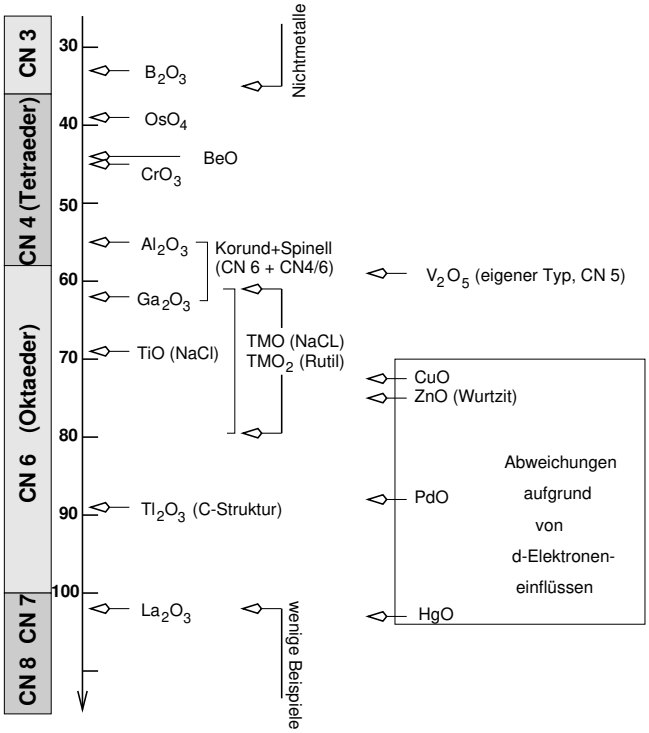
3.3. Binäre Oxide

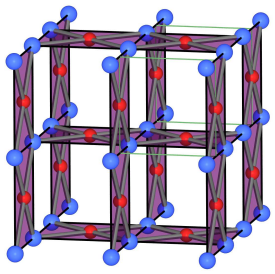
3.3.2. Pauling-Regeln

❶ Pauling-Regel ('Radienverhältnisregel'):
Um jedes Kation wird ein Koordinationspolyeder gebildet. Der Abstand zwischen Kation und Anion ist durch die Summe der Ionenradien bestimmt, die Koordinationszahl dagegen vom Radienverhältnis.

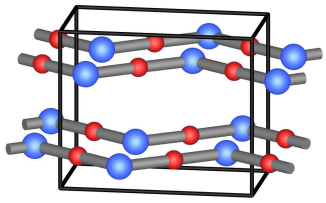
Gültigkeit und Abweichungen bei binären Oxide

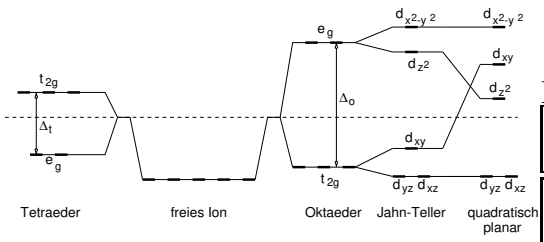


PtO:



HgO: (rot)





LFSE verschiedener 3d-Kationen in Oxiden

	Ion	Oktaederst.	Tetraederst.	Δ
		jeweils in [kJ/mol]		
d^3	Cr^{3+}	225	67	158
d^5	Fe^{3+}	0	0	0
d^6	Fe^{2+}	50	33	17
d^8	Ni^{2+}	122	36	86
d^{10}	Zn^{2+}	0	0	0

❷ Pauling-Regel ('Elektrostatische Valenzsummen-Regel'):
Die Valenz eines Anions in einer stabilen ionischen Struktur versucht die Stärke der elektrostatischen Bindungen der umgebenden Kationen zu kompensieren (und umgekehrt).

❸ Pauling-Regel:
Teilung von Kanten und besonders von Flächen zwischen Koordinationspolyedern reduziert die Stabilität einer Struktur. Dieser Effekt ist besonders ausgeprägt für Kationen hoher Valenz und geringer Koordinationszahl.

❹ Pauling-Regel:
In einer Struktur mit meherern Kationen weichen Kationen mit hohen Ladungen einem Teilen von Bauelemente aus.

❺ Pauling-Regel ('Sparsamkeitsregel'):
Die Zahl verschiedener Bauelemente in einer Kristallstruktur ist klein.