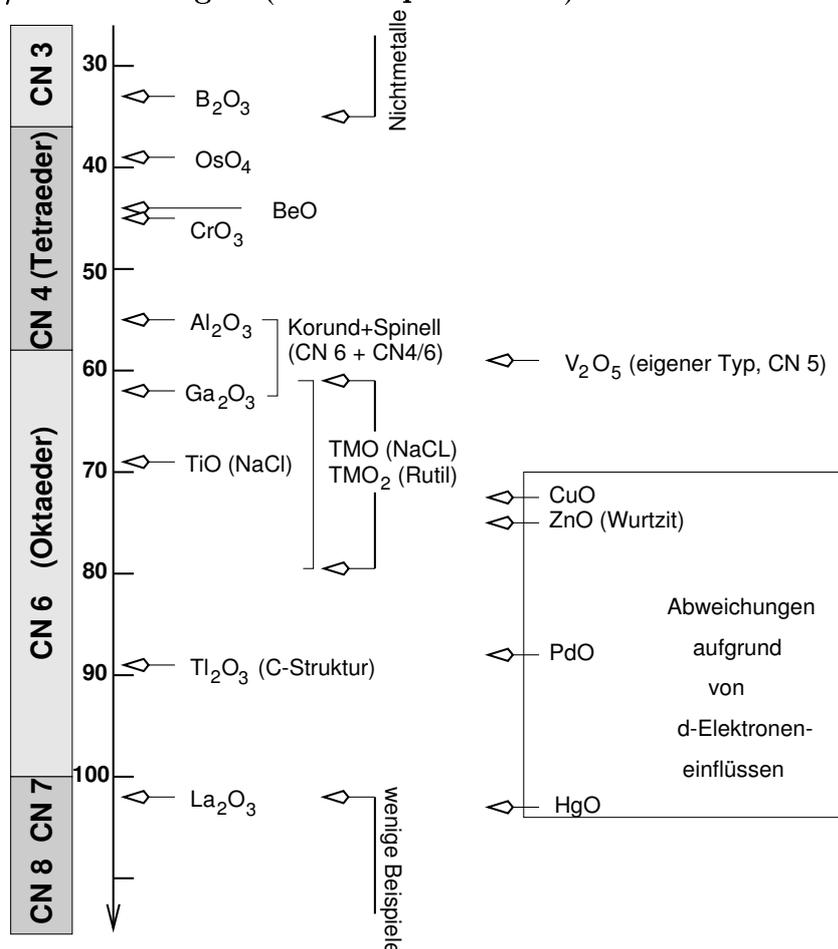


## 4. Ionenkristalle

### 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)



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

		Oktaederst.	Tetraederst.	$\Delta$
$d^3$	$\text{Cr}^{3+}$	225	67	158
$d^5$	$\text{Fe}^{3+}$	0	0	0
$d^6$	$\text{Fe}^{2+}$	50	33	17
$d^8$	$\text{Ni}^{2+}$	122	36	86
$d^{10}$	$\text{Zn}^{2+}$	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.