

QUIMICA DE MATERIALES

1.2.

NATURALEZA DE LA UNION
QUIMICA

ENLACE

- COVALENTE

Los electrones están compartidos por los átomos

- IONICO

Uno o más electrones son transferidos entre los átomos, formando iones

- COORDINADO

Los electrones de enlace los proporciona sólo uno de los átomos; es indistinguible de un enlace covalente “normal”

TEORIAS DE ENLACE (covalente)

- REPULSION DE PARES ELECTRONICOS DE LA CAPA DE VALENCIA (RPECV)

La molécula se forma al acercarse lo suficiente los átomos, que retienen en gran medida su carácter original

- HIBRIDACION

Los orbitales atómicos se combinan y cambian de forma para albergar a los electrones de enlace

- ORBITAL MOLECULAR (TOM)

Los electrones de enlace se ubican en orbitales moleculares, formados por interacción de los orbitales atómicos

Modelo de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia (RPECV)

□ Para determinar la geometría de una molécula:

- Los pares de electrones (compartidos y no compartidos) tienden a situarse en aquellas posiciones que minimicen las repulsiones entre ellos.
- Las repulsiones decrecen en importancia en el orden:

$$\text{PNC-PNC} > \text{PNC-PE} > \text{PE-PE}$$

donde PNC = Par no compartido
 PE = par de enlace

□ Hay que determinar el número de electrones de la capa de valencia del átomo central. Para ello:

- Determinar el número de pares de electrones. Para ello se contabilizan los electrones de las capas de valencia de los átomos de la molécula.
- Dibujar las posibles estructuras moleculares atendiendo al cumplimiento de la regla del octeto y a la repulsión mínima entre los pares electrónicos, según el orden comentado anteriormente.

Modelo de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia

Geometrías moleculares

A: átomo central

B: átomos enlazados a A

E: pares de electrones

Nº de pares de electrones

2

3

4

5

6

Geometría

Lineal (AB_2)

Trigonal (AB_3 o AB_2E)

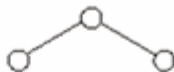
Tetraédrica (AB_4 o AB_3E o AB_2E_2)

Bipirámide trigonal (AB_5 o AB_4E)

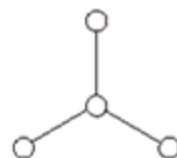
Octaédrica (AB_6 o AB_5E)



lineal



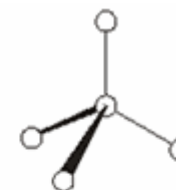
angular



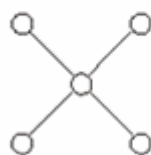
plana trigonal



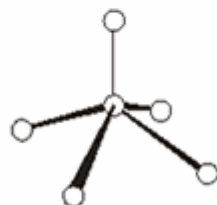
pirámide trigonal



tetraédrica



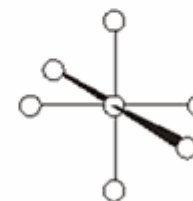
planocuadrada



pirámide cuadrada



bipirámide trigonal



octaédrica

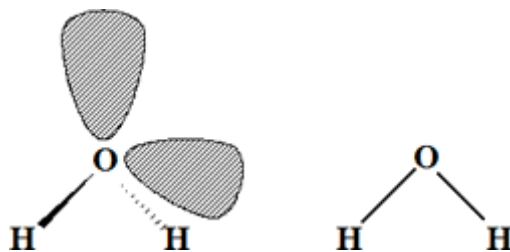
Ejemplos

H₂O

- N° electrones = 6 (O) + 2 x 1 (2 H) = 8 = 4 pares de electrones
- Estructura de Lewis:



- El átomo central presenta dos pares de enlace y dos no compartidos (= 4).
- cuatro pares $\Rightarrow$ estructura molecular debe ser tetraédrica
- $\Rightarrow$ geometría de la molécula (es decir, la geometría de los átomos y enlaces) es angular:

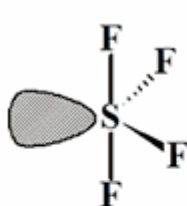


SF₄

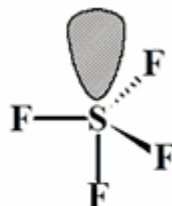
- N° electrones = 6 (S) + 7 x 4 (4 F) = 34 = 17 pares de electrones
- Estructura de Lewis:



- Alrededor del átomo central hay 5 pares de electrones (cuatro de enlace y uno de no enlace o no compartido).
- Para cinco pares la geometría debe ser derivada de bipirámide trigonal. En este caso existen dos posibles ubicaciones de los pares de electrones:



I

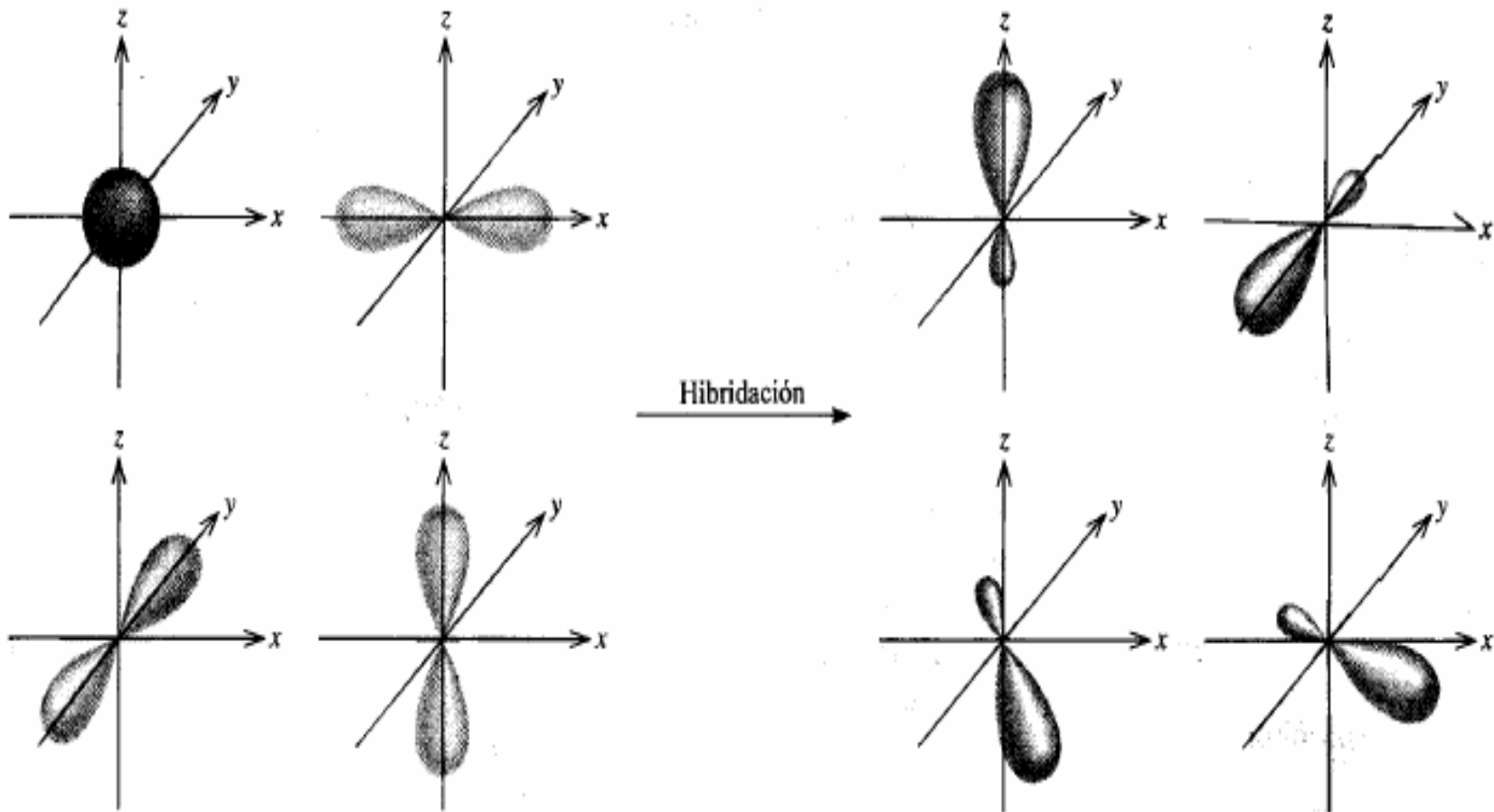


II

- Evaluar las interacciones entre los pares de enlace. La geometría I presenta 2 interacciones PNC-PE a 90° y otras dos a 120°. La geometría II presenta tres interacciones PNC-PE a 90° y 1 PNC-PE a 180°.
- Las más importantes son las que involucran PNC, y ya que la segunda presenta 3 al menor ángulo, esta estructura es la más inestable.
- La geometría de SF₄ es la I.

Hibridación de orbitales

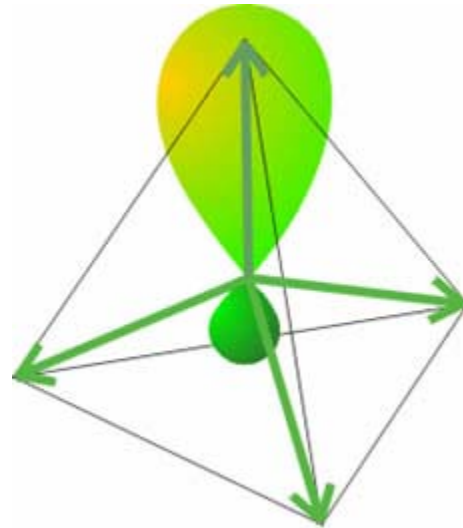
- ❑ Permite explicar la formación de una molécula



Formación de Orbitales Híbridos sp^3

Hibridación de orbitales

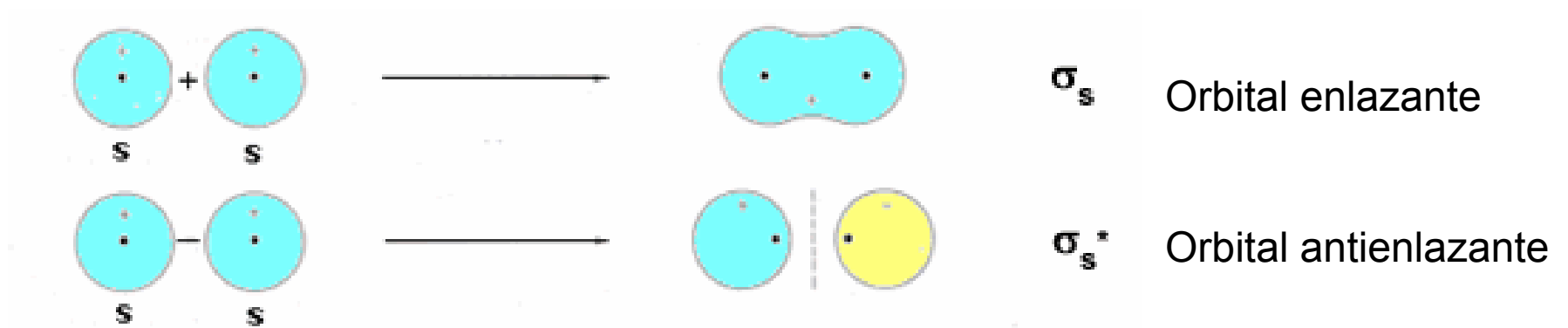
Orbitales			Tipo de hibridación	Nº de orbitales híbridos	Geometría
s	p	d			
1	1	0	sp	2	Lineal
1	2	0	sp ²	3	Plana trigonal
1	3	0	sp ³	4	Tetraédrica
1	3	1	sp ³ d	5	Bipirámide trigonal
1	3	2	sp ³ d ²	6	Octaédrica



Orbitales
híbridos sp³

Teoría del Orbital Molecular (TOM)

- Formas de los orbitales moleculares a partir de los orbitales atómicos s



Energía de orbitales moleculares en función de la separación de los átomos (para dos átomos hidrogenoides)

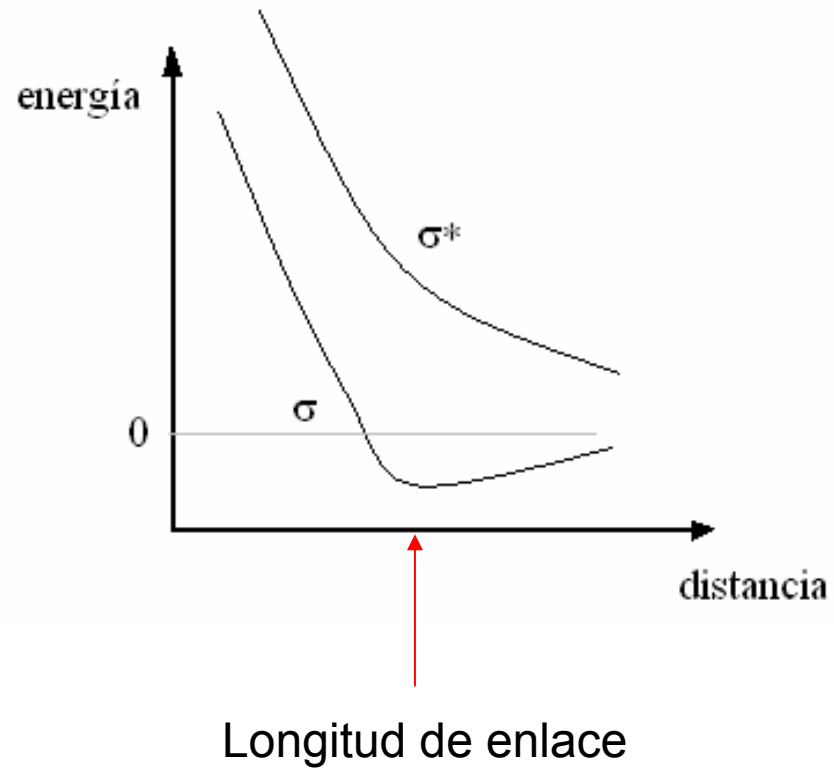
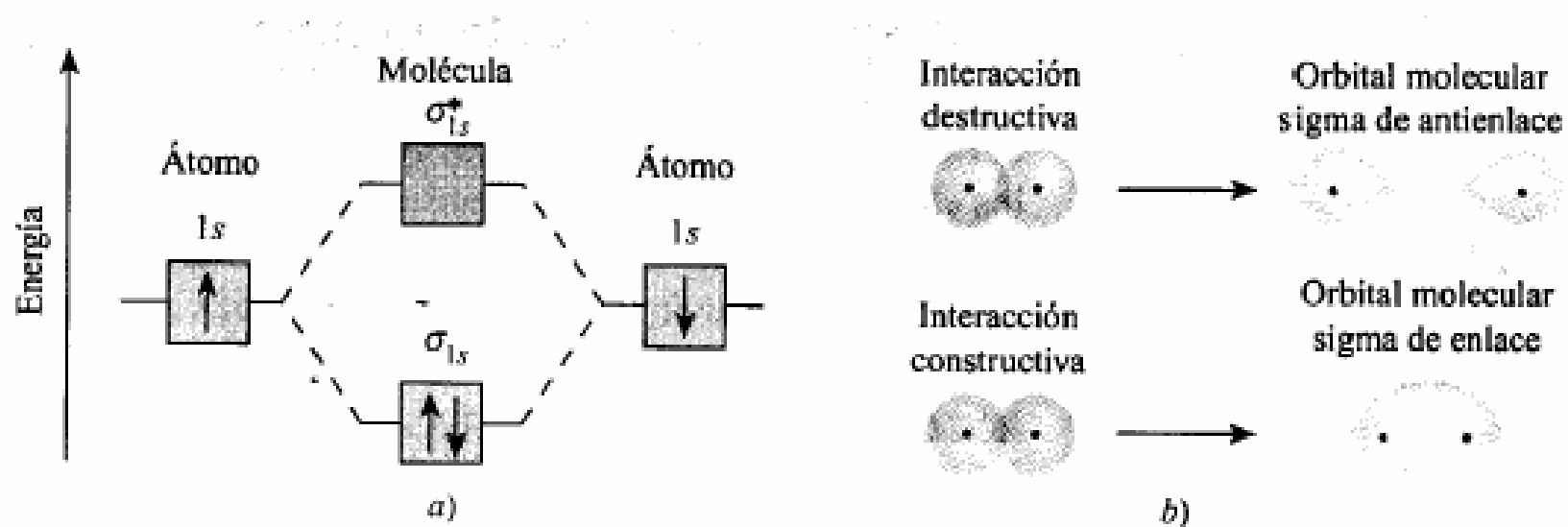


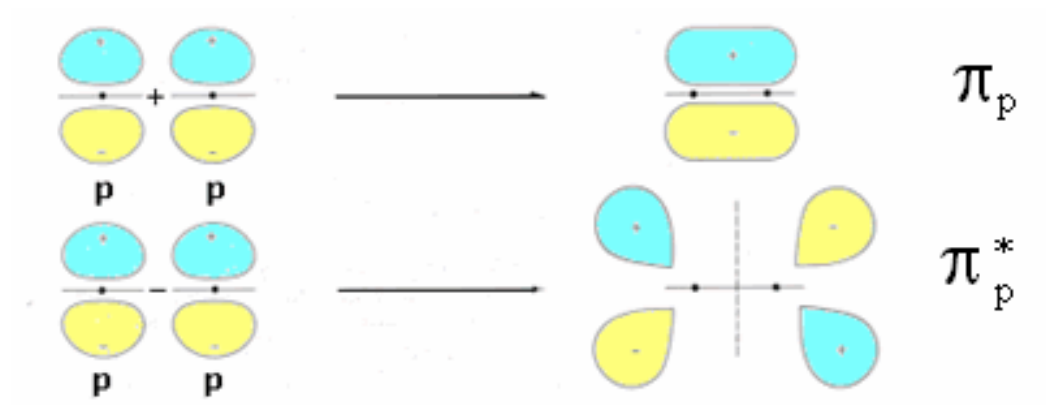
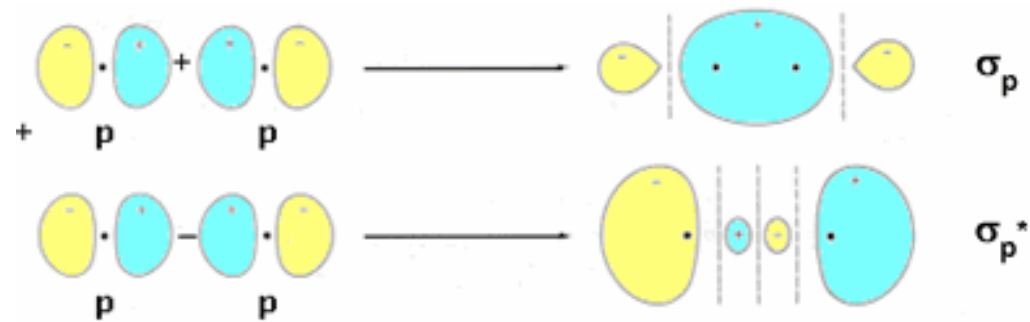
Diagrama de Orbitales Moleculares en la molécula de H_2



Consideraciones respecto a los orbitales moleculares

1. Para que los orbitales se traslapen, los signos de los lóbulos que se superponen deben ser iguales.
2. Siempre que dos orbitales atómicos mezclan, se forman dos orbitales moleculares (uno enlazante, de menor energía, y el otro antienlazante, de mayor energía)
3. Los orbitales atómicos deben tener energías similares
4. Cada orbital molecular puede contener 2 electrones como máximo ($s=1/2$ y $s=-1/2$)
5. La configuración electrónica de una molécula se puede construir llenando en secuencia los orbitales moleculares de más baja energía.
6. Rige el principio de máxima multiplicidad (Hund) para orbitales moleculares de igual energía.
7. El orden de enlace de una molécula se define como: N° de pares de electrones enlazantes – N° de pares antienlazantes.

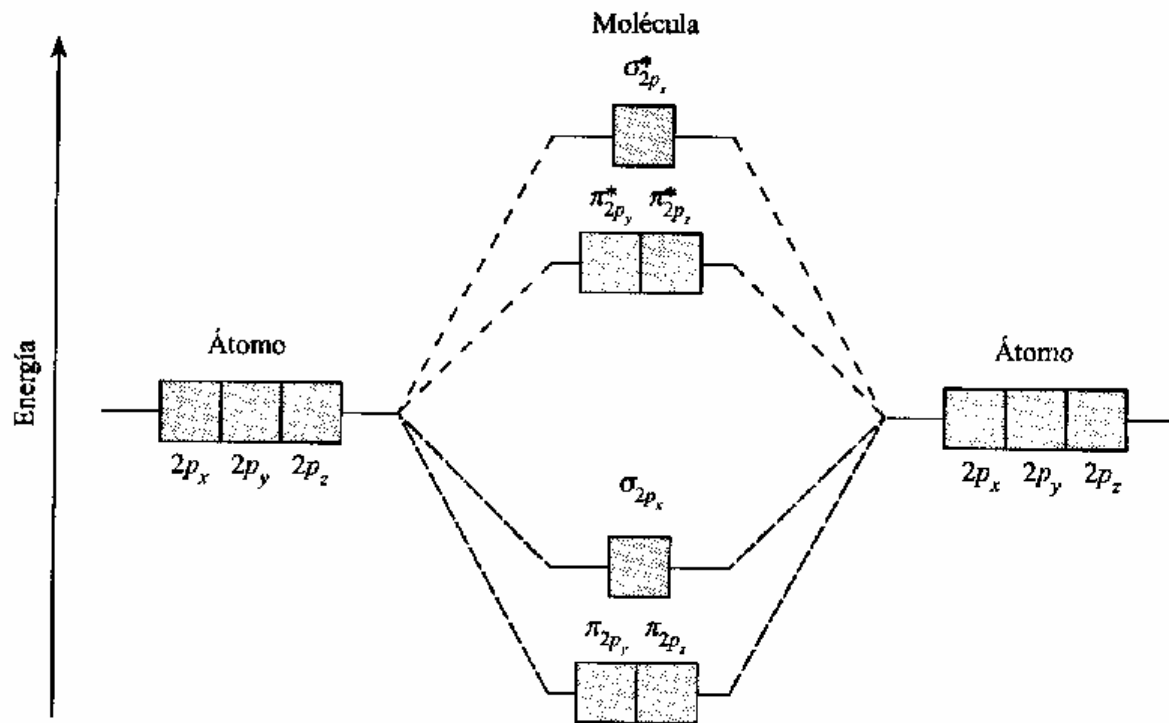
- Formas de los orbitales moleculares a partir de los orbitales atómicos p



- La energía en los orbitales moleculares aumenta según:

$$\sigma_{1s} < \sigma_{1s}^* < \sigma_{2s} < \sigma_{2s}^* < \pi_{2p_y} = \pi_{2p_z} < \sigma_{2p_x} < \pi_{2p_y}^* = \pi_{2p_z}^* < \sigma_{2p_x}^*$$

Diagrama general de OM para moléculas diatómicas homonucleares del segundo período (Li_2 , Be_2 , B_2 , C_2 , N_2)



Para O_2 y F_2 , el orbital σ_{2p} tiene menor energía que los orbitales π_{2p_x} y π_{2p_y}

Carácter iónico parcial de los enlaces covalentes

Momento dipolar:

Magnitud vectorial que da una indicación del grado de separación de carga en una molécula

$$\mu = qel$$

q: carga parcial

e: carga electrón = $1,602 \times 10^{-19}$ Coulomb

l: distancia de enlace (m)

μ suele medirse en Debye = $3,336 \times 10^{-30}$ C m

Para moléculas poliatómicas, μ depende de la geometría

Caso HCl

- La distancia de enlace experimental es 1,27 Å
- Si el enlace H-Cl fuera completamente iónico:

$$\mu = qel$$

$$\mu = 1 \times 1,602 \times 10^{-19} \text{ (C)} \times 1,27 \times 10^{-10} \text{ (m)} = 2,03 \times 10^{-29} \text{ C m}$$

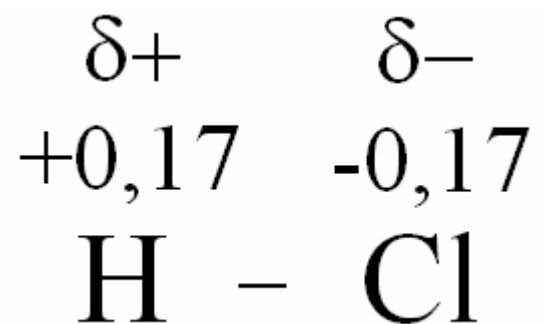
$$\mu = 6,08 \text{ D}$$

Pero el momento dipolar observado es: $\mu = 1,03 \text{ D}$

$$\% \text{carácter iónico} = \frac{1,03}{6,08} \times 100 = 17\%$$

- La carga parcial sobre H y sobre Cl:

$$q = \frac{\mu}{el} = \frac{1,03(D) \times 3,336 \times 10^{-30} (Cm / D)}{1,602 \times 10^{-19} (C) \times 1,27 \times 10^{-10} (m)} = 0,17$$



Diferencia de electronegatividad H-Cl = 3,15 - 2,1 = 0,9

Para un enlace covalente A-B:

$$\textit{Porcentaje de carácter iónico} = 18|X_A - X_B|^{1,4} \quad (\text{Pauling})$$

X: electronegatividad

$$\textit{Porcentaje de carácter iónico enlace H - Cl} = 15,5$$

Uniones Intermoleculares

- Puentes de hidrógeno
- Uniones dipolo-dipolo
- Fuerzas de van der Waals



+ fuerte

+ débil

METALES

Características:

- Conductividad eléctrica 3D
- Conductividad térmica
- Brillo
- Maleabilidad, ductilidad

ENLACE METALICO

Los átomos metálicos comparten electrones externos (de valencia) con todos los átomos vecinos.

- movimiento libre de los electrones
- Ausencia de enlaces direccionales

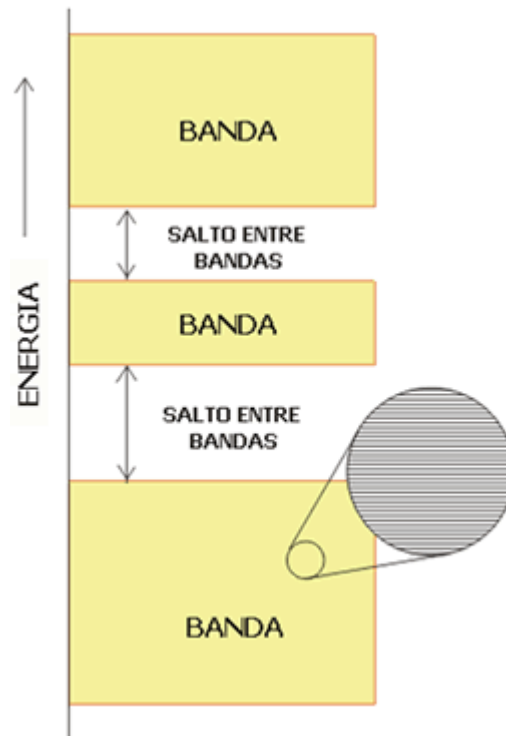
Comparación propiedades físicas

- Compuestos covalentes Tf bajo
- Compuestos iónicos Tf alto
- Metales: depende

Mercurio	Tf = -39 °C	Teb = 357 °C (enlace débil)
Tungsteno	Tf = 3410 °C	Teb = 5660 °C (enlace fuerte)

Modelos de Enlace: Teoría de Bandas

El solapamiento de un gran número de orbitales atómicos conduce a un conjunto de orbitales moleculares que se encuentran muy próximos en energías y que forman virtualmente lo que se conoce como una banda.

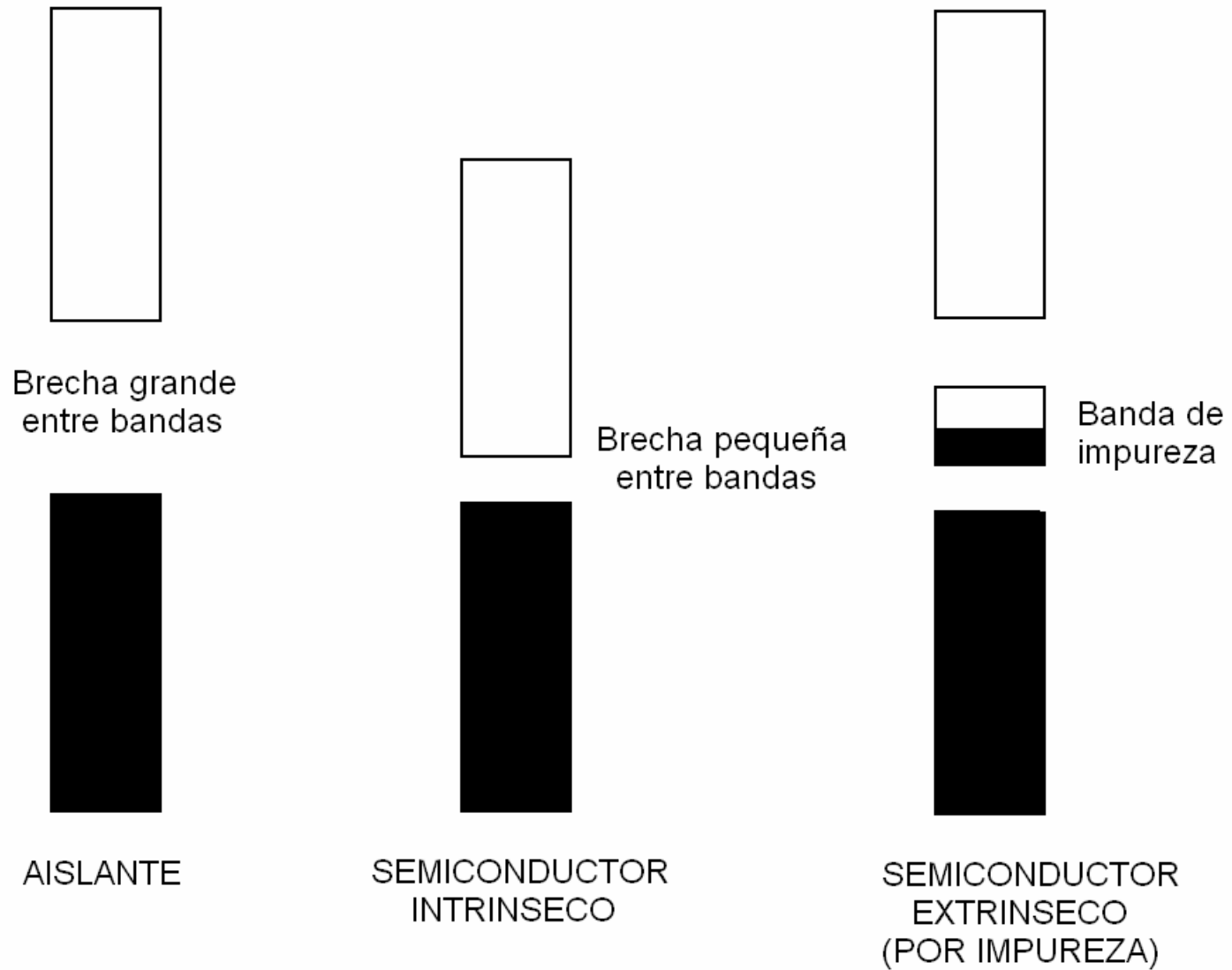




Banda de conduccion

Banda de valencia

METAL



Semiconductores: la separación entre las bandas de valencia y de conducción es menor que 3.0 eV

Elemento	Separación entre bandas (eV)	Tipo de material
Diamante	6.0	Aislante
Silicio	1.1	Semiconductor
Germanio	0.7	Semiconductor
Estaño gris	0.1	Semiconductor
Estaño blanco	0	Metal
Plomo	0	Metal

Semiconductores intrínsecos

La separación entre la banda de valencia y la de conducción es tan pequeña que a la temperatura ambiente algunos electrones ocupan niveles de energía de la banda de conducción. La ocupación de estos niveles introduce portadores de carga negativa en la banda superior y huecos positivos en la inferior y como resultado, el sólido es conductor. Un semiconductor, a la temperatura ambiente, presenta, generalmente, una menor conductividad que un metal pues existen pocos electrones y huecos positivos que actúan como portadores. A medida que aumenta la temperatura aumenta la población de los niveles en la banda de conducción y el número de portadores se hace mucho mayor, por lo que la conductividad eléctrica también aumenta.

Semiconductores extrínsecos

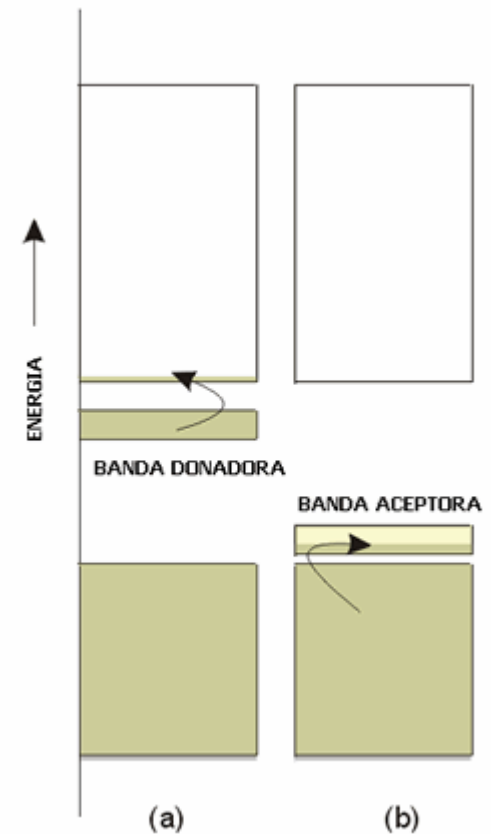
- Aquellos en que se han introducido pequeñas cantidades de una impureza con el objeto de aumentar la conductividad eléctrica del material a la temperatura ambiente (**dopado**).
- El nivel de dopado no debe de ser muy alto (1 átomo por cada 10^9 átomos del material de partida) para que sea efectivo.

Ej.: si se introducen átomos de **arsénico** ($[\text{Ar}]4s^24p^3$) en un cristal de **silicio** ($[\text{Ne}]3s^23p^2$), se habrá añadido **un electrón extra** por cada átomo de arsénico que sustituye al de silicio.

Los átomos donadores de arsénico formarán una banda muy estrecha que se encuentra próxima en energía a la banda de conducción del silicio. A la temperatura ambiente, algunos de los electrones de la banda del arsénico serán promocionados a la banda de conducción (los electrones del arsénico se transferirán a los orbitales vacíos del silicio).

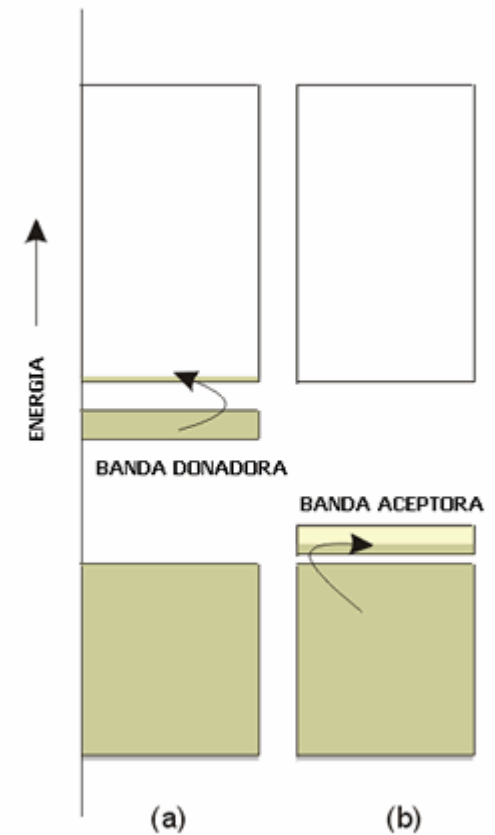
Semiconductividad de tipo n ($n \Rightarrow$ los portadores de cargas son los electrones (carga negativa))

((a) en la figura)



- Ej.: sustituir átomos de silicio por átomos de un elemento que tenga menos electrones en su capa de valencia, como el **Ga** (**[Ar]4s²4p¹**).
- La sustitución de un átomo de silicio por uno de galio introduce **un hueco en el sólido**.
- Los átomos de Ga forman una banda aceptora que se encuentra muy cerca de la banda de valencia del silicio.
- A la temperatura ambiente los electrones de la banda de valencia del Si se promocionan a la banda aceptora del galio; ésto ocasiona la formación de huecos en la banda de valencia del Si que permiten la movilidad de los electrones de dicha banda. Los responsables de la conductividad eléctrica son los huecos positivos de forma que a este semiconductor se le denomina de **tipo p**

((b) en la figura)

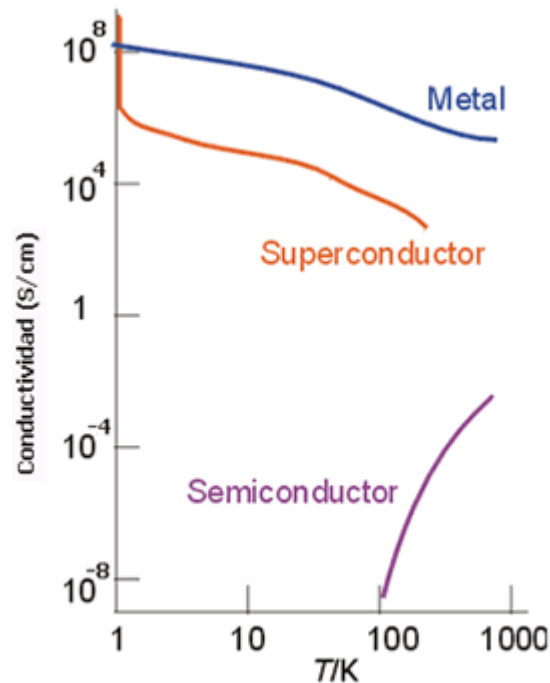


Sólidos Aislantes

- Su banda de valencia se encuentra totalmente ocupada y existe una gran separación energética entre ésta y la banda de conducción.
- Esta separación energética entre ambas bandas suele ser mayor de 3.0 eV para que la sustancia se considere un aislante.
- Ej.: diamante (cuya diferencia entre bandas es de 5.47 eV)
- Los materiales aislantes son utilizados para separar conductores eléctricos y así evitar cortocircuitos y mantener apartar a los usuarios de las partes de los sistemas eléctricos, que de tocarse accidentalmente cuando se encuentran en tensión pueden producir una descarga. Los materiales aislantes más frecuentemente utilizados son los plásticos y las cerámicas.

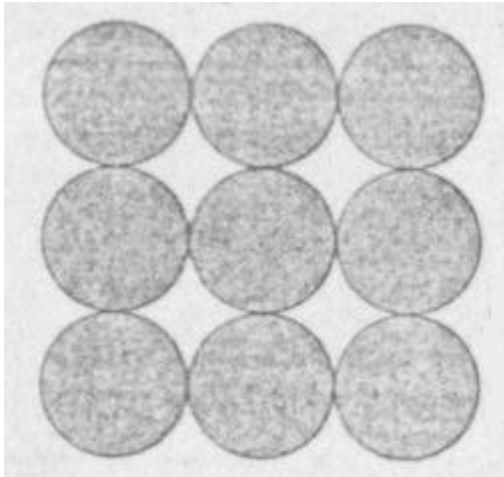
Enlace Metálico

- En un conductor metálico: su conductividad eléctrica disminuye al aumentar la temperatura.
- En un semiconductor: su conductividad eléctrica aumenta al hacerlo la temperatura.
- Un sólido aislante es una sustancia que presenta una baja conductividad eléctrica; sin embargo cuando su conductividad se puede medir, ésta aumenta con la temperatura, como ocurre en los semiconductores.

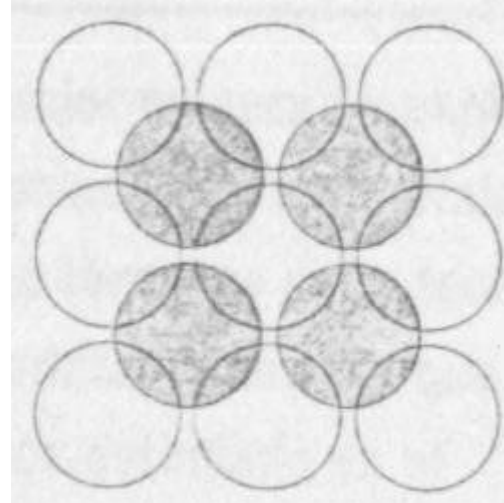


Variación de la conductividad con la temperatura

Estructura de los metales

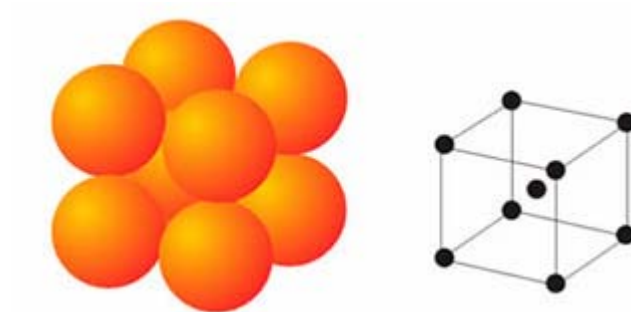
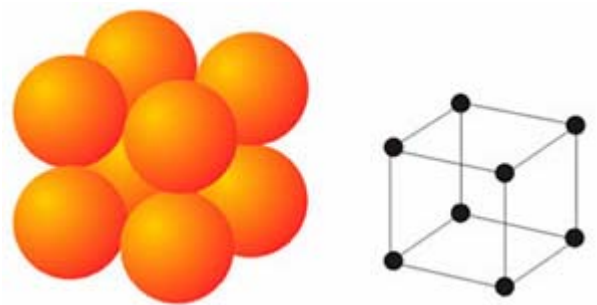


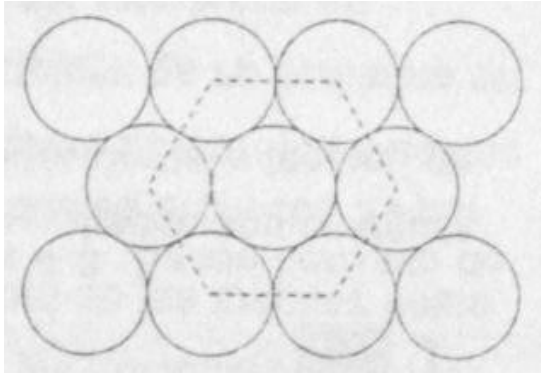
Empaque cúbico simple (cs)



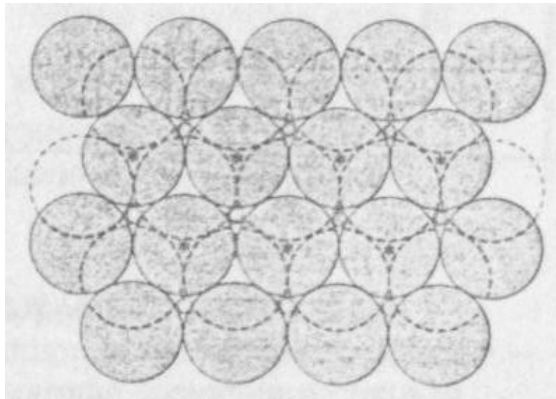
Empaque cúbico centrado en el cuerpo (ccc)

Ej.: Fe α , Ti, W, Mo, Nb, V, Cr, Zr, Hf, Na, K



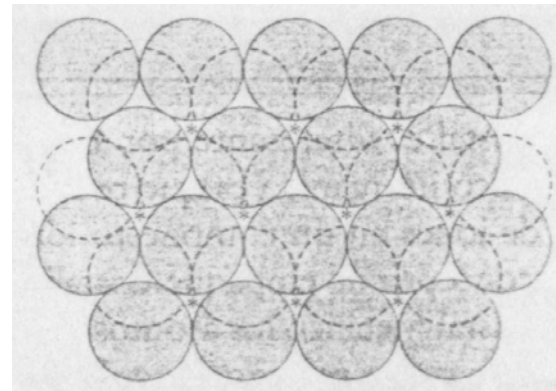


Primera capa del empaque hexagonal



Empaque hexagonal compacto (ch).
La segunda capa (gris) encaja sobre los huecos alternados de la primera. La tercera, se superpone a la primera. (abab)

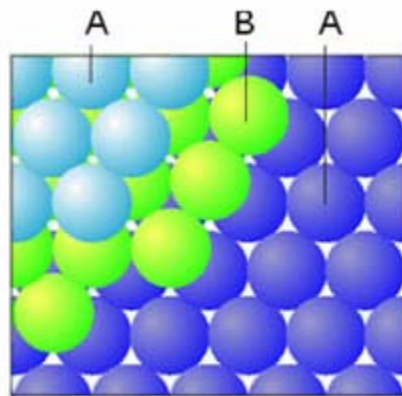
Los metales que cristalizan en esta forma de estructura son: titanio, magnesio, cinc, berilio, cobalto, circonio y cadmio.



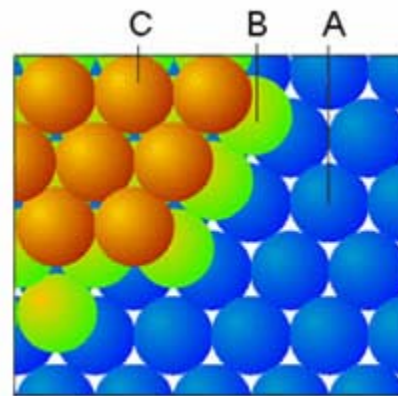
Empaque compacto cúbico o cúbico centrado en las caras (cc).
La tercera capa se coloca sobre los huecos de la primera y la segunda. (abcabc)

Los metales que cristalizan en esta estructura son: hierro γ , cobre, plata, platino, oro, plomo y níquel.

- La primera capa consiste en esferas tangentes entre sí de tal forma que cada una de ellas está rodeada de otras seis en dicha capa.
- La segunda capa se construye ubicando las esferas sobre los puntos de tangencia de las esferas de la primera capa.
- En la formación de la tercera capa surgen diferencias.
- El número de coordinación es el mismo (12).

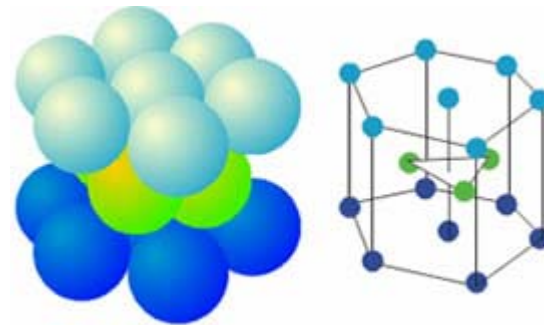


Empaque hexagonal compacto (ch)
(abab)

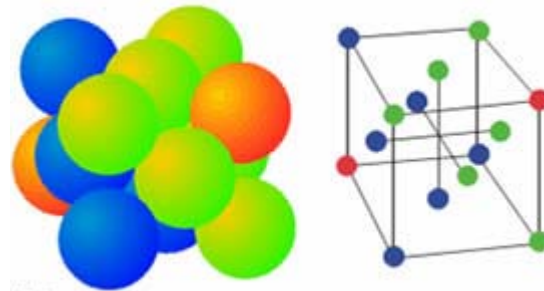


Empaque compacto cúbico o cúbico centrado en las caras (cc).
La tercera capa se coloca sobre los huecos de la primera y la segunda.
(abcabc)

- Celdas unidad de los empaquetamientos compactos hexagonal (a) y cúbico (b).

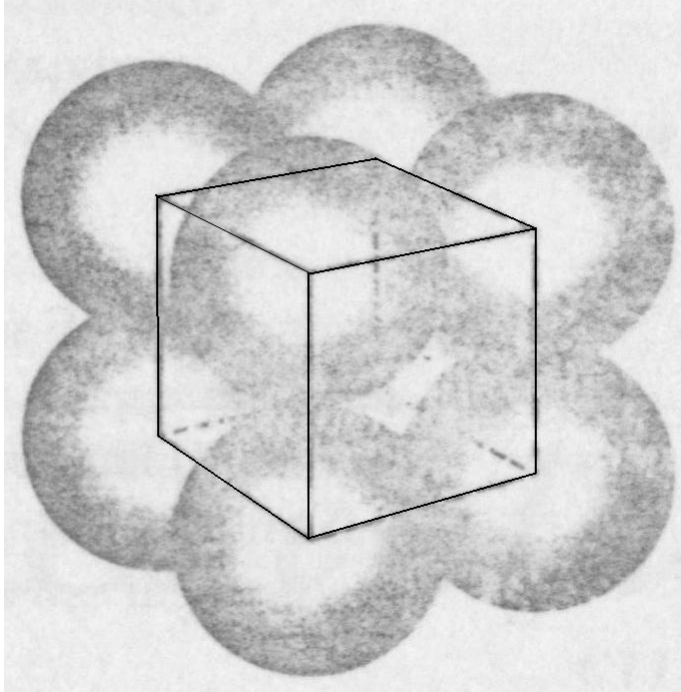


(a)

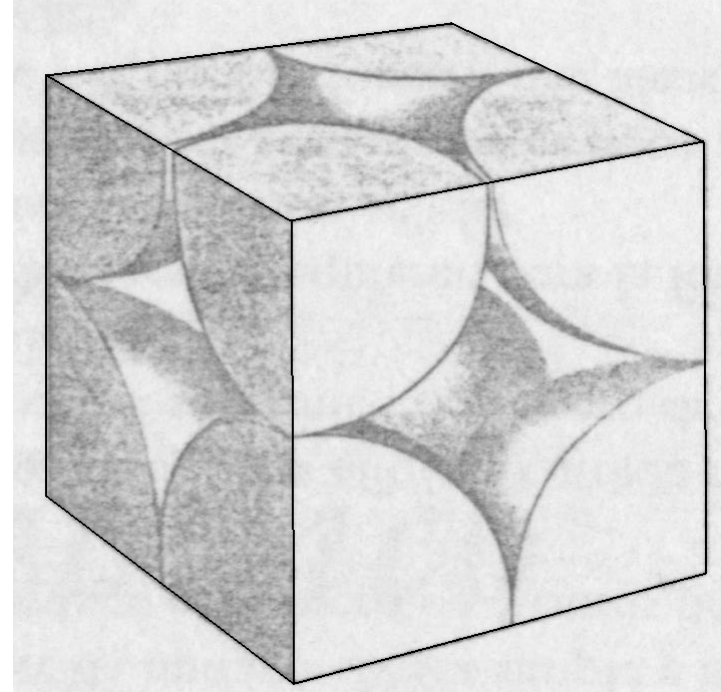


(b)

Empaque cúbico simple (cs)

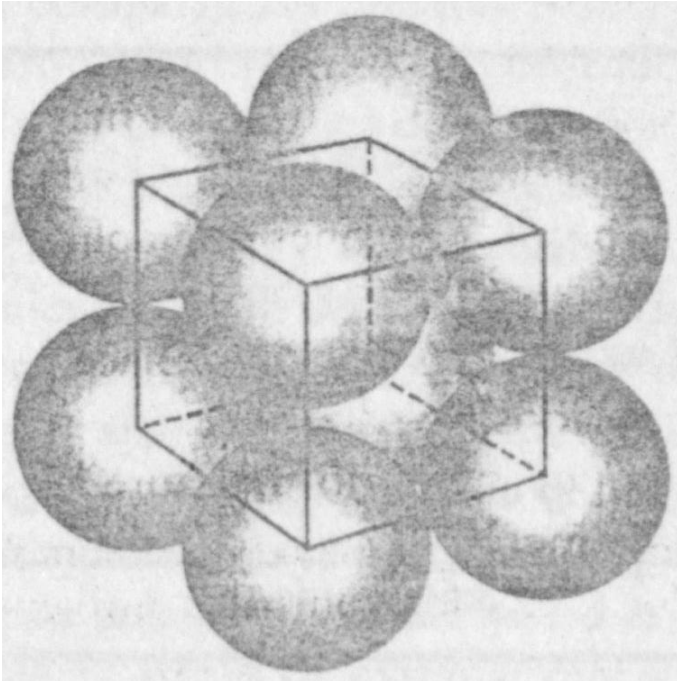


Ocho átomos en formación
cúbica simple

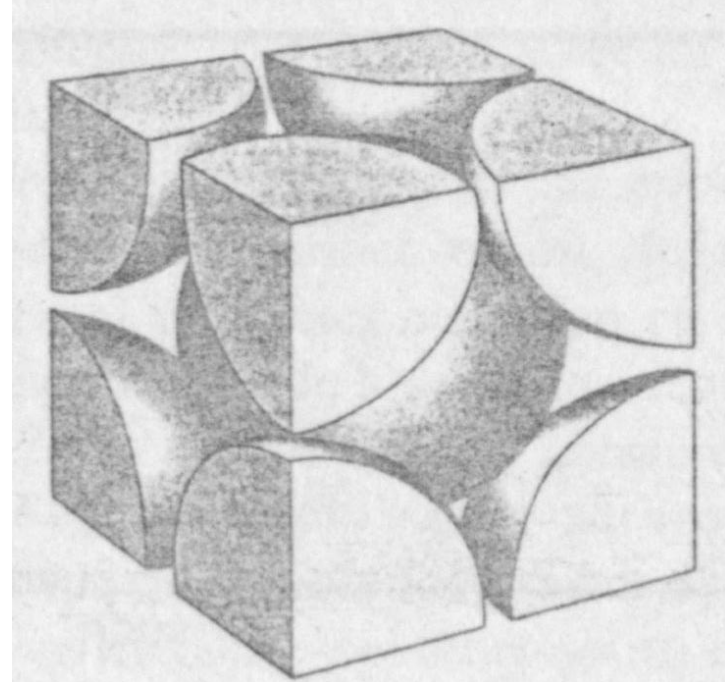


Celda unitaria

Empaque cúbico centrado en el cuerpo (ccc)



Nueve átomos en
formación cúbica centrada
en el cuerpo



Celda unitaria

Estructuras cristalinas de elementos metálicos a 25°C y 1atm

Estructura cristalina	Elemento
Hexagonal compacta	Be, Cd, Co, Mg, Ti, Zn
Cúbica compacta	Ag, Al, Au, Ca, Cu, Ni, Pb, Pt
Cúbica centrada en el cuerpo	Ba, Cr, Fe, W, alcalinos
Cúbica-primitiva	Po

Polimorfismo en los Metales

- Polimorfismo: capacidad de adoptar distintas formas cristalinas, bajo distintas condiciones de presión y temperatura.
- Fases más compactas suelen ser las termodinámicamente más favorables a T° bajas, mientras que las menos compactas lo serán a T° altas .
- Los polimorfos de los metales se suelen denominar (con excepciones) con las letras griegas α , β , γ , δ ... conforme aumenta la T° . Incluso algunos metales revierten a la forma estable a baja T° cuando alcanzan T° más altas.

El hierro presenta las siguientes transiciones:

- α -Fe (cúbico centrado en cuerpo) $T < 910\text{ }^{\circ}\text{C}$,
- γ -Fe (cúbico compacto) $906\text{ }^{\circ}\text{C} < T < 1401\text{ }^{\circ}\text{C}$
- α -Fe (cúbico centrado en cuerpo) $1401\text{ }^{\circ}\text{C} < T < 1530\text{ }^{\circ}\text{C}$
- β -Fe (hexagonal compacta) aparece bajo alta presión.

Otro ej.: estaño

T° ambiente: el polimorfo estable es el estaño blanco, β -Sn

$T^{\circ} < 14\text{ }^{\circ}\text{C}$: estaño gris, α -Sn

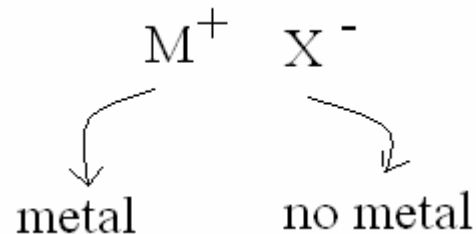
Enlace iónico

- Atracción electrostática entre un catión y un anión

Características de los compuestos iónicos:

- Todos los compuestos iónicos son sólidos a T ambiente
- Los cristales de compuestos iónicos son duros y frágiles
- Tienen puntos de fusión altos
- Cuando se calientan al estado de fusión (si no se descomponen) conducen la electricidad
- Muchos se disuelven en solventes polares, dando soluciones eléctricamente conductoras

- Electronegatividad Pauling $\Rightarrow$
- A mayor Δ electronegatividad entre dos átomos unidos de forma covalente, el enlace se hace cada vez más polar.
- Δ electronegatividad alto
 $\Rightarrow$ compartición insignificante
 $\Rightarrow$ enlace iónico



Tamaño

Conversión de átomos en iones
⇒ cambio de tamaño

	Radio (pm)	V (pm ³)
Na	186	26,95x10 ⁶
Na ⁺	116	6,53 x10 ⁶

Radios de cationes
isoelectrónicos

Catión	Radio (pm)
Na ⁺	116
Mg ²⁺	86
Al ³⁺	68

> carga catión → < tamaño

Radios de aniones
isoelectrónicos

Anión	Radio (pm)
N ³⁻	132
O ²⁻	124
F ⁻	117

< Z → > tamaño

Al descender en un grupo
aumenta el tamaño de los iones.

Anión	Radio (pm)
F ⁻	117
Cl ⁻	167
Br ⁻	182
I ⁻	206

Puntos de Fusión

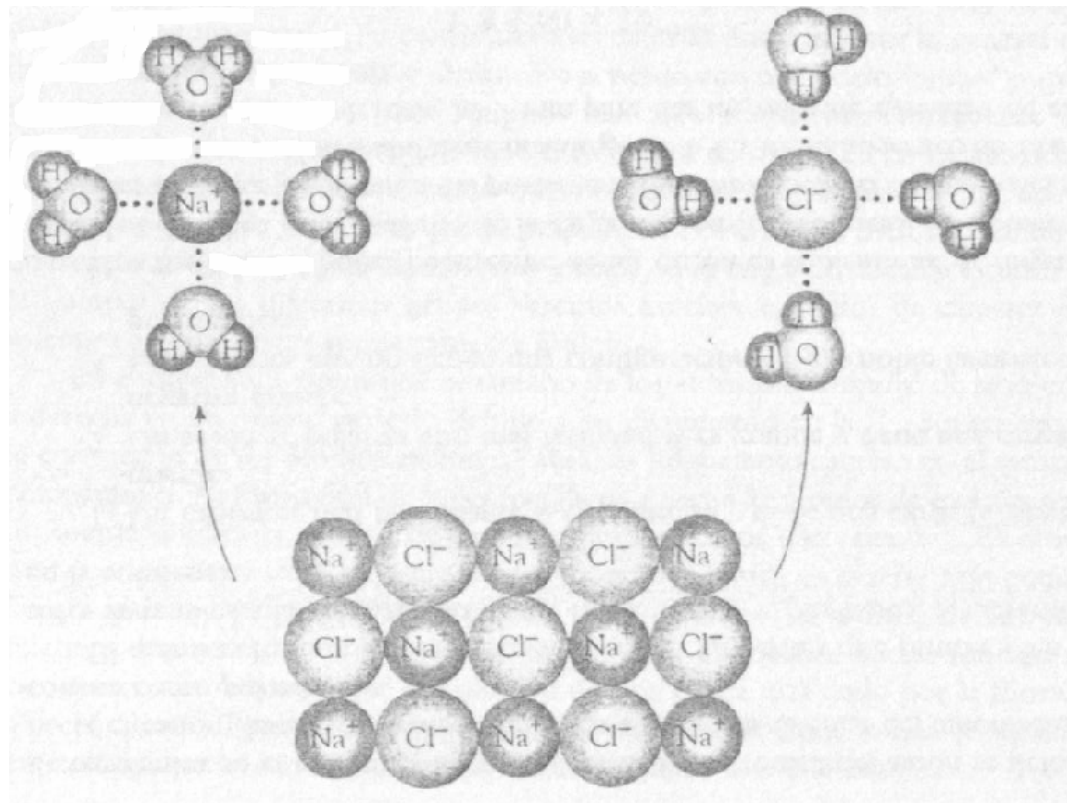
- FUSION $\Rightarrow$ vencer parcialmente las atracciones iónicas y permitir el libre movimiento de los iones en la fase líquida
- Compuestos iónicos tienen puntos de fusión altos $\Rightarrow$ el enlace iónico debe ser fuerte

radio iónico 	Compuesto	Punto de fusión (°C)	 Puntos de fusión de los halogenuros de potasio
	KF	857	
	KCl	772	
	KBr	735	
	KI	685	

Mientras más pequeño el ión (y más concentrada la carga), más alto el punto de fusión

Solubilidad

Compuestos iónicos son solubles en solventes polares



Disolución de cloruro de sodio en agua

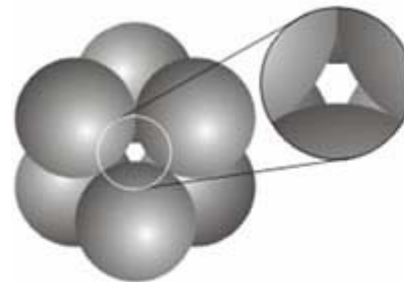
Estructuras características de los sólidos iónicos

Estructura cristalina	Ejemplo
Antifluorita	K_2O , K_2S , Li_2O , Na_2O , Na_2Se , Na_2S
Cloruro de cesio	$CsCl$, CaS , $TlSb$, $CsCN$, $CuZn$
Fluorita	CaF_2 , UO_2 , $BaCl_2$, HgF_2 , PbO_2
Arseniuro de níquel	$NiAs$, NiS , FeS , $PtSn$, CoS
Perovskita	$CaTiO_3$, $BaTiO_3$, $SrTiO_3$
Sal de roca	$NaCl$, $LiCl$, KBr , RbI , $AgCl$, $AgBr$, MgO , CaO , TiO , FeO , NiO , $SnAs$, UC , ScN
Rutilo	TiO_2 , MnO_2 , SnO_2 , WO_2 , MgF_2 , NiF_2
Blenda	ZnS , $CuCl$, CdS , HgS , GaP , $InAs$
Wurtzita	ZnS , ZnO , BeO , MnS , AgI , AlN , SiC , NH_4F

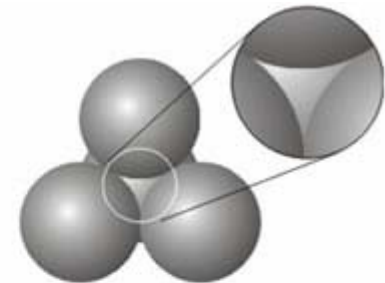
Huecos en estructuras empaquetadas

Existentes dos tipos de huecos: octaédrico y tetraédrico.

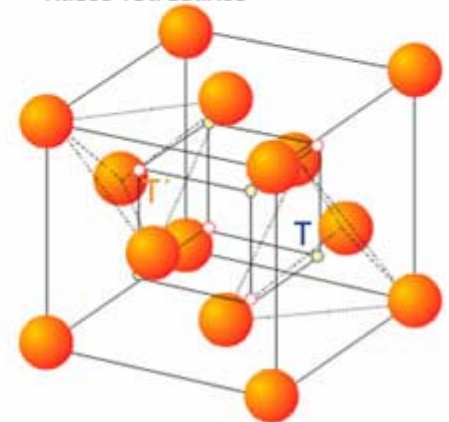
- El hueco octaédrico aparece entre dos triángulos de esferas que están opuestos entre sí. cada hueco presenta simetría octaédrica, ya que los seis átomos que lo forman se disponen en los vértices de un octaedro. Si cada esfera tiene un radio r , puede demostrarse fácilmente que un hueco de estas características puede acomodar otra esfera de radio $0.414r$.
- El hueco tetraédrico aparece como consecuencia de la ubicación de una esfera sobre el triángulo que forman otras tres. En una estructura de este tipo, con átomos de radio r , el hueco tetraédrico puede acomodar una esfera de radio igual o inferior a $0.225r$.



Hueco Octaédrico



Hueco Tetraédrico



Para construir una red iónica

- Suponer a los iones como esferas cargadas e incompresibles
- Los iones se rodean del mayor N° posible de iones de carga opuesta (mayor compacidad)
- aniones → “arman” la red
- cationes → en los huecos

$$\text{Relación } \frac{\text{radio catión}}{\text{radio anión}} \text{ óptima} = 0,414$$

CLORURO DE CESIO

Celda unitaria

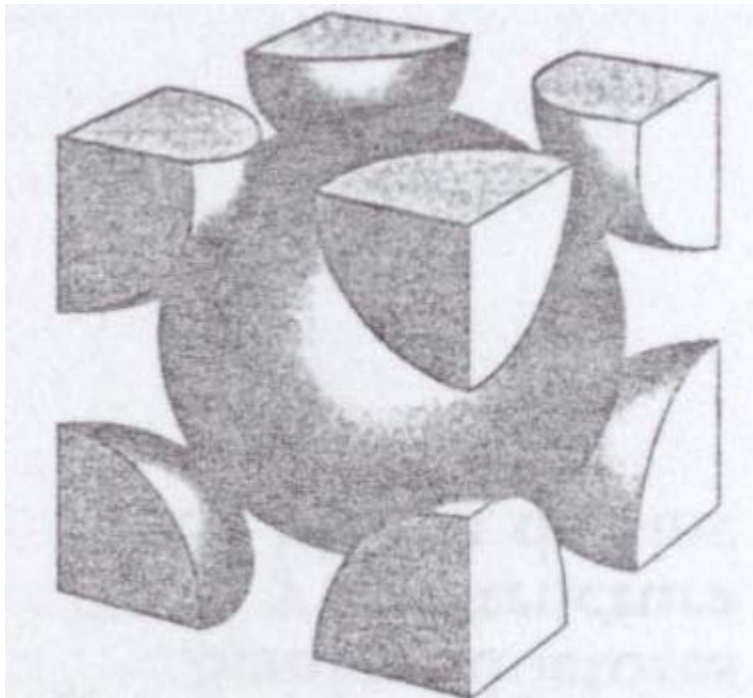
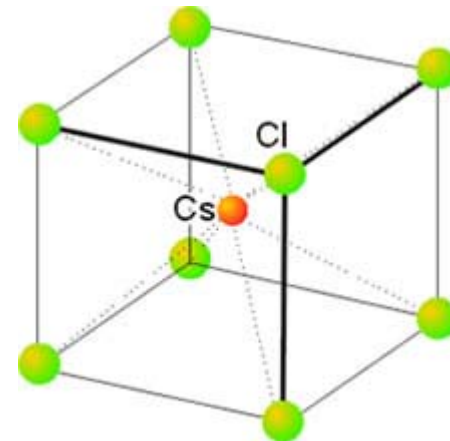
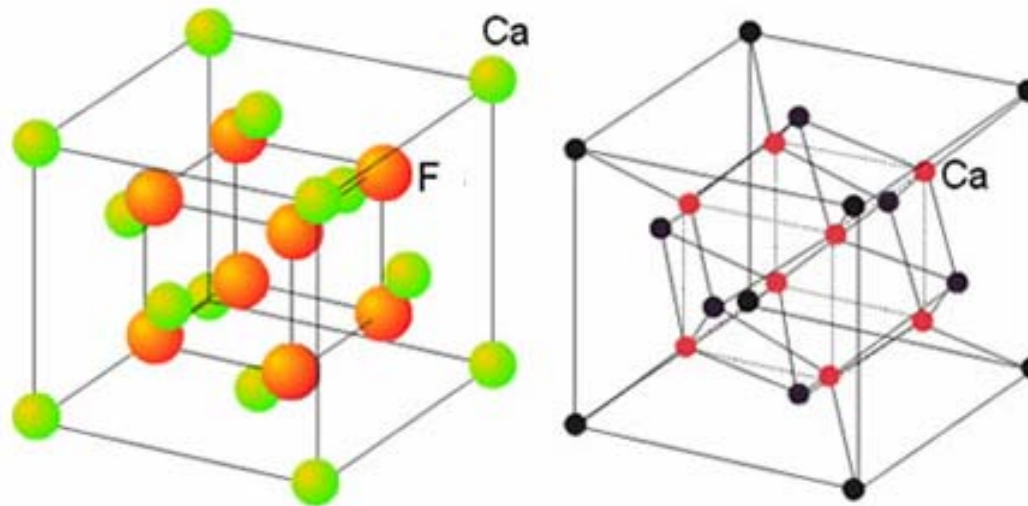


Diagrama de la red
iónica



FLUORITA

(Fluoruro de Calcio CaF_2)



Ca^{+2} : empaquetamiento cúbico centrado en las caras

F^- : en los huecos tetraédricos

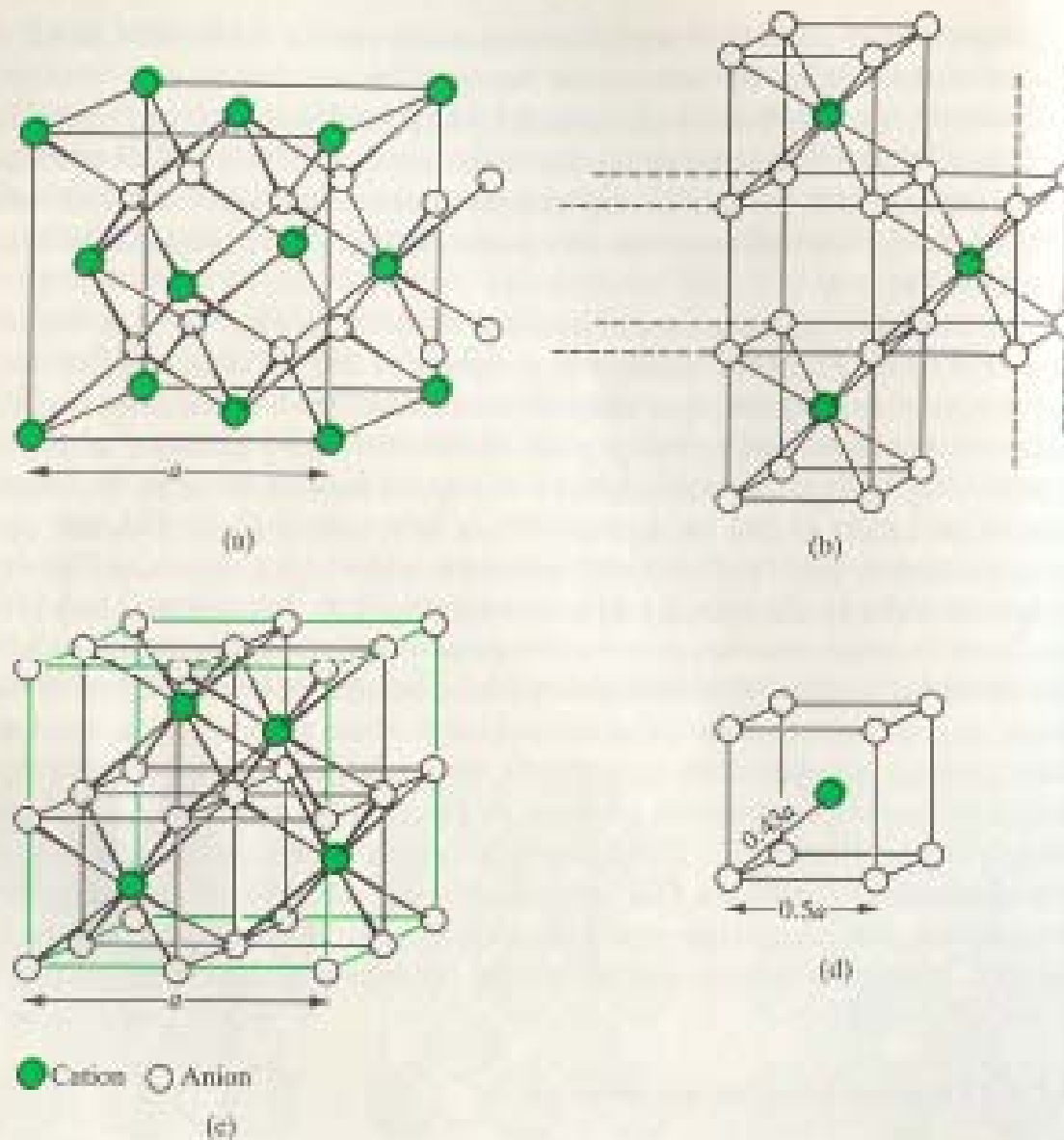
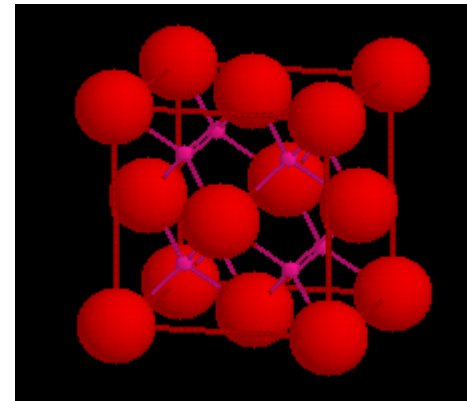
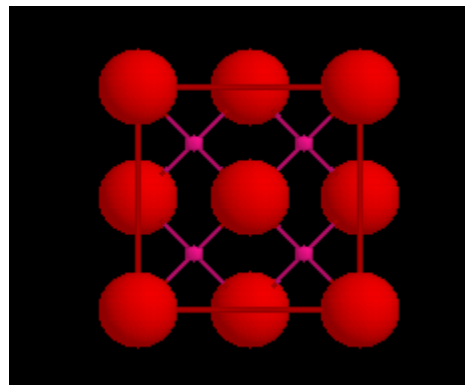


Figura 3.3 Estructura cristalina de la fluorita, MX_2 . (a) Celda unitaria como empaquetamiento ecc de cationes. (b) y (c) La misma estructura redibujada como una red cúbica simple de aniones. En la figura (c) la celda unitaria se marca con un trazo coloreado. (d) Dimensiones de la celda.

ANTIFLUORITA

En la celda de la antifluorita se invierten las posiciones de cationes y aniones.

Ej.: Li_2O



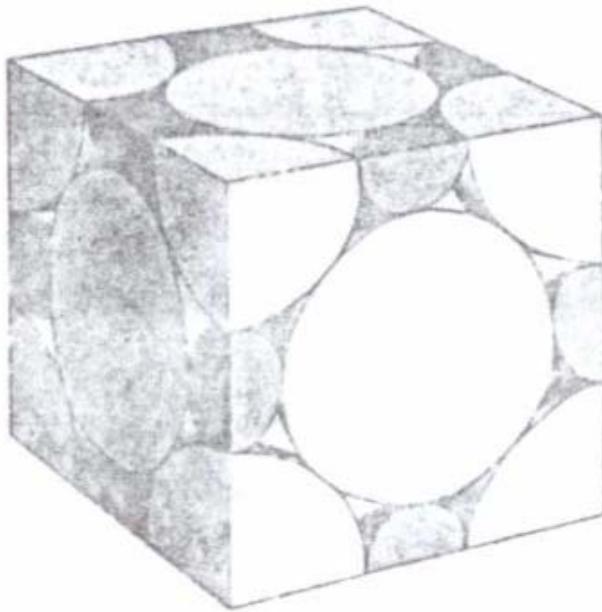
COLORURO DE SODIO

Na^+Cl^- Geometría octaédrica

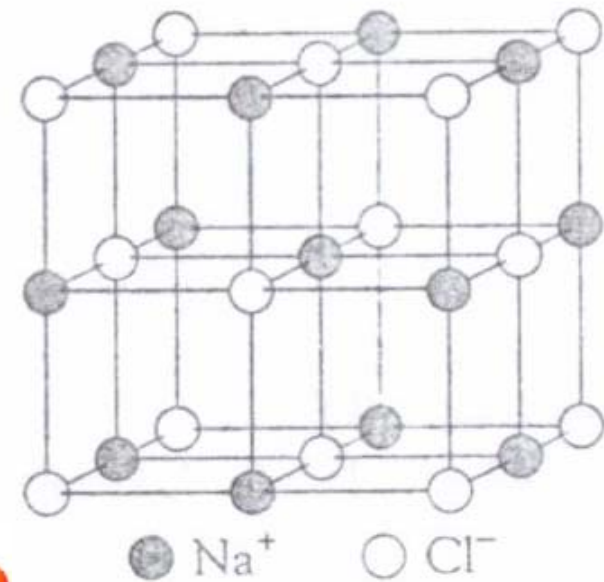
Aniones en empaque cúbico centrado en las caras

Cationes en huecos octaédricos

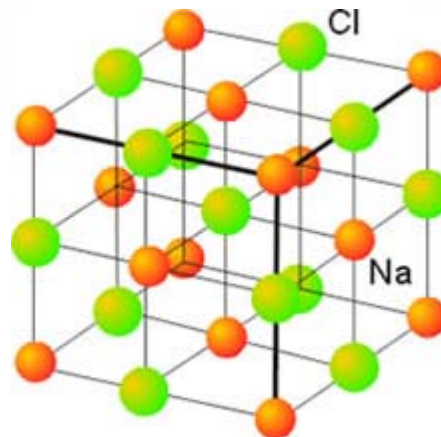
Relación de radios $< 0,732$



Celda unitaria



Red iónica

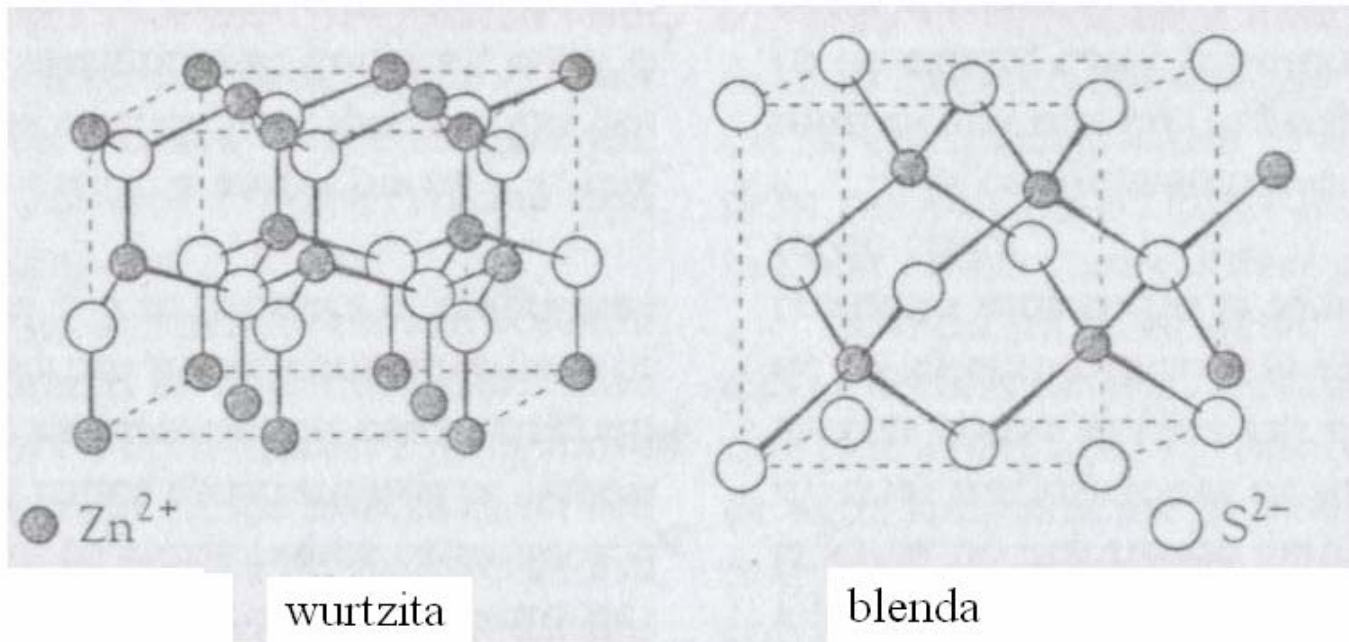


BLENDA y WURTZITA (ZnS)

El sulfuro de cinc cristaliza en dos formas polimórficas:

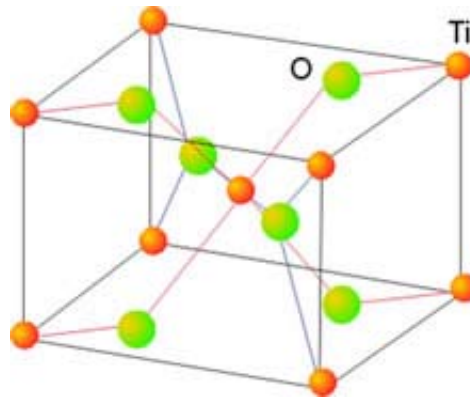
- **Wurtzita**: empaquetamiento **hexagonal** de los **aniones**; los cationes ocupan la mitad de los huecos tetraédricos.
- **Blenda**: empaquetamiento de los **aniones** de tipo **cúbico centrado en las caras**; los cationes ocupan la mitad de los huecos tetraédricos.

Las dos estructuras se presentan en los óxidos y sulfuros de los metales divalentes como el Be, Zn, Mn, Cd, Hg.



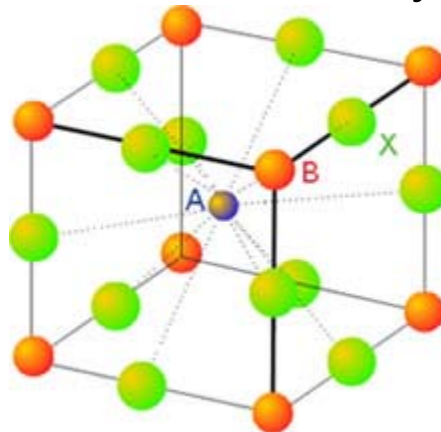
RUTILO (TiO_2)

- Rutilo: un mineral de óxido de Ti(IV).
- Empaquetamiento **hexagonal compacto** de los **aniones**; los cationes ocupan la mitad de los huecos octaédricos.
- Cada átomo de Ti está rodeado de 6 átomos de oxígeno (disposición octaédrica) y cada átomo de oxígeno se rodea de 3 átomos de titanio (disposición trigonal); la estructura presenta coordinación de 6:3.
- Estructura de rutilo es adoptada por: óxido de Sn(IV) (casiderita), MnO_2 , WO_2 , fluoruros del tipo MgF_2 y NiF_2 .



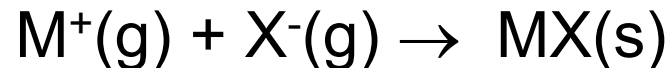
PEROVSKITA

- Mineral perovskita: CaTiO_3 .
- Su estructura es el prototipo de muchos sólidos de composición ABX_3 , particularmente óxidos.
- Forma idealizada: estructura cúbica, los átomos A ocupan el centro del cubo y están rodeados de 12 átomos de tipo X; los átomos B ocupan los vértices del cubo y están rodeados por 6 átomos de tipo X.
- La suma de las cargas de los iones positivos A y B debe ser de 6 ($\text{A}^{2+} \text{B}^{4+}$, $\text{A}^{3+} \text{B}^{3+}$, ...).
- La estructura de tipo perovskita está relacionada con la de materiales que presentan propiedades eléctricas interesantes (sólidos piezoeléctricos, ferroeléctricos y superconductores de alta temperatura).



Energía del enlace iónico

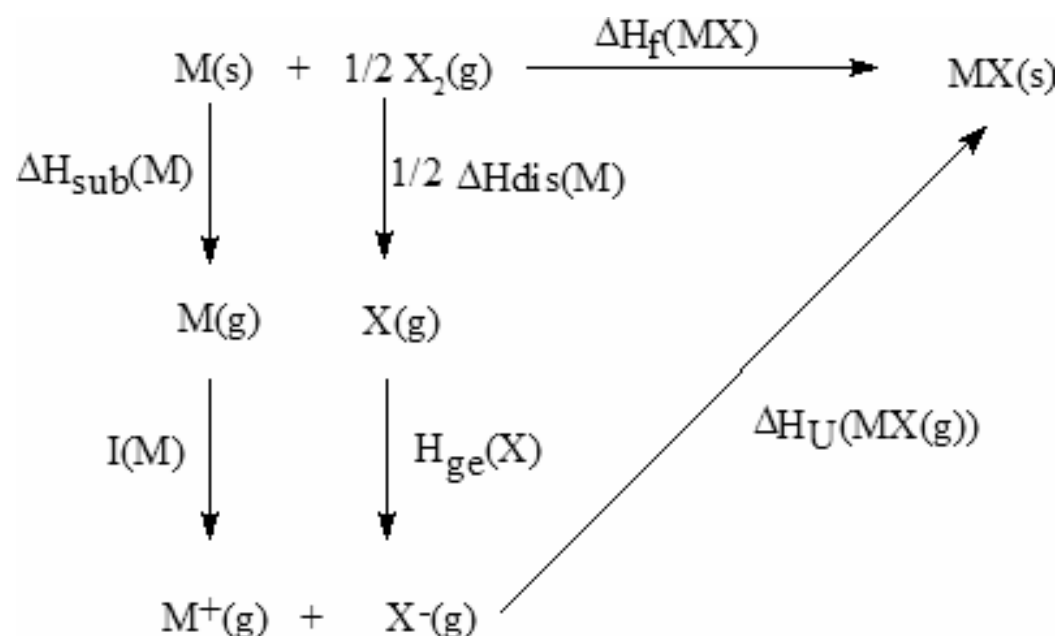
- La entalpía o energía reticular de un compuesto iónico (ΔH_U): cambio entálpico que se produce cuando 1 mol de iones positivos y un mol de iones negativos, ambos en estado gaseoso, se aproximan desde distancia infinita hasta las posiciones de equilibrio que ocupan en el cristal:



- La entalpía reticular es siempre negativa $\Rightarrow$ la formación del sólido iónico es un proceso exotérmico.
- Una forma de calcular la entalpía reticular es mediante el ciclo de Born-Haber.

Ciclo de Born-Haber

La entalpía de una reacción es la misma, independientemente de que la reacción transcurra en uno o en múltiples pasos. Para la formación de un cristal iónico a partir de los elementos que lo constituyen se puede plantear el siguiente ciclo de Born-Haber:

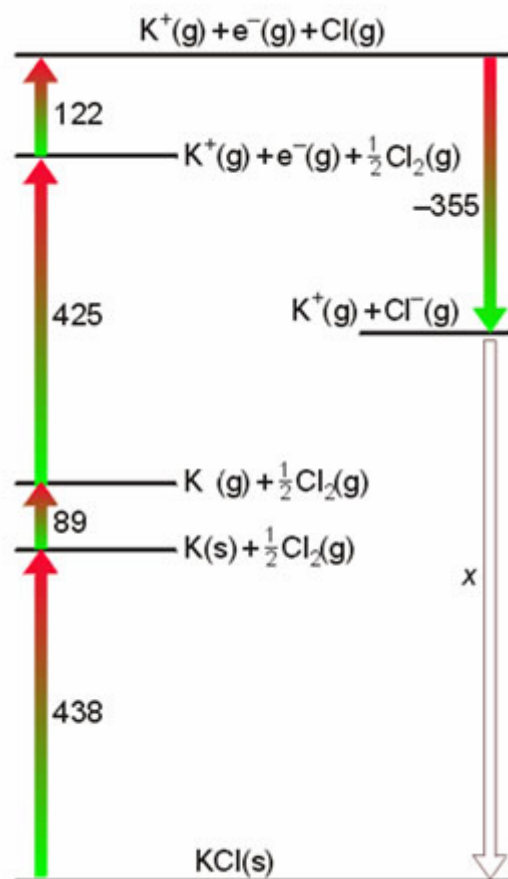


ΔH_{sub} = entalpía sublimación metal
 ΔH_{dis} = entalpía disociación del no metal
 I = energía de ionización del metal
 H_{ge} = afinidad electrónica del no metal
 ΔH_U = entalpía reticular
 ΔH_f = entalpía de formación compuesto

Aplicando la ley de Hess resulta:

$$\Delta H_f = \Delta H_{sub} + \frac{1}{2} \Delta H_{dis} + I + A_e + \Delta H_U$$

Ciclo de Born-Haber aplicado al cloruro potásico



Paso	$\Delta H(\text{kJ/mol})$
Sublimación del K	+89
Ionización del K(g)	+425
Disociación del Cl ₂ (g)	+244
Ganancia e del Cl	-355
Formación del KCl(s)	-438

Energía reticular:

$$\Delta H_{\text{U}}(\text{KCl(s)}) = -719 \text{ kJ/mol.}$$