

Klatraty to związki krystaliczne typu gość-gospodarz, w których struktura gospodarza składa się ze polihedralnego szkieletu jednego związku chemicznego tworzącego pustki strukturalne, w których lokują się cząstki drugiego związku chemicznego - gościa. Są one rzadkie w naturze. Najbardziej znanym związkiem klatratowym są hydraty metanu składające się z cząstek wody i gazu bogatego w metan. Ostatnie badania wykazały, że minerały należące do nadgrupy mayenitu mogą również tworzyć związki klatratowe. Ich ogólny wzór chemiczny można przedstawić jako $X_{12}T_{14}O_{32-x}(OH)_{3x}[W_{6-x}]$, gdzie $X = Ca$, $T = Al^{3+}$, Fe^{3+} , Mg^{2+} , Si^{4+} lub Ti^{4+} oraz $x = 0-2$. Można je znaleźć w wapniowo - krzemianowych skałach pirometamorficznych, które powstają w warunkach bardzo wysokich temperatur i niskich ciśnień. Posiadają one nanoporową strukturę, która zbudowana jest ze szkieletu tetraedrycznego i sześciu pustek strukturalnych. W środku każdej pustki znajduje się pozycja W, która może być obsadzona przez jony lub molekuly, takie jak F^- , Cl^- , OH^- , H_2O etc. W związku ze swoją specyficzną strukturą, obsadzenie pozycji W w strukturze jest nietrwałe i łatwo może zostać zmienione, przez co minerały nadgrupy mayenitu mogą "wyłapywać" ze środowiska składniki gazów bądź fluidów krążących w obrębie skał pirometamorficznych.

Celem projektu jest opracowanie modelu powstawania klatratów w minerałach nadgrupy mayenitu. Aby to osiągnąć, zbadane zostaną podstawienia różnych jonów i molekuł w obrębie pozycji W w naturalnych minerałach należących do nadgrupy mayenitu i ich syntetycznych analogach.

Aby porównać ze sobą minerały nadgrupy mayenitu o różnej historii geologicznej, i co za tym idzie różnymi podstawieniami w obrębie pustek strukturalnych, planowany projekt zakłada badanie tych minerałów z kilku różnych lokalizacji, takich jak skały pirometamorficzne Kompleksu Hatrurim (Izrael) oraz ksenolity występujące w skałach wulkanów Szadył - Khoch (Osetia Południowa), Bellerberg (Niemcy), Czegem (Rosja), a także w obrębie wulkanicznej wyżyny nad Balatonem (Węgry) oraz w kamieniołomach w prefekturze Tadano (Japonia). Oprócz badań naturalnych faz, proponowany projekt zakłada odtwarzanie badanych minerałów w warunkach laboratoryjnych przy użyciu materiału syntetycznego. W ostatnich latach syntetyczne odpowiedniki mayenitów wzbudzają powszechne zainteresowanie, wraz z odkryciem występowania w nich przewodności jonowej. W związku z tym opracowanie różnych podstawień w obrębie minerałów nadgrupy mayenitów przyniesie wiele istotnych informacji nie tylko w dziedzinie geologii, ale także przyczyni się do rozwoju nowoczesnych materiałów stosowanych w elektronice, ochronie środowiska oraz cementach.

Przedstawiony problem badawczy jest innowacyjny ze względu na obejmowanie swoim zasięgiem nowych naturalnych klatratów. Doświadczenie lidera proponowanego projektu w pracy nad badaniami minerałów nadgrupy mayenitu oraz bogate zaplecze laboratoryjne gwarantują rzetelny przebieg projektu oraz uzyskanie zaplanowanych wyników. Wstępne badania prowadzone nad fluormayenitami z Kompleksu Hatrurim dostarczyły danych o występowaniu podstawień różnych związków siarki, w tym neutralnej cząstki H_2S , w pozycji W. Obecność neutralnej molekuly H_2S świadczy o tym, że mamy do czynienia z nowym, naturalnym typem klatratu.

Najważniejszym spodziewanym efektem projektu będzie odkrycie i opisanie nowego naturalnego związku klatratowego. Biorąc pod uwagę, że pomimo intensywnych badań nad nadgrupą mayenitu nie są znane wszystkie naturalne odpowiedniki faz syntetycznych (takich jak np. "czysto tlenowy" człon $Ca_{12}Al_{14}O_{33}$) szczegółowe badania różnych podstawień w obrębie nadgrupy mayenitu przynoszą realną możliwość odkrycia i opisanie nowego minerału, co jest wielkim sukcesem i olbrzymim wkładem w dziedzinie mineralogii, chemii i fizyki ciała stałego. Dane uzyskane podczas planowanego projektu przyczynią się również do stworzenia nowych, zaawansowanych materiałów służących do inkorporacji pierwiastków szkodliwych dla środowiska, takich jak siarka, chlor czy fluor.