

# Inhalt

<b>A</b>	<b>Theoretischer Teil</b>	<b>1</b>
<b>1</b>	<b>Struktur und Bindung</b>	<b>3</b>
1.1	Molekülsymmetrie und Punktgruppen	3
1.2	Das VSEPR-Konzept und seine Grenzen	7
1.2.1	Koordinationszahlen $\leq 6$	7
1.2.2	Koordinationszahlen $> 6$	10
1.3	MO-Theorie der kovalenten Bindung	13
1.3.1	Allgemeines	13
1.3.2	Das $H_2^+$ -Molekülion als zweiatomiges Molekül mit $\sigma$ -Wechselwirkung	17
1.3.3	Zweiatomige Moleküle mit $\pi$ -Wechselwirkung	25
1.3.4	Dreiatomige Moleküle	27
1.3.5	Tetraedrische und pseudotetraedrische Moleküle	33
1.3.6	Oktäedrische und trigonal-bipyramidale Moleküle	36
1.3.7	Walsh-Mulliken-Diagramme	38
1.4	Bindungstheorie anorganischer aromatischer Verbindungen	40
1.5	$\pi^*$ - $\pi^*$ -Wechselwirkungen	44
1.5.1	Die 4-Zentren-2-Elektronen- $\pi^*$ - $\pi^*$ -Bindung	45
1.5.2	Die 6-Zentren- $\pi^*$ - $\pi^*$ -Wechselwirkungen	48
1.6	Doppelbindungen zwischen Elementen höherer Perioden	49
1.7	Grundlagen von Ab-initio-SCF-Berechnungen	51
1.7.1	Molekulare Probleme	53
1.7.2	Elektronen-Korrelation	56
1.7.3	Lokalisierte Orbitale	59
1.8	Molekülzustände und Struktur	63
1.8.1	Grundlagen	63
1.8.2	UV-Photoelektronenspektroskopie (UPS)	65
1.9	Einfluß relativistischer Effekte	71
1.9.1	Theoretische Grundlagen	71
1.9.2	Gold	72
1.9.3	Quecksilber	74
1.9.4	Die Lanthanoiden-Kontraktion	74
1.10	Die d-Block-Kontraktion	75
1.11	Die Ionenbindung	77
1.12	Van der Waals-Wechselwirkungen und -Radien	81
	Literatur	84
<b>2</b>	<b>Thermodynamik und Kinetik</b>	<b>87</b>
2.1	Einige thermodynamische Grundlagen	87
2.1.1	Die Bindungsenergie	92
2.1.2	Born-Haber-Kreisprozesse	96

2.2	Verschiedene Elektronegativitätsskalen .....	103
2.3	Halbquantitatives Konzept der harten und weichen Säuren und Basen .....	106
2.3.1	Theorie .....	106
2.3.2	Die Reaktivität von Stickstoff-Basen gegenüber der Lewis-Säure Arsenpentafluorid .....	109
2.4	Einige kinetische Betrachtungen .....	110
2.4.1	Reaktionsdynamik .....	111
2.4.2	Orbitalsymmetrie und Katalyse .....	112
2.4.3	Explosionen .....	115
	Literatur .....	116
<b>3</b>	<b>Ringe, Käfige und Cluster .....</b>	<b>119</b>
3.1	Abhängigkeit der Struktur von der Elektronenzahl .....	120
3.2	Elektronenarme Verbindungen .....	123
3.2.1	Borane .....	123
3.2.2	Zintl-Ionen .....	127
3.3	Klassische Verbindungen .....	129
3.3.1	Chalkogen-Ringe .....	129
3.3.2	Phosphane, Cyclophosphane und Phosphide .....	131
3.4	Elektronenreiche Verbindungen .....	134
3.4.1	Borazin .....	135
3.4.2	Bornitrid .....	136
3.4.3	Fullerene .....	138
3.4.4	Pentazol .....	139
3.4.5	Phosphazene .....	139
3.4.6	Schwefel-Stickstoff-Verbindungen .....	143
3.4.7	Polyatomare Kationen .....	148
	Literatur .....	151
<b>4</b>	<b>Chemie in wäßrigen und nichtwäßrigen Lösungsmitteln .....</b>	<b>153</b>
4.1	Fluorwasserstoff .....	154
4.1.1	Eigenschaften .....	154
4.1.2	Chemie in Fluorwasserstoff .....	155
4.2	Supersäuren .....	157
4.3	Chemische Werkstoffe .....	161
4.4	Ammoniak und Schwefeldioxid als Lösungsmittel .....	162
4.5	Salzschmelzen .....	163
	Literatur .....	165
<b>B</b>	<b>Stoffchemie der Nichtmetalle .....</b>	<b>167</b>
<b>5</b>	<b>Der Wasserstoff .....</b>	<b>169</b>
5.1	Elementarer Wasserstoff .....	169
5.2	Verbindungen des Wasserstoffs — Hydride .....	174
	Literatur .....	174

<b>6</b>	<b>Die 13. Gruppe: Bor</b>	175
6.1	Elementares Bor	175
6.2	Metallboride und Borcarbide	179
6.3	Borane	182
6.4	Borhalogenide	186
6.4.1	Bortrihalogenide	187
6.4.2	Dibortetrahalogenide und Bormonohalogenide (BX) <sub>n</sub>	190
6.5	Bor-Sauerstoff-Verbindungen	193
6.5.1	Borsäure und Boroxid	193
6.5.2	Borate	195
6.6	Bor-Stickstoff-Verbindungen	196
6.6.1	Amin-Boran-Addukte	196
6.6.2	Aminoborane	197
6.6.3	Iminoborane und Borazin	198
6.7	Weitere Bor-Verbindungen	199
	Literatur	202
<b>7</b>	<b>Die 14. Gruppe: Kohlenstoff und Silicium</b>	203
7.1	Kohlenstoff	203
7.1.1	Elementarer Kohlenstoff	203
7.1.2	Modifikationen	204
7.1.3	Vorkommen, Gewinnung und Verwendung	207
7.1.4	Graphit-Einlagerungsverbindungen	209
7.1.5	Chemie der Buckminsterfullerene	210
7.1.6	Carbide	211
7.1.7	Methan, Halogenverbindungen und Oxidhalogenide	213
7.1.8	Kohlenstoff-Chalkogen-Verbindungen	216
7.1.9	Kohlenstoff-Stickstoff-Verbindungen	222
7.2	Silicium	231
7.2.1	Elementares Silicium	231
7.2.2	Silicide	237
7.2.3	Carbide und Nitride des Siliciums	238
7.2.4	Silicium-Sauerstoff-Verbindungen	241
7.2.5	Halogenide des Siliciums	246
7.2.6	Silane und Organosilane	247
7.2.7	Weitere Silicium-Stickstoff- und Silicium-Schwefel-Verbindungen	253
	Literatur	256
<b>8</b>	<b>Die 15. Gruppe</b>	259
8.1	Stickstoff	259
8.1.1	Elementarer Stickstoff	259
8.1.2	Nitride	261
8.1.3	HN <sub>3</sub> , Azide und verwandte Verbindungen	264
8.1.4	Stickstoff-Halogen-Verbindungen	270
8.1.5	Stickstoff-Wasserstoff-Verbindungen	277
8.1.6	Stickstoff-Sauerstoff-Verbindungen	287

8.1.7 Weitere Verbindungen des Stickstoffs .....	298
8.2 Phosphor.....	303
8.2.1 Elementarer Phosphor .....	303
8.2.2 Phosphide .....	306
8.2.3 Phosphor-Wasserstoff-Verbindungen .....	310
8.2.4 Phosphor-Halogen-Verbindungen, Pseudohalogenide, Oxo- und Thio-Halogenide .....	312
8.2.5 Phosphor-Sauerstoff-Verbindungen .....	316
8.2.6 Phosphor-Schwefel-Verbindungen .....	323
8.2.7 Phosphor-Stickstoff-Verbindungen .....	325
8.2.8 Phosphor-Kohlenstoff-Verbindungen .....	327
8.3 Arsen, Antimon, Bismut .....	328
8.3.1 Die Elemente .....	328
8.3.2 Wasserstoff-Verbindungen.....	329
8.3.3 Halogen-Verbindungen .....	330
8.3.4 Sauerstoff-Verbindungen .....	336
8.3.5 Sulfide .....	338
Literatur .....	339
 <b>9 Die 16. Gruppe .....</b>	 343
9.1 Sauerstoff .....	343
9.1.1 Elementarer Sauerstoff .....	343
9.1.2 Sauerstoff-Wasserstoff-Verbindungen .....	348
9.1.3 Sauerstoff-Kationen und -Anionen .....	352
9.1.4 Sauerstoff-Fluoride und Halogen-Oxide .....	353
9.2 Schwefel.....	353
9.2.1 Elementarer Schwefel .....	353
9.2.2 Schwefel-Kationen .....	359
9.2.3 Schwefel-Anionen.....	361
9.2.4 Schwefel-Wasserstoff-Verbindungen .....	362
9.2.5 Halogen-Verbindungen und Oxidhalogenide .....	363
9.2.6 Schwefel-Sauerstoff-Verbindungen .....	370
9.2.7 Schwefel-Stickstoff-Verbindungen .....	381
9.3 Selen und Tellur.....	386
9.3.1 Die Elemente .....	386
9.3.2 Polyatomare Selen- und Tellur-Ionen .....	388
9.3.3 Wasserstoffverbindungen .....	389
9.3.4 Halogenide und Oxohalogenide .....	390
9.3.5 Oxide, Oxosäuren und deren Anionen .....	391
9.3.6 Stickstoff-Verbindungen .....	393
Literatur .....	394
 <b>10 Die 17. Gruppe .....</b>	 397
10.1 Die Elemente .....	397
10.2 Interhalogen-Verbindungen.....	403
10.3 Halogenwasserstoffe .....	408

10.4	Lösungen der Halogene und Charge-Transfer-Komplexe .....	411
10.5	Halogen-Kationen .....	412
10.6	Halogen-Anionen .....	415
10.7	Sauerstoff-Verbindungen .....	420
	Literatur .....	436
<b>11</b>	<b>Die 18. Gruppe .....</b>	<b>439</b>
11.1	Die Elemente .....	439
11.2	Xenon, Krypton .....	440
11.2.1	Edelgashalogenide .....	441
11.2.2	Binäre Xenonoxide und ternäre Xenonoxidfluoride .....	447
11.2.3	Xenon-Kohlenstoff-Verbindungen .....	449
11.2.4	Xenon- und Krypton-Stickstoff-Verbindungen .....	451
11.2.5	Weitere nichtbinäre Xenon- und Krypton-Sauerstoff-Verbindungen .....	454
11.2.6	Eine Xenon-Wolfram-Verbindung .....	456
11.3	Helium, Neon, Argon .....	456
	Literatur .....	457
<b>C</b>	<b>Anhang .....</b>	<b>459</b>
1	Physikalische Daten von Hauptgruppenelementen: $r_{\text{kov}}$ , $r_{\text{vdW}}$ , $I$ , $A$ , $\chi_{\text{M}}$ , $\chi_{\text{AR}}$ ..	461
2	Ausgewählte thermodynamische Daten einiger Nichtmetallverbindungen ....	462
3	Fluoridionenaffinitäten ( <i>FIA</i> ) .....	466
4	Fluor-plus-detachment-Energien ( <i>FPDE</i> ) .....	466
5	Molvolumina .....	467
6	Kerneigenschaften einiger für die NMR-Spektroskopie wichtiger Kerne .....	467
7	Gebräuchliche Standards für die NMR-Spektroskopie .....	468
8	Hyperfeinkopplungskonstanten $a_{\text{iso}}(\text{X})^\circ$ in der ESR-Spektroskopie .....	468
9	Einige zur Strukturbestimmung geeignete Methoden .....	469
10	Vergleich von Röntgen- und Neutronenbeugung an einkristallinen Proben ....	470
11	Kristallsysteme, Bravais-Gitter und kristallographische Punktgruppen .....	471
12	Abkürzungen und Konstanten .....	472
13	Einheiten und Umrechnungsfaktoren .....	476
	Literatur .....	478