

Sólidos Iónicos

El enlace Iónico (2)



Energía Reticular

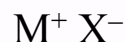
La energía de una red cristalina de un compuesto iónico es la energía liberada cuando los iones se acercan desde el infinito para formar el cristal, considerando los iones en estado de vapor:



El estudio mediante un *modelo electrostático simple* proporciona una aproximación suficientemente buena.

Estudio teórico de la energía de enlace iniciado por Born y Landé.

Comenzaremos por estudiar lo que se ha denominado “*el par iónico*”, un anión y un catión monovalentes, de un compuesto de estequiometría 1:1 (simplicidad matemática)



* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, **pp 224**.

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 99**.

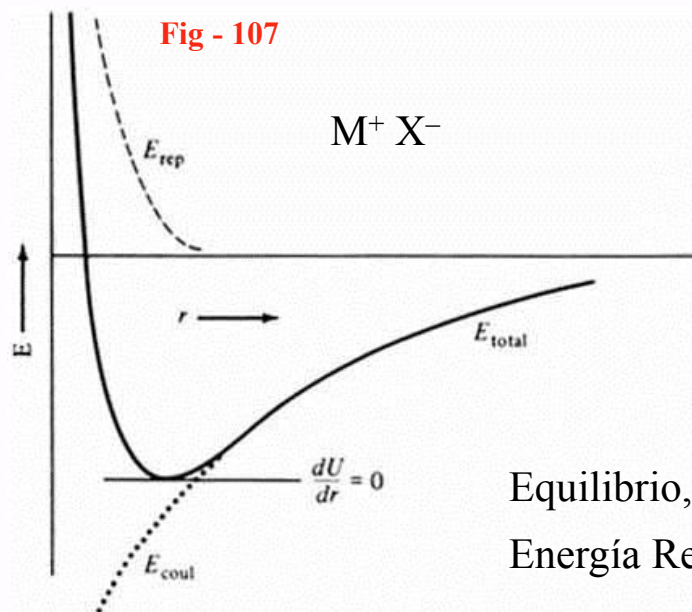
* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008. **pp 171**.

* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, **pp 320**.

* Rodgers, G. E. Traducción española: “*Química Inorgánica, Introducción a la Química de Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva*”, McGraw-Hill, 1995, **pp 227**.

Energía Reticular

Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 100.



$$r = \infty \quad E = 0$$

Al acercarse, interacción electrostática del par iónico

$$E = \frac{Z^+ \cdot Z^-}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad E = -\frac{e^2}{r}$$

Repulsiones interelectrónicas, internucleares, ...

$$E = +\frac{B}{r^n} \quad \text{Positiva, dado que es repulsiva}$$

Equilibrio, $r = r_0$, mínimo de energía

$$\text{Energía Reticular} = U_r = E_{\text{coulombiana}} + E_{\text{repulsiva}}$$

$$U_r = -\frac{e^2}{r} + \frac{B}{r^n}$$

$r > r_0$ Fuerzas atractivas

$r < r_0$ Fuerzas repulsivas

$r = r_0$ situación de equilibrio,

Condición Matemática de Mínimo

$$\left(\frac{dU_r}{dr} \right)_{r=r_0} = 0$$

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 224.

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 99.

* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 171.

* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 320.

* Rodgers, G. E. Traducción española: "Química Inorgánica, Introducción a la Química de Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva", McGraw-Hill, 1995, pp 227.

Energía Reticular

Condición Matemática de Mínimo

$$U_r = -\frac{e^2}{r} + \frac{B}{r^n}$$

$$\left(\frac{dU_r}{dr}\right)_{r=r_0} = 0$$

$$\frac{d(1/r)}{dr} = -\frac{1}{r^2} \quad \frac{d(-1/r)}{dr} = -\frac{-1}{r^2} = \frac{1}{r^2}$$

$$\frac{d(1/r^n)}{dr} = -\frac{nr^{n-1}}{r^{2n}}$$

$$\left(\frac{dU_r}{dr}\right)_{r=r_0} = \frac{e^2}{r^2} - \frac{nBr^{n-1}}{r^{n+1}r^{n-1}} = \frac{e^2}{r^2} - \frac{nB}{r^{n+1}} = 0 \quad \frac{e^2}{r_0^2} - \frac{nB}{r_0^{n+1}} = 0 \quad \frac{e^2}{r_0^2} = \frac{nB}{r_0^{n+1}}$$

$$B = \frac{e^2 r_0^{n+1}}{n \cdot r_0^2} = \frac{e^2 r_0^{n-1}}{n}$$

$$U_{r_0} = -\frac{e^2}{r_0} + \frac{B}{r_0^n} = -\frac{e^2}{r_0} + \frac{e^2 r_0^{n-1}}{n \cdot r_0^n} = -\frac{e^2}{r_0} + \frac{e^2}{n \cdot r_0} = \frac{e^2}{r_0} \left(\frac{1}{n} - 1\right) = -\frac{e^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

$$U_{r_0} = -\frac{e^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

$$U_{r_0} = -\frac{N_a Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

Energía desprendida al formarse una
"molécula" (**par iónico**)
Para un mol, ...

Energía reticular: Energía desprendida al formarse un
mol de compuesto iónico partiendo de los iones en
estado gaseoso.

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 224.

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 99.

* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 171.

* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 320.

* Rodgers, G. E. Traducción española: "Química Inorgánica, Introducción a la Química de Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva", McGraw-Hill, 1995, pp 227.

Energía Reticular

U_r kCal/mol	F ⁻	Cl ⁻	Br ⁻	I ⁻
Li ⁺	124	104	107	99
Na ⁺	110	105	99	94
K ⁺	105	95	91	89

$$r_o = r^+ + r^-$$

$$\left. \begin{array}{l} q^+ \uparrow, q^- \uparrow \\ r^+ \downarrow, r^- \downarrow \end{array} \right\} U_r \uparrow, \text{ más estable}$$

$$\left. \begin{array}{l} q^+ \downarrow, q^- \downarrow \\ r^+ \uparrow, r^- \uparrow \end{array} \right\} U_r \downarrow, \text{ menos estable}$$

La ecuación de un par iónico no es aplicable tal cual a un cristal, es incorrecta.

¿Por qué?

$$U_{r_o} = -\frac{N_a Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_o r_o} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

Energía reticular: Energía desprendida al formarse un mol de compuesto iónico partiendo de los iones en estado gaseoso.

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 224.

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 99.

* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008. pp 171.

* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 320.

* Rodgers, G. E. Traducción española: "Química Inorgánica, Introducción a la Química de Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva", McGraw-Hill, 1995, pp 227.

Energía Reticular

Red NaCl, estequiometría 1:1, geoméricamente más sencillo

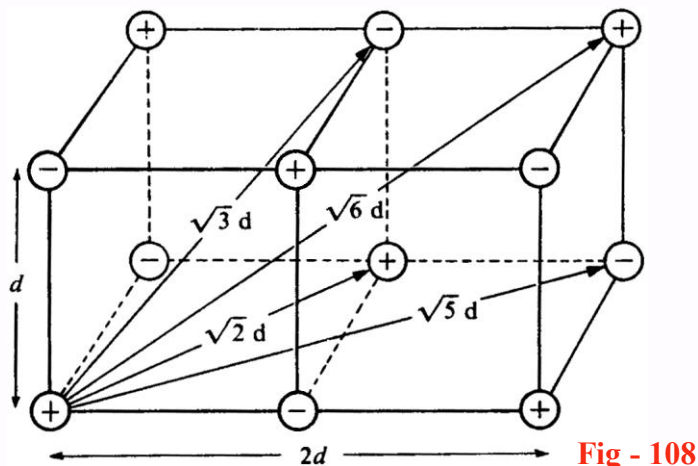


Fig - 108

En un par iónico la interacción electrostática era

$$E = \frac{Z^+ \cdot Z^-}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

En un cristal $E_{\text{coulombiana}} = E_{\text{atractiva}} + E_{\text{repulsiva}}$

Un catión M^+ tiene

6 iones X^-	a una distancia r
12 M^+	$r\sqrt{2}$
8 X^-	$r\sqrt{3}$
6 M^+	$2r$
...	...

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Conceptos y Modelos en Química Inorgánica", Reverté, 1977, pp 146.

$$E = -\frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} 6 + \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \frac{12}{\sqrt{2}} - \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \frac{8}{\sqrt{3}} + \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \frac{6}{2} \dots$$

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 228.

$$E = -\frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \left(6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{2} + \dots \right)$$

Sucesión convergente, Constante de Madelung = A

Values of Madelung constants

Structure	Madelung constant	Fig - 109 Structure	Madelung constant
Sodium chloride	1.74756	Rutile (TiO ₂)	2.408
Cesium chloride	1.76267	Anatase (TiO ₂)	2.400
Zinc blende (ZnS)	1.63806	Cadmium iodide	2.36
Wurtzite (ZnS)	1.64132	β-Quartz (SiO ₂)	2.201
Fluorite (CaF ₂)	2.51939	Corundum (Al ₂ O ₃)	4.040

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 224.

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 99.

* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 171.

* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 320.

* Rodgers, G. E. Traducción española: "Química Inorgánica, Introducción a la Química de Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva", McGraw-Hill, 1995, pp 227.

Energía Reticular

Red NaCl, estequiometría 1:1, geoméricamente más sencillo

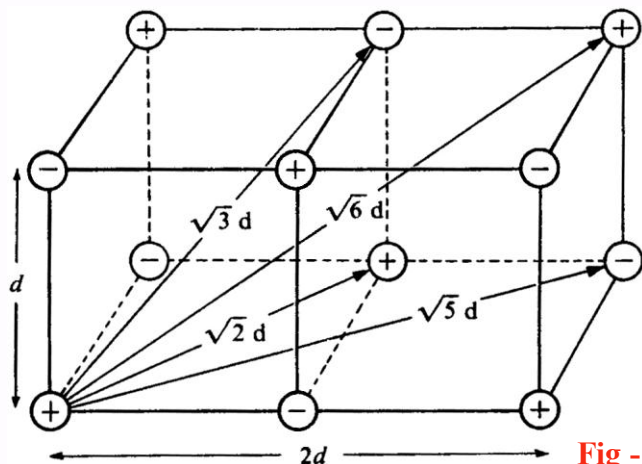


Fig - 108

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Conceptos y Modelos en Química Inorgánica", Reverté, 1977, pp 146.

En un par iónico la interacción electrostática era

$$E = \frac{Z^+ \cdot Z^-}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

En un cristal iónico la interacción electrostática es

$$E = -\frac{Z^2 e^2 A}{4\pi\epsilon_0 r}$$

"A" veces mayor más estable
A = 1,74756 NaCl



$$E = \frac{Z^+ Z^- e^2 A}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$E = +\frac{B}{r^n}$$

1 mol de cristal
 N_a

$$U_r = \frac{N_a Z^+ Z^- e^2 A}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{N_a B}{r^n}$$

Condición Matemática de Mínimo

$$r = r_0 \quad U_{r_0} = \frac{N_a Z^+ Z^- e^2 A}{4\pi\epsilon_0 r_0} + \frac{N_a B}{r_0^n}$$

$$\left(\frac{dU_r}{dr} \right)_{r=r_0} = 0$$

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 224.

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 99.

* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 171.

* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 320.

* Rodgers, G. E. Traducción española: "Química Inorgánica, Introducción a la Química de Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva", McGraw-Hill, 1995, pp 227.

Energía Reticular

$$U_{r_o} = \frac{N_a Z^+ Z^- e^2 A}{4 \pi \epsilon_o r_o} + \frac{N_a B}{r_o^n}$$

$$\left(\frac{dU_r}{dr} \right)_{r=r_o} = 0 = -\frac{N_a Z^+ Z^- e^2 A}{4 \pi \epsilon_o r_o^n} - \frac{n N_a B}{r_o^{n+1}} = 0$$

$$B = -\frac{N_a Z^+ Z^- e^2 A r_o^{n+1}}{n N_a 4 \pi \epsilon_o r_o^2} = -\frac{Z^+ Z^- e^2 A r_o^{n-1}}{n 4 \pi \epsilon_o}$$

$$U_{r_o} = \frac{N_a Z^+ Z^- e^2 A}{4 \pi \epsilon_o r_o} - \frac{N_a Z^+ Z^- e^2 A r_o^{n-1}}{n 4 \pi \epsilon_o r_o^n}$$

$$U_{r_o} = \frac{N_a Z^+ Z^- e^2 A}{4 \pi \epsilon_o r_o} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

Ecuación de Born-Landée

$$U_{r_o} = \frac{N_a Z^+ Z^- e^2 A}{4 \pi \epsilon_o r_o} \left(1 - \frac{1}{n} \right) \quad \begin{array}{l} Z^+ = +1 \\ Z^- = -1 \end{array} \quad \text{Con su signo}$$

$$U_{r_o} = -\frac{N_a Z^+ Z^- e^2 A}{4 \pi \epsilon_o r_o} \left(1 - \frac{1}{n} \right) \quad \begin{array}{l} Z^+ = 1 \\ Z^- = 1 \end{array} \quad \text{Sin su signo}$$

U_r Energía desprendida cuando ...

$$U_r < 0$$

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 224.

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 99.

* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008. pp 171.

* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 320.

* Rodgers, G. E. Traducción española: "Química Inorgánica, Introducción a la Química de Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva", McGraw-Hill, 1995, pp 227.

Energía Reticular

NaCl

$$A = 1,74756$$

$$Z^+ = +1$$

$$Z^- = -1$$

$$r_0 = 2,814 \text{ \AA} = 2,814 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$n = 8$$

$$N_a = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ iones/mol}$$

$$e = 1,60218 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$\pi = 3,14159$$

$$\epsilon_0 = 8,854188 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1}$$

$$U_r \text{ (Teórica)} = -755 \text{ kJ/mol}$$

$$U_r \text{ (Experimental)} = -770 \text{ kJ/mol (V.d.W.)}$$

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 224.

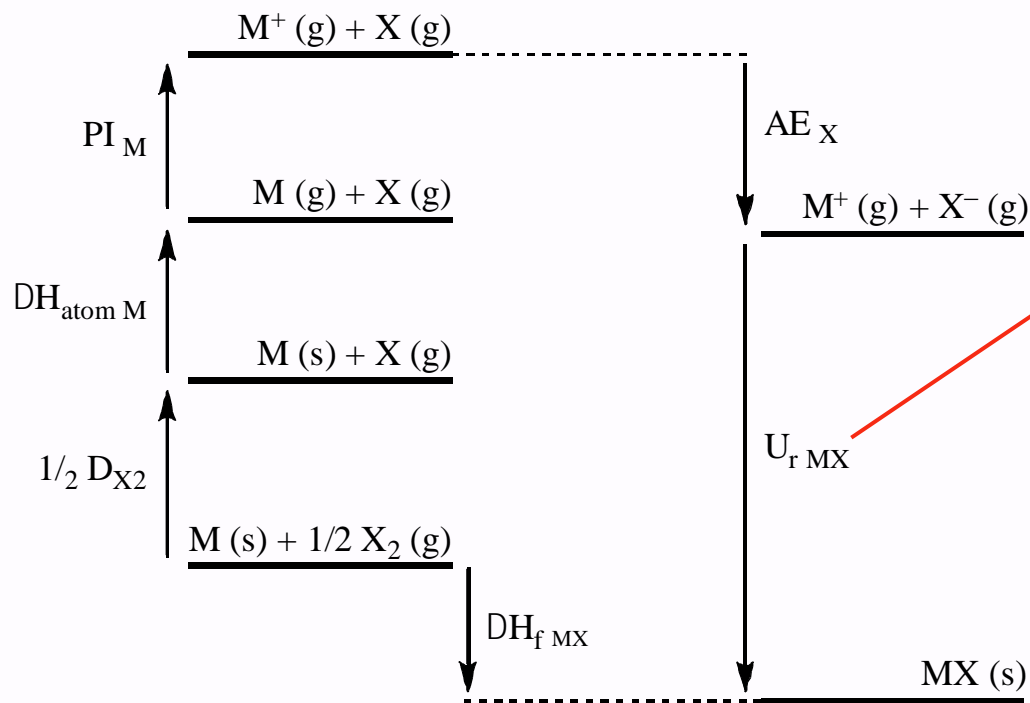
* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 99.

* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 171.

* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 320.

* Rodgers, G. E. Traducción española: "Química Inorgánica, Introducción a la Química de Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva", McGraw-Hill, 1995, pp 227.

Energía Reticular Ciclo de Born-Haber



$U_{r(MX)} = -185,9 \text{ kCal/mol}$

(-) Desprendida

Ec. Born-Landée

$U_{r(MX)} = -183,3 \text{ kCal/mol}$

De los dos valores
Cual es la *correcta*
o cual es *más correcta*

¿Por qué?

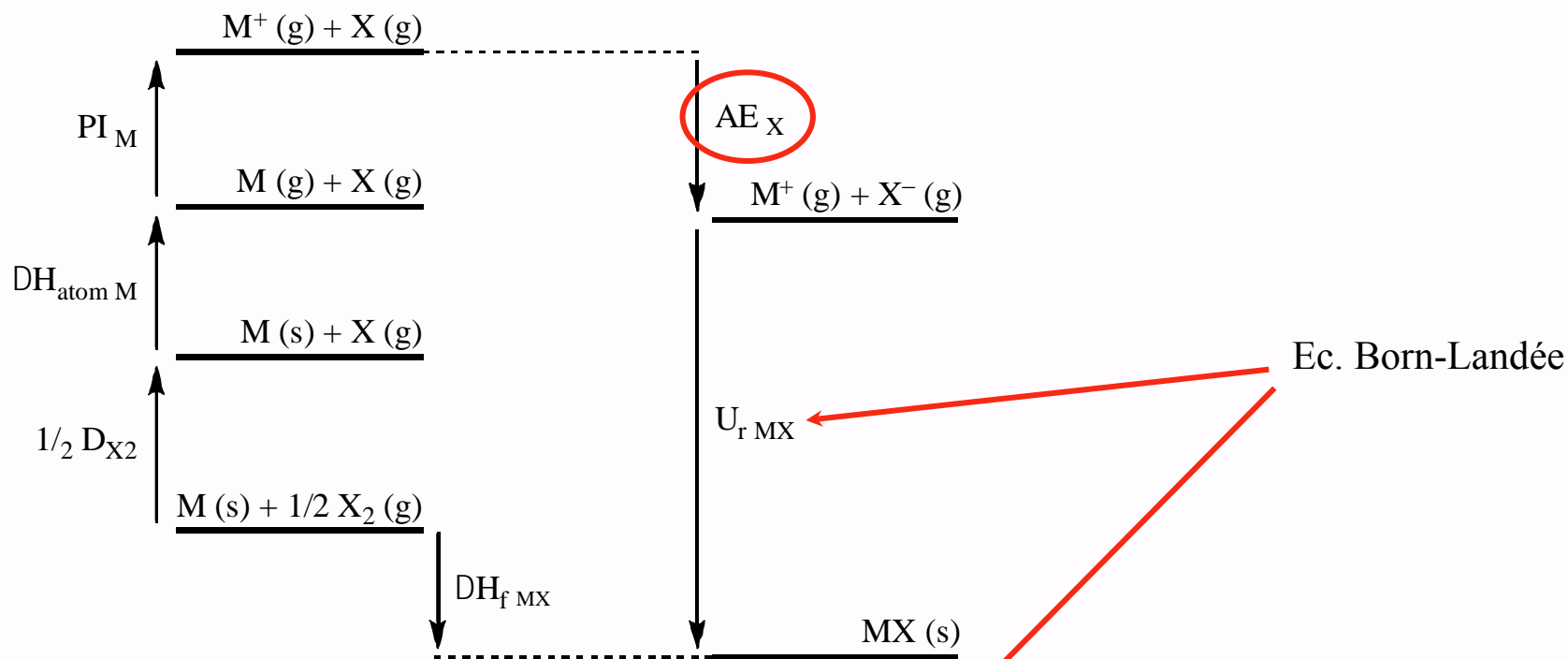
$$\Delta H_f(MX) = \Delta H_{atom(M)} + 1/2 D_{(X_2)} + PI_{(M)} + AE_{(X)} + U_{r(MX)}$$

(-) (+) (+) (+) (-) (-)

$$-98,2 = +26 + 1/2 \cdot 58 + 118,5 - 85,8 + U_{r(MX)}$$

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 230.
 * Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 104.
 * Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 174.
 * Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F. Traducción española de la 4ª Ed. "Química Inorgánica", McGraw-Hill Interamericana, 2008, pp 93.
 * Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 320.
 * Rodgers, G. E. Traducción española: "Química Inorgánica, Introducción a la Química de Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva", McGraw-Hill, 1995, pp 235.

Energía Reticular Ciclo de Born-Haber



$$\Delta H_f(MX) = \Delta H_{atom(M)} + 1/2 D_{(X_2)} + PI_{(M)} + AE_{(X)} + U_r(MX)$$

Ec. Born-Landée

- * Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 230.
- * Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 104.
- * Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 174.
- * Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F. Traducción española de la 4ª Ed. "Química Inorgánica", McGraw-Hill Interamericana, 2008, pp 93.
- * Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 320.
- * Rodgers, G. E. Traducción española: "Química Inorgánica, Introducción a la Química de Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva", McGraw-Hill, 1995, pp 235.

Energía Reticular **Ciclo de Born-Haber**

Tabla 3-10. *Valores experimentales y calculados de la energía reticular de haluros alcalinos (en kJ mol⁻¹).*

Haluro	U_o experimental	U_o calculado	$\frac{U_{calc}}{U_{exp}} \cdot 10^2$
LiF	1.034,28	1.007,51	97,41
LiCl	840,15	811,28	96,56
LiBr	781,15	766,09	98,07
LiI	718,39	708,35	98,60
NaF	914,20	902,07	98,67
NaCl	770,27	755,21	98,05
NaBr	728,43	718,81	98,68
NaI	680,74	663,16	97,42
KF	812,11	797,47	98,20
KCl	710,24	687,43	98,03
KBr	671,11	659,82	98,32
KI	632,20	623,00	98,54
RbF	780,32	761,07	97,53
RbCl	682,41	661,49	96,93
RbBr	653,96	636,39	97,31
RbI	616,72	602,50	97,69
CsF	743,92	623,00	97,19
CsCl	629,69	622,58	98,87
CsBr	612,54	599,57	97,88
CsI	584,50	568,19	97,21

Grado de aproximación satisfactorio

Fig - 110

Gutiérrez Ríos, E, "Química Inorgánica", 2ª Ed. Reverté, 1984, pp 62.

- * Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, **pp 230**.
- * Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 104**.
- * Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 174**.
- * Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F. Traducción española de la 4ª Ed. "Química Inorgánica", McGraw-Hill Interamericana, 2008, **pp 93**.
- * Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, **pp 320**.
- * Rodgers, G. E. Traducción española: "Química Inorgánica, Introducción a la Química de Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva", McGraw-Hill, 1995, **pp 235**.

Energía Reticular

La constante de Madelung = A, cambia para cada tipo de empaquetamiento.

Si no conocemos el tipo de empaquetamiento, no podemos utilizar la Ec. Born-Landée para el cálculo teórico de la Energía Reticular.

A = Cte Madelung $\frac{A}{\nu}$ Permanece constante para todos los tipos de empaquetamientos
 ν = N° de iones generados

$$U_{r_o} = \frac{N_a Z^+ Z^- e^2 \cdot \nu \cdot A \left(1 - \frac{1}{n}\right)}{4 \pi \epsilon_0 r_o \cdot \nu} = \frac{256 \cdot \nu \cdot Z^+ Z^-}{r_o} \quad \begin{matrix} Z^+ Z^- \\ \text{con su signo} \end{matrix}$$

$$U_{r_o} = 121000 \cdot \left(\frac{\nu \cdot Z^+ \cdot Z^-}{r_o}\right) \cdot \left(1 - \frac{34,5}{r_o}\right)$$

Ecuación de Kapustinskii

r_o en "pm"
 U_r en kJul/mol

$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$
 $1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$
 $1 \text{ \AA} = 100 \text{ pm}$

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 230.

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 104.

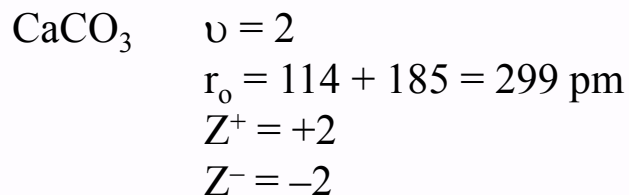
* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 174.

* Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F. Traducción española de la 4ª Ed. "Química Inorgánica", McGraw-Hill Interamericana, 2008, pp 93.

* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 320.

* Rodgers, G. E. Traducción española: "Química Inorgánica, Introducción a la Química de Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva", McGraw-Hill, 1995, pp 235.

Energía Reticular



$U_r = -2860$ kJul/mol
(-) Desprendida

NaCl

?

Born-Haber $U_r = -770$ kJul/mol

?

Born-Landée $U_r = -755$ kJul/mol

?

Kapustinskii $U_r = -753$ kJul/mol

$$U_{r_o} = 121000 \cdot \left(\frac{\nu \cdot Z^+ \cdot Z^-}{r_o} \right) \cdot \left(1 - \frac{34,5}{r_o} \right)$$

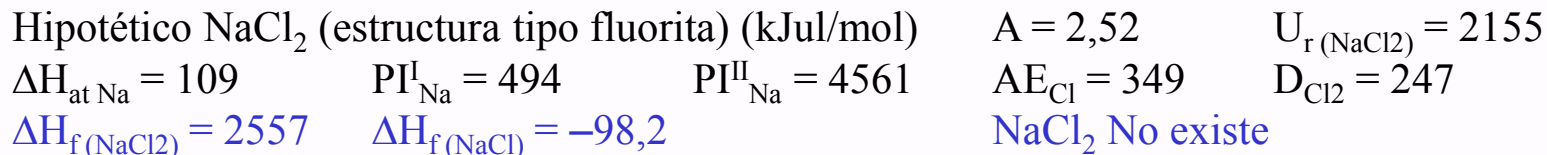
Ecuación de Kapustinskii

Cual será su grado
de precisión

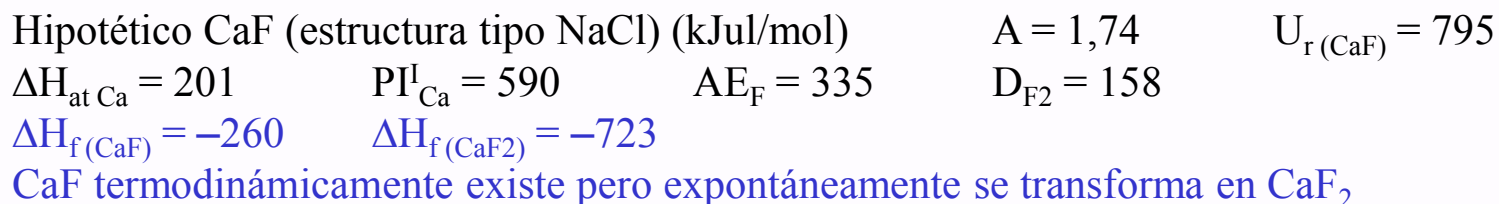
- * Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 230.
- * Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 104.
- * Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 174.
- * Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F. Traducción española de la 4ª Ed. "Química Inorgánica", McGraw-Hill Interamericana, 2008, pp 93.
- * Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 320.
- * Rodgers, G. E. Traducción española: "Química Inorgánica, Introducción a la Química de Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva", McGraw-Hill, 1995, pp 235.

Energía Reticular

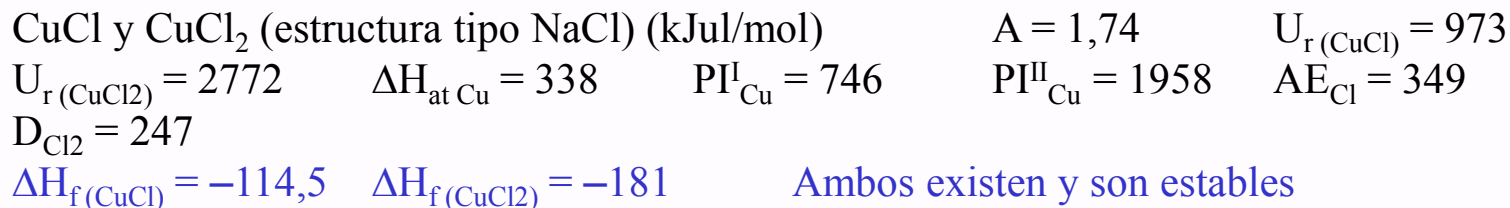
Considerar los términos de Born-Haber sirve para comprender el porqué de la existencia de ciertos compuestos y la no existencia de otros.



La mayor o menor estabilidad de metales en bajos estados de oxidación



La estabilidad relativa de distintos estados de oxidación



Ayuda:

* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 233.

* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 105.

* Rodgers, G. E. Traducción española: "Química Inorgánica, Introducción a la Química de Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva", McGraw-Hill, 1995, pp 241.