

## Pauling'sche Regeln: Zum Verständnis von Polyeder-Strukturen

- (1) Ein Polyeder aus Anionen wird um jedes Kationen gebildet. Der Kation-Anion Abstand ergibt sich aus der Summe der Ionenradien und die Koordinationszahl aus dem Verhältnis der Radien:  $r_{(\text{Kation})}/r_{(\text{Anion})}$
- (2) Die positiven und negativen Lokalladungen sollten ausgeglichen sein. Dabei entspricht die Summe an Valenzbindungen  $\sum s_{ij}$  der Oxidationsstufe  $V_i$  des Ions  $i$  :  
$$V_i = \sum s_{ij}$$
- (3) Die Anwesenheit von gemeinsamen Ecken und insbesondere gemeinsamen Seitenflächen senkt die Stabilität der Struktur. Dies gilt besonders für Kationen mit hoher Valenz und kleiner Koordinationszahl.
- (4) In einem Kristall, der unterschiedliche Kationen enthält, tendieren die Kationen, mit hoher Valenz und kleiner Koordinationszahl, nicht dazu, Polyeder-Elemente miteinander zu teilen.
- (5) Die Anzahl unterschiedlicher Koordinationsumgebungen für ein gegebenes Ion in einem Kristall tendiert dazu möglichst klein zu sein.