

# INHALTSVERZEICHNIS

Inhaltsverzeichnis .....	v
Formelzeichen und Konstanten .....	viii
1. Einleitung .....	1
2. Literaturüberblick und Grundlagen .....	5
2.1. Stand der Literatur: Phasenbeziehungen von $\text{AlF}_x(\text{OR})_{3-x}$ und HS-AlF <sub>3</sub> .....	5
2.2. Grundlagen der Festkörper-Kernmagnet- resonanz .....	9
2.2.1. Die Besonderheiten eines Quadrupolkerns in der Festkörper- NMR .....	14
3. Kristalline Modellsubstanzen und die Ableitung von Struktur- Eigenschaftsbeziehungen .....	19
3.1. Strukturmotive bekannter kristalliner Al-F- Verbindungen .....	19
3.2. Stand der Literatur: <sup>27</sup> Al- und <sup>19</sup> F-NMR- Untersuchungen von Proben im System Al / F / O .....	23
3.3. Die Entwicklung von Struktur-Eigenschafts- beziehungen am Beispiel kristalliner AlF <sub>x</sub> (OH) <sub>3-x</sub> - Verbindungen .....	26
3.3.1. Trendanalysen der <sup>19</sup> F chemischen Verschiebungen von kristallinen Aluminiumhydroxidfluoriden .....	29
3.3.2. Korrelationen von Protonensignalen in AlF <sub>x</sub> (OH) <sub>3-x</sub> - Verbindungen .....	33
3.3.3. Der Einfluss von H-Brücken auf die Fluor-Verschiebung; <sup>19</sup> F-Trendanalyse protonenarmer Aluminiumhydroxidfluoride .....	37
3.3.4. Trendanalyse der <sup>27</sup> Al chemischen Verschiebung von AlF <sub>x</sub> (OH) <sub>6-x</sub> -Strukturen .....	43
3.3.5. Strukturelle Einflüsse auf die Quadrupolparameter .....	50
3.4. Weiterführende strukturelle Korrelationen .....	57
3.5. Zusammenfassung .....	63
4. Der fluorolytische Sol –Gel Prozess – vom Al(O <sup>i</sup> Pr) <sub>3</sub> zum Xerogel AlF <sub>2,3</sub> (O <sup>i</sup> Pr) <sub>0,7•z</sub> iPrOH .....	69
4.1. Vorberichtigungen: oxidische und fluoridische Sol-Gel Chemie im Vergleich .....	69
4.2. Experimente an Gelen unter MAS-Bedingungen – eigene Inserts und tiefe Temperaturen .....	73
4.3. Strukturen der Ausgangsstoffe .....	76
4.4. Experimente an Aluminiumalkoxidfluorid-Solen und –Gelen .....	80
4.5. Untersuchungen an festen Aluminium– isopropoxid-fluoriden mit unterschiedlichen F-Gehalten .....	90

4.6. Charakterisierung des Xerogels $\text{AlF}_{2.3}(\text{O}^{\text{i}}\text{Pr})_{0.7} \cdot z^{\text{i}}\text{PrOH}$ im Vergleich zum Alkogel.....	120
4.7. Zusammenfassung.....	128
5. Aspekte des chemischen Verhaltens des Xerogels – $\text{AlF}_{2.3}(\text{O}^{\text{i}}\text{Pr})_{0.7} \cdot z^{\text{i}}\text{PrOH}$ .....	133
5.1. Veränderung lokaler Strukturen auf dem Weg zu <i>high surface</i> -Aluminiumfluoriden	
5.2. Zusammenfassung	134
6. Zusammenfassung und Ausblick	155
7. Literaturverzeichnis.	159
8. Anhang	171
8.1. Daten und Tabellen	178