

ENERGÍA RETICULAR (IMPORTANTE)

$$U = \frac{N \Delta Z^+ Z^- e^2}{d_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

unidades - $\begin{matrix} \text{cm} \\ \text{u.e.e} \end{matrix}$

Δ - cte. de Madelung.

$Z^+ Z^- \rightarrow$ carga de iones

$d_0 \rightarrow$ suma de radios atómicos

$e \rightarrow$ carga del e^- (u.e.e.)

$n \rightarrow$ tabla correspondiente a conf. Born Haber.

si tenemos varias n hacemos la media aritmética.

$U \Rightarrow$ Ergios $\cdot \text{mol}^{-1}$

1 ergio = 10^{-7} julios

0.24 cal = 1 julio

Ejemplo: ClK $\Delta = 1.74$ $Z^+ = 1$ $Z^- = 1$

$d_0 = 1.33 \times 10^{-8} \text{ cm} + 1.81 \times 10^{-8} \text{ cm} = 3.12 \times 10^{-8} \text{ cm}$. $q_e = 4.8 \cdot 10^{-10} \text{ u.e.e.}$

$n = 9$ $U = 6.87 \cdot 10^{12} \text{ ergios} \cdot \text{mol}^{-1}$

PORCENTAJE DE CARACTER IÓNICO.

LiH $\mu = 1.96 \times 10^{-29} \text{ cm}$.

$d = 1.96 \text{ Å}$

$\Delta^0 = 10^{-8} \text{ cm} = 10^{-10} \text{ m}$.

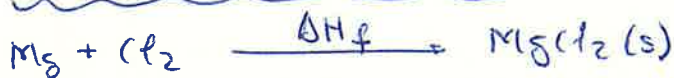
$\mu = c \cdot d$ unidades c.m.

si fuese iónico totalmente el momento dipolar sería.

$\mu = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C} \times 1.596 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 2.5 \times 10^{-29} \text{ cm}$.

% iónico: $\frac{1.96 \text{ experimental}}{2.5 \text{ teórico}} \times 100 = 78.4\%$ caracter iónico

* CICLO BORN-HABER.



$\left. \begin{array}{l} \text{L} \rightarrow \text{disociarlo} \rightarrow \text{ionizarlo } 2\text{Cl}^- \\ \text{sublimación} \rightarrow \text{ionizarlo } \text{Mg}^{2+} \end{array} \right\} U \text{ energía reticular.}$

$$\Delta H_f = \Delta H_s + 2\Delta E + \sum EI + \Delta Hd + U$$

Energía reticular o de red (u)

$$u = - \frac{NM z_c z_a e^2}{r_c + r_a} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

U = energía reticular en ergios

N = no Avogadro 6.023×10^{23} átomos/mol.

M = llamada cte de Madelung depende de la disposición geométrica de los iones.

z_c y z_a son las cargas del catión y del anión respectivamente.

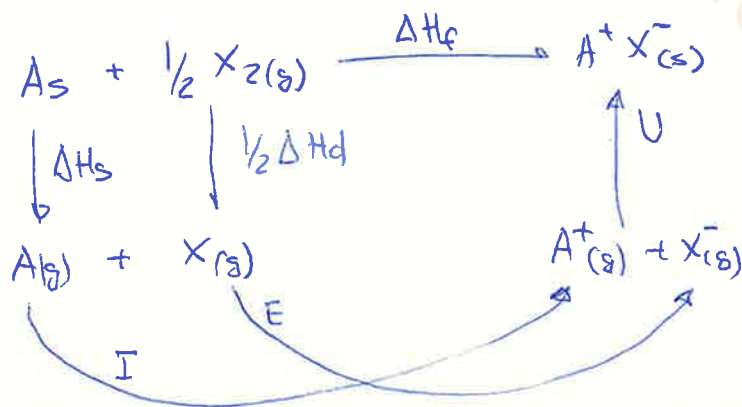
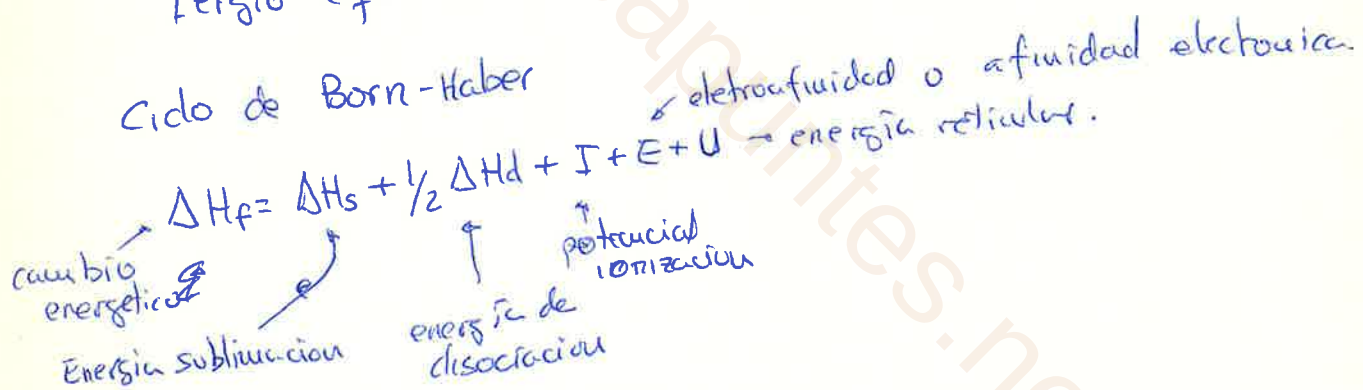
e = es la carga del electrón en unidades electrostáticas ($e = 4.803 \times 10^{-10}$ u.e.e)

r_c y r_a = son los radios del catión y del anión respectivamente en centímetros

n = coef. de compresibilidad o coef. Born.

1 ergio equivale a 2.39×10^{-11} Kcal.

Ciclo de Born-Haber



1.- Con los datos que se aportan, de un valor aproximado de la entalpía de sublimación del potasio. Para ello, emplee un ciclo de Born-Haber y la ecuación para la energía reticular.

¿Porque es un valor aproximado?

ΔH_f de formación de KF

ΔH_D de disociación de F_2

ΔH_I de ionización de K

ΔH_{AF} afinidad electrónica del Fluor

constante de Madelung

radio F^-

radio K^+

Valor del coeficiente n Born

carga del electrón

Energía reticular.

$$U = \frac{-N_A M Z_c Z_a e^2}{r_c + r_a} \left(1 - \frac{1}{n}\right) = - \frac{6.023 \cdot 10^{23} \cdot 1.76267 \cdot (-4.8032 \cdot 10^{-10})^2}{1.36 \cdot 10^{-8} + 1.33 \cdot 10^{-7}}$$

$$\left(1 - \frac{1}{8}\right) = - \frac{2.44931'82}{2.69 \cdot 10^{-8}} \left(\frac{7}{8}\right) = -7.96 \cdot 10^{12} \text{ ergios/mol.}$$

$$-7.96 \cdot 10^{12} \text{ erg/mol} \cdot 2.39 \cdot 10^{-11} \text{ Kcal/erg} = -190 \text{ Kcal/mol.}$$

Ciclo de BORN-HABER

$$\Delta H_f = \Delta H_s + \frac{1}{2} \Delta H_D + I + E + U$$

$$-135'12 = \Delta H_s + \frac{1}{2} (39'92) + 100'56 - 79'92 - 190$$

$$-135'12 = \Delta H_s + 19'96 + 100'56 - 79'92 - 190$$

$$\Delta H_s = 14'28 \text{ Kcal/mol.}$$

$$1 \text{ ergio} = 10^{-7} \text{ julios}$$

$$0.24 \text{ cal} = 1 \text{ julio.}$$

$$1 \text{ erg} = 10^{-7} \text{ julios}$$

CICLO DE BORN-HABER.

