Výskyt whewellitu v pelosideritoch uhoľného ložiska Handlová (Slovenská republika)

The occurrence of whewellite in pelosiderites of the Handlová coal deposit (Slovak Republic)

MARTIN ŠTEVKO¹⁾, PETER BAČÍK¹⁾ A PETER CAGÁŇ²⁾

¹⁾Katedra mineralógie a petrológie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská dolina G, 842 15 Bratislava, Slovenská republika ²⁾Lipová 5/5, 972 51 Handlová, Slovenská republika

Šτενκο M., Βαčίκ P., Cagáň P. (2011): Výskyt whewellitu v pelosideritoch uhoľného ložiska Handlová (Slovenská republika). - Bull. mineral.-petrolog. Odd. Nár. Muz. (Praha) **19/1**, 27-31. ISSN 1211-0329.

Abstract

Whewellite was identified on fissures in central part of pelosiderite concretions and lenses at the Handlová coal deposit. It forms colourless to white crystalline aggregates together with vitreous lustre associated together with crystalline aggregates of quartz and fine-grained pyrite. Rarely well developed tabular to prismatic crystals (up to 1 cm) are present. Whewellite shows intense green-yellow fluorescence and phosphorescence in long-wave UV light. The unitcell parameters of whewellite refined from powder X-ray data are: a = 6.2925(6) Å, b = 14.5947(10) Å, c = 10.1230(2) Å, $\beta = 109.446(8)^{\circ}$ and V = 876.64(5) Å³. An infrared spectrum of whewellite from Handlová is given. The bands of oxalate groups as well as molecular H₂O were identified. Whewellite was formed as youngest phase in reductive environment with high activity of Ca²⁺ ions. Oxalic acid was formed by decomposition of organic matter.

Key words: whewellite, pelosiderites, X-ray powder data, IR absorption spectrum, Handlová, Slovak Republic

Úvod

Whewellit $Ca(C_2O_4) \cdot H_2O_1$ je najhojnejším oxalátom a zároveň najrozšírenejším organickým minerálom v prírode. Jeho výskyt je obmedzený predovšetkým na dve geneticky odlišné prostredia. Prvú skupinu predstavujú výskyty whewellitu viazané na pukliny v rôznych typoch karbonátových konkrécií prípadne priamo na pukliny hornín v sedimentárnych komplexoch rôzneho veku. Typickým reprezentantom tohto genetického typu whewellitu je jeho výskyt v puklinách pelosideritových konkrécií severočeskej hnedouhoľnej panvy (Ježek 1911; Brus, Dvořák 1989; Žáček et al. 2008) alebo kladnianskej čiernouhoľnej panvy (Slavík 1908; Kašpar 1932; Žák, Skála 1993). Zo zahraničných lokalít sú významným reprezentantom tohto typu lokality Burgk a Zwickau v Nemecku (Hofmann 1991; Penndorf 2006), Elk Creek v Južnej Dakote a Havr v Montane, USA (Campbell, Roberts 1986). Whewellit sa na týchto lokalitách najčastejšie vyskytuje v asociácii spolu s kalcitom, ankeritom, sideritom, kremeňom, baritom, sadrovcom, pyritom a milleritom. K tomuto typu je možné priradiť aj doteraz jediný opísaný výskyt whewellitu v Slovenskej republike, na lokalite Cígeľka, kde sa whewellit vyskytuje v puklinách pieskovcov v asociácii spolu s ílovými minerálmi a kalcitom (Bačo, Pacindová 1993). Druhý genetický typ predstavujú hydrotermálne polymetalické a uránové ložiská, kde sa whewellit vyskytuje v drúzových dutinách ako jeden z najmladších minerálov v asociácii spolu s kalcitom a zeolitmi. Typickým reprezentantom je uránovo-polymetalické ložisko Příbram v Českej republike (Skála 1995; Knížek, Litochleb 2005), uránové ložiská Schlema (Schüler 1991) a Ronneburg (Witzke, Rüger 1998) v Nemecku, polymetalické ložisko Cavnic v Rumunsku (Koch 1926) a Cu ložisko Récsk v Maďarsku (Szakáll et al. 2005). Geneticky zaujímavý je výskyt whewellitu v dutinách vulkanických hornín v oblasti Hannebacher Ley v Nemecku (Hentschel 1987). Vzácne bol tiež whewellit nájdený ako alteračný produkt uhlíkatých chondritických meteoritov (Fuchs et al. 1973; Tyra et al. 2007). Ucelený prehľad výskytov whewellitu vo svete prináša práca Dvořák et al. (1999). Kryštalochémiu a genézu oxalátov Ca novšie detailne zhrnuli Echigo a Kimata (2010).

Cieľom tohto príspevku je podať informácie o novom výskyte whewellitu v puklinách pelosideritových konkrécií na uhoľnom ložisku Handlová.

Lokalizácia a geologické pomery výskytu

Handlovské hnedouhoľné ložisko je súčasťou handlovsko-nováckej uhoľnej panvy, ktorá sa v prevažnej miere nachádza pod centrálnou časťou vulkanického pohoria Vtáčnik. Vzorky pelosideritov s whewellitom boli nájdené na halde šachty ťažobného úseku Handlová, ktorá je situovaná na jz. okraji mesta Handlová. Ťažba uhlia na bani Handlová má viac ako storočnú históriu a dobývací priestor ložiska predstavuje ~ 47 km² (Machajová et al. 2000). Produktívne tzv. handlovské súvrstvie vrchobádenskeho veku leží na komplexe spodnobádenských granátických andezitov a epiklastických vulkanických zlepencov a pieskovcov Kamenenského súvrstvia a v nadloží je zakryté hrubým komplexom ílov a diatomitov Košianskeho súvrstvia a vulkanitmi Novolehotskej a Plešinskej formácie (Šimon et al. 1997). Vlastnú výplň Handlovského súvrstvia predstavujú piesčito-ílovité a tufitické sedimenty s postupným prechodom do tmavých až čiernych ílov

a ílovcov s uhoľnými slojmi. Na ložisku sú vyvinuté dva uhoľné sloje: spodný (II.) sloj s hrúbkou 2 - 6 m a horný (I.) s hrúbkou 3 - 7 m, ktorých vzájomný vzťah je zložitý. V oblasti Novej Lehoty je pod spodným slojom vyvinutý ešte tzv. III. uhoľný sloj s hrúbkou 1 - 4 m (Brodňanová 1985). Po petrografickej stránke patrí uhlie z ložiska Handlová do skupiny hnedouhoľných humitov a stupeň preuhoľnatenia zodpovedá prevažne hnedouhoľnej ortofáze s nízkym obsahom popolovín (Machajová et al. 2000).

Výskyt šošoviek a polôh pelosideritov je viazaný najmä na medzislojové pásmo medzi I. a II. uhoľným slojom handlovského ložiska, zriedkavejšie sa tiež vyskytujú v tesnom nadloží uhoľných slojov. Na ložisku Nováky sa výskyt pelosioderitov nezistil. Distribúcia pelosideritov na ložisku Handlová je značne nepravidelná. Najčastejšie vytvárajú šošovky uprostred tufitov, ílov a ílovcov a veľmi často obsahujú zuhoľnatené rastlinné zvyšky. V strede pelosideritových šošoviek boli zriedkavo zistené pukliny vyplnené opálovou hmotou alebo kryštálmi sadrovca. Pelosiderity vznikali v redukčných podmienkach v lokálnych bazénoch, kde dochádzalo k vyzrážaniu Fe vo forme uhličitanov (Čech, Petrík 1972).

Metodika

Röntgenové práškové údaje whewellitu boli získané pomocou difraktometra Bruker D8 Advance (laboratóriu RTG difrakcie SOLIPHA, PriF UK, Bratislava) za nasledovných podmienok: anóda/filter Cu/Ni, detektor LynxEye, napätie 40 kV, prúd 40 mA, krok 0.01° 20, čas 3 s/ krok, rozsah merania 2 - 65° 20, ako preparát sme použili rozachátovanú vyseparovanú monominerálnu vzorku. Pripravený práškový preparát bol pre zníženie pozadia záznamu nanesený na nosič zhotovený z monokryštálu Si. Získané údaje boli vyhodnotené pomocou softvéru Bruker DIFFRAC^{plus} EVA. Mriežkové parametre whewellitu boli vypočítané a spresnené rietveldovou metódou pomocou programu Bruker DIFFRAC^{plus} TOPAS.

Fourierovská infračervená (FTIR) spektroskopia v strednej oblasti (4000 - 400 cm⁻¹) bola prevedená na spektrometri Nicolet 6700 (Ústav anorganickej chémie SAV, Bratislava) s DTSG detektorom. Vzorka bola pripravená v podobe KBr tablety (1 mg vzorky a 200 mg KBr). Získané spektrum bolo upravené v programe OMNIC 8.1 (Nicolet Instruments Corp.).



Obr. 1 Číre kryštalické až masívne agregáty whewellitu. Šírka záberu 20 mm. Foto M. Števko.



Mikrofotografie whewellitu boli vyhotovené na stereoskopickom mikroskope Olympus SZ61 s pripojeným digitálnym fotoaparátom Olympus SP-350 (PriF UK, Bratislava) a pomocou softvéru QuickPHOTO MICRO 2.2 a Deep Focus 3.1.

Výsledky

Whewellit bol nájdený na stenách úzkych puklín, ktoré sú viazané na centrálnu časť ~ 30 cm veľkej pelosideritovej konkrécie. Farba pelosideritovej konkrécie je svetlohnedá až sivohnedá a obsahuje časté zuhoľnatené zvyšky a úlomky rastlín. Whewellit vytvára číre až kriedovobiele kryštalické až celistvé agregáty s dobre pozorovateľnou štiepateľnosťou a výrazným skleným leskom (obr. 1). Agregáty whewellitu sú čiastočne ohraničené kryštálovými plochami a zriedkavo pokrývajú plochy až 20 cm². Vzácne boli v puklinách s dostatočným množstvom priestoru nájdené aj idiomorfné tabuľkovité kryštály max. 1 cm veľké (obr. 2). V asociácii spolu s whewellitom bol na stenách puklín konkrécie identifikovaný jemnozrnný pyrit a max. 2 mm veľké bielosivé kryštalické agregáty kremeňa. V puklinách ďalších konkrécií boli zistené aj svetlo-

Tabuľka 1 Práškový rtg. difrakčný záznam whewellitu z Handlovej

h	k	Ι	d _{obs} [Å]	I _{obs} [%]	d _{tab} [Å]*		h	k	1	d _{obs} [Å]	I _{obs} [%]	d _{tab} [Å]*
1	0	0	5.93	100	5.93		-3	2	2	2.0090	2	2.0039
0	2	1	5.80	28	5.79		1	0	4	1.9959	4	1.9942
1	1	0	5.50	2	5.49		0	4	4	1.9972	2	1.9942
0	0	2	4.773	4	4.768		-3	1	3	1.9870	2	1.9864
-1	2	1	4.642	4	4.639		3	0	0	1.9779	14	1.9768
-1	0	2	4.527	8	4.526		1	1	4	1.9775	17	1.9768
-1	1	2	4.324	3	4.330		-1	6	3	1.9577	5	1.9561
1	2	1	3.782	12	3.779		3	1	0	1.9599	3	1.9561
0	4	0	3.649	96	3.647		-1	2	5	1.9508	7	1.9496
0	3	2	3.407	6	3.405		1	6	2	1.9432	2	1.9422
-1	3	2	3.314	5	3.311		-3	2	3	1.9339	8	1.9330
0	1	3	3.107	8	3.105		0	6	3	1.9325	6	1.9330
-1	2	3	3.006	11	3.003		-2	4	4	1.9235	5	1.9230
2	0	0	2.967	57	2.966		-2	6	1	1.9242	6	1.9230
0	2	3	2.917	10	2.915		-3	3	2	1.9201	2	1.9194
2	1	0	2.907	8	2.905		2	4	2	1.8910	5	1.8893
0	4	2	2.899	10	2.897		-2	2	5	1.8595	3	1.8584
-2	2	1	2.891	5	2.887		-3	0	4	1.8565	2	1.8559
-1	4	2	2.841	17	2.839		-3	3	3	1.8542	2	1.8559
0	3	3	2.663	6	2.661		1	3	4	1.8466	5	1.8459
-2	1	3	2.612	4	2.611		0	2	5	1.8470	5	1.8459
-1	0	4	2.524	5	2.522		-3	1	4	1.8416	2	1.8409
-2	2	3	2.4951	22	2.4945		3	3	0	1.8322	2	1.8310
0	5	2	2.4889	4	2.4885		0	8	0	1.8243	4	1.8229
1	1	3	2.4475	6	2.4468		2	2	3	1.8206	2	1.8196
1	4	2	2.4181	7	2.4165		-3	4	2	1.8134	6	1.8124
-2	4	1	2.3858	6	2.3842		-3	4	1	1.8064	2	1.8052
0	0	4	2.3796	4	2.3842		-2	6	3	1.7934	11	1.7926
0	6	1	2.3565	45	2.3554		2	6	1	1.7758	2	1.7747
1	2	3	2.3504	9	2.3473		-2	7	1	1.7378	3	1.7356
-2	4	2	2.3212	4	2.3194		1	6	3	1.7370	5	1.7356
2	4	0	2.3019	5	2.2998		0	8	2	1.7041	2	1.7024
-2	0	4	2.2636	11	2.2630		-1	8	2	1.6921	3	1.6912
-1	6	1	2.2551	10	2.2530		0	4	5	1.6916	3	1.6912
1	6	0	2.2490	3	2.2493		-1	0	6	1.6832	2	1.6821
1	3	3	2.2103	7	2.2093		-3	2	5	1.6386	2	1.6377
1	6	1	2.1303	5	2.1300		1	8	2	1.5886	2	1.5876
-3	0	2	2.0897	6	2.0887		2	5	3	1.5806	2	1.5796
-1	4	4	2.0753	13	2.0739		-3	6	1	1.5805	2	1.5796
-3	1	2	2.0687	3	2.0676		-2	8	2	1.5599	2	1.5586
2	3	2	2.0130	2	2.0118		-3	6	3	1.5474	3	1.5468
-1	1	5	2.0053	2	2.0039							
*Taz	*Tazzoli, Domengheti (1980)											

porovnanie s publikovanými údajmi (* objem základnej bunky bol dopočítaný)						
lokalita	citácia	<i>a</i> [Å]	b [Å]	c [Å]	β [°]	V [ų]
Handlová (SR)	táto práca	6.2925(6)	14.5947(10)	10.1230(2)	109.446(8)	876.64(5)
Kladno (ČR)	Žáček et al. (2008)	6.288(2)	14.583(3)	10.114(3)	109.45(1)	874.51*
Bílina (ČR)	Echigo et al. (2005)	6.250(1)	14.471(2)	10.114(2)	109.978(5)	859.7(3)
Bílina (CR)	Žáček et al. (2008)	6.296(2)	14.597(4)	10.123(4)	109.46(1)	877.19*
svntetický	Tazzoli, Domeneghetti (1980)	6.290(1)	14.583(1)	10.116(1)	109.46(2)	876.228

Tabuľka 2 Mriežkové parametre whewellitu z Handlovej (indexácia v monoklinickej priestorovej grupe P2,/n) a ich porovnanie s publikovanými údajmi (* objem základnej bunky bol dopočítaný)

Obr. 3 FTIR spektrum whewellitu z lokality Handlová (4000 - 2000 cm⁻¹).

hnedé kôry a povlaky drobnokryštalického sideritu, biele práškovité agregáty bližšie neidentifikovaného ílového minerálu a vzácne aj max. 11 mm veľké, číre, biele a žltkasté prizmatické kryštály baritu.

Whewellit má pri interakcii s dlhovlnným UV žiarením intenzívnu zelenožltú fluorescenciu a fosforescenciu, ktorá trvá ~ 10 sekúnd. Identickú fosforescenciu prvý krát opísali Žáček et al. (2008) pri whewellite z mosteckej panvy v ČR. Práškové rtg. difrakčné údaje (tab. 1) ako aj vypočítané a spresnené mriežkové parametre whewellitu z Handlovej (tab. 2) sú vo veľmi dobrej zhode s publikovanými údajmi. Infračervené absorpčné spektrum whewellitu (obr. 3, 4) z Handlovej sa tiež veľmi dobre zhoduje s údajmi publikovanými pre synteticky pripravený alebo prírodný whewellit (napr. Trpkovska et al. 2002; Frost et al. 2003; Echigo et al. 2005). Oxalátová skupina (O-C-O väzby) sa prejavila pás-

mi antisymetrických a symetrických valenčných vibrácií (tab. 3, obr. 4). Zvýšená intenzita pásu charakteristického pre symetrickú valenčnú vibráciu C-O (1624 cm⁻¹) môže byť spôsobená prekryvom s pásom deformačnej vibrácie H_2O . Molekulová H_2O prítomná v kryštálovej štruktúre whewellitu sa v IČ spektre prejavila najmä valenčnými vibráciami O-H väzieb (oblasť 3485 - 3062 cm⁻¹) ako aj libračnými pásmi (oblasť 665 - 516 cm⁻¹) (tab. 3, obr. 3 a 4).

Whewellit vznikol ako najmladší minerál puklín v redukčných podmienkach za prítomnosti vápnika. Kyselina šťavelová potrebná pre vznik whewellitu mohla byť produkovaná rozkladom organickej hmoty rastlín alebo bol oxalát vápenatý priamo vylúhovaný z pletiva rastlín, ktorých fosílne zvyšky sú často prítomné aj priamo v pelosideritoch.



Obr. 4 FTIR spektrum whewellitu z lokality Handlová (2000 - 400 cm⁻¹).

Tabuľka 3 Vlnočty a absorbancia pásov jednotlivých vibrácií väzieb v IČ spektre whewellitu z Handlovej a ich interpretácia

v (cm ⁻¹)AbsorbanciaTyp34850.29v-valenčná vibrácia O-H v H2O34290.31v-valenčná vibrácia O-H v H2O33420.23v-valenčná vibrácia O-H v H2O32610.17v-valenčná vibrácia O-H v H2O30620.17v-valenčná vibrácia O-H v H2O16240.93 $v_s^+\delta$ -kombinovaná antisymetrická valenčná vibrácia0-C=O v COO a deformačná vibrácia C-O v COO13830.0813170.59 v_s^+v -kombinovaná symetrická valenčná vibrácia1470.01 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO9470.01 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO7810.36 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO6650.17L-libračná vibrácia O-H v H2O5920.10L-libračná vibrácia O-H v H2O5160.25L-libračná vibrácia O-H v H2O			
34850.29v-valenčná vibrácia O-H v H2O34290.31v-valenčná vibrácia O-H v H2O33420.23v-valenčná vibrácia O-H v H2O32610.17v-valenčná vibrácia O-H v H2O30620.17v-valenčná vibrácia O-H v H2O16240.93 $v_s^+\delta$ -kombinovaná antisymetrická valenčná vibrácia O-C=O v COO a deformačná vibrácia H-O-H v H2O13830.08vs-symetrická valenčná vibrácia C-O v COO13170.59 v_s^+v -kombinovaná symetrická valenčná vibrácia C-O v COO9470.01 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO8830.04 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO7810.36 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO6650.17L-libračná vibrácia O-H v H2O5920.10L-libračná vibrácia O-H v H2O5160.25L-libračná vibrácia O-H v H2O	ν (cm ⁻¹)	Absorbancia	Тур
3429 0.31 v-valenčná vibrácia O-H v H2O 3342 0.23 v-valenčná vibrácia O-H v H2O 3261 0.17 v-valenčná vibrácia O-H v H2O 3062 0.17 v-valenčná vibrácia O-H v H2O 1624 0.93 $v_s + \delta$ -kombinovaná antisymetrická valenčná vibrácia O-C=O v COO a deformačná vibrácia H-O-H v H2O 1383 0.08 $v_s - symetrická valenčná vibrácia C-O v COO$ 1317 0.59 $v_s + v$ -kombinovaná symetrická valenčná vibrácia C-O v COO 947 0.01 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO 883 0.04 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO 781 0.36 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO 665 0.17 L-libračná vibrácia O-H v H2O 592 0.10 L-libračná vibrácia O-H v H2O 516 0.25 L-libračná vibrácia O-H v H2O	3485	0.29	v-valenčná vibrácia O-H v H ₂ O
33420.23v-valenčná vibrácia O-H v H_2O 32610.17v-valenčná vibrácia O-H v H_2O 30620.17v-valenčná vibrácia O-H v H_2O 16240.93 $v_s^+\delta$ -kombinovaná antisymetrická valenčná vibrácia O-C=O v COO a deformačná vibrácia H-O-H v H_2O 13830.08 v_s^- symetrická valenčná vibrácia C-O v COO13170.59 v_s^+v -kombinovaná symetrická valenčná vibrácia C-O a valenčná vibrácia O-C v COO9470.01 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO8830.04 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO7810.36 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO6650.17L-libračná vibrácia O-H v H_2O 5920.10L-libračná vibrácia O-H v H_2O 5160.25L-libračná vibrácia O-H v H_2O	3429	0.31	v-valenčná vibrácia O-H v H ₂ O
32610.17v-valenčná vibrácia O-H v H_2O 30620.17v-valenčná vibrácia O-H v H_2O 16240.93 $v_s^+\delta$ -kombinovaná antisymetrická valenčná vibrácia O-C=O v COO a deformačná vibrácia C-O v COO13830.08 v_s^- symetrická valenčná vibrácia C-O v COO13170.59 v_s^+v -kombinovaná symetrická valenčná vibrácia C-O a valenčná vibrácia O-C=O v COO9470.01 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO8830.04 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO7810.36 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO6650.17L-libračná vibrácia O-H v H_2O5920.10L-libračná vibrácia O-H v H_2O5160.25L-libračná vibrácia O-H v H_2O	3342	0.23	v-valenčná vibrácia O-H v H ₂ O
3062 0.17 v-valenčná vibrácia O-H v H2O1624 0.93 $v_s + \delta$ -kombinovaná antisymetrická valenčná vibrácia O-C=O v COO a deformačná vibrácia H-O-H v H2O1383 0.08 v_s -symetrická valenčná vibrácia C-O v COO1317 0.59 v_s -v-kombinovaná symetrická valenčná vibrácia C-C v COO947 0.01 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO883 0.04 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO781 0.36 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO665 0.17 L-libračná vibrácia O-H v H2O592 0.10 L-libračná vibrácia O-H v H2O516 0.25 L-libračná vibrácia O-H v H2O	3261	0.17	v-valenčná vibrácia O-H v H ₂ O
1624 0.93 $v_s + \delta$ -kombinovaná antisymetrická valenčná vibrácia O-C=O v COO a deformačná vibrácia H-O-H v H2O1383 0.08 v_s -symetrická valenčná vibrácia C-O v COO1317 0.59 v_s +v-kombinovaná symetrická valenčná vibrácia C-O a valenčná vibrácia O-C v COO947 0.01 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO883 0.04 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO781 0.36 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO665 0.17 L-libračná vibrácia O-H v H2O592 0.10 L-libračná vibrácia O-H v H2O516 0.25 L-libračná vibrácia O-H v H2O	3062	0.17	v-valenčná vibrácia O-H v H ₂ O
13830.08 v_s -symetrická valenčná vibrácia C-O v COO13170.59 v_s +v-kombinovaná symetrická valenčná vibrácia C-O a valenčná vibrácia O-C v COO9470.01 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO8830.04 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO7810.36 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO6650.17L-libračná vibrácia O-H v H_2O5920.10L-libračná vibrácia O-H v H_2O5160.25L-libračná vibrácia O-H v H_2O	1624	0.93	ν _s +δ-kombinovaná antisymetrická valenčná vibrácia O-C=O v COO a deformačná vibrácia H-O-H v H_2O
1317 0.59 v_s+v -kombinovaná symetrická valenčná vibrácia C-O a valenčná vibrácia C-C v COO947 0.01 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO883 0.04 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO781 0.36 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO665 0.17 L-libračná vibrácia O-H v H2O592 0.10 L-libračná vibrácia O-H v H2O516 0.25 L-libračná vibrácia O-H v H2O	1383	0.08	v_s -symetrická valenčná vibrácia C-O v COO
9470.01 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO8830.04 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO7810.36 δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO6650.17L-libračná vibrácia O-H v H2O5920.10L-libračná vibrácia O-H v H2O5160.25L-libračná vibrácia O-H v H2O	1317	0.59	v _s +v-kombinovaná symetrická valenčná vibrácia C-O a valenčná vibrácia C-C v COO
8830.04δ-deformačná vibrácia O-C=O v COO7810.36δ-deformačná vibrácia O-C=O v COO6650.17L-libračná vibrácia O-H v H2O5920.10L-libračná vibrácia O-H v H2O5160.25L-libračná vibrácia O-H v H2O	947	0.01	δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO
7810.36δ-deformačná vibrácia O-C=O v COO6650.17L-libračná vibrácia O-H v H_2O 5920.10L-libračná vibrácia O-H v H_2O 5160.25L-libračná vibrácia O-H v H_2O	883	0.04	δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO
6650.17L-libračná vibrácia O-H v H_2O 5920.10L-libračná vibrácia O-H v H_2O 5160.25L-libračná vibrácia O-H v H_2O	781	0.36	δ -deformačná vibrácia O-C=O v COO
5920.10L-libračná vibrácia O-H v H_2O 5160.25L-libračná vibrácia O-H v H_2O	665	0.17	L-libračná vibrácia O-H v H ₂ O
516 0.25 L-libračná vibrácia O-H v H_2O	592	0.10	L-libračná vibrácia O-H v H ₂ O
	516	0.25	L-libračná vibrácia O-H v H ₂ O

Záver

V puklinách pelosideritových konkrécií na hnedouhoľnom ložisku Handlová bol zistený výskyt whewellitu v asociácii spolu s kremeňom a pyritom. Rtg. práškové difrakčné údaje, vypočítané mriežkové parametre ako aj FTIR spektrum whewellitu zo študovanej lokality sú v dobrej zhode s údajmi publikovanými pre túto minerálnu fázu. V dlhovlnnom UV žiarení bola pozorovaná výrazná zelenožltá fluorescencia a fosforescencia whewellitu, ktorá bola doteraz zistená len na lokalite Bílina v Českej republike.

Poďakovanie

Autori ďakujú doc. Pavlovi Fejdimu, Dr. Vladimírovi Žáčkovi a Ing. Jiřímu Čejkovi, DrSc. za kritické posúdenie článku a cenné pripomienky, ktoré pomohli zvýšiť jeho úroveň. Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV VVCE-0033-07.

Literatúra

- Bačo P., Pacindová M. (1993): Whewellit a dawsonitepigenetická mineralizácia v puklinách pieskovca pri Cigeľke. - *Miner. Slov.* 25, 4, 277-281.
- Brodňanová E. (1985): Geologická stavba handlovskonováckeho uhoľného ložiska. - In: Samuel O., Franko O. (ed.): Sprievodca XXV. celoštátneho geologického zjazdu Slovenskej geologickej spoločnosti. 15-18, ŠGÚDŠ, Bratislava.
- Brus Z., Dvořák Z. (1989): Nový nález whewellitu ze severočeské hnědouhelné pánve. - Čas. Mineral. Geol. 34, 3, 327.
- Campbell T. J., Roberts W. L. (1986): Whewellite from South Dacota and a review of other North American localities. - *Miner. Rec.* **17**, 2, 131-133.
- Čech F., Petrík F. (1972): Klasifikačné zatriedenie a popis minerálnej prímesi v slojoch handlovsko-nováckej oblasti. - *Miner. Slov.* 4, 16, 257-265.
- Dvořák Z., Janeček O., Radoň M. (1999): Whewellit a jeho výskyty. - Bull. mineral.-petrolog. Odd. Nár. Muz. (Praha) 7, 64-67.
- Echigo T., Kimata M., Kyono A., Shimizu M., Hatta T. (2005): Re-investigation of the crystal structure of whewellite $[Ca(C_2O_4) \cdot H_2O]$ and the dehydration mechanism of caoxite $[Ca(C_2O_4) \cdot 3H_2O]$. *Min. Mag.* **69**, 77-88.
- Echigo T., Kimata M. (2010): Crystal chemistry and genesis of organic minerals: A review of oxalate and polycyclic aromatic hydrocarbon minerals. - *Can. Mineral.* 48, 1329-1357.
- Frost R. L., Yang J., Ding Z. (2003): Raman spectroscopy of natural oxalates-implications for the evidence of life on Mars. - *Chinese Science Bulletin* 48, 1844-1852.
- Fuchs L. H., Olsen E., Jensen K. J. (1973): Mineralogy, mineral-chemistry and composition of the Murchison (C2) meteorite. - *Smithsonian Contrib. Earth Sci.* 10, 1-39.
- Hentschel G. (1987): Die Mineralien der Eifelvulkane. 1-177, Weise Verlag, München.

- Hofmann F. (1991): Die Whewellit Vorkommen in Sachsen und Thüringen. - *Lapis* **16**, 5, 34-37.
- Ježek B. (1911): Whewellit z Lomu (Bruch) u Duchcova. - Rozpr. Čes. Akad. Věd Umění, Tř. II 20, 1-9.
- Machajová Z., Verbich F., Sýkora I. (2000): Geologická a petrografická charakteristika ložiska Handlová. -Acta Montanistica Slovaca 5, 3, 261-264.
- Kašpar J. V. (1932): O krystalografii kladenského whewellitu. - Rozpr. Čes. Akad. Věd Umění, Tř. II, 1-29.
- Knížek F., Litochleb J. (2005): Kalcitové drúzové dutiny s whewellitem na uranovém ložisku Bytíz (příbramský uran-polymetalický revír). - Bull. mineral.-petrolog. Odd. Nár. Muz. (Praha) 13, 73-77.
- Koch A. (1926): Whewellitkristal von Kapnikbánya. Zeitschr. Krist. 63, 176-179.
- Penndorf H. G. (2006): Burgk, Freital und Plauen in Sachsen: Prächtige Calcite und Whewellit aus dem Döhlener Becken bei Dresden. - *Lapis* 31, 2, 13-22.
- Schlüler S. (1991): Ein Fundbericht: Whewellit von Schlema-Hartenstein in Sachsen. - *Lapis* **16**, 5, 38-39.
- Skála R. (1995): Whewellit z příbramského uranového ložiska. *Minerál* **3**, 2, 115-116.
- Slavík F. (1908): Whewellit ze Slaného. Rozpr. Čes. Akad. Věd Umění, Tř. II, **17**.
- Szakáll S., Gatter I., Szendrei G. (2005): A magyarországi ásványfajok. - 1-427, Kőország Kiadó, Budapest.
- Simon L., Elečko M., Lexa J., Kohút M., Halouzka R., Gross P., Pristaš J., Konečný V., Mello J., Polák M., Vozárová A., Vozár J., Havrila M., Köhlerová M., Stolár M., Jánová V., Marcin D., Szalaiová V. (1997): Vysvetlivky ku geologickej mape Vtáčnika a Hornonitrianskej kotliny 1:50 000. - 1-281, ŠGÚDŠ, Bratislava.
- Tazzoli V., Domeneghetti C. (1980): The crystal structures of whewellite and weddellite: re-examination and comparison. - *Am. Mineral.* 65, 327-334.
- Trpkovska M., Šoptrajanov B., Pejov L. (2002): Reinvestigation of the infrared spectra of calcium oxalate monohydrate and ists partially deuterated analogues An experimental and theoretical study. *Bulletin of Chemists and Technologist of Macedonia* **21**, 2, 11-116.
- Tyra M. A., Farquhar J., Wing B. A., Benedix G. K., Jull A. J. T., Jackson T., Thiemens M. H. (2007): Terestrial alteration of carbonate in a suite of Antarctic CM chondrites: evidence from oxygen and carbon isotopes. -*Geochim. Cosmochim. Acta* **71**, 782-795.
- Witzke T., Rüger F. (1998): Die Minerale der Ronneburger und Culmitzcher Lagerstätten in Thüringen. - Lapis 23, 7-8, 26-64.
- Žáček V., Dvořák Z., Škoda R., Laufek F., Mráz J. (2008): Fosforeskující whewellit z Mostecké pánve (Česká republika). - Bull. mineral.-petrolog. Odd. Nár. Muz. (Praha) 16, 2, 208-211.
- Žák K., Skála R. (1993): Carbon isotopic composition of whewellite (CaC₂O₄·H₂O) from different geological environments and its significance. *Chem. Geol.* **106**, 123-131.