

## Abstract

Recently, carbonates have attracted a lot of attention, due to the recognition of their importance in the global carbon cycle. This was enabled by improvement of the experimental techniques that allow for investigating the stability, structure, and physical properties of materials and high-pressures and high-temperatures, that is, they allow for investigating minerals and geochemical processes at the conditions occurring deep inside Earth. Although a lot of research has been focused on carbonates, there are still some open questions regarding their structure and physical properties at such extreme conditions. The aim of this thesis is to establish a deeper understanding of the nature of the phase transitions in carbonates by studying how do the atoms building up the crystal structure vibrate, that is lattice dynamics. The methodology adapted in this study is a combination of experimental and computational methods which allows for a very thorough examination of the problem. The computational approach allows to determine parameters that are elusive or tedious to measure, and the experimental results provide a solid benchmark for the calculations. This tandem of methods has been widely used for investigating lattice dynamics of various materials. In this study it was used to elucidate the structure and properties of carbonates in the deep Earth conditions.

**Keywords:** Lattice dynamics, phonons, inelastic x-ray scattering, thermal diffuse scattering, carbonates, high-pressure.

## Zusammenfassung

In letzter Zeit haben Carbonate aufgrund der Entdeckung ihrer Bedeutung für den globalen Kohlenstoffkreislauf viel Aufmerksamkeit auf sich gezogen. Diese Entdeckung wurde durch die Verbesserung der experimentellen Techniken ermöglicht, die es erlauben, die Stabilität, Struktur und physikalischen Eigenschaften von Materialien unter hohen Drücken und hohen Temperaturen zu untersuchen, d. h. Mineralien und geochemische Prozesse können unter den tief im Erdinneren auftretenden Bedingungen untersucht werden.

Obwohl sich viele Untersuchungen auf Carbonate bezogen haben, gibt es noch offene Fragen zu ihrer Struktur und ihren physikalischen Eigenschaften unter solch extremen Bedingungen. Das Ziel dieser Arbeit ist es, ein tieferes Verständnis der Natur von Phasenübergängen in Carbonaten zu erlangen, indem untersucht wird, wie die Atome, die die Kristallstruktur aufbauen, vibrieren, d. h. eine Untersuchung ihrer Gitterdynamik. Die in dieser Studie verwendete Methodik ist eine Kombination von experimentellen und rechnerischen Methoden, was eine sehr gründliche Untersuchung des Problems ermöglicht. Einerseits ermöglichen die gemessenen Ergebnisse eine Evaluation der Modellrechnungen, andererseits liefert der rechnerische Ansatz Werte für Parameter, deren Messung schwierig oder langwierig ist.

**Keywords:** Gitterdynamik, Phonons, inelastische Röntgenstreuung, thermischen diffusen Streuung, Carbonate.