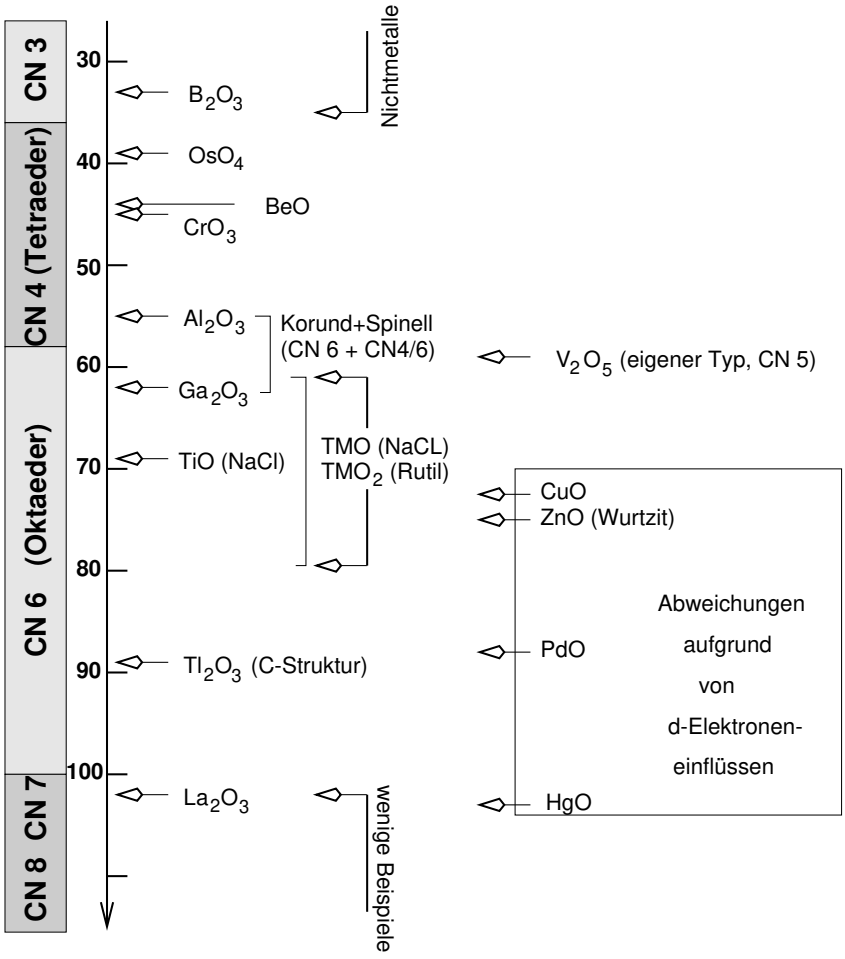
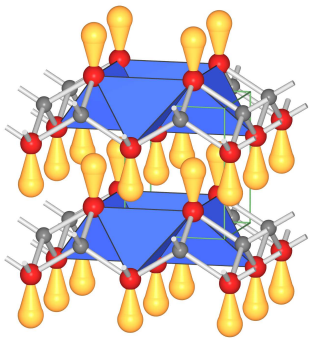
4. Ionenkristalle

4.2. Kondensation von KKP: Pauling-Regeln

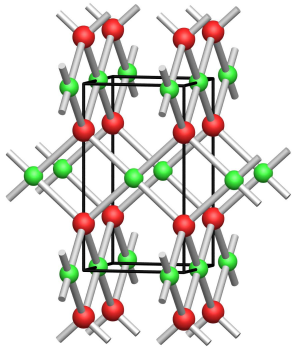
❶ Pauling-Regel: Radienverhältnisregel: Um jedes Kation wird ein Koordinationspolyeder gebildet. Der Abstand zwischen Kation und Anion ist durch die Summe der Ionenradien bestimmt, die Koordinationszahl dagegen vom Radienverhältnis.

Gültigkeit/Abweichungen (am Beispiel Oxide)

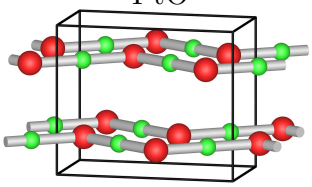




PbO



PtO



[b] HgO (rot)

Octahedral Site Preference Energy (in Oxiden, in kJ/mol)

		Oktaederst.	Tetraederst.	Δ
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 geringer Koordinationszahl.

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

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