

## 10 Verzeichnisse

### 10.1 Literatur

Die Literaturzitate sind nach Sachgebieten und Erscheinungsjahr geordnet und enthalten jeweils den Titel des Artikels, den (die) Autor(en) und die Quelle. Bei Zeitschriften folgt nach den Autoren der Band (unterstrichen), das Erscheinungsjahr (in Klammern) und die erste Seite des Artikels. Bei Büchern wird neben dem Titel des Buches auch der Herausgeber, der Verlag und das Erscheinungsjahr angegeben. Innerhalb des Textes wird die laufende Nummer des Literaturzitats in eckigen Klammern angegeben. Teilweise werden zusätzlich einer oder mehrere Autoren genannt.

### Gitterenergie, Madelung-Faktor und Bulk-Potentiale

- [1] Das elektrische Feld in Systemen von regelmäßig angeordneten Punktladungen  
**E. Madelung** Physik. Zeitschr. 19 (1918) 524
- [2] Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale  
**P.P. Ewald** Ann. Phys. 64 (1921) 253
- [3] On the Stability of Certain Heteropolar Crystals  
**H.M. Evjen** Phys. Rev. 39 (1932) 675
- [4] Lattice Sums for Ionic Crystals  
**F.C. Frank** Phil. Mag. 41 (1950) 1287
- [5] L'Énergie Électrostatique de Réseaux Ioniques  
**F. Bertaut** J. Phys. Radium 13 (1952) 499
- [6] Über Madelungfaktoren  
**R. Hoppe** Angew. Chem. 78 (1966) 52
- [7] Lattice Self Potentials and Madelung Constants for Some Compounds  
**W. van Gool, A.G. Piken** J. Mater. Sci. 4 (1969) 95, 105

- [8] Crystal Lattice Energy and the Madelung Constant  
**D. Quane**, *J. Chem. Educ.* 47 (1970) 396
- [9] Hydrogen Bond Studies  
**J. Almlöf, U. Wahlgren**, *Theoret. Chim. Acta* 28 (1973) 161
- [10] The Madelung Part of the Lattice Energy, MAPLE, as a Guide in Crystal Chemistry  
**R. Hoppe**, in *Crystal Structure and Chemical Bonding in Inorganic Chemistry*, Ed. by C.J.M. Rooymans, A. Rabenau, North-Holland Publishing Company, Amsterdam 1975, 127 ff.
- [11] Convergence of the Bertaut Series and the Calculation of the Electrostatic Energy of an Extended Crystalline Lattice  
**H.D.B. Jenkins, K.F. Pratt**, *Chem. Phys. Lett.* 62 (1979) 416
- [12] Lattice Sums  
**M.L. Glasser, I.J. Zucker**, in *Theoretical Chemistry : Advances and Perspectives* 5 (1980) 67
- [13] Computational Techniques and Simulation of Crystal Structures  
**C.R.A. Catlow**, in *Solid State Chemistry Techniques*, Ed. by A.K. Cheetham, P. Day, Clarendon Press, Oxford 1987, 231 ff.
- [14] Gitterenergieberechnungen zur Ermittlung der wahrscheinlichsten Strukturtypen für Verbindungen  $MX_6$   
**W. Willing, U. Müller**, *Acta Cryst. B* 44 (1988) 1
- [15] Acceleration of Convergence for Lattice Sums  
**N. Karasawa, W.A. Goddard III**, *Phys. Chem.* 93 (1989) 7320
- [16] Accelerated Convergence Treatment of  $R^n$  Lattice Sums  
**D.E. Williams**, *Cryst. Rev.* 2 (1989) 3, 163 (Korrektur)
- [17] Zur Berechnung von Gitterpotentialen in Kristallen und an Kristalloberflächen und deren Anwendung in der Strukturchemie  
**T. Beyer**, Diplomarbeit, Saarbrücken 1993

### Oberflächenenergien, -potentiale und -strukturen

- [18] Crystal Habit and Internal Structure  
**A.F. Wells**, *Phil. Mag.* 37 (1946) 217

- [19] Atomic Theory of Surface Energy  
**P.P. Ewald, H. Juretschke**, in Structure and Properties of Solid Surfaces, Ed. by R. Gomer, C.S. Smith, University of Chicago Press, Illinois 1953, 82 ff.
- [20] On the Relations between Structure and Morphology of Crystals I, II, III  
**P. Hartman, W.G. Perdock** Acta Cryst. 8 (1955) 49, 521, 525
- [21] Le Terme Électrostatique de l'Énergie de Surface  
**F. Bertaut** C.R. Acad. Sci. Paris 246 (1958) 3447
- [22] The Madelung Constants of Slices and Chains, with an Application to the CdI<sub>2</sub> Structure  
**P. Hartman** Acta Cryst. 11 (1958) 365
- [23] Direct Measurements of the Surface Energies of Crystals  
**J.J. Gilman** J. Appl. Phys. 31 (1960) 2208
- [24] Theory and Observation of Intrinsic Surface States on Ionic Crystals  
**J.D. Levine, P. Mark** Phys. Rev. 144 (1966) 751
- [25] Surface Madelung Potentials in Electron Spectroscopy  
**R.R. Slater**, Surf. Sci. 23 (1970) 403
- [26] Polar Surfaces of Wurtzite and Zincblende Lattices  
**R.W. Nosker, P. Mark, J.D. Levine** Surf. Sci. 19 (1970) 291
- [27] The Electrostatic Potential in the Surface Region of an Ionic Crystal  
**D.E. Parry**, Surf. Sci. 49 (1975) 433, Korrektur : 54 (1976) 195
- [28] Molecular Dynamics Computer Simulation of Surface Properties of Crystalline Potassium Chloride  
**D.M. Heyes, M. Barber, J.H.R. Clarke**, J. Chem. Soc. Faraday Trans. II 10 (1977) 1485
- [29] Bonding as Revealed by Crystal Morphology  
**G.A. Wolff**, in Intermetallic Compounds, Ed. by J.H. Westbrook, R.E. Krieger Publishing Company, Huntington, New York 1977, 85 ff.
- [30] A Simple Shell Model Calculation of Differential Ionic Relaxations at the (100) Surfaces of NaCl Structure Alkali Halides  
**M.R. Welton-Cook, M. Prutton** Surf. Sci. 64 (1977) 633
- [31] Atomic Geometry of Semiconductor Surfaces  
**C.B. Duke**, CRC: Crit. Rev. Solid State Mater. Sci. 8 (1978) 69

- [32] The Surface Energies, Surface Tensions and Surface Structure of the Alkali Halide Crystals  
**P.W. Tasker**, *Phil. Mag. A* 39 (1978) 119
- [33] The Stability of Ionic Crystal Surfaces  
**P.W. Tasker**, *J. Phys. C* 12 (1979) 4977
- [34] The Surface Properties of Uranium Dioxide  
**P.W. Tasker**, *Surf. Sci.* 78 (1979) 315
- [35] A Study of Madelung Potential Effects in the ESCA Spectra of the Metal Oxides  
**J.Q. Broughton, P.S. Bagus**, *J. Elec. Spec. Rel. Phen.* 20 (1980) 261
- [36] Determination of the Madelung Potential of Ionic Crystals with a Polar Surface by the Ewald Method  
**W.W. Lee, S. Choi**, *J. Chem. Phys.* 72 (1980) 6164
- [37] The Structure and Properties of Fluorite Crystal Surfaces  
**P.W. Tasker**, *J. Phys. C* 6 (1980) 488
- [38] Zur theoretischen Bestimmung stabiler Oberflächenstrukturen von Ionen- und partiell ionogenen Kristallen  
**E. Müller**, *Wiss. Ztschr. Friedrich-Schiller-Univ. Jena, Math.-Naturwiss. R.* 29 (1980) 761
- [39] Computer Simulation of Ionic Crystal Surfaces  
**P.W. Tasker**, in *Lecture Notes in Physics*, Vol. 166, *Computer Simulation of Solids*, Ed. by C.R.A. Catlow, W.C. Mackrodt, Springer Verlag Heidelberg-New York 1982, 288 ff.
- [40] A Simple Method to Evaluate the Coulomb Potential at the Polar Surface of an Ionic Crystal  
**W. Ebert, H.H. Kung**, *Chem. Phys. Lett.* 118 (1985) 203
- [41] Toward an Ab Initio Derivation of Crystal Morphology  
**Z. Berkovitch-Yellin**, *J. Am. Chem. Soc.* 107 (1985) 8239
- [42] Modelling the Morphology of Molecular Crystals  
**P. Docherty, K.J. Roberts**, *J. Cryst. Growth* 88 (1988) 159
- [43] Habit Changes of Lead Chloride,  $\text{PbCl}_2$ , Caused by Growth from Pure Aqueous Solution and the Effect of  $\text{KCl}$ ,  $\text{NH}_4\text{Cl}$ ,  $\text{CdCl}_2$  and  $\text{HCl}$  as Additives  
**M. van Panhuys-Sigler, P. Hartman, C.F. Woensdregt**, *J. Cryst. Growth* 87 (1988) 554

- [44] Structural Morphology of Cotunnite,  $\text{PbCl}_2$ , Laurionite,  $\text{Pb}(\text{OH})\text{Cl}$ , and  $\text{SbSI}$   
**C.F. Woensdregt, P. Hartman** *J. Cryst. Growth* 87 (1988) 561
- [45] Application of Bravais-Friedel-Donnay-Harker, Attachment Energy and Ising Models to Predicting and Understanding the Morphology of Molecular Crystals  
**R. Docherty, G. Clydesdale, K.J. Roberts, P. Bennema**, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 24 (1991) 89
- [46] An Ewald Summation Method for Planar Surfaces and Interfaces  
**J. Hautman, M.L. Klein** *Mol. Phys.* 75 (1992) 379
- [47] Computer Modelling of Inorganic Solids and Surfaces  
**S.C. Parker, E.T. Kelsey, P.M. Oliver, J.O. Titiloye**, *Faraday Discuss.* 95 (1993) 75
- [48] Hartman-Perdock Theory: Influence of Crystal Structure and Crystalline Interface on Crystal Growth  
**C.F. Woensdregt** *Faraday Discuss.* 95 (1993) 97
- [49] Surface Stress of Point Charge Lattices  
**D.M. Heyes** *Surf. Sci. Lett.* 293 (1993) L857
- [50] Pressure Tensor from Ewald-Kornfeld Coulomb Summations  
**D.M. Heyes** *Phys. Lett. A* 187 (1994) 273

### **Potentialflächen und Minimalflächen**

- [51] X-Ray Diffraction Studies of Echinoderm Plates  
**G. Donnay**, *Science* 166 (1969) 1147
- [52] Equilibrium Bicontinuous Structure  
**L.E. Scriven**, *Nature* 263 (1976) 123
- [53] A Bicontinuous Tetrahedral Structure in a Liquid-Crystalline Lipid  
**W. Longley, T.J. McIntosh** *Nature* 303 (1983) 612
- [54] Eine Beschreibung komplexer anorganischer Kristallstrukturen  
**S. Andersson**, *Angew. Chem.* 95 (1983) 67
- [55] The Intrinsic Curvature of Solids  
**S. Andersson, S.T. Hyde** *Z. Krist.* 168 (1984) 1

- [56] Periodische Äqui-Potentialflächen (PEPS)  
**R. Nesper, H.G. von Schnering**Z. Krist. 170 (1985) 138
- [57] On the Periodic Minimal Surfaces and the Conductivity Mechanism of  $\alpha$ -AgI  
**S. Andersson, S.T. Hyde, J.O. Bovin**Z. Krist. 173 (1985) 97
- [58] Periodic Minimal Surfaces  
**A.L. Mackay**, Physica B 131 (1985) 300
- [59] Periodic Minimal Surfaces  
**A.L. Mackay**, Nature 314 (1985) 604
- [60] Soap Films : The Amusement of Children and Mathematicians, in Mathematics and Optimal Form, Ed. by S. Hildebrandt, A. Tromba, Scientific American Library 1985, 91 ff.
- [61] Periodische Potentialflächen in Kristallstrukturen  
**R. Nesper, H.G. von Schnering**Angew. Chem. 98 (1986) 111
- [62] Äquipotentialflächen in Kristallen  
**H.G. von Schnering**Z. Krist. 174 (1986) 182
- [63] Die natürliche Anpassung von chemischen Strukturen an gekrümmte Flächen  
**H.G. von Schnering, R. Nesper**Angew. Chem. 99 (1987) 1097
- [64] On 3-Periodic Minimal Surfaces  
**W. Fischer, E. Koch**Z. Krist. 179 (1987) 31
- [65] Die periodischen Nullpotentialflächen  $I_2$ -Y<sup>\*\*</sup> und F-I, zwei neue Raumteiler kubischer Symmetrie  
**M. Oehme, R. Nesper, H.G. von Schnering**Z. Krist. 182 (1988) 201
- [66] Äquipotentialflächen für periodische Ladungsverteilungen  
**A.L. Mackay**, Angew. Chem. 100 (1988) 867
- [67] Minimal Surfaces and Structures: From Inorganic and Metal Crystals to Cell Membranes and Biopolymers  
**S. Andersson, S.T. Hyde, K. Larsson, S. Lidin**, Chem. Rev. 88 (1988) 221
- [68] Nullpotentialflächen und ihre Anwendung in der Kristallchemie  
**M. Oehme** Dissertation, Stuttgart 1989
- [69] Die Geometrie von Minimalflächen

- H. Karcher, K. Polthier** Spektrum der Wissenschaft 10 (1990) 96
- [70] The Curvature of Chemical Structures  
**H.G. von Schnering, R. Nesper** Coll. Phys. C 7 (1990) 383
- [71] Nodal Surfaces of Fourier Series: Fundamental Invariants of Structured Matter  
**H.G. von Schnering, R. Nesper** Z. Phys. B 83 (1991) 407
- [72] Die Krümmung chemischer Strukturen  
**H.G. von Schnering** Nova Acta Leopold. 277 (1991) 89
- [73] Three-Dimensional Periodic Nodal Surfaces which Envelope the Threefold and Fourfold Cubic Rod Packings  
**H.G. von Schnering, M. Oehme, G. Rudolf** Acta Chem. Scand. 45 (1991) 873
- [74] Abbildung elektrostatischer Potentiale muscarinischer und nicotinischer Agonisten mit künstlichen neuronalen Netzen  
**J. Gasteiger, X. Li** Angew. Chem. 106 (1994) 671

### Quantenmechanische Rechenverfahren

- [75] An Extended Hückel Theory  
**R. Hoffmann** J. Chem. Phys. 39 (1963) 1397
- [76] Linear Methods in Band Theory  
**O.K. Andersen** Phys. Rev. B 12 (1975) 3060
- [77] Die Begegnung von Chemie und Physik im Festkörper  
**R. Hoffmann** Angew. Chem. 99 (1987) 871
- [78] A Simple Measure of Electron Localization in Atomic and Molecular Systems  
**A.D. Becke, K.E. Edgecombe** J. Chem. Phys. 92 (1990) 5397
- [79] Ein neuer Blick auf die Elektronenlokalisierung  
**A. Savin, A.D. Becke, J. Flad, R. Nesper, H. Preuß, H.G. von Schnering** Angew. Chem. 103 (1991) 421
- [80] Kristallzucht, Gitterdynamik und elektronentheoretische Untersuchungen an Verbindungen niederwertiger Hauptgruppenelemente  
**F. Wagner** Dissertation, Saarbrücken 1993

- [81] Eindeutige Wirkungsbereiche in Kristallstrukturen am Beispiel aluminiumhaltiger intermetallischer Phasen  
**U. Häußermann, S. Wengert, R. Nesper**, *Angew. Chem.* 106 (1994) 2150
- [82] Classification of Chemical Bonds on Topological Analysis of Electron Localization of the Si(100) Surface  
**B. Silvi, A. Savin** *Nature* 371 (1994) 683
- [83] Visualization of Tight-Binding Calculations - The Electronic Structure and Electron Localization of the Si(100) Surface  
**T.F. Fässler, U. Häussermann, R. Nesper** *Chem. Eur. J.* 1 (1995) 625

### gemischte Zinnhalogenide

- [84] Recherches sur le Chloro-Iodure, le Bromo-Iodure et le Chloro-Bromure Stanneux  
**M.T. Karantassis** *C. R. Acad. Sci. Paris* 182 (1926) 134
- [85] Recherches sur le Chloro-Iodure, le Bromo-Iodure et le Chloro-Bromure Stanneux  
**M.T. Karantassis** *Ann. Chim. Paris* 8 (1927) 71
- [86] The Preparation and Properties of Tin(II) Chlorofluoride  
**W.H. Nebergall, G. Baseggio, J.C. Muhler**, *J. Am. Chem. Soc.* 76 (1954) 5353
- [87] The Mössbauer Effect in Tin(II) Compounds. Part VI. Spectra of Ternary Tin(II) Halides  
**J.D. Donaldson, B.J. Senior** *J. Chem. Soc. A* (1969) 2358
- [88] Synthesis and Physical Chemistry of Mixed Tin(II) Halides  
**N.A. Shestakova, E.M. Moroz, V.S. Grigor'eva, S.S. Batsanov**, *Russ. J. Inorg. Chem.* 16 (1971) 10
- [89] Preparation of Tin Bromide Chloride and Iodide Chloride with the Aid of Shock Compression  
**S.S. Batsanov, V.F. Lyakhova, E.M. Moroz**, *Russ. J. Inorg. Chem.* 16 (1971) 1233
- [90] Contribution à l'Étude des Solutions Solides entre les Bromures et les Iodures Stanneux et Stanniques  
**F. Thévet, C. Dagron** *Bull. Soc. Chim. Fr.* (1974) 2448

- [91] Cristallographie de quelques Fluorohalogénures de  $\text{Sn}^{\text{II}}$   
**A. Lari-Lavassani, C. Geneys, S. Vilminot, L. Cot**, C.R. Acad. Sci. Paris C 281 (1975) 535
- [92] Étude Structurale du Chlorofluorure d'Étain(II),  $\text{SnClF}$   
**C. Geneys, S. Vilminot, L. Cot**Acta Cryst. B 32 (1976) 3199
- [93] Étude Structurale de Fluorobromure d'Étain (II),  $\text{SnBr}_4\text{F}_6$   
**C. Geneys, S. Vilminot**Rev. Chim. Min. 14 (1977) 395
- [94] Description Partielle du Binaire Étain-Chlore. Contribution à l'Étude du Système Formé par l'Iodure et le Chlorure Stanneux  
**F. Thévet, C. Dagron** Bull. Soc. Chim. Fr. (1977) 1078
- [95] Étude du Système Formé par le Bromure et le Chlorure Stanneux  
**F. Thévet, C. Dagron, J. Flahaut**Bull. Soc. Chim. Fr. (1978) 455
- [96] Description Partielle du Binaire Étain-Fluor. Étude du Système Formé par l'Iodure et le Fluorure Stanneux  
**C. Dagron, J. Flahaut**C.R. Acad. Sci. Paris C 289 (1979) 337
- [97] Étude Structurale d'un Iodochlorure d'Étain(II) :  $\text{SnClI}$ . Comparaison avec les Halogénures Mixtes de  $\text{Sn}^{\text{II}}$  et  $\text{Pb}^{\text{II}}$   
**S. Vilminot, W. Granier, Z. Al Oraibi, L. Cot**, Acta Cryst. B 36 (1980) 1537
- [98] Étude du Système Formé par le Chlorure et le Fluorure Stanneux  
**F. Thévet, C. Dagron** C.R. Acad. Sci. Paris II 292 (1981) 1011
- [99] Contribution à l'Étude du Système Formé par le Bromure et le Fluorure Stanneux  
**F. Thévet, J. Rivet, J. Flahaut**C.R. Acad. Sci. Paris II 296 (1983) 1309

### Strukturdaten

- [100] Die Kristallstruktur von Bleibromid  $\text{PbBr}_2$   
**W. Nieuwenkamp, J.M. Bijvoet**Z. Krist. 84 (1933) 49
- [101] Über Thiohalogenide des dreiwertigen Antimons und Wismuts  
**E. Dönges**, Z. anorg. allg. Chem. 263 (1950) 112
- [102] Titan(III)-oxychlorid  
**H. Schäfer, F. Wartenpfehl, E. Weise**, Z. anorg. allg. Chem. 295 (1958) 268

- [103] The Crystal Structure of  $\text{SnCl}_2$   
**J.M. van den Berg** Acta Cryst. 14 (1961) 1002
- [104] A Tetragonal Form of Zirconium Oxide Sulfide,  $\text{ZrOS}$   
**F. Jellinek** Acta Chem. Scand. 16 (1962) 791
- [105] Crystal Structures  
**R.W.G. Wyckoff**, University of Arizona, Second Edition, Volume 1-3,  
Interscience Publishers 1963
- [106] Structure Cristalline de l'Oxychlorure de Gallium, Nouveau Type du  
Genre MOX  
**A. Hardy, A.-M. Hardy** C.R. Acad. Sci. Paris 256 (1963) 3477
- [107] The Crystal Structure of Barium Chloride, Barium Bromide and Barium  
Iodide  
**E.B. Brackett, T.E. Brackett, R.L. Sass** J. Phys. Chem. 67 (1963) 2132
- [108] The Crystal Structure of Lead Chloride  
**R.L. Sass, E.B. Brackett, T.E. Brackett** J. Phys. Chem. 67 (1963) 2863
- [109] AB Compounds with Sc, Y and Rare Earth Metals  
**O. Schob, E. Parthé** Acta Cryst. 19 (1965) 214
- [110] Atomic Parameters in Ferroelectric  $\text{SbSI}$   
**Y. Oka, A. Kikuchi, T. Mori, E. Sawaguchi** J. Phys. Soc. Japan 21  
(1966) 405
- [111] CrB-Type Equiatomic Compounds of Europium, Ytterbium and Alkaline-  
Earth Metals with Si, Ge, Sn, Pb  
**F. Merlo, M.L. Fornasini** J. Less-Common Met. 13 (1967) 603
- [112] Neutron Diffraction Investigation of Orthorhombic Lead(II) Fluoride  
**P. Boldrini, B.O. Loopstra** Acta Cryst. 22 (1967) 744
- [113] The Crystal Structure of  $\text{MoCoB}$  and Related Compounds  
**W. Jeitschko** Acta Cryst. B 24 (1968) 930
- [114] The Crystal Structure of Some Mixed Halides of Lead  
**J. Goodyear, S.A.D. Ali, W.J. Duffin** Acta Cryst. B 25 (1969) 796
- [115] Uran-Nitrid-Chlorid, -Bromid und -Iodid  
**R. Juza, W. Meyer** Z. anorg. allg. Chem. 366 (1969) 43
- [116] Structure Cristalline du Sulfo-Iodure de Cérium  $\text{CeSI}$   
**J. Étienne** Bull. Soc. Fr. Minér. Crist. 92 (1969) 134

- [117] The Crystal Structure of Stoichiometric Yttrium Oxyfluoride, YOF  
**A.W. Mann, D.J.M. Bevan** Acta Cryst. B 26 (1970) 2129
- [118] Les Structures Type PbFCl ( $EO_I$ ) et Type Anti- $Fe_2As$  (C38) des Composés Ternaires à Deux Anions MXY  
**J. Flahaut** J. Solid State Chem. 9 (1974) 124
- [119] The Crystal Structure of Tin(II) Bromide  
**J. Andersson** Acta Chem. Scand. A 29 (1975) 956
- [120] Structural Chemistry of Layer-Type Phases  
**F. Hulliger**, in Physics and Chemistry of Materials with Layered Structures, Vol. 5, Ed. by F. Lévy, D. Reidel Publishing Company 1976
- [121] Calcium Hydride and Deuteride Studied by Neutron Diffraction and NMR  
**A.F. Andresen, A.J. Maeland, D. Slotfeldt-Ellingsen**, J. Solid State Chem. 20 (1977) 93
- [122] Refinement of the PbFCl Types BaFI, BaFBr and CaFCl  
**B.W. Liebich** Acta Cryst. B 33 (1977) 2790
- [123] The Preparation and Structural Properties of Trivalent Lanthanide and Actinide Oxide Iodides  
**D. Brown, L. Hall, C. Hurtgen, P.T. Moseley**, J. Inorg. Nucl. Chem. 39 (1977) 1464
- [124] Die Verfeinerung der Kristallstrukturen von YbFCl, SmFCl, SrFBr und BaFBr  
**H.P. Beck**, Z. anorg. allg. Chem. 451 (1979) 73
- [125] Tin(II)-Oxide : Structure Refinement and Thermal Expansion  
**J. Pannetier, G. Denes** Acta Cryst. B 36 (1980) 2763
- [126] Filiation Structurale des Composés de Formule Générale  $AB_2$ : Étude Comparée des Types  $Co_2Si$ ,  $Co_2P$ ,  $PbCl_2$  et  $SbSI$   
**J. Flahaut, F. Thévet** J. Solid State Chem. 32 (1980) 365
- [127] Gmelin Handbook of Inorganic Chemistry, 8th Edition, U Supplement Vol. C13 : Compounds with Si, Springer Verlag Berlin-Heidelberg-New York-Tokyo 1983
- [128] A Structure Refinement of the High Pressure Modification  $Ba_2H$   
**H.P. Beck**, J. Solid State Chem. 47 (1983) 328
- [129] Die Verfeinerung der Kristallstrukturen von  $CaHCl$ ,  $SrHCl$ ,  $BaHCl$ ,  $BaHBr$  und  $BaHI$

- H.P. Beck, A. Limmer**Z. anorg. allg. Chem.502 (1983) 185
- [130] Zur Hochdruckpolymorphie der Seltenerdsulfidiodide LnSI  
**H.P. Beck, C. Strobel**Z. anorg. allg. Chem.535 (1986) 229
- [131] Zur Kristallchemie von Verbindungen mit PbCl<sub>2</sub>-Struktur  
**P. Trübenbach** Diplomarbeit, Erlangen-Nürnberg 1986
- [132] Crystal Structure of Barium Hydride, Determined by Neutron Diffraction Experiments on Barium Deuteride  
**W. Bronger, S. Chi-Chien, P. Müller**, Z. anorg. allg. Chem. 545 (1987) 69
- [133] Bindungsverhältnisse in den kristallinen Phasen von Cäsiumhydroxid und -deuterohydroxid, CsOH und CsOD  
**H. Jacobs, B. Mach, B. Harbrecht**Z. anorg. allg. Chem.544 (1987) 55
- [134] Hochdruckpulverdiffraktometrie an Fluoridhalogeniden des PbFCl-Strukturtyps  
**R. Haberkorn** Dissertation, Erlangen-Nürnberg 1988
- [135] Notiz zur Kenntnis der roten Monohalogenide des Indiums, InX (X = Cl, Br, I)  
**G. Meyer, T. Staffel**Z. anorg. allg. Chem.574 (1989) 114
- [136] Die Verfeinerung der Kristallstruktur von ThOTe  
**H.P. Beck, W. Dausch**Z. anorg. allg. Chem.571 (1989) 162
- [137] Über Chalkogenidhalogenide des Chroms : Synthese, Kristallstruktur und Magnetismus von Chromsulfidbromid, CrSBr  
**J. Beck**, Z. anorg. allg. Chem.585 (1990) 157
- [138] Hochdruck- und Hochtemperaturverhalten von Verbindungen aus der TII-Strukturfamilie  
**G. Lederer**, Dissertation, Erlangen-Nürnberg 1992
- [139] Alternative Descriptions of the C23 (PbCl<sub>2</sub>), C37 (Co<sub>2</sub>Si), B8<sub>b</sub> (Ni<sub>2</sub>In) and Related Structure Types  
**B.G. Hyde, M.O. O'Keeffe, W.M. Lyttle, N.E. Brese**, Acta Chem. Scand. 46 (1992) 216
- [140] DySBr und DySI - Synthese, Kristallstruktur und Magnetismus  
**G. Kleef, H. Schilder, H. Lueken**Z. anorg. allg. Chem.621 (1995) 963
- [141] Die Kristallstrukturverfeinerung von  $\gamma$ -US<sub>2</sub> und  $\gamma$ -USE<sub>2</sub>  
**H. Kohlmann** Persönliche Mitteilung 1995

### Verschiedenes

- [142] A Scale of Electronegativity Based on Electrostatic Force  
**A.L. Allred, E.G. Rochow** *J. Inorg. Nucl. Chem.* 5 (1958) 264
- [143] Error Function and Fresnel Integrals  
**M. Abramowitz, I.A. Stegun**, in *Handbook of Mathematical Functions*,  
Dover Publications, New York 1964, 297 ff.
- [144] Die Natur der Chemischen Bindung  
**L. Pauling** Verlag Chemie, Weinheim 1968
- [145] Effective Ionic Radii in Oxides and Fluorides  
**R.D. Shannon, C.T. Prewitt** *Acta Cryst. B* 25 (1969) 925
- [146] Stéréochimie des Éléments Comportant des Paires Non Liées  
**J. Galy, G. Meunier, S. Andersson, A. Åström**, *J. Solid State Chem.* 13  
(1975) 142
- [147] Effective Coordination Numbers (ECoN) and Mean Fictive Ionic Radii  
(MEFIR)  
**R. Hoppe** *Z. Krist.* 156 (1979) 23
- [148] *International Tables for Crystallography, Volume A : Space Group  
Symmetry*, Ed. by T. Hahn, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht,  
Holland 1983
- [149] Einführung in die Kristallographie  
**W. Kleber**, Hrsg. H.-J. Bausch, J. Bohm, I. Kleber, 17. Aufl., Verlag  
Technik GmbH Berlin 1992
- [150] Die Stabilisierung ungewöhnlicher Substanzklassen durch  $n\bar{s}$ -Ionen  
**H.P. Beck**, in *DFG-Forschungsbericht 1992*, VCH Weinheim 1992

### Computerprogramme

- [151] SAMPLE : Programm zur Verfeinerung von Gitterkonstanten anhand indi-  
zierter Reflexlagen  
**R. Haberkorn** Dissertation, Erlangen-Nürnberg 1988
- [152] Microsoft ® FORTRAN Optimizing Compiler, Version 4.10, Copyright ©  
1987, 1988, Microsoft Corp.

- [153] MIPS FORTRAN Compiler, © Copyright 1991, Silicon Graphics, Inc.
- [154] C-Compiler, © Copyright 1991, AT&T and UNIX System Laboratory, Inc.
- [155] IBM Visualization DATA EXPLORER, © International Business Machines Corp. 1991, 1992
- [156] SCHAKAL 92/V 256, A Fortran Program for the Graphical Representation of Molecular and Crystallographic Models  
Copyright © 1992, Albert-LudwigsUniversität Freiburg
- [157] TOP92 : Programm zur Darstellung von ELF- und Elektronendichtediagrammen auf einem PC  
**F. Wagner**, Dissertation, Saarbrücken 1993
- [158] EHMACC : Extended Hückel Molecular and Crystal Calculations  
Chicago-Cornell-Zürich-Stuttgart-Version
- [159] LMTO-45, **M. van Schilfgaarde, T.A. Paxton, O. Jepsen, O.K. Anderson**, Max Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart 1994
- [160] COLTURE Version 1.1, Three Dimensional Colour Structure Display and Structure Investigating Program Package  
**R. Nesper, P. Hofmann**, Laboratorium für Anorganische Chemie, ETH Zürich 1993
- [161] WYRIET, Version 3.0, Rietveld Structure Refinement Package, Copyright © 1993, **M. Schneider** EDV-Vertrieb, D-82343 Pöcking, Germany

## 10.2 Abbildungen und Tabellen

### Abbildungsverzeichnis :

Abb. 2.1 : Unterschied zwischen Allo-Potential und Meso-Potential	11
Abb. 2.2 : Definition von MAPSE	22
Abb. 2.3 : Oberflächenklassifizierung nach elektrostatischen Gesichtspunkten	28
Abb. 2.4 : mögliche Kristallformen bei der Kristallklasse 4/mmm	28
Abb. 2.5 : Relaxation von Kristalloberflächen	29
Abb. 2.6 : Beispiele für Periodische Minimalflächen (PMS)	42
Abb. 4.1 : Rietveld-Verfeinerung von SnFCl	52
Abb. 4.2 : Koordinationspolyeder des Zinns in SnFCl	54
Abb. 4.3 : Phasendiagramm SnF-SnBr <sub>2</sub> nach Thévet	56
Abb. 4.4 : erweitertes Strukturfelddiagramm des PbCl <sub>2</sub> -Typs nach Jeitschko	58
Abb. 5.1 : POPS-Topologie bei einigen einfachen Strukturtypen	61
Abb. 5.2 : Reichweite von Epi-Meso-Potentialen in Typ I-Oberflächen von NaCl	70
Abb. 5.3 : Reichweite von Epi-Meso-Potentialen in rekonstruierten Oberflächen von NaCl	70
Abb. 5.4 : Potentialtopologie in einigen stabilen Kristalloberflächen	72
Abb. 5.5 : Der PbFCl-Strukturtyp	74
Abb. 5.6 : aktualisiertes Strukturfelddiagramm des PbFCl-Strukturtyps nach Flahau	75
Abb. 5.7 : POPS-Topologie beim PbFCl-Strukturtyp	79
Abb. 5.8 : Fluorid- und Hydridhalogenide im PbFCl-Typ	82
Abb. 5.9 : Oxidhalogenide im PbFCl-Typ	82
Abb. 5.10: Oxidchalkogenide im PbFCl-Typ	83
Abb. 5.11: Nitridhalogenide im PbFCl-Typ	83
Abb. 5.12: Die UPS-Familie des PbFCl-Typs	84
Abb. 5.13: Reichweite von Epi-Meso-Potentialen bei PbFCl	90
Abb. 5.14: Der FeOCl-Strukturtyp	92
Abb. 5.15: POPS-Topologie beim FeOCl-Strukturtyp	94
Abb. 5.16: reduzierte partielle Madelung-Faktoren ( $PM_{ij}^*$ ) beim FeOCl-Typ	95
Abb. 5.17: Der PbCl <sub>2</sub> -Strukturtyp am Beispiel von SnFCl	97
Abb. 5.18: POPS-Topologie beim PbCl <sub>2</sub> -Strukturtyp	99

Abb. 5.19: Reichweite von Epi-Meso-Potentialen bei $\text{SnCl}_2$	104
Abb. 5.20: Der TII-Strukturtyp	106
Abb. 5.21: POPS-Topologie beim TII-Strukturtyp	107
Abb. 5.22: reduzierte partielle Madelung-Faktoren ( $\text{PM}_i^*$ ) beim TII-Typ	108
Abb. 5.23: POPS-Topologie bei verschiedenen Strukturtypen	111
Abb. 6.1 : Schnitt durch die $\text{PbCl}_2$ -Struktur für ELF-Berechnungen	113
Abb. 6.2 : ELF-Berechnungen an $\text{Sn(II)}$ -Verbindungen im $\text{PbCl}_2$ -Typ	116
Abb. 6.3 : ELF-Berechnungen an $\text{Pb(II)}$ -Verbindungen im $\text{PbCl}_2$ -Typ	119
Abb. 6.4 : Schnitte für ELF-Berechnungen im $\text{PbFCl}$ -Strukturtyp	121
Abb. 6.5 : ELF-Berechnungen an Bleifluoridhalogeniden im $\text{PbFCl}$ -Typ	123
Abb. 6.6 : $c/a$ -Verhältnisse bei Fluoridhalogeniden im $\text{PbFCl}$ -Typ	124
Abb. 6.7 : Koordinationspolyeder von Bleifluoridhalogeniden im $\text{PbFCl}$ -Typ auf der Basis eines Hartkugelmodells	125
Abb. 6.8 : ELF-Berechnungen an Zinn(II)-oxid und rotem Blei(II)-oxid	126
Abb. 6.9 : ELF-Berechnungen an Wismutoxidhalogeniden im $\text{PbFCl}$ -Typ	129
Abb. 6.10: Vergleich von PEPS- und ELF-Schnitten am Beispiel von $\text{SnFCl}$	131
Abb. 6.11: "Mapping" von ELF auf POPS bzw. PEPS am Beispiel von $\text{PbFCl}$	133
Abb. 9.1 : Dateinamen des Programmpakets COUPOT	142
Abb. 9.2 : Auswahlmenü des Programms COUPOT	143
Abb. 9.3 : Format der Input-Dateien in COUPOT	143
Abb. 9.4 : Input-Datei für $\text{CaF}_2$	144
Abb. 9.5 : Input-Datei für Berechnungen in der (110)-Oberfläche von Fluorit	146
Abb. 9.6 : Bildschirmausgabe des Programms POTAT für Fluorit	147
Abb. 9.7 : Ausgabedatei des Programms POTAT für Fluorit	148
Abb. 9.8 : Ausgabedatei des Programms POTXX für Fluorit	149
Abb. 9.9 : Ausgabedatei des Programms PARAT für Fluorit (110)	151
Abb. 9.10: Ausgabedatei des Programms PARAT für Fluorit (110)	151
Abb. 9.11: Bildschirmausgabe des Programmteils EPIAT	152
Abb. 9.12: Ausgabedatei des Programms EPIAT für die (110)-Fläche von Fluorit	153
Abb. 9.13: Summationsbereich beim Parry-Heyes-Algorithmus	163
Abb. 9.14: Die komplementäre Fehler-Funktion $\text{cerf}(x)$	169

**Tabellenverzeichnis :**

Tab. 4.1	: Strukturdaten der bekannten gemischten Zinnhalogenide	49
Tab. 4.2	: Atomlagen von gemischten Zinnhalogeniden im PbCl <sub>2</sub> -Typ	49
Tab. 4.3	: Parameter der Rietveld-Verfeinerung von SnFCl	53
Tab. 4.4	: Vergleich verschiedener Strukturbestimmungen von SnFCl	54
Tab. 4.5	: ECoN-Berechnungen an SnFCl	55
Tab. 4.6	: Vergleich der Gittermetrik von SnFCl, SnCl <sub>2</sub> und SnF <sub>2</sub>	57
Tab. 5.1	: MAPLE-Berechnungen an einfachen Strukturtypen (AB, A <sub>2</sub> B <sub>3</sub> )	64
Tab. 5.2	: Volumina der Potentialräume bei einfachen Strukturtypen	65
Tab. 5.3	: MAPSE-Berechnungen an NaCl und CaF <sub>2</sub>	67
Tab. 5.4	: Reichweite von Epi-Potentialen am Beispiel des NaCl	69
Tab. 5.5	: Volumina der Potentialräume beim PbFCl <sub>2</sub> -Typ	77
Tab. 5.6	: Anzahl der Vertreter der einzelnen POPS-Typen beim PbFCl <sub>2</sub> -Typ und seinen Strukturzweigen	80
Tab. 5.7	: POPS-Typ der Vertreter des BiOCl <sub>2</sub> -Zweigs	81
Tab. 5.8	: Anzahl der Vertreter der einzelnen POPS-Typen beim PbFCl <sub>2</sub> -Typ und seinen Strukturzweigen bei Änderung der Ladungsverhältnisse	85
Tab. 5.9	: MAPSE-Berechnungen an BaHBr, PbFCl <sub>2</sub> und PbFI	88
Tab. 5.10	: MAPSE-Berechnungen an TmOI und BiOF	89
Tab. 5.11	: POPS-Topologie der Vertreter des FeOCl <sub>2</sub> -Strukturtyps	93
Tab. 5.12	: POPS-Topologie der Vertreter des PbCl <sub>2</sub> -Strukturtyps	98
Tab. 5.13	: Volumina der Potentialräume beim PbCl <sub>2</sub> -Typ	100
Tab. 5.14	: MAPSE-Berechnungen an SnFCl	101
Tab. 5.15	: MAPSE-Berechnungen an PbCl <sub>2</sub>	102
Tab. 5.16	: MAPSE-Berechnungen an SbSI	103
Tab. 5.17	: POPS-Topologie der Vertreter des TII-Strukturtyps	108
Tab. 5.18	: Volumina der Potentialräume beim TII-Typ	109
Tab. 5.19	: reduzierte partielle Madelung-Faktoren (PMF <sup>*</sup> ) verschiedener Strukturtypen	112
Tab. 5.20	: Volumina der Potentialräume bei verschiedenen Strukturtypen	112
Tab. 6.1	: Strukturdaten für die ELF-Berechnungen an Verbindungen des PbFCl <sub>2</sub> -Typs	120
Tab. 9.1	: Die Konvergenz von Potentialsummen am Beispiel verschiedener Aufstellungen der CsCl-Struktur	161

---

Tab. 9.2 : Transformationsmatrizen und Determinanten für Oberflächen- berechnungen	166
Tab. 9.3 : Indizierung der Verbindung SnFCl	191
Tab. 9.4 : Indizierung der Verbindung SnFI	192

### **10.3 Abkürzungen und Variablen**

#### **Abkürzungen:**

Allo-Potential	: Potential am Ort eines Ions
Meso-Potential	: Potential auf einem Zwischengitterplatz
Epi-Potential	: oberflächenspezifischer Potentialanteil
MAPLE	: Madelung Part of Lattice Energy
MAPSE	: Madelung Part of the Surface Energy
MF	: Madelung-Faktor
MF <sup>*</sup>	: reduzierter Madelung-Faktor
PMF	: partieller Madelung-Faktor
PMF <sup>*</sup>	: reduzierter partieller Madelung-Faktor
PMS	: Periodic Minimal Surface
POPS	: Periodic Zero Potential Surface
PEPS	: Periodic Equi-Potential Surface
PNS	: Periodic Nodal Surface
PK	: Punktkonfiguration
PBC	: Periodic Bond Chain
EN	: Elektronegativität
KZ	: Koordinationszahl
ECoN	: Effective Coordination Number
MEFIR	: Mean Fictive Ionic Radius

**Variablen :**

Vektoren werden im Unterschied zu Skalaren fett gedruckt und mit einem Pfeil versehen. Matrizen werden fettgedruckt und doppelt unterstrichen. Größen im reziproken Gitter werden durch einen hochgestellten Stern (\*) gekennzeichnet.

$l_1, l_2, l_3$	: Laufindizes
$a, b, c$	: Gitterkonstanten
$\alpha, \beta, \gamma$	: Gitterwinkel
$a^*, b^*, c^*$	: reziproke Gitterkonstanten
$V$	: Volumen der Elementarzelle
$K$	: Trennstelle in den Ewald- bzw. Parry-Heyes-Formeln
$N$	: Anzahl der Atome pro Elementarzelle
$\kappa$	: Anzahl der Formeleinheiten pro Elementarzelle
$e$	: Elementarladung
$\epsilon_0$	: elektrische Feldkonstante
$N_A$	: Avogadro-Zahl
$q_i, q_j$	: Ladung des Ions $i$ bzw. $j$
$r_{ij}$	: Abstand der Ionen $i$ und $j$
$E_C$	: Madelung-Anteil der Gitterenergie (MAPLE)
$E_S$	: Madelung-Anteil der Oberflächenenergie (MAPSE)
$E$	: Coulomb-Energie eines Ionenpaares
$\varphi(\vec{x})$	: Gitterpotential in der CGS-Einheit ( $\text{\AA}^{-1}$ )
$\phi(\vec{x})$	: Gitterpotential in der SI-Einheit (V)
$\Phi_{\text{Bulk}}$	: Gitterpotential im Bulk
$\Phi_{\text{Surf}}$	: Gitterpotential in Kristalloberflächen
$\Phi_{\text{Epi}}$	: oberflächenspezifischer Anteil des Gitterpotentials
$\omega$	: Quotient aus $\Phi_{\text{Surf}}$ und $\Phi_{\text{Bulk}}$ an einem Atomort
$A = a \cdot b \cdot \sin(\gamma)$	: Fläche der Elementarmasche in der berechn. Oberfläche
$\vec{x} = (x, y, z)$	: Ortsvektor eines beliebigen Gitterpunktes
$\vec{x}_s = (x_s, y_s, z_s)$	: Ortsvektor des Atoms $s$ in der Elementarzelle
$\vec{n}$	: Oberflächennormale
$\vec{d} = l_1 \vec{a} + l_2 \vec{b} + l_3 \vec{c}$	: Gittervektor im direkten Raum
$\vec{r} = \vec{x}_s - \vec{x} + \vec{d}$	: Abstandsvektor im direkten Raum
$\vec{x}_{l_3} = \vec{x}_s + l_3 \vec{c}$	: Ortsvektor eines Atoms in $\vec{c}$ -Richtung

$\vec{\vartheta} = \vec{x}_s - \vec{x} + l_3 \vec{c}$	: Abstandsvektor in $\vec{c}$ -Richtung
$\lambda =  \vec{n} \cdot \vec{\vartheta} $	: Betrag der Komponente des Vektors $\vec{\vartheta}$ in $\vec{c}^*$ -Richtung
$\vec{\rho} = \vec{\vartheta} - \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{\vartheta})$	: Komponente des Vektors $\vec{\vartheta}$ senkrecht zum Vektor $\vec{c}^*$
$\vec{d}^* = l_1 \vec{a}^* + l_2 \vec{b}^* + l_3 \vec{c}^*$	: reziproker Gittervektor
$\vec{\delta}^* = l_1 \vec{a}^* + l_2 \vec{b}^*$	: reziproker Gittervektor in der $(a^*, b^*)$ -Ebene
$\vec{\sigma}^* = \vec{\delta}^* - \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{\delta}^*)$	: Komponente des Vektors $\vec{\delta}^*$ senkrecht zum Vektor $\vec{c}^*$
$\tau^* = \vec{n} \cdot \vec{\delta}^*$	: Komponente des Vektors $\vec{\delta}^*$ in $\vec{c}^*$ -Richtung
erf(x)	: Fehler-Funktion
erfc(x)	: komplementäre Fehler-Funktion
$p_i$	: Zähligkeit der Punktlage i
R	: Referenzlänge zur Definition des Madelung-Faktors
Z	: Elementarzellvergrößerung bei Gittertransformationen
$\mu$	: Dipolmoment senkrecht zur Kristalloberfläche
$\Delta EN_{M-X}$	: Betrag der Elektronegativitätsdifferenz zwischen den Elementen M und X
$q_X^*, q_X'$	: korrigierte Ionenladung von X (vgl. Kap. 2.2.3)
ELF( $\vec{x}$ )	: Wert der Elektronenlokalisierungsfunktion am Ort $\vec{x}$
$\rho(\vec{x})$	: Elektronendichte am Ort $\vec{x}$
$D(\vec{x})$	: Krümmung der Zweiteilchendichte für Elektronen gleichen Spins Ort $\vec{x}$
$D_h(\rho(\vec{x}))$	: entsprechender D-Wert des homogenen Elektronengases mit der Dichte $\rho$
$\vec{d}_e$	: Vektor vom Mittelpunkt des Kations in Richtung der maximalen Dichte bzw. Lokalisierung des lone-pairs
$\vec{d}_i(M-X)$	: Abstandsvektor zwischen den Atomen M und X
$\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$	: Nullpunktverschiebung bei Gittertransformationen
$\vec{u}, \vec{v}, \vec{w}$	: Elementartranslationsvektoren
$\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}'$	: transformierte Gittervektoren
$x', y', z'$	: transformierte Atomlagen
$\vec{t}$	: Netzebenenvektor bei Gittertransformationen
$\underline{\underline{P}}$	: Transformationsmatrix
$\underline{\underline{Q}}$	: inverse Matrix der Transformationsmatrix