

Wasser in seiner festen Form - Eis - ist ein faszinierendes System. Erscheint es doch in seiner molekularen Struktur so einfach, geben zahlreiche Anomalien des Wassers Forschern weltweit noch immer Rätsel auf. Wasser ist von großer Bedeutung für unsere Umwelt und das Leben auf unserer Erde. Neben diesem allgemeinen Interesse, ist ein grundsätzliches Verständnis der physikalischen Eigenschaften des Wassers von fundamentaler Wichtigkeit. Ein Verständnis des anomalen Verhaltens von Wasser ist eng verknüpft mit dem Verständnis des Phasendiagramms der metastabilen nicht-kristallinen Zustände von Wasser. Mishima et al. gelang es 1984 erstmals hexagonales Eis, durch Druck-induzierte Amorphisierung bei 77 K, in einen hochdichten amorphen Zustand (HDA) zu überführen. Er fand des weiteren einen Phasenübergang zwischen HDA und einem amorphen Zustand niedrigerer Dichte (LDA), welcher einem Übergang erster Ordnung gleicht. Durch diese Entdeckung wurde erstmals der Begriff "Polyamorphismus" geprägt.

Seither wird in der Literatur äußerst kontrovers diskutiert, ob es sich bei den gefundenen Zuständen tatsächlich um ein Glas handelt, oder um einen nanokristallinen Festkörper. Die direkte Messung eines möglichen Glasübergangs wird durch das Kristallisations-Verhalten von Eis erschwert. Die bisher gemessene Glasübergangstemperatur bei 1 bar liegt nur wenige Kelvin unterhalb der Kristallisationstemperatur, daher sind Untersuchungen der ultraviskosen Flüssigkeit äußerst schwierig.

Dies erklärt auch, warum bisher fast ausschließlich Nicht-Gleichgewichtszustände der amorphen Eisphasen experimentell untersucht wurden. In meiner Dissertation habe ich erstmals gezeigt, dass es durchaus möglich ist, vollständig equilibrierte amorphe Zustände zu erzeugen. Das sogenannte "equilibrated high density amorphous ice" (eq-HDA) zeigt einen Übergang erster Ordnung zu einem weiteren niedrigdichten Zustand LDAII. Meine Ergebnisse weisen darauf hin, dass es sich hierbei um einen Übergang zwischen zwei ultraviskosen Flüssigkeiten handelt.

Ziel meines Projektes ist es nun, diese equilibrierten amorphen Eisphasen und ihre ultraviskosen Zustände detaillierter zu untersuchen. Dabei hilft die Tatsache, dass Gläser grundsätzlich bestrebt sind, einen Gleichgewichtszustand einzunehmen, ob dieser erreicht wird, hängt jedoch von Temperatur und Zeitskala ab. In meinem Projekt soll diese Zeitskala anhand komplementärer Messmethoden bestimmt werden. Dies sind zum einen volumetrische Messungen und zum anderen Deuteronen-Festkörper NMR.

Desweiteren sollen Neutronenstreuexperimente am ISIS/ILL Aufschluss über die Frage geben, ob amorphes Eis nanokristallin oder ein echtes Glas ist. Die Ergebnisse meiner Dissertation lassen vermuten, dass zahlreiche Experimente an amorphem Eis, welche bislang gegen eine Glas-Charakteristik sprechen, mit unrelaxiertem amorphem Eis durchgeführt wurden. Ziel meines Projektes ist es, einige dieser fundamentalen Experimente nun mit vollständig equilibriertem amorphem Eis durchzuführen. Zusätzlich sollen Messungen an amorphem Eis stattfinden, welches nicht durch Druck-amorphisierung von kristallinem Eis, sondern durch direkte Vitrifizierung von Wasser hergestellt wurde.