

Wirt/Gast-Beziehungen in Bassanit

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

Institut für Geowissenschaften, Universität Kiel, 24098 Kiel, Germany

Einleitung

Bassanit $\text{CaSO}_4 \cdot 0,5 \text{H}_2\text{O}$

Kristallstruktur des Gerüsts ist bekannt (Abb. 1)

- isotyp mit $\gamma\text{-CaSO}_4$ (Anhydrit III)
- $\text{CaO}_8\text{-}/\text{CaO}_9\text{-}$ Polyeder um $\text{SO}_4\text{-}$ Tetraeder
- Polyederketten $\parallel [001]$
- Kanäle $\parallel [001]$ mit $\phi = 4.5 \text{ \AA}$

Einlagerung von Gästen in Kanäle möglich

- ⇒ $\text{CaSO}_4 \cdot x \text{H}_2\text{O}$ mit $0 \leq x \leq (0,8)$
- ⇒ Methanol

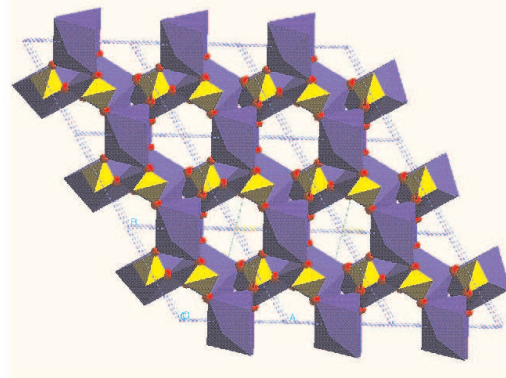


Abb. 1: Kristallstruktur von Bassanit $\parallel [001]$

Fragestellungen

- Wechselwirkungen der Gäste mit Gerüst?
- Molekulare Dynamik des H_2O ?

Untersuchungsmethoden

Röntgenbeugung als $f(p)$ → DAC + IP (Abb. 2,3,4)

Neutronenbeugung

- als $f(p)$ → Kiel-Berlin-Zelle
- als $f(T)$ → hochauflösend (+ D_2O) (Abb. 7)

Computer-Experimente

- DFT, GGA, ultraweiche Pseudopotentiale

$^1\text{H-NMR}$ -Spektroskopie als $f(T)$

Dielektrische Verlustmessungen

Spektroskopie mit Neutronen

- inelastisch inkohärent (Abb. 5,6)
- tief-inelastisch

Synthesen mit größeren Gästen

Durch die **Kombination** der verschiedenen Methoden soll die Stärke der Wirt/Gast-Wechselwirkungen als $f(p,T,x)$ untersucht werden. Damit soll ein tiefgehendes Verständnis der Dynamik der Gäste erzielt werden.

Erste Ergebnisse

Bestimmung des Kompressionsmoduls aus DAC-Versuchen

- ⇒ $B_0 = 68(2) \text{ GPa}$, $B' = 4$ (fix)

Übereinstimmung mit theoretischem Wert für $\gamma\text{-CaSO}_4$

- ⇒ Kompressionsmodul durch Einbau H_2O kaum verändert

Aus Neutronenspektroskopie

- ⇒ H_2O dynamisch fehlgeordnet
- ⇒ Änderung der Dynamik bei 30 K

Aus Neutronenbeugung

- ⇒ vermutlich keine langreichweitige Ordnung von H_2O

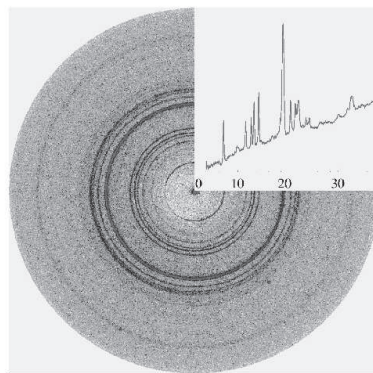


Abb. 2: Mit DAC/IP aufgenommenes Pulverdiffraktogramm

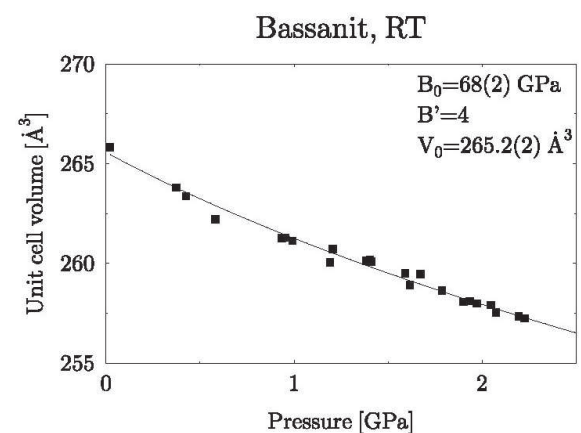


Abb. 3: V-p-Diagramm mit angepaßter Zustandsgleichung

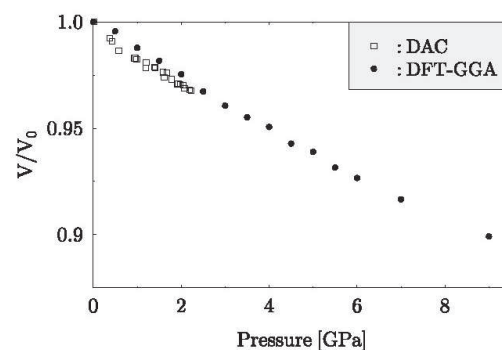


Abb. 4: Vergleich der Zustandsgleichungen von Bassanite mit theoretischen Daten für $\gamma\text{-CaSO}_4$

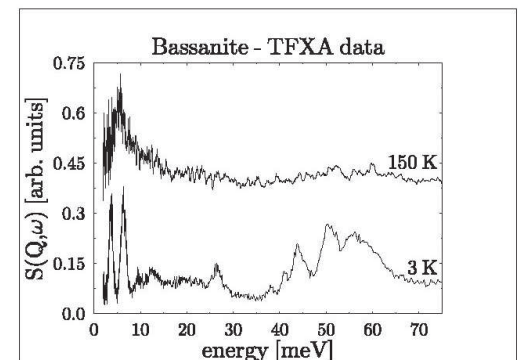


Abb. 5: Neutronen-Spektroskopie: Beleg für die Änderung der Dynamik von H_2O als $f(T)$

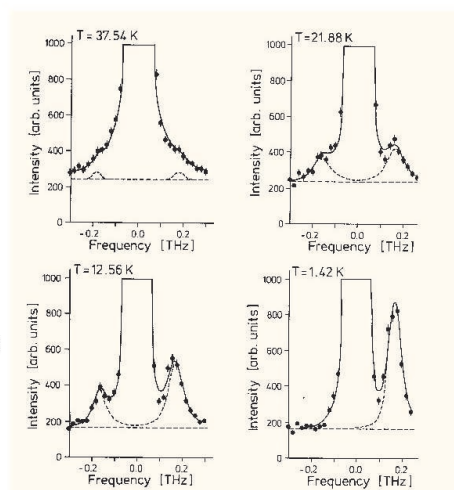


Abb. 6: Inelastische Neutronenstreuung: Änderung der Dynamik der H_2O -Moleküle. Oberhalb 30 K sind die H_2O -Moleküle dynamisch fehlgeordnet, bei tiefen Temperaturen kann man Translationsbewegungen beobachten.

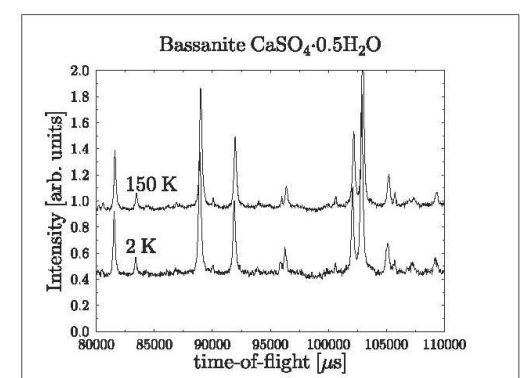


Abb. 7: Hochauflösende Neutronenbeugung zeigt keine langreichweitige Ordnung bei tiefen Temperaturen. Durch Einbau von D_2O soll in zukünftigen Experimenten der Untergrund stark reduziert werden.