

Postadresse: Institut: Telefon: Telefax: D-52056 Aachen, Germany Jägerstraße 17-19, D-52066 Aachen ++49 241 80 96900 ++49 241 80 92184

http://www.xtal.rwth-aachen.de

GRUNDZÜGE DER KRISTALLOGRAPHIE

Die Paulingschen Regeln

• 1. Regel:

Um jedes Kation sind Anionen derart angeordnet, daß sie die Ecken eines Polyeders besetzen. Der Abstand Kation—Anion wird durch die Summe der Ionenradien, die Koordinationszahl des Kations durch das Radien-Verhältnis bestimmt.

• 2. Regel:

Die elektrostatische Valenz einer Bindung eines Kations ist definiert als $\frac{z}{n}$; wobei z die Ladung des Kations in Einheiten der Elementarladung ist und n die Koordinationszahl des Kations. Der Zustand maximaler Stabilität eines Ionenkristalls ist der, bei dem die Ladung jedes Anions gerade kompensiert wird durch die Summe der elektrostatischen Valenzen aller Bindungen zwischen Anion und unmittelbar benachbarten Kationen.

• 3. Regel:

Die Stabilität einer Ionenanordnung wird vermindert, je größer die Anzahl gemeinsamer Kanten und vor allem gemeinsamer Flächen der Koordinationspolyeder ist. Dieser Effekt ist groß für hochwertige Kationen mit kleiner Koordinationszahl, ganz besonders dann, wenn das Radienverhältnis bei dem unteren Grenzwert für die Stabilität des Koordinationspolyeders liegt.

• 4. Regel:

Kationen hoher Wertigkeit und geringer Koordinationszahl haben das Bestreben, so weit wie möglich voneinander entfernt zu sein; daher besteht die Tendenz, dass die Anionenpolyeder solcher Kationen möglichst nicht miteinander verbunden sind.

• 5. Regel:

Nach Möglichkeit ist die Umgebung aller chemisch gleichen Ionen gleichartig.