

Landolt-Börnstein

**Zahlenwerte und Funktionen
aus Naturwissenschaften und Technik**

**Numerical Data and Functional Relationships
in Science and Technology**

Neue Serie / New Series

Gruppe III / Group III

Band 7 / Volume 7

Kristallstrukturdaten anorganischer Verbindungen

Crystal Structure Data of Inorganic Compounds

Teil b 3 / Part b 3



Springer-Verlag Berlin · Heidelberg · New York

LANDOLT-BÖRNSTEIN

Numerical Data and Functional Relationships
in Science and Technology

New Series

Editor in Chief: K.-H. Hellwege

Group III: Crystal and Solid State Physics

Volume 7

Crystal Structure Data of Inorganic Compounds

Wolfgang Pies · Alarich Weiss

Part b

Key Elements O, S, Se, Te

b3: Key Elements S, Se, Te

Editors: K.-H. Hellwege and A.M. Hellwege



Springer-Verlag Berlin · Heidelberg · New York 1982

CIP-Kurztitelaufnahme der Deutschen Bibliothek

Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik/Landolt-Börnstein. – Berlin; Heidelberg; New York: Springer. Parallelt.: Numerical data and functional relationships in science and technology.

NE: Landolt, Hans [Begr.]; PT Landolt-Börnstein, ... N.S./Gesamthrg.: K.-H. Hellwege. Gruppe 3, Kristall- und Festkörperphysik. Bd. 7, Kristallstrukturdaten anorganischer Verbindungen/Wolfgang Pies; Alarich Weiss. Hrsg.: K.-H. Hellwege u. A.M. Hellwege. Teil b. Schlüsselemente O, S, Se, Te. 3. Schlüsselemente S, Se, Te. – 1982.

ISBN 3-540-11622-2 (Berlin, Heidelberg, New York)

ISBN 0-387-11622-2 (New York, Heidelberg, Berlin)

NE: Hellwege, Karl-Heinz [Hrsg.]; Pies, Wolfgang [Mitverf.]

This work is subject to copyright. All rights are reserved, whether the whole or part of the material is concerned specifically those of translation, reprinting, reuse of illustrations, broadcasting, reproduction by photocopying machine or similar means, and storage in data banks.

Under § 54 of the German Copyright Law where copies are made for other than private use, a fee is payable to the publisher, the amount of the fee to be determined by agreement with the publisher.

© by Springer-Verlag Berlin-Heidelberg 1982

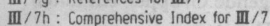
Printed in Germany

The use of registered names, trademarks, etc. in this publication does not imply, even in the absence of a specific statement, that such names are exempt from the relevant protective laws and regulations and therefore free for general use.

Typesetting, printing and bookbinding: Universitätsdruckerei H. Stürtz AG Würzburg

2163/3020 – 543210

Anordnung der Schlüsselemente in den Teilbänden III/7a...III/7f



Distribution of Substances

Volume III/5 Structure Data of Organic Crystals
(2 subvolumes)

This volume includes all organic compounds which contain the following groups:

C—H, C—C, C—X (where X = F, Cl, Br, I), C—NH₂, C=NH.

Carbides and acetylides are included in volume III/6.

Volume III/6 Structure Data of Elements and Intermetallic Phases

This volume includes elements and all those inorganic compounds which do *not* contain any of the elements F, Cl, Br, I, O, N and *cannot* be termed as organic compounds in the sense of volume III/5.

Volume III/7 Crystal Structure Data of Inorganic Compounds
(8 subvolumes)

This volume includes all inorganic compounds which contain *at least one* of the elements F, Cl, Br, I, O, N, P and *cannot* be termed as organic compounds in the sense of volume III/5.

Elements are included in volume III/6.

If in doubt consult alphabetical formula index in subvolume III/7h.

Volume III/8 Epitaxy Data of Inorganic and Organic Crystals

Epitactic systems of inorganic and organic crystals.

Volume III/10 Structure Data of Organic Crystals

Supplement and Extension to Volume III/5.

Volume III/14 Structure Data of Elements and Intermetallic Phases

Supplement to Volume III/6.

Aufteilung der Substanzen

Band III/5 Strukturdaten organischer Kristalle
(2 Teilbände)

Aufgenommen sind alle organischen Verbindungen, die folgende Gruppen enthalten:

C—H, C—C, C—X (mit X = F, Cl, Br, J), C—NH₂, C=NH.

Carbide und Acetylide sind in Band III/6 aufgenommen.

Band III/6 Strukturdaten der Elemente und intermetallischen Phasen

Aufgenommen sind Elemente und alle diejenigen anorganischen Verbindungen, die *nicht* eines der Elemente F, Cl, Br, J, O, N enthalten und *nicht* als organische Verbindungen im Sinn von Band III/5 gelten.

Band III/7 Kristallstrukturdaten anorganischer Verbindungen
(8 Teilbände)

Aufgenommen sind alle anorganischen Verbindungen, die *mindestens eines* der Elemente F, Cl, Br, J, O, N und P enthalten und die *nicht* als organische Verbindungen im Sinn von Band III/5 gelten. Elemente sind in Band III/6 aufgenommen.

In Zweifelsfällen siehe das alphabetische Formelverzeichnis, Teilband III/7h.

Band III/8 Epitaxie-Daten anorganischer und organischer Kristalle

Epitaktische Systeme anorganischer und organischer Kristalle.

Band III/10 Strukturdaten organischer Kristalle

Ergänzung und Erweiterung zu Band III/5.

Band III/14 Strukturdaten der Elemente und intermetallischen Phasen

Ergänzung zu Band III/6.

Vorwort

Im vorliegenden Teil III/7b3 des Bandes III/7 der Neuen Serie, „Kristallstrukturdaten anorganischer Verbindungen“, werden die Verbindungen mit den Schlüsselementen Schwefel, Selen und Tellur umfassend behandelt. Die Literatur wurde bis 1978 einschließlich ausgewertet. Die Daten für die Verbindungen mit dem Schlüsselement Sauerstoff sind bereits in den 1975 und 1980 erschienenen Teilen III/7b1 und III/7b2 veröffentlicht worden.

Der Begriff Schlüsselement ist in der Gesamt-Einleitung erklärt, die vom Teilband III/7a auch in diesen Band übernommen wurde.

Die vor 1972 erschienene Literatur ist schon im 1974 veröffentlichten Teilband III/7g („Literaturverzeichnis für III/7“) aufgeführt. Die von 1972 bis 1978 erschienene neue Literatur ist im vorliegenden Teil III/7b3 in Fußnoten bei den einzelnen Substanzen zitiert.

Ein Substanzenverzeichnis für den gesamten Band III/7 (Teilbände a, ..., f) wird als Teilband III/7h erscheinen.

Darmstadt, September 1982

Die Herausgeber

Preface

In the present part III/7b3 of volume III/7 of the New Series, "Crystal Structure Data of Inorganic Compounds", the compounds with the key elements sulfur, selenium and tellurium are treated exhaustively. The literature covers the period up to 1978. The data concerning the compounds with the key element oxygen have been already published in part III/7b1 and part III/7b2 which appeared in 1975 and 1980, respectively.

The definition of the term "key element" has been given in the introduction of sub-volume III/7a which is repeated here for the reader's convenience.

The literature covering the period before 1972 has been already listed in part III/7g ("References for III/7") which appeared in 1974. The literature published from 1972 until 1978 is cited in footnotes for the various substances of the present part.

An index of substances for the whole volume III/7 (subvolumes a, ..., f) will be published as subvolume III/7h.

Darmstadt, September 1982

The Editors

Introduction

1 Subject matter

The volume "Crystal Structure Data of Inorganic Compounds" contains structure data of inorganic substances, the crystal structures of which were examined by means of various diffraction techniques (X-ray diffraction, neutron diffraction and electron diffraction), and where at least the lattice constants have been determined. Additionally substances have been included, where isotypism with substances of well known crystal structure has been confirmed. The real structure of the crystals (dislocations, ...) was generally not taken into consideration.

As far as this volume III/7 is concerned, compounds which contain at least one of the elements

F, Cl, Br, I, O, N and P

and cannot be called "organic" in the sense of volume III/5 (that is, do not contain any of the following groups: C—H, C—C, C—X (with X=F, Cl, Br, I), C—NH₂ and C=NH) are considered to be "inorganic". This definition separates this volume also from volume III/6 "Structural Data of Elements and Intermetallic Phases".

2 Arrangement of the substances

The systematic arrangement of volume III/7 "Crystal Structure Data of Inorganic Compounds" is set by the anions ordered according to key elements. This system, in contrast to a purely alphabetical order, allows the arrangement of the crystal structure data in a way that chemical and crystallographical relationships can be taken into consideration.

The key elements have to be distinguished from the seven elements which are a necessary criterium for the selection of the compounds for this volume of "inorganic" crystal structures (F, Cl, Br, I, O, N, P). All elements of the periodic table can be key elements in the sense of this volume, if they form anions either by themselves or together with other elements. From this it follows that also F, Cl, ... and P are key elements. With simple anions there is no difficulty in finding the key element of the compound. For example, for NaCl chlorine, for Na₂S · 9H₂O sulphur and for KNH₂, Ca₂N₃ and NaN₃ nitrogen are the respective key elements.

Compounds with complex anions were dealt with as follows: With complex halides (and double halides) as well as oxo-compounds of the halogens (and of xenon) the respective "ligand", that is the halogen or the oxygen respectively, is the key element (e.g. chlorine in NaAlCl₄ and KCl · MgCl₂ · 6H₂O, oxygen in NaOCl · 5H₂O and H₂IO₆). Complex oxides or double oxides (apart from those of the halogens and of xenon) have the central atom or the cation with the highest oxidation state as key element. Examples: Li₂SO₄ has sulphur, BaCO₃ carbon, NaAlSi₃O₈ silicon and NaNbO₃ niobium as key element. In analogy to this, the key element of K₃PS₄ is phosphorus, of CuNH₄MoS₄ molybdenum and of K₂CS₃ · H₂O carbon. Compounds whose anions contain carbon

Einleitung

1 Abgrenzung des Gebietes

Der Band „Kristallstrukturdaten anorganischer Verbindungen“ enthält Strukturdaten anorganischer Substanzen, deren Kristallstrukturen mit Hilfe von Beugungsmethoden (Röntgenbeugung, Neutronenbeugung und Elektronenbeugung) untersucht wurden und von denen zumindest die Gitterkonstanten bestimmt sind. Außerdem wurden Substanzen aufgenommen, deren Isotypie mit Substanzen bekannter Kristallstruktur feststeht. Der Realbau der Kristalle (Versetzungen, ...) ist im Allgemeinen nicht berücksichtigt.

Als „anorganisch“ gelten im Sinne dieses Bandes III/7 alle Verbindungen, die mindestens eines der Elemente

F, Cl, Br, J, O, N und P

enthalten und nicht als „organisch“ im Sinn von Band III/5 gelten (d.h. die die folgenden Gruppen nicht enthalten: C—H, C—C, C—X (mit X=F, Cl, Br, J), C—NH₂ und C=NH). Durch diese Feststellung ist der vorliegende Band auch gegenüber Band III/6 „Strukturdaten der Elemente und intermetallischen Phasen“ abgegrenzt.

2 Anordnung der Substanzen

Die Systematik des Bandes III/7 „Kristallstrukturdaten anorganischer Verbindungen“ wird von den nach Schlüsselementen geordneten Anionen bestimmt. Dieses Prinzip erlaubt – im Gegensatz zu einer rein alphabetischen Reihenfolge – eine Anordnung der Kristallstrukturdaten, die chemische und kristallographische Verwandtschaften berücksichtigt.

Die Schlüsselemente sind zu unterscheiden von den sieben Elementen, die ein notwendiges Kriterium zur Aufnahme der Verbindungen in diesen „anorganischen“ Kristallstrukturband sind (F, Cl, Br, J, O, N, P). Alle Elemente des periodischen Systems können im Sinne dieses Bandes Schlüsselemente sein, soweit sie allein oder zusammen mit anderen Elementen Anionen bilden können. Daraus folgt, daß auch F, Cl, ... und P Schlüsselemente sind. Bei einfachen Anionen bereitet die Findung des Schlüsselements der Verbindung keine Schwierigkeit. So sind z.B. bei NaCl Chlor, bei Na₂S · 9H₂O Schwefel und bei KNH₂, Ca₂N₃ und NaN₃ Stickstoff die entsprechenden Schlüsselemente.

Verbindungen mit komplexen Anionen wurden wie folgt behandelt: Bei Halogenokomplexen (und Doppelhalogeniden) sowie bei den Oxoverbindungen der Halogene (und des Xenons) ist der entsprechende „Ligand“, also das Halogen bzw. der Sauerstoff, das Schlüsselement (z.B. Chlor in NaAlCl₄ und KCl · MgCl₂ · 6H₂O, Sauerstoff in NaOCl · 5H₂O und H₂JO₆). Komplexe Oxide bzw. Doppeloxyde (außer denen der Halogene und des Xenons) haben das Zentralatom bzw. das Kation mit der höchsten Oxidationsstufe als Schlüsselement. Beispiele: Li₂SO₄ hat Schwefel, BaCO₃ Kohlenstoff, NaAlSi₃O₈, Silicium und NaNbO₃ Niob als Schlüsselement. Analog dazu sind die Schlüsselemente von K₃PS₄ Phosphor, von CuNH₄MoS₄ Molybdän und von K₂CS₃ · H₂O Kohlenstoff. Verbindungen,

2 Anordnung der Substanzen

(e.g. Na_2CN_2 , KCN , $\text{H}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$, $\text{K}_2[\text{Hg}(\text{SCN})_4]$, $\text{K}[\text{C}(\text{NO}_2)_3]$, $\text{Cd}(\text{H}_2\text{NNHCOO})_2$) have been listed with the key element carbon. For compounds with two or more different anions see below.

Arrangement from a chemical point of view presents difficulties. The multitude of chemical relationships cannot be shown in a one-dimensional reproduction such as a table. It is difficult to classify inorganic molecular compounds within the system chosen here. Examples for this are: $\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_2$, Al_2Br_6 , boranes (e.g. $\text{B}_5\text{H}_9\text{I}$) and cyclic inorganic compounds such as $(\text{PNF}_2)_4$. For the first two examples an informal classification was easy. Without taking the crystal structure into consideration they were listed with the respective ionic compounds (that is as $\text{PtCl}_2 \cdot 2\text{NH}_3$ and as AlBr_3 , respectively). The other two examples cannot be treated according to the system outlined above. Such compounds were dealt with in special subsections and attributed to key elements by chemical aspects (e.g. boranes with boron).

The arrangement of the compounds and the subdivision of volume III/7 into subvolumes is shown in the following survey and also in the graphical representation on the inside of the cover of this volume.

deren Anionen Kohlenstoff enthalten (z.B. Na_2CN_2 , KCN , $\text{H}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$, $\text{K}_2[\text{Hg}(\text{SCN})_4]$, $\text{K}[\text{C}(\text{NO}_2)_3]$, $\text{Cd}(\text{H}_2\text{NNHCOO})_2$) sind unter dem Schlüsselement Kohlenstoff eingeordnet. Zu Verbindungen mit mehreren verschiedenen Anionen siehe unten.

Bei einer solchen nach chemischen Gesichtspunkten gewählten Einteilung ergeben sich Schwierigkeiten. Die Vielfalt chemischer Verwandtschaften läßt sich nicht in einer eindimensionalen Darstellung, wie sie eine Tabelle ist, wiedergeben. So ist bei dem hier gewählten Prinzip die Einordnung anorganischer Molekülverbindungen problematisch. Beispiele sind $\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_2$, Al_2Br_6 , Borane (z.B. $\text{B}_5\text{H}_9\text{I}$) und cyclische anorganische Verbindungen wie $(\text{PNF}_2)_4$. Bei den ersten beiden Beispielen war eine zwanglose Einordnung nach der gewählten Systematik möglich, sie wurden unter Nichtbeachtung des Kristallaufbaus bei den entsprechenden ionischen Verbindungen aufgeführt (d.h. als $\text{PtCl}_2 \cdot 2\text{NH}_3$ bzw. als AlBr_3). Die beiden anderen Beispiele lassen sich nicht nach dem oben skizzierten Verfahren behandeln. Solche Verbindungen wurden in gesonderten Abschnitten aufgeführt, die unter chemischen Aspekten den Schlüsselementen zugeordnet wurden (z.B. Borane bei Bor).

Die Reihenfolge der Verbindungen und die Untergliederung des Bandes III/7 in Teilbände geht aus der folgenden Übersicht und der graphischen Darstellung auf der Innenseite des vorderen Einbanddeckels hervor.

Survey¹⁾: Distribution of substances within subvolumes III/7a...III/7h

III/7a	Key elements: F, Cl, Br and I
I	Halides and complex halides
I.1	Fluorides and complex fluorides
I.2	Chlorides and complex chlorides
I.3	Bromides and complex bromides
I.4	Iodides and complex iodides
III/7b	Key elements: O, S, Se and Te
b1	II Oxides and hydroxides
b2	II.1 Oxides and hydroxides
	II.2 Oxides and hydroxides "with further anions" (oxide halides, hydroxide halides)
	III Oxo-compounds of halogens and xenon
	III.1 Oxo-compounds of chlorine
	III.2 Oxo-compounds of bromine
	III.3 Oxo-compounds of iodine
	III.4 Oxo-compounds of xenon ²⁾
b3	IV Sulfur compounds
	IV.1 Sulfides ³⁾
	IV.2 Sulfites
	IV.3 Sulfates
	IV.4 Further oxo-compounds of sulfur
	V Compounds of selenium and tellurium
	V.1 Selenides ³⁾ and oxo-compounds of selenium
	V.2 Tellurides ³⁾ and oxo-compounds of tellurium

Übersicht¹⁾: Aufteilung der Verbindungen auf die Teilbände III/7a...III/7h

	Schlüsselemente: F, Cl, Br und J
I	Halogenide und Halogenokomplexe
I.1	Fluoride und Fluorokomplexe
I.2	Chloride und Chlorokomplexe
I.3	Bromide und Bromokomplexe
I.4	Jodide und Jodokomplexe
	Schlüsselemente: O, S, Se und Te
II	Oxide und Hydroxide
II.1	Oxide und Hydroxide
II.2	Oxide und Hydroxide „mit weiteren Anionen“ (Oxidhalogenide, Hydroxidhalogenide)
III	Oxoverbindungen der Halogene und des Xenons
III.1	Oxoverbindungen des Chlors
III.2	Oxoverbindungen des Broms
III.3	Oxoverbindungen des Jods
III.4	Oxoverbindungen des Xenons ²⁾
IV	Verbindungen des Schwefels
IV.1	Sulfide ³⁾
IV.2	Sulfite
IV.3	Sulfate
IV.4	Sonstige Oxoverbindungen des Schwefels
V	Verbindungen des Selen und des Tellurs
V.1	Selenide ³⁾ und Oxoverbindungen des Selen
V.2	Telluride ³⁾ und Oxoverbindungen des Tellurs

2 Arrangement of the substances

III/7c	Key elements: N, P, As, Sb, Bi; C	Schlüsselemente: N, P, As, Sb, Bi; C
c1	VI Nitrogen compounds	VI Verbindungen des Stickstoffs
	VI.1 Ammonia and derivatives ⁴⁾	VI.1 Ammoniak und Derivate ⁴⁾ ein-
	including amides, imides, and	schließlich der Amide, Imide und
	nitrides	Nitride
	VI.2 Azides	VI.2 Azide
	VI.3 Oxo-compounds of nitrogen	VI.3 Oxoverbindungen des Stickstoffs
	VI.4 Further nitrogen compounds	VI.4 Sonstige Stickstoffverbindungen
c2	VII Phosphorus compounds	VII Verbindungen des Phosphors
	VII.1 Phosphides	VII.1 Phosphide
	VII.2 Oxo-compounds of phosphorus	VII.2 Oxoverbindungen des Phosphors
	VII.3 Further phosphorus compounds	VII.3 Sonstige Phosphorverbindungen
	VIII Compounds of arsenic, antimony, and	VIII Verbindungen des Arsens, Antimons und
	bismuth	Wismuts
	VIII.1 Arsenides ³⁾ and oxo-compounds	VIII.1 Arsenide ³⁾ und Oxoverbindungen
	of arsenic	des Arsens
	VIII.2 Antimonides ³⁾ and oxo-	VIII.2 Antimonide ³⁾ und Oxo-
	compounds of antimony	verbindungen des Antimons
	VIII.3 Bismuthides ³⁾ and oxo-	VIII.3 Bismutide ³⁾ und Oxo-
	compounds of bismuth	verbindungen des Wismuts
c3	IX Carbon compounds ³⁾	IX Verbindungen des Kohlenstoffs ³⁾
	IX.0 Graphite intercalation compounds	IX.0 Graphiteinlagerungsverbindungen
	IX.1 Carbides ³⁾	IX.1 Carbide ³⁾
	IX.2 Carbonyls	IX.2 Carbonyle
	IX.3 Carbonates	IX.3 Carbonate
	IX.4 Simple and complex compounds	IX.4 Einfache und komplexe Verbind-
	containing $\text{CN}^\ominus$, $\text{OCN}^\ominus$, $\text{SCN}^\ominus$	ungen mit $\text{CN}^\ominus$, $\text{OCN}^\ominus$, $\text{SCN}^\ominus$
	IX.5 Further carbon compounds ³⁾	IX.5 Sonstige Kohlenstoffverbindun-
		gen ³⁾
III/7d	Key elements: Si, Ge, Sn, Pb;	Schlüsselemente: Si, Ge, Sn, Pb;
	B, Al, Ga, In, Tl;	B, Al, Ga, In, Tl;
	Be	Be
d1	X Silicates	X Silikate
	XI Oxo-compounds of germanium	XI Oxoverbindungen des Germaniums
	(germanates)	(Germanate)
	XII Compounds of tin and lead	XII Verbindungen des Zinns und des Bleis
	XII.1 Oxo-compounds of tin	XII.1 Oxoverbindungen des Zinns
	(stannates)	(Stannate)
	XII.2 Oxo-compounds of lead	XII.2 Oxoverbindungen des Bleis
	(plumbates)	(Plumbate)
d2	XIII Boron compounds	XIII Verbindungen des Bors
	XIII.1 Boranes and borides ³⁾	XIII.1 Borane und Boride ³⁾
	XIII.2 Oxo-compounds of boron	XIII.2 Oxoverbindungen des Bors
	(borates)	(Borate)
	XIV Compounds of aluminium, gallium,	XIV Verbindungen des Aluminiums, Galliums,
	indium, thallium, and beryllium	Indiums, Thalliums und Berylliums
	XIV.1 Oxo-compounds of aluminium	XIV.1 Oxoverbindungen des
		Aluminiums
	XIV.2 Oxo-compounds of gallium	XIV.2 Oxoverbindungen des Galliums
	XIV.3 Oxo-compounds of indium	XIV.3 Oxoverbindungen des Indiums
	XIV.4 Oxo-compounds of thallium	XIV.4 Oxoverbindungen des Thalliums
	XIV.5 Oxo-compounds of beryllium	XIV.5 Oxoverbindungen des Berylliums
III/7e	Key elements: d^9-, d^{10}-, d^1 ... d^3-, f-elements	Schlüsselemente: d^9-, d^{10}-, d^1 ... d^3-, f-Elemente
	XV Compounds of copper, silver, gold, zinc,	XV Verbindungen des Kupfers, Silbers, Gol-
	cadmium, and mercury	des, Zinks, Cadmiums und Quecksilbers
	XV.1 Oxo-compounds of copper,	XV.1 Oxoverbindungen des Kupfers,
	silver, and gold	Silbers und Goldes
	XV.2 Oxo-compounds of zinc,	XV.2 Oxoverbindungen des Zinks,
	cadmium, and mercury	Cadmiums und Quecksilbers
	XVI Compounds of scandium, yttrium,	XVI Verbindungen des Scandiums, Yttriums,
	of the lanthanoids, and the	der Lanthanoide und der
	actinoids	Actinoide

2 Anordnung der Substanzen

	XVI.1 Oxo-compounds of scandium XVI.2 Oxo-compounds of yttrium XVI.3 Oxo-compounds of the lanthanoids XVI.4 Oxo-compounds of the actinoids XVII Compounds of titanium, zirconium, and hafnium XVII.1 Oxo-compounds of titanium XVII.2 Oxo-compounds of zirconium XVII.3 Oxo-compounds of hafnium XVIII Compounds of vanadium, niobium, and tantalum XVIII.1 Oxo-compounds of vanadium XVIII.2 Oxo-compounds of niobium XVIII.3 Oxo-compounds of tantalum	XVI.1 Oxoverbindungen des Scandiums XVI.2 Oxoverbindungen des Yttriums XVI.3 Oxoverbindungen der Lanthanoide XVI.4 Oxoverbindungen der Actinoide XVII Verbindungen des Titans, Zirkoniums und Hafniums XVII.1 Oxoverbindungen des Titans XVII.2 Oxoverbindungen des Zirkoniums XVII.3 Oxoverbindungen des Hafniums XVIII Verbindungen des Vanadiums, Niobs und Tantal XVIII.1 Oxoverbindungen des Vanadiums XVIII.2 Oxoverbindungen des Niobs XVIII.3 Oxoverbindungen des Tantal
III/7f	Key elements: d⁴ ... d⁸-elements XIX Compounds of chromium, molybdenum, and tungsten XIX.1 Oxo-compounds of chromium XIX.2 Oxo-compounds of molybdenum XIX.3 Oxo-compounds of tungsten XX Compounds of manganese, technetium, and rhenium XX.1 Oxo-compounds of manganese XX.2 Oxo-compounds of technetium XX.3 Oxo-compounds of rhenium XXI Compounds of iron, cobalt, nickel, and the platinum metals XXI.1 Oxo-compounds of iron XXI.2 Oxo-compounds of cobalt XXI.3 Oxo-compounds of nickel XXI.4 Oxo-compounds of ruthenium, rhodium, and palladium XXI.5 Oxo-compounds of osmium, iridium, and platinum	Schlüsselemente: d⁴ ... d⁸-Elemente XIX Verbindungen des Chroms, Molybdäns und Wolframs XIX.1 Oxoverbindungen des Chroms XIX.2 Oxoverbindungen des Molybdäns XIX.3 Oxoverbindungen des Wolframs XX Verbindungen des Mangans, Technetiums und Rheniums XX.1 Oxoverbindungen des Mangans XX.2 Oxoverbindungen des Technetiums XX.3 Oxoverbindungen des Rheniums XXI Verbindungen des Eisens, Cobalts, Nickels und der Platinmetalle XXI.1 Oxoverbindungen des Eisens XXI.2 Oxoverbindungen des Cobalts XXI.3 Oxoverbindungen des Nickels XXI.4 Oxoverbindungen des Rutheniums, Rhodiums und Palladiums XXI.5 Oxoverbindungen des Osmiums, Iridiums und Platins
III/7g III/7h	References for III/7 Comprehensive index Over-all list of contents of volume III/7 Alphabetical formula index Alphabetical mineral name index ¹⁾ This survey corresponds to the state after completion of subvolume III/7b2. Slight modifications may be necessary in preparing the other subvolumes. Some classes of compounds with less than about 20 representatives are not listed in order to keep the survey clearer. In the tables such compounds are listed next to analogous compounds (e.g. CuNH₄MoS₄ follows the oxo-compounds of molybdenum, BaTeS₃ · 2H₂O follows the oxo-compounds of tellurium). ²⁾ Classification in analogy to the oxo-compounds of iodine. ³⁾ As far as they contain F, Cl, Br, I, O, N, and/or P, and as they cannot be termed "organic" in the sense of volume III/5. ⁴⁾ With the exception of ammonium, hydroxylammonium and hydrazinium salts (see page XII, line 7).	Literaturverzeichnis für III/7 Gesamtregister Gesamtinhaltsverzeichnis des Bandes III/7 Alphabetisches Formelverzeichnis Alphabetisches Mineralnamenverzeichnis ¹⁾ Diese Übersicht entspricht dem Stand nach Fertigstellung von Teilband III/7b2. Geringfügige Änderungen können sich während der Bearbeitung der weiteren Teilbände ergeben. Auf die Aufführung von einigen Verbindungsklassen mit weniger als ca. 20 Vertretern wurde aus Gründen der Übersichtlichkeit verzichtet. Solche Verbindungen wurden nach den ihnen am nächsten verwandten Verbindungsklassen einsortiert (z.B. CuNH₄MoS₄ nach den Oxoverbindungen des Molybdäns, BaTeS₃ · 2H₂O nach den Oxoverbindungen des Tellurs). ²⁾ Die Einordnung erfolgt in Analogie zu den Oxoverbindungen des Jods. ³⁾ Soweit sie F, Cl, Br, I, O, N oder P enthalten und nicht als organische Verbindungen im Sinn von Band III/5 gelten. ⁴⁾ Außer den Ammonium-, Hydroxylammonium- und Hydraziniumsalzen (siehe S. XII, Zeile 7).

For the same anion the compounds are arranged according to cations in ascending order of the groups of the periodic table (H, Li, Na, ..., Be, Mg, ..., Os, Ir, Pt). Sub-groups follow the corresponding main groups (... , Rb, Cs, Cu, Ag, Au, Be, ...). Within a main group or sub-group the order is determined by the atomic number. The ammonium, hydrazinium, hydroxylammonium, and phosphonium cations are listed between the cations K^+ and Rb^+ . Metal-oxygen compounds are arranged according to an increasing valency of the key element and – within the same valency – in the order of an increasing mean valency of the metal ions (i.e. according to ascending O/Me-ratio).

For compounds with the same anions, substances crystallizing without solvent (H_2O , NH_3 , N_2H_4 , SO_2 , ...) are compiled separately from those crystallizing with solvent.

Compounds which contain further anions than the anion with the key-element¹⁾ are separately listed as "compounds with further anions". Usually only such anions appear as "further anions" the key-elements of which have already been treated. Exceptions to this rule are the borosilicates, aluminosilicates etc. which are listed with the silicates and not with the borates, aluminates etc. Also for compounds with "further anions" those with and without solvent are listed as separate groups.

In some case it does not seem sensible to adhere strictly to the systematic arrangement. For example most of the gas hydrates would have to be listed as "hydrates of the elements" before the halides and complex halides. However, for structural reasons they were all placed together with the ice modifications in sub-volume III/7b1. The same holds for the graphite intercalation compounds in subvolume III/7c3.

When in doubt consult the table of contents in each subvolume, the over-all table of contents, or the alphabetical formula index in subvolume III/7h.

3 Selection and arrangement of information in the tables

3.1 Selection of information

The following information was included in the tables:

Substance

- Chemical formula
- Mineral name (in special cases: trivial name)

Structural data

- Space-group
- Lattice constants
- Number of formula units in the unit cell
- Density
- Structure type
- Scope of the structural determination

¹⁾ See the survey for the distribution of crystal structure data of volume III/7 over the subvolumes (p. XIV).

Für ein gleiches Anion sind die Verbindungen nach Kationen in aufsteigender Reihenfolge der Gruppen des Periodischen Systems geordnet (H, Li, Na, ..., Be, Mg, ..., Os, Ir, Pt). Nebengruppen folgen den entsprechenden Hauptgruppen (... , Rb, Cs, Cu, Ag, Au, Be, ...). Innerhalb einer Haupt- oder Nebengruppe ist die Reihenfolge durch die Ordnungszahl bestimmt. Ammonium-, Hydrazinium-, Hydroxylammonium- und Phosphoniumkationen sind zwischen den Kationen K^+ und Rb^+ eingeschoben. Metall-Sauerstoffverbindungen sind nach steigender Wertigkeit des Schlüsselements und innerhalb einer Wertigkeitsstufe nach steigender mittlerer Wertigkeit der Metallionen (d.h. nach steigendem O/Me-Verhältnis) geordnet.

Bei Verbindungen mit gleichen Anionen sind die ohne Lösungsmittel (H_2O , NH_3 , N_2H_4 , SO_2 , ...) kristallisierenden Substanzen getrennt von den mit Lösungsmittel kristallisierenden zusammengefaßt.

Verbindungen, die neben dem das Schlüsselement enthaltenden Anion¹⁾ weitere Anionen enthalten, sind als „Verbindungen mit weiteren Anionen“ getrennt aufgeführt. Dabei erscheinen in der Regel als „weitere Anionen“ nur solche Anionen, deren Schlüsselemente bereits behandelt wurden. In Abweichung von dieser Regel werden Borosilikate, Aluminosilikate, usw. bei den Silikaten und nicht bei den Boraten, Aluminaten, usw. eingeordnet. Auch bei Verbindungen mit mehreren, verschiedenen Anionen werden solche mit und ohne Lösungsmittel als getrennte Gruppen aufgeführt.

In einigen Fällen erscheint die strikte Einhaltung der Systematik nicht sinnvoll. So wären z.B. der Großteil der Gashydrate als „Hydrate der Elemente“ vor den Halogeniden und Halogenokomplexen einzureihen. Sie wurden jedoch aus strukturellen Gründen geschlossen nach den Eismodifikationen in Teilband III/7b1 eingegliedert. Ähnliches gilt für die Graphiteinlagerungsverbindungen in Teilband III/7c3.

In Zweifelsfällen sind die Inhaltsverzeichnisse der einzelnen Teilbände, das Gesamtinhaltsverzeichnis in Teilband III/7h oder das alphabetische Formelregister (Teilband III/7h) zu konsultieren.

3 Auswahl und Anordnung der einzelnen Angaben in den Tabellen

3.1 Auswahl der Angaben

Folgende Angaben wurden in die Tabellen aufgenommen:

Substanz

- Chemische Formel
- Mineralname (in speziellen Fällen: Trivialname)

Strukturdaten

- Raumgruppe
- Gitterkonstanten
- Zahl der Formeleinheiten in der Elementarzelle
- Dichte
- Strukturtyp
- Umfang der Strukturbestimmung

¹⁾ Siehe Übersicht zur Aufteilung der Kristallstrukturdaten des Bandes III/7 auf die Teilbände (S. XIV).

3 Auswahl und Anordnung der einzelnen Angaben

Methods

Single crystal method
Powder method
X-ray diffraction ("X")
Neutron diffraction ("N")
Electron diffraction ("E")
Optional:
Spectroscopic methods (IR, Raman, NMR, NQR).

Optional additional information on:

Colour
Habit
Optical properties
Electron density distribution
Debye-Waller factors
Structure factors
Phase diagram
Magnetic properties
Epitaxy
etc.

The authors have tried to compile the data given in the literature as completely as possible. Whenever the existing information allowed it, the data were critically evaluated. However, it was found inappropriate to dispense with "older" data in favour of "newer" ones. For substances where the lattice constants have been determined several times by different authors, large discrepancies remain occasionally even after error margins have been considered. Usually it is not obvious in the literature whether these differences arise from preparative or experimental problems. The "newer" data are not a priori the "better" ones. In general, therefore, all further lattice constants given in the literature have been listed in the footnotes, as omitting part of these data would seem arbitrary.

Recently many refinements of already known crystal structures have been made. Improvement of the determination of the atomic positions has become possible because of better experimental techniques and/or refined calculation methods. In such cases it was nevertheless thought best to cite also older publications, where the structural principle was recognized and the atomic positions were determined sufficiently well for various applications. Another point which encouraged us to cite older publications was the fact that they often contain detailed information of structural relevance.

3.2 Arrangement of information

The individual columns contain the following information:

Column 1: Serial number

The first column contains the serial numbering of the compounds. These numbers are used to identify the footnotes. They also serve as reference numbers in the alphabetical list of formulae and the alphabetical list of mineral names (subvolume III/7h). The small letter placed in front of the number signifies the subvolume in question. Occasionally capital letters are placed behind the serial number. This became necessary, when insertions were made during the proof stage.

Methoden

Einkristalluntersuchung
Pulveruntersuchung
Röntgenbeugung („X“)
Neutronenbeugung („N“)
Elektronenbeugung („E“)
Fakultativ:
Spektroskopische Untersuchungen (IR, Raman, NMR, NQR).

Fakultativ zusätzlich Angaben zu:

Farbe
Habitus
Optische Eigenschaften
Elektronendichteverteilung
Debye-Waller-Faktoren
Strukturfaktoren
Phasendiagramm
Magnetische Eigenschaften
Epitaxie
usw.

Es wurde versucht, die in der Literatur vorliegenden Daten möglichst vollständig zu erfassen. Eine kritische Sichtung der Daten erfolgte, soweit dies nach den vorhandenen Angaben möglich war. Dabei erschien es uns nicht angebracht, auf „ältere“ Daten zugunsten „neuerer“ Daten zu verzichten. Für Substanzen, an denen mehrere Gitterkonstantenbestimmungen durchgeführt wurden, divergieren diese Gitterkonstanten, auch unter Berücksichtigung der Fehlergrenzen, teilweise beträchtlich. Dabei ist aus der Literatur meist nicht ersichtlich, ob diese Unterschiede methodisch oder präparativ bedingt sind. „Neuere“ Werte sind nicht a priori „bessere“ Werte. In der Regel wurden daher alle weiteren in der Literatur angegebenen Gitterkonstanten in den Fußnoten zusammengestellt, da die Unterdrückung eines Teils dieser Werte willkürlich erscheinen würde.

In den letzten Jahren wurden zunehmend Verfeinerungen schon bekannter Kristallstrukturen durchgeführt. Dabei können die Atomparameter durch bessere experimentelle Technik und/oder verfeinerte Rechenmethoden verbessert worden sein. Trotzdem erschien es uns auch in diesen Fällen angebracht, die älteren Arbeiten, in denen das Strukturprinzip erkannt und die Atomparameter mit einer für viele Anwendungen ausreichenden Genauigkeit bestimmt worden waren, hier mit aufzuführen. Ein weiterer Punkt, der uns darin bestärkte, die älteren Arbeiten zu zitieren, ist die Tatsache, daß in diesen Arbeiten oft strukturell relevante Informationen ausführlich dargestellt sind.

3.2 Anordnung der Angaben

Im folgenden wird die Anordnung der ausgewählten Angaben in den Spalten der Tabellen im einzelnen erläutert.

1. Spalte: Laufende Nummer

Die erste Spalte enthält die fortlaufende Numerierung der Verbindungen. Diese Numerierung wird zur Zuordnung der Fußnoten sowie als Kennzahl im alphabetischen Formelregister und im alphabetischen Mineralnamenverzeichnis benutzt (Teilband III/7h). Dabei bezeichnet der vorgestellte Kleinbuchstabe den betreffenden Teilband. Gelegentlich nachgestellte Großbuchstaben wurden für Einschübe während der Korrektur benötigt.

3 Selection and arrangement of information

Column 2: Chemical formula, name, identification of the phase

The second column contains the chemical formulae written in the normal convention. Mineral names (in special cases trivial names) are also listed. The mineral names were based on the Mineralogische Tabellen (5. Auflage, 1970) of H. Strunz und Ch. Tennyson.

If there exist several modifications of one compound, they are differentiated by additional Roman numerals or, in special cases, by small Greek letters. Solid solutions and compounds of variable composition are described in the index by means of the variables x , y and z (e.g. $\text{LiH}_{1-x}\text{F}_x$). If such compounds crystallize as a function of temperature, pressure or composition in several modifications of different crystal structure, these modifications are also differentiated by additional Roman numerals. The phase widths, if known, are given in this column, in column 6 ["weitere Angaben" ($\approx$ further information)] or in the footnotes.

Column 3: Space-group, lattice constants

Space-group:

On the left side of the third column the symbol for the space-group is given according to the Schoenflies and Hermann-Mauguin notation. In general the setting given in the literature was adopted. If there is a choice of several space-groups, this fact is indicated. If the information on a space-group is missing, the crystal system is given¹⁾.

Lattice constants:

On the right side of the column the lattice constants a , b , c , α , β , γ and the ratio c/a for hexagonal and tetragonal systems are given. If the temperature and pressure at which the lattice constants were determined are not given in column 3, it can be assumed that the measurements were carried out at room temperature ("RT") and atmospheric pressure. For substances with variable composition the composition, if known, to which the lattice constants are referring is also noted in column 3. The lattice constants a , b , c are generally given in Ångström units, the angles α , β , γ in degrees of angles. For substances with cubic structure the lattice constant " a " is always given in Ångström units, unless otherwise indicated. Data originally given in kX were converted using the factor 1,00202 Å/kX.

For substances with other than cubic structure it can be assumed that the lattice constants were measured in kX, if the data were taken from Strukturberichte or the literature before 1950. However, with literature published after 1953 it can be assumed that the lattice constants are given in Ångström units, unless explicitly stated otherwise. In the Structure Reports for the years 1940–1953 the lattice constants were usually converted into Ångström units and are cited here directly.

¹⁾ In order to make it easier for the reader to compare different settings, a list of the symbols for the space-groups for different settings is given in subvolume III/7a, p. XXIV.

2. Spalte: Chemische Formel, Name, Kennzeichnung der Phase

Die zweite Spalte enthält die chemischen Formeln in konventioneller Schreibweise. Weiterhin sind die Mineralnamen (in speziellen Fällen: Trivialnamen) aufgeführt. Bei den Mineralnamen wurden die Mineralogischen Tabellen (5. Auflage, 1970) von H. Strunz und Ch. Tennyson zugrunde gelegt.

Existiert eine Verbindung in mehreren Modifikationen, so sind die Modifikationen durch nachgestellte römische Ziffern, in Einzelfällen durch kleine griechische Buchstaben, unterschieden. Mischkristalle und Verbindungen variabler Zusammensetzung werden mit Hilfe der Variablen x , y und z im Index beschrieben (z.B. $\text{LiH}_{1-x}\text{F}_x$). Treten in solchen Verbindungen als Funktion von Druck, Temperatur und Zusammensetzung mehrere Phasen mit unterschiedlicher Kristallstruktur auf, so werden auch diese Phasen durch nachgestellte römische Ziffern unterschieden. Die Phasenbreiten sind, soweit bekannt, in dieser Spalte, in Spalte 6 [„weitere Angaben“] oder in den Fußnoten angegeben.

3. Spalte: Raumgruppe, Gitterkonstanten

Raumgruppe:

In der dritten Spalte ist links das Raumgruppensymbol in der Bezeichnung nach Schoenflies und Hermann-Mauguin angegeben. Die in der Literatur angegebene Aufstellung wurde in der Regel übernommen. Stehen mehrere Raumgruppen zur Auswahl, so ist dies vermerkt. Fehlen Angaben zur Raumgruppe, so ist das Kristallsystem angegeben¹⁾.

Gitterkonstanten:

Auf der rechten Seite der Spalte sind die Gitterkonstanten a , b , c , α , β , γ sowie bei hexagonalen und tetragonalen Systemen das Achsenverhältnis c/a aufgeführt. Sind in Spalte 3 Temperatur und Druck, bei denen die Gitterkonstantenbestimmung durchgeführt wurde, nicht angegeben, so kann angenommen werden, daß die Messungen bei Raumtemperatur („RT“) und Normaldruck durchgeführt wurden. Für Substanzen mit Phasenbreite ist die Zusammensetzung, auf die sich die Gitterkonstanten beziehen, ebenfalls in Spalte 3 vermerkt, soweit sie bekannt ist. Die Gitterkonstanten a , b , c sind im allgemeinen in Ångström-Einheiten angegeben, die Winkel α , β , γ in Winkelgrad. Für kubische Substanzen ist die Gitterkonstante „ a “ grundsätzlich in Ångström-Einheiten angegeben, wenn nicht anders vermerkt. Angaben in kX wurden mit dem Faktor 1,00202 Å/kX umgerechnet.

Bei nichtkubischen Substanzen kann angenommen werden, daß die Gitterkonstanten in kX gemessen sind, wenn die Daten den Strukturberichten bzw. der Literatur vor 1950 entnommen sind. Dagegen kann bei nach 1953 erschienener Literatur angenommen werden, daß, wenn nicht ausdrücklich anders vermerkt, die Gitterkonstanten in Ångström-Einheiten angegeben sind. In den Structure Reports für die Jahre 1940–1953 sind die Gitterkonstanten in den meisten Fällen auf Ångström-Einheiten umgerechnet und so übernommen worden.

¹⁾ Um dem Leser einen Vergleich verschiedener Aufstellungen zu erleichtern, ist in Teilband III/7a, S. XXIV, eine Liste der Raumgruppensymbole für verschiedene Aufstellungen gegeben.

3 Auswahl und Anordnung der einzelnen Angaben

In the case of compounds for which different lattice constants have been reported in the literature those values which are in the opinion of the authors the most reliable are given in column 3 of the tables. The reference belonging to these data is usually listed first in column 7. The results of other determinations of lattice constants can be found with the appropriate references in the footnotes.

For crystalline substances with a hexagonal-rhombohedral space-group, the lattice constants for the hexagonal setting, when given in the literature, are shown in column 3. The lattice constants " a_{rh} " and " α_{rh} " corresponding to the rhombohedral setting are given in the footnotes.

For substances with variable composition (solid solutions, non-stoichiometric phases) the lattice constants as functions of the composition are given in tables in the footnotes. If the lattice constants are given in the form of diagrams in the original papers, this is indicated in the footnotes. Space did not permit reproduction of these diagrams.

When determinations of lattice constants as functions of external parameters (temperature, pressure) exist, these data are listed in the footnotes; again diagrams were not reproduced.

Error margins:

Error margins quoted in the literature were retained. The given error always refers to the last decimal places. For example $a = 4,356 \pm 13$ means when written in full $a = 4,356 \pm 0,013$. This way of presenting the errors was maintained for all data given in the tables except for angles and temperature. When the degree of accuracy is indicated in the original paper by writing the last decimal place as a subscript this was not retained in the tables (e.g. $a = 3,98_4$ is cited as $a = 3,984$).

Column 4: Formula units per unit cell

In the fourth column the number " Z " of the formula units per unit cell given in column 2 is listed. For hexagonal-rhombohedral space-groups Z is referring to the hexagonal unit cell. The number of the formula units in the rhombohedral unit cell, Z_{rh} , is given in the footnote. The following relationship is valid: $Z_{hex} = 3 Z_{rh}$. In some cases " Z " does not refer to the formula unit given in column 2, but indicates the number of atoms of a specific type of atoms.

Column 5: Density

The density " ρ_{exp} " determined usually by pycnometry is listed in column 5. The X-ray density " ρ_x ", which has been calculated from the lattice constants in column 3, is shown in square brackets, if it was given in the literature. The units of ρ_{exp} and ρ_x are g/cm^3 . If available the temperature at which ρ_{exp} was determined is given in round brackets following ρ_{exp} .

Ist eine Verbindung in der Literatur mit verschiedenen Gitterkonstanten beschrieben, so sind in Spalte 3 der Tabellen die nach Ansicht der Autoren zuverlässigsten Werte aufgeführt. Die zu diesen Werten gehörende Literaturstelle ist in der Regel in Spalte 7 als erste angegeben. Ergebnisse weiterer Gitterkonstantenbestimmungen sind mit den zugehörigen Literaturstellen in den Fußnoten aufgeführt.

Kristallisiert eine Substanz in einer hexagonal-rhomboedrischen Raumgruppe, so sind, sofern in der Literatur angegeben, in Spalte 3 die Gitterkonstanten für die hexagonale Aufstellung angegeben. Die der rhomboedrischen Aufstellung entsprechenden Gitterkonstanten " a_{rh} " und " α_{rh} " sind in den Fußnoten aufgenommen.

Liegen für Substanzen variabler Zusammensetzung (Mischkristalle, nichtstöchiometrische Phasen) Bestimmungen der Gitterkonstanten als Funktion der Zusammensetzung vor, so sind die Daten in den Fußnoten tabelliert. Sind die Gitterkonstanten in der Originalliteratur in Form graphischer Darstellungen angegeben, so wird darauf in den Fußnoten hingewiesen. Auf eine Reproduktion graphischer Darstellungen wurde aus Platzgründen verzichtet.

Liegen Bestimmungen der Gitterkonstanten als Funktion äußerer Parameter (Temperatur, Druck) vor, so sind diese Daten in den Fußnoten aufgeführt; bei graphischer Darstellung gilt das oben Gesagte.

Fehlerangaben:

Fehlerangaben in der Literatur wurden übernommen. Der angegebene Fehler bezieht sich immer auf die letzten Dezimalen. So bedeutet $a = 4,356 \pm 13$ in ausführlicher Schreibweise $a = 4,356 \pm 0,013$. Diese Art der Fehlerangabe wurde in den Tabellen für alle Daten außer Winkel- und Temperaturangaben angewandt. Genauigkeitsangaben, die in der Literatur durch Tiefstellen der letzten Dezimalen erfolgten, wurden nicht berücksichtigt (z.B. wird die Angabe $a = 3,98_4$ als $a = 3,984$ in die Tabellen übernommen).

4. Spalte: Formeleinheiten pro Elementarzelle

In der 4. Spalte ist die Zahl „ Z “ der in Spalte 2 angegebenen Formeleinheiten pro Elementarzelle aufgeführt. Bei hexagonal-rhomboedrischen Raumgruppen bezieht sich Z auf die hexagonale Elementarzelle. Die Zahl der Formeleinheiten in der rhomboedrischen Elementarzelle, Z_{rh} , ist in der Fußnote angegeben. Es gilt: $Z_{hex} = 3 Z_{rh}$. In einigen Fällen ist „ Z “ nicht auf die in Spalte 2 angegebene Formeleinheit bezogen, sondern bezeichnet die Zahl der Atome pro Elementarzelle einer bestimmten, dann angegebenen, Atomsorte.

5. Spalte: Dichte

In der 5. Spalte ist die in der Regel pyknometrisch bestimmte Dichte „ ρ_{exp} “ aufgeführt. In eckigen Klammern steht die röntgenographisch aus den in Spalte 3 angegebenen Gitterkonstanten berechnete Dichte „ ρ_x “, soweit sie der Literatur entnommen werden konnte. Die Einheiten von ρ_{exp} und ρ_x sind g/cm^3 . Ist die Temperatur, bei der ρ_{exp} bestimmt wurde, in der Originalliteratur angegeben, so wird sie in dieser Spalte nach ρ_{exp} in runden Klammern aufgeführt.

3 Selection and arrangement of information

Column 6: *Type, structure determination, habit of crystals and further information*

Type:

In the first line of column 6 the type of structure, if known, is listed. This structure type is characterized by a well known representative of this type, the prototype. This prototype was chosen according to the following criteria:

1. If the use of a specific prominent representative has been adopted in the literature as the prototype of an isotypic class of compounds, this custom has been maintained.
2. If it was not possible to use the first criterium, the compound with the most complete information about the structure of the crystal (lattice constants, atomic positions) was usually chosen as prototype.

It follows from the second criterium that the atomic positions of the prototype are not necessarily completely known. Some substances have been assigned to isotypic classes, even if there was no quantitative proof from a complete determination of the crystal structure for that isotypism.

The symbols used for the various structure types by the Strukturberichte were not maintained, since this system has not been further developed after 1939.

Structure determination:

In the second line of column 6 information is given on the type of the structure determination carried out. The first information given is whether the atomic positions ("Parameter") are complete, partial, qualitative or not determined. This signifies:

komplett: The atomic positions are completely known. The only exceptions are the hydrogen atom positions. If the positions of the hydrogen atoms are known, this fact is mentioned separately ("mit H").

(komplett): This identification was chosen, if in spite of a complete determination of the crystal structure there is no information given in the literature concerning atomic positions. Sometimes interatomic distances are given in the literature in these cases.

partiell: If the atomic positions have only been partially determined, such a structure is identified by "partiell".

qualitativ: This name was chosen, if atomic positions are assumed or if the structure can be considered to be approximately known because of isotypic relationships.

If there is nothing known about the atomic positions this fact is indicated by "Parameter:-".

Further information on the method of the structural determination is given in the second line of column 6.

6. Spalte: *Typ, Strukturbestimmung, Kristallform und weitere Angaben*

Typ:

In der ersten Zeile von Spalte 6 ist der Strukturtyp aufgeführt, soweit dieser bekannt ist. Der Strukturtyp wird durch einen bekannten Vertreter dieses Typs, den Prototyp, gekennzeichnet. Die Auswahl des Prototyps erfolgte nach folgenden Kriterien:

1. Hat sich in der Literatur der Gebrauch eines bestimmten, prominenten Vertreters als Prototyp einer isotypen Verbindungsklasse eingebürgert, so wird dieser Brauch beibehalten.
2. Konnte nicht nach dem ersten Kriterium vorgefahren werden, so ist in der Regel die Verbindung als Prototyp ausgewählt worden, bei der die Information über die Kristallstruktur (Gitterkonstanten, Atomparameter) möglichst vollständig ist.

Aus dem zweiten Kriterium folgt, daß die Atomparameter des Prototyps nicht notwendigerweise vollständig bekannt sind. Es sind Substanzen isotypen Klassen zugeordnet, für die kein quantitativer Beweis für die Isotypie durch vollständige Kristallstrukturbestimmung geführt ist.

Die in den Strukturberichten eingeführten Symbole für die Strukturtypen wurden nicht übernommen, da diese Symbolik nach 1939 nicht weitergeführt wurde.

Strukturbestimmung:

In der zweiten Zeile von Spalte 6 sind Angaben zur Art der Strukturbestimmung gemacht. Zuerst wird aufgeführt, ob die Lageparameter („Parameter“) komplett, partiell, qualitativ oder nicht bestimmt sind. Die Angaben bedeuten:

komplett: Die Parameter sind vollständig bekannt. Eine Ausnahme bilden die Wasserstoffatome. Sind die Lagen der Wasserstoffatome bekannt, so ist dies gesondert vermerkt („mit H“).

(komplett): Diese Bezeichnung wurde gewählt, wenn trotz einer vollständigen Kristallstrukturbestimmung in der Literatur keine Lageparameter angegeben sind. In der Literatur sind in diesen Fällen manchmal interatomare Abstände angegeben.

partiell: Sind die Parameter einer Struktur nur zum Teil bestimmt, so ist eine derartige Struktur durch die Angabe „partiell“ gekennzeichnet.

qualitativ: Diese Bezeichnung wurde gewählt, falls geschätzte Lageparameter vorliegen oder falls die Struktur auf Grund einer Isotypiebeziehung als annähernd bekannt angesehen werden kann.

Ist über die Parameter nichts bekannt, so wird dies durch „Parameter:-“ gekennzeichnet.

Als weitere Information sind in der zweiten Zeile von Spalte 6 Angaben über die Methode der Strukturbestimmung gemacht.

3 Auswahl und Anordnung der einzelnen Angaben

It is:

- X: Investigation by X-ray Diffraction
 N: Investigation by Neutron Diffraction
 E: Investigation by Electron Diffraction
 NMR: Investigation by Nuclear Magnetic Resonance
 NQR: Investigation by Nuclear Quadrupole Resonance
 IR: Investigation by Infrared Spectroscopy
 Raman: Investigation by Raman Spectroscopy.
 Pulver: The diffraction experiments were carried out on poly-crystalline material.
 (≡ powder)
 Einkristall: The diffraction experiments were carried out on single crystals.
 (≡ single crystal)
 Kristallfilm: This term was used in electron diffraction studies, if it was not absolutely certain whether they were concerned with a single crystal film or a poly-crystalline film.
 (≡ crystal film)

The authors only tried to give a complete compilation of the literature on neutron diffraction for publications dealing with the determination of the chemical unit cell and the atomic positions. Publications on neutron diffraction which deal with the magnetic structure are also listed when possible.

No attempt was made to cover completely the information on spectroscopic methods (NMR, NQR, IR, Raman) for structure determination.

"R-values" are not given as quality factors of the determination of the crystal structure, since this is only advisable, if atomic positions and temperature factors with error limits are given. The latter were not listed in the Landolt-Börnstein, New Series, III/5, III/6 and III/7 due to limitation in space.

Crystal habit and further information:

In the third line of column 6 additional information which contributes to the characterization of the substance is listed under the keyword "Kristallform und weitere Angaben" (≡ crystal habit and further information). Generally this information was taken from the literature on the determination of the crystal structures. Obviously no attempt was made to be complete. The following properties are mainly listed.

- Colour
 Habit
 Shapes
 Twin formation
 Cleavage
 Hardness
 Refractive indices
 Optical angle
 Information on the phase diagram
 Phase width
 Melting point ("T_m")
 Boiling point ("T_b")
 Thermal stability
 Special methods of preparation
 Single crystal growing
 Solubility

Es bedeuten:

- X: Röntgenbeugungsuntersuchung
 N: Neutronenbeugungsuntersuchung
 E: Elektronenbeugungsuntersuchung
 NMR: Kernresonanzuntersuchung
 NQR: Kernquadrupolresonanzuntersuchung
 IR: Infrarotspektroskopische Untersuchung
 Raman: Ramanspektroskopische Untersuchung
 Pulver: Die Beugungsuntersuchungen wurden an polykristallinem Material durchgeführt.
 Einkristall: Die Beugungsuntersuchungen wurden an Einkristallen durchgeführt.
 Kristallfilm: Diese Bezeichnung wurde bei Elektronenbeugungsuntersuchungen verwandt, soweit nicht eindeutig zu erkennen war, ob es sich um einen Einkristallfilm oder um einen polykristallinen Film handelte.

Eine Vollständigkeit in der Erfassung der Literatur zur Neutronenbeugung ist nur für die Arbeiten angestrebt, die sich mit der Bestimmung der chemischen Elementarzelle und der Lageparameter beschäftigen. Neutronenbeugungsarbeiten, die sich mit der magnetischen Struktur auseinandersetzen, sind nach Möglichkeit zusätzlich erfasst worden.

Bei der Angabe spektroskopischer Methoden (NMR, NQR, IR, Raman) zur Strukturbestimmung wurde keine Vollständigkeit angestrebt.

Auf eine Angabe des „R-Wertes“ als Gütefaktor der Kristallstrukturbestimmung wurde verzichtet, da eine solche nur dann sinnvoll ist, wenn Lageparameter und Temperaturfaktoren mit Fehlergrenzen aufgeführt sind. Letztere konnten jedoch in den Bänden Landolt-Börnstein, Neue Serie, III/5, III/6 und III/7 aus Platzgründen nicht aufgenommen werden.

Kristallform und weitere Angaben:

In der dritten Zeile der 6. Spalte sind unter dem Stichwort „Kristallform und weitere Angaben“ zusätzliche Angaben aufgenommen, die zu einer Charakterisierung der Substanz beitragen. Im Allgemeinen sind diese Angaben der Literatur zu den Kristallstrukturbestimmungen entnommen. Daraus geht hervor, daß eine Vollständigkeit keineswegs angestrebt wurde. Es sind in der Hauptsache folgende Eigenschaften aufgeführt:

- Farbe
 Habitus
 Formen
 Zwillingsbildung
 Spaltbarkeit
 Härte
 Brechungsindizes
 Optischer Winkel
 Angaben zum Phasendiagramm
 Phasenbreite
 Schmelzpunkt („T_m")
 Siedepunkt („T_b")
 Thermische Stabilität
 Spezielle Methoden der Darstellung
 Einkristallzucht
 Löslichkeit

Magnetic properties
Information on ferroelectric, pyro- and piezoelectric properties
Curie temperature (" T_C ")
Néel temperature (" T_N ")

Epitaxy

Column 7: References

In the seventh column the references are given. The reference key is made in the following way.

The reference key starts with a number in bold type which is referring to Strukturberichte or Structure Reports, respectively. The number in bold type gives the volume, the following number(s) the page(s).

The reference keys consisting of numbers and letters refer to the original papers. The first two numbers give the last numbers of the year of publication. Following these are the first two letters of the name of the author cited first in the original paper. A serial number follows.

Usually the first reference gives the lattice constants of the third column. This and all following references contain information relevant to the crystal structure (e.g. atomic positions) of the compound under consideration. An asterisk indicates that further references relevant to this substance are given in the footnotes.

The references are collected together in subvolume III/7g.

Footnotes

The footnotes are assigned to the substances by the serial numbers. They contain data for which there was no room in the main table.

3.3 Reference sources

The structural data published up to and including 1961 were selected from Strukturberichte or Structure Reports, respectively. If there were obvious discrepancies and incompleteness in Strukturberichte or Structure Reports, the original paper was consulted for the evaluation of this reference. Also original papers from before 1961 were consulted, if through citations in newer literature it became obvious that Strukturberichte or Structure Reports were incomplete.

Publications for the years 1962 to 1971 inclusive were assessed as follows. Volumes 56 (1962) to 70 (1st half of the year 1969) of Chemical Abstracts were used as reference source. The key word "Crystal Structures" in the subject index was consulted. Whenever possible, for references found in this way the original papers were consulted. If the original paper was not available, this is mentioned in the reference list. In addition to the Chemical Abstracts a number of selected journals were consulted directly. A list of these journals ranging from 1962 to 1971 is given below.

Results published after 1971 in the relevant journals have been considered for the evaluation of data in some of the individual subvolumes.

Magnetische Eigenschaften
Angaben zur Ferroelektrizität, Pyro- und Piezoelektrizität
Curie-Temperatur (" T_C ")
Néel-Temperatur (" T_N ")

Epitaxie

7. Spalte: Literatur

In der siebten Spalte erfolgt die Literaturangabe. Der Literaturschlüssel ist wie folgt gebildet:

Der mit einer halbfetten Zahl beginnende Literaturschlüssel bezieht sich auf die Strukturberichte bzw. auf die Structure Reports. Dabei gibt die halbfette Zahl den Band, die nachfolgende(n) Zahl(en) die Seitenzahl(en) an.

Die aus Zahlen und Buchstaben gebildeten Literaturschlüssel beziehen sich auf die Originalliteratur. Die beiden ersten Ziffern geben die beiden letzten Ziffern des Jahres der Publikation an. Es folgen die beiden Anfangsbuchstaben des in der Literatur zuerst aufgeführten Autors. Die anschließende Zahl ist eine Laufzahl.

Die erste Literaturstelle gibt im Allgemeinen die Gitterkonstanten der Spalte 3. Diese und die daran anschließenden Literaturstellen enthalten relevante Informationen (z. B. Atomparameter) zur Kristallstruktur der jeweiligen Verbindung. Auf weitere Literatur zu dieser Substanz, die in den Fußnoten aufgeführt ist, wird mit einem Stern verwiesen.

Die Literaturzitate sind im Teilband III/7g zusammengefaßt.

Fußnoten

Die Fußnoten sind den Substanzen durch die laufende Nummer zugeordnet. In ihnen sind Daten, die in der Haupttabelle keinen Platz mehr finden konnten, aufgenommen.

3.3 Erfasste Literatur

Die bis einschließlich 1961 publizierten Strukturdaten wurden an Hand der Strukturberichte bzw. Structure Reports bearbeitet. Nur bei offensichtlichen Unstimmigkeiten und Unvollständigkeiten in den Strukturberichten oder Structure Reports wurde zur Bearbeitung dieser Literaturstelle das Original herangezogen. Ebenso wurde Originalliteratur aus dem Zeitraum vor 1961 bearbeitet, wenn durch Zitate in neuerer Literatur Lücken der Strukturberichte bzw. Structure Reports offenkundig wurden.

Die in den Jahren 1962–1971 einschließlich erschienene Literatur wurde wie folgt bearbeitet. Es wurden die Bände 56 (1962) bis 70 (1. Halbjahr 1969) der Chemical Abstracts zur Literatursuche herangezogen. Dabei wurde das Stichwort „Crystal Structures“ im Subject Index ausgewertet. Alle so erfaßten Literaturstellen wurden, soweit möglich, im Original eingesehen und bearbeitet. War die Originalliteratur nicht zugänglich, so ist das im Literaturzitat angegeben. Unabhängig von den Chemical Abstracts wurde eine Reihe ausgewählter Zeitschriften direkt ausgewertet. Ein Verzeichnis dieser Zeitschriften mit dem Erfassungszeitraum ist nachfolgend aufgeführt.

Die nach 1971 in den leicht zugänglichen Zeitschriften veröffentlichten Ergebnisse wurden, soweit möglich, bei der Bearbeitung einiger Teilbände berücksichtigt.