

**Kristallstrukturen von CaSO₄ und
seinen Hydraten
- Anmerkungen zum Vortrag V3 -**

(neu) P 11

R. Allmann

Institut für Mineralogie der Philipps-Universität
Marburg

Legenden zu den Abbildungen des Posters.

Abb. oben links: Eine Ca-SO₄-Kette als gemeinsames Strukturelement in allen betreffenden Strukturen (hier am Beispiel von Gips mit zusätzlichen Wassermolekülen).

Unten links (rechte Hälfte): Im Gips, CaSO₄·2 H₂O, sind diese Ketten im Zickzack zu Schichten angeordnet. Neben den 4 Ca-O-Bindungen in der Kette sind die Ca-Ionen an weitere 2 O von benachbarten Ketten und an 2 Wassermoleküle gebunden. Die Außenfront dieser CaSO₄·2 H₂O-Schichten besteht praktisch nur aus Wassermolekülen, die nur schwache Wasserstoffbrückenbindungen zu benachbarten Schichten ausbilden. Dadurch erklärt sich die gute Spaltbarkeit des Gipses: Bei der Spaltung brauchen nur Wasserstoffbrücken gelöst zu werden.

Unten links (linke Hälfte): Im wasserfreien Anhydrit II ist jedes Ca außer an die 4 O innerhalb einer Ca-SO₄-Kette an weitere 4 O aus 4 benachbarten Ketten gebunden. Dadurch entsteht ein dreidimensionaler Verband mit höherer Festigkeit als beim Gips (Mohssche Härte 3½ gegenüber 1½-2 - je nach Kristallfläche- beim Gips).

Unten rechts: Im Anhydrit III und im Bassanit (Halbhydrat oder besser Subhydrat mit 0,48 bis 0,67 H₂O pro CaSO₄, Grundstoff aller Dentalgipse) sind je 6 Ca-SO₄-Ketten um hohle Kanäle angeordnet. Im Anhydrit III sind diese Kanäle leer und die Kanäle haben die höchstmögliche hexagonale Symmetrie. Im Bassanit sind diese mit Wassermolekülen gefüllt. Da die Ca-Ionen in den Ketten etwas an die nächsten Wassermoleküle heranrücken, wird die Symmetrie der Kanäle erniedrigt (trigonal (oben) oder monoklin-pseudotrigonal (Mitte, für 2/3 H₂O)). Für die 2/3-Füllung lassen sich die Leerstellen in benachbarten Kanälen auch so anordnen, daß für den Gesamtkristall noch eine trigonale Symmetrie resultiert (hypothetische Struktur, ganz unten).

Oben rechts (oben): Beim Blick in einen geöffneten Kanal der Bassanitstruktur sind die möglichen Lagen der Wassermoleküle erkennbar. Diese sind 2,48 Å von den Ca-Ionen entfernt, liegen aber im Zentrum der Kanäle zu dicht (2,42 Å) beieinander, als daß sie alle besetzt sein könnten. Bei geordneten Lücken kann entweder jeder 2. Gitterplatz besetzt sein (links), oder 2 von 3 Plätzen (rechts). Im letzteren Fall wird der Abstand von 2,42 Å auf über 2,7 Å aufgeweitet, in dem die Wassermoleküle etwas in Richtung auf den leeren Gitterplatz aus ihrer Ideallage herausrücken. Im ersten Fall (1/2 Wasser) verdoppelt sich die Translationsperiode c₀ in Kettenrichtung. In der Hälfte der Kanäle wird gerade die andere Hälfte der möglichen Wasserplätze besetzt. Durch diese Anordnung geht die trigonale Symmetrie verloren und das Gitter wird leicht monoklin verzerrt. Bei einer Kanalfüllung zwischen 1/2 und 2/3 sind die Lücken statistisch verteilt. Dadurch bleibt die Struktur im Mittel über alle Zellen trigonal.

Oben rechts (unten): Auch in der häufig auftretenden Ausblühphase Syngenit, K₂Ca(SO₄)₂·H₂O, ist die Hälfte der SO₄-Gruppen in Ca-SO₄-Ketten eingebaut (links. Das Kalium stammt aus den Stellmitteln der Dentalgipse). Ähnliche Ketten sind auch aus anderen Verbindungen bekannt, z.B. Zr-SiO₄-Ketten im Zirkon.

G... Dentalgipse 1996

Strukturen von $\text{CaSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ ($x = 0-2$)

Rudolf Allmann, Institut für Mineralogie und
Wissenschaftl. Zentrum für Materialwissenschaften,
Philippsuniversität, Marburg

