

Forschungsbericht 264

Chr. Splett, Chr. Peuker, I. Saul, W. Pilz

Katalog der Infrarot- und Ramanspektren von Molekularsieben

ISBN 3-86509-123-7

Der "Katalog der Infrarot- und Raman-Spektren von Molekularsieben" enthält mehr als 100 Infrarot- und Raman-Spektren von natürlichen und synthetischen Zeolithen auf einem gemeinsamen Blatt im Spektralbereich von 100 bis 1500 cm^{-1} . Der Nutzen einer solchen Sammlung ergibt sich aus zahlreichen Gesichtspunkten:

Während eines Syntheseprozesses kann man mikrokristalline Phasen mit spektroskopischen Mitteln deutlich eher erkennen als mit der Pulverdiffraktometrie, Fremdphasen geringer Konzentration können unter dem Mikroskop vom Syntheseprodukt auf Grund ihres abweichenden Kristallhabitus unterschieden werden. Ihre Identifizierung gelingt Raman-spektroskopisch, auch wenn die Kristalle nicht größer als 2 μm sind. Interessante theoretische Fragestellungen ergeben sich aus dem Vergleich der Spektren für unterschiedliche Si/Al-Verhältnisse oder ausgetauschte Kationen. Die Identifizierung von Zeolithen in mineralogischen Sammlungen ist zerstörungsfrei durch den Vergleich ihrer Raman-Spektren möglich.

Das Programm "Zeolith-Katalog" läuft auf einem PC unter WIN 3.11, WIN 9X, WIN NT4, LINUX und WIN OS2. Es verwaltet die Spektrenblätter der einzelnen Molekularsiebe. Für einen Spektrenvergleich ist die Überlagerung bis zu 4 Spektren möglich, ebenso eine Zoomfunktion zur besseren Darstellung von Details. Der Import von Nutzer-Spektren im ASCII- oder JCAMP-Format ist möglich. Weiterhin ist ein Such-Programm eingebunden, das auf der Auswahl der stärksten Banden in den Spektren basiert.

Allgemein gesehen ist dieser Katalog eine nützliche Ergänzung zu den bereits vorhandenen Monographien: W. M. Meier, D. H. Olson and Ch. Baerlocher: Atlas of Zeolite Structure Types (1996)

W. J. Mortier: Compilation of Extra Framework Sites in Zeolites (1982)

R. v. Ballmoos and J. B. Higgins: Collection of Simulated XRD Powder Patterns for Zeolites (1990).