Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung 1

2 Strukturverwandtschaften bei Elpasolithen 5

2.1 Einleitung 5

2.2 Erläuterungen zu Stammbaum 1 16

2.3 Beschreibung der Glazer-Symbole 20

2.4 Erläuterungen zu im Stammbaum aufgeführten Verbindungen 21

2.5 Verdrehung und Verzerrung der MX_6-Oktaeder beim Symmetrieabbau am Beispiel von Gold(I)-Gold(III)-Elpasolithen 23

3 Heliotypen der hexagonal-dichtesten Kugelpackung mit der Zellvergrößerung 2a · b, b, 2c 27

3.1 Randbedingungen für Stammbaum 2 27

3.2 Berechnung der Anzahl möglicher Strukturtypen für Stammbaum 2 37

3.3 Bekannte Vertreter und Ableitung möglicher Strukturtypen in Stammbaum 2 42

3.3.1 Bekannte Vertreter in Stammbaum 2 42

3.3.2 Der 1(Nr.) Strukturtyp 45

3.3.3 Vorhersage möglicher Strukturtypen in der Raumgruppe $G_1 = 3/2\,m\,m$ (33) 49

3.3.4 Vorhersage eines möglichen Strukturtyps in der Raumgruppe $G_2 = 3/2\,m\,1$ (12) 51

4 Hettotypen der hexagonal-dichtesten Kugelpackung mit der Zellvergrößerung 4a - 2b, 2b, c 56
4.1 Randbedingungen für Stammbaum 3 56
4.2 Berechnung der Anzahl möglicher Kristallstrukturtypen für Stammbaum 3 71
4.3 Diskussion bekannter Verbindungen und Vorhersage möglicher Strukturtypen in Stammbaum 3 83
4.3.1 Die Kristallstruktur des Chrysoberyll 83
4.3.2 Strukturtypen, in denen die Hälfte der Oktaederlücken besetzt ist 89
4.3.3 Strukturtypen mit der Zusammensetzung AX_2 91

5 Hettotypen der doppelt-hexagonal-dichtesten Kugelpackung mit der Zellvergrößerung 2a, 2b, c 100
5.1 Randbedingungen zu Stammbaum 4 100
5.2 Berechnung der Anzahl möglicher Strukturtypen für Stammbaum 4 106
5.3 Bekannte Vertreter in Stammbaum 4 110
5.4 Diskussion bekannter und Vorhersage möglicher Strukturtypen in Stammbaum 4 114
5.4.1 Strukturvergleich der Verbindungen Cr_2YO_3 und Sn_2LiS_3 114
5.4.2 Möglicher Strukturtyp für die hypothetische Verbindung Zr_2Cl 119
5.4.3 Vorhersage möglicher Kristallstrukturtypen auf der Basis von K_2MnF_4 und K_2ReF_4 117
5.4.4 Möglicher Strukturtyp mit der Zusammensetzung $A_2^{+}Q_2^{+}[XY]Z_2$ in der Raumgruppe $G_2^{+}P_{6/m}^{+}$ (1861) 121
5.4.5 Vorhersage von Strukturtypen mit M_2X_2-Bauanalogen 123

6 Zusammenfassung und Ausblick 131

7 Literaturverzeichnis 133