

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	9
2	Beschreibung chemischer Strukturen	11
2.1	Koordinationszahl und Koordinationspolyeder	13
2.2	Die Beschreibung von Kristallstrukturen	18
2.3	Atomkoordinaten	21
2.4	Isotypie	23
2.5	Übungsaufgaben	24
3	Symmetrie	26
3.1	Symmetrieoperationen und Symmetrieelemente	26
3.2	Die Punktgruppen	32
3.3	Raumgruppen und Raumgruppentypen	38
3.4	Punktlagen	41
3.5	Kristallklassen und Kristallsysteme	42
3.6	Aperiodische Kristalle	44
3.7	Fehlgeordnete Kristalle	47
3.8	Übungsaufgaben	49
4	Polymorphie, Phasenumwandlungen	51
4.1	Thermodynamische Stabilität	51
4.2	Kinetische Stabilität	52
4.3	Polymorphie	52
4.4	Phasenumwandlungen	54
4.5	Phasendiagramme	57
4.6	Übungsaufgaben	63
5	Chemische Bindung und Gitterenergie	64
5.1	Chemische Bindung und Struktur	64
5.2	Die Gitterenergie	66
5.3	Übungsaufgaben	72
6	Die effektive Größe von Atomen	73
6.1	Van-der-Waals-Radien	74
6.2	Atomradien in Metallen	75
6.3	Kovalenzradien	76
6.4	Ionenradien	77
6.5	Übungsaufgaben	81

7	Ionenverbindungen	82
7.1	Radienquotienten	82
7.2	Ternäre Ionenverbindungen	87
7.3	Verbindungen mit komplexen Ionen	88
7.4	Die Regeln von Pauling und Baur	90
7.5	Übungsaufgaben	95
8	Molekülstrukturen I: Verbindungen der Hauptgruppenelemente	97
8.1	Valenzelektronenpaar-Abstoßung	98
8.2	Strukturen bei fünf Valenzelektronenpaaren	109
8.3	Übungsaufgaben	111
9	Molekülstrukturen II:	
	Verbindungen der Nebengruppenelemente	112
9.1	Ligandenfeldtheorie	112
9.2	Koordinationspolyeder bei Nebengruppenelementen	122
9.3	Isomerie	124
9.4	Übungsaufgaben	127
10	Molekülorbital-Theorie und chemische Bindung in Festkörpern	128
10.1	Molekülorbitale	128
10.2	Hybridisierung	130
10.3	Die Elektronen-Lokalisierungs-Funktion	133
10.4	Bändertheorie. Die lineare Kette aus Wasserstoffatomen	134
10.5	Die Peierls-Verzerrung	139
10.6	Kristall-Orbital-Überlappungspopulation (COOP)	144
10.7	Bindungen in zwei und drei Dimensionen	148
10.8	Bindung in Metallen	151
10.9	Übungsaufgaben	152
11	Die Elementstrukturen der Nichtmetalle	153
11.1	Wasserstoff und Halogene	153
11.2	Chalkogene	155
11.3	Elemente der fünften Hauptgruppe	160
11.4	Elemente der fünften und sechsten Hauptgruppe unter Druck	164
11.5	Kohlenstoff	168
11.6	Bor	173

12 Diamantartige Strukturen	175
12.1 Kubischer und hexagonaler Diamant	175
12.2 Binäre diamantartige Verbindungen	176
12.3 Diamantartige Verbindungen unter Druck	178
12.4 Polynäre diamantartige Verbindungen	183
12.5 Aufgeweitete Diamantstrukturen. SiO_2 -Strukturen	184
12.6 Übungsaufgaben	189
13 Polyanionische und polykationische Verbindungen.	
Zintl-Phasen	190
13.1 Die verallgemeinerte $(8 - N)$ -Regel	190
13.2 Polyanionische Verbindungen, Zintl-Phasen	193
13.3 Polykationische Verbindungen	204
13.4 Clusterverbindungen	205
13.5 Übungsaufgaben	221
14 Kugelpackungen. Metallstrukturen	222
14.1 Dichteste Kugelpackungen	222
14.2 Die kubisch-innenzentrierte Kugelpackung	227
14.3 Andere Metallstrukturen	228
14.4 Übungsaufgaben	230
15 Das Prinzip der Kugelpackungen bei Verbindungen	231
15.1 Geordnete und ungeordnete Legierungen	231
15.2 Dichteste Kugelpackungen bei Verbindungen	233
15.3 Das Prinzip der kubisch-innenzentrierten Kugelpackung bei Verbindungen (CsCl-Typ)	235
15.4 Hume-Rothery-Phasen	237
15.5 Laves-Phasen	239
15.6 Übungsaufgaben	242
16 Verknüpfte Polyeder	243
16.1 Eckenverknüpfte Oktaeder	246
16.2 Kantenverknüpfte Oktaeder	253
16.3 Flächenverknüpfte Oktaeder	256
16.4 Oktaeder mit gemeinsamen Ecken und Kanten	257
16.5 Oktaeder mit gemeinsamen Kanten und Flächen	261

16.6	Verknüpfte trigonale Prismen	263
16.7	Eckenverknüpfte Tetraeder. Silicate	263
16.8	Kantenverknüpfte Tetraeder	275
16.9	Übungsaufgaben	276
17	Kugelpackungen mit besetzten Lücken	277
17.1	Die Lücken in dichtesten Kugelpackungen	277
17.2	Einlagerungsverbindungen	283
17.3	Wichtige Strukturtypen mit besetzten Oktaederlücken in dichtesten Kugelpackungen	285
17.4	Perowskite	295
17.5	Besetzung von Tetraederlücken in dichtesten Kugelpackungen	299
17.6	Spinnelle	303
17.7	Übungsaufgaben	307
18	Symmetrie als Ordnungsprinzip für Kristallstrukturen	308
18.1	Kristallographische Gruppe-Untergruppe-Beziehungen	308
18.2	Das Symmetrieprinzip in der Kristallchemie	311
18.3	Strukturverwandtschaften durch Gruppe-Untergruppe-Beziehungen	312
18.4	Symmetriebeziehungen bei Phasenumwandlungen	321
18.5	Übungsaufgaben	326
19	Physikalische Eigenschaften von Festkörpern	328
19.1	Mechanische Eigenschaften	328
19.2	Piezo- und ferroelektrische Eigenschaften	330
19.3	Magnetische Eigenschaften	336
20	Nanostrukturen	349
21	Sprachliche und andere Verirrungen	356
	Literatur	361
	Lösungen zu den Übungsaufgaben	373
	Sachverzeichnis	378