



Technische Universität Hamburg-Harburg

Auswertung von IR-Banden in zementgebundenen
Baustoffen, insbesondere im Hinblick auf die
Analyse von C-S-H

F. Schmidt-Döhl

September 2017

Abkürzungen in den Quellenangaben:

Ben – BENSTED (1976)
 Bob - BOBROWSKI et al. (2012)
 Chu - CHUKIN & MALEVICH (1977)
 Fer - FERNÁNDEZ & VAZQUEZ (1996)
 Fernan - FERNÁNDEZ-CARRASCO et al. (2012)
 Fre – FREDERICKSON (1954)
 Gar - GARCIA-LODEIRO et al. (2009)
 Garbev – GARBEV et al. (2014)
 GarD - GARBEV (2003)
 Gün - GÜNZLER & GREMLICH (2003)
 Haj - HAJIMOHAMMADI et al. (2011)
 Hug - HUGHES et al. (1995)
 Linden – LINDEN & HIGL (2016)
 Mol - MOLLAH et al. (2000)
 Pöll - PÖLLMANN (1984)
 Rog - ROGGENDORF et al. (1996)
 Tay - TAYLOR (1997)
 Tor - TORRÉNS-MARTIN & FERNÁNDEZ-CARRASCO (2013)
 Tre - TREZZA & LAVAT (2001)
 Van – VAN DER MAREL & BEUTELSPACHER (1976)
 Yi1 - YLMEN et al. (2014)
 Yil – YLMEN et al. (2009)
 Yu - YU et al. (1999)
 Yua - YUAN et al. (2011)
 Zhao - ZHAO et al. (2006)

δ -Deformationsschwingung, ν -Streckschwingung.
 Banden im Zusammenhang mit C-S-H sind grün hinterlegt.

Wellenzahl	Schwingung	Bemerkung	Quelle
280-420	Ca-O	AFm	Pöll
310	Ca-O	Sulfatettringit	Pöll
353	Ca-O Gitterschwingungen	Portlandit	Fernan
Kleiner 400	Ca-O	In Calciumaluminatzement	Fernan
400-500	Deformationsschwingung der SiO ₄ -Tetraeder	C-S-H	Yu
400-600	Deformationsschwingung Si-O-Si Bindungen	Wasserglas	Bob
400-530	„Isolierte“ AlO ₆ -Oktaeder		Fernan
400-720	AlO ₆ Gruppen	C ₂ AS	Fernan
410	AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	C ₁₂ A ₇	Fernan
411-578	δ Si-O-Si, δ O-SiO	CSH	GarD
412	Al-O in den AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	C ₃ AH ₆	Fernan
414	AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	C ₃ A	Fernan
420	Ca-O	Sulfatettringit	Pöll
420		C ₂ AS	Fernan
420	AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	CA	Fernan
422	AlO ₆ -Gruppen	CA ₂	Fernan
440	AlO ₆ -Gruppen	CA ₂	Fernan
450-650	δ Si-O-Si Deformationsschwingungen		Gar
450-955	Al-O und Metall – OH	AFm	Pöll
450	Asymmetrische bending-Schwingung O-Si-O	C ₃ S	Fernan
450	AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	CA	Fernan
452	Si-O in plane bending Schwingung ν_2	Zement	Mol
453	δ Si-O SiO ₄ Tetraeder	Gel	Gar

453	Streckschwingungen der Ca-O-Gruppe)	Wollastonit	Zhao
460	AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	C ₃ A, C ₁₂ A ₇	Fernan
461		Al(OH) ₃ Nordstrandit	Van
465	Si-O bending Schwingung im SiO ₄ -Tetraeder	Silikagel	Chu
472	Biegeschwingungen der Si-O-Gruppe)	Wollastonit	Zhao
480		C ₂ A ₅	Fernan
491	δ Si-O-Si	Gel	Gar
500-700		C ₄ AF	Fernan
500-680	„Kondensierte“ AlO ₆ -Oktaeder		Fernan
500	Interne Deformation der SiO ₄ -Tetraeder	C-S-H	Yu
509		C ₂ S	Fernan
509	Biegeschwingungen der Si-O-Gruppe)	Wollastonit	Zhao
510	AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	C ₃ A	Fernan
510		Friedelsches Salz	Pöll
520	Bending-Schwingung O-Si-O	C ₂ S	Fernan
520	AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	C ₃ A	Fernan
520	AlO ₆ -Gruppen Streckschwingung	Ettringit	Tor
521		C ₃ S	Fernan
522	Si-O out of plane bending Schwingung v4	Zement	Mol
524	Si-O-Si bending Schwingung	Wasserfreie Silikate im Zement	Tor
525	Symmetrische bending-Schwingung O-Si-O	C ₃ S	Fernan
525		C ₃ S	Ben
525	Al-O in den AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	C ₃ AH ₆	Fernan
530		C ₂ AS	Fernan
538	Bending-Schwingung O-Si-O	C ₂ S	Fernan
540	Al-O und Metall – OH	Sulfatettringit	Pöll
540	AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	CA	Fernan
540	AlO ₆ -Gruppen	CA ₂	Fernan
550	Al-O Streckschwingung v AlO ₆	Ettringit	Fernan
567	Biegeschwingungen der Si-O-Gruppe	Wollastonit	Zhao
570	Symmetrische Streckschwingung Si-O	Sehr schwach, Silikagel	Chu
570	AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	CA	Fernan
575	AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	C ₁₂ A ₇	Fernan
575	AlO ₆ -Gruppen	CA ₂	Fernan
590	δ Si-O-Si	Gel	Gar
591		Anhydrit	Fernan
594		Bassanit	Fernan
595		Gips	Fernan
600	Antisymmetrische bending-Schwingung S-O v4	Bassanit, Anhydrit	Fernan Tor
601	Biegeschwingung in Sulfat v2	Zement	Mol
604	Antisymmetrische bending-Schwingung	Gips	Fernan Tor
606-631		CSH	GarD
610-680		Sulfat	Gün
610		Anhydrit	Fernan
610	Al-O und Metall – OH	Sulfatettringit	Pöll
610	AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	C ₁₂ A ₇	Fernan
615	Antisymmetrische bending-Schwingung	Anhydrit	Fernan
620	AlO ₄ ⁵⁻ Tetraeder	Calciumsulfaluminatzement	Fernan
620-670		C ₄ AF	Fernan
629	Antisymmetrische bending-Schwingung	Bassanit	Fernan
630	Symmetrische Streckschwingung Si-O	Sehr schwach, Silikagel	Chu
640	AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	CA	Fernan
640	AlO ₆ -Gruppen	CA ₂	Fernan
641-764	Symmetrische Streckschwingung v _s Si-O-Si	CSH	GarD
645	Symmetrische Streckschwingungen der Si-O-Si-Gruppe	Wollastonit	Zhao

650		C ₂ AS	Fernan
650		Friedelsches Salz	Pöll
650-800	„Isolierte“ AlO ₄ -Tetraeder		Fernan
660	Si-O-Si bending-Schwingung	C-S-H	Yu
660	Antisymmetrische bending-Schwingung	Bassanit	Fernan
660	AlO ₆ -Gruppen	CA ₂	Fernan
662	Biegeschwingung in Sulfat v2	Zement	Mol
666	O-H Streckschwingung in Wasser	Breit, C-S-H	Fernan
667	δ Si-O-Si	Gel	Gar
669 oder 670	Antisymmetrische bending-Schwingung	Gips	Fernan Tor
670	Si-O-Si bending Schwingung	C-S-H	Yu
677	Antisymmetrische bending-Schwingung	Anhydrit	Fernan
680	AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	CA	Fernan
680	AlO ₆ -Gruppen	CA ₂	Fernan
681	Symmetrische Streckschwingungen der Si-O-Si-Gruppe	Wollastonit	Zhao
695	Si-O-Si bending-Schwingungen in early form of C-S-H	Hydratisierender Kalksteinzement, Messung in diffuser Reflexion	Yil
696-744	Si-O-Si bending-Schwingungen in Silikatketten	C-S-H	Yu
700-900	„Kondensierte“ AlO ₄ -Tetraeder		Fernan
700	Out-of-plane bending-Schwingung CO ₃ ²⁻	Aragonit	Fernan
705	AlO ₄ -Gruppen tetraedrisch	C ₃ A	Fernan
709	V2 CO CO32-	Gel	Gar
710		C ₂ AS	Fernan
712	Out-of-plane bending-Schwingung CO ₃ ²⁻	Calcit	Fernan
713	Out-of-plane bending-Schwingung CO ₃ ²⁻	Aragonit	Fernan
720-920	AlO ₄ Gruppen	C ₂ AS	Fernan
720	AlO ₄ -Gruppen tetraedrisch	C ₃ A, CA	Fernan
720	[(Fe,Al)O ₄ ⁵⁻]	C ₄ AF	Fernan
720		C ₂ AS	Fernan
720	AlO ₆ -Gruppen oktaedrisch	In Calciumaluminatzement	Fernan
740	Symmetrische Streckschwingung Si-O	Sehr schwach, Silikagel	Chu
744	Out-of-plane bending-Schwingung CO ₃ ²⁻	Vaterit	Fernan
745	AlO ₄ -Gruppen	CA ₂	Fernan
770		Al(OH) ₃ Nordstrandit	Van
778	Si-O Streckschwingung	Quarz	Garbev
780	v4 SO ₄	Scharf, Monosulfat	Pöll
780	AlO ₄ -Gruppen tetraedrisch	C ₃ A, CA, C ₁₂ A ₇	Fernan
790		Friedelsches Salz	Pöll
798	Si-O Streckschwingung	Quarz	Garbev
800-1200	Streckschwingungen der Si-O Bindungen	C-S-H	Yu
800	Silikate	Calciumsulfoaluminatzement	Fernan
800-880		Carbonat	Gün
802	Al-O in den AlO ₆ Gruppen oktaedrisch	C ₃ AH ₆	Fernan
805	AlO ₄ -Gruppen tetraedrisch	CA	Fernan
810	Symmetrische Si-O Schwingungen Q ¹ -Einheiten	C-S-H	Gar
810	AlO ₄ -Gruppen	CA ₂	Fernan
810	Symmetrische Si-O Streckschwingung in early form of C-S-H	Hydratisierender Kalksteinzement, Messung in diffuser Reflexion	Yil
810	Symmetrische Streckschwingung Si-O	Silikagel	Chu
811	Si-O Streckschwingung Q ¹	C-S-H	Yu
815	v Si-O symmetrische Streckschwingung	C-S-H	Gar

820	AlO ₄ -Gruppen tetraedrisch	C ₃ A	Fernan
823		Al(OH) ₃ Nordstrandit	Van
840	Si-O Streckschwingung	C ₂ S	Fernan
840	AlO ₄ -Gruppen tetraedrisch	CA	Fernan
840	AlO ₄ -Gruppen	CA ₂	Fernan
844-984	v O-SiO-	CSH	GarD
847		C ₂ S	Fernan
847		C ₂ S, diffuse Reflexion	Hug
849	v ₂ C-O ₃ ²⁻	CSH	GarD
850	O-H Biegeschwingung in Si-OH		Haj
850	Asymmetrische Schwingung Q ⁰ -Spezies	Wasserglas	Bob
850	Al-O und Metall – OH	Sulfatettringit	Pöll
850	AlO ₄ Gruppen tetraedrisch	C ₁₂ A ₇	Fernan
855	Al-O-H bending-Schwingung	Ettringit	Fernan, Tor
856	Split-in-plane bending-Schwingung CO ₃ ²⁻	Vaterit	Fernan
860	AlO ₄ -Gruppen	CA ₂	Fernan
864		Carbonat	Gar
865	AlO ₄ -Gruppen tetraedrisch	C ₃ A	Fernan
865	v ₂ CO in CO ₃ ²⁻	Gel	Gar
870	symmetrische Si-O Streckschwingung v1	C ₃ S	Fernan
874-875	v ₂ C-O ₃ ²⁻	CSH	GarD
875	Out-of-plane bending-Schwingung CO ₃ ²⁻ n2	Carbonat	Yu
875	Split-in-plane bending-Schwingung CO ₃ ²⁻	Calcit	Fernan
877	Split-in-plane bending-Schwingung CO ₃ ²⁻	Aragonit	Fernan
879		C ₂ S	Fernan
879		C ₂ S, diffuse Reflexion	Hug
880		C ₃ S	Linden
890	Si-O Streckschwingung Q ¹	Wasserglas	Bob
900-1100		Silikate	Gün
900-1200	Si-O Streckschwingungen	C-S-H	Yi1
900	Si-O Streckschwingungen in Q ²	C-S-H	Yu
900	AlO ₄ -Gruppen tetraedrisch	C3A	Fernan
902	Si-O Streckschwingungen in Silikatketten	C-S-H	Yu
902	Asymmetrische Streckschwingungen der O-Si-O-Gruppe	Wollastonit	Zhao
920	AlO ₄ -Gruppen	CA ₂	Fernan
920		C ₂ AS	Fernan
925	Asymmetrische Si-O Streckschwingung v3	Zement	Mol
925	Si-O	C ₂ S, C ₃ S	Tor
925		C ₃ S	Ben
927	Asymmetrische Streckschwingungen der O-Si-O-Gruppe	Wollastonit	Zhao
935		Breit C ₃ S	Fernan
935	Si-O Streckschwingung	C ₃ S, diffuse Reflexion	Hug
940	asymmetrische Si-O Streckschwingung v3	C ₃ S	Fernan
945	AlO ₄ -Gruppen	CA ₂	Fernan
950	Symmetrische Streckschwingung Si-O	Silikagel	Chu
960	Si-O-T (T: Si oder Al) asymmetrische Streckschwingung, je mehr Al umso niedrigere Wellenzahl	Erhärtendes Geopolymer	Haj
960	Si-O-H	Erhärtendes Geopolymer	Haj
964	Si-O Streckschwingungen in Silikatketten	C-S-H	Yu
966	Asymmetrische Si-O Streckschwingung in Q ²	C-S-H	Gar
967	Symmetrische Streckschwingungen der O-Si-O-Gruppe	Wollastonit	Zhao
969		Al(OH) ₃ Gibbsit	Fer

970	v1 SO ₄	Scharf, Halbsulfat	Pöll
970	Asymmetrische v3 Si-O Streckschwingung Q ²	C-S-H	Gar
970	Si-O Streckschwingung in Q ²	C-S-H, Lage hängt vom C/S-Verhältnis ab	Yu
970		C-S-H	Ben
973	Si-O	C ₂ AS	Fernan
975		Al(OH) ₃ Bayerit	Fre
975	v1 SO ₄	Scharf, Monosulfat und Sulfatettringit	Pöll
980		C-S-H	Yi1
980	Si-O Streckschwingungen in Q ²	C-S-H	Yu
984	Si-O Streckschwingungen in Silikatketten	C-S-H	Yu
990		Breit, C-S-H	Tor
990	Si-O Streckschwingung	C ₂ S	Fernan
991		C ₂ S	Fernan
991		C ₂ S, diffuse Reflexion	Hug
1003-1077	v _{as} Si-O-Si von Q ²	CSH	GarD
1003-1028	Si-O Streckschwingung. Die Bande ist offensichtlich nicht gebunden an n (Q ⁿ) und kann sowohl aus Q ⁰ , Q ¹ , Q ² , Q ³ oder Q ⁴ herrühren.	Typisches Signal in Natriumwasserglas	Yua
1010	Si-O Streckschwingung. Die Darstellung um welches Q ⁿ -Signal es sich handelt ist widersprüchlich. Am meisten wahrscheinlich ist, dass die Autoren die Bande Q ² zuordnen.	Wasserglas	Bob
1010	Annahme: Q ¹ . Die Interpretation als Q ¹ ist jedoch fraglich und nicht mit Quellen belegt.	Hydratisierender Alit	Linden
1010	Asymmetrische Si-O Streckschwingung. C-S-H. In Teilen der Arbeit wird diese Bande C-S-H I, in einem anderen Teil der Arbeit C-S-H II zugeschrieben.	Hydratisierender Kalksteinzement, Messung in diffuser Reflexion	Yil
1018	Asymmetrische Streckschwingungen der Si-O-Si-Gruppe	Wollastonit	Zhao
1020	Si-O	C ₂ AS	Fernan
1024		Al(OH) ₃ Bayerit	Fre
1025		Al(OH) ₃ Gibbsit	Fer
1030	Natriumbindung an ein Gel	Silikatgel	Gar
1030		Al(OH) ₃ Nordstrandit	Van
1033	v Si-O	Spezielle Gele	Gar
1050-1100	Si-O-Si Si-O-Si Streckschwingung	SiO ₂ bzw. Glas	Gün Haj
1060	Si-O Streckschwingungen in Q ²	C-S-H	Yu
1060	Asymmetrische Streckschwingungen der Si-O-Si-Gruppe	Wollastonit	Zhao
1060		Al(OH) ₃ Nordstrandit	Van
1062	v1 CO ₃ Valenzschwingung	Scharf, Monocarbonat	Pöll
1063	Symmetrische Streckschwingung CO ₃ ²⁻ v1	Calcit	Fernan
1070	v3 SO ₄	Halbsulfat	Pöll
1080-1130		Sulfat	Gün
1080		Hochkondensiertes Si reiches Gel	Gar
1081	Si-O Streckschwingungen in Silikatketten	C-S-H	Yu
1085	Symmetrische Streckschwingung CO ₃ ²⁻ v1	Vaterit	Fernan
1085	Asymmetrische Streckschwingung der O-Si-O Gruppe	Wollastonit	Zhao
1090	Q ³	Si-reiches Gel	Gar
1094	Antisymmetrische Streckschwingung im SO ₄	Anhydrit in Portlandzement	Fernan

	Tetraeder v3		
1095	v3 SO ₄	Monosulfat	Pöll
1096	Si-O-Si Streckschwingung v3 Q ¹	Quarz	Garbev
1096-1152	S-O Streckschwingung in SO ₄ v3	Zement, Bildung von Ettringit führt von einem Triplet zum Singlet. Umwandlung zum Monosulfat führt vom Singlet zum Dublett. Auch Taylor spricht von einer Aufspaltung im Sulfatträger und im Monosulfat, die im Ettringit (1120) jedoch nicht vorhanden ist. Auch nach Tor führt die Umwandlung von AFt nach AFm von einem Singlet (1118) zum Dublett (1112 und 1169)	Mol
1098	v3	Bassanit in Portlandzement	Fernan
1100	Si-O Streckschwingung Q ³	Wasserglas	Bob
1100	Antisymmetrische Streckschwingung Si-O in den SiO ₄ -Tetraedern	Silikagel	Chu
1100	v3 SO ₄	Halbsulfat	Pöll
1102	Antisymmetrische Streckschwingung im SO ₄ Tetraeder v3	Gips in Portlandzement	Fernan
1105	v3 SO ₄	Monosulfat	Pöll
1109	v Si-O	Spezielle Gele	Gar
1110	v3 SO ₄	Sulfatettringit	Pöll
1110	SO ₄ ²⁻ Gruppen, 2 Banden	Yeelimit	Fernan
1111	Antisymmetrische Streckschwingung im SO ₄ Tetraeder v3	Bassanit in Portlandzement	Fernan
1117	v3	Gips und Bassanit in Portlandzement	Fernan
1120		Gips	Ben
1120	v3	Anhydrit in Portlandzement	Fernan
1120	Antisymmetrische Streckschwingung im SO ₄ Tetraeder v3	Ettringit	Fernan, Tre, Tay, Tor
1120		Ettringit	Ben
1140	Symmetrische Streckschwingung im SO ₄ Tetraeder v1	Schwach, Gips in Portlandzement	Fernan
1140	Asymmetrische Si-O Streckschwingung, Q ⁴	Si-reiches Gel	Gar
1145		Hochkondensiertes Si reiches Gel	Gar
1145		Gips	Ben
1150	Symmetrische Streckschwingung im SO ₄ Tetraeder v1	Schwach, Gips und Bassanit in Portlandz.	Fernan
1150	v3 SO ₄	Monosulfat	Pöll
1160	v3 SO ₄	Halbsulfat	Pöll
1172	Si-O-Si Streckschwingung v3 Q ⁴	Quarz	Garbev
1180-1198	v _{as} Si-O-Si von Q ³	CSH	GarD
1200-1350	C-S-H II	Hydratisierender Kalksteinzement, Messung in diffuser Reflexion	Yil
1200	Si-O Streckschwingungen in Q ³	CSH	Yu
1200		Typisch für Doppelketten-silikate (Si-O-Si Winkel 180 Grad), Silikagel.	Chu
1200	Q ₃ -Einheiten (SiO ₄ -Tetraeder)		Gar
1200	Antisymmetrische Streckschwingung Si-O in den SiO ₄ -Tetraedern	Silikagel	Chu

1350	Si-OH bending Schwingungen	C-S-H	Yi1
1360	v2 CO ₃ Valenzschwingung	Monocarbonat	Pöll
1400	Na-OH Bindungen	In Natriumhydroxidlösung	Yua
1400-1450	Streckschwingungen in Carbonat	C-S-H	Gar
1400-1500	Asymmetrische Streckschwingungen CO ₃ ²⁻	Carbonat	Yu
1400	v3 SO ₃	Scharf, Monosulfit	Pöll
1400	CO ₃ ²⁻	Schwach, Halbsulfat	Pöll
1404-1492	Asymmetrische Streckschwingung CO ₃ ²⁻ v3	Aragonit	Fernan
1410-1450		Carbonat	Gün
1400-1500		Carbonat	Yu
1417	v3 C-O in CO ₃ ²⁻	Gel	Gar
1419-1461	v _{as} C-O ₃ ²⁻	CSH	GarD
1420	v3 CO ₃	Friedelsches Salz	Pöll
1420	Asymmetrische Streckschwingung CO ₃ ²⁻ v3	Calcit	Fernan
1425	v2 CO ₃ Valenzschwingung	Scharf, Monocarbonat	Pöll
1428	O-H Streckschwingung in Wasser	Breit, C-S-H	Fernan
1470	v3 CO in CO ₃ ²⁻	Gel	Gar
1482	Asymmetrische Streckschwingung CO ₃ ²⁻ v3	Vaterit	Fernan
1618	O-H Bending-Schwingung	Gips, Bassanit	Fernan
1620	H ₂ O Deformationsschwingung	Scharf, Friedelschem Salz	Pöll
1623	H ₂ O Bending-Schwingung	Gips	Tor
1623		Wasser	Ben
1630		Adsorbiertes Wasser	Chu
1631	δ OH in H ₂ O	Gel	Gar
1633-1641	H ₂ O bending Schwingung Wird durch Fließmittel verschoben	CSH	GarD Mol
1635	H ₂ O Deformationsschwingung	Scharf, Monocarbonat	Pöll
1640	H ₂ O Deformationsschwingung	Scharf, Mono SO ₃	Pöll
1640	H ₂ O Deformationsschwingung	Ettringit	Fernan, Tre
1640	Bending-Schwingung in molekularem H ₂ O	C-S-H	Yu
1640	Wassermoleküle	Wasserglas	Bob
1640		Flüssiges Wasser	Gün
1650	H ₂ O Deformationsschwingung	Flüssiges Wasser	Rog
1650	H ₂ O Deformationsschwingung	Mono- und Halbsulfat	Pöll
1650	H ₂ O bending-Schwingungen	Wasser in zementärer Matrix	Yil
1650	H-O-H Deformationsschwingung	Schwach, CAH10	Fernan
1670	H ₂ O Deformationsschwingung	Scharf, Sulfatettringit	Pöll
1675	H ₂ O	Ettringit	Fernan, Tre
1686 oder 1688	O-H Bending-Schwingung	Gips	Fernan Tor
1688		Wasser	Ben
1900-2500	Obertonschwingungen	Gips, Bassanit, Anhydrit	Fernan
2100-2400	Schwingungen von Wasserstoffbrücken zwischen Si(OH) ₄ und dem Silikatgitter	Wasserglas	Bob
2150		Breit, schwach, Wasser	Rog
2325		CO ₂ gelöst in Flüssigkeiten	Gün
2800-3700	O-H Streckschwingung in H ₂ O oder OH		
2980-3650	H ₂ O Zwischenschicht Valenzschwingung	AFm	Pöll

3000-3500	HO-H Streckschwingung	Wasser in zementärer Matrix	Yil
3100		Monosulfat	Tay
3140	Molekulares Wasser Zwischenschicht	C-S-H	Yu
3140-3687	v O-H, v H ₂ O	CSH	GarD
3300	O-H Streckschwingung in molekularem H ₂ O in der Zwischenschicht	C-S-H	Yu
3330-3450		Wasser in der Probe	Gün
3360		Al(OH) ₃ Bayerit	Fre
3360		Al(OH) ₃ Nordstrandit	Van
3380		Al(OH) ₃ Nordstrandit	Van
3395		Al(OH) ₃ Gibbsit	Fer
3399	O-H Streckschwingung v1	Gips	Fernan
3400-3600	H-O-H Deformationsschwingung	Molekulares Wasser	Fernan
3400	Symmetrische und asymmetrische Streckschwingung von O-H adsorbierten Wassermolekülen v1 und v3 Adsorbiertes Wasser	Breit, hydratisierender Zement Silikagel	Mol Chu
3401		Al(OH) ₃ Bayerit	Fre
3405	Adsorbierte OH-Spezies O-H-O-H	Hydratisierter Zement	Mol
3410		Wasser	Ben
3420	H ₂ O Valenzschwing. Kanäle	Sulfatettringit	Pöll
3420	O-H Streckschwingung in Wasser	Breit, C-S-H	Fernan
3420	v1 H ₂ O	Ettingit	Fernan
3420		Al(OH) ₃ Bayerit	Fre
3439	v O-H in H ₂ O	Gel	Gar
3440	O-H Schwingungen	Wasserglas	Bob
3454		Al(OH) ₃ Bayerit	Fre
3455		Al(OH) ₃ Nordstrandit	Van
3465	O-H Schwingung in Wasser	β-C ₂ AH ₈	Fernan
3465	O-H Streckschwingungen	C-S-H	Yu
3468		Al(OH) ₃ Gibbsit	Fer
3475	Valenzschwingung Zwischenschicht H ₂ O	Friedelsches Salz	Pöll
3490		Al(OH) ₃ Nordstrandit	Van
3500		Breit, Monosulfat	Tay
3500	Hydroxylschwingung	Breit, CAH ₁₀	Fernan
3521		Al(OH) ₃ Nordstrandit	Van
3523	O-H Streckschwingungen	C-S-H	Yu
3524		Al(OH) ₃ Gibbsit	Fer
3533		Al(OH) ₃ Bayerit	Fre
3540		Al(OH) ₃ Bayerit	Fre
3540		Monosulfat	Tay
3553	O-H Streckschwingung v1	Gips	Fernan
3555		Wasser	Ben
3557	O-H Streckschwingung v1	Bassanit	Fernan
3558		Al(OH) ₃ Nordstrandit	Van
3572	O-H Streckschwingungen	C-S-H	Yu
3589	O-H Streckschwingungen	C-S-H	Yu
3610	An der Oberfläche gebundene OH-Gruppen	Hydratisierender Zement	Mol
3611	O-H Streckschwingung v1	Bassanit	Fernan
3620		Al(OH) ₃ Gibbsit	Fer
3620		Al(OH) ₃ Bayerit	Fre
3624	O-H Streckschwingungen	C-S-H	Yu
3625	O-H Schwingung in Wasser	β-C ₂ AH ₈	Fernan
3625	O-H-Schwingung der Säulen	Scharf, Sulfatettringit	Pöll
3625	O-H-Schwingung der Hauptschicht	Monocarbonat	Pöll

3626	O-H Streckschwingung in Wasser	Breit, C-S-H	Fernan
3630	O-H-Schwingung der Hauptschicht	Scharf, Friedelsches Salz	Pöll
3635	v O-H _{frei}	Ettringit	Fernan
3635	v O-H Streckschwingung	Portlandit	Gar
3640	O-H-Schwingung der Hauptschicht	Scharf, Halbsulfat	Pöll
3640	O-H-Schwingung	Portlandit	Linden
3640		Portlandit	Ben
3643	OH(Ca) v1	Portlandit	Garbev
3644	OH Streckschwingung	Portlandit	Yu
3645	O-H-Streckschwingung	Portlandit	Fernan, Mol
3650	O-H Streckschwingung	Portlandit	Yi1
3650	O-H-Schwingung der Hauptschicht	Monosulfat und Monosulfit	Pöll
3660		Al(OH) ₃ Nordstrandit	Van
3670	O-H _{frei}	C ₃ AH ₆	Fernan
3670	v O-H _{frei}	Magnesiumhydroxid	Ben
3675		Monosulfat	Tay
3680	O-H-Schwingung der Hauptschicht	Scharf, Monocarbonat und Monosulfit	Pöll
3740	SiO-H Streckschwingungen	C-S-H	Yu
3750	O-H Schwingung, freie Silanolgruppe, OH ⁻ Ionen	Silikagel	Chu

Weitere Bandenlagen von Gips, Bassanit, Syngenit, Anhydrit, Calciumcarbonat, Calciumhydroxid, Magnesiumhydroxid, C₃S, C₂S, C₃A und C₄AF, gemessen mit diffuser Reflexion können aus HUGHES et al. (1995, S. 97) entnommen werden. Weitere Daten befinden sich in STEPKOWSKA et al. (2005, S. 736) sowie MOLLAH et al. (2004, S. 259, unhydratisierter und hydratisierter Zement). Bandenlagen in CAH-Phasen sowie carbonathaltigen AFm-Phasen können aus TREZZA & LAVAT (2001) entnommen werden. Eine Zusammenstellung von Infrarotfrequenzen zementärer Systeme befindet sich außerdem in VAZQUEZ-MORENO & BLANCO-VARELA (1981, tabellarisch/graphisch keine genauen Lagen entnehmbar, kein C-S-H). Eine Zusammenstellung der Bandenlagen von Si-O, Si-H und O-H Schwingungen in aufgedampften dünnen SiO_x-Schichten kann aus KAHLER (2001) entnommen werden. Sie stimmen nicht mit entsprechenden Bandenlagen in zementären Systemen überein. Spektren von Wassergläsern zusammen mit NMR-Untersuchungen sind außerdem in ROGGENDORF et al. (1996) enthalten.

Aus der Auswertung geht hervor, dass C-S-H im IR-Spektrum insbesondere charakterisiert ist durch die asymmetrische Si-O Streckschwingung der Q² Einheiten bei ca. 970 cm⁻¹ und die symmetrische Si-O Streckschwingung der Q¹ Einheiten bei ca. 810 cm⁻¹ (GARCIA-LODEIRO et al. 2009, YU et al. 1999). Diese Beobachtung konnte durch eigene Analysen hydratisierender Zementleime mittels ATR-FTIR bestätigt werden, wenn auch bei etwas anderen Wellenzahlen.

LINDEN & HIGL (2016) konnten bei der Hydratation von C₃S beobachten, dass sich eine Bande bei 1010 cm⁻¹ bildet, die der eigentlichen C-S-H-Bildung vorausläuft, die in ihrer Arbeit durch eine Bande bei 940 cm⁻¹ verfolgt wurde. Sie interpretieren die Bande bei 1010 cm⁻¹ als ein Q¹-Signal und damit als ein Dimer. Diese Interpretation ist jedoch unsicher. Diese Bande ist typisch für Wasserglas. Darin liegen je nach Zusammensetzung gelöste Q⁰- bis Q⁴-Einheiten vor. Die 1010 cm⁻¹ Bande tritt dabei unabhängig vom Polymerisationsgrad auf. (YUAN et al. 2011) Das Auftreten der 1010 cm⁻¹ Bande scheint deshalb ein typisches Anzeichen für gelöste Si-Spezies zu sein, wobei nicht auf eine Q¹-Struktur zurückgeschlossen werden kann. In hydratisierenden Zementsteinen konnte im Gegensatz zu den Untersuchungen von LINDEN & HIGL (20016) die 1010 cm⁻¹-Bande in den meisten Literaturdaten und in eigenen Untersuchungen nicht festgestellt werden. Lediglich STEPKOWSKA et al. (2005) berichten von einer Si-O Streckschwingung bei 1023 cm⁻¹ in einem mehrere Jahre alten Zementstein. Dieser war jedoch carbonatisiert und wurde mit Aceton behandelt. In diesem Zementstein ersetzt die 1023 cm⁻¹-Bande die 970 cm⁻¹-Bande. Er kann nicht als ein „normaler“ Zementstein aufgefasst werden. In einer zweiten dargestellten Zementsteinprobe trat kein solches Signal auf. Wenn die 1010

cm⁻¹-Bande in hydratisierenden zementären Systemen wie in Wasserglas auf gelöste Si-Spezies zurückzuführen ist, treten diese bei hydratisierenden Zementen im Gegensatz zu hydratisierendem Alit also offensichtlich nur in sehr geringer Konzentration auf. Sie kann auch nicht mit dem Erstarren hydratisierender Zemente in Verbindung gebracht werden. Dafür müssen Dimere verantwortlich gemacht werden, die das Q¹-Signal bei 810 cm⁻¹ erzeugen. Die Entstehung dieser Bande läuft dem Q²-Signal bei 970 cm⁻¹ voraus. Sie ist nach eigenen Untersuchungen an hydratisierendem CEM I und CEM III/B spätestens nach 30 Minuten messbar, was sehr gut die langsame Verschlechterung der Konsistenz bis hin zum Erstarren erklärt, während die Q²-Bande bei 970 cm⁻¹ erst nach etwa 6 Stunden oder später sichtbar wird.

Fremdatome, z.B. Alkalien, die als Spurenelemente in die C-S-H Struktur eintreten, verschieben die Lage der Banden etwas.

Aus den Intensitätsverhältnissen der Signale, die von den Q⁰- bis Q⁴-Einheiten herrühren, lassen sich eine Reihe von Parametern bestimmen, z.B. der Hydratationsgrad der siliziumhaltigen Klinkerminerale und die mittlere Kettenlänge der entstandenen C-S-H-Phase. Wenn die C-S-H-Phase keine Fremdatome enthält, z.B. Alkalien oder Aluminium, ist das Verhältnis C/S direkt verknüpft mit der Kettenlänge und damit mit dem Konzentrationsverhältnis von Q¹- und Q²-Einheiten. Bei der Hydratation von Calciumsilikaten mit großem C/S-Verhältnis entstehendes, auf der Nanoebene intensiv mit C-S-H verwachsenes und nicht röntgenographisch nachweisbares Ca(OH)₂ kann ebenfalls IR-spektroskopisch quantifiziert werden (YU et al., 1999).

Literatur

- Bensted, J.: Examination of the hydration of slag and pozzolanic cements by infrared spectroscopy. *Il cemento*, Bd. 73, Heft 4, S. 209-214, **1976**.
- Bobrowski, A.; Kmita, A., Starowicz, M., Stypuła, B., Hutera, B.: Effect of Magnesium Oxide Nanoparticles on Water Glass Structure. *Archives of foundry engineering*, Bd. 12, Heft 3, S. 9-12, **2012**.
- Chukin, G.D.; Malevich, V.I.: Structure of silica. Plenum Publishing Corporation, S. 76-83, **1977**.
- Fernandez, L., Vazquez, T. "Aplicación de la espectroscopia infrarroja al estudio de cemento aluminoso" *Materiales de Construcción*, 46 (241), S. 53-65, **1996**.
- Fernández-Carrasco, L.; Torrens-Martín, D.; Morales, L.M.; Martínez-Ramírez, S.: Infrared spectroscopy in the analysis of building and construction materials. In: Theophile, T. (Ed.): *Infrared spectroscopy – materials science, engineering and technology*. InTech, S. 369-382, **2012**.
- Frederickson, L.D., *Analytical Chemistry*, Bd. 26, S. 1883, **1954**.
- Garbev, K.; Beuchle, G., Schweike, U.; Merz, D.; Dregert, O.; Stemmermann, P.: Preparation of a Novel Cementitious Material from Hydrothermally Synthesized C–S–H Phases. *J. Am. Ceram. Soc.*, 97 [7], S. 2298–2307, **2014**.
- Garbev, K.: Struktur, Eigenschaften und quantitative Rietveldanalyse von hydrothermal kristallisierten Calciumsilikathydraten (C-S-H-Phasen). Dissertation, Universität Heidelberg, **2003**.
- García Lodeiro, I.; Macphee, D.E.; Palomo, A.; Fernández-Jiménez, A.: Effect of alkalis on fresh C–S–H gels. FT IR analysis. *Cement and Concrete Research*, Bd. 39, S. 147-153, **2009**.
- Günzler, H.; Gremlich, H.U.: *IR-Spektroskopie*. 4. Auflage, Wiley-VCH Verlag, Weinheim, **2003**.
- Hajimohammadi, A.; Provis, J.L.; van Deventer, J.S.J.: The effect of silica availability on the mechanism of geopolymerisation. *Cement and Concrete Research*, Bd. 41, S. 210–216, **2011**.
- Hughes, T.L.; Methven, C.M.; Jones, T.G.J.; Pelham, S.E.; Fletcher, P.; Hall, C.: Determining Cement Composition by Fourier Transform Infrared Spectroscopy. *Advanced Cement Based Materials*; Bd. 2, S. 91-104, **1995**.
- Kahler, U.: Darstellung, Charakterisierung und Oberflächenmodifizierung von Siliziumnanopartikeln in SiO₂. Dissertation Universität Halle-Wittenberg, **2001**.

- Lindén, M.; Higl, J.: Investigation of alite hydration using in-situ ATR-FTIR spectroscopy. 2. Int. Conf. on Construction Chemistry. München, 10-12.10.2016, GDCH-Monographie Bd. 50, S. 165-168, **2016**.
- Mollah, M.Y.A.; Yu, W.; Schennach, R.; Cocke, D.L.: A Fourier transform infrared spectroscopic investigation of the early hydration of Portland cement and the influence of sodium lignosulfonate. *Cement and Concrete Research*, Bd. 30, S. 267–273, **2000**.
- Mollah, M.Y.A., Kesmez, M., Cocke, D.L.: An X-ray diffraction (XRD) and Fourier transform infrared spectroscopic (FT-IR) investigation of the long-term effect on the solidification/stabilization (S/S) of arsenic(V) in Portland cement type-V. *Science of the Total Environment*, Bd. 325, S. 255–262, **2004**.
- Pöllmann, H.: Die Kristallchemie der Neubildungen bei Einwirkung von Schadstoffen auf hydraulische Bindemittel. Dissertation, Universität Erlangen-Nürnberg, **1984**.
- Roggendorf, H.; Grond, W.; Hurbanic, M.: Structural characterization of concentrated alkaline silicate solutions by ^{29}Si -NMR spectroscopy, FT-IR spectroscopy, light scattering, and electron microscopy – molecules, colloids, and dissolution artefacts. *Glastech. Ber., Glass Sci. Technol.*, Bd. 69, Nr. 7, S. 216-231, **1996**.
- Stepkowska, E.T.; Blanes, J.M.; Rea, C.; Perez-Rodriguez, J.L.: Hydration products in two aged cement pastes. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, Bd. 82, S. 731–739, **2005**.
- Taylor, H.F.W.: *Cement Chemistry*. 2nd ed., Thomas Telford, London, **1997**.
- Torréns-Martín, D.; Fernández-Carrasco, L.: Effect of sulfate content on cement mixtures. *Construction and Building Materials*, Bd. 48, S. 144–150, **2013**.
- Trezza, M.A.; Lavat, A.E.: Analysis of the system $3\text{CaO}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3\text{-CaSO}_4\cdot 2\text{H}_2\text{O}\text{-CaCO}_3\text{-H}_2\text{O}$ by FT-IR spectroscopy. *Cement and Concrete research*, Bd. 31, S. 869-872, **2001**.
- Van der Marel and Beutelspacher, H.: *Atlas of Infrared Spectroscopy of Clay Minerals and Their Admixtures*. Ed. ELSEVIER, New York. **1976**.
- Vazquez-Moreno, T.; Blanco-Varela, M.T.: Tabla de frecuencias y espectros de absorción infrarroja de compuestos relacionados con la química del cemento. *Materiales de construcción*. Bd. 182, S. 31-48, **1981**.
- Yuan, M., Lu, J.; Kong, G.; Che, C.: Effect of silicate anion distribution in sodium silicate solution on silicate conversion coatings of hot-dip galvanized steels. *Surface & Coatings Technology*, Bd. 205, S. 4466–4470, **2011**.
- Ylmén, R.; Jäglind, U.; Steenari, B.-M.; Panas, I.: Early hydration and setting of Portland cement monitored by IR, SEM and Vicat techniques. *Cement and Concrete Research.*, Bd. 39, S. 433-439, **2009**.
- Ylmen, R.; Jäglind, U.; Panas, I.: Monitoring Early Hydration of Cement by Ex Situ and In Situ ATR-FTIR – a Comparative Study. *J. Am. Cer. Soc.*, Bd. 97, S. 3669-3675, **2014**.
- Yu, P.; Kirkpatrick, R.J.; Poe, B.; McMillan, P.F.; Cong, X.: Structure of calcium silicate hydrate (C-S-H): near-, mid-, and far-infrared spectroscopy. *J. Am. Ceram. Soc.*, Bd. 82, S. 742-748, **1999**.
- Zhao, W.; Zhang, Q.; Peng, C.: FTIR spectra for molecular structure of wollastonite. *Journal of the Chinese Ceramic Society*, Bd. 34, Nr. 9, S. 1137 –1139, **2006**.