



Das Radienquotientenmodell

Das Radienquotientenmodell ist eine Möglichkeit zu erklären, warum eine Verbindung in einem bestimmten Strukturtyp kristallisiert. Das Modell bezieht sich auf Ionenverbindungen. Ionenverbindungen entstehen durch Vereinigung von ausgeprägt metallischen Elementen mit ausgeprägt nicht-metallischen Elementen (z.B. NaCl). Ein Ionenkristall mit einer bestimmten Zusammensetzung, z.B. AB, kann in unterschiedlichen geometrischen Anordnungen (unterschiedliche Strukturtypen) mit jeweils unterschiedlichen Koordinationszahlen auftreten:

Beispiel: Zusammensetzung AB: CsCl-Typ ($KZ_{\text{Kation}}: 8$)
 NaCl-Typ ($KZ_{\text{Kation}}: 6$)
 ZnS-Typ ($KZ_{\text{Kation}}: 4$)

Nach welchen Kriterien wird aber entschieden, in welchem Strukturtyp ein Salz kristallisiert?

Eine Möglichkeit dies herauszufinden ist das Radienquotientenmodell.

Der Radienquotient ist die relative Größe von Kationen und Anionen. Man betrachtet hierbei das Verhältnis zwischen Kationenradius r_K und Anionenradius r_A .

Radienquotient: (r_K/r_A)

Das Radienquotientenmodell beruht auf der Annahme, dass die ideale Struktur diejenige ist bei der sich Kationen und Anionen gerade berühren. Für jede Koordinationszahl kann man den Radienquotienten bei dem dies zutrifft berechnen. Für die Koordinationszahl 4 ergibt sich ein idealer Wert von 0,225, für die Koordinationszahl 6 ein Wert von 0,414 und für die Koordinationszahl 8 ein Wert von 0,732.

Koordinationszahl KZ	Koordinations- polyeder	Radienquotient r_K/r_A	Strukturtyp
4	Tetraeder	0,225-0,414	Zinkblende (AB), Cristobalit (AB ₂)
6	Oktaeder	0,414-0,732	Natriumchlorid (AB), Rutil (AB ₂)
8	Würfel	0,732-1	Caesiumchlorid (AB), Fluorit (AB ₂)

Das Radienquotientenmodell zeigt, dass die Koordinationszahl in vielen Fällen vom Radienquotienten abhängig ist.

Dieses Modell ist allerdings eine Vereinfachung und stößt daher an seine Grenzen. Die Struktur, in der eine Ionenverbindung tatsächlich kristallisiert ist diejenige für die die Gitterenergie am größten ist.

Fragen:

- 1) Beschreiben Sie das Radienquotientenmodell.
- 2) Berechnen Sie den Radienquotienten für eine oktaedrische Koordination.

Literatur:

Riedel, E. /Janiak ,C. (2007), *Anorganische Chemie*,7. Auflage, Berlin

James E. Huheey, Ellen A. Keiter, Ralf Steudel, Richard L. Keiter, *Anorganische Chemie*
(http://books.google.de/books?id=xD7v_PSYPtYC&printsec=frontcover, 05.07.09, 20:30)

Müller, U., *Anorganische Strukurchemie*, 3.Auflage

(<http://books.google.de/books?id=W8Gnx951HOoC&pg=PA279&dq=radienquotient>,
05.07.09, 20:32)