0.248 | 0.238 | 0.262 |
| FR 158 | H2O2 | 71 | 0.306 | 0.283 | 0.306 | 0.232 | 0.218 | 0.238 |
| FR 159 | H2O2 | 55 | 0.202 | 0.226 | 0.242 | 0.239 | 0.227 | 0.249 |
| FR 160 | H2O2 | 73 | 0.207 | 0.229 | 0.245 | 0.309 | 0.311 | 0.353 |
| FR 161 | H2O2 | 64 | 0.507 | 0.395 | 0.430 | 0.279 | 0.275 | 0.309 |
| FR 162 | H2O2 | 82 | 0.277 | 0.267 | 0.288 | 0.343 | 0.352 | 0.405 |
| FR 163 | H2O2 | 66 | 0.278 | 0.268 | 0.289 | 0.275 | 0.271 | 0.303 |
| FR 176 | H2O2 | 72 | 0.374 | 0.321 | 0.348 | 0.267 | 0.260 | 0.290 |
| FR 177 | H2O2 | 73 | 0.418 | 0.346 | 0.375 | 0.307 | 0.309 | 0.351 |
| FR 178 | H2O2 | 77 | 0.436 | 0.356 | 0.386 | 0.299 | 0.299 | 0.338 |
| FR 179 | H2O2 | 86 | 0.369 | 0.319 | 0.345 | 0.299 | 0.299 | 0.338 |
| FR 180 | H2O2 | 77 | 0.298 | 0.279 | 0.301 | 0.259 | 0.251 | 0.279 |
| FR 181 | H2O2 | 85 | 0.249 | 0.252 | 0.271 | 0.267 | 0.261 | 0.291 |
| FR 182 | H2O2 | 72 | 0.324 | 0.293 | 0.317 | 0.283 | 0.279 | 0.314 |
| FR 183 | H2O2 | 77 | 0.295 | 0.277 | 0.299 | 0.267 | 0.261 | 0.291 |
| FR 184 | H2O2 | 55 | 0.457 | 0.367 | 0.399 | 0.330 | 0.336 | 0.385 |
| FR 185 | H2O2 | 80 | 0.470 | 0.374 | 0.407 | 0.381 | 0.398 | 0.462 |
| FR 189 | H2O2 | 77 | 0.314 | 0.288 | 0.311 | 0.295 | 0.294 | 0.332 |
| FR 190 | H2O2 | 84 | 0.452 | 0.365 | 0.396 | 0.272 | 0.267 | 0.298 |
| FR 191 | H2O2 | 71 | 0.316 | 0.289 | 0.312 | 0.294 | 0.293 | 0.331 |

| Probe-Nr. | Auf- bereitung | Illit/Chlorit Verhältnis (Illit %) | 10 Å- | | | 7 Å- | | |
|-----------|-------------------|--|--------------------------------|--|--|--------------------------------|--|--|
| | | | CIS $\Delta^{\circ}2\theta$ | Illit Frey $\Delta^{\circ}2\theta$ | (FWHM) Meßwert $\Delta^{\circ}2\theta$ | CIS $\Delta^{\circ}2\theta$ | Chlorit Frey $\Delta^{\circ}2\theta$ | (FWHM) Meßwert $\Delta^{\circ}2\theta$ |
| FR 192a | H2O2 | 84 | 0.299 | 0.280 | 0.302 | 0.290 | 0.288 | 0.325 |
| FR 192b | H2O2 | 85 | 0.580 | 0.436 | 0.475 | 0.427 | 0.452 | 0.530 |
| FR 193 | H2O2 | 85 | 0.605 | 0.449 | 0.490 | 0.371 | 0.386 | 0.447 |
| FR 194 | H2O2 | 83 | 0.587 | 0.439 | 0.479 | 0.303 | 0.304 | 0.345 |
| FR 195 | H2O2 | 82 | 0.725 | 0.516 | 0.564 | 0.312 | 0.315 | 0.358 |
| FR 196 | H2O2 | 77 | 0.459 | 0.368 | 0.400 | 0.317 | 0.320 | 0.365 |
| FR 197 | H2O2 | 87 | 0.576 | 0.433 | 0.472 | 0.444 | 0.473 | 0.556 |

| Probe Nummer | Aufbereitung | Meßwerte n | 10Å - Iilit - Peak | | | Peak-Lage Å | Peak-Intensität Counts | Peak-Fläche Counts | Integralbreite $\Delta^2\Theta$ | BB1 Index | Esquevin Index |
|--------------|--------------|---------------|----------------------------------|---------|--------|----------------|---------------------------|-----------------------|------------------------------------|--------------|-------------------|
| | | | FWHM (MW) $\Delta^2\Theta$ | s1 % | | | | | | | |
| K2 | US | 3 | 0,380 | 4,011 | 10,026 | 1396 | 69645 | 0,499 | 2,070 | 0,446 | |
| K2 | H2O2 | 3 | 0,383 | 0,395 | 10,037 | 1779 | 89657 | 0,504 | 2,220 | 0,459 | |
| K3 | NADA | 3 | 0,291 | 1,581 | 10,015 | 1498 | 59354 | 0,396 | 1,650 | 0,613 | |
| K3 | US | 3 | 0,296 | 0,405 | 10,015 | 1669 | 67451 | 0,403 | 1,940 | 0,576 | |
| K3 | H2O2 | 3 | 0,321 | 1,176 | 10,026 | 1886 | 80965 | 0,429 | 2,000 | 0,536 | |
| K5 | NADA | 3 | 0,234 | 2,340 | 10,026 | 1806 | 58642 | 0,325 | 1,830 | 0,514 | |
| K5 | US | 3 | 0,241 | 1,646 | 10,015 | 2044 | 67110 | 0,328 | 1,610 | 0,497 | |
| K5 | H2O2 | 3 | 0,282 | 2,837 | 10,026 | 2161 | 80375 | 0,372 | 1,690 | 0,466 | |
| K6 | NADA | 3 | 0,259 | 0,465 | 10,026 | 2056 | 71864 | 0,350 | 1,800 | 0,519 | |
| K6 | US | 3 | 0,260 | 1,158 | 10,026 | 2581 | 90447 | 0,350 | 1,850 | 0,490 | |
| K6 | H2O2 | 3 | 0,267 | 1,161 | 10,015 | 2605 | 94490 | 0,363 | 1,970 | 0,449 | |
| K7 | NADA | 3 | 0,275 | 1,273 | 10,026 | 734 | 25525 | 0,348 | 1,480 | 0,650 | |
| K7 | US | 6 | 0,190 | 2,011 | 10,015 | 610 | 15894 | 0,261 | 1,510 | 0,543 | |
| K7 | H2O2 | 3 | 0,207 | 3,267 | 10,026 | 1237 | 35306 | 0,285 | 1,360 | 0,523 | |
| K8 | NADA | 3 | 0,189 | 2,406 | 10,026 | 1673 | 43762 | 0,262 | 1,460 | 0,475 | |
| K8 | US | 6 | 0,198 | 1,399 | 10,003 | 531 | 14753 | 0,278 | 1,590 | 0,510 | |
| K8 | H2O2 | 3 | 0,203 | 2,315 | 10,015 | 1595 | 43850 | 0,275 | 1,350 | 0,481 | |
| K9 | US | 4 | 0,214 | 3,700 | 10,049 | 339 | 10748 | 0,317 | 1,670 | 0,572 | |
| K9 | H2O2 | 4 | 0,213 | 2,783 | 10,037 | 1244 | 35810 | 0,288 | 1,190 | 0,503 | |
| K11 | H2O2 | 4 | 0,270 | 2,269 | 10,060 | 449 | 17462 | 0,389 | 1,550 | 0,497 | |
| K14 | NADA | 3 | 0,260 | 0,769 | 10,026 | 1045 | 43318 | 0,415 | 1,800 | 0,474 | |
| K14 | US | 3 | 0,260 | 0,462 | 10,026 | 1100 | 45529 | 0,414 | 1,740 | 0,517 | |
| K14 | H2O2 | 3 | 0,293 | 1,497 | 10,026 | 1415 | 62783 | 0,444 | 1,820 | 0,452 | |
| K17 | NADA | 3 | 0,230 | 2,609 | 10,026 | 1065 | 33881 | 0,318 | 1,510 | 0,494 | |
| K17 | NADA II | 3 | 0,224 | 1,295 | 10,026 | 1025 | 32373 | 0,316 | 1,600 | 0,506 | |
| K17 | NADA III | 3 | 0,235 | 1,277 | 10,026 | 1085 | 35853 | 0,330 | 1,850 | 0,535 | |
| K17 | NADA IV | 3 | 0,218 | 1,055 | 10,015 | 959 | 29687 | 0,310 | 1,570 | 0,546 | |
| K17 | NADA V | 3 | 0,214 | 1,168 | 10,015 | 1068 | 33120 | 0,310 | 1,740 | 0,505 | |
| K17 | NADA VI | 3 | 0,220 | 1,818 | 10,026 | 1121 | 35251 | 0,314 | 1,670 | 0,517 | |
| K17 | US | 3 | 0,261 | 0,577 | 10,026 | 1031 | 36607 | 0,355 | 1,670 | 0,550 | |
| K17 | US II | 3 | 0,228 | 2,140 | 10,026 | 1101 | 35897 | 0,326 | 1,900 | 0,500 | |
| K17 | US ii | 3 | 0,232 | 2,597 | 10,026 | 1078 | 35415 | 0,329 | 1,560 | 0,542 | |
| K17 | US III | 3 | 0,239 | 1,967 | 10,015 | 1055 | 35867 | 0,340 | 1,830 | 0,510 | |
| K17 | US iii | 3 | 0,231 | 0,913 | 10,026 | 1083 | 35064 | 0,324 | 1,600 | 0,541 | |
| K17 | US IV | 3 | 0,229 | 1,366 | 10,026 | 1113 | 37632 | 0,338 | 2,110 | 0,511 | |
| K17 | US iv | 3 | 0,228 | 3,057 | 10,026 | 1096 | 35397 | 0,323 | 1,400 | 0,528 | |
| K17 | US V | 3 | 0,232 | 2,532 | 10,026 | 1027 | 34752 | 0,338 | 1,960 | 0,513 | |
| K17 | US v | 3 | 0,234 | 3,476 | 10,015 | 1000 | 33478 | 0,335 | 1,570 | 0,514 | |
| K17 | US VI | 3 | 0,265 | 0,455 | 10,026 | 954 | 34889 | 0,366 | 1,860 | 0,555 | |
| K17 | H2O2 | 3 | 0,231 | 0,519 | 10,026 | 1124 | 36370 | 0,324 | 1,630 | 0,490 | |
| K18 | US | 3 | 0,200 | 0,750 | 10,026 | 1963 | 55409 | 0,282 | 1,470 | 0,503 | |
| K18 | H2O2 | 3 | 0,216 | 0,558 | 10,037 | 1794 | 53389 | 0,298 | 1,340 | 0,484 | |
| K19 | US | 4 | 0,196 | 1,330 | 10,037 | 710 | 19088 | 0,269 | 1,380 | 0,499 | |
| K19 | H2O2 | 4 | 0,278 | 2,800 | 10,049 | 1341 | 47054 | 0,351 | 1,340 | 0,577 | |
| K20 | NADA | 3 | 0,235 | 2,128 | 10,026 | 1343 | 43808 | 0,326 | 1,800 | 0,518 | |
| K20 | US | 3 | 0,235 | 1,277 | 10,026 | 1523 | 49548 | 0,325 | 1,660 | 0,547 | |
| K20 | H2O2 | 3 | 0,276 | 1,123 | 10,026 | 2289 | 83520 | 0,365 | 1,740 | 0,494 | |
| K21 | NADA | 3 | 0,221 | 1,598 | 10,015 | 573 | 17523 | 0,306 | 1,350 | 0,525 | |
| K21 | US | 3 | 0,230 | 2,043 | 10,015 | 780 | 24461 | 0,311 | 1,360 | 0,515 | |
| K21 | H2O2 | 3 | 0,241 | 1,120 | 10,015 | 860 | 28016 | 0,326 | 1,460 | 0,556 | |
| K22A15 | US | 4 | 0,229 | 1,366 | 10,037 | 699 | 22291 | 0,319 | 1,690 | 0,499 | |
| K22A15 | H2O2 | 4 | 0,339 | 1,356 | 10,015 | 1197 | 50813 | 0,425 | 1,850 | 0,525 | |
| K22-50A | US | 4 | 0,322 | 2,656 | 10,015 | 510 | 22649 | 0,317 | 1,580 | 0,449 | |
| K22-50A | H2O2 | 4 | 0,411 | 0,711 | 10,037 | 1351 | 68670 | 0,508 | 1,880 | 0,474 | |
| K23 | US | 3 | 0,307 | 0,814 | 10,003 | 262 | 12222 | 0,466 | 1,950 | 0,447 | |
| K23 | H2O2 | 3 | 0,378 | 2,249 | 10,015 | 847 | 41506 | 0,490 | 2,070 | 0,491 | |
| K24 | H2O2 | 3 | 0,309 | 1,003 | 10,037 | 2067 | 86943 | 0,421 | 2,020 | 0,432 | |
| K25 | H2O2 | 4 | 0,244 | 1,203 | 10,026 | 1771 | 58458 | 0,330 | 1,820 | 0,484 | |

| Probe Nummer | Aufbereitung | Meßwerte n | 10Å - Illit - Peak | | Peak-Lage Å | Peak-Intensität Counts | Peak-Fläche Counts | Integralbreite $\Delta^2\Theta$ | BB1 Index | Esquevin Index |
|--------------|--------------|---------------|----------------------------------|---------|----------------|---------------------------|-----------------------|------------------------------------|--------------|-------------------|
| | | | FWHM (MW) $\Delta^2\Theta$ | s1 % | | | | | | |
| K26 | NADA | 3 | 0,210 | 1,442 | 10,015 | 1214 | 34821 | 0,287 | 1,380 | 0,541 |
| K26 | US | 3 | 0,209 | 1,292 | 10,015 | 1772 | 51599 | 0,291 | 1,640 | 0,474 |
| K26 | H2O2 | 3 | 0,257 | 0,584 | 10,015 | 1931 | 65415 | 0,339 | 1,660 | 0,532 |
| K27 | NADA | 3 | 0,214 | 1,286 | 10,003 | 1111 | 32916 | 0,296 | 1,460 | 0,468 |
| K27 | US | 3 | 0,217 | 0,968 | 10,003 | 1625 | 49050 | 0,302 | 1,720 | 0,501 |
| K27 | H2O2 | 3 | 0,207 | 1,024 | 10,015 | 1350 | 39070 | 0,267 | 1,810 | 0,487 |
| K28 | NADA | 3 | 0,203 | 0,594 | 10,015 | 1965 | 56552 | 0,288 | 1,860 | 0,476 |
| K28 | US | 3 | 0,213 | 1,174 | 10,015 | 2103 | 61369 | 0,292 | 1,570 | 0,490 |
| K28 | H2O2 | 3 | 0,229 | 0,664 | 10,015 | 2601 | 79194 | 0,304 | 1,400 | 0,508 |
| K29 | NADA | 3 | 0,189 | 1,217 | 10,015 | 1352 | 36665 | 0,271 | 1,690 | 0,456 |
| K29 | US | 3 | 0,194 | 1,823 | 10,015 | 1641 | 44283 | 0,270 | 1,520 | 0,480 |
| K29 | H2O2 | 3 | 0,213 | 2,170 | 10,015 | 1429 | 41723 | 0,292 | 1,430 | 0,519 |
| K30 | US | 3 | 0,224 | 4,554 | 10,026 | 980 | 29565 | 0,302 | 1,400 | 0,535 |
| K30 | H2O2 | 3 | 0,288 | 1,458 | 10,049 | 1149 | 41602 | 0,362 | 1,440 | 0,605 |
| K31 | NADA | 3 | 0,198 | 1,162 | 10,015 | 1689 | 45938 | 0,272 | 1,260 | 0,527 |
| K31 | US | 3 | 0,209 | 0,577 | 10,015 | 1519 | 42796 | 0,282 | 1,320 | 0,511 |
| K31 | H2O2 | 3 | 0,218 | 0,461 | 10,015 | 1718 | 51203 | 0,298 | 1,570 | 0,485 |
| K32 | H2O2 | 4 | 0,220 | 1,727 | 10,015 | 1678 | 50389 | 0,300 | 1,590 | 0,467 |
| K33 | H2O2 | 4 | 0,250 | 1,265 | 10,037 | 2767 | 90435 | 0,327 | 1,470 | 0,532 |
| K34 | NADA | 3 | 0,232 | 1,522 | 10,026 | 1635 | 50223 | 0,307 | 1,470 | 0,522 |
| K34 | US | 3 | 0,221 | 1,142 | 10,026 | 2155 | 64626 | 0,300 | 1,630 | 0,478 |
| K34 | H2O2 | 3 | 0,240 | 1,046 | 10,026 | 1992 | 64331 | 0,323 | 1,580 | 0,481 |
| K35 | H2O2 | 4 | 0,243 | 1,245 | 10,037 | 1923 | 62971 | 0,327 | 1,570 | 0,485 |
| K36 | US | 3 | 0,250 | 1,587 | 10,015 | 2096 | 69974 | 0,334 | 1,710 | 0,458 |
| K37 | NADA | 4 | 0,217 | 0,599 | 10,015 | 2117 | 62900 | 0,297 | 1,650 | 0,494 |
| K37 | US | 3 | 0,224 | 3,833 | 10,015 | 2650 | 79468 | 0,300 | 1,450 | 0,539 |
| K37 | H2O2 | 3 | 0,248 | 1,918 | 10,026 | 2981 | 98019 | 0,329 | 1,590 | 0,550 |
| K39 | NADA | 4 | 0,281 | 7,563 | 10,015 | 299 | 12918 | 0,432 | 2,090 | 0,602 |
| K41 | NADA | 4 | 0,233 | 4,174 | 10,026 | 315 | 10854 | 0,345 | 1,950 | 0,559 |
| K42-1 | NADA | 4 | 0,227 | 1,814 | 10,026 | 228 | 7923 | 0,347 | 1,760 | 0,605 |
| K42-2 | NADA | 4 | 0,215 | 3,843 | 10,015 | 204 | 6838 | 0,335 | 1,690 | 0,554 |
| K43 | NADA | 4 | 0,221 | 1,570 | 10,015 | 234 | 7942 | 0,339 | 1,760 | 0,547 |
| K45 | NADA | 4 | 0,264 | 6,616 | 9,992 | 102 | 3678 | 0,361 | 1,600 | 0,637 |
| K46 | NADA | 4 | 0,214 | 5,209 | 10,037 | 394 | 12633 | 0,321 | 1,490 | 0,624 |
| K47 | NADA | 4 | 0,317 | 1,230 | 10,026 | 1329 | 58504 | 0,440 | 2,020 | 0,513 |
| K49 | NADA | 4 | 0,236 | 2,692 | 10,037 | 699 | 23418 | 0,335 | 1,740 | 0,486 |
| K50 | NADA | 4 | 0,233 | 1,255 | 10,037 | 1058 | 35219 | 0,333 | 1,980 | 0,555 |
| K51 | NADA | 4 | 0,230 | 2,350 | 10,026 | 895 | 28762 | 0,321 | 2,210 | 0,531 |
| K52 | NADA | 4 | 0,214 | 0,379 | 10,003 | 1533 | 45887 | 0,299 | 2,200 | 0,532 |
| K53 | NADA | 4 | 0,203 | 1,634 | 10,026 | 749 | 21417 | 0,286 | 1,350 | 0,511 |
| K54 | NADA | 4 | 0,324 | 4,300 | 10,037 | 627 | 26458 | 0,422 | 1,710 | 0,507 |
| K55 | NADA | 3 | 0,213 | 4,762 | 10,026 | 411 | 12808 | 0,312 | 1,530 | 0,528 |
| K56 | NADA | 4 | 0,205 | 3,054 | 10,037 | 789 | 23102 | 0,293 | 1,460 | 0,521 |
| K57 | US | 4 | 0,330 | 2,733 | 10,015 | 704 | 30109 | 0,428 | 1,670 | 0,517 |
| K58-1 | US | 4 | 0,316 | 1,798 | 10,060 | 659 | 28234 | 0,428 | 1,980 | 0,472 |
| K58-2 | US | 4 | 0,327 | 2,043 | 10,026 | 409 | 18244 | 0,446 | 1,790 | 0,482 |
| K59 | US | 4 | 0,295 | 3,275 | 10,049 | 747 | 27680 | 0,371 | 1,430 | 0,491 |
| K60 | US | 4 | 0,294 | 1,384 | 10,037 | 1088 | 40949 | 0,376 | 1,660 | 0,570 |
| K61 | US | 4 | 0,341 | 1,557 | 10,049 | 1198 | 55609 | 0,464 | 1,770 | 0,483 |
| K62-1 | US | 4 | 0,390 | 0,769 | 10,060 | 1038 | 52734 | 0,508 | 2,000 | 0,416 |
| K62-2 | US | 4 | 0,346 | 1,157 | 10,049 | 740 | 35868 | 0,485 | 2,190 | 0,447 |
| K63 | US | 4 | 0,335 | 1,420 | 10,026 | 917 | 39277 | 0,428 | 1,700 | 0,530 |
| K64 | US | 4 | 0,383 | 0,345 | 10,060 | 1226 | 59754 | 0,487 | 1,760 | 0,445 |
| K65 | US | 4 | 0,321 | 1,031 | 10,072 | 1373 | 57130 | 0,416 | 1,860 | 0,571 |
| K66 | US | 4 | 0,249 | 1,365 | 10,026 | 1441 | 47636 | 0,331 | 1,470 | 0,480 |
| K67 | US | 4 | 0,255 | 2,549 | 10,037 | 1452 | 49202 | 0,339 | 1,640 | 0,496 |
| K68 | US | 4 | 0,213 | 1,422 | 10,026 | 1563 | 44333 | 0,284 | 1,400 | 0,541 |
| K69 | US | 4 | 0,229 | 1,834 | 10,015 | 1803 | 55709 | 0,309 | 1,620 | 0,508 |

| Probe Nummer | Aufbereitung | 10Å - Illit - Peak | | | | | | | | |
|--------------|--------------|--------------------|----------------------------------|---------|----------------|---------------------------|-----------------------|------------------------------------|--------------|-------------------|
| | | Meßwerte n | FWHM (MW) $\Delta^2\Theta$ | s1 % | Peak-Lage Å | Peak-Intensität Counts | Peak-Fläche Counts | Integralbreite $\Delta^2\Theta$ | BB1 Index | Esquevin Index |
| K70 | US | 4 | 0,233 | 2,155 | 10,026 | 557 | 19643 | 0,353 | 2,020 | 0,513 |
| K71 | US | 4 | 0,244 | 1,399 | 10,026 | 1178 | 40883 | 0,347 | 1,790 | 0,463 |
| K72 | US | 4 | 0,274 | 0,803 | 10,037 | 1573 | 58807 | 0,374 | 1,860 | 0,422 |
| K73 | US | 4 | 0,250 | 1,545 | 10,026 | 1760 | 58319 | 0,331 | 1,560 | 0,447 |
| K74 | US | 4 | 0,207 | 2,136 | 10,003 | 1599 | 44209 | 0,276 | 1,370 | 0,503 |
| K75 | US | 4 | 0,227 | 1,858 | 10,015 | 1128 | 34985 | 0,310 | 1,610 | 0,478 |
| K76 | US | 4 | 0,228 | 3,467 | 10,015 | 1133 | 35218 | 0,311 | 1,440 | 0,481 |
| K77 | US | 4 | 0,228 | 1,681 | 10,015 | 1315 | 41437 | 0,315 | 1,840 | 0,458 |
| K78-1 | US | 4 | 0,213 | 1,435 | 10,015 | 1588 | 45522 | 0,287 | 1,400 | 0,548 |
| K78-2 | US | 4 | 0,215 | 1,355 | 10,026 | 1707 | 49012 | 0,287 | 1,280 | 0,517 |
| K79 | US | 4 | 0,204 | 1,232 | 10,015 | 2625 | 71937 | 0,274 | 1,400 | 0,520 |
| K80 | US | 4 | 0,224 | 1,300 | 10,015 | 1842 | 55475 | 0,301 | 1,644 | 0,519 |
| K81 | US | 4 | 0,213 | 2,062 | 10,037 | 1435 | 43577 | 0,304 | 2,720 | 0,502 |
| K82 | US | 4 | 0,206 | 2,059 | 10,015 | 1861 | 52158 | 0,280 | 1,470 | 0,485 |
| K83 | US | 2 | 0,209 | 0,995 | 10,003 | 1670 | 48485 | 0,290 | 1,530 | 0,477 |
| K84 | US | 2 | 0,241 | 0,290 | 10,026 | 1164 | 38611 | 0,332 | 2,840 | 0,467 |
| K85 | US | 2 | 0,223 | 1,584 | 10,003 | 2081 | 62729 | 0,308 | 3,050 | 0,483 |
| K86 | US | 2 | 0,226 | 1,562 | 10,015 | 1144 | 34689 | 0,303 | 2,310 | 0,495 |
| K87 | US | 4 | 0,238 | 1,073 | 10,026 | 1993 | 62743 | 0,315 | 1,370 | 0,501 |
| K88 | US | 4 | 0,248 | 2,369 | 10,015 | 1235 | 40520 | 0,328 | 1,940 | 0,462 |
| K89 | US | 4 | 0,254 | 3,569 | 10,003 | 375 | 12999 | 0,347 | 1,400 | 0,467 |
| K90 | US | 4 | 0,274 | 1,022 | 10,037 | 1137 | 43744 | 0,385 | 2,360 | 0,506 |
| K91 | US | 4 | 0,246 | 2,490 | 10,032 | 1367 | 45734 | 0,335 | 1,590 | 0,525 |
| K92 | US | 4 | 0,224 | 2,203 | 10,003 | 1329 | 40316 | 0,303 | 1,310 | 0,544 |
| K93 | US | 4 | 0,255 | 2,213 | 10,026 | 1068 | 36745 | 0,344 | 1,500 | 0,486 |
| K94a | US | 4 | 0,236 | 1,489 | 10,015 | 1755 | 55801 | 0,318 | 1,420 | 0,475 |
| K95 | US | 4 | 0,243 | 4,767 | 10,037 | 429 | 15619 | 0,364 | 1,610 | 0,434 |
| K96 | US | 4 | 0,326 | 2,659 | 10,037 | 890 | 38102 | 0,428 | 1,600 | 0,416 |
| K97 | US | 4 | 0,304 | 1,197 | 9,992 | 1580 | 62976 | 0,399 | 1,580 | 0,432 |
| K98 | US | 4 | 0,228 | 1,092 | 10,026 | 1590 | 49555 | 0,312 | 1,420 | 0,521 |
| K99 | US | 4 | 0,309 | 2,990 | 10,037 | 1072 | 43031 | 0,401 | 1,710 | 0,470 |
| K100 | US | 4 | 0,246 | 1,306 | 10,026 | 1202 | 39042 | 0,325 | 1,470 | 0,452 |
| K101 | US | 4 | 0,243 | 1,545 | 10,026 | 1487 | 49362 | 0,332 | 1,540 | 0,482 |
| K102 | US | 4 | 0,299 | 1,672 | 10,043 | 1675 | 67140 | 0,401 | 1,780 | 0,484 |
| K103 | US | 4 | 0,190 | 2,589 | 9,981 | 2545 | 70917 | 0,279 | 1,320 | 0,460 |
| K104 | US | 4 | 0,237 | 1,941 | 10,026 | 1538 | 51095 | 0,332 | 1,750 | 0,457 |
| K105 | US | 4 | 0,263 | 0,962 | 10,003 | 2132 | 84989 | 0,399 | 1,610 | 0,423 |
| K106a | US | 4 | 0,199 | 1,465 | 10,043 | 536 | 15460 | 0,288 | 1,370 | 0,453 |
| K106b | US | 4 | 0,212 | 3,062 | 10,026 | 553 | 16756 | 0,303 | 1,340 | 0,510 |
| K108 | US | 4 | 0,304 | 3,956 | 10,026 | 1588 | 68470 | 0,431 | 1,820 | 0,338 |
| K109 | US | 4 | 0,236 | 2,863 | 10,049 | 860 | 29728 | 0,346 | 1,380 | 0,420 |
| K110 | US | 4 | 0,287 | 1,575 | 10,026 | 2187 | 93225 | 0,426 | 1,840 | 0,424 |
| K111 | US | 4 | 0,232 | 2,415 | 10,043 | 1125 | 36036 | 0,320 | 1,380 | 0,502 |
| K112 | US | 4 | 0,309 | 3,684 | 10,037 | 1820 | 77605 | 0,278 | 0,427 | 0,374 |
| K117 | US | 4 | 0,232 | 2,929 | 10,003 | 1474 | 48765 | 1,620 | 0,331 | 0,480 |
| K118 | US | 4 | 0,233 | 2,291 | 10,015 | 1294 | 41693 | 0,322 | 1,470 | 0,502 |
| FR039 | H2O2 | 4 | 0,291 | 2,167 | 10,055 | 717 | 28277 | 0,394 | 1,940 | 0,470 |
| FR040 | H2O2 | 4 | 0,310 | 0,680 | 10,049 | 1585 | 68373 | 0,431 | 1,820 | 0,407 |
| FR041 | H2O2 | 4 | 0,272 | 3,590 | 10,037 | 1564 | 61199 | 0,391 | 1,720 | 0,476 |
| FR042 | H2O2 | 4 | 0,295 | 0,993 | 10,003 | 2007 | 81473 | 0,406 | 1,750 | 0,473 |
| FR043 | H2O2 | 4 | 0,305 | 1,987 | 10,026 | 4664 | 185464 | 0,398 | 1,690 | 0,516 |
| FR044 | H2O2 | 4 | 0,377 | 3,016 | 10,026 | 719 | 34882 | 0,485 | 1,740 | 0,364 |
| FR045 | H2O2 | 4 | 0,271 | 2,054 | 10,037 | 1094 | 41739 | 0,382 | 1,720 | 0,494 |
| FR046 | H2O2 | 4 | 0,252 | 3,052 | 10,049 | 782 | 26006 | 0,333 | 1,410 | 0,504 |
| FR047 | H2O2 | 3 | 0,229 | 4,089 | 10,060 | 841 | 25147 | 0,299 | 1,230 | 0,543 |
| FR101 | H2O2 | 4 | 0,379 | 6,027 | 10,015 | 341 | 15552 | 0,456 | 1,880 | 0,361 |
| FR102 | H2O2 | 4 | 0,262 | 8,677 | 10,037 | 270 | 9158 | 0,339 | 1,280 | 0,467 |
| FR103 | H2O2 | 4 | 0,355 | 6,072 | 10,026 | 119 | 5413 | 0,455 | 1,600 | 0,387 |

| Probe Nummer | Aufbereitung | 10Å - Illit - Peak | | | | | | | | |
|--------------|--------------|--------------------|----------------------------------|---------|----------------|---------------------------|-----------------------|------------------------------------|--------------|-------------------|
| | | Meßwerte n | FWHM (MW) $\Delta^2\Theta$ | s1 % | Peak-Lage Å | Peak-Intensität Counts | Peak-Fläche Counts | Integralbreite $\Delta^2\Theta$ | BB1 Index | Esquevin Index |
| FR104 | H2O2 | 4 | 0,447 | 1,847 | 10,072 | 457 | 26828 | 0,587 | 2,200 | 0,337 |
| FR105 | H2O2 | 4 | 0,384 | 4,615 | 10,060 | 147 | 6595 | 0,449 | 1,490 | 0,340 |
| FR106 | H2O2 | 4 | 0,473 | 3,957 | 10,060 | 432 | 24296 | 0,562 | 1,860 | 0,370 |
| FR107 | H2O2 | 4 | 0,412 | 2,850 | 10,049 | 332 | 17858 | 0,538 | 2,190 | 0,386 |
| FR108 | H2O2 | 4 | 0,376 | 1,751 | 10,037 | 261 | 11534 | 0,442 | 1,470 | 0,456 |
| FR109 | H2O2 | 4 | 0,315 | 0,093 | 10,015 | 183 | 7332 | 0,401 | 1,410 | 0,404 |
| FR110 | H2O2 | 4 | 0,278 | 2,904 | 10,015 | 132 | 4882 | 0,370 | 1,630 | 0,424 |
| FR111 | H2O2 | 4 | 0,254 | 1,815 | 10,015 | 256 | 8481 | 0,331 | 1,310 | 0,453 |
| FR112 | H2O2 | 5 | 0,252 | 3,386 | 10,015 | 822 | 28339 | 0,345 | 1,540 | 0,462 |
| FR113 | H2O2 | 4 | 0,277 | 4,307 | 10,037 | 1492 | 55544 | 0,372 | 1,790 | 0,482 |
| FR114 | H2O2 | 5 | 0,254 | 1,365 | 10,003 | 322 | 10326 | 0,321 | 1,290 | 0,466 |
| FR115 | H2O2 | 4 | 0,309 | 0,097 | 10,026 | 403 | 17474 | 0,434 | 2,350 | 0,447 |
| FR116 | H2O2 | 4 | 0,244 | 2,254 | 10,015 | 311 | 9650 | 0,310 | 1,290 | 0,444 |
| FR117 | H2O2 | 4 | 0,204 | 3,532 | 10,015 | 824 | 23344 | 0,283 | 1,570 | 0,578 |
| FR118 | H2O2 | 4 | 0,228 | 2,178 | 10,026 | 1562 | 47773 | 0,306 | 1,510 | 0,533 |
| FR119 | H2O2 | 4 | 0,251 | 0,952 | 10,026 | 924 | 32011 | 0,346 | 1,750 | 0,491 |
| FR120 | H2O2 | 4 | 0,298 | 0,068 | 10,026 | 456 | 18679 | 0,410 | 1,810 | 0,465 |
| FR122 | H2O2 | 4 | 0,420 | 3,095 | 10,060 | 710 | 37656 | 0,530 | 1,950 | 0,415 |
| FR123 | H2O2 | 4 | 0,303 | 4,459 | 10,015 | 415 | 17435 | 0,420 | 1,780 | 0,441 |
| FR124 | H2O2 | 4 | 0,447 | 1,256 | 10,043 | 421 | 24105 | 0,573 | 2,030 | 0,371 |
| FR125 | H2O2 | 4 | 0,373 | 0,909 | 10,026 | 1057 | 52620 | 0,498 | 2,020 | 0,435 |
| FR126 | H2O2 | 4 | 0,379 | 3,795 | 10,020 | 618 | 32621 | 0,528 | 2,040 | 0,476 |
| FR127 | H2O2 | 4 | 0,370 | 4,076 | 10,049 | 903 | 44481 | 0,493 | 2,030 | 0,482 |
| FR128 | H2O2 | 4 | 0,426 | 1,910 | 10,032 | 659 | 36703 | 0,557 | 2,220 | 0,443 |
| FR129 | H2O2 | 4 | 0,344 | 3,953 | 10,060 | 896 | 40134 | 0,448 | 1,660 | 0,443 |
| FR129a | H2O2 | 4 | 0,332 | 3,112 | 10,060 | 717 | 31311 | 0,437 | 1,730 | 0,428 |
| FR130 | H2O2 | 4 | 0,496 | 1,933 | 10,072 | 1283 | 82169 | 0,640 | 2,350 | 0,429 |
| FR131 | H2O2 | 4 | 0,334 | 2,199 | 10,066 | 1364 | 59360 | 0,435 | 1,830 | 0,437 |
| FR132-1 | H2O2 | 4 | 0,337 | 0,663 | 10,060 | 1819 | 80178 | 0,441 | 1,910 | 0,446 |
| FR132-2 | H2O2 | 4 | 0,328 | 2,031 | 10,037 | 1750 | 76133 | 0,435 | 1,950 | 0,417 |
| FR133 | H2O2 | 4 | 0,517 | 1,531 | 10,060 | 1034 | 68965 | 0,667 | 2,280 | 0,347 |
| FR134 | H2O2 | 4 | 0,376 | 2,757 | 10,037 | 586 | 28875 | 0,493 | 1,840 | 0,439 |
| FR135 | H2O2 | 4 | 0,337 | 1,756 | 10,015 | 920 | 41423 | 0,450 | 1,890 | 0,387 |
| FR136 | H2O2 | 4 | 0,293 | 2,253 | 10,026 | 1230 | 48422 | 0,394 | 1,650 | 0,477 |
| FR137 | H2O2 | 4 | 0,340 | 1,791 | 10,026 | 606 | 26781 | 0,442 | 1,730 | 0,424 |
| FR138 | H2O2 | 4 | 0,327 | 1,380 | 10,037 | 885 | 38445 | 0,434 | 1,750 | 0,451 |
| FR139 | H2O2 | 4 | 0,331 | 1,003 | 10,037 | 1749 | 81462 | 0,466 | 2,270 | 0,475 |
| FR141 | H2O2 | 4 | 0,399 | 0,051 | 10,037 | 1011 | 53045 | 0,525 | 2,250 | 0,424 |
| FR142 | H2O2 | 4 | 0,325 | 2,586 | 10,037 | 908 | 40757 | 0,449 | 2,010 | 0,415 |
| FR144 | H2O2 | 4 | 0,345 | 5,889 | 10,015 | 773 | 35554 | 0,460 | 1,930 | 0,431 |
| FR145 | H2O2 | 4 | 0,321 | 3,805 | 10,060 | 699 | 30354 | 0,434 | 1,920 | 0,464 |
| FR146 | H2O2 | 4 | 0,313 | 1,981 | 10,060 | 1045 | 43011 | 0,412 | 1,800 | 0,463 |
| FR147 | H2O2 | 4 | 0,458 | 1,729 | 10,083 | 1108 | 62758 | 0,566 | 1,970 | 0,329 |
| FR158 | H2O2 | 4 | 0,306 | 3,816 | 9,992 | 815 | 36171 | 0,444 | 1,980 | 0,437 |
| FR159 | H2O2 | 4 | 0,242 | 1,471 | 10,060 | 886 | 26737 | 0,302 | 1,200 | 0,555 |
| FR160 | H2O2 | 4 | 0,245 | 2,863 | 10,015 | 1548 | 47023 | 0,304 | 1,170 | 0,536 |
| FR161 | H2O2 | 4 | 0,430 | 3,286 | 10,164 | 181 | 9361 | 0,517 | 1,600 | 0,238 |
| FR162 | H2O2 | 4 | 0,288 | 4,690 | 10,003 | 722 | 26513 | 0,367 | 1,400 | 0,385 |
| FR163 | H2O2 | 4 | 0,289 | 2,933 | 10,049 | 1047 | 38196 | 0,365 | 1,600 | 0,459 |
| FR176 | H2O2 | 4 | 0,348 | 1,408 | 10,049 | 964 | 43130 | 0,447 | 1,920 | 0,405 |
| FR177 | H2O2 | 4 | 0,375 | 1,543 | 10,015 | 936 | 45024 | 0,481 | 1,800 | 0,546 |
| FR178 | H2O2 | 4 | 0,386 | 1,076 | 10,037 | 727 | 35321 | 0,486 | 1,880 | 0,413 |
| FR179 | H2O2 | 4 | 0,345 | 1,320 | 10,026 | 968 | 41395 | 0,428 | 1,560 | 0,447 |
| FR180 | H2O2 | 4 | 0,301 | 0,736 | 10,026 | 1324 | 50657 | 0,383 | 1,830 | 0,560 |
| FR181 | H2O2 | 4 | 0,271 | 1,741 | 10,015 | 1683 | 57498 | 0,342 | 1,530 | 0,595 |
| FR182 | H2O2 | 4 | 0,317 | 1,246 | 10,026 | 654 | 26623 | 0,407 | 1,830 | 0,526 |
| FR183 | H2O2 | 4 | 0,299 | 6,871 | 10,026 | 1077 | 40242 | 0,374 | 1,520 | 0,565 |
| FR184 | H2O2 | 4 | 0,399 | 4,073 | 10,037 | 281 | 13442 | 0,478 | 1,520 | 0,466 |

| 10Å - Illit - Peak | | | | | | | | | | |
|--------------------|--------------|---------------|---|---------|----------------|---------------------------|-----------------------|---|--------------|-------------------|
| Probe Nummer | Aufbereitung | Meßwerte n | FWHM (MW) $\Delta^{\circ}2\theta$ | s1 % | Peak-Lage Å | Peak-Intensität Counts | Peak-Fläche Counts | Integralbreite $\Delta^{\circ}2\theta$ | BB1 Index | Esquevin Index |
| FR185 | H2O2 | 4 | 0,407 | 1,037 | 10,037 | 463 | 24438 | 0,528 | 2,000 | 0,410 |
| FR189 | H2O2 | 4 | 0,311 | 1,684 | 9,992 | 1038 | 40407 | 0,389 | 1,600 | 0,526 |
| FR190 | H2O2 | 4 | 0,396 | 3,114 | 10,037 | 827 | 43111 | 0,521 | 1,830 | 0,359 |
| FR191 | H2O2 | 4 | 0,312 | 1,954 | 10,015 | 584 | 23236 | 0,398 | 1,780 | 0,464 |
| FR192a | H2O2 | 4 | 0,302 | 2,188 | 10,015 | 961 | 37205 | 0,387 | 1,880 | 0,550 |
| FR192b | H2O2 | 4 | 0,475 | 3,219 | 10,049 | 685 | 41680 | 0,608 | 2,140 | 0,407 |
| FR193 | H2O2 | 4 | 0,490 | 2,355 | 10,043 | 686 | 40537 | 0,591 | 2,050 | 0,370 |
| FR194 | H2O2 | 4 | 0,479 | 2,420 | 10,026 | 596 | 35408 | 0,594 | 2,100 | 0,384 |
| FR195 | H2O2 | 4 | 0,564 | 0,963 | 10,060 | 994 | 67128 | 0,675 | 2,290 | 0,323 |
| FR196 | H2O2 | 4 | 0,400 | 1,483 | 9,981 | 790 | 41161 | 0,521 | 2,070 | 0,418 |
| FR197 | H2O2 | 4 | 0,472 | 4,156 | 10,060 | 699 | 44202 | 0,632 | 2,390 | 0,386 |

| 7Å - Chlorit - Peak | | | | | | | | |
|---------------------|-------------------|---------------|---|---------|--------------------|-------------------------------|---------------------------|--|
| Proben Nummer | Auf- bereitung | Meßwerte n | FWHM (MW) $\Delta^{\circ}2\theta$ | s1 % | Peak- Lage Å | Peak- Intensität Counts | Peak- Fläche Counts | Integral- Breite $\Delta^{\circ}2\theta$ |
| K2 | US | 3 | 0,294 | 2,671 | 7,081 | 1700 | 75162 | 0,442 |
| K2 | H2O2 | 3 | 0,298 | 0,842 | 7,093 | 2051 | 86067 | 0,420 |
| K3 | NADA | 3 | 0,255 | 0,000 | 7,081 | 1759 | 52833 | 0,300 |
| K3 | US | 3 | 0,230 | 1,004 | 7,081 | 1907 | 60239 | 0,316 |
| K3 | H2O2 | 3 | 0,247 | 1,089 | 7,087 | 1536 | 56280 | 0,366 |
| K5 | NADA | 3 | 0,210 | 1,196 | 7,070 | 1401 | 42702 | 0,305 |
| K5 | US | 3 | 0,217 | 0,694 | 7,070 | 1580 | 53167 | 0,336 |
| K5 | H2O2 | 3 | 0,256 | 3,398 | 7,070 | 1207 | 50191 | 0,416 |
| K6 | NADA | 3 | 0,255 | 0,938 | 7,070 | 1710 | 55219 | 0,323 |
| K6 | US | 3 | 0,217 | 0,276 | 7,070 | 1914 | 54361 | 0,284 |
| K6 | H2O2 | 3 | 0,228 | 2,687 | 7,070 | 1516 | 46192 | 0,305 |
| K7 | NADA | 3 | 0,263 | 1,379 | 7,081 | 987 | 33153 | 0,336 |
| K7 | US | 6 | 0,184 | 1,033 | 7,070 | 610 | 16475 | 0,270 |
| K7 | H2O2 | 3 | 0,200 | 2,908 | 7,076 | 1024 | 30157 | 0,295 |
| K8 | NADA | 3 | 0,194 | 3,490 | 7,076 | 1577 | 42978 | 0,273 |
| K8 | US | 6 | 0,201 | 2,398 | 7,065 | 468 | 13427 | 0,287 |
| K8 | H2O2 | 3 | 0,215 | 2,347 | 7,076 | 1301 | 42659 | 0,328 |
| K9 | US | 4 | 0,256 | 1,551 | 7,081 | 340 | 14417 | 0,424 |
| K9 | H2O2 | 4 | 0,285 | 2,756 | 7,081 | 1191 | 51017 | 0,428 |
| K11 | H2O2 | 4 | 0,246 | 2,203 | 7,087 | 465 | 24469 | 0,526 |
| K14 | NADA | 3 | 0,192 | 0,314 | 7,070 | 3348 | 88468 | 0,264 |
| K14 | US | 3 | 0,197 | 0,612 | 7,065 | 3756 | 103885 | 0,277 |
| K14 | H2O2 | 3 | 0,207 | 1,304 | 7,065 | 2666 | 78735 | 0,295 |
| K17 | NADA | 3 | 0,207 | 0,971 | 7,070 | 1796 | 59004 | 0,329 |
| K17 | NADA II | 3 | 0,191 | 0,890 | 7,076 | 1704 | 43528 | 0,255 |
| K17 | NADA III | 3 | 0,206 | 1,117 | 7,076 | 1837 | 49955 | 0,272 |
| K17 | NADA IV | 3 | 0,187 | 1,892 | 7,070 | 1739 | 46180 | 0,266 |
| K17 | NADA V | 3 | 0,179 | 0,857 | 7,070 | 1845 | 45418 | 0,246 |
| K17 | VI | 3 | 0,192 | 1,615 | 7,070 | 1935 | 50435 | 0,261 |
| K17 | US | 3 | 0,242 | 1,033 | 7,076 | 1453 | 63111 | 0,434 |
| K17 | US II | 3 | 0,196 | 1,071 | 7,070 | 1450 | 38846 | 0,268 |
| K17 | US ii | 3 | 0,201 | 1,550 | 7,070 | 1471 | 42161 | 0,287 |
| K17 | US III | 3 | 0,209 | 1,005 | 7,070 | 1405 | 42073 | 0,299 |
| K17 | US iii | 3 | 0,202 | 1,040 | 7,076 | 1501 | 45892 | 0,306 |
| K17 | US IV | 3 | 0,193 | 0,521 | 7,070 | 1498 | 39331 | 0,263 |
| K17 | US iv | 3 | 0,202 | 0,299 | 7,070 | 1529 | 50237 | 0,329 |
| K17 | US V | 3 | 0,197 | 1,071 | 7,070 | 1361 | 37707 | 0,277 |
| K17 | US v | 3 | 0,201 | 2,000 | 7,070 | 1351 | 43708 | 0,324 |
| K17 | US VI | 3 | 0,233 | 1,325 | 7,076 | 1266 | 38350 | 0,303 |
| K17 | H2O2 | 3 | 0,204 | 1,512 | 7,076 | 1447 | 47386 | 0,327 |
| K18 | US | 3 | 0,684 | 1,069 | 7,087 | 264 | 23559 | 0,892 |
| K18 | H2O2 | 3 | 0,852 | 6,050 | 7,104 | 204 | 20182 | 0,989 |
| K19 | US | 4 | 0,186 | 2,541 | 7,076 | 661 | 16999 | 0,257 |
| K19 | H2O2 | 4 | 0,281 | 6,165 | 7,076 | 1206 | 42383 | 0,351 |
| K20 | NADA | 3 | 0,201 | 0,746 | 7,076 | 1859 | 51508 | 0,277 |
| K20 | US | 3 | 0,195 | 1,026 | 7,076 | 2232 | 58944 | 0,264 |
| K20 | H2O2 | 3 | 0,224 | 0,893 | 7,076 | 2218 | 68517 | 0,309 |
| K21 | NADA | 3 | 0,199 | 1,150 | 7,076 | 1373 | 43213 | 0,315 |
| K21 | US | 3 | 0,208 | 0,288 | 7,076 | 1486 | 47940 | 0,323 |
| K21 | H2O2 | 3 | 0,211 | 0,474 | 7,076 | 1844 | 55881 | 0,303 |
| K22A15 | US | 4 | 0,258 | 1,357 | 7,081 | 564 | 16275 | 0,289 |
| K22A15 | H2O2 | 4 | 0,342 | 0,979 | 7,070 | 720 | 27304 | 0,379 |
| K22-50A | US | 4 | 0,197 | 3,401 | 7,087 | 436 | 16238 | 0,372 |
| K22-50A | H2O2 | 4 | 0,315 | 0,621 | 7,093 | 970 | 42987 | 0,443 |
| K23 | US | 3 | 0,251 | 0,598 | 7,081 | 442 | 14491 | 0,328 |
| K23 | H2O2 | 3 | 0,322 | 2,500 | 7,093 | 1423 | 57546 | 0,404 |
| K24 | H2O2 | 3 | 0,230 | 0,870 | 7,076 | 1584 | 54902 | 0,347 |
| K25 | H2O2 | 4 | 0,213 | 3,160 | 7,076 | 680 | 20179 | 0,297 |

| 7Å - Chlorit - Peak | | | | | | | | |
|---------------------|-------------------|---------------|----------------------------------|---------|--------------------|-------------------------------|---------------------------|---|
| Proben Nummer | Auf- bereitung | Meßwerte n | FWHM (MW) $\Delta^2\theta$ | s1 % | Peak- Lage Å | Peak- Intensität Counts | Peak- Fläche Counts | Integral- Breite $\Delta^2\theta$ |
| K26 | NADA | 3 | 0,196 | 0,306 | 7,070 | 1267 | 37477 | 0,296 |
| K26 | US | 3 | 0,196 | 0,612 | 7,070 | 1626 | 47110 | 0,290 |
| K26 | H2O2 | 3 | 0,243 | 1,488 | 7,065 | 1533 | 55249 | 0,360 |
| K27 | NADA | 3 | 0,201 | 0,498 | 7,070 | 1296 | 39238 | 0,303 |
| K27 | US | 3 | 0,201 | 1,050 | 7,076 | 1708 | 48519 | 0,284 |
| K27 | H2O2 | 3 | 0,193 | 0,885 | 7,076 | 1737 | 46323 | 0,428 |
| K28 | NADA | 3 | 0,218 | 2,890 | 7,104 | 739 | 23927 | 0,324 |
| K28 | US | 3 | 0,222 | 3,130 | 7,098 | 785 | 26926 | 0,343 |
| K28 | H2O2 | 3 | 0,255 | 2,292 | 7,098 | 876 | 38590 | 0,441 |
| K29 | NADA | 3 | 0,183 | 2,077 | 7,070 | 805 | 20964 | 0,260 |
| K29 | US | 3 | 0,194 | 2,344 | 7,070 | 905 | 25065 | 0,277 |
| K29 | H2O2 | 3 | 0,220 | 1,636 | 7,070 | 1344 | 47145 | 0,351 |
| K30 | US | 3 | 0,204 | 3,627 | 7,076 | 1267 | 42763 | 0,338 |
| K30 | H2O2 | 3 | 0,277 | 7,437 | 7,081 | 889 | 31596 | 0,355 |
| K31 | NADA | 3 | 0,189 | 1,117 | 7,070 | 1139 | 29256 | 0,257 |
| K31 | US | 3 | 0,201 | 1,000 | 7,070 | 1163 | 34622 | 0,298 |
| K31 | H2O2 | 3 | 0,210 | 0,574 | 7,076 | 1187 | 35031 | 0,295 |
| K32 | H2O2 | 4 | 0,212 | 1,174 | 7,076 | 1470 | 45353 | 0,309 |
| K33 | H2O2 | 4 | 0,215 | 1,185 | 7,076 | 2201 | 66104 | 0,300 |
| K34 | NADA | 3 | 0,225 | 1,607 | 7,076 | 1931 | 66979 | 0,347 |
| K34 | US | 3 | 0,214 | 0,708 | 7,076 | 2561 | 85016 | 0,332 |
| K34 | H2O2 | 3 | 0,225 | 1,689 | 7,076 | 2209 | 74491 | 0,337 |
| K35 | H2O2 | 4 | 0,219 | 0,833 | 7,076 | 1701 | 53046 | 0,312 |
| K36 | US | 3 | 0,215 | 1,461 | 7,070 | 972 | 27392 | 0,282 |
| K37 | NADA | 4 | 0,199 | 0,657 | 7,070 | 1649 | 47482 | 0,288 |
| K37 | US | 3 | 0,208 | 2,170 | 7,070 | 2136 | 64665 | 0,303 |
| K37 | H2O2 | 3 | 0,233 | 2,017 | 7,070 | 1856 | 63563 | 0,342 |
| K39 | NADA | 4 | 0,198 | 0,653 | 7,076 | 400 | 12061 | 0,302 |
| K41 | NADA | 4 | 0,198 | 2,887 | 7,070 | 402 | 10820 | 0,269 |
| K42-1 | NADA | 4 | 0,191 | 1,937 | 7,076 | 374 | 9741 | 0,260 |
| K42-2 | NADA | 4 | 0,187 | 2,353 | 7,070 | 319 | 8204 | 0,257 |
| K43 | NADA | 4 | 0,189 | 1,158 | 7,065 | 291 | 7591 | 0,261 |
| K45 | NADA | 4 | 0,203 | 6,485 | 7,076 | 141 | 3913 | 0,278 |
| K46 | NADA | 4 | 0,180 | 2,022 | 7,081 | 625 | 16675 | 0,267 |
| K47 | NADA | 4 | 0,196 | 2,589 | 7,070 | 612 | 17419 | 0,285 |
| K49 | NADA | 4 | 0,203 | 3,216 | 7,087 | 1041 | 29785 | 0,286 |
| K50 | NADA | 4 | 0,203 | 1,782 | 7,076 | 1234 | 34443 | 0,279 |
| K51 | NADA | 4 | 0,212 | 2,222 | 7,076 | 1110 | 33304 | 0,300 |
| K52 | NADA | 4 | 0,193 | 0,895 | 7,070 | 1397 | 38873 | 0,278 |
| K53 | NADA | 4 | 0,190 | 2,086 | 7,081 | 1171 | 31515 | 0,269 |
| K54 | NADA | 4 | 0,331 | 2,500 | 7,093 | 451 | 24366 | 0,540 |
| K55 | NADA | 3 | 0,181 | 4,667 | 7,070 | 658 | 16934 | 0,257 |
| K56 | NADA | 4 | 0,198 | 2,775 | 7,076 | 1194 | 34521 | 0,289 |
| K57 | US | 4 | 0,280 | 1,498 | 7,070 | 834 | 29099 | 0,349 |
| K58-1 | US | 4 | 0,262 | 3,602 | 7,087 | 388 | 13090 | 0,337 |
| K58-2 | US | 4 | 0,258 | 1,892 | 7,076 | 478 | 15779 | 0,330 |
| K59 | US | 4 | 0,279 | 1,439 | 7,081 | 556 | 19893 | 0,358 |
| K60 | US | 4 | 0,274 | 0,627 | 7,081 | 830 | 29156 | 0,351 |
| K61 | US | 4 | 0,263 | 1,004 | 7,070 | 2111 | 68493 | 0,324 |
| K62-1 | US | 4 | 0,281 | 1,036 | 7,081 | 1479 | 53849 | 0,364 |
| K62-2 | US | 4 | 0,264 | 0,778 | 7,076 | 1679 | 54617 | 0,325 |
| K63 | US | 4 | 0,324 | 1,211 | 7,070 | 630 | 28506 | 0,452 |
| K64 | US | 4 | 0,281 | 0,657 | 7,087 | 750 | 26789 | 0,357 |
| K65 | US | 4 | 0,304 | 2,778 | 7,093 | 533 | 23597 | 0,443 |
| K66 | US | 4 | 0,232 | 1,466 | 7,070 | 746 | 23979 | 0,321 |
| K67 | US | 4 | 0,236 | 1,064 | 7,076 | 1043 | 35002 | 0,336 |
| K68 | US | 4 | 0,230 | 3,991 | 7,076 | 602 | 24095 | 0,400 |
| K69 | US | 4 | 0,208 | 1,250 | 7,065 | 953 | 28038 | 0,294 |

| 7Å - Chlorit - Peak | | | | | | | | |
|---------------------|-------------------|---------------|----------------------------------|---------|--------------------|-------------------------------|---------------------------|---|
| Proben Nummer | Auf- bereitung | Meßwerte n | FWHM (MW) $\Delta^2\theta$ | s1 % | Peak- Lage Å | Peak- Intensität Counts | Peak- Fläche Counts | Integral- Breite $\Delta^2\theta$ |
| K70 | US | 4 | 0,166 | 1,677 | 7,070 | 922 | 21853 | 0,237 |
| K71 | US | 4 | 0,190 | 1,368 | 7,072 | 1160 | 30954 | 0,267 |
| K72 | US | 4 | 0,207 | 3,510 | 7,076 | 684 | 19712 | 0,288 |
| K73 | US | 4 | 0,235 | 2,161 | 7,081 | 333 | 10123 | 0,304 |
| K74 | US | 4 | 0,196 | 1,480 | 7,065 | 910 | 23901 | 0,263 |
| K75 | US | 4 | 0,218 | 3,721 | 7,076 | 399 | 12230 | 0,307 |
| K76 | US | 4 | 0,222 | 5,023 | 7,073 | 805 | 25981 | 0,323 |
| K77 | US | 4 | 0,193 | 1,146 | 7,071 | 1328 | 36270 | 0,273 |
| K78-1 | US | 4 | 0,200 | 1,566 | 7,072 | 1475 | 39507 | 0,268 |
| K78-2 | US | 4 | 0,197 | 2,449 | 7,076 | 767 | 20061 | 0,259 |
| K79 | US | 4 | 0,192 | 0,890 | 7,065 | 1532 | 39293 | 0,256 |
| K80 | US | 4 | 0,217 | 2,617 | 7,072 | 527 | 14924 | 0,283 |
| K81 | US | 4 | 0,209 | 2,116 | 7,076 | 796 | 22794 | 0,286 |
| K82 | US | 4 | 0,192 | 2,320 | 7,070 | 1065 | 27340 | 0,257 |
| K83 | US | 2 | 0,197 | 1,050 | 7,065 | 1078 | 30184 | 0,280 |
| K84 | US | 2 | 0,215 | 1,643 | 7,076 | 1048 | 33502 | 0,320 |
| K85 | US | 2 | 0,203 | 1,393 | 7,059 | 1661 | 44949 | 0,271 |
| K86 | US | 2 | 0,197 | 1,436 | 7,070 | 1260 | 34145 | 0,271 |
| K87 | US | 4 | 0,332 | 0,846 | 7,076 | 813 | 38060 | 0,468 |
| K88 | US | 4 | 0,252 | 2,016 | 7,076 | 984 | 36102 | 0,367 |
| K89 | US | 4 | 0,209 | 1,923 | 7,076 | 1407 | 41232 | 0,293 |
| K90 | US | 4 | 0,263 | 2,146 | 7,076 | 717 | 25997 | 0,363 |
| K91 | US | 4 | 0,234 | 1,795 | 7,076 | 740 | 24252 | 0,328 |
| K92 | US | 4 | 0,282 | 4,270 | 7,059 | 673 | 26881 | 0,399 |
| K93 | US | 4 | 0,208 | 1,627 | 7,076 | 1164 | 34367 | 0,295 |
| K94a | US | 4 | 0,208 | 1,796 | 7,070 | 837 | 25419 | 0,304 |
| K95 | US | 4 | 0,180 | 1,202 | 7,070 | 797 | 20134 | 0,253 |
| K96 | US | 4 | 0,269 | 1,324 | 7,070 | 1188 | 45838 | 0,386 |
| K97 | US | 4 | 0,295 | 1,267 | 7,065 | 656 | 27707 | 0,422 |
| K98 | US | 4 | 0,221 | 0,633 | 7,070 | 1154 | 36099 | 0,313 |
| K99 | US | 4 | 0,267 | 2,322 | 7,076 | 656 | 24899 | 0,380 |
| K100 | US | 4 | 0,218 | 0,596 | 7,070 | 1354 | 42228 | 0,312 |
| K101 | US | 4 | 0,200 | 1,893 | 7,070 | 1164 | 32733 | 0,281 |
| K102 | US | 4 | 0,203 | 3,897 | 7,076 | 748 | 20411 | 0,273 |
| K103 | US | 4 | 0,203 | 1,558 | 7,059 | 1340 | 38141 | 0,285 |
| K104 | US | 4 | 0,192 | 2,642 | 7,070 | 1487 | 39707 | 0,267 |
| K105 | US | 4 | 0,181 | 0,276 | 7,065 | 2496 | 61732 | 0,247 |
| K106a | US | 4 | 0,168 | 1,976 | 7,076 | 1020 | 24471 | 0,240 |
| K106b | US | 4 | 0,176 | 1,676 | 7,070 | 1112 | 27704 | 0,249 |
| K108 | US | 4 | 0,198 | 3,085 | 7,070 | 1535 | 39665 | 0,258 |
| K109 | US | 4 | 0,223 | 1,390 | 7,076 | 725 | 24391 | 0,336 |
| K110 | US | 4 | 0,182 | 0,989 | 7,076 | 3371 | 82842 | 0,246 |
| K111 | US | 4 | 0,217 | 4,364 | 7,070 | 859 | 27502 | 0,320 |
| K112 | US | 4 | 0,197 | 2,020 | 7,070 | 794 | 22053 | 1,770 |
| K117 | US | 4 | 0,187 | 2,902 | 7,059 | 1470 | 37958 | 0,258 |
| K118 | US | 4 | 0,192 | 2,062 | 7,065 | 783 | 21351 | 0,273 |
| FR039 | H2O2 | 4 | 0,251 | 1,235 | 7,076 | 662 | 22387 | 0,338 |
| FR040 | H2O2 | 4 | 0,291 | 0,968 | 7,081 | 1950 | 59935 | 0,307 |
| FR041 | H2O2 | 4 | 0,225 | 1,067 | 7,076 | 2593 | 78244 | 0,302 |
| FR042 | H2O2 | 4 | 0,248 | 2,470 | 7,065 | 1115 | 38523 | 0,345 |
| FR043 | H2O2 | 4 | 0,288 | 1,585 | 7,070 | 1801 | 70216 | 0,390 |
| FR044 | H2O2 | - | - | - | - | - | - | - |
| FR045 | H2O2 | 4 | 0,233 | 1,781 | 7,076 | 1539 | 50842 | 0,330 |
| FR046 | H2O2 | 4 | 0,260 | 2,510 | 7,081 | 638 | 20447 | 0,320 |
| FR047 | H2O2 | 3 | 0,256 | 2,717 | 7,079 | 929 | 32217 | 0,347 |
| FR101 | H2O2 | - | - | - | - | - | - | - |
| FR102 | H2O2 | 4 | 0,283 | 3,486 | 7,070 | 124 | 4566 | 0,368 |
| FR103 | H2O2 | 4 | 0,475 | 7,782 | 7,081 | 80 | 4668 | 0,584 |

| 7Å - Chlorit - Peak | | | | | | | | |
|---------------------|-------------------|---------------|---------------------------------|---------|-----------|----------------------|------------------|--|
| Proben Nummer | Auf- bereitung | Meßwerte n | FWHM | | Peak- | Peak- | Peak- | Integral- Breite $\Delta^{\circ}2\theta$ |
| | | | (MW) $\Delta^{\circ}2\theta$ | s1 % | Lage Å | Intensität Counts | Fläche Counts | |
| FR104 | H2O2 | 4 | 0,276 | 3,154 | 7,070 | 369 | 14833 | 0,402 |
| FR105 | H2O2 | 4 | 0,275 | 10,456 | 7,076 | 112 | 4206 | 0,376 |
| FR106 | H2O2 | 4 | 0,293 | 5,817 | 7,065 | 299 | 11450 | 0,383 |
| FR107 | H2O2 | 4 | 0,336 | 4,940 | 7,073 | 141 | 6770 | 0,480 |
| FR108 | H2O2 | 4 | 0,318 | 4,511 | 7,104 | 170 | 5952 | 0,350 |
| FR109 | H2O2 | 4 | 0,331 | 0,197 | 7,093 | 87 | 3954 | 0,454 |
| FR110 | H2O2 | 4 | 0,244 | 9,021 | 7,087 | 169 | 5476 | 0,324 |
| FR111 | H2O2 | 4 | 0,232 | 3,435 | 7,076 | 240 | 7829 | 0,326 |
| FR112 | H2O2 | 5 | 0,237 | 3,386 | 7,076 | 708 | 21524 | 0,304 |
| FR113 | H2O2 | 4 | 0,285 | 0,647 | 7,081 | 649 | 22360 | 0,345 |
| FR114 | H2O2 | 5 | 0,230 | 1,991 | 7,062 | 245 | 7631 | 0,311 |
| FR115 | H2O2 | 4 | 0,275 | 3,210 | 7,081 | 292 | 10922 | 0,374 |
| FR116 | H2O2 | 4 | 0,229 | 3,778 | 7,070 | 303 | 9311 | 0,307 |
| FR117 | H2O2 | 4 | 0,202 | 3,116 | 7,076 | 1221 | 34863 | 0,286 |
| FR118 | H2O2 | 4 | 0,217 | 1,916 | 7,070 | 1002 | 31799 | 0,317 |
| FR119 | H2O2 | 4 | 0,219 | 3,211 | 7,076 | 645 | 20457 | 0,317 |
| FR120 | H2O2 | 4 | 0,259 | 3,735 | 7,093 | 467 | 17854 | 0,382 |
| FR122 | H2O2 | 4 | 0,373 | 7,216 | 7,093 | 393 | 26748 | 0,681 |
| FR123 | H2O2 | 4 | 0,279 | 4,176 | 7,081 | 411 | 16750 | 0,408 |
| FR124 | H2O2 | 4 | 0,329 | 2,783 | 7,081 | 1031 | 46788 | 0,454 |
| FR125 | H2O2 | 4 | 0,311 | 5,244 | 7,079 | 391 | 19499 | 0,499 |
| FR126 | H2O2 | 4 | 0,331 | 2,779 | 7,087 | 448 | 24585 | 0,549 |
| FR127 | H2O2 | 4 | 0,297 | 5,424 | 7,076 | 862 | 35811 | 0,415 |
| FR128 | H2O2 | 4 | 0,316 | 0,675 | 7,093 | 646 | 28317 | 0,438 |
| FR129 | H2O2 | 4 | 0,418 | 6,667 | 7,081 | 283 | 20195 | 0,714 |
| FR129a | H2O2 | 4 | 0,380 | 7,029 | 7,084 | 244 | 15617 | 0,640 |
| FR130 | H2O2 | 4 | 0,350 | 2,342 | 7,081 | 1057 | 49247 | 0,466 |
| FR131 | H2O2 | 4 | 0,287 | 4,240 | 7,087 | 824 | 34391 | 0,417 |
| FR132-1 | H2O2 | 4 | 0,343 | 0,880 | 7,090 | 82 | 3892 | 0,475 |
| F132-2 | H2O2 | 4 | 0,365 | 21,795 | 7,081 | 76 | 3697 | 0,486 |
| FR133 | H2O2 | 4 | 0,302 | 1,258 | 7,076 | 845 | 36106 | 0,427 |
| FR134 | H2O2 | 4 | 0,372 | 4,946 | 7,087 | 442 | 25468 | 0,576 |
| FR135 | H2O2 | 4 | 0,341 | 5,131 | 7,076 | 305 | 16076 | 0,527 |
| FR136 | H2O2 | 4 | 0,317 | 3,236 | 7,076 | 498 | 21479 | 0,431 |
| FR137 | H2O2 | 4 | 0,313 | 2,596 | 7,084 | 496 | 22228 | 0,448 |
| FR138 | H2O2 | 4 | 0,293 | 2,799 | 7,087 | 1028 | 46463 | 0,452 |
| FR139 | H2O2 | 4 | 0,267 | 0,037 | 7,079 | 665 | 23378 | 0,352 |
| FR141 | H2O2 | 4 | 0,284 | 0,070 | 7,084 | 670 | 24519 | 0,366 |
| FR142 | H2O2 | 4 | 0,277 | 0,899 | 7,076 | 558 | 20185 | 0,362 |
| FR144 | H2O2 | 4 | 0,287 | 2,545 | 7,076 | 417 | 17650 | 0,423 |
| FR145 | H2O2 | 4 | 0,313 | 6,026 | 7,096 | 219 | 10533 | 0,457 |
| FR146 | H2O2 | 4 | 0,413 | 5,149 | 7,073 | 219 | 11037 | 0,504 |
| FR147 | H2O2 | 4 | 0,262 | 2,346 | 7,076 | 752 | 27654 | 0,368 |
| FR158 | H2O2 | 4 | 0,238 | 3,403 | 7,065 | 946 | 29912 | 0,316 |
| FR159 | H2O2 | 4 | 0,249 | 1,423 | 7,081 | 1149 | 43288 | 0,377 |
| FR160 | H2O2 | 4 | 0,353 | 3,718 | 7,062 | 653 | 35715 | 0,547 |
| FR161 | H2O2 | 4 | 0,309 | 5,526 | 7,098 | 247 | 10874 | 0,440 |
| FR162 | H2O2 | 4 | 0,405 | 8,416 | 7,059 | 192 | 12778 | 0,666 |
| FR163 | H2O2 | 4 | 0,303 | 3,878 | 7,070 | 846 | 39021 | 0,461 |
| FR176 | H2O2 | 4 | 0,290 | 0,448 | 7,070 | 763 | 29092 | 0,381 |
| FR177 | H2O2 | 4 | 0,351 | 3,761 | 7,081 | 645 | 27966 | 0,434 |
| FR178 | H2O2 | 4 | 0,338 | 1,269 | 7,076 | 483 | 21343 | 0,442 |
| FR179 | H2O2 | 4 | 0,338 | 2,636 | 7,081 | 294 | 13577 | 0,462 |
| FR180 | H2O2 | 4 | 0,279 | 1,769 | 7,076 | 853 | 31481 | 0,369 |
| FR181 | H2O2 | 4 | 0,291 | 1,615 | 7,070 | 508 | 20201 | 0,398 |
| FR182 | H2O2 | 4 | 0,314 | 4,662 | 7,065 | 469 | 20882 | 0,445 |
| FR183 | H2O2 | 4 | 0,291 | 8,050 | 7,070 | 615 | 24387 | 0,397 |
| FR184 | H2O2 | 4 | 0,385 | 2,291 | 7,076 | 400 | 20237 | 0,506 |

| 7Å - Chlorit - Peak | | | | | | | | |
|---------------------|-------------------|---------------|---|---------|--------------------|-------------------------------|---------------------------|--|
| Proben Nummer | Auf- bereitung | Meßwerte n | FWHM (MW) $\Delta^{\circ}2\theta$ | s1 % | Peak- Lage Å | Peak- Intensität Counts | Peak- Fläche Counts | Integral- Breite $\Delta^{\circ}2\theta$ |
| FR185 | H2O2 | 4 | 0,462 | 3,407 | 7,070 | 174 | 10771 | 0,619 |
| FR189 | H2O2 | 4 | 0,332 | 4,013 | 7,059 | 499 | 23849 | 0,478 |
| FR190 | H2O2 | 4 | 0,298 | 1,338 | 7,081 | 428 | 16312 | 0,381 |
| FR191 | H2O2 | 4 | 0,331 | 1,358 | 7,059 | 397 | 19544 | 0,492 |
| FR192a | H2O2 | 4 | 0,325 | 2,848 | 7,062 | 400 | 14560 | 0,364 |
| FR192b | H2O2 | 4 | 0,530 | 4,066 | 7,084 | 259 | 14922 | 0,576 |
| FR193 | H2O2 | 4 | 0,447 | 1,945 | 7,070 | 290 | 13863 | 0,478 |
| FR194 | H2O2 | 4 | 0,345 | 2,269 | 7,081 | 335 | 14911 | 0,445 |
| FR195 | H2O2 | 4 | 0,358 | 1,691 | 7,087 | 608 | 28625 | 0,471 |
| FR196 | H2O2 | 4 | 0,365 | 2,563 | 7,053 | 446 | 24772 | 0,555 |
| FR197 | H2O2 | 4 | 0,556 | 3,504 | 7,067 | 235 | 12692 | 0,540 |

| 14Å - Chlorit - Peak | | | | | | | | |
|----------------------|-------------------------|--------------------|-------------------------|--------|---------------|---------------------|-----------------|-------------------------|
| Proben Nummer | Art der aufbereitung | Meß- werte n | FWHM | | Peak- Lage | Peak- Intensität | Peak- Fläche | Integral- Breite |
| | | | (MW) | s1 | Å | Counts | Counts | $\Delta^{\circ}2\Theta$ |
| | | | $\Delta^{\circ}2\Theta$ | % | | | | |
| K2 | US | 3 | 0,343 | 4,783 | 14,165 | 423 | 18535 | 0,403 |
| K2 | H2O2 | 3 | 0,360 | 1,690 | 14,210 | 451 | 21538 | 0,478 |
| K3 | NADA | 3 | 0,249 | 6,397 | 14,187 | 331 | 11146 | 0,337 |
| K3 | US | 3 | 0,253 | 12,040 | 14,165 | 329 | 11446 | 0,305 |
| K3 | H2O2 | 3 | 0,293 | 6,136 | 14,210 | 257 | 9445 | 0,368 |
| K5 | NADA | 3 | 0,227 | 5,336 | 14,165 | 286 | 8972 | 0,314 |
| K5 | US | 3 | 0,227 | 6,391 | 14,142 | 324 | 10101 | 0,312 |
| K5 | H2O2 | 3 | 0,270 | 7,941 | 14,165 | 230 | 8084 | 0,351 |
| K6 | NADA | 3 | 0,237 | 7,490 | 14,187 | 285 | 9003 | 0,316 |
| K6 | US | 3 | 0,236 | 6,391 | 14,165 | 360 | 11284 | 0,313 |
| K6 | H2O2 | 3 | 0,249 | 7,941 | 14,142 | 258 | 8282 | 0,321 |
| K7 | NADA | 3 | 0,284 | 5,694 | 14,187 | 168 | 5929 | 0,353 |
| K7 | US | 6 | 0,195 | 5,544 | 14,165 | 123 | 3447 | 0,280 |
| K7 | H2O2 | 3 | 0,249 | 8,293 | 14,165 | 197 | 6680 | 0,339 |
| K8 | NADA | 3 | 0,201 | 2,551 | 14,165 | 380 | 10662 | 0,281 |
| K8 | US | 6 | 0,217 | 6,049 | 14,097 | 111 | 3407 | 0,307 |
| K8 | H2O2 | 3 | 0,234 | 3,219 | 14,142 | 291 | 9449 | 0,325 |
| K9 | US | 4 | 0,284 | 5,799 | 14,142 | 113 | 4858 | 0,430 |
| K9 | H2O2 | 4 | 0,319 | 4,479 | 14,119 | 437 | 20812 | 0,476 |
| K11 | H2O2 | 4 | 0,239 | 4,632 | 14,210 | 82 | 2632 | 0,321 |
| K14 | NADA | 3 | 0,204 | 1,569 | 14,142 | 580 | 16739 | 0,289 |
| K14 | US | 3 | 0,209 | 3,062 | 14,142 | 607 | 17752 | 0,292 |
| K14 | H2O2 | 3 | 0,241 | 3,856 | 14,142 | 401 | 13317 | 0,332 |
| K17 | NADA | 3 | 0,214 | 0,708 | 14,165 | 345 | 9932 | 0,288 |
| K17 | NADA II | 3 | 0,200 | 2,587 | 14,165 | 338 | 9438 | 0,279 |
| K17 | NADA III | 3 | 0,210 | 1,683 | 14,187 | 339 | 9843 | 0,290 |
| K17 | NADA IV | 3 | 0,194 | 1,823 | 14,142 | 326 | 8758 | 0,269 |
| K17 | NADA V | 3 | 0,185 | 2,406 | 14,142 | 369 | 9609 | 0,260 |
| K17 | NADA VI | 3 | 0,199 | 5,231 | 14,165 | 360 | 9921 | 0,276 |
| K17 | US | 3 | 0,246 | 2,099 | 14,187 | 254 | 8400 | 0,331 |
| K17 | US II | 3 | 0,209 | 2,356 | 14,142 | 300 | 9569 | 0,319 |
| K17 | US ii | 3 | 0,213 | 4,076 | 14,165 | 281 | 8362 | 0,298 |
| K17 | US III | 3 | 0,255 | 1,786 | 14,142 | 280 | 8627 | 0,308 |
| K17 | US iii | 3 | 0,216 | 5,708 | 14,165 | 283 | 8379 | 0,296 |
| K17 | US IV | 3 | 0,215 | 6,359 | 14,165 | 290 | 9125 | 0,315 |
| K17 | US iv | 3 | 0,228 | 5,263 | 14,142 | 278 | 8627 | 0,310 |
| K17 | US V | 3 | 0,205 | 2,537 | 14,165 | 278 | 8181 | 0,294 |
| K17 | US v | 3 | 0,213 | 4,764 | 14,187 | 271 | 7985 | 0,295 |
| K17 | US VI | 3 | 0,245 | 8,193 | 14,165 | 250 | 8244 | 0,330 |
| K17 | H2O2 | 3 | 0,216 | 1,488 | 14,165 | 299 | 9009 | 0,301 |
| K18 | US | 3 | 0,389 | 5,782 | 14,210 | 131 | 7152 | 0,546 |
| K18 | H2O2 | 3 | 0,485 | 31,287 | 14,256 | 94 | 6329 | 0,673 |
| K19 | US | 4 | 0,211 | 0,922 | 14,142 | 166 | 5795 | 0,349 |
| K19 | H2O2 | 4 | 0,349 | 0,296 | 14,142 | 292 | 14804 | 0,507 |
| K20 | NADA | 3 | 0,227 | 4,690 | 14,165 | 359 | 11434 | 0,318 |
| K20 | US | 3 | 0,208 | 0,478 | 14,165 | 393 | 12031 | 0,306 |
| K20 | H2O2 | 3 | 0,273 | 2,028 | 14,187 | 401 | 14454 | 0,360 |
| K21 | NADA | 3 | 0,228 | 2,423 | 14,187 | 244 | 7881 | 0,323 |
| K21 | US | 3 | 0,219 | 2,227 | 14,142 | 267 | 8000 | 0,300 |
| K21 | H2O2 | 3 | 0,234 | 4,770 | 14,187 | 319 | 9746 | 0,306 |
| K22A15 | US | 4 | 0,280 | 4,380 | 14,165 | 114 | 3369 | 0,296 |
| K22A15 | H2O2 | 4 | 0,385 | 5,462 | 14,119 | 122 | 4797 | 0,393 |
| K22-50A | US | 4 | 0,224 | 3,682 | 14,233 | 78 | 3035 | 0,389 |
| K22-50A | H2O2 | 4 | 0,343 | 8,245 | 14,210 | 158 | 6936 | 0,439 |
| K23 | US | 3 | 0,287 | 0,941 | 14,119 | 108 | 4691 | 0,434 |
| K23 | H2O2 | 3 | 0,355 | 3,914 | 14,210 | 292 | 12737 | 0,436 |
| K24 | H2O2 | 3 | 0,242 | 5,579 | 14,165 | 297 | 9173 | 0,309 |
| K25 | H2O2 | 4 | 0,237 | 0,711 | 14,165 | 124 | 3926 | 0,317 |

| 14Å - Chlorit - Peak | | | | | | | | |
|----------------------|------------------------|--------------------|---------------------------------|---------|--------------------|-------------------------------|---------------------------|--|
| Proben Nummer | Art der ufbereitung | Meß- werte n | FWHM | | Peak- Lage Å | Peak- Intensität Counts | Peak- Fläche Counts | Integral- Breite $\Delta^{\circ}2\Theta$ |
| | | | (MW) $\Delta^{\circ}2\Theta$ | s1 % | | | | |
| K26 | NADA | 3 | 0,205 | 2,315 | 14,142 | 226 | 6210 | 0,275 |
| K26 | US | 3 | 0,207 | 1,298 | 14,142 | 325 | 9188 | 0,283 |
| K26 | H2O2 | 3 | 0,269 | 1,498 | 14,142 | 278 | 9958 | 0,358 |
| K27 | NADA | 3 | 0,198 | 6,382 | 14,142 | 258 | 7331 | 0,284 |
| K27 | US | 3 | 0,215 | 8,295 | 14,142 | 330 | 9874 | 0,299 |
| K27 | H2O2 | 3 | 0,201 | 4,208 | 14,165 | 353 | 9783 | 0,262 |
| K28 | NADA | 3 | 0,208 | 0,574 | 14,210 | 379 | 11271 | 0,297 |
| K28 | US | 3 | 0,232 | 0,426 | 14,210 | 413 | 12745 | 0,309 |
| K28 | H2O2 | 3 | 0,251 | 2,097 | 14,210 | 393 | 12645 | 0,322 |
| K29 | NADA | 3 | 0,206 | 10,383 | 14,142 | 156 | 4679 | 0,300 |
| K29 | US | 3 | 0,211 | 2,039 | 14,187 | 169 | 5083 | 0,301 |
| K29 | H2O2 | 3 | 0,250 | 5,890 | 14,142 | 227 | 7542 | 0,332 |
| K30 | US | 3 | 0,227 | 4,130 | 14,165 | 328 | 10358 | 0,316 |
| K30 | H2O2 | 3 | 0,328 | 0,400 | 14,165 | 212 | 9084 | 0,428 |
| K31 | NADA | 3 | 0,205 | 2,970 | 14,165 | 216 | 6162 | 0,285 |
| K31 | US | 3 | 0,255 | 4,636 | 14,165 | 205 | 6148 | 0,300 |
| K31 | H2O2 | 3 | 0,247 | 10,287 | 14,142 | 211 | 6661 | 0,316 |
| K32 | H2O2 | 4 | 0,229 | 0,346 | 14,165 | 310 | 9760 | 0,315 |
| K33 | H2O2 | 4 | 0,242 | 2,101 | 14,165 | 419 | 13315 | 0,318 |
| K34 | NADA | 3 | 0,237 | 7,185 | 14,165 | 402 | 13027 | 0,324 |
| K34 | US | 3 | 0,227 | 0,942 | 14,142 | 535 | 17443 | 0,326 |
| K34 | H2O2 | 3 | 0,247 | 5,738 | 14,142 | 435 | 14869 | 0,342 |
| K35 | H2O2 | 4 | 0,255 | 5,534 | 14,165 | 325 | 11247 | 0,346 |
| K36 | US | 3 | 0,254 | 7,570 | 14,142 | 210 | 7165 | 0,341 |
| K37 | NADA | 4 | 0,215 | 1,557 | 14,142 | 301 | 8684 | 0,289 |
| K37 | US | 3 | 0,216 | 3,182 | 14,142 | 375 | 10876 | 0,290 |
| K37 | H2O2 | 3 | 0,244 | 1,829 | 14,165 | 290 | 9258 | 0,319 |
| K39 | NADA | 4 | 0,198 | 8,128 | 14,165 | 73 | 2234 | 0,306 |
| K41 | NADA | 4 | 0,227 | 11,911 | 14,187 | 78 | 2421 | 0,310 |
| K42-1 | NADA | 4 | 0,216 | 4,818 | 14,142 | 71 | 2100 | 0,296 |
| K42-2 | NADA | 4 | 0,236 | 12,424 | 14,142 | 62 | 1910 | 0,308 |
| K43 | NADA | 4 | 0,216 | 0,137 | 14,165 | 59 | 1659 | 0,281 |
| K45 | NADA | 4 | 0,282 | 24,049 | 14,165 | 27 | 1188 | 0,440 |
| K46 | NADA | 4 | 0,190 | 14,764 | 14,210 | 119 | 3269 | 0,275 |
| K47 | NADA | 4 | 0,210 | 9,814 | 14,165 | 104 | 3021 | 0,290 |
| K49 | NADA | 4 | 0,234 | 3,680 | 14,210 | 189 | 6065 | 0,321 |
| K50 | NADA | 4 | 0,232 | 5,696 | 14,165 | 176 | 5574 | 0,317 |
| K51 | NADA | 4 | 0,235 | 0,091 | 14,210 | 205 | 6702 | 0,327 |
| K52 | NADA | 4 | 0,216 | 3,879 | 14,119 | 292 | 8608 | 0,295 |
| K53 | NADA | 4 | 0,213 | 1,972 | 14,187 | 263 | 7466 | 0,284 |
| K54 | NADA | 4 | 0,408 | 9,075 | 14,233 | 174 | 9616 | 0,553 |
| K55 | NADA | 3 | 0,202 | 6,345 | 14,142 | 132 | 3884 | 0,294 |
| K56 | NADA | 4 | 0,217 | 6,651 | 14,165 | 286 | 8728 | 0,305 |
| K57 | US | 4 | 0,320 | 2,949 | 14,119 | 159 | 6167 | 0,388 |
| K58-1 | US | 4 | 0,316 | 0,157 | 14,165 | 77 | 2718 | 0,353 |
| K58-2 | US | 4 | 0,285 | 0,365 | 14,187 | 88 | 3163 | 0,359 |
| K59 | US | 4 | 0,313 | 7,089 | 14,210 | 110 | 3934 | 0,358 |
| K60 | US | 4 | 0,285 | 11,875 | 14,233 | 142 | 4908 | 0,346 |
| K61 | US | 4 | 0,285 | 3,380 | 14,165 | 322 | 11173 | 0,347 |
| K62-1 | US | 4 | 0,308 | 4,513 | 14,187 | 242 | 9067 | 0,375 |
| K62-2 | US | 4 | 0,283 | 1,345 | 14,187 | 274 | 9831 | 0,359 |
| K63 | US | 4 | 0,358 | 3,247 | 14,142 | 219 | 9608 | 0,439 |
| K64 | US | 4 | 0,307 | 8,502 | 14,187 | 131 | 4674 | 0,357 |
| K65 | US | 4 | 0,306 | 2,079 | 14,187 | 433 | 17168 | 0,396 |
| K66 | US | 4 | 0,261 | 8,045 | 14,142 | 144 | 4930 | 0,342 |
| K67 | US | 4 | 0,262 | 6,207 | 14,142 | 210 | 7312 | 0,348 |
| K68 | US | 4 | 0,287 | 7,238 | 14,119 | 143 | 6409 | 0,448 |
| K69 | US | 4 | 0,254 | 7,500 | 14,142 | 166 | 5507 | 0,332 |

| 14Å - Chlorit - Peak | | | | | | | | |
|----------------------|------------------------|--------------------|--------------------------|---------|---------------|---------------------|-----------------|---------------------|
| Proben Nummer | Art der ufbereitung | Meß- werte n | FWHM | | Peak- Lage | Peak- Intensität | Peak- Fläche | Integral- Breite |
| | | | (MW) $\Delta^2\Theta$ | s1 % | Å | Counts | Counts | $\Delta^2\Theta$ |
| K70 | US | 4 | 0,183 | 4,317 | 14,165 | 176 | 4229 | 0,393 |
| K71 | US | 4 | 0,197 | 6,834 | 14,142 | 249 | 6713 | 0,270 |
| K72 | US | 4 | 0,219 | 66,818 | 14,165 | 150 | 4326 | 0,288 |
| K73 | US | 4 | 0,296 | 3,458 | 14,187 | 92 | 3429 | 0,373 |
| K74 | US | 4 | 0,203 | 7,972 | 14,119 | 178 | 4631 | 0,260 |
| K75 | US | 4 | 0,223 | 15,783 | 14,165 | 91 | 2575 | 0,283 |
| K76 | US | 4 | 0,242 | 4,500 | 14,142 | 201 | 6423 | 0,320 |
| K77 | US | 4 | 0,230 | 4,956 | 14,142 | 290 | 9063 | 0,313 |
| K78-1 | US | 4 | 0,227 | 5,789 | 14,142 | 276 | 8054 | 0,292 |
| K78-2 | US | 4 | 0,218 | 7,014 | 14,165 | 148 | 3985 | 0,269 |
| K79 | US | 4 | 0,217 | 1,168 | 14,119 | 275 | 7990 | 0,291 |
| K80 | US | 4 | 0,251 | 8,596 | 14,142 | 104 | 3797 | 0,365 |
| K81 | US | 4 | 0,203 | 4,080 | 14,176 | 151 | 4755 | 0,315 |
| K82 | US | 4 | 0,205 | 3,971 | 14,142 | 224 | 6182 | 0,276 |
| K83 | US | 2 | 0,210 | 0,625 | 14,142 | 214 | 6181 | 0,289 |
| K84 | US | 2 | 0,226 | 0,921 | 14,165 | 272 | 8515 | 0,313 |
| K85 | US | 2 | 0,216 | 2,273 | 14,097 | 326 | 9760 | 0,299 |
| K86 | US | 2 | 0,213 | 7,723 | 14,119 | 283 | 8571 | 0,303 |
| K87 | US | 4 | 0,313 | 6,019 | 14,119 | 303 | 12741 | 0,420 |
| K88 | US | 4 | 0,270 | 4,416 | 14,119 | 253 | 9045 | 0,358 |
| K89 | US | 4 | 0,226 | 4,826 | 14,142 | 261 | 8058 | 0,309 |
| K90 | US | 4 | 0,303 | 3,726 | 14,142 | 218 | 8976 | 0,412 |
| K91 | US | 4 | 0,286 | 8,712 | 14,153 | 231 | 9242 | 0,400 |
| K92 | US | 4 | 0,307 | 1,010 | 14,097 | 251 | 10856 | 0,433 |
| K93 | US | 4 | 0,249 | 3,455 | 14,165 | 256 | 8560 | 0,334 |
| K94a | US | 4 | 0,231 | 2,143 | 14,142 | 192 | 5993 | 0,312 |
| K95 | US | 4 | 0,221 | 7,500 | 14,142 | 172 | 5263 | 0,306 |
| K96 | US | 4 | 0,397 | 2,744 | 14,142 | 269 | 12961 | 0,482 |
| K97 | US | 4 | 0,370 | 4,802 | 14,142 | 218 | 11643 | 0,534 |
| K98 | US | 4 | 0,260 | 1,712 | 14,142 | 241 | 8811 | 1,110 |
| K99 | US | 4 | 0,356 | 7,994 | 14,187 | 194 | 9683 | 0,499 |
| K100 | US | 4 | 0,249 | 0,398 | 14,131 | 264 | 9096 | 0,345 |
| K101 | US | 4 | 0,223 | 3,911 | 14,119 | 253 | 8179 | 0,323 |
| K102 | US | 4 | 0,231 | 4,504 | 14,187 | 127 | 3657 | 0,288 |
| K103 | US | 4 | 0,197 | 3,122 | 14,097 | 240 | 6896 | 0,287 |
| K104 | US | 4 | 0,203 | 6,099 | 14,165 | 268 | 7839 | 0,292 |
| K105 | US | 4 | 0,198 | 1,450 | 14,119 | 440 | 12508 | 0,284 |
| K106a | US | 4 | 0,191 | 4,697 | 14,165 | 228 | 6649 | 0,292 |
| K106b | US | 4 | 0,196 | 0,859 | 14,119 | 233 | 6855 | 0,294 |
| K108 | US | 4 | 0,208 | 6,018 | 14,131 | 334 | 9464 | 0,283 |
| K109 | US | 4 | 0,276 | 4,424 | 14,165 | 162 | 6649 | 0,410 |
| K110 | US | 4 | 0,206 | 1,635 | 14,165 | 529 | 14973 | 0,283 |
| K111 | US | 4 | 0,272 | 3,620 | 14,131 | 249 | 9736 | 0,391 |
| K112 | US | 4 | 0,247 | 7,175 | 14,119 | 134 | 4146 | 0,309 |
| K117 | US | 4 | 0,206 | 5,945 | 14,097 | 267 | 7471 | 0,280 |
| K118 | US | 4 | 0,245 | 5,107 | 14,119 | 153 | 4755 | 0,311 |
| FR039 | H2O2 | 4 | 0,280 | 7,657 | 14,187 | 131 | 4291 | 0,328 |
| FR040 | H2O2 | 4 | 0,247 | 3,198 | 14,187 | 259 | 8392 | 0,324 |
| FR041 | H2O2 | 4 | 0,252 | 3,346 | 14,165 | 409 | 13499 | 0,330 |
| FR042 | H2O2 | 4 | 0,273 | 4,818 | 14,119 | 170 | 5742 | 0,338 |
| FR043 | H2O2 | 4 | 0,320 | 3,563 | 14,086 | 334 | 13304 | 0,398 |
| FR044 | H2O2 | - | - | - | - | - | - | - |
| FR045 | H2O2 | 4 | 0,265 | 8,606 | 14,187 | 251 | 8805 | 0,351 |
| FR046 | H2O2 | 4 | 0,283 | 9,472 | 14,165 | 209 | 8387 | 0,401 |
| FR047 | H2O2 | 3 | 0,300 | 2,585 | 14,119 | 249 | 11356 | 0,456 |
| FR101 | H2O2 | - | - | - | - | - | - | - |
| FR102 | H2O2 | 4 | 0,410 | 18,471 | 14,210 | 27 | 1257 | 0,466 |
| FR103 | H2O2 | 4 | 0,495 | 16,139 | 14,142 | 42 | 2460 | 0,586 |

| 14Å - Chlorit - Peak | | | | | | | | |
|----------------------|-------------------------|--------------------|--------------------------|---------|---------------|---------------------|-----------------|---------------------|
| Proben Nummer | Art der aufbereitung | Meß- werte n | FWHM | | Peak- Lage | Peak- Intensität | Peak- Fläche | Integral- Breite |
| | | | (MW) $\Delta^2\Theta$ | s1 % | Å | Counts | Counts | $\Delta^2\Theta$ |
| FR104 | H2O2 | 4 | 0,337 | 6,106 | 14,233 | 33 | 1329 | 0,403 |
| FR105 | H2O2 | 4 | 0,380 | 30,712 | 14,233 | 15 | 448 | 0,299 |
| FR106 | H2O2 | 4 | 0,363 | 9,511 | 14,074 | 35 | 1322 | 0,378 |
| FR107 | H2O2 | 4 | 0,445 | 3,624 | 14,142 | 30 | 1501 | 0,500 |
| FR108 | H2O2 | 4 | 0,322 | 13,832 | 14,256 | 29 | 994 | 0,343 |
| FR109 | H2O2 | 4 | 0,320 | 29,483 | 14,119 | 18 | 610 | 0,339 |
| FR110 | H2O2 | 4 | 0,262 | 39,939 | 14,210 | 31 | 1241 | 0,400 |
| FR111 | H2O2 | 4 | 0,270 | 7,626 | 14,165 | 47 | 1921 | 0,409 |
| FR112 | H2O2 | 5 | 0,305 | 9,134 | 14,131 | 145 | 5500 | 0,379 |
| FR113 | H2O2 | 4 | 0,326 | 2,597 | 14,176 | 176 | 7858 | 0,446 |
| FR114 | H2O2 | 5 | 0,272 | 5,589 | 14,097 | 44 | 1588 | 0,361 |
| FR115 | H2O2 | 4 | 0,309 | 16,925 | 14,074 | 38 | 1489 | 0,392 |
| FR116 | H2O2 | 4 | 0,256 | 4,667 | 14,142 | 70 | 2463 | 0,352 |
| FR117 | H2O2 | 4 | 0,233 | 6,933 | 14,153 | 211 | 6957 | 0,330 |
| FR118 | H2O2 | 4 | 0,244 | 4,618 | 14,142 | 190 | 6458 | 0,340 |
| FR119 | H2O2 | 4 | 0,267 | 5,704 | 14,187 | 104 | 3632 | 0,349 |
| FR120 | H2O2 | 4 | 0,350 | 4,585 | 14,187 | 129 | 5554 | 0,431 |
| FR122 | H2O2 | 4 | 0,437 | 8,352 | 14,187 | 81 | 5126 | 0,633 |
| FR123 | H2O2 | 4 | 0,301 | 6,388 | 14,165 | 104 | 4494 | 0,432 |
| FR124 | H2O2 | 4 | 0,382 | 5,591 | 14,176 | 182 | 8891 | 0,489 |
| FR125 | H2O2 | 4 | 0,380 | 1,516 | 14,165 | 106 | 5171 | 0,488 |
| FR126 | H2O2 | 4 | 0,400 | 13,200 | 14,153 | 90 | 5122 | 0,569 |
| FR127 | H2O2 | 4 | 0,349 | 14,241 | 14,165 | 95 | 4169 | 0,439 |
| FR128 | H2O2 | 4 | 0,343 | 6,351 | 14,233 | 108 | 4665 | 0,432 |
| FR129 | H2O2 | 4 | 0,367 | 7,102 | 14,176 | 85 | 4323 | 0,509 |
| FR129a | H2O2 | 4 | 0,427 | 20,071 | 14,142 | 77 | 4076 | 0,529 |
| FR130 | H2O2 | 4 | 0,443 | 7,226 | 14,119 | 126 | 6640 | 0,527 |
| FR131 | H2O2 | 4 | 0,326 | 12,239 | 14,187 | 113 | 5128 | 0,454 |
| FR132-1 | H2O2 | - | - | - | - | - | - | - |
| FR32-2 | H2O2 | - | - | - | - | - | - | - |
| FR133 | H2O2 | 4 | 0,346 | 5,826 | 14,119 | 123 | 5178 | 0,421 |
| FR 134 | H2O2 | 4 | 0,448 | 4,802 | 14,108 | 105 | 6017 | 0,573 |
| FR135 | H2O2 | 4 | 0,400 | 4,941 | 14,086 | 81 | 4197 | 0,518 |
| FR136 | H2O2 | 4 | 0,352 | 9,686 | 14,119 | 168 | 7784 | 0,463 |
| FR137 | H2O2 | 4 | 0,350 | 2,911 | 14,165 | 223 | 9896 | 0,444 |
| FR138 | H2O2 | 4 | 0,354 | 2,401 | 14,199 | 206 | 9878 | 0,480 |
| FR139 | H2O2 | 4 | 0,301 | 3,223 | 14,165 | 195 | 7178 | 0,368 |
| FR141 | H2O2 | 4 | 0,352 | 16,783 | 14,074 | 104 | 4934 | 0,474 |
| FR142 | H2O2 | 4 | 0,358 | 12,931 | 14,097 | 94 | 3838 | 0,408 |
| FR144 | H2O2 | 4 | 0,338 | 11,124 | 14,142 | 83 | 3561 | 0,429 |
| FR145 | H2O2 | 4 | 0,480 | 48,884 | 14,119 | 45 | 2659 | 0,591 |
| FR146 | H2O2 | 4 | 0,417 | 12,475 | 14,074 | 112 | 5297 | 0,473 |
| FR147 | H2O2 | 4 | 0,322 | 6,647 | 14,165 | 116 | 4543 | 0,392 |
| FR158 | H2O2 | 4 | 0,275 | 2,630 | 14,119 | 163 | 5688 | 0,349 |
| FR159 | H2O2 | 4 | 0,277 | 2,198 | 14,176 | 241 | 9876 | 0,410 |
| FR160 | H2O2 | 4 | 0,622 | 1,954 | 13,952 | 297 | 24765 | 0,834 |
| FR161 | H2O2 | 4 | 0,370 | 21,391 | 14,325 | 29 | 1232 | 0,425 |
| FR162 | H2O2 | 4 | 0,339 | 11,949 | 14,008 | 113 | 5032 | 0,445 |
| FR163 | H2O2 | 4 | 0,350 | 2,845 | 14,142 | 192 | 9227 | 0,481 |
| FR176 | H2O2 | 4 | 0,372 | 4,472 | 14,097 | 112 | 5556 | 0,496 |
| FR177 | H2O2 | 4 | 0,414 | 5,802 | 14,165 | 139 | 7276 | 0,523 |
| FR178 | H2O2 | 4 | 0,379 | 6,929 | 14,153 | 133 | 6028 | 0,453 |
| FR179 | H2O2 | 4 | 0,385 | 3,924 | 14,165 | 59 | 3845 | 0,652 |
| FR180 | H2O2 | 4 | 0,337 | 7,976 | 14,176 | 149 | 6107 | 0,410 |
| FR181 | H2O2 | 4 | 0,307 | 4,248 | 14,097 | 97 | 3398 | 0,350 |
| FR182 | H2O2 | 4 | 0,344 | 4,302 | 14,119 | 108 | 4653 | 0,431 |
| FR183 | H2O2 | 4 | 0,347 | 10,669 | 14,119 | 98 | 4105 | 0,419 |
| FR184 | H2O2 | 4 | 0,441 | 8,637 | 14,153 | 123 | 6654 | 0,541 |

| 14Å - Chlorit - Peak | | | | | | | | |
|----------------------|------------------------|--------------------|--------------------------|--------|---------------|---------------------|-----------------|---------------------|
| Proben Nummer | Art der ufbereitung | Meß- werte n | FWHM | s1 | Peak- Lage | Peak- Intensität | Peak- Fläche | Integral- Breite |
| | | | (MW) $\Delta^2\Theta$ | % | Å | Counts | Counts | $\Delta^2\Theta$ |
| FR185 | H2O2 | 4 | 0,444 | 10,205 | 14,030 | 111 | 6345 | 0,572 |
| FR189 | H2O2 | 4 | 0,332 | 9,045 | 14,074 | 130 | 5535 | 0,426 |
| FR190 | H2O2 | 4 | 0,337 | 6,628 | 14,142 | 103 | 4718 | 0,458 |
| FR191 | H2O2 | 4 | 0,342 | 4,841 | 14,097 | 114 | 4887 | 0,429 |
| FR192a | H2O2 | 4 | 0,350 | 4,792 | 14,108 | 98 | 4262 | 0,435 |
| FR192b | H2O2 | 4 | 0,520 | 16,552 | 14,052 | 51 | 3058 | 0,600 |
| FR193 | H2O2 | 4 | 0,502 | 9,684 | 14,074 | 110 | 6784 | 0,617 |
| FR194 | H2O2 | 4 | 0,330 | 6,982 | 14,119 | 67 | 2733 | 0,408 |
| FR195 | H2O2 | 4 | 0,390 | 5,564 | 14,244 | 107 | 5049 | 0,472 |
| FR196 | H2O2 | 4 | 0,440 | 5,882 | 13,974 | 138 | 7391 | 0,536 |
| FR197 | H2O2 | 4 | 0,630 | 11,346 | 14,097 | 49 | 3230 | 0,659 |

| Proben Nummer | Rm % | | | | | 5Å - Illit - Peak | | 4.26Å - Qz - Peak | |
|------------------|---------|---------|-------------|-----------|------------|-------------------|----------------------|-------------------|----------------------|
| | Rm (%) | | Meß- | Auf- | Meß- | Peak- | Peak- | Peak- | Peak- |
| | Rm % | s2 % | Punkte n | bereitung | werte n | Lage Å | Intensität Counts | Lage Å | Intensität Counts |
| K2 | - | - | - | US | 3 | 5,000 | 622 | 4,261 | 164 |
| K2 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,000 | 817 | 4,261 | 161 |
| K3 | - | - | - | NADA | 3 | 4,997 | 918 | 4,261 | 266 |
| K3 | - | - | - | US | 3 | 5,000 | 961 | 4,261 | 205 |
| K3 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,000 | 1010 | 4,261 | 188 |
| K5 | - | - | - | NADA | 3 | 5,005 | 929 | 4,261 | 254 |
| K5 | - | - | - | US | 3 | 5,005 | 1015 | 4,261 | 209 |
| K5 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,003 | 1006 | 4,261 | 165 |
| K6 | - | - | - | NADA | 3 | 5,003 | 1067 | 4,261 | 226 |
| K6 | - | - | - | US | 3 | 5,005 | 1265 | 4,261 | 187 |
| K6 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,005 | 1169 | 4,261 | 161 |
| K7 | - | - | - | NADA | 3 | 5,005 | 477 | 4,265 | 250 |
| K7 | - | - | - | US | 6 | 5,008 | 331 | 4,261 | 98 |
| K7 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,005 | 647 | 4,261 | 153 |
| K8 | - | - | - | NADA | 3 | 5,005 | 795 | 4,261 | 234 |
| K8 | - | - | - | US | 6 | 5,003 | 271 | 4,261 | 70 |
| K8 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,005 | 767 | 4,261 | 171 |
| K9 | - | - | - | US | 4 | 5,019 | 194 | 4,263 | 102 |
| K9 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,017 | 626 | 4,263 | 141 |
| K11 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,017 | 223 | 4,261 | 46 |
| K14 | - | - | - | NADA | 3 | 5,011 | 495 | 4,261 | 366 |
| K14 | - | - | - | US | 3 | 5,008 | 569 | 4,261 | 399 |
| K14 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,008 | 639 | 4,261 | 167 |
| K17 | - | - | - | NADA | 3 | 5,008 | 526 | 4,261 | 614 |
| K17 | - | - | - | NADA II | 3 | 5,008 | 519 | 4,261 | 606 |
| K17 | - | - | - | NADA III | 3 | 5,008 | 581 | 4,261 | 661 |
| K17 | - | - | - | NADA IV | 3 | 5,008 | 524 | 4,261 | 654 |
| K17 | - | - | - | NADA V | 3 | 5,008 | 539 | 4,261 | 656 |
| K17 | - | - | - | NADA VI | 3 | 5,008 | 579 | 4,261 | 687 |
| K17 | - | - | - | US | 3 | 5,008 | 567 | 4,261 | 470 |
| K17 | - | - | - | US II | 3 | 5,008 | 551 | 4,261 | 492 |
| K17 | - | - | - | US ii | 3 | 5,008 | 584 | 4,261 | 541 |
| K17 | - | - | - | US III | 3 | 5,005 | 538 | 4,261 | 485 |
| K17 | - | - | - | US iii | 3 | 5,008 | 586 | 4,261 | 511 |
| K17 | - | - | - | US IV | 3 | 5,005 | 569 | 4,261 | 489 |
| K17 | - | - | - | US iv | 3 | 5,008 | 579 | 4,261 | 531 |
| K17 | - | - | - | US V | 3 | 5,005 | 527 | 4,261 | 490 |
| K17 | - | - | - | US v | 3 | 5,005 | 514 | 4,261 | 468 |
| K17 | - | - | - | US VI | 3 | 5,011 | 529 | 4,261 | 461 |
| K17 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,011 | 551 | 4,261 | 480 |
| K18 | - | - | - | US | 3 | 5,008 | 988 | 4,261 | 346 |
| K18 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,008 | 869 | 4,261 | 301 |
| K19 | - | - | - | US | 4 | 5,017 | 354 | 4,263 | 85 |
| K19 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,017 | 774 | 4,261 | 105 |
| K20 | - | - | - | NADA | 3 | 5,005 | 696 | 4,261 | 454 |
| K20 | - | - | - | US | 3 | 5,005 | 833 | 4,261 | 455 |
| K20 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,003 | 1130 | 4,261 | 311 |
| K21 | - | - | - | NADA | 3 | 5,003 | 301 | 4,261 | 513 |
| K21 | - | - | - | US | 3 | 5,000 | 402 | 4,261 | 476 |
| K21 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,003 | 478 | 4,261 | 340 |
| K22A15 | - | - | - | US | 4 | 5,011 | 349 | 4,261 | 61 |
| K22A15 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,003 | 628 | 4,261 | 66 |
| K22-50A | - | - | - | US | 4 | 5,000 | 229 | 4,261 | 67 |

| Proben Nummer | Rm % | | | | | 5Å - Illit - Peak | | 4.26Å - Qz - Peak | |
|------------------|---------|---------|-------------|-----------|------------|-------------------|----------------------|-------------------|----------------------|
| | Rm (%) | | Meß- | Auf- | Meß- | Peak- | Peak- | Peak- | Peak- |
| | Rm % | s2 % | Punkte n | bereitung | werte n | Lage Å | Intensität Counts | Lage Å | Intensität Counts |
| K22-50A | - | - | - | H2O2 | 4 | 4,997 | 641 | 4,261 | 91 |
| K23 | - | - | - | US | 3 | 4,997 | 117 | 4,261 | 62 |
| K23 | - | - | - | H2O2 | 3 | 4,989 | 416 | 4,261 | 91 |
| K24 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,011 | 892 | 4,261 | 465 |
| K25 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,008 | 857 | 4,261 | 137 |
| K26 | - | - | - | NADA | 3 | 5,005 | 657 | 4,261 | 340 |
| K26 | - | - | - | US | 3 | 5,005 | 840 | 4,261 | 245 |
| K26 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,003 | 1028 | 4,261 | 201 |
| K27 | - | - | - | NADA | 3 | 5,000 | 520 | 4,261 | 362 |
| K27 | - | - | - | US | 3 | 5,000 | 814 | 4,261 | 337 |
| K27 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,000 | 658 | 4,261 | 449 |
| K28 | - | - | - | NADA | 3 | 5,003 | 936 | 4,261 | 298 |
| K28 | - | - | - | US | 3 | 5,005 | 1031 | 4,261 | 277 |
| K28 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,005 | 1322 | 4,261 | 177 |
| K29 | - | - | - | NADA | 3 | 5,005 | 617 | 4,261 | 419 |
| K29 | - | - | - | US | 3 | 5,005 | 787 | 4,261 | 392 |
| K29 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,005 | 742 | 4,261 | 282 |
| K30 | - | - | - | US | 3 | 5,011 | 524 | 4,261 | 408 |
| K30 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,014 | 695 | 4,261 | 179 |
| K31 | - | - | - | NADA | 3 | 5,003 | 890 | 4,261 | 404 |
| K31 | - | - | - | US | 3 | 5,003 | 776 | 4,261 | 386 |
| K31 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,003 | 833 | 4,261 | 224 |
| K32 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,003 | 784 | 4,261 | 129 |
| K33 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,008 | 1471 | 4,263 | 62 |
| K34 | - | - | - | NADA | 3 | 5,005 | 853 | 4,261 | 276 |
| K34 | - | - | - | US | 3 | 5,005 | 1031 | 4,261 | 241 |
| K34 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,011 | 958 | 4,261 | 204 |
| K35 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,008 | 933 | 4,263 | 94 |
| K36 | - | - | - | US | 3 | 5,003 | 961 | 4,261 | 173 |
| K37 | - | - | - | NADA | 4 | 5,005 | 1045 | 4,261 | 239 |
| K37 | - | - | - | US | 3 | 5,003 | 1429 | 4,261 | 213 |
| K37 | - | - | - | H2O2 | 3 | 5,005 | 1639 | 4,261 | 175 |
| K39 | - | - | - | NADA | 4 | 5,003 | 180 | 4,261 | 270 |
| K41 | - | - | - | NADA | 4 | 5,005 | 176 | 4,261 | 157 |
| K42-1 | - | - | - | NADA | 4 | 5,014 | 138 | 4,261 | 178 |
| K42-2 | - | - | - | NADA | 4 | 5,008 | 113 | 4,261 | 149 |
| K43 | - | - | - | NADA | 4 | 5,011 | 128 | 4,261 | 147 |
| K45 | - | - | - | NADA | 4 | 5,005 | 65 | 4,261 | 107 |
| K46 | - | - | - | NADA | 4 | 5,014 | 246 | 4,265 | 349 |
| K47 | - | - | - | NADA | 4 | 5,005 | 682 | 4,263 | 155 |
| K49 | - | - | - | NADA | 4 | 5,005 | 340 | 4,263 | 217 |
| K50 | - | - | - | NADA | 4 | 5,011 | 587 | 4,265 | 277 |
| K51 | - | - | - | NADA | 4 | 5,005 | 475 | 4,261 | 221 |
| K52 | - | - | - | NADA | 4 | 5,003 | 815 | 4,261 | 128 |
| K53 | - | - | - | NADA | 4 | 5,008 | 383 | 4,263 | 211 |
| K54 | - | - | - | NADA | 4 | 5,003 | 318 | 4,263 | 304 |
| K55 | - | - | - | NADA | 3 | 5,008 | 217 | 4,261 | 675 |
| K56 | - | - | - | NADA | 4 | 5,011 | 411 | 4,263 | 408 |
| K57 | - | - | - | US | 4 | 5,008 | 364 | 4,261 | 242 |
| K58-1 | - | - | - | US | 4 | 5,014 | 311 | 4,261 | 222 |
| K58-2 | - | - | - | US | 4 | 5,011 | 197 | 4,263 | 290 |
| K59 | - | - | - | US | 4 | 5,014 | 367 | 4,261 | 97 |
| K60 | - | - | - | US | 4 | 5,011 | 620 | 4,265 | 148 |

| Proben Nummer | Rm % | | | Auf- bereitung | Meß- werte n | 5Å - Illit - Peak | | 4.26Å - Qz - Peak | |
|------------------|--------|----|---------------------|-------------------|--------------------|--------------------|-------------------------------|--------------------|-------------------------------|
| | Rm (%) | s2 | Meß- Punkte n | | | Peak- Lage Å | Peak- Intensität Counts | Peak- Lage Å | Peak- Intensität Counts |
| | % | % | | | | | | | |
| K61 | - | - | - | US | 4 | 5,014 | 579 | 4,261 | 105 |
| K62-1 | - | - | - | US | 4 | 5,014 | 432 | 4,267 | 229 |
| K62-2 | - | - | - | US | 4 | 5,017 | 331 | 4,263 | 148 |
| K63 | - | - | - | US | 4 | 5,014 | 486 | 4,261 | 112 |
| K64 | - | - | - | US | 4 | 5,017 | 545 | 4,267 | 150 |
| K65 | - | - | - | US | 4 | 5,028 | 784 | 4,265 | 139 |
| K66 | - | - | - | US | 4 | 5,005 | 692 | 4,261 | 113 |
| K67 | - | - | - | US | 4 | 5,011 | 720 | 4,261 | 113 |
| K68 | - | - | - | US | 4 | 5,005 | 845 | 4,261 | 120 |
| K69 | - | - | - | US | 4 | 5,003 | 916 | 4,261 | 142 |
| K70 | - | - | - | US | 4 | 5,008 | 286 | 4,261 | 528 |
| K71 | - | - | - | US | 4 | 5,011 | 545 | 4,261 | 298 |
| K72 | - | - | - | US | 4 | 5,011 | 664 | 4,261 | 228 |
| K73 | - | - | - | US | 4 | 5,008 | 786 | 4,261 | 97 |
| K74 | - | - | - | US | 4 | 5,003 | 804 | 4,261 | 121 |
| K75 | - | - | - | US | 4 | 5,005 | 539 | 4,261 | 134 |
| K76 | - | - | - | US | 4 | 5,003 | 545 | 4,261 | 122 |
| K77 | - | - | - | US | 4 | 5,005 | 602 | 4,261 | 138 |
| K78-1 | - | - | - | US | 4 | 5,003 | 871 | 4,261 | 109 |
| K78-2 | - | - | - | US | 4 | 5,008 | 883 | 4,261 | 134 |
| K79 | - | - | - | US | 4 | 5,005 | 1364 | 4,261 | 116 |
| K80 | - | - | - | US | 4 | 5,005 | 956 | 4,261 | 103 |
| K81 | - | - | - | US | 4 | 5,007 | 720 | 4,264 | 120 |
| K82 | - | - | - | US | 4 | 5,005 | 903 | 4,261 | 125 |
| K83 | - | - | - | US | 2 | 5,003 | 797 | 4,261 | 127 |
| K84 | - | - | - | US | 2 | 5,008 | 544 | 4,261 | 218 |
| K85 | - | - | - | US | 2 | 5,000 | 1005 | 4,259 | 97 |
| K86 | - | - | - | US | 2 | 5,004 | 566 | 4,261 | 189 |
| K87 | - | - | - | US | 4 | 5,005 | 999 | 4,261 | 105 |
| K88 | - | - | - | US | 4 | 5,003 | 570 | 4,261 | 105 |
| K89 | - | - | - | US | 4 | 5,000 | 175 | 4,261 | 152 |
| K90 | - | - | - | US | 4 | 5,005 | 575 | 4,261 | 131 |
| K91 | - | - | - | US | 4 | 5,008 | 718 | 4,263 | 141 |
| K92 | - | - | - | US | 4 | 5,000 | 723 | 4,259 | 115 |
| K93 | - | - | - | US | 4 | 5,008 | 519 | 4,261 | 139 |
| K94a | - | - | - | US | 4 | 5,005 | 834 | 4,260 | 99 |
| K95 | - | - | - | US | 4 | 5,014 | 186 | 4,261 | 443 |
| K96 | - | - | - | US | 4 | 5,008 | 370 | 4,260 | 170 |
| K97 | - | - | - | US | 4 | 5,000 | 682 | 4,256 | 117 |
| K98 | - | - | - | US | 4 | 5,005 | 828 | 4,262 | 124 |
| K99 | - | - | - | US | 4 | 5,011 | 504 | 4,262 | 129 |
| K100 | - | - | - | US | 4 | 5,008 | 543 | 4,261 | 157 |
| K101 | - | - | - | US | 4 | 5,003 | 717 | 4,261 | 153 |
| K102 | - | - | - | US | 4 | 5,008 | 811 | 4,263 | 130 |
| K103 | - | - | - | US | 4 | 4,994 | 1171 | 4,261 | 95 |
| K104 | - | - | - | US | 4 | 5,007 | 703 | 4,261 | 149 |
| K105 | - | - | - | US | 4 | 5,005 | 901 | 4,261 | 110 |
| K106a | - | - | - | US | 4 | 5,008 | 243 | 4,261 | 184 |
| K106b | - | - | - | US | 4 | 5,008 | 282 | 4,261 | 201 |
| K108 | - | - | - | US | 4 | 5,011 | 536 | 4,261 | 93 |
| K109 | - | - | - | US | 4 | 5,014 | 361 | 4,260 | 169 |
| K110 | - | - | - | US | 4 | 5,008 | 927 | 4,261 | 111 |
| K111 | - | - | - | US | 4 | 5,019 | 565 | 4,261 | 175 |

| Proben Nummer | Rm % | | | Auf- bereitung | Meß- werte n | 5Å - Illit - Peak | | 4.26Å - Qz - Peak | |
|------------------|--------|------|---------------------|-------------------|--------------------|--------------------|-------------------------------|--------------------|-------------------------------|
| | Rm (%) | s2 | Meß- Punkte n | | | Peak- Lage Å | Peak- Intensität Counts | Peak- Lage Å | Peak- Intensität Counts |
| | % | % | | | | | | | |
| K112 | - | - | - | US | 4 | 5,012 | 681 | 4,260 | 109 |
| K117 | - | - | - | US | 4 | 5,003 | 707 | 4,260 | 146 |
| K118 | - | - | - | US | 4 | 5,005 | 650 | 4,260 | 178 |
| FR039 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,015 | 337 | 4,262 | 148 |
| FR040 | 4 | 0,31 | 9 | H2O2 | 4 | 5,014 | 645 | 4,265 | 165 |
| FR041 | 4,2 | 0,19 | 25 | H2O2 | 4 | 5,011 | 745 | 4,264 | 85 |
| FR042 | 4,1 | 0,33 | 25 | H2O2 | 4 | 5,003 | 949 | 4,261 | 126 |
| FR 043 | 5 | 0,22 | 25 | H2O2 | 4 | 5,005 | 2405 | 4,261 | 69 |
| FR044 | - | - | - | H2O2 | 4 | 4,993 | 262 | 4,261 | 46 |
| FR045 | 4,9 | 0,25 | 25 | H2O2 | 4 | 5,014 | 540 | 4,263 | 94 |
| FR046 | 4,4 | 0,42 | 25 | H2O2 | 4 | 5,014 | 394 | 4,262 | 65 |
| FR047 | 5,3 | 0,26 | 25 | H2O2 | 3 | 5,019 | 457 | 4,263 | 155 |
| FR101 | 3,7 | 0,56 | 9 | H2O2 | 4 | 4,994 | 123 | - | - |
| FR102 | 5,2 | 0,3 | 25 | H2O2 | 4 | 5,010 | 126 | 4,261 | 53 |
| FR103 | 4,7 | 0,25 | 25 | H2O2 | 4 | 5,004 | 46 | 4,261 | 34 |
| FR104 | 4,8 | 4,8 | - | H2O2 | 4 | 5,005 | 154 | 4,260 | 40 |
| FR105 | 5,4 | 0,17 | 25 | H2O2 | 4 | 5,022 | 50 | 4,261 | 71 |
| FR106 | 5,2 | 0,23 | 25 | H2O2 | 4 | 5,010 | 160 | 4,261 | 29 |
| FR107 | 4,2 | 0,19 | 25 | H2O2 | 4 | 5,022 | 128 | 4,261 | 81 |
| FR108 | 5,4 | 0,51 | 16 | H2O2 | 4 | 4,997 | 119 | 4,261 | 59 |
| FR109 | 5,5 | 0,3 | 15 | H2O2 | 4 | 4,998 | 74 | 4,261 | 77 |
| FR110 | 5 | 0,2 | 20 | H2O2 | 4 | 4,997 | 56 | 4,261 | 112 |
| FR111 | 7,3 | 0,37 | 20 | H2O2 | 4 | 4,997 | 116 | 4,261 | 80 |
| FR112 | 6,2 | 0,3 | 25 | H2O2 | 5 | 5,003 | 380 | 4,261 | 186 |
| FR113 | 5,2 | 0,21 | 25 | H2O2 | 4 | 5,008 | 719 | 4,261 | 127 |
| FR114 | 5,6 | 0,3 | 25 | H2O2 | 5 | 5,004 | 150 | 4,261 | 59 |
| FR115 | 5,4 | 0,16 | 25 | H2O2 | 4 | 5,004 | 180 | 4,261 | 60 |
| FR116 | 5,4 | 0,17 | 25 | H2O2 | 4 | 5,003 | 138 | 4,261 | 92 |
| FR117 | 5,7 | 0,19 | 7 | H2O2 | 4 | 5,005 | 476 | 4,261 | 80 |
| FR118 | 6,9 | 0,15 | 6 | H2O2 | 4 | 5,005 | 832 | 4,261 | 126 |
| FR119 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,008 | 454 | 4,261 | 219 |
| FR120 | 4,7 | 0,27 | 25 | H2O2 | 4 | 5,000 | 212 | 4,265 | 160 |
| FR122 | 2,9 | 0,17 | 25 | H2O2 | 4 | 5,000 | 295 | 4,265 | 144 |
| FR123 | 3,4 | 0,72 | 15 | H2O2 | 4 | 4,994 | 183 | 4,263 | 158 |
| FR124 | 2,8 | 0,19 | 25 | H2O2 | 4 | 4,991 | 156 | 4,261 | 111 |
| FR125 | 2,4 | 0,22 | 25 | H2O2 | 4 | 5,005 | 460 | 4,261 | 90 |
| FR126 | 2,9 | 0,27 | 20 | H2O2 | 4 | 4,997 | 294 | 4,261 | 136 |
| FR127 | 4,3 | 0,2 | 28 | H2O2 | 4 | 5,010 | 435 | 4,263 | 133 |
| FR128 | 2,8 | 0,19 | 21 | H2O2 | 4 | 5,000 | 292 | 4,266 | 135 |
| FR129 | 5,1 | 5,49 | 25 | H2O2 | 4 | 5,021 | 397 | 4,263 | 228 |
| FR129a | 5,2 | 0,19 | 25 | H2O2 | 4 | 5,019 | 307 | 4,263 | 228 |
| FR130 | 4,7 | 0,17 | 25 | H2O2 | 4 | 5,005 | 550 | 4,261 | 100 |
| FR131 | 5,1 | 0,13 | 25 | H2O2 | 4 | 5,014 | 596 | 4,263 | 78 |
| FR132-1 | 4,7 | 0,12 | 25 | H2O2 | 4 | 5,012 | 812 | 4,264 | 129 |
| FR132-2 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,008 | 730 | 4,261 | 130 |
| FR133 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,008 | 359 | 4,260 | 109 |
| FR134 | 4,5 | 0,22 | 10 | H2O2 | 4 | 4,991 | 257 | 4,263 | 94 |
| FR135 | 5,5 | 0,25 | 25 | H2O2 | 4 | 4,991 | 356 | 4,261 | 111 |
| FR136 | 5 | 0,25 | 25 | H2O2 | 4 | 5,003 | 587 | 4,261 | 187 |
| FR137 | 5,8 | 0,29 | 10 | H2O2 | 4 | 5,003 | 257 | 4,261 | 186 |
| FR138 | 5,2 | 0,35 | 25 | H2O2 | 4 | 5,010 | 399 | 4,261 | 216 |
| FR139 | 3,1 | 0,1 | 25 | H2O2 | 4 | 5,005 | 830 | 4,261 | 175 |
| FR141 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,005 | 429 | 4,261 | 153 |

| Proben Nummer | Rm % | | | | | 5Å - Illit - Peak | | 4.26Å - Qz - Peak | |
|------------------|---------|---------|-------------|-----------|------------|-------------------|----------------------|-------------------|----------------------|
| | Rm (%) | | Meß- | Auf- | Meß- | Peak- | Peak- | Peak- | Peak- |
| | Rm % | s2 % | Punkte n | bereitung | werte n | Lage Å | Intensität Counts | Lage Å | Intensität Counts |
| FR142 | 5,5 | 0,29 | 25 | H2O2 | 4 | 5,007 | 377 | 4,261 | 207 |
| FR144 | 5,1 | 0,23 | 25 | H2O2 | 4 | 5,003 | 333 | 4,261 | 124 |
| FR145 | 5,1 | 0,24 | 25 | H2O2 | 4 | 5,008 | 324 | 4,265 | 154 |
| FR146 | 5,1 | 0,34 | 25 | H2O2 | 4 | 5,014 | 484 | 4,262 | 111 |
| FR147 | 4,6 | 0,21 | 25 | H2O2 | 4 | 5,014 | 365 | 4,262 | 124 |
| FR158 | - | - | - | H2O2 | 4 | 4,998 | 356 | 4,263 | 145 |
| FR159 | 9,1 | 1,05 | 7 | H2O2 | 4 | 5,022 | 492 | 4,264 | 164 |
| FR160 | 7 | 1,24 | 2 | H2O2 | 4 | 5,008 | 830 | 4,261 | 119 |
| FR161 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,003 | 43 | 4,267 | 197 |
| FR162 | 5,3 | 0,15 | 25 | H2O2 | 4 | 4,994 | 278 | 4,261 | 96 |
| FR163 | 3,6 | 0,29 | 25 | H2O2 | 4 | 5,017 | 481 | 4,263 | 116 |
| FR176 | 3,7 | 0,59 | 4 | H2O2 | 4 | 5,017 | 390 | 4,261 | 111 |
| FR177 | 3,1 | 1 | 7 | H2O2 | 4 | 5,000 | 511 | 4,261 | 102 |
| FR178 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,003 | 300 | 4,263 | 138 |
| FR179 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,007 | 433 | 4,261 | 112 |
| FR180 | 5,6 | 0,19 | 25 | H2O2 | 4 | 5,008 | 742 | 4,261 | 68 |
| FR181 | 6,6 | 0,55 | 3 | H2O2 | 4 | 5,005 | 1001 | 4,261 | 99 |
| FR182 | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,005 | 344 | 4,261 | 112 |
| FR183 | 5,2 | 0,33 | 25 | H2O2 | 4 | 5,007 | 609 | 4,264 | 79 |
| FR184 | 4,1 | 0,3 | 25 | H2O2 | 4 | 5,010 | 131 | 4,261 | 78 |
| FR185 | 3,7 | 0,19 | 25 | H2O2 | 4 | 5,005 | 190 | 4,261 | 159 |
| FR189 | 5,7 | 0,28 | 25 | H2O2 | 4 | 5,003 | 546 | 4,261 | 83 |
| FR190 | 5,1 | 0,46 | 13 | H2O2 | 4 | 5,018 | 297 | 4,263 | 265 |
| FR191 | 4,8 | 0,38 | 10 | H2O2 | 4 | 4,998 | 271 | 4,263 | 159 |
| FR192a | 5,3 | 0,28 | 25 | H2O2 | 4 | 5,008 | 529 | 4,261 | 87 |
| FR192b | - | - | - | H2O2 | 4 | 5,000 | 279 | 4,262 | 84 |
| FR193 | 3,3 | 0,1 | 25 | H2O2 | 4 | 5,000 | 254 | 4,261 | 99 |
| FR194 | - | - | - | H2O2 | 4 | 4,987 | 229 | 4,261 | 130 |
| FR195 | 3,3 | 0,23 | 12 | H2O2 | 4 | 5,000 | 321 | 4,262 | 110 |
| FR196 | 2,8 | 0,24 | 25 | H2O2 | 4 | 4,986 | 330 | 4,261 | 95 |
| FR197 | 2,8 | 0,21 | 25 | H2O2 | 4 | 5,000 | 270 | 4,263 | 83 |