

H. Voigtländer, W. Depmeier, B. Winkler, K. Knorr und  
L. Ehm

Institut für Geowissenschaften der Universität Kiel,  
Mineralogie / Kristallographie

*Notizen*

Die Kristallstruktur von Bassanit,  $\text{CaSO}_4 \cdot 0,5 \text{H}_2\text{O}$  ist isotyp mit der des  $\gamma$ -Anhydrits,  $\gamma\text{-CaSO}_4$ , die aus  $\text{CaO}_6$ - und  $\text{CaO}_9$ -Polyedern sowie  $\text{SO}_4$ -Tetraedern aufgebaut ist. Charakteristisch für diese Struktur sind Kanäle parallel [001] mit ca. 4,5 Å Durchmesser [1], die im Anhydrit leer sind, in die aber  $\text{H}_2\text{O}$ -Moleküle eingelagert werden können. Sie sind also Gäste in der Wirtsstruktur des  $\gamma$ -Anhydrits. Die Wechselwirkung zwischen Polyedergerüst und eingebautem Wasser sind bislang noch weitgehend unbekannt. Aus Neutronenstreuungs-Experimenten [2] gibt es Hinweise darauf, daß die Wechselwirkung zwischen  $\text{H}_2\text{O}$ -Molekülen und umgebender Wirtsstruktur schwach sind.

In der vorliegenden Arbeit wurde untersucht, ob der Wassereinbau in die Kristallstruktur des  $\gamma$ -Anhydrits eine Änderung der Kompressibilität bewirkt. Es wurden Hochdruckexperimente bis zu Drücken von 5,8 GPa mit einer Diamant-Stempel-Zelle [3] in Kombination mit einem Röntgen-Bildplatten-Diffraktometer vorgenommen. Parallel dazu wurden Berechnungen mit dem Programm CASTEP [4] durchgeführt, um die Kompressibilität von  $\gamma\text{-CaSO}_4$  theoretisch zu ermitteln. Die simulierten Drücke betragen bis zu 9 GPa.

An die experimentell ermittelten Elementarzell-Volumina wurde eine Birch-Murnaghan-Zustandsgleichung angepaßt, aus der sich die Kompressibilität des Bassanits zu 66(2) GPa ergibt. Der theoretische Wert für  $\gamma\text{-CaSO}_4$  beträgt 67(4) GPa und stimmt im Rahmen der Fehler mit dem experimentellen Wert überein. Das legt nahe, daß der Wassereinbau nur geringe Auswirkungen auf die Kompressibilität hat, und bestätigt die Annahme einer nur geringen Wechselwirkung zwischen den  $\text{H}_2\text{O}$ -Molekülen und dem Polyedergerüst.

Weitere Versuche in Hinblick auf die Veränderung der Kompressibilität durch den Einbau verschiedener Gäste ins Kristallgitter des  $\gamma$ -Anhydrits werden zur Zeit durchgeführt.

Dieses Projekt (De 412/13-2) wird von der DFG gefördert.

[1] Abriel, W. und Nesper, R.: Z. Krist. 205 (1993), 99-113. Bezou, C.; Nonat, A.; Mutin, J.-C.; Nørlund Christensen, A. und Lehmann, M. S.; J. Sol. St. Chem. 117 (1995), 165-176. Lager, G. A., Armbruster, T., Rotella, F. J., Jorgensen, J. D. und Hinks, D. G.; Am. Min. 69 (1984), 910-918.

[2] Winkler, B. und Hennion, B.; Phys. Chem. Min. 21 (1994), 539-545

[3] Merrill, L. und Basset, W.; Rev. Sci. Instr. 45 (1974), 290-294

[4] Payne, M. C., Teter, M. P., Allen, D. C., Arias, T. A. und Johannopoulos, J. D.; Rev. Mod. Phys. 64 (1992), 1045-1097

*Marburger Gipstagung 1999*