

## APPENDIX 2

# Charge Densities of Selected Ions

Charge densities ( $\text{C mm}^{-3}$ ) are calculated according to the formula

$$\frac{ne}{(4/3)\pi r^3}$$

where the ionic radii  $r$  are the Shannon-Prewitt values in millimeters (*Acta Cryst.*, 1976, A32, 751),  $e$  is the electron charge ( $1.60 \times 10^{-19}$  C), and  $n$  represents the ion charge. The radii used are the values for six-coordinate ions except where noted by (T) for four-coordinate tetrahedral ions; (HS) and (LS) designate the high-spin and low-spin radii for the transition metal ions.

Cation	Charge density	Cation	Charge density	Cation	Charge density
Ac <sup>3+</sup>	57	B <sup>3+</sup>	1663	Cl <sup>7+</sup>	3880
Ag <sup>+</sup>	15	Ba <sup>2+</sup>	23	Cm <sup>3+</sup>	84
Ag <sup>2+</sup>	60	Be <sup>2+</sup>	1108 (T)	Co <sup>2+</sup>	155 (LS)
Ag <sup>3+</sup>	163	Bi <sup>3+</sup>	72	Co <sup>2+</sup>	108 (HS)
Al <sup>3+</sup>	770 (T)	Bi <sup>5+</sup>	262	Co <sup>3+</sup>	349 (LS)
Al <sup>3+</sup>	364	Bk <sup>3+</sup>	86	Co <sup>3+</sup>	272 (HS)
Am <sup>3+</sup>	82	Br <sup>7+</sup>	1796	Co <sup>4+</sup>	508 (HS)
As <sup>3+</sup>	307	C <sup>4+</sup>	6265 (T)	Cr <sup>2+</sup>	116 (LS)
As <sup>5+</sup>	884	Ca <sup>2+</sup>	52	Cr <sup>2+</sup>	92 (HS)
At <sup>7+</sup>	609	Cd <sup>2+</sup>	59	Cr <sup>3+</sup>	261
Au <sup>+</sup>	11	Ce <sup>3+</sup>	75	Cr <sup>4+</sup>	465
Au <sup>3+</sup>	118	Ce <sup>4+</sup>	148	Cr <sup>5+</sup>	764
B <sup>3+</sup>	7334 (T)	Cf <sup>3+</sup>	88	Cr <sup>6+</sup>	1175
Cs <sup>+</sup>	6	Mn <sup>4+</sup>	508	Sb <sup>3+</sup>	157
Cu <sup>+</sup>	51	Mn <sup>7+</sup>	1238	Sb <sup>5+</sup>	471
Cu <sup>2+</sup>	116	Mo <sup>3+</sup>	200	Sc <sup>3+</sup>	163
Dy <sup>2+</sup>	43	Mo <sup>6+</sup>	589	Se <sup>4+</sup>	583
Dy <sup>3+</sup>	99	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	11	Se <sup>6+</sup>	1305
Er <sup>3+</sup>	105	Na <sup>+</sup>	24	Si <sup>4+</sup>	970
Eu <sup>2+</sup>	34	Nb <sup>3+</sup>	180	Sm <sup>3+</sup>	86
Eu <sup>3+</sup>	88	Nb <sup>5+</sup>	402	Sn <sup>2+</sup>	54

HS, high spin; LS, low spin; T, four-coordinate tetrahedral ions.

<b>Cation</b>	<b>Charge density</b>	<b>Cation</b>	<b>Charge density</b>	<b>Cation</b>	<b>Charge density</b>
F <sup>7+</sup>	25 110	Nd <sup>3+</sup>	82	Sn <sup>4+</sup>	267
Fe <sup>2+</sup>	181 (LS)	Ni <sup>2+</sup>	134	Sr <sup>2+</sup>	33
Fe <sup>2+</sup>	98 (HS)	No <sup>2+</sup>	40	Ta <sup>3+</sup>	180
Fe <sup>3+</sup>	349 (LS)	Np <sup>5+</sup>	271	Ta <sup>5+</sup>	402
Fe <sup>3+</sup>	232 (HS)	Os <sup>4+</sup>	335	Tb <sup>3+</sup>	96
Fe <sup>6+</sup>	3864	Os <sup>6+</sup>	698	Tc <sup>4+</sup>	310
Fr <sup>+</sup>	5	Os <sup>8+</sup>	2053	Tc <sup>7+</sup>	780
Ga <sup>3+</sup>	261	P <sup>3+</sup>	587	Te <sup>4+</sup>	112
Gd <sup>3+</sup>	91	P <sup>5+</sup>	1358	Te <sup>6+</sup>	668
Ge <sup>2+</sup>	116	Pa <sup>5+</sup>	245	Th <sup>4+</sup>	121
Ge <sup>4+</sup>	508	Pb <sup>2+</sup>	32	Ti <sup>2+</sup>	76
Hf <sup>4+</sup>	409	Pb <sup>4+</sup>	196	Ti <sup>3+</sup>	216
Hg <sup>+</sup>	16	Pd <sup>2+</sup>	76	Ti <sup>4+</sup>	362
Hg <sup>2+</sup>	49	Pd <sup>4+</sup>	348	Ti <sup>+</sup>	9
Ho <sup>3+</sup>	102	Pm <sup>3+</sup>	84	Tl <sup>3+</sup>	105
I <sup>7+</sup>	889	Po <sup>4+</sup>	121	Tm <sup>2+</sup>	48
In <sup>3+</sup>	138	Po <sup>6+</sup>	431	Tm <sup>3+</sup>	108
Ir <sup>3+</sup>	208	Pr <sup>3+</sup>	79	U <sup>4+</sup>	140
Ir <sup>5+</sup>	534	Pr <sup>4+</sup>	157	U <sup>6+</sup>	348
K <sup>+</sup>	11	Pt <sup>2+</sup>	92	V <sup>2+</sup>	95
La <sup>3+</sup>	72	Pt <sup>4+</sup>	335	V <sup>3+</sup>	241
Li <sup>+</sup>	98 (T)	Pu <sup>4+</sup>	153	V <sup>4+</sup>	409
Li <sup>+</sup>	52	Ra <sup>2+</sup>	18	V <sup>5+</sup>	607
Lu <sup>3+</sup>	115	Rb <sup>+</sup>	8	W <sup>4+</sup>	298
Mg <sup>2+</sup>	120	Re <sup>7+</sup>	889	W <sup>6+</sup>	566
Mn <sup>2+</sup>	114 (LS)	Rh <sup>3+</sup>	224	Y <sup>3+</sup>	102
Mn <sup>2+</sup>	84 (HS)	Ru <sup>3+</sup>	208	Yb <sup>3+</sup>	111
Mn <sup>3+</sup>	307 (LS)	S <sup>4+</sup>	1152	Zn <sup>2+</sup>	112
Mn <sup>3+</sup>	232 (HS)	S <sup>6+</sup>	2883	Zr <sup>4+</sup>	240

Anion	Charge density	Anion	Charge density	Anion	Charge density
As <sup>3-</sup>	12	I <sup>-</sup>	4	O <sub>2</sub> <sup>2-</sup>	19
Br <sup>-</sup>	6	MnO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	4	OH <sup>-</sup>	23
CN <sup>-</sup>	7	N <sup>3-</sup>	50	P <sup>3-</sup>	14
CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	17	N <sub>3</sub> <sup>-</sup>	6	S <sup>2-</sup>	16
Cl <sup>-</sup>	8	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	9	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	5
ClO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	3	O <sup>2-</sup>	40	Se <sup>2-</sup>	12
F <sup>-</sup>	24	O <sub>2</sub> <sup>-</sup>	13	Te <sup>2-</sup>	9