

DER ZUSAMMENHANG ZWISCHEN DER STRUKTUR, DER LAGE DER OPTISCHEN INDIKATRIX
UND DES ELLIPSOIDES DER WÄRMELEITFÄHIGKEIT BEI GIPS, $\text{CaSO}_4 \times 2\text{H}_2\text{O}$ MONOKLIN

von

M. Wildner +)

(eingelangt am 21. Jänner 1986)

Die Struktur von Gips ist bereits seit einiger Zeit gut untersucht, doch gibt es in der Literatur aufgrund verschiedener Aufstellungsmöglichkeiten oft unterschiedliche Angaben (siehe Tab. 1).

Es schien daher angebracht, bezogen auf die neueste Strukturuntersuchung, die Lage der kristallographischen Achsen, der optischen Indikatrix und der Richtung der besten Wärmeleitfähigkeit zueinander zusammenfassend darzustellen.

Für die vorliegende Arbeit wurde die Aufstellung von Bragg, 1937 (Atoji & Rundle, 1958; Cole & Lancucki, 1973): 12/a und die Gitterkonstanten von Cole & Lancucki, 1973: $a = 5,67 \text{ \AA}$, $b = 15,201 \text{ \AA}$, $c = 6,533 \text{ \AA}$, $\beta = 118^\circ 36'$ übernommen.

Tab. 1: Angaben verschiedener Autoren über Raumgruppe bzw. Aufstellung und Gitterkonstanten von Gips.

+) Keine Angaben in der Originalliteratur; nach Deer et al., 1962 ist die Zelle von Goßner, 1937 F-zentriert, die Zelle von de Jong & Bouman, 1939 A-zentriert.

Autor	RG bzw. Aufstellung	a(Å)	b(Å)	c(Å)	β	Z
Onorato, 1929	C2/m	10,47	15,15	6,51	151°33'	4
Wooster, 1936	C2/c	10,47	15,15	6,51	151°33'	4
Bragg, 1937	I2/a	5,67	15,15	6,51	118°23'	4
Goßner, 1937	- +)	10,47	15,15	6,28	98°58'	8
de Jong & Bouman, 1939	- +)	5,63	15,15	6,23	113°50'	4
Strunz, 1942	A2/a	6,51	15,15	6,28	127°24'	4
Atoji & Rundle, 1958	I2/a	5,68	15,18	6,52	118°23'	4
Cole & Lancucki, 1973	I2/a	5,67	15,201	6,533	118°36'	4
		a	1	c		
morphologisch		0,69	1	0,41	98°58'	(8)

Die Untersuchungen wurden an einem Kristall aus Hallein, Österreich, durchgeführt. Zur Ermittlung der kristallographischen Achsen wurden Precession-Aufnahmen der 0. bis 3. Schicht mit Mo- und Ag-Strahlung angefertigt. Die Aufnahmen zeigen auch schwache unerlaubte Reflexe, die auf parallele Verwachsung bzw. Verzwilligung mit (010) als Verwachsungsebene zurückgeführt werden müssen. Die Richtung der b-Achse war Präzessionsachse. Aus den Aufnahmen konnte daher die Richtung der a- und c-Achse bestimmt und auf den Kristall übertragen werden. Aus der Aufnahme der 0. Schicht wurden folgende Gitterkonstanten ermittelt: $a = 5,69(1) \text{ \AA}$, $c = 6,53(1) \text{ \AA}$, $\beta = 118^\circ 30'(10)'$

+) Anschrift des Verfassers:

Manfred Wildner

Institut für Mineralogie und Kristallographie der Universität Wien

Dr. Karl Lueger-Ring 1, A-1010 Wien

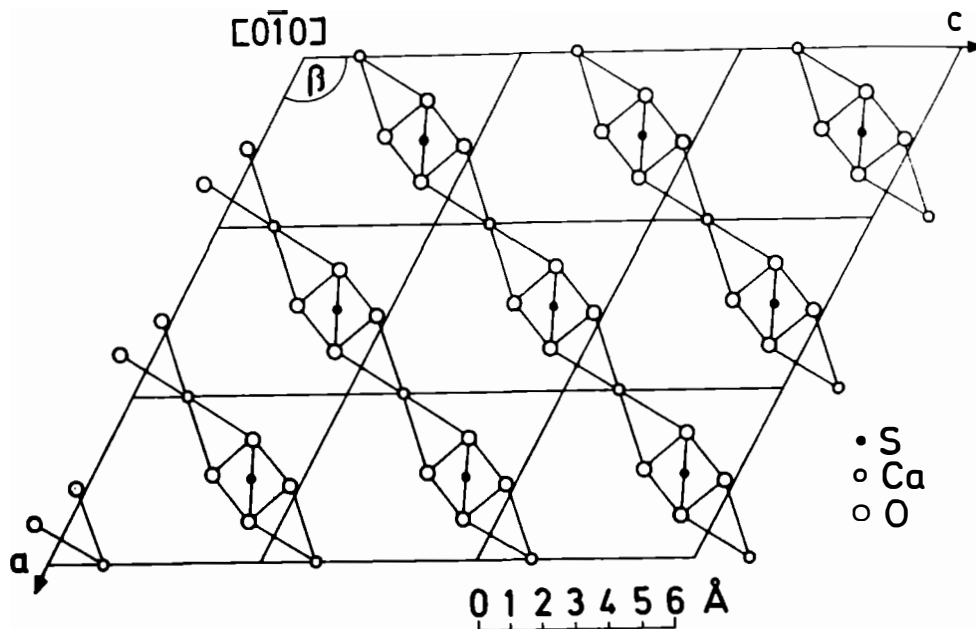


Abb. 1: Schematische Projektion senkrecht auf $(0\bar{1}0)$. Sie zeigt eine aus CaSO_4 Ketten aufgebaute Schicht.

Gips besitzt eine ausgeprägte Schichtstruktur. Je Elementarzelle liegen vier CaSO_4 -Schichten, zu zwei Doppelschichten zusammengefaßt, senkrecht zur b-Achse. Diese Schichten werden wiederum von parallelen CaSO_4 -Ketten gebildet. Die Ketten schließen mit der positiven a-Achse einen Winkel von $66,1^\circ$ und mit der positiven c-Achse einen Winkel von $52,5^\circ$ ein (s. Abb. 1).

Das Ca-Atom ist 8-koordiniert. Jedes Ca hat vier Bindungen zu je zwei Sauerstoffatomen benachbarter $(\text{SO}_4)^{2-}$ -Tetraeder innerhalb einer Kette (und innerhalb einer Schicht) mit $2,528 \text{ \AA} \times 2$ und $2,544 \text{ \AA} \times 2$, weiters zwei Bindungen zu Sauerstoffen zweier H_2O -Moleküle mit $2,380 \text{ \AA} \times 2$, und noch zwei Bindungen zu jeweils einem Sauerstoffatom zweier $(\text{SO}_4)^{2-}$ -Tetraeder der unmittelbar benachbarten Schicht mit $2,378 \text{ \AA} \times 2$ (Cole & Lancucki, 1973). Die beiden letzteren Bindungen bewirken den Zusammenhalt von zwei Schichten zu einer Doppelschicht (s. Abb. 2).

Von Doppelschicht zu Doppelschicht gibt es nur Wasserstoffbrückenbindungen, und zwar zu Sauerstoffen von $(\text{SO}_4)^{2-}$ -Gruppen. Das zeigt sich am Kristall in der sehr vollkommenen Spaltbarkeit senkrecht zur b-Achse.

Der $(\text{SO}_4)^{2-}$ -Tetraeder im Gips ist verzerrt und seine Symmetrie ist zu einem tetragonalen Bisphenoid erniedrigt. Der Grund dafür sind wahrscheinlich die unterschiedlichen Bindungsverhältnisse um verschiedene Sauerstoffatome (Cole & Lancucki, 1973).

Nach Ermittlung der kristallographischen Achsen und Übertragung auf den Kristall wurden an demselben Kristall die optischen Bestimmungen vorgenommen. Aufgrund der unterschiedlichen Aufstellungsmöglichkeiten gibt es in der Literatur uneinheitliche und unklare Angaben über die Lage der Indikatrix, die Werte der Brechungsindices stimmen jedoch gut überein, ebenso sind die Wahl der optischen Achsenebene und die Lage von n_y parallel zur b-Achse einheitlich (siehe Tab. 2).

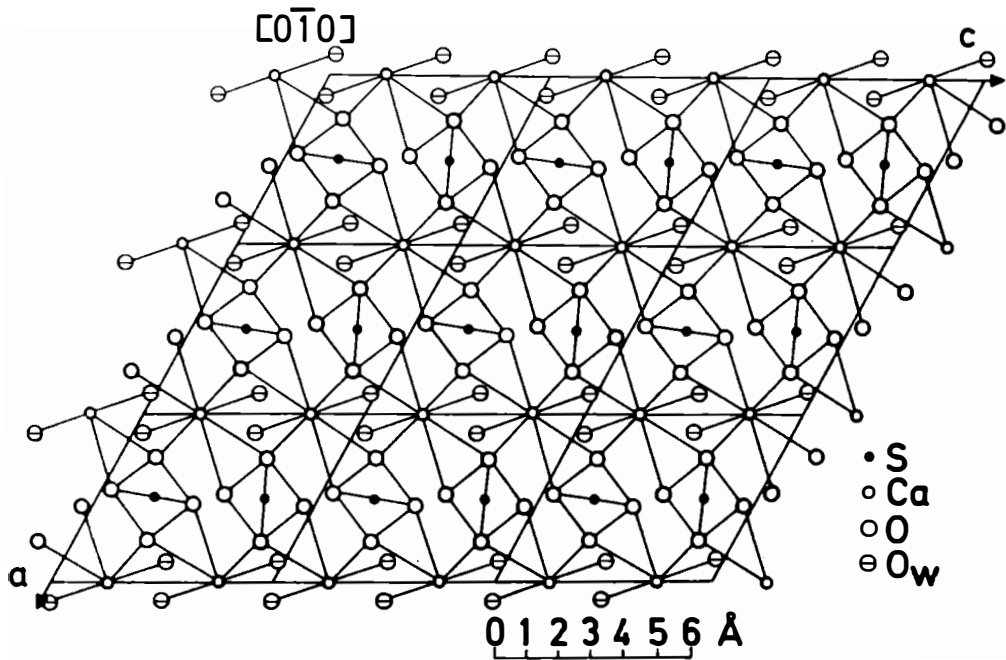


Abb. 2: Schematische Projektion einer Doppelschicht und Koordinationsverhältnisse um Ca^{2+} O_w : Sauerstoff des H_2O -Moleküls.

Tab. 2: Angaben verschiedener Autoren über Größe der Brechungsindices und Lage der optischen Achsenebene.

Autor	n_x	n_y	n_z	OAE
Tröger, 1971; Correns, 1968	1,5205	1,5226	1,5296	(010)
Ramdohr & Strunz, 1978	1,521	1,523	1,530	(010)
Deer et al., 1962	1,519-	1,523-	1,529-	(010)
	1,521	1,526	1,531	
Dana, 1951	1,5207	1,5230	1,5299	(010)

Für die Richtung von n_x und n_z wurde gefunden:
 n_x schließt mit der positiven a-Achse einen Winkel von ca. 104° und mit der positiven c-Achse einen Winkel von ca. $14,5^\circ$ ein. n_y liegt parallel der b-Achse (s. Abb. 3). Mit einem Jelliey-Refraktometer wurde mittels der Immersionsmethode in Na-Licht für $n_x = 1,519$ und für $n_z = 1,528$ bestimmt.

Nachdem die Lage der Indikatrix und der kristallographischen Achsen bestimmt war, schien es noch interessant, in welcher Richtung beim Gips die beste Wärmeleitfähigkeit liegt. Zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit in der Ebene (010) wurden dünne Spaltblättchen von Gips mit einer dünnen Wachsschicht einseitig überzogen und dann von der Unterseite einer punktförmigen Wärmequelle ausgesetzt. Aus der Aufschmelzfigur des Wachses konnte die Richtung der besten Wärmeleitfähigkeit ungefähr bestimmt werden. Sie stimmt im Rahmen der Meßgenauigkeit mit der Richtung der CaSO_4 -Ketten überein. Es wurden sechs Bestimmungen an verschiedenen

Gipsproben vorgenommen. Der Mittelwert dieser Messungen weicht um ca. 40° von der CaSO_4 -Kettenrichtung ab (s. Abb. 3). Die Wärmeausbreitungsfläche ist in guter Annäherung elliptisch.

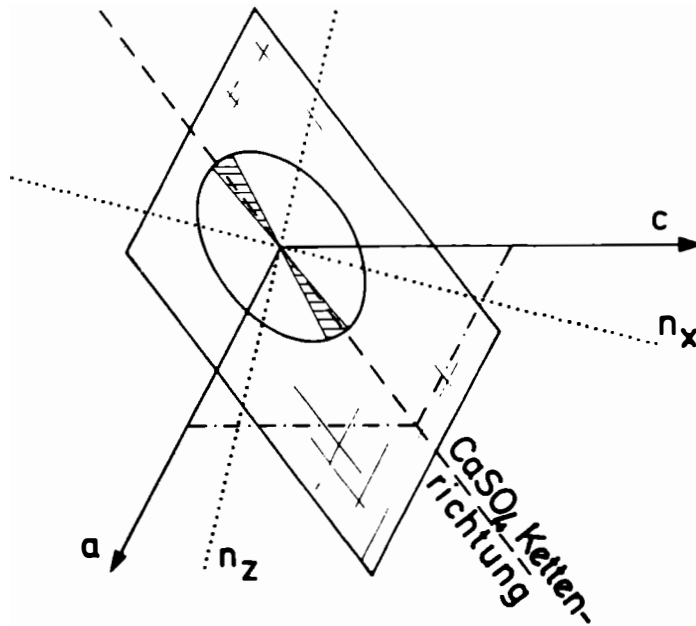


Abb. 3: Schematische Zeichnung eines Gips-Spaltstückchens.
 Übersicht über Spaltbarkeit, Lage der kristallographischen Achsen,
 der optischen Indikatrix und der Ellipse der Wärmeleitfähigkeit.
 strichpunktirt: Elementarzelle
 schraffiert: Bereich, in dem die Richtungen der besten Wärmeleitfähigkeit von sechs verschiedenen Gipsproben liegen.

Literatur

- ATOJI, M., RUNDLE, R.E. (1958): Neutron Diffraction Study of Gypsum, $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. J. Chem. Phys. 29, 1306-1311.
- BRAGG, W.L. (1937): Atomic Structure of Minerals. New York: Cornell Univ. Press.
- COLE, W.F., LANCUCKI, C.J. (1974): A Refinement of the Crystal Structure of Gypsum $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Acta Cryst. B30, 921-929.
- CORRENS, C.W. (1968): Einführung in die Mineralogie. Berlin-Heidelberg-New York: Springer.
- DANA, S.D. (1951): Dana's System of Mineralogy, 7th Ed., Vol.II. New York: John Wiley & Sons.
- DEER, W.A., HOWIE, R.A., ZUSSMAN, J. (1962): Rock forming Minerals, Vol. 5. London: Longmans
- GOSSNER, B. (1937): Ober Sulfate und Phosphate mit ähnlichen Kristallgittern. Z. Krist. 96, 488-492.

- HAMMER, V. (1985): Zusammenhang zwischen Raumgruppe und Lage der Indikatrix bei Anhydrit. Mitt. Österr. Miner. Ges. 130, 5-8.
- JONG, W.F. de, BOUMAN, J. (1939): Das reziproke und das Bravais'sche Gitter von Gips. Z. Krist. 100, 275, 276.
- ONORATO, E. (1929): Über den Feinbau des Gipses. Z. Krist. 71, 277-325
- RAMDOHR, P., STRUNZ, H. (1978): Klockmanns Lehrbuch der Mineralogie. Stuttgart: Enke.
- TRÜGER, W.E. (1971): Optische Bestimmung der gesteinsbildenden Minerale, 4. Auflage. Stuttgart: Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung.
- WOOSTER, W.A. (1936): On the Crystal Structure of Gypsum, $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Z. Krist. 94, 375-396.
- ZEMANN, J. (1983): Mineralogie der Sulfate. Mitt. Österr. Miner. Ges. 129, 54-59.