

Inhalt

1	Einleitung	5
2	Verwendete Methoden	10
2.1	Präparative Methoden	10
2.1.1	Edukte	10
2.1.2	Darstellung der Verbindungen	10
2.1.3	Darstellung der Einkristalle	12
2.1.4	Kristallbearbeitung	16
2.2	Charakterisierungsmethoden	18
2.2.1	Röntgenographische Methoden	18
2.2.2	Metallographie	22
2.2.3	Elektronenmikroskopie	23
2.2.4	Dynamische Differenzkalorimetrie	24
2.2.5	Element-Analysen	25
2.2.6	Raman-Spektroskopie	25
2.2.7	Hall-Messungen	27
2.2.8	Dichtebestimmung	28
2.3	Quantenchemische Berechnungen	28
2.3.1	LMTO-Berechnungen	29
2.3.2	LAPW-Berechnungen	29
2.3.3	Eigenschaftsberechnungen	30

3	Untersuchungsergebnisse und chemische Bindung	33
3.1	CuAl₂	33
3.1.1	Darstellung	33
3.1.2	Bildungsbedingungen und Homogenitätsbereich	36
3.1.3	Physikalische Eigenschaften	40
3.1.4	Quantenchemische Berechnungen	50
3.1.5	Diskussion der chemischen Bindung	55
3.1.6	Zusammenfassung	65
3.2	Stannide	66
3.2.1	Darstellung	66
3.2.2	Bildungsbedingungen und Homogenitätsbereiche	70
3.2.3	Physikalische Eigenschaften	83
3.2.4	Quantenchemische Berechnungen	91
3.2.5	Diskussion der chemischen Bindung	98
3.2.6	Zusammenfassung	108
3.3	Antimonide	109
3.3.1	Darstellung	109
3.3.2	Bildungsbedingungen und Homogenitätsbereiche	112
3.3.3	Physikalische Eigenschaften	121
3.3.4	Quantenchemische Berechnungen	126
3.3.5	Diskussion der chemischen Bindung	132
3.3.6	Zusammenfassung	141

4	Zum Verständnis des CuAl₂-Strukturtyps	142
4.1	Vergleichende Betrachtungen	142
4.1.1	Topologie der chemischen Bindung	142
4.1.2	Art der chemischen Bindung	144
4.1.3	Stärke der chemischen Bindung	148
4.2	Allgemeine Betrachtungen zum CuAl₂-Strukturtyp	150
5	Zusammenfassung	153
6	Ausblick	156
7	Anhang	157
7.1	Verwendete Chemikalien	157
7.2	Abkürzungsverzeichnis	158
8	Literatur	159
	Danksagung	189
	Versicherung	191
	Lebenslauf	192