

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	8
2	Beschreibung chemischer Strukturen	9
2.1	Koordinationszahl und Koordinationspolyeder	11
2.2	Die Beschreibung von Kristallstrukturen	16
2.3	Atomkoordinaten	19
2.4	Isotypie	20
3	Polymorphie, Phasendiagramme	22
3.1	Polymorphie	22
3.2	Phasendiagramme	23
4	Struktur, Energie und chemische Bindung	30
4.1	Thermodynamische Stabilität	30
4.2	Kinetische Stabilität	31
4.3	Chemische Bindung und Struktur	31
4.4	Die Gitterenergie	34
5	Die effektive Grösse von Atomen	40
5.1	Van-der-Waals-Radien	41
5.2	Atomradien in Metallen	42
5.3	Kovalenzradien	42
5.4	Ionenradien	44
6	Ionenverbindungen	48
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
7	Molekülstrukturen I: Verbindungen der Hauptgruppenelemente	61
7.1	Valenzelektronenpaar-Abstoßung	62
7.2	Strukturen bei fünf Valenzelektronenpaaren	73

8 Molekülstrukturen II: Verbindungen der Nebengruppen- elemente	75
8.1 Ligandenfeldtheorie	75
8.2 Koordinationspolyeder bei Nebengruppenelementen	85
8.3 Isomerie	86
9 Molekülorbital-Theorie und chemische Bindung in Festkörpern	92
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
10 Die Elementstrukturen der Nichtmetalle	115
10.1 Halogene	115
10.2 Chalkogene	117
10.3 Elemente der fünften Hauptgruppe	121
10.4 Graphit	126
10.5 Bor	128
11 Diamantartige Strukturen	130
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 ₂ -Strukturen	136
12 Polyanionische und polykationische Verbindungen. Zintl-Phasen	142
12.1 Die verallgemeinerte (8 - N)-Regel	142
12.2 Polyanionische Verbindungen, Zintl-Phasen	145
12.3 Polykationische Verbindungen	153
12.4 Clusterverbindungen	155

13 Kugelpackungen. Metallstrukturen	171
13.1 Dichteste Kugelpackungen	172
13.2 Die kubisch-innenzentrierte Kugelpackung	176
13.3 Andere Metallstrukturen	177
14 Das Prinzip der Kugelpackungen bei Verbindungen	179
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
15 Verknüpfte Polyeder	191
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
16 Kugelpackungen mit besetzten Lücken	225
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

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