

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Einleitung</b>	<b>8</b>
<b>2 Beschreibung chemischer Strukturen</b>	<b>9</b>
2.1 Koordinationszahl und Koordinationspolyeder . . . . .	11
2.2 Die Beschreibung von Kristallstrukturen . . . . .	16
2.3 Atomkoordinaten . . . . .	19
2.4 Isotypie . . . . .	20
<b>3 Polymorphie, Phasendiagramme</b>	<b>22</b>
3.1 Polymorphie . . . . .	22
3.2 Phasendiagramme . . . . .	23
<b>4 Struktur, Energie und chemische Bindung</b>	<b>30</b>
4.1 Thermodynamische Stabilität . . . . .	30
4.2 Kinetische Stabilität . . . . .	31
4.3 Chemische Bindung und Struktur . . . . .	31
4.4 Die Gitterenergie . . . . .	34
<b>5 Die effektive Grösse von Atomen</b>	<b>40</b>
5.1 Van-der-Waals-Radien . . . . .	41
5.2 Atomradien in Metallen . . . . .	42
5.3 Kovalenzradien . . . . .	42
5.4 Ionenradien . . . . .	44
<b>6 Ionenverbindungen</b>	<b>48</b>
6.1 Radienquotienten . . . . .	48
6.2 Ternäre Ionenverbindungen . . . . .	53
6.3 Verbindungen mit komplexen Ionen . . . . .	54
6.4 Die Regeln von Pauling und Baur . . . . .	56
<b>7 Molekülstrukturen I: Verbindungen der Hauptgruppen- elemente</b>	<b>61</b>
7.1 Valenzelektronenpaar-Abstoßung . . . . .	62
7.2 Strukturen bei fünf Valenzelektronenpaaren . . . . .	73

<b>8 Molekülstrukturen II: Verbindungen der Nebengruppenelemente</b>	<b>75</b>
8.1 Ligandenfeldtheorie . . . . .	75
8.2 Koordinationspolyeder bei Nebengruppenelementen . . . . .	85
8.3 Isomerie . . . . .	86
<b>9 Molekülorbital-Theorie und chemische Bindung in Festkörpern</b>	<b>92</b>
9.1 Molekülorbitale . . . . .	92
9.2 Hybridisierung . . . . .	95
9.3 Bändertheorie. Die lineare Kette aus Wasserstoffatomen . . . . .	97
9.4 Die Peierls-Verzerrung . . . . .	101
9.5 Kristall-Orbital-Überlappungspopulation (COOP) . . . . .	106
9.6 Bindungen in zwei und drei Dimensionen . . . . .	110
9.7 Bindung in Metallen . . . . .	113
<b>10 Die Elementstrukturen der Nichtmetalle</b>	<b>115</b>
10.1 Halogene . . . . .	115
10.2 Chalkogene . . . . .	117
10.3 Elemente der fünften Hauptgruppe . . . . .	121
10.4 Graphit . . . . .	126
10.5 Bor . . . . .	128
<b>11 Diamantartige Strukturen</b>	<b>130</b>
11.1 Kubischer und hexagonaler Diamant . . . . .	130
11.2 Binäre diamantartige Verbindungen . . . . .	132
11.3 Diamantartige Verbindungen unter Druck . . . . .	134
11.4 Polynäre diamantartige Verbindungen . . . . .	135
11.5 Aufgeweitete Diamantgitter. SiO <sub>2</sub> -Strukturen . . . . .	136
<b>12 Polyanionische und polykationische Verbindungen.</b>	
<b>Zintl-Phasen</b>	<b>142</b>
12.1 Die verallgemeinerte (8 – N)-Regel . . . . .	142
12.2 Polyanionische Verbindungen, Zintl-Phasen . . . . .	145
12.3 Polykationische Verbindungen . . . . .	153
12.4 Clusterverbindungen . . . . .	155

<b>13 Kugelpackungen. Metallstrukturen</b>	<b>171</b>
13.1 Dichteste Kugelpackungen . . . . .	172
13.2 Die kubisch-innenzentrierte Kugelpackung . . . . .	176
13.3 Andere Metallstrukturen . . . . .	177
<b>14 Das Prinzip der Kugelpackungen bei Verbindungen</b>	<b>179</b>
14.1 Geordnete und ungeordnete Legierungen . . . . .	179
14.2 Dichteste Kugelpackungen bei Verbindungen . . . . .	181
14.3 Das Prinzip der kubisch-innenzentrierten Kugelpackung bei Verbindungen (CsCl-Typ) . . . . .	183
14.4 Hume-Rothery-Phasen . . . . .	185
14.5 Laves-Phasen . . . . .	187
<b>15 Verknüpfte Polyeder</b>	<b>191</b>
15.1 Eckenverknüpfte Oktaeder . . . . .	194
15.2 Kantenverknüpfte Oktaeder . . . . .	201
15.3 Flächenverknüpfte Oktaeder . . . . .	204
15.4 Oktaeder mit gemeinsamen Ecken und Kanten . . . . .	205
15.5 Oktaeder mit gemeinsamen Kanten und Flächen . . . . .	209
15.6 Verknüpfte trigonale Prismen . . . . .	211
15.7 Eckenverknüpfte Tetraeder. Silicate . . . . .	212
15.8 Kantenverknüpfte Tetraeder . . . . .	224
<b>16 Kugelpackungen mit besetzten Lücken</b>	<b>225</b>
16.1 Die Lücken in dichtesten Kugelpackungen . . . . .	225
16.2 Einlagerungsverbindungen . . . . .	230
16.3 Wichtige Strukturtypen mit besetzten Oktaederlücken in dichtesten Kugelpackungen . . . . .	233
16.4 Perowskite . . . . .	242
16.5 Besetzung von Tetraederlücken in dichtesten Kugelpackungen	247
16.6 Spinelle . . . . .	251

<b>17 Physikalische Eigenschaften von Festkörpern</b>	<b>255</b>
17.1 Mechanische Eigenschaften . . . . .	255
17.2 Piezo- und ferroelektrische Eigenschaften . . . . .	257
17.3 Magnetische Eigenschaften . . . . .	262
<b>18 Symmetrie</b>	<b>271</b>
18.1 Symmetrieelemente und Symmetrieroberationen . . . . .	271
18.2 Die Punktgruppen . . . . .	276
18.3 Raumgruppen und Raumgruppentypen . . . . .	282
18.4 Kristallklassen und Kristallsysteme . . . . .	285
<b>19 Symmetrie als Ordnungsprinzip für Kristallstrukturen</b>	<b>287</b>
19.1 Kristallographische Gruppe-Untergruppe-Beziehungen . . . . .	287
19.2 Das Symmetrioprinzip in der Kristallchemie . . . . .	290
19.3 Strukturverwandtschaften durch Gruppe-Untergruppe-Beziehungen . . . . .	291
19.4 Zwillingskristalle . . . . .	297
<b>Literatur</b>	<b>301</b>
<b>Sachverzeichnis</b>	<b>308</b>