



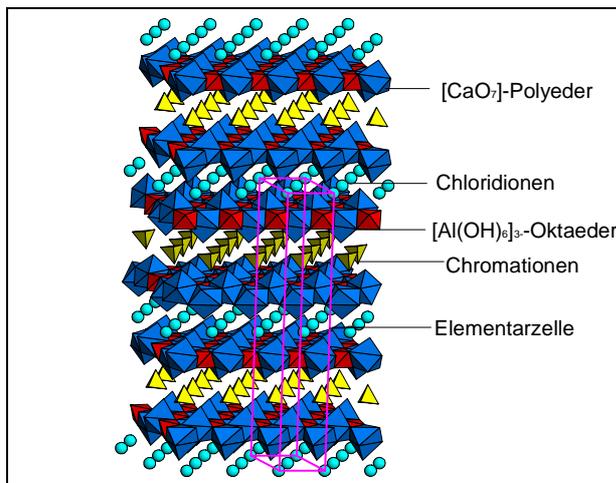
Untersuchung der Eigenschaften und Struktur lamellarer Schichtstrukturen unter Anwendung der Rietveldverfeinerung

Bearbeiterin: Dipl. Min. Christina Kraus

Tel.: +49.345.5526123, kraus@geologie.uni-halle.de

Neben den nadeligen Calciumaluminathydraten spielen die lamellaren Calciumaluminathydroxysalze als Hydratationsprodukte von Bindemitteln eine Rolle. Aber auch in anderen Anwendungsbereichen wie im Bereich der Umweltmineralogie werden diese zur Schadstoffbindung und als Austauscherminerale eingesetzt. Es wurden bereits sulfathaltige, chloridhaltige Strukturen sowie eine Überstruktur mit wechselnden Lagen aus Chlorid und Chromat bestimmt (Allmann, R. 1977, Löns, J.F. 1998, TERZIS ET AL. 1987). In dieser Arbeit sollen die lamellaren Calciumaluminathydroxysalze im Hinblick auf ihre Struktur, Mischkristallbildung und deren Quantifizierung mit Hilfe der Rietveldmethode untersucht werden.

Durch eine wechselnde Besetzung der Zwischenschichten mit Chlorid und Chromat kommt es zu einer Verdopplung der c-Gitterkonstante. Die Überstrukturverbindung des Halbchromatchlorids besteht äquivalent zur Substruktur Monochlorid aus Hauptschichten $[\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_6]^+$ und Zwischenschichten $[\text{CrO}_4 \cdot \text{Cl} \cdot n \text{H}_2\text{O}]^-$ mit variablem Wassergehalt. Für eine Quantifizierung wurden theoretische Röntgendiagramme erstellt und mit synthetischen Phasen verglichen.



Durch Rietveldverfeinerungen soll geprüft werden, ob die relevanten Verbindungen mit verschiedenen Anionen exakt quantifiziert werden können. Dabei sind Strukturbeschreibungen notwendig, um Verfeinerungen von Röntgenpulverdaten durchzuführen. Auf diese Weise ist es möglich, Reaktionsmechanismen und Hydratationsvorgänge besser zu verstehen. Aus diesem Grunde sollen im Rahmen dieser Arbeit die Überstrukturverbindungen der lamellaren Hydroxysalze mit wechselnden Lagen aus tetraedrischen Anionen und Chloridionen untersucht werden. Auch Carbonatisierungsprozesse sollen hierbei quantifiziert werden.

Abb. 1 Struktur von Halbchromatchlorid - strukturelle Schreibweise $[\text{Ca}_4\text{Al}_2(\text{OH})_{12}]^{2+} [\text{Cl}_{0.5}\text{CrO}_4n\text{H}_2\text{O}]^{2-}$ (AUER, 1992) (Strukturdaten von LÖNS & PÖLLMANN 1998)

Literatur:

ALLMANN, R. (1977): Refinement of the hybrid layer structure $[\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_6] [0.5 \text{SO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}]$.- N. Jb. Min.Mh. H3, 136-144

AUER, S. (1992): Bindung umweltrelevanter Ionen in Ettringit und in Schichtstrukturen vom Typus TCAH.- Dissertation, Erlangen

LÖNS, J.F. ET AL. (1998): Über den Einbau von Chlorid und Chromat-Ionen in lamellare Calcium- Aluminathydrate $[\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_6] [\text{CrO}_4 \cdot \text{Cl} \cdot n\text{H}_2\text{O}]$.-Z. Krist. Suppl. No. 15, p. 44

TERZIS, ET AL. (1987): The crystal structure of $\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_6 \cdot \text{Cl} \cdot \text{H}_2\text{O}$.- Z. Krist. 181, 29-34