

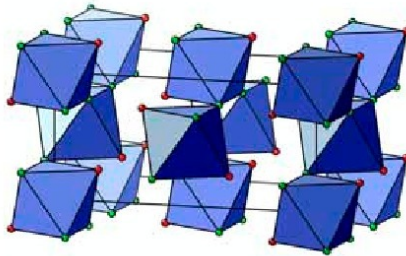


Oliver Bock (Autor)

Vorhersage von Kristallstrukturtypen mit Hilfe der Gruppentheorie

Oliver Bock

Vorhersage von Kristallstrukturtypen
mit Hilfe der Gruppentheorie



Cuvillier Verlag Göttingen

<https://cuvillier.de/de/shop/publications/3678>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,
Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung.....	1
2	Strukturverwandtschaften bei Flipsäulichen	5
2.1	Einleitung	5
2.2	Erläuterungen zu Stammbaum 1	14
2.3	Beschreibung der Glazer-Symbole	20
2.4	Erläuterungen zu im Stammbaum aufgeführten Verbindungen	21
2.5	Vergleich und Verzerrung der MX ₂ -Oktaeder (einf. Symmetrieabbau am Beispiel von $\text{TiCl}_2(\text{L-GoldIII})$ -Flipsäulichen)	23
3	Typen der hexagonal-dichtesten Kugelpackung mit der Zellvergrößerung $2a \times b, 2c$	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 im Stammbaum 2	42
3.3.1	Bekannte Vertreter im Stammbaum 2	42
3.3.2	Der UNIST-Strukturtyp	53
3.3.3	Vorhersage möglicher Strukturtypen der Raumgruppe $C_{2v} = P2_1/m1121$	59
3.3.4	Vorhersage möglicher Strukturtypen der Raumgruppe $C_{2h} = P2_1/m1121$	61

4	Typen der hexagonal-dichtesten Kugelpackung mit der Zellvergrößerung $4a$ - $2b$, $2b$, c	56
4.1	Randbedingungen für Stammraum 3	56
4.2	Berechnung der Anzahl möglicher Kristallstruktartypen für Stammraum 3	71
4.3	Diskussion bekannter Verbindungen und Vorhersage möglicher Struktartypen in Stammraum 3	83
4.4	Die Kristallstruktur des Chrysoberyll	83
4.4.1	Strukturtypen, in denen die Hälfte der Oktaederlücken besetzt ist	89
4.4.2	Strukturtypen mit einer Zusammensetzung AX_2	91
5	Typen der doppelt-hexagonal-dichtesten Kugelpackung mit der Zellvergrößerung $2a$, $2b$, c	100
5.1	Randbedingungen zu Stammraum 4	106
5.2	Berechnung der Anzahl möglicher Struktartypen für Stammraum 4	106
5.3	Bekannte Vertreter in Stammraum 4	110
5.4	Diskussion bekannter und Vorhersage möglicher Struktartypen in Stammraum 4	114
5.4.1	Strukturvergleich der Verbindungen U_2VO_8 mit $SnTeS_6$	114
5.4.2	Möglicher Strukturtyp für eine zirkonitische Verbindung $ZrSi_2$	116
5.4.3	Vorhersage möglicher Kristallstruktartypen auf der Basis von $X_2M_2O_8$ mit K, Rb	117
5.4.4	Möglicher Strukturtyp für die Zusammensetzung $A_2^{II}Q_2^{IV}X_2$ / Zr_2O_7 mit Raumgruppe C_2h / $P6_3/m$ / $I2/m$	121
5.4.5	Vorhersage von Struktartypen auf $M_2X_2O_8$ / Zr_2O_7	123
6	Zusammenfassung und Ausblick	131
7	Literaturverzeichnis	133