



TECHNISCHE UNIVERSITÄT
CHEMNITZ

Institut für Physik Physikalisches Kolloquium - Online-Veranstaltung -



Mittwoch, 20.01.2021, um 11:15 Uhr

Prof. Dr. Ingrid Wilke

Department of Physics, Applied Physics & Astronomy
Rensselaer Polytechnic Institute
Troy, NY (USA)

Infrarotspektroskopische Beobachtung der Schwingungsmoden von Wasser in Montmorillonites

Montmorillonites sind natürlich vorkommende Schichtsilikate mit vielen wichtigen Anwendungen in industriellen Prozessen, z.B. als Schmiermittel oder umweltverträglicher Katalysator, oder als Verbraucherprodukt, z.B. als Katzenstreu, bzw. Bestandteil von Hautpflegeartikeln. In der Astrobiologie, wird die Katalyse von RNA in Montmorillonites als Hypothese zur Erklärung des Ursprungs des Lebens auf der Erde untersucht.

Montmorillonites sind 2-dimensionale Coulombmaterialien. Die kristalline Struktur des Materials besteht aus zwei tetraedrische Siliziumdioxidschichten, die eine zentrale oktaedrische Aluminiumoxidschicht einschließen. Die elektrisch negativ geladenen Siliziumdioxidoberflächen werden durch Kationen, z.B. Li^+ , Na^+ , K^+ , aneinander gebunden. Montmorillonites haben die Eigenschaft polare Moleküle, z. B. Wasser, zwischen den Siliziumdioxidschichten zu binden. Damit sind Montmorillonites ein vorzügliches Modellsystem zur Untersuchung der dynamischen Eigenschaften des Wassers auf Längenskalen im Nanometerbereich und wenn begrenzt auf zwei Raumdimensionen.

In meinem Vortrag berichte ich über die infrarotspektroskopische Beobachtung (400cm^{-1} to 4000cm^{-1}) der Schwingungsmoden von Wasser in Li^+ , Na^+ , und K^+ Montmorillonites als Funktion des PH Werts. Eine wichtige Beobachtung ist die Änderung der Wasser Streckschwingung zu höheren Frequenzen wenn sich der PH Wert erhöht. Ansätze zur Modellierung der Infrarotschwingungsmoden mittels klassischer Molekularer Dynamik Simulationen werden diskutiert.

