

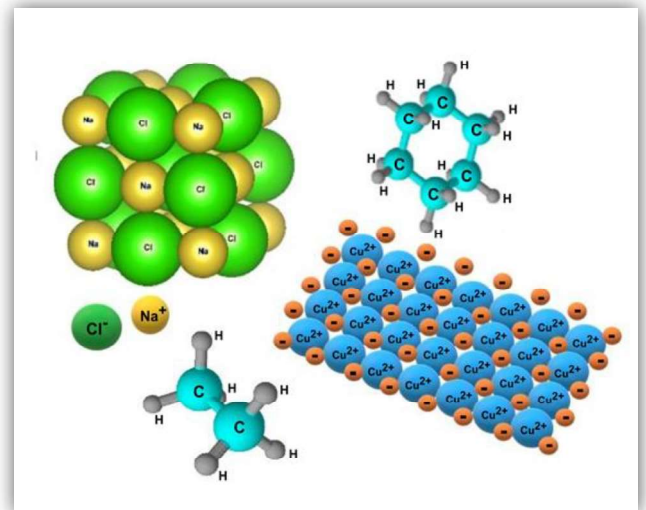
## ENLACE QUÍMICO

## ENLACE IÓNICO

2026

Dra. Florencia Mangiameli

Bioquímica y Farmacia  
Turno tarde – Comisiones 7, 8 y 9



1

Los átomos, al combinarse, alcanzan un estado más estable que cuando están separados. Por eso, la mayoría de los átomos posee tendencia a combinarse con otros átomos (del mismo u otro elemento).

No existe una única manera de llegar al estado de mayor estabilidad.

**Siempre que átomos o iones se unen fuertemente unos a otros, decimos que hay un *enlace químico* entre ellos.**

Las propiedades de las sustancias dependen en gran medida de los enlaces químicos que mantienen unidos sus átomos

# Tipos de fuerzas

**Fuerzas primarias:**  
entre átomos para dar  
lugar a compuestos.  
Atractivas y fuertes.



**Fuerzas  
intramoleculares**

**Fuerzas  
secundarias:**  
entre moléculas  
formadas.  
Intensidad variada.



**Fuerzas  
interparticulares**

3

## Enlace químico

**Fuerzas que mantienen unidos a los  
átomos en las moléculas de  
elementos (O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>), compuestos y  
metales**

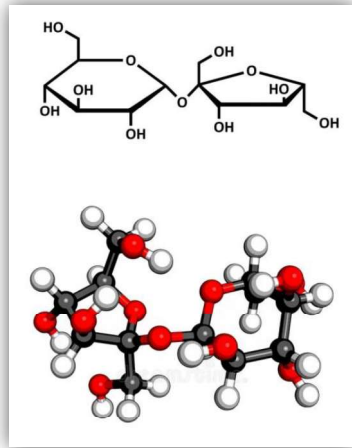
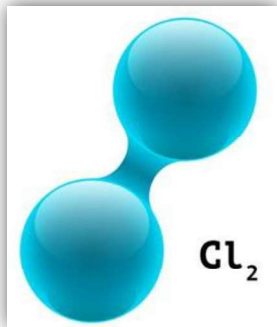
- ✓ **Enlace iónico:** cristales iónicos, agrupación de iones por combinación de un metal y un no metal, cuando estos tienen electronegatividades muy diferentes.
- ✓ **Enlace covalente:** compartición de electrones entre átomos, combinación de dos no metales, o de un metal y un no metal, de electronegatividades no muy diferentes.
- ✓ **Enlace metálico:** compartición de electrones en metales, ocurre por unión de elementos metálicos

El tipo de enlace depende de las propiedades químicas de los elementos que se combinan.

4

## Enlace covalente

Se llama así al enlace formado entre dos elementos que comparten electrones.



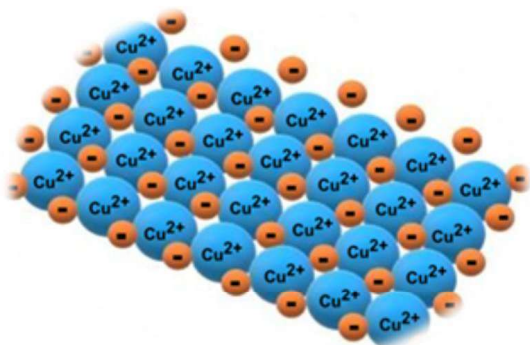
Ejemplos: Azúcar (sacarosa,  $\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$ ), Cloro ( $\text{Cl}_2$ )

No conduce la corriente eléctrica ni sólidos, ni fundidos, ni disueltos en agua.

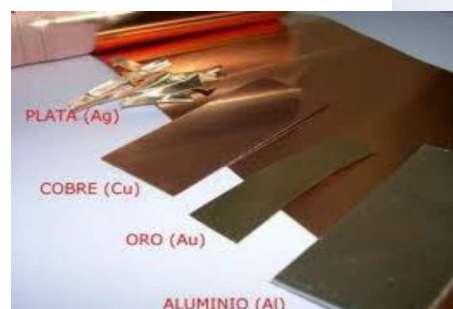
5

## Enlace metálico

Se llama así al enlace que une a los átomos en los metales. Cada átomo está unido a varios átomos vecinos. Los electrones de enlace tienen relativa libertad para moverse dentro de la estructura tridimensional, hay una compartición de electrones en metales.



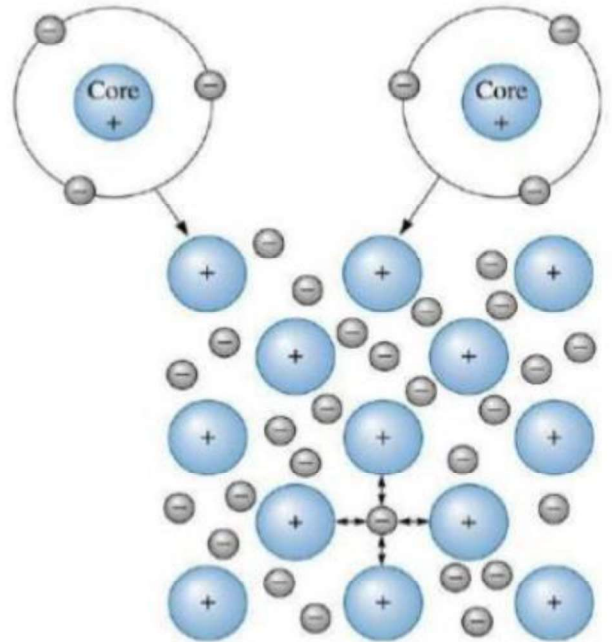
Los enlaces metálicos dan pie a propiedades metálicas típicas como elevada conductividad eléctrica y lustre, son insolubles en agua y conducen la corriente eléctrica en estado sólido.



6

## Enlace metálico

Enlace que une a los átomos en los metales. Los átomos ceden sus electrones de valencia, que forman un mar de electrones. Los núcleos quedan enlazados por atracción mutua.



**cobre**



**aluminio**

7

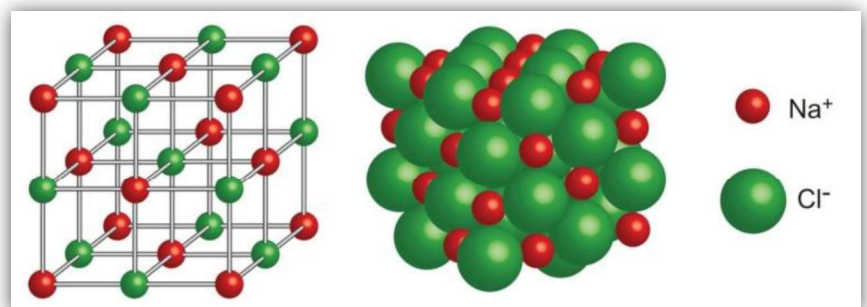
## Enlace iónico



Ejemplo: sal de mesa (NaCl).

No conduce la corriente eléctrica en estado sólido, pero sí fundida o disuelta en agua.

Se refiere a las fuerzas electrostáticas que existen entre iones con carga opuesta. Los iones podrían formarse a partir de átomos por la transferencia de uno o más electrones de un átomo a otro. Las sustancias iónicas casi siempre se forman por interacción entre metales y no metales muy alejados en la Tabla periódica.



8

## Algunas propiedades de los compuestos iónicos

- ✓ Formados por iones, no existe la molécula (ej.: en un cristal de NaCl no existe ninguna entidad discreta constituida por un Cl<sup>-</sup> y un Na<sup>+</sup>)
- ✓ Sólidos a temperatura ambiente
- ✓ Duros y quebradizos
- ✓ Tienen alto punto de fusión (ej.: NaCl funde a 801 °C)
- ✓ Tienden a ser más solubles en solventes polares que no polares
- ✓ No conducen la corriente eléctrica como sólidos, sí fundidos o en solución acuosa
- ✓ Disueltos en agua son electrolitos fuertes (totalmente disociados).

9

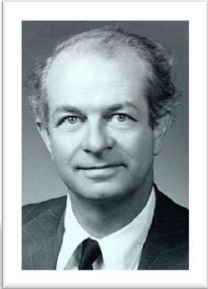
Enlace iónico: cristales iónicos por agrupación de iones  
combinación de un metal y un no metal

Metal		Metaloide		No metal													
H					He												
Li	Be		B	C	N	O	F	Ne									
Na	Mg		Al	Si	P	S	Cl	Ar									
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La-Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac-Lr															

¿Por qué se da este tipo de interacción?  
¿Cuál es la explicación fisicoquímica?

10

# Electronegatividad de Pauling (1931)



Linus Pauling (1901-1994)

**Electronegatividad ( $\chi_p$ )**  
**Tendencia de un átomo para atraer hacia sí los electrones cuando se combina con otro átomo formando un compuesto químico.**

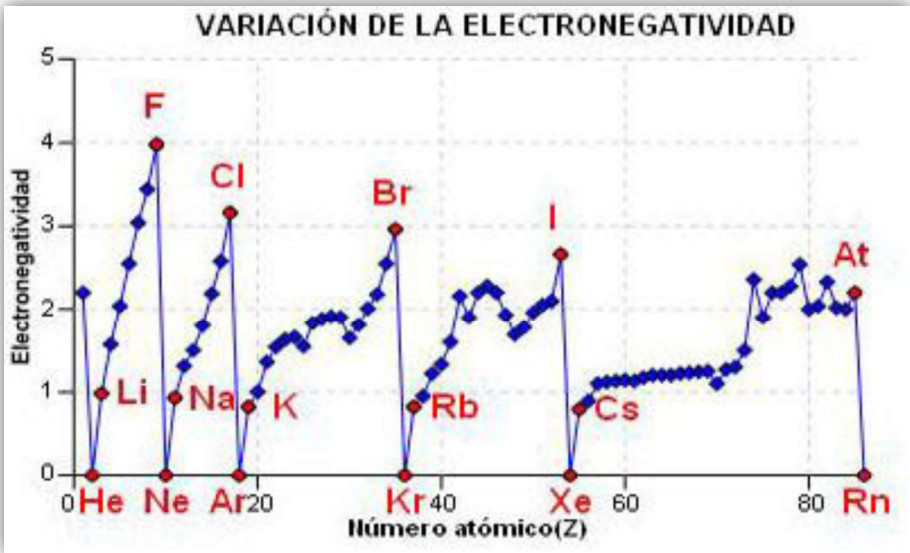


Permite estimar si un enlace dado es covalente no polar, covalente polar o iónico

Premio Nobel de Química 1954



11



**La electronegatividad es una propiedad periódica**

Aumenta al disminuir el radio



12

## Valores de electronegatividad (escala de Pauling)

1											13	14	15	16	17	
H 2,1	2											B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,5	F 4,0
Li 1,0	Be 1,5											Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,5	Cl 3,0
Na 0,9	Mg 1,2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12					
K 0,8	Ca 1,0	Sc 1,3	Ti 1,5	V 1,6	Cr 1,6	Mn 1,5	Fe 1,8	Co 1,8	Ni 1,8	Cu 1,9	Zn 1,6	Ga 1,6	Ge 1,8	As 2,0	Se 2,4	Br 2,8
Rb 0,8	Sr 1,0	Y 1,2	Zr 1,4	Nb 1,6	Mo 1,8	Tc 1,9	Ru 2,2	Rh 2,2	Pd 2,2	Ag 1,9	Cd 1,7	In 1,7	Sn 1,8	Sb 1,9	Te 2,1	I 2,5
Cs 0,8	Ba 0,9	La* 1,1	Hf 1,3	Ta 1,5	W 2,4	Re 1,9	Os 2,2	Ir 2,2	Pt 2,2	Au 2,4	Hg 1,9	Tl 1,8	Pb 1,8	Bi 1,9	Po 2,0	At 2,2
Fr 0,7	Ra 0,9	Ac† 1,1	† Lantánidos: 1,1-1,3 † Actínidos: 1,3-1,5													

H 2,1																	He
Li 1,0	Be 1,6											B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,5	F 4,0	Ne
Na 0,9	Mg 1,2											Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,5	Cl 3,0	Ar
K 0,8	Ca 1,0	Sc 1,3	Ti 1,5	V 1,6	Cr 1,6	Mn 1,5	Fe 1,8	Co 1,9	Ni 1,9	Cu 1,9	Zn 1,6	Ga 1,6	Ge 1,8	As 2,0	Se 2,4	Br 2,8	Kr
Rb 0,8	Sr 1,0	Y 1,2	Zr 1,4	Nb 1,6	Mo 1,8	Tc 1,9	Ru 2,2	Rh 2,2	Pd 2,2	Ag 1,9	Cd 1,7	In 1,7	Sn 1,8	Sb 1,9	Te 2,1	I 2,5	Xe
Cs 0,7	Ba 0,9	La 1,0	Hf 1,3	Ta 1,5	W 1,7	Re 1,9	Os 2,2	Ir 2,2	Pt 2,2	Au 2,4	Hg 1,9	Tl 1,8	Pb 1,9	Bi 1,9	Po 2,0	At 2,1	Rn

BAJO

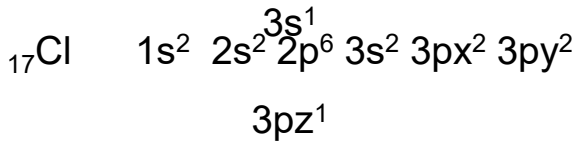
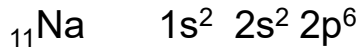
MEDIO

ALTO

13

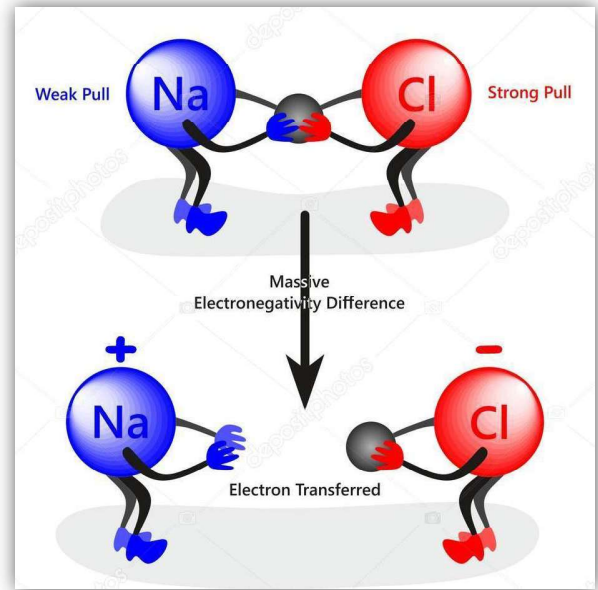
- ✓ La *escala de Pauling* es una *escala arbitraria*, basada en *datos termoquímicos*, que asigna el máximo valor (4,0) al F. Es un *concepto relativo*, no una *función medible*. No tiene unidades.
- ✓ Se relaciona con la energía de ionización y con la afinidad electrónica.
- ✓ A mayor electronegatividad de un átomo, mayor es su capacidad de atraer electrones.
- ✓ La consecuencia de la diferente electronegatividad entre los átomos unidos es la polarización del enlace entre dos átomos.

A mayor diferencia de electronegatividad, mas polar el enlace. Si la diferencia es lo suficientemente grande, los electrones se transfieren del menos electronegativo, al más electronegativo.



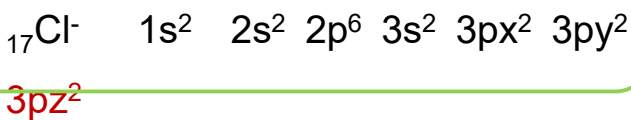
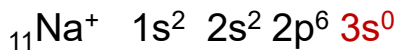
$$\chi_p(\text{Na}) = 0,9 \quad \ll \quad \chi_p(\text{Cl}) = 3,0$$

$$\Delta\chi_p = \chi_p(\text{Cl}) - \chi_p(\text{Na}) = 2,1 \quad \uparrow \uparrow$$



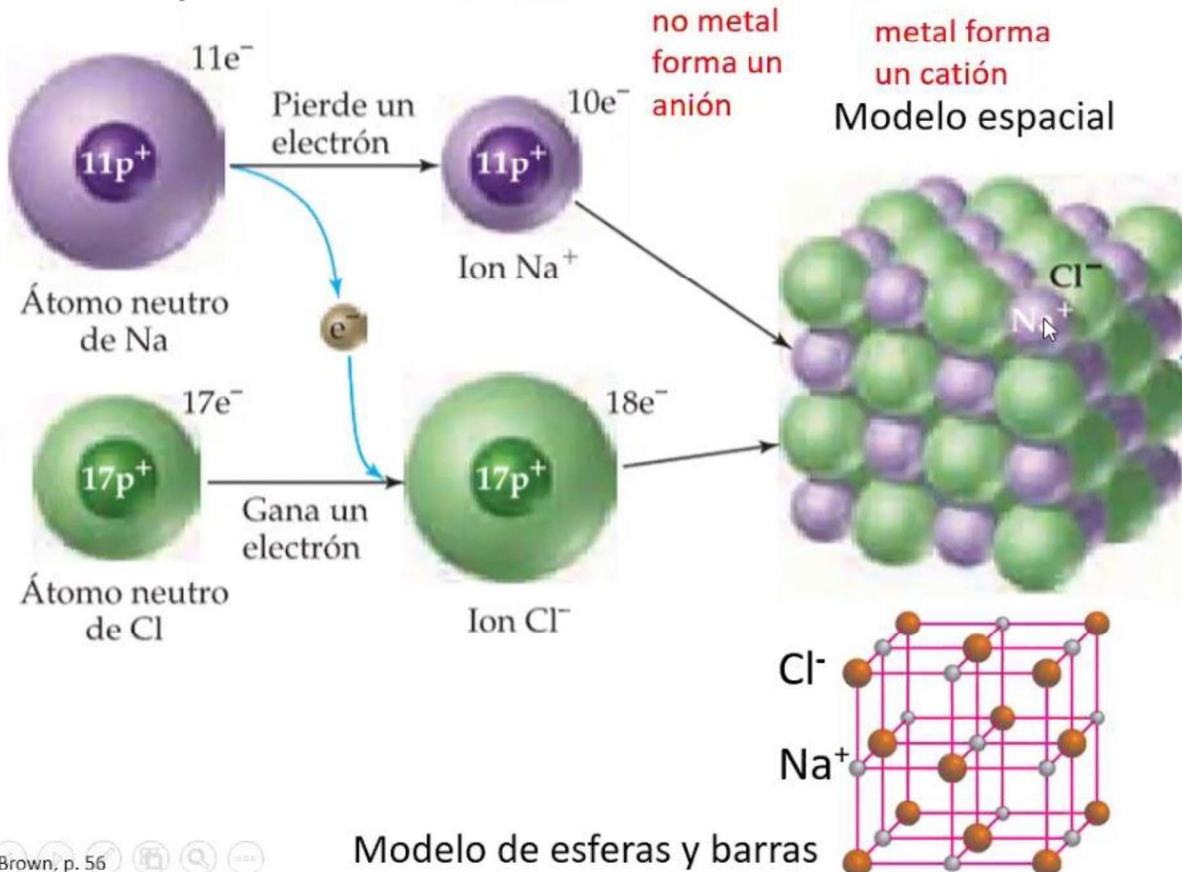
**NaCl**

**Compuesto iónico**

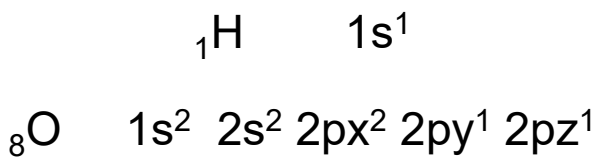


15

## Compuestos Iónicos: Cloruro de Sodio



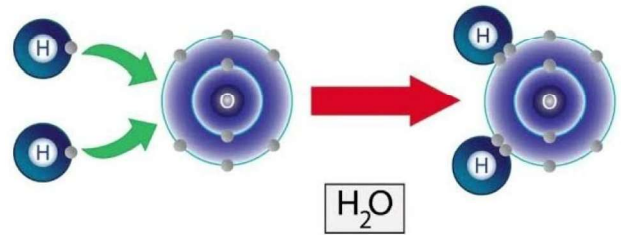
Sólo si los átomos tienen la misma electronegatividad, el enlace será no polar.



$$\chi_p(\text{H}) = 2,10 \quad << \quad \chi_p(\text{O}) = 3,44$$

$$\Delta\chi_p = \chi_p(\text{O}) - \chi_p(\text{H}) = 1,34 \downarrow$$

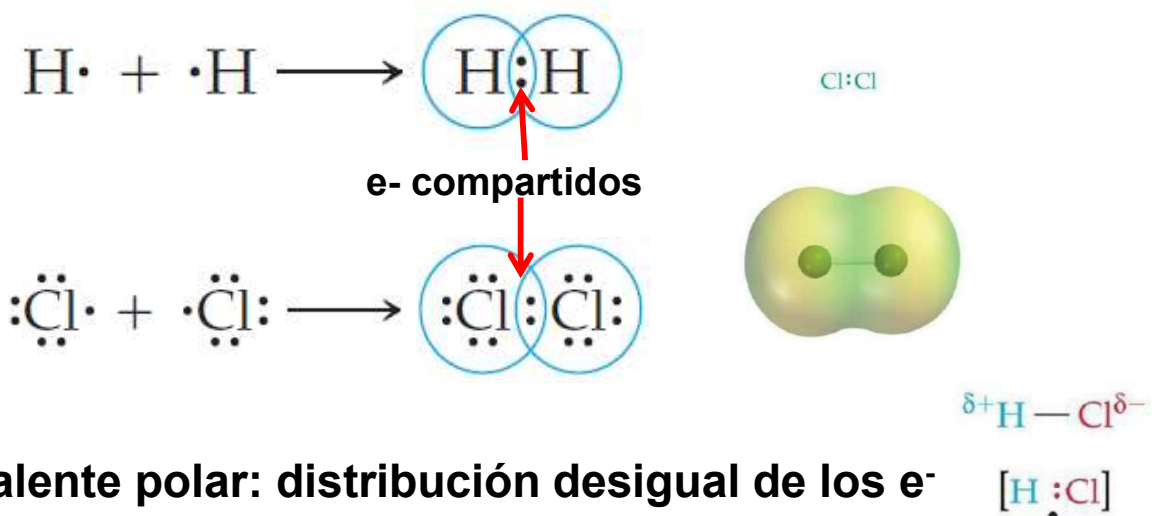
compartición de electrones entre átomos



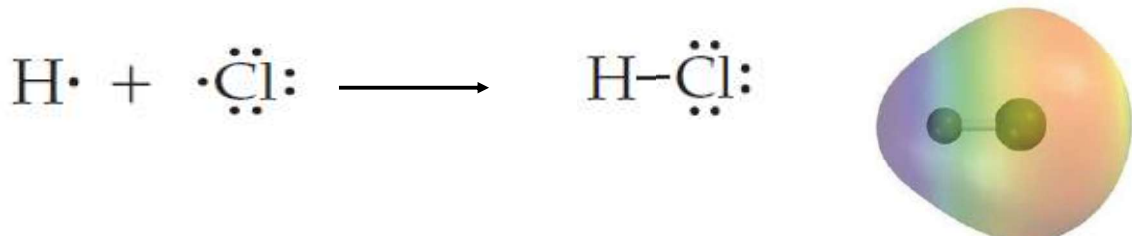
**Compuesto covalente**

## Enlace covalente

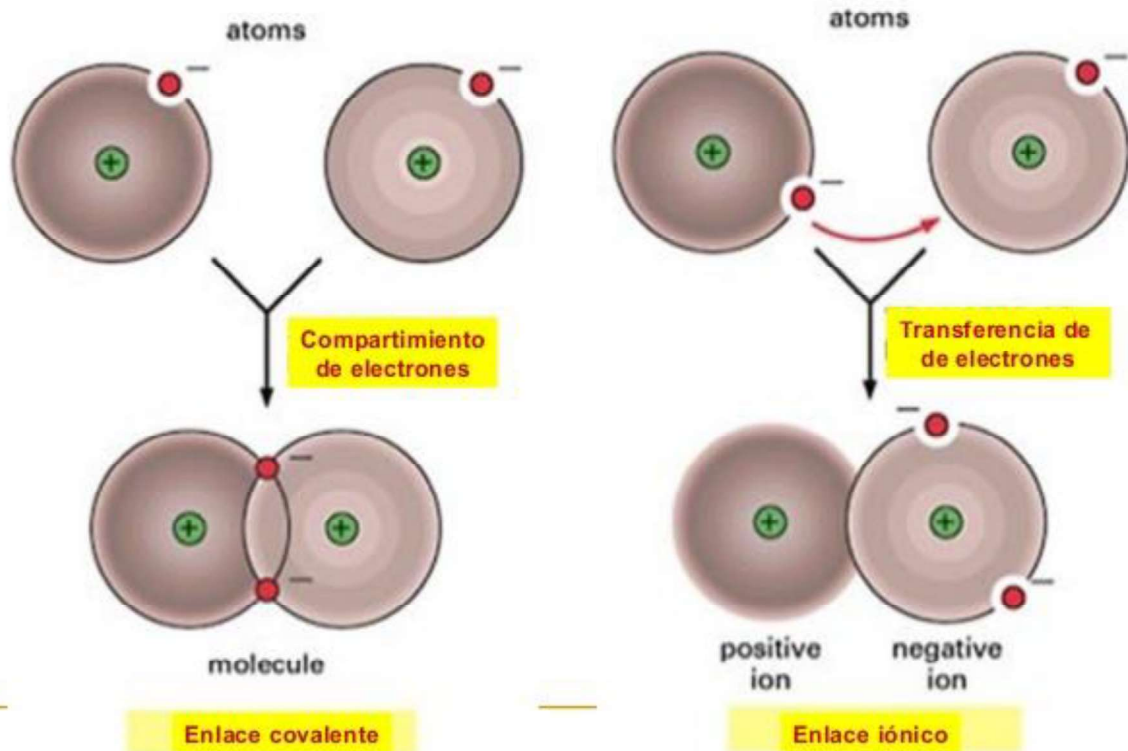
Covalente puro: no hay transferencia de electrones



Covalente polar: distribución desigual de los e<sup>-</sup>



# Enlace covalente vs Enlace iónico



19

Ejercicio 1: Determine la diferencia de electronegatividad entre los átomos unidos en estos compuestos: KCl, H<sub>2</sub>O y CH<sub>4</sub>

¿Donde buscar los datos de electronegatividad?

## TABLA DE LAS PROPIEDADES PERIODICAS DE LOS ELEMENTOS

Porcentaje de carácter iónico de una única ligación química

Diferencia en electronegatividad	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Carácter % iónico	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
14.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
14.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
20.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

LEYENDA

Estructura cristalina (2)	Propiedades ácido base (1)
Símbolo	Electronegatividad de Pauling
Radio covalente, Å	Calor de Vaporización KJ / Mol (4)
Radio atómico, Å (6)	Calor de fusión KJ / Mol (5)
Volumen atómico, cm <sup>3</sup> /mol (8)	Conductividad eléctrica 10 <sup>6</sup> Ω <sup>-1</sup> m <sup>-1</sup> (6)
Potencial de primera ionización, V	Conductividad térmica W m <sup>-3</sup> K <sup>-3</sup> (3)
Capacidad específica de calor Jg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> (3)	

20

KCl	$\chi_{\text{K}} = 0,8$	$\chi_{\text{Cl}} = 3,1$	$\Delta\chi = 2,3$	¿alta?
H <sub>2</sub> O	$\chi_{\text{H}} = 2,2$	$\chi_{\text{O}} = 3,5$	$\Delta\chi = 1,3$	¿Alta o baja ?
CH <sub>4</sub>	$\chi_{\text{C}} = 2,5$	$\chi_{\text{H}} = 2,2$	$\Delta\chi = 0,3$	baja

¿cómo saber cuando es grande la diferencia de electronegatividad?



21

✓ **Enlace iónico:** unión electrostática entre elementos con electronegatividades muy diferentes.

✓ **Enlace covalente:** compartición de e<sup>-</sup> entre átomos de electronegatividades no muy diferentes.

Pauling introdujo la idea de que *el carácter iónico de un enlace varía con la diferencia de electronegatividad*

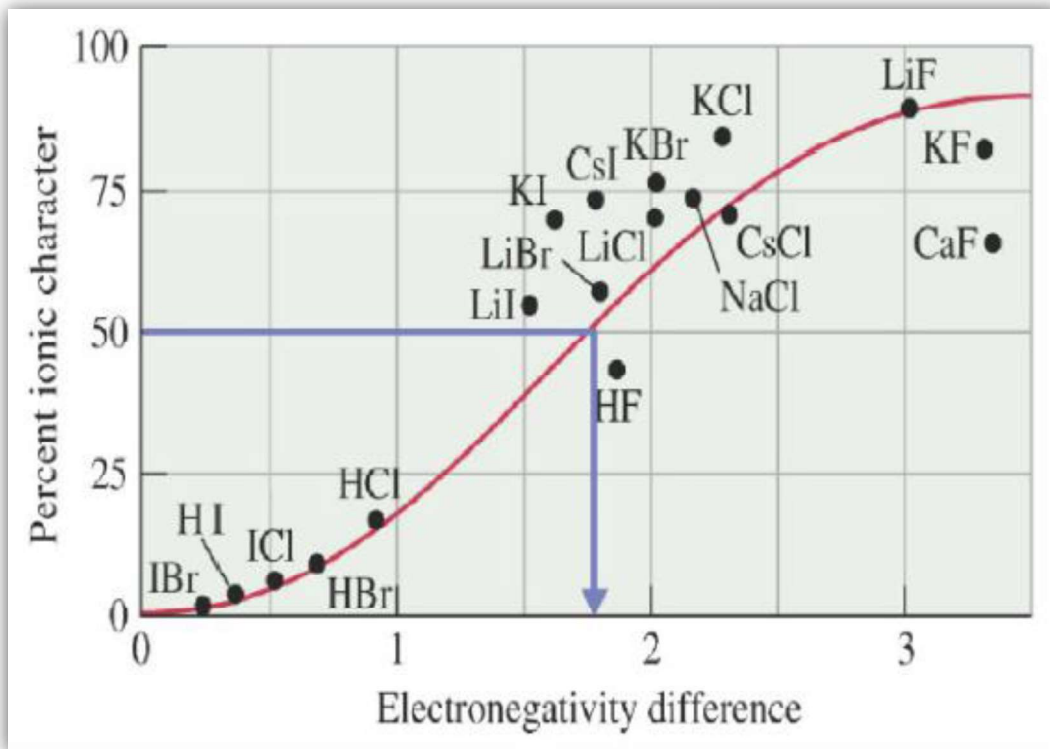
¿Qué tan grande debe ser la diferencia de electronegatividad para que un enlace sea iónico?

¿Qué tan pequeña debe ser la diferencia de electronegatividad para que un enlace sea covalente?



22

$$\% CI = \left\{ 1 - e^{(-0,25 (\chi_A - \chi_B)^2)} \right\} \times 100$$



**$\Delta \chi \geq 1,7 \rightarrow$  enlace iónico**

23

Compuesto	$\Delta \chi$	% CI	$\Delta G_f^\circ$ (kJ/mol)	$\Delta H_f^\circ$ (kJ/mol)
LiF <sub>(s)</sub>	3	89,5	- 584,1	- 612,1
LiCl <sub>(s)</sub>	2,18	69,5	- 384	- 408,8
LiBr <sub>(s)</sub>	1,98	62,5	- 342	- 351
LiI <sub>(s)</sub>	1,68	5	- 270	- 271

$$\chi_F = 3,98$$

$$\chi_{Cl} =$$

$$3,16$$

$$\chi_{Br} =$$

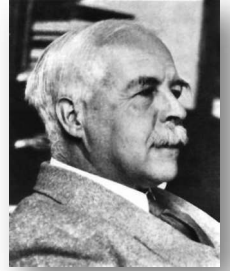
$$2,96$$

$$\chi_I = 2,66$$

**Diferencia de electronegatividad,  
% de carácter iónico y calor de  
formación**

24

## Visión general de la teoría de Lewis



Gilbert Lewis  
(1875-1946)

- ✓ Los electrones de valencia juegan un rol fundamental en el enlace químico.
- ✓ La *transferencia de electrones* lleva a un *enlace iónico*.
- ✓ *Compartir electrones* lleva a un *enlace covalente*.
- ✓ *Los electrones son transferidos o compartidos para dar a cada átomo la configuración de gas noble* (muy estable): regla del octeto (hay excepciones a esta regla).

25

## Regla del octeto

Los átomos tienden a ganar, perder o compartir electrones hasta estar rodeados por ocho electrones de valencia.

Subcapas s y p llenas (configuración de gas noble)

26

La formación de enlaces implica interacciones de los electrones más externos de los átomos, llamados “electrones de valencia”.

Una forma conveniente de mostrar los electrones de valencia es mediante los **símbolos de Lewis** o de electrón-punto.

El símbolo de Lewis para un elemento consiste en el símbolo químico del elemento (que representa el núcleo + el *core* de electrones) con un punto por cada  $e^-$  de valencia, colocados alrededor de dicho símbolo.

Las tendencias de los átomos a ganar, perder o compartir sus electrones de valencia con frecuencia siguen la regla del octeto, que puede verse como un intento por parte de los átomos de alcanzar la configuración electrónica del gas noble más cercano en la TP.

27

Los *símbolos de Lewis* se escriben en general para los elementos de los grupos principales y en raras ocasiones para los elementos de transición.

Símbolo químico del elemento más un punto por cada electrón de valencia

**Una estructura de Lewis es una combinación de símbolos de Lewis que representa la transferencia o la compartición de electrones en un enlace químico.**

28

Elemento	Configuración electrónica	Símbolo de Lewis
Li	[He]2s <sup>1</sup>	Li·
Be	[He]2s <sup>2</sup>	·Be·
B	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup>	·B·
C	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	·C·
N	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	·N·
O	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	·O·
F	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	·F·
Ne	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>	·Ne·

n = 2, mismo período

n = 3, mismo período

Elemento	Configuración electrónica	Símbolo de Lewis
Na	[Ne]3s <sup>1</sup>	Na·
Mg	[Ne]3s <sup>2</sup>	·Mg·
Al	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>	·Al·
Si	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	·Si·
P	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	·P·
S	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	·S·
Cl	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	·Cl·
Ar	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	·Ar·

29

### NOTACIÓN DE LEWIS DE ELEMENTOS REPRESENTATIVOS

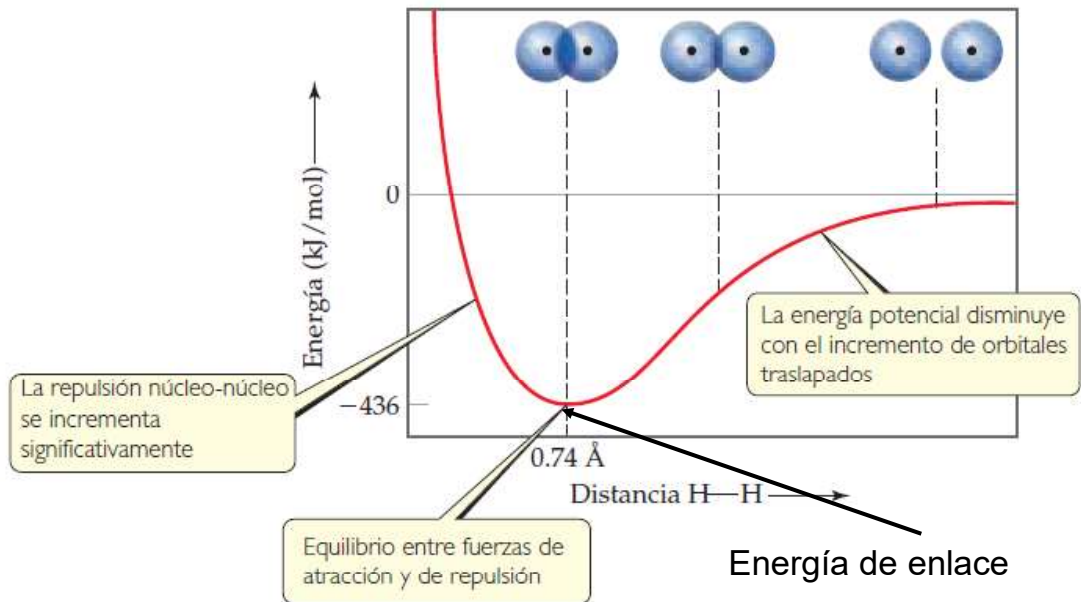
IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
· H							·· He
· Li	·· Be	·· B·	·· C· ·	·· N· ·	·· O· ·	·· F· ·	·· Ne· ·
· Na	·· Mg	·· Al·	·· Si· ·	·· P· ·	·· S· ·	·· Cl· ·	·· Ar· ·
· K	·· Ca	·· Ga·	·· Ge· ·	·· As· ·	·· Se· ·	·· Br· ·	·· Kr· ·
· Rb	·· Sr	·· In·	·· Sn· ·	·· Sb· ·	·· Te· ·	·· I· ·	·· Xe· ·
· Cs	·· Ba	·· Tl·	·· Pb· ·	·· Bi· ·	·· Po· ·	·· At· ·	·· Rn· ·
· Fr	·· Ra						

30

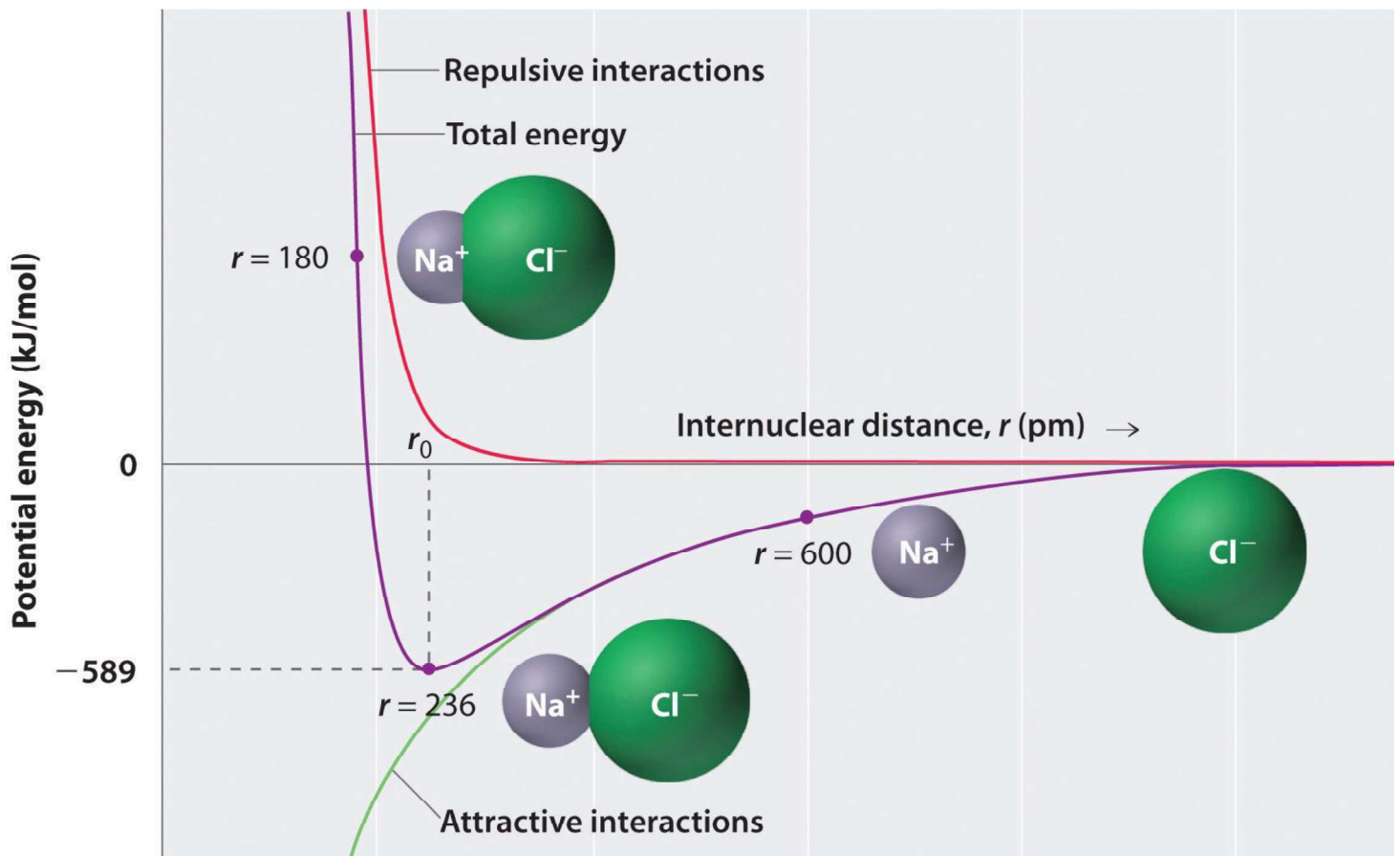
¿Qué pasa con la energía interna la formarse un compuesto iónico?



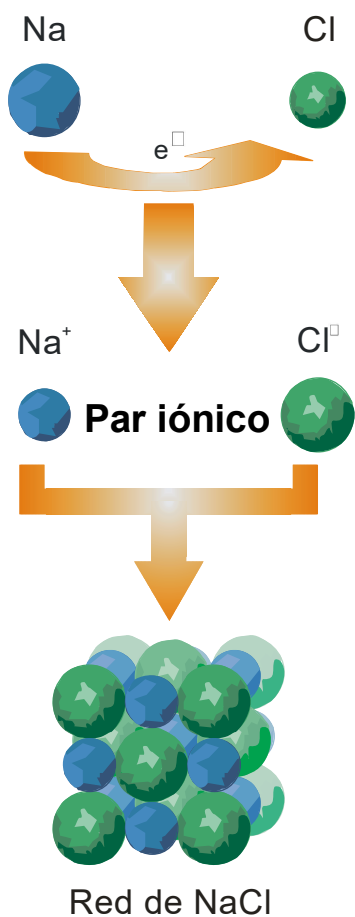
Curva de energía potencial vs distancia internuclear al aproximarse **iones de carga opuesta**



31



32



Formación del cristal de cloruro de sodio (s):  
transferencia de **un electrón** desde el átomo de sodio (Na) al átomo de cloro (Cl)

El contenido energético disminuye al formarse el **par iónico**

El contenido energético disminuye aún más, al agruparse los pares iónicos.

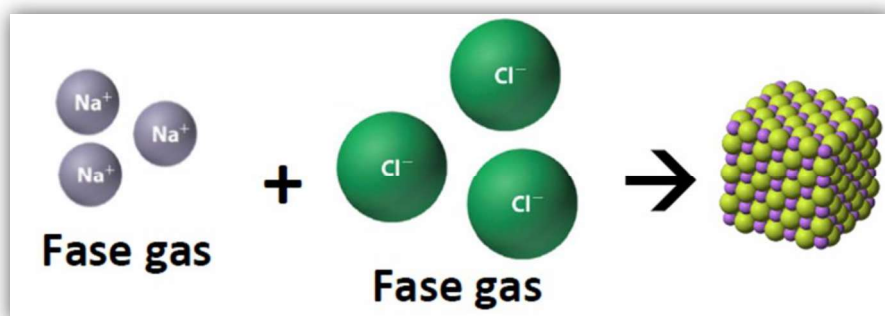
↓  $U_0 = \text{Energía de red}$

← **Formación del cristal iónico**

33

## Energía de red ( $U$ o $\Delta H_{\text{red}}$ )

**Cantidad de energía liberada cuando se forma un mol de compuesto iónico sólido a partir de sus iones en estado gaseoso.**



- Depende de:
- ✓ carga de iones
  - ✓ tamaño iones
  - ✓ disposición en el sólido

Muy difícil de determinar experimentalmente. Se calcula:

- 1) Cálculos teórico- electrostáticos: a) Born- Landé, b) Kaputinskii
- 2) Ciclo de Born- Haber. Usando la ley de Hess

34

## A mayor energía de red, mayor atracción de los iones en el compuesto

Compuesto	Energía de red (kJ/mol)
LiCl	- 834
NaCl	- 769
KCl	- 701
NaBr	- 732
Na <sub>2</sub> O	- 2481
Na <sub>2</sub> S	- 2192
MgCl <sub>2</sub>	- 2326
MgO	- 3795

35

Las energías de red de compuestos iónicos son valores grandes, lo que indica que los iones experimentan fuerte atracción entre sí en estos sólidos.

La energía liberada por la atracción entre iones con carga distinta compensa con creces la naturaleza endotérmica de las energías de ionización y hace que la formación de compuestos iónicos sea un proceso exotérmico.

La magnitud de la energía de red de un sólido depende de las cargas de los iones, sus tamaños y su disposición en el sólido.

36

Dado que la energía potencial de dos partículas cargadas que interactúan está dada por:

$$E = \frac{k(Q_1 \times Q_2)}{d}$$

$Q_1$  y  $Q_2$ : cargas de las partículas,  $d$ : distancia entre sus centros,  $k$  es una cte =  $8,99 \times 10^9 \text{ J}\cdot\text{m}/\text{C}^2$

**Lo que más influye en las energías de red son las cargas, porque la variación de los radios iónicos no es muy grande.**

37

**Cálculos teórico- electrostáticos de la energía de red (estado solido)**

a) Cuando se sabe la estructura cristalina del compuesto: **Ecuación de Born-Landé**

$$U = 120.000 \frac{\nu z^+ z^-}{d_0} \left( 1 - \frac{34,5}{d_0} \right)$$

b) Cuando no se conoce la estructura cristalina del compuesto: **Ecuación de Kapustinskii**

$$U = 138.900 \frac{z^+ z^- M}{d_0} \left( 1 - \frac{1}{n} \right)$$

$U$  = energía reticular expresada en kJ/mol de fórmula unidad  
 $\nu$  = número de iones por fórmula unidad del compuesto  
 $z^+$ ,  $z^-$  = cargas del catión y del anión respectivamente  
 $d_0$  = distancia interiónica de equilibrio expresada en picómetros.

38

La ecuación de Born-Landé es una forma de calcular la energía de red de un compuesto iónico cristalino. En 1918 Max Born y Alfred Landé propusieron que la energía de red se podría derivar del potencial electrostático de la red iónica y un término de energía potencial repulsiva

$$E = - \frac{N_A M z^+ z^- e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_0} \left( 1 - \frac{1}{n} \right)$$

$N_A$  = Constante de Avogadro

$M$  = Constante de Madelung, relacionada con la geometría del cristal.

$Z^+$  = número de carga del catión

$Z^-$  = número de carga del anión

$e$  = carga elemental:  $1,6022 \times 10^{-19}$  C

$\epsilon_0$  = permitividad del vacío;  $4 \pi \epsilon_0 = 1.112 \times 10^{-10}$  C<sup>2</sup>/(J·m)

$r_0$  = distancia al ion más cercano

$n$  = Exponente de Born, un número entre 5 y 12, determinado experimentalmente mediante la medición de la compresibilidad del sólido, o derivado teóricamente

39

## Variación de la energía de red con la distancia interiónica

Compuesto	$\Delta H_f^\circ$ (kJ/mol)	$r^+ + r^-$ (pm)	$\Delta H_f^\circ$ (kJ/mol)
LiF <sub>(s)</sub>	- 612,1	209	- 1030
LiCl <sub>(s)</sub>	- 408,8	257	- 843
LiBr <sub>(s)</sub>	- 351	272	- 788
LiI <sub>(s)</sub>	- 271	296	- 730

### 13. ENERGÍA DE RED $U_0$ (kJ/mol)

En la tabla aparecen los valores obtenidos a partir de un ciclo termodinámico de Born-Haber.

\* Valor calculado a partir de la ecuación de Born-Landé

	F <sup>-</sup>	Cl <sup>-</sup>	Br <sup>-</sup>	I <sup>-</sup>	O <sup>2-</sup>	S <sup>2-</sup>	OH <sup>-</sup>	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	O <sub>2</sub> <sup>2-</sup>	O <sub>2</sub> <sup>-</sup>
Li <sup>+</sup>	-1036	-853	-807	-757	-2799*	-2472	-1039	-2269	-2560	-872
Na <sup>+</sup>	-923	-786	-747	-704	-2481*	-2203	-900	-2030	-2305	-796
K <sup>+</sup>	-821	-715	-682	-649	-2238*	-2052	-804	-1858	-2078	-725
Rb <sup>+</sup>	-785	-689	-660	-630	-2163*	-1949	-773	-1795	-2006	-995
Cs <sup>+</sup>	-740	-659	-631	-604	---	-1850	-724	-1702	-1861	-668
Ag <sup>+</sup>	-967	-915	-904	-889	-3002*	-2677	-918*	---	---	---
Cu <sup>+</sup>	---	-996	-979	-966	-3273*	-2865	-1006*	---	---	---
Mg <sup>2+</sup>	-2957	-2526	-2440	-2327	-3791	---	-3006	-3122	-3526	---
Ca <sup>2+</sup>	-2630	-2258	-2176	-2074	-3401	---	-2645	-2810	-3133	---
Sr <sup>2+</sup>	-2492	-2156	-2075	-1963	-3223	---	-2483	-2688	-2849	---
Ba <sup>2+</sup>	-2352	-2056	-1985	-1877	-3054	---	-2339	-2554	---	---
Cu <sup>2+</sup>	-3082	-2811	-2763	-2640*	-4050	---	-3237	-3327	---	---
Zn <sup>2+</sup>	-3032	-2734	-2678	-2605	-3971	---	-3158	-3273	---	---
Cd <sup>2+</sup>	-2829	-2552	-2507	-2441	-3806*	---	-2918	-3052	---	---



Max Born  
1882 – 1970

### El ciclo de Born–Haber



Fritz Haber  
1868 - 1934

Es un ciclo de reacciones químicas desarrollado en un principio por el físico Max Born y el químico alemán Fritz Haber en 1917.

El ciclo de Born–Haber comprende la formación de un compuesto iónico desde la reacción de un metal (normalmente un elemento del grupo 1 o 2) con un no metal (como halógenos, oxígeno, etc.).

Los ciclos de Born–Haber se usan principalmente como medio para calcular la energía reticular que, en general, es muy difícil de determinar experimentalmente.

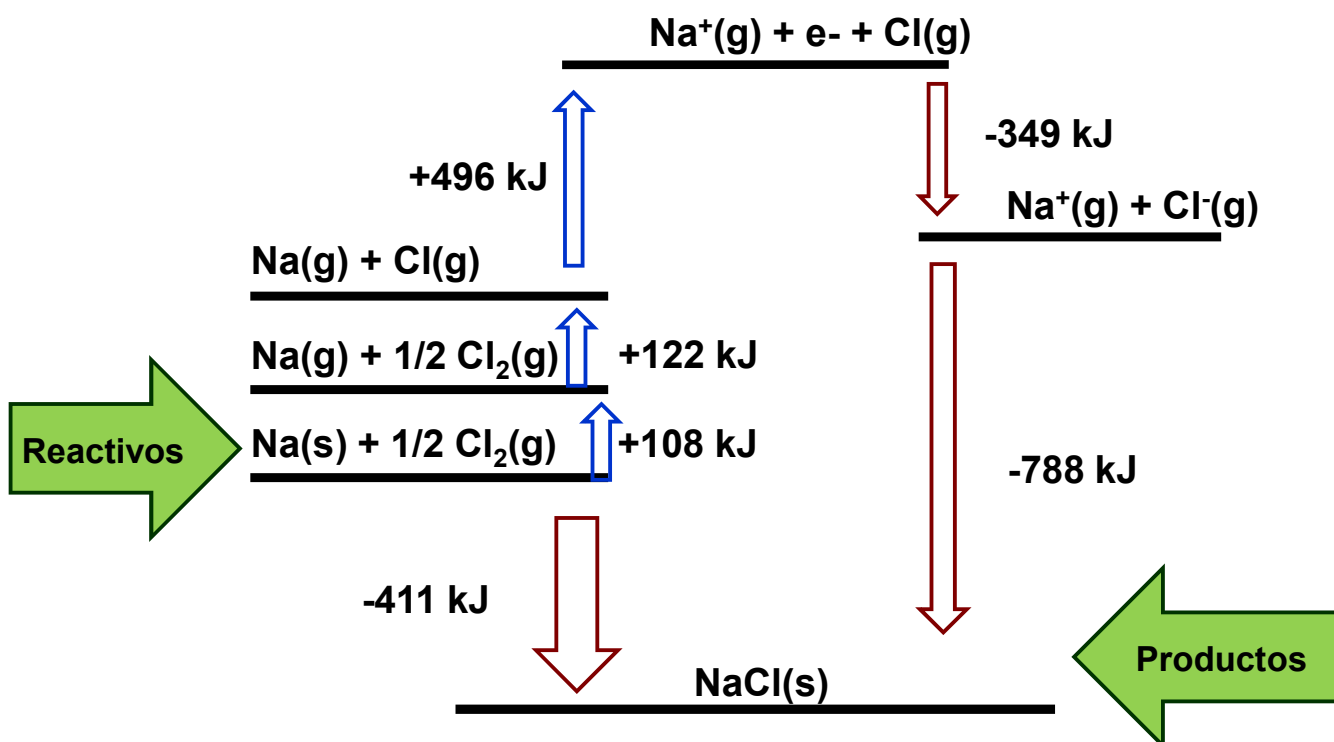
## Energía y formación del enlace iónico

			$\Delta H^\circ$ (kJ)
Sublimación de sodio	$\text{Na(s)} \rightarrow \text{Na(g)}$		+92
Disociación de moléculas de cloro	$\frac{1}{2} \text{Cl}_2(\text{g}) \rightarrow \text{Cl(g)}$		+121
Ionización de sodio (PI)	$\text{Na(g)} \rightarrow \text{Na}^+(\text{g}) + \text{e}^-$		+496
Adición de un electrón al cloro (AE)	$\text{Cl(g)} + \text{e}^- \rightarrow \text{Cl}^-(\text{g})$		-349
Formación de NaCl (U o $\Delta H_{\text{red}}$ )	$\text{Na}^+(\text{g}) + \text{Cl}^-(\text{g}) \rightarrow \text{NaCl(s)}$		-771
<hr/>			
Entalpia de formación ( $\Delta H^\circ_f$ )	$\text{Na(s)} + \frac{1}{2} \text{Cl}_2(\text{g}) \rightarrow \text{NaCl(s)}$		-411

$$\Delta H^\circ_f \text{NaCl}_{(\text{s})} = \Delta H_{\text{red}} \text{NaCl}_{(\text{s})} + \Delta H^\circ_f \text{Na}_{(\text{g})} + \Delta H^\circ_f \text{Cl}_{(\text{g})} + I_1 \text{Na} + EA_1 \text{Cl}$$

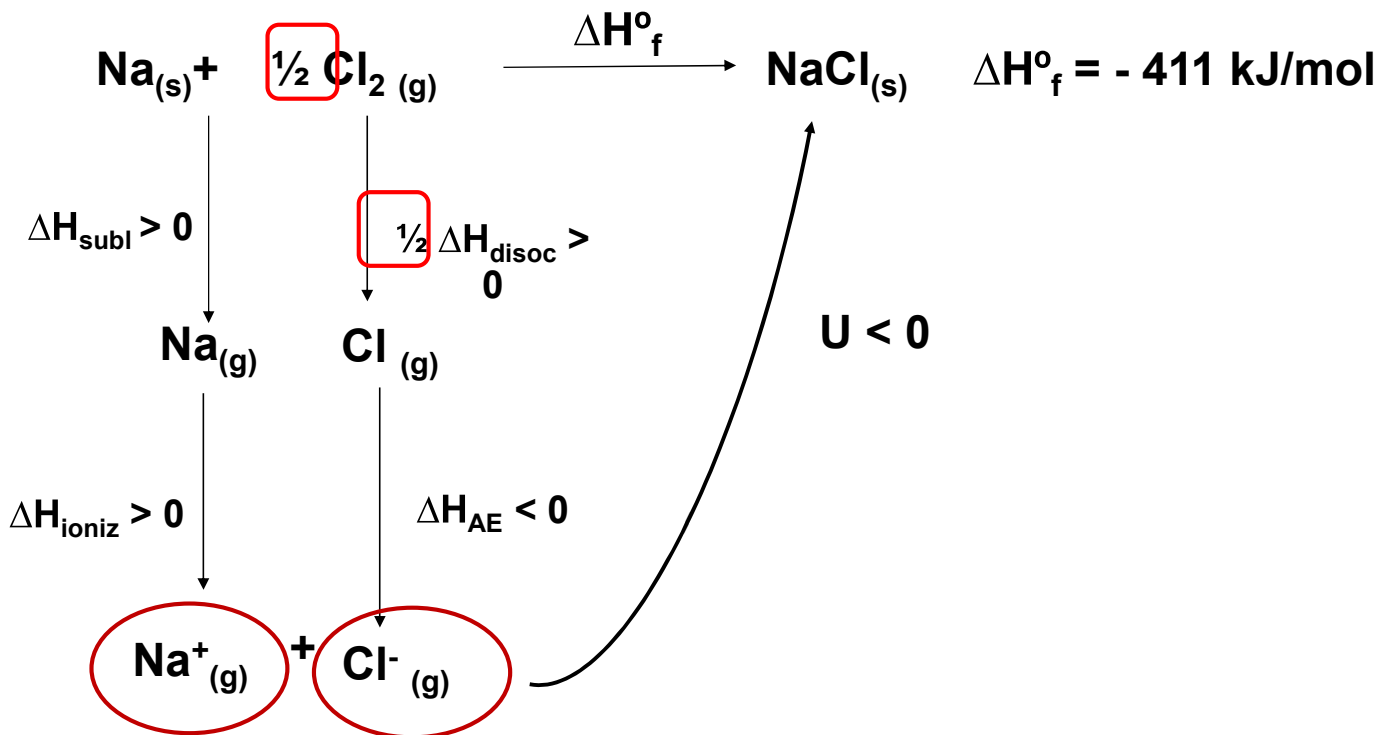
43

**Ciclo de Born-Haber para la formación de un sólido iónico a partir de sus elementos:  $\text{Na(s)} + \frac{1}{2} \text{Cl}_2(\text{g}) \rightarrow \text{NaCl(s)}$**



$$\Delta H_{\text{red}} \text{NaCl} = \Delta H^\circ_f \text{NaCl}_{(\text{s})} - (\Delta H^\circ_f \text{Na}_{(\text{g})} + \Delta H^\circ_f \text{Cl}_{(\text{g})} + I_1 \text{Na} + EA_1 \text{Cl})$$

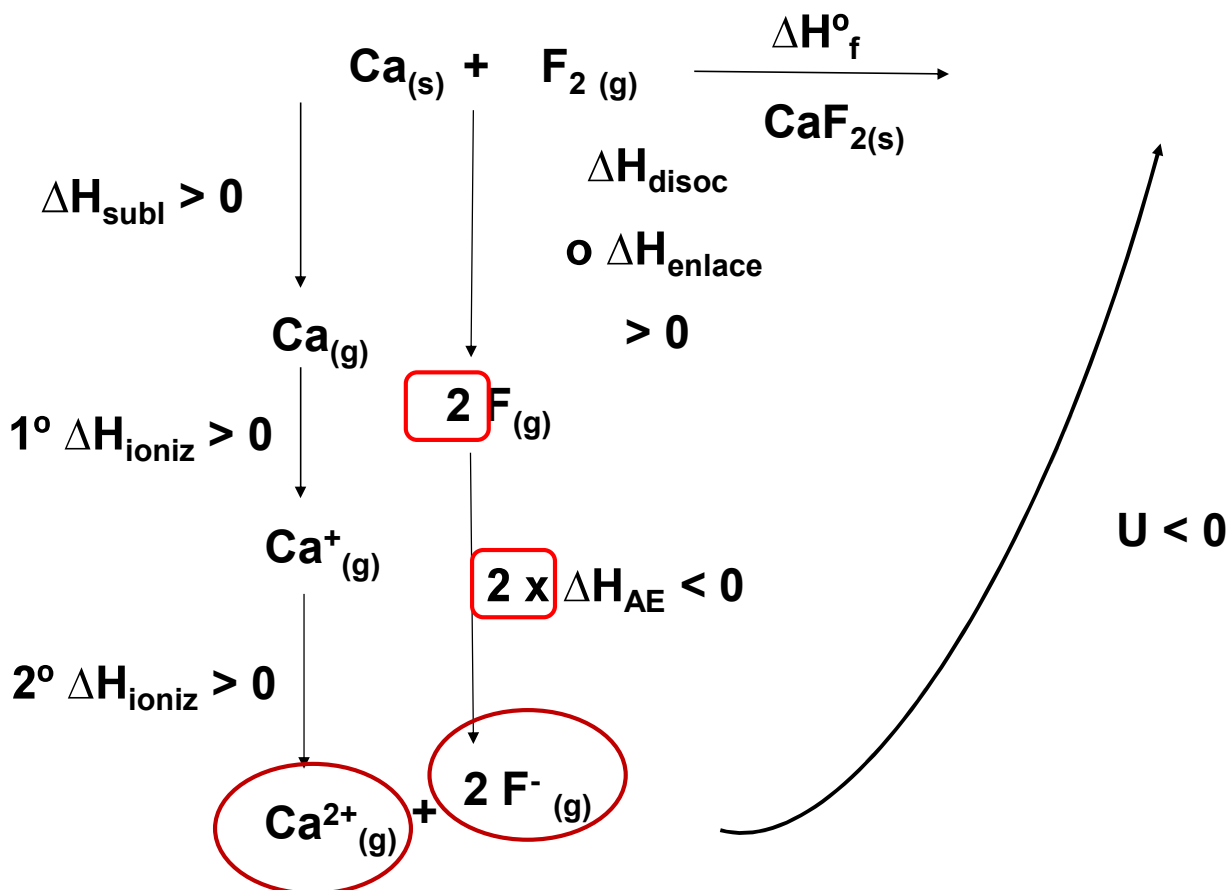
44



**Ley Hess**

$$\Delta H_f^\circ = \Delta H_{\text{subl}} + \frac{1}{2} \Delta H_{\text{disoc}} + \Delta H_{\text{ioniz}} + \Delta H_{\text{AE}} + U$$

45



$$\Delta H_f^\circ = \Delta H_{\text{subl}} + 1^\circ \Delta H_{\text{ioniz}} + 2^\circ \Delta H_{\text{ioniz}} + \Delta H_{\text{disoc}} + 2 \times \Delta H_{\text{AE}} + U$$

46

### 9. POTENCIALES DE IONIZACIÓN (kJ/mol)

N° atómico	Elemento	I <sub>1</sub>	I <sub>2</sub>	I <sub>3</sub>	I <sub>4</sub>	I <sub>5</sub>	I <sub>6</sub>
1	H	1312,0					
2	He	2372,3	5250,4				
3	Li	520,3	7298,1				
4	Be	899,5	1757,1	14848,7			
5	B	800,6	2427,0	3659,8			
6	C	1086,4	2352,6	4620,5	6222,6		
7	N	1402,3	2856,1	4578,1	7475,1	9444,9	
8	O	1314,0	3388,2				
9	F	1681,0	3374,2				
10	Ne	2080,7	3952,3				
11	Na	495,8	4562,4				
12	Mg	737,7	1450,7	7732,8			
13	Al	577,6	1816,7	2744,8	11578,0		
14	Si	786,5	1577,1	3231,6	4355,5		
15	P	1011,8	1903,2	2912,0	4957,0	6273,9	
16	S	999,6	2251,0	3361,0	4564,0	7013,0	8495,6
17	Cl	1251,1					
19	K	418,9	3051,4				
20	Ca	589,8	1145,4	4912,0			
21	Sc	631,0	1235,0				
22	Ti	658,0	1310,0	2652,0	4176,3		
23	V	650,0	1414,0	2828,0			
24	Cr	652,8	1496,0	2987,0			
25	Mn	717,4	1509,1	3248,4			
26	Fe	759,4	1561,0	2957,4			
27	Co	758,0	1646,0	3232,0			
28	Ni	736,7	1753,0	3393,0			
29	Cu	745,5	1957,9	3554,0			
30	Zn	906,4	1733,3	3832,7			
31	Ga	578,8	1979,0	2963,0			
32	Ge	762,2	1537,2	3302,0			
33	As	944,0	1797,8	2735,5			
34	Se	940,9	2045,0	2973,7			

Pag 26 Tabla de constantes

47

### 10. AFINIDADES ELECTRÓNICAS (kJ/mol)

Los cambios entálpicos de esta tabla corresponden al proceso de adicionar un electrón al átomo o ion correspondiente en estado gaseoso. Usualmente, se tabulan los potenciales de ionización de los iones -1 (-2 y -3, cuando corresponde), que corresponden al proceso inverso, quedando los signos invertidos.

N° atómico	Elemento	ΔH <sub>E1</sub>	ΔH <sub>E2</sub>	ΔH <sub>E3</sub>
1	H	-72,8		
3	Li	-59,6		
5	B	-26,7		
6	C	-121,9		
7	N	-7,0	673,0	1070,0
8	O	-141,0	744,0	
9	F	-328,0		
11	Na	-52,9		
13	Al	-42,5		
14	Si	-133,6		
15	P	-72,0	468,0	886,0
16	S	-200,4	456,0	
17	Cl	-349,0		
19	K	-48,4		
21	Sc	-18,1		
22	Ti	-7,6		
23	V	-50,6		
24	Cr	-64,3		
26	Fe	-15,7		
27	Co	-63,7		
28	Ni	-111,5		
29	Cu	-118,4		

Pag 27  
Tabla de constantes

48

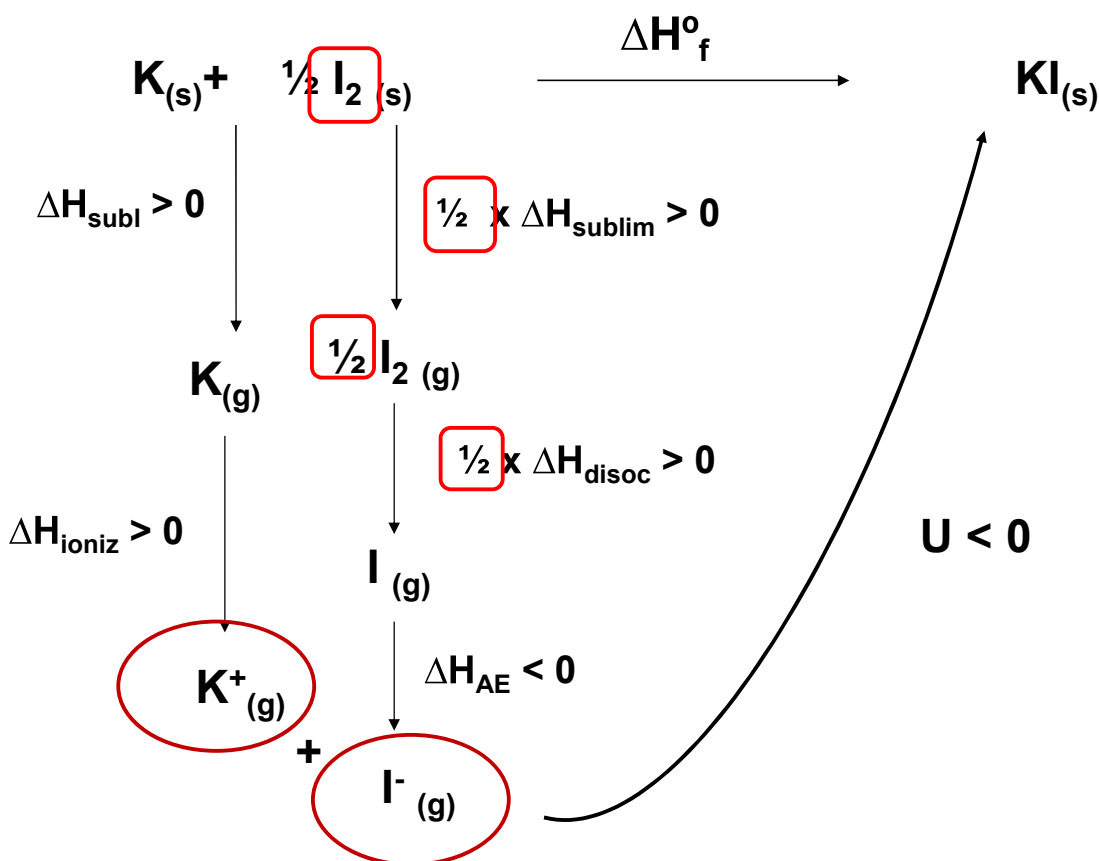
### 11. CALORES DE FORMACIÓN (kJ/mol)

	F <sup>-</sup>	Cl <sup>-</sup>	Br <sup>-</sup>	I <sup>-</sup>	O <sup>2-</sup>	S <sup>2-</sup>	OH <sup>-</sup>	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	O <sub>2</sub> <sup>2-</sup>	O <sub>2</sub> <sup>-</sup>
Li <sup>+</sup>	-615,9	-408,8	-351,0	-270,3	-597,9	-500,0	-484,9	-1215,9	-634,3	---
Na <sup>+</sup>	-573,6	-410,9	-361,1	-287,9	-414,2	-364,8	-425,5	-1130,5	-510,9	-260,2
K <sup>+</sup>	-567,4	-436,8	-393,7	-328,0	-361,5	-380,7	-424,7	-1151,0	-494,1	-284,9
Rb <sup>+</sup>	-557,7	-435,1	-394,6	-333,9	-338,9	-360,7	-418,2	-1129,3	-472,0	-278,7
Cs <sup>+</sup>	-553,5	-443,1	-395,0	-346,4	-345,8	-359,8	-417,2	---	-402,8	-286,2
Ag <sup>+</sup>	-204,6	-127,2	-100,4	-61,9	-31,0	-32,6	---	---	-24,3	---
Cu <sup>+</sup>	---	-137,2	-104,6	-67,8	-168,6	-79,5	---	---	---	---
Be <sup>2+</sup>	-1026,8	-490,4	-353,5	-192,5	-609,6	-234,3	-903,7	-1025,1	---	---
Mg <sup>2+</sup>	-1123,4	-641,4	-524,3	-364,0	-601,7	-346,0	-887,0	-1095,8	---	---
Ca <sup>2+</sup>	-1219,6	-795,8	-682,8	-533,5	-635,1	-482,4	-986,2	-1207,1	-652,7	---
Sr <sup>2+</sup>	-1216,3	-828,9	-717,6	---	-592,0	-472,4	-959,0	-1220,1	-633,5	---
Ba <sup>2+</sup>	-1207,1	-858,6	-757,3	-602,1	-563,2	-460,2	-944,7	-1216,3	-634,3	---
Cu <sup>2+</sup>	-542,7	-220,1	-141,8	---	-157,3	-53,1	-449,8	-595,4	---	---
Zn <sup>2+</sup>	-764,4	-415,1	-328,9	-207,9	-348,1	-192,5	-641,8	-813,0	---	---
Cd <sup>2+</sup>	-700,4	-391,5	-316,2	-203,3	-258,2	-161,9	-560,7	-750,6	---	---

Handbook of Chemistry and Physics, 68 th ed., CRC Press, 1987-1988

Pag 28 Tabla de constantes

49



$$\Delta H^{\circ}_f = \Delta H_{\text{subl K}} + \frac{1}{2} \Delta H_{\text{subl I}_2} + \frac{1}{2} \Delta H_{\text{disoc I}_2} + P I_{\text{K}^+} + \Delta H_{\text{AE}} +$$

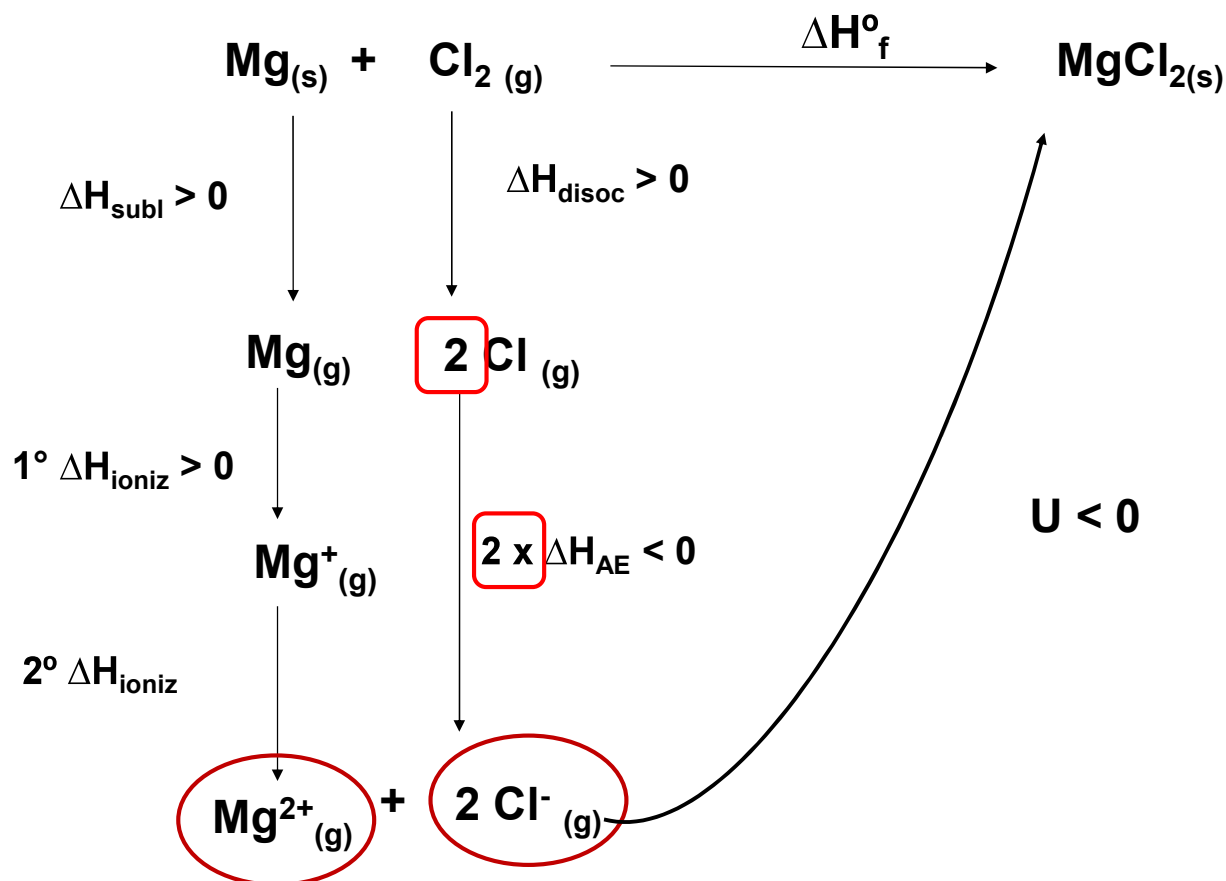
50

Sustancia	$\Delta H^{\circ}_f$ kJ/mol	$\Delta G^{\circ}_f$ kJ/mol	$S^{\circ}$ J/mol K	$C_p$ J/mol K
<b>Iodo</b>				
I <sub>2</sub> (s)	0.0	0.0	116.1	54.4
I <sub>2</sub> (g)	62.4	19.3	260.7	36.9
I (g) (atómico)	106.8	70.2	180.8	20.8
IO (g)	126.0	102.5	239.6	32.9

### 17. ENERGÍAS DE ENLACE PROMEDIO (kJ/mol)

Enlace	$\Delta H_{enl}$	Enlace	$\Delta H_{enl}^{298}$	Enlace	$\Delta H_{enl}$	Enlace	$\Delta H_{enl}^{298}$
<b>Enlaces simples</b>							
C-H	413	N-H	391	O-H	463	F-F	155
C-C	348	N-N	163	O-O	146	C-H	253
C-N	293	N-O	201	O-F	190	Cl-F	242
C-O	358	N-F	272	O-Cl	203	Br-F	237
C-F	485	N-Cl	200	O-I	234	Br-Cl	218
C-Cl	328	N-Br	243	S-H	339	Br-Br	193
C-Br	276	H-H	436	S-F	327	I-Cl	208
C-I	240	H-F	567	S-Cl	253	I-Br	175
C-S	259	H-Cl	431	S-Br	218	H	151
Si-H	323	H-Br	366	S-S	266		
Si-Si	226	H-I	299				
Si-C	301						
Si-O	368						
Si-Cl	464						

51



$$\Delta H^{\circ}_f = \Delta H_{\text{subl Mg}} + \Delta H_{\text{disoc Cl}_2} + 1^{\circ} \text{PI} + 2^{\circ} \text{PI} + 2 \Delta \text{HAE} + U$$

52

## Calor de atomización ( $\Delta H^\circ_{at}$ )

Es la energía requerida para producir 1 mol de átomos gaseosos de un elemento a partir del estado de agregación que presenta a temperatura ambiente y presión de 1 atmósfera. A 25 C y P = 1,0 atm

Elemento (E)	Calor de atomización $\Delta H^\circ_{at}$ (kJ/mol)
Na (s)	107,3
Cl (g)	122
Sc(s)	378
Hg (l)	64
Ga(l)	277
O (g)	249

53

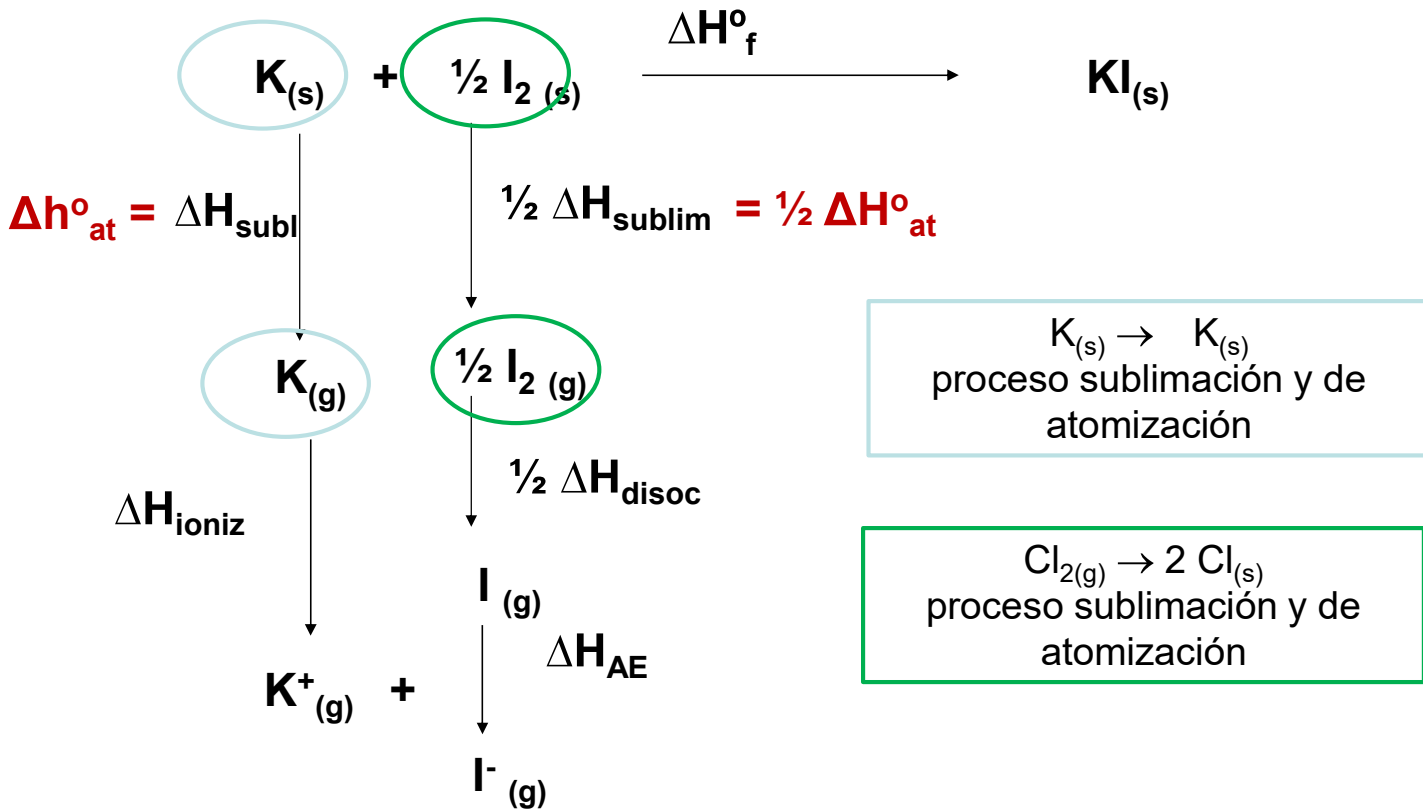
### 12. CALORES DE ATOMIZACIÓN DE LOS ELEMENTOS

Los calores de atomización tabulados corresponden a la formación de un mol de átomos del elemento independientemente de su estado de agregación inicial. En el caso de los elementos diatómicos gaseosos ( $F_2$ ,  $Cl_2$ ,  $O_2$ ), el calor de atomización corresponde a 1/2 del calor de disociación del enlace.

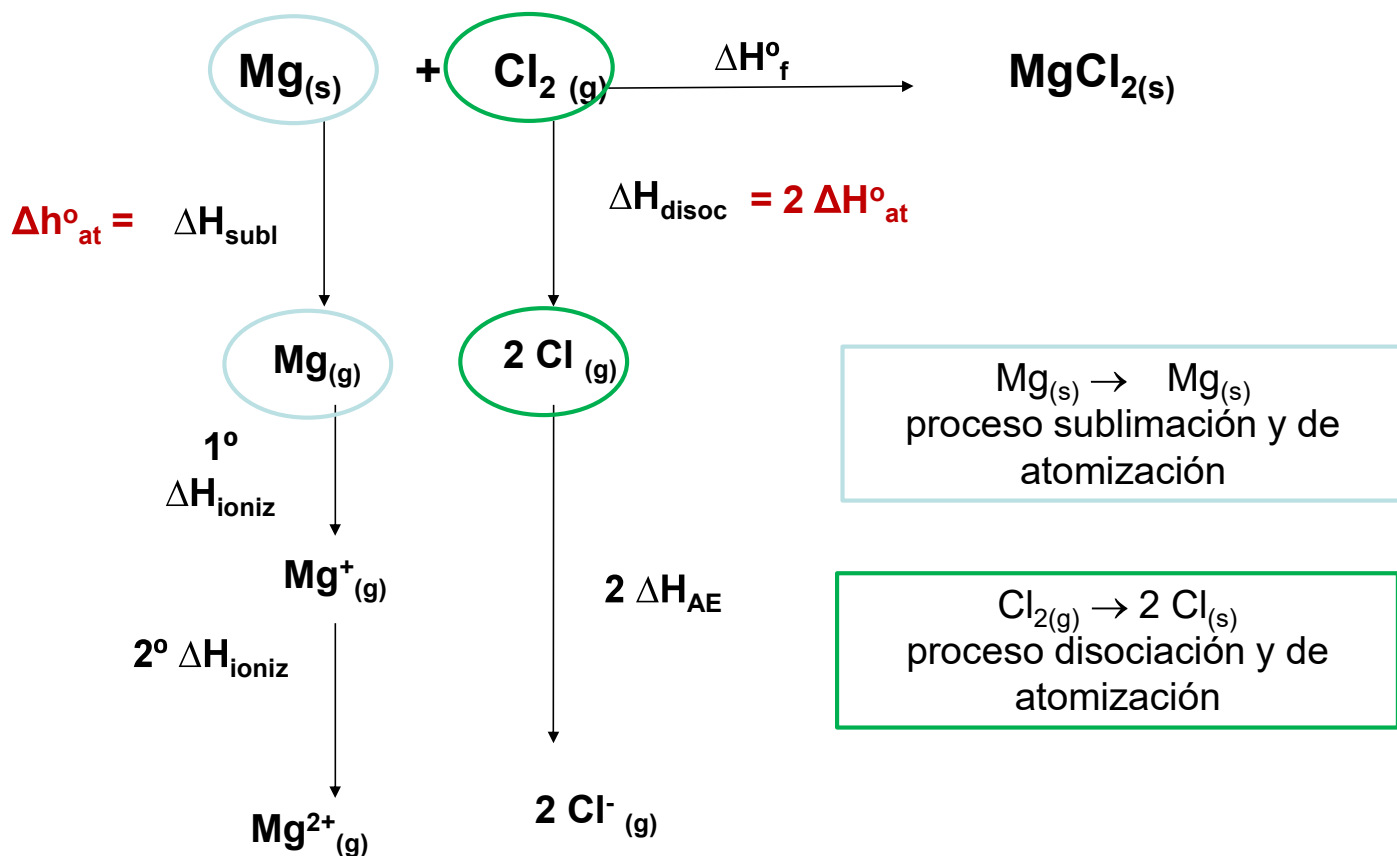
Elemento	$\Delta H_A$ (kJ/mol)	Elemento	$\Delta H_A$ (kJ/mol)
Ag	285	Li	159
As	303	Mg	146
B	563	Mn	283
Ba	182	N	473
Be	324	Na	107
Bi	207	Ni	431
Br	112	O	249
C	717	P	315
Ca	178	Pb	195
Cd	112	Rb	81
Cl	122	S	279
Co	426	Sb	262
Cr	397	Se	227
Cs	76	Si	456
Cu	338	Sn	302
F	79	Sr	165

Pag 29 Tabla de constantes

54



55



56

La energía de atomización se multiplica por la cantidad de átomos que se

forman.

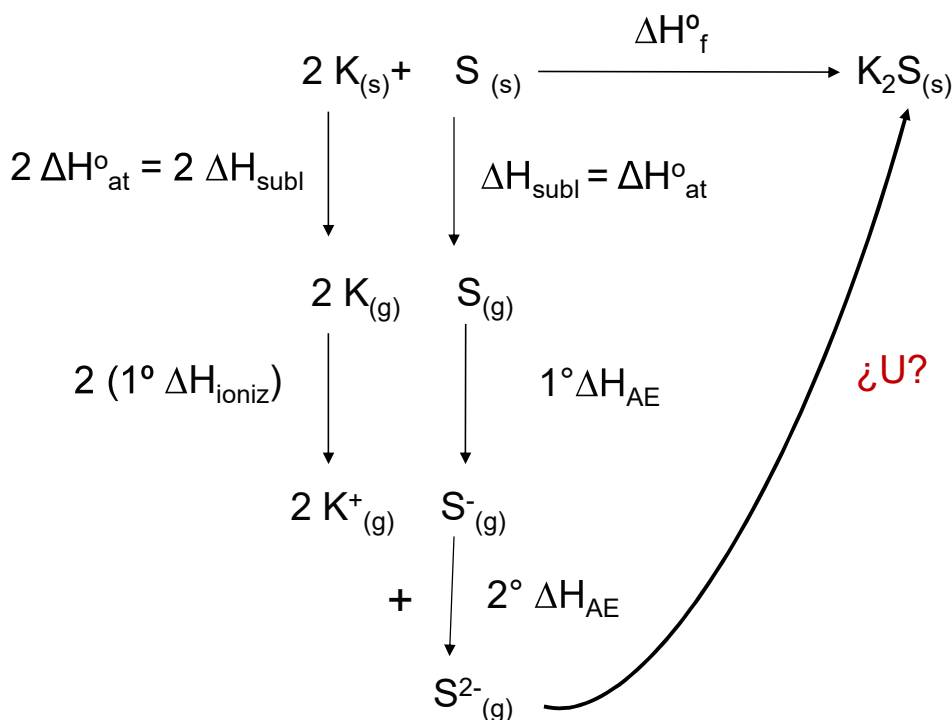
La energía de disociación se multiplica por la cantidad de moléculas que se disocian

La energía de sublimación se multiplica por la cantidad de átomos que se forman (que es la misma que se

subliman).

57

Ejercicio 2: utilizando un ciclo de Born-Haber, calcular el valor de la energía de red para la formación de un mol de sulfuro de potasio a partir de sus elementos.



58

$$\Delta H_f^\circ = 2 \Delta H_{\text{subl K}} + \Delta H_{\text{subl S}} + 2 \times (1^\circ \text{PI}_K) + 1^\circ \Delta H_{\text{AE}} + 2^\circ \Delta H_{\text{AE}} + U$$

$$U = \Delta H_f^\circ - (2 \times \Delta H_{\text{subl K}} + \Delta H_{\text{subl S}} + 2 \times 1^\circ \text{PI}_K) + 1^\circ \Delta H_{\text{AE}} + 2^\circ \Delta H_{\text{AE}}$$

$$U = (-380,7 \text{ kJ/mol}) - [(2 \times 89,0 \text{ kJ/mol}) + 277,2 \text{ kJ/mol} + (2 \times -48,4 \text{ kJ/mol}) + -200,4 \text{ kJ/mol} + 456,0 \text{ kJ/mol}] =$$

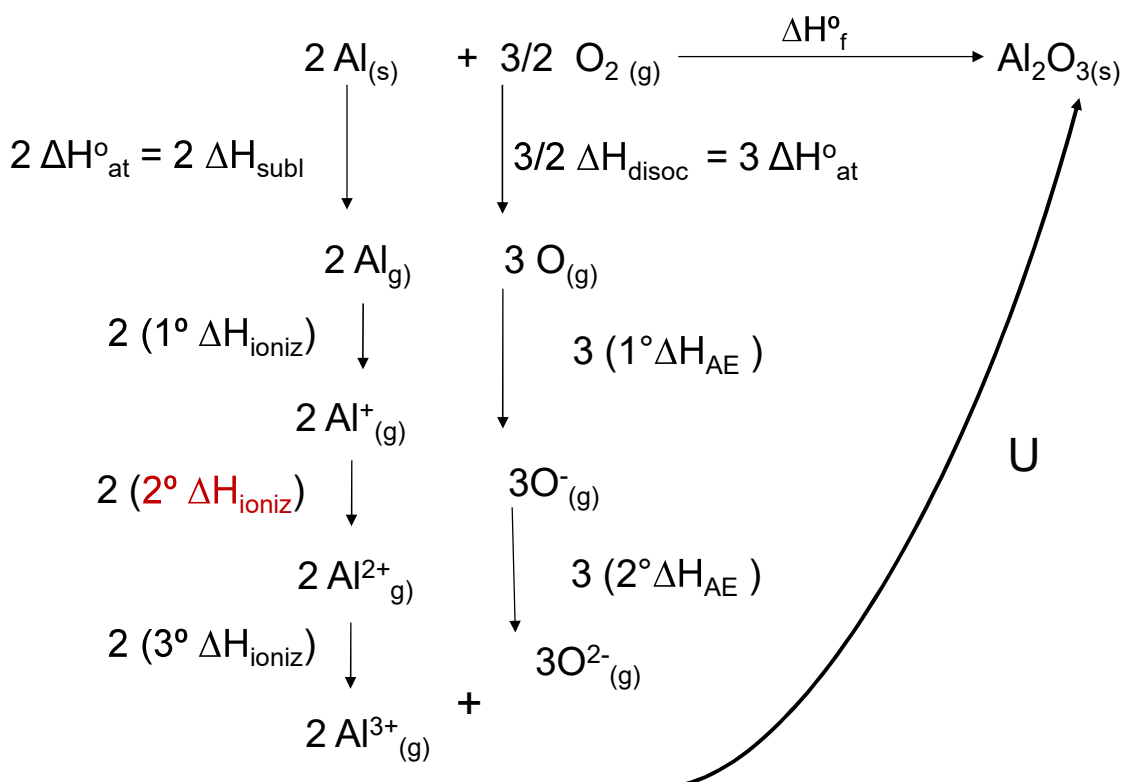
$$\Delta H_f^\circ = 2 \times \Delta H_{\text{at K}} + \Delta H_{\text{at S}} + 2 \times (1^\circ \text{PI}_K) + 1^\circ \Delta H_{\text{AE}} + 2^\circ \Delta H_{\text{AE}} + U$$

$$U = \Delta H_f^\circ - (2 \times \Delta H_{\text{at K}} + \Delta H_{\text{at S}} + 2 \times 1^\circ \text{PI}_K) + 1^\circ \Delta H_{\text{AE}} + 2^\circ \Delta H_{\text{AE}}$$

$$U = (-380,7 \text{ kJ/mol}) - [(2 \times 89 \text{ kJ/mol}) + 279 \text{ kJ/mol} + (2 \times -48,4 \text{ kJ/mol}) + -200,4 \text{ kJ/mol} + 456,0 \text{ kJ/mol}] =$$

59

Ejercicio 3: utilizando un ciclo de Born-Haber, calcular el valor de la segunda energía de ionización del Al, durante la formación de un mol de óxido de aluminio, a partir de sus elementos.



60

$$\Delta H_f^\circ = 2 \times \Delta H_{\text{subl Al}} + 3/2 \Delta H_{\text{disoc O}} + 2 \times (1^\circ \text{PI}_{\text{Al}} + 2^\circ \text{PI}_{\text{Al}} + 3^\circ \text{PI}_{\text{Al}}) + 3 \times (1^\circ \Delta H_{\text{AE}} + 2^\circ \Delta H_{\text{AE}}) + U$$

$$2^\circ \text{PI}_{\text{Al}} = \Delta H_f^\circ - [2 \times \Delta H_{\text{subl Al}} + 3/2 \Delta H_{\text{disoc O}} + 2 \times (1^\circ \text{PI}_{\text{Al}} + 3^\circ \text{PI}_{\text{Al}}) + 3 \times (1^\circ \Delta H_{\text{AE}} + 2^\circ \Delta H_{\text{AE}}) + U]$$

$$2^\circ \text{PI}_{\text{Al}} = (-1675,7 \text{ kJ/mol}) - [2 \times 330,0 \text{ kJ/mol} + 3/2 \times 498 \text{ kJ/mol} + 2 \times (578 \text{ kJ/mol} + 2745 \text{ kJ/mol}) + 3 \times (-141 \text{ kJ/mol} + 744 \text{ kJ/mol}) + (-15916 \text{ kJ/mol})]$$

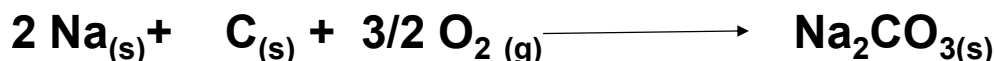
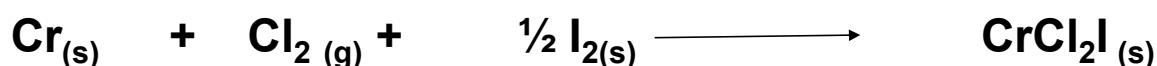
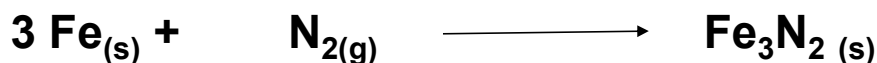
$$\Delta H_f^\circ = 2 \times \Delta H_{\text{at Al}} + 3 \Delta H_{\text{at O}} + 2 \times (1^\circ \text{PI}_{\text{Al}} + 2^\circ \text{PI}_{\text{Al}} + 3^\circ \text{PI}_{\text{Al}}) + 3 \times (1^\circ \Delta H_{\text{AE}} + 2^\circ \Delta H_{\text{AE}}) + U$$

$$2^\circ \text{PI}_{\text{Al}} = \Delta H_f^\circ - [2 \times \Delta H_{\text{at Al}} + 3 \Delta H_{\text{at O}} + 2 \times (1^\circ \text{PI}_{\text{Al}} + 3^\circ \text{PI}_{\text{Al}}) + 3 \times (1^\circ \Delta H_{\text{AE}} + 2^\circ \Delta H_{\text{AE}}) + U]$$

$$2^\circ \text{PI}_{\text{Al}} = (-1675,7 \text{ kJ/mol}) - [2 \times 330,0 \text{ kJ/mol} + 3/2 \times 249,2 \text{ kJ/mol} + 2 \times (578 \text{ kJ/mol} + 2745 \text{ kJ/mol}) + 3 \times (-141 \text{ kJ/mol} + 744 \text{ kJ/mol}) + (-15916 \text{ kJ/mol})]$$

61

Tarea: desarrollar los ciclos de Born-Haber para las siguientes reacciones, expresando la ecuación de obtención de la entalpia de formación estándar.



¿Por qué existe el NaCl y no el NaCl<sub>2</sub>? ¿Por qué existe el CaCl<sub>2</sub> y no el CaCl?

Estrategia: calcular el  $\Delta H^\circ_f$  de cada compuesto propuesto

Datos:

$$\Delta H^\circ_{\text{red}} \text{CaCl}_2 = -2630 \text{ kJ/mol (Tabla)}$$

$$\Delta H^\circ_{\text{red}} \text{CaCl} = -877,5 \text{ kJ/mol (calculado)}$$

$$\Delta H^\circ_{\text{red}} \text{NaCl}_2 = -2234,5 \text{ kJ/mol (calculado)}$$

$$\Delta H^\circ_{\text{red}} \text{NaCl} = -769 \text{ kJ/mol (Tabla)}$$

$$\text{EA Cl} = -349 \text{ kJ/mol (tabla)}$$

a) Born- Landé,  
b) Kaputinskii

63

**13. ENERGÍA DE RED  $U_0$  (kJ/mol)**

En la tabla aparecen los valores obtenidos a partir de un ciclo termodinámico de Born-Haber.

\* Valor calculado a partir de la ecuación de Born-Landé

	F <sup>-</sup>	Cl <sup>-</sup>	Br <sup>-</sup>	I <sup>-</sup>	O <sup>2-</sup>	S <sup>2-</sup>	OH <sup>-</sup>	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	O <sub>2</sub> <sup>2-</sup>	O <sub>2</sub> <sup>-</sup>
Li <sup>+</sup>	-1036	-853	-807	-757	-2799*	-2472	-1039	-2269	-2560	-872
Na <sup>+</sup>	-923	-786	-747	-704	-2481*	-2203	-900	-2030	-2305	-796
K <sup>+</sup>	-821	-715	-682	-649	-2238*	-2052	-804	-1858	-2078	-725
Rb <sup>+</sup>	-785	-689	-660	-630	-2163*	-1949	-773	-1795	-2006	-995
Cs <sup>+</sup>	-740	-659	-631	-604	---	-1850	-724	-1702	-1861	-668
Ag <sup>+</sup>	-967	-915	-904	-889	-3002*	-2677	-918*	---	---	---
Cu <sup>+</sup>	---	-996	-979	-966	-3273*	-2865	-1006*	---	---	---
Mg <sup>2+</sup>	-2957	-2526	-2440	-2327	-3791	---	-3006	-3122	-3526	---
Ca <sup>2+</sup>	-2630	-2258	-2176	-2074	-3401	---	-2645	-2810	-3133	---

elemento	Config. Elect.	I <sub>1</sub>	I <sub>2</sub>	I <sub>3</sub>
Na	[Ne] 3s <sup>1</sup>	496	4560	6912
Ca	[Ar] 4s <sup>2</sup>	590	1145	4912

$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$  ¿Cómo es  $\Delta S$  para la formación del sólido?

En general:

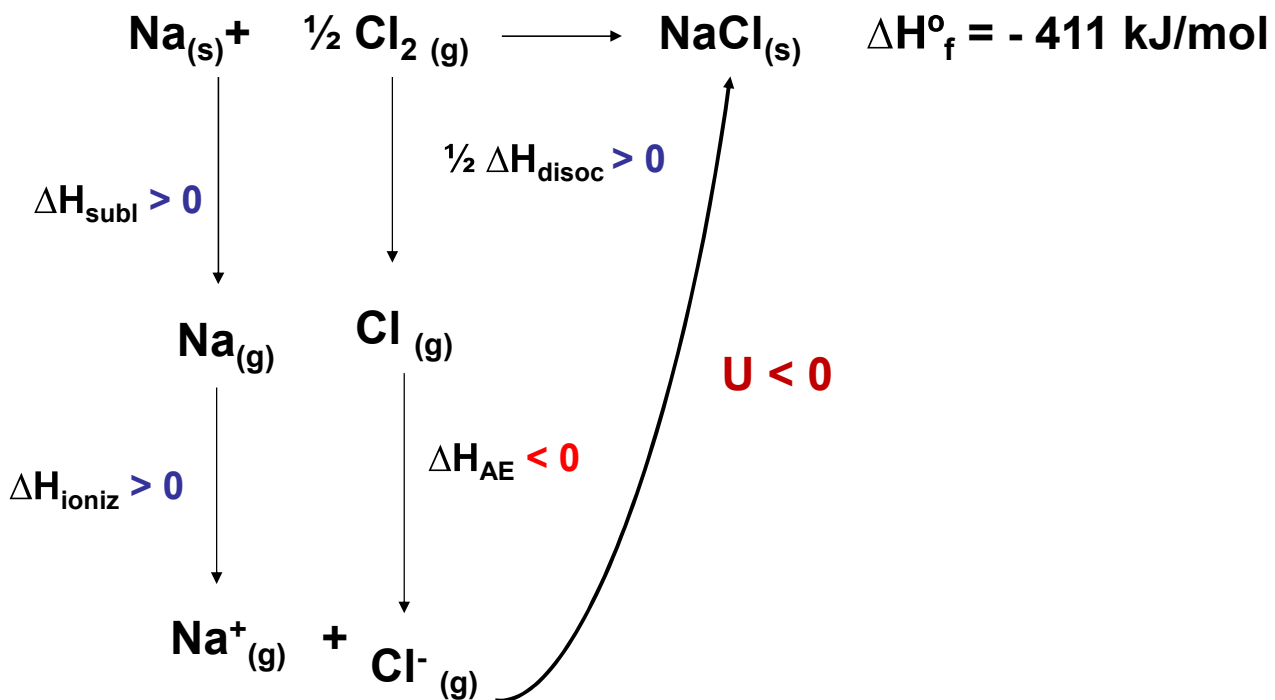
$$\Delta H_f^\circ \text{ comp. iónico(s)} = \Delta H_f^\circ \text{ átomos metal(g)} + \Delta H_f^\circ \text{ átomos no metal(g)} + \Sigma(I_i \text{ metal}) + \Sigma(EA_i \text{ no metal}) + \Delta H_{\text{red}} \text{ comp. iónico}$$

Respuestas numéricas:

$$\Delta H_f^\circ \text{ CaCl}_2 = - 785 \text{ kJ/mol}; \quad \Delta H_f^\circ \text{ NaCl}_2 = + 2478 \text{ kJ/mol};$$

$$\Delta H_f^\circ \text{ CaCl} = - 194 \text{ kJ/mol}; \quad \Delta H_f^\circ \text{ NaCl} = - 411 \text{ kJ/mol}$$

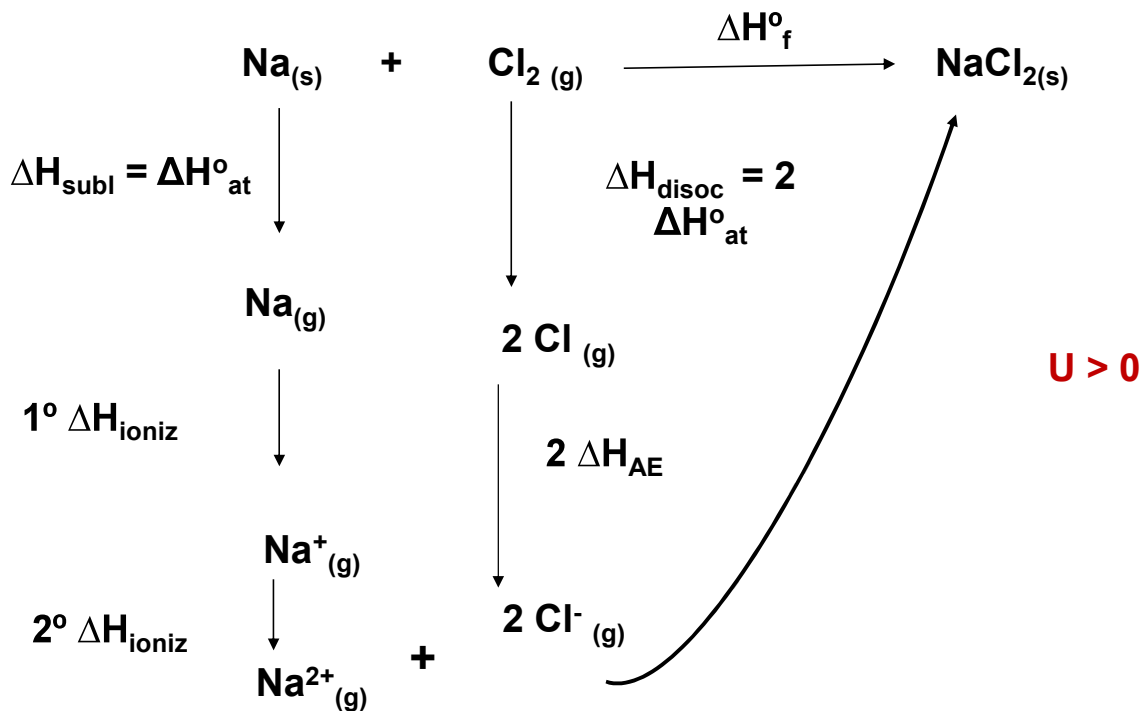
65



$$\Delta H_f^\circ = \Delta H_{\text{subl}} + \frac{1}{2} \Delta H_{\text{disoc}} + \Delta H_{\text{ioniz}} + \Delta H_{\text{AE}} + U$$

$$\Delta H_f^\circ = [107 + 122 + 496 + (-349) + (-769)] \text{ kJ/mol} = - 393 \text{ kJ/mol}$$

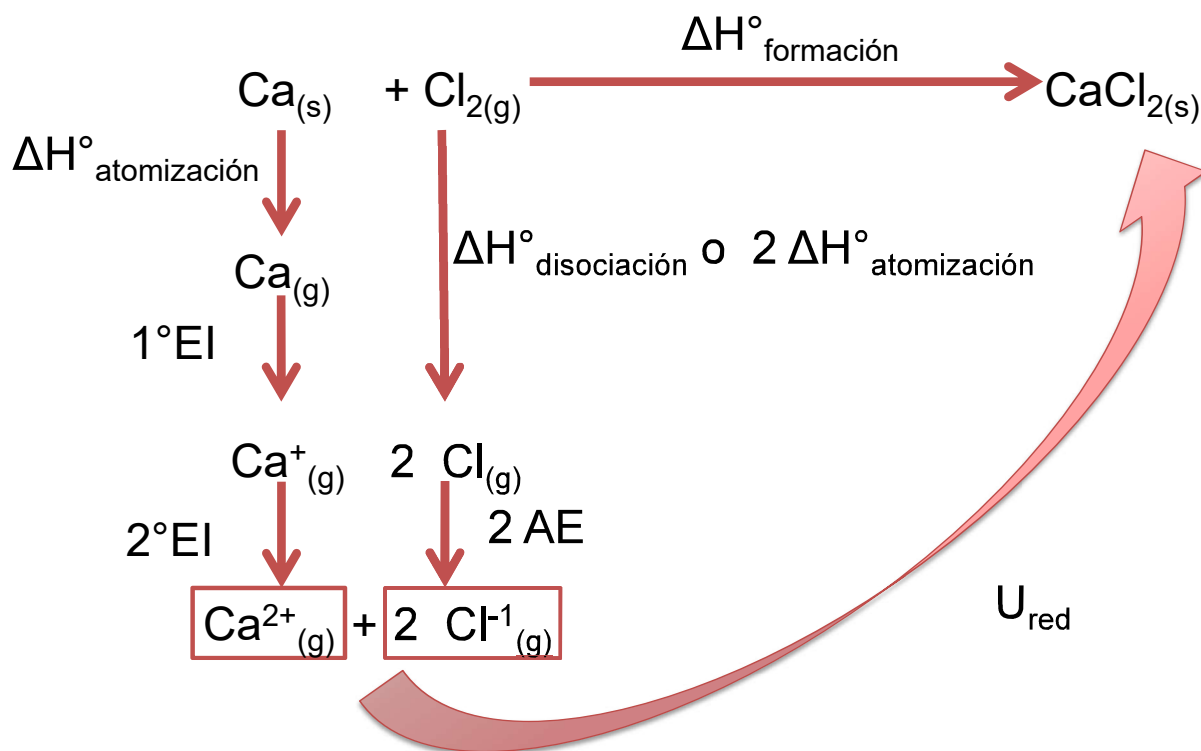
66



$$\Delta H_f^\circ \text{NaCl}_2 = \Delta H_{\text{subl Na}} + \Delta H_{\text{disocCl}_2} + 1^\circ \text{PI}_{\text{Na}} + 2^\circ \text{PI}_{\text{Na}} + 2 (1^\circ \Delta H_{\text{AE Cl}}) + U$$

$$\Delta H_f^\circ \text{NaCl}_2 = [107 + 244 + 496 + 4562 + 2(-349) + (-2234,5)] = 2476,5 \text{ kJ/mol}$$

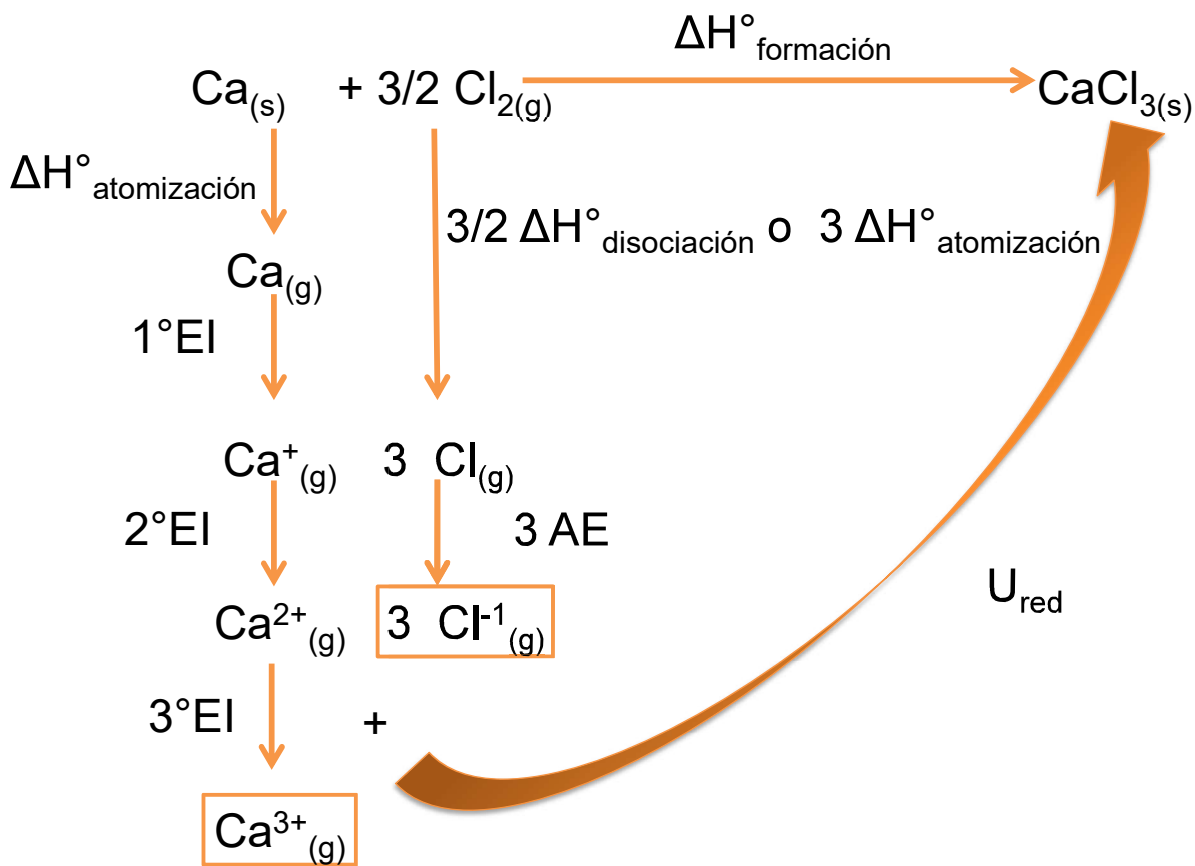
67



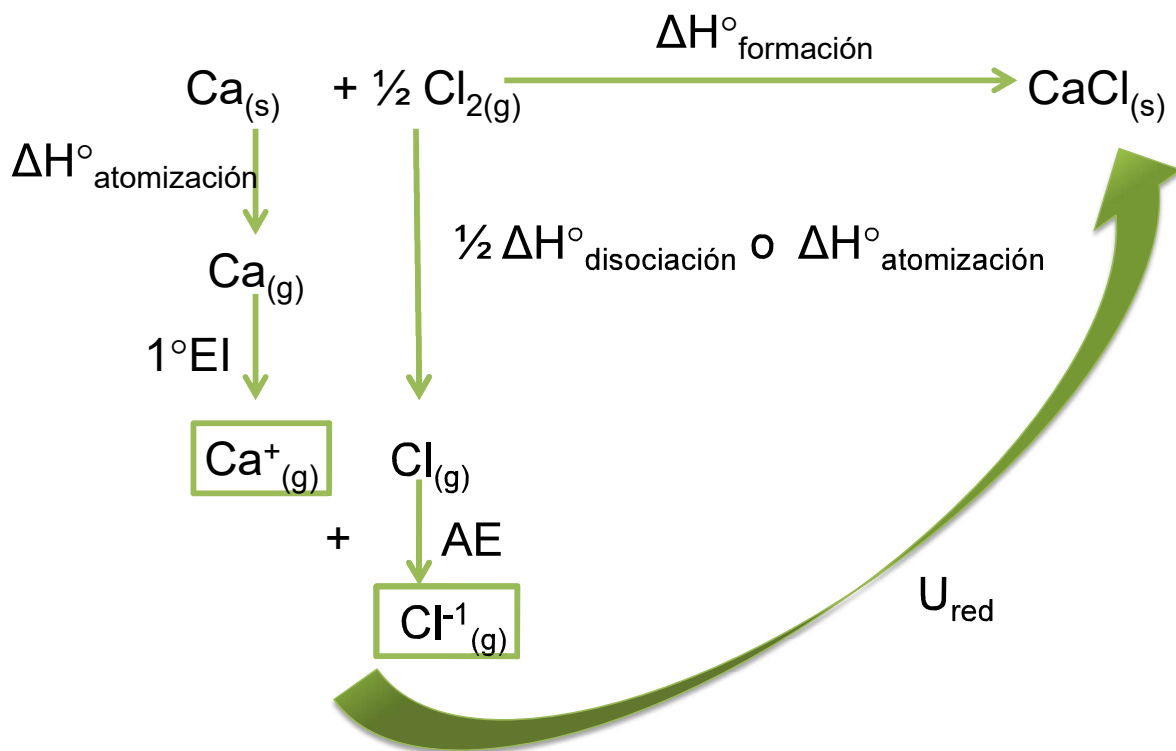
$$\Delta H_f^\circ \text{CaCl}_2: \Delta H_{\text{subl}} + \Delta H_{\text{disocCl}_2} + 1^\circ \text{PI}_{\text{Ca}} + 2^\circ \text{PI}_{\text{Ca}} + 2(1^\circ \Delta H_{\text{AE Cl}}) + U$$

$$\Delta H_f^\circ \text{CaCl}_2: 178 + 244 + 590 + 1145 + 2(-349) + (-2630) = -1171 \text{ kJ/mol}$$

68



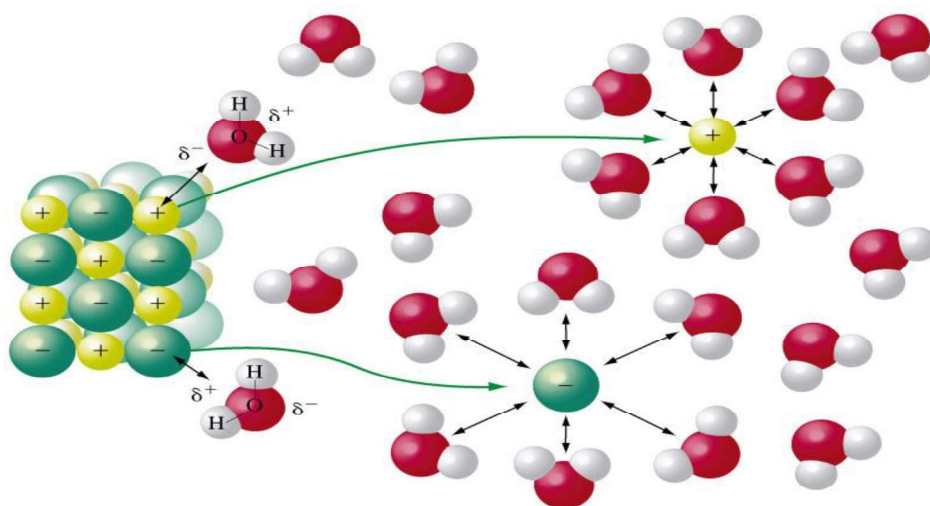
69



70

# Solubilidad de compuestos iónicos

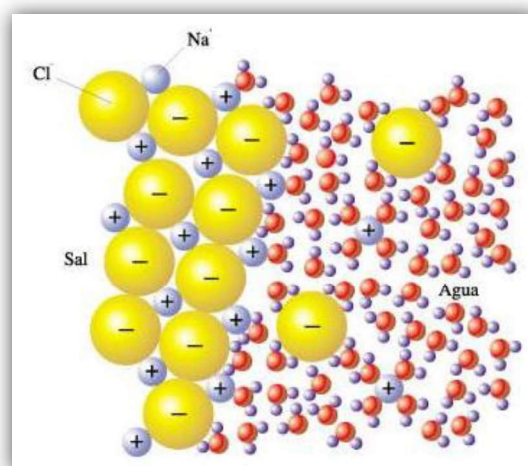
## Esquema de la disolución de un compuesto iónico en agua



71

## Disolución de un sólido

**Entalpía de disolución ( $\Delta H_{\text{disol}}$ ):** cambio de entalpía por mol de unidades fórmula cuando una sustancia se disuelve.

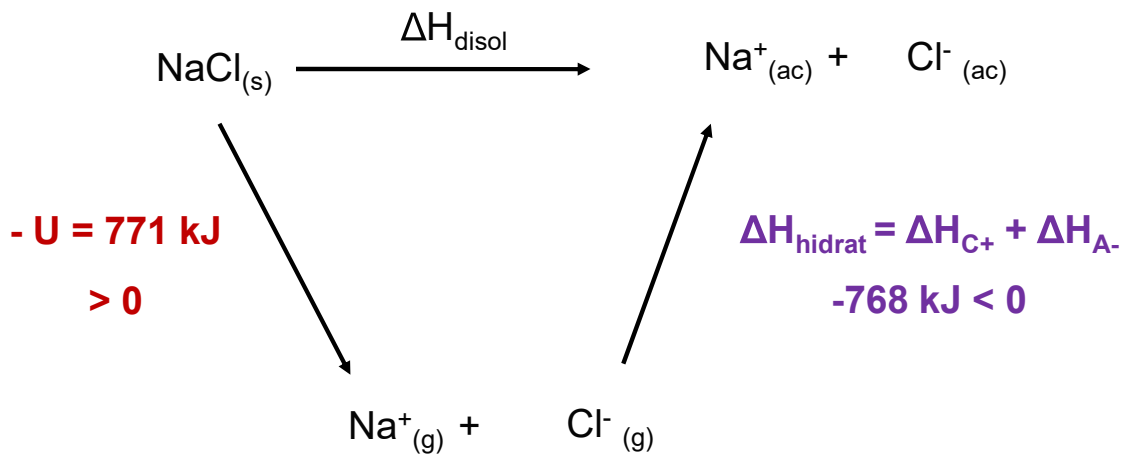


$\Delta H_{\text{disol}}$  (kJ/mol)

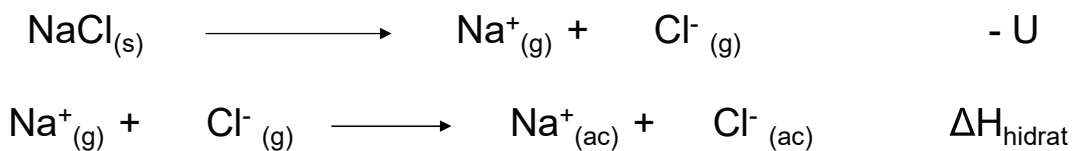
Algunos sólidos se disuelven exotérmicamente y otros en forma endotérmica.

LiF	+ 4,9
LiCl	- 37
LiBr	- 48,8
LiI	- 63,3

72

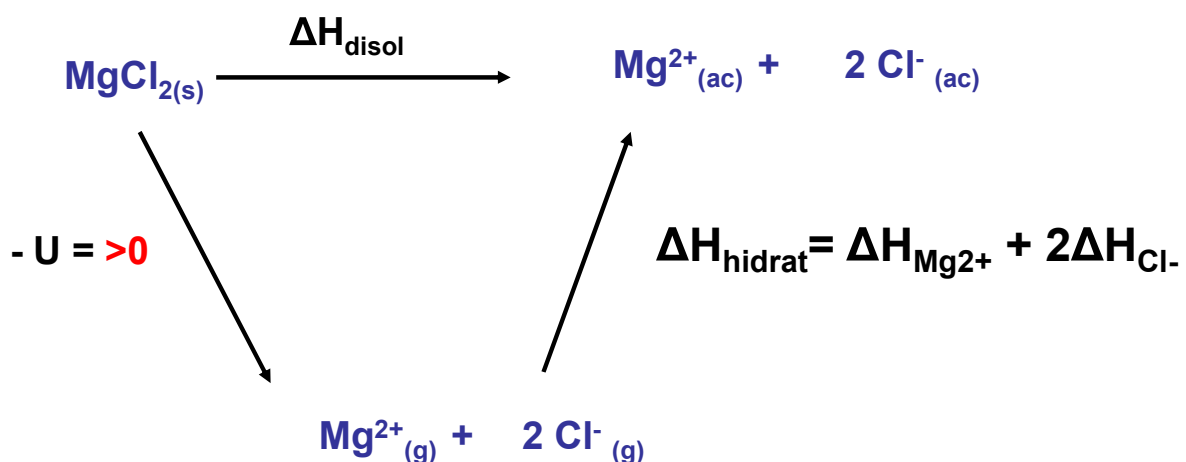


$$\Delta H_{\text{hidrat}} = \Delta h_{\text{hidrat}}(\text{catión}) + \Delta H_{\text{hidrat}}(\text{anión})$$



$$\Delta H_{\text{disol}} = \Delta H_{\text{hidrat}} + (-U) = -768 + 771 = +3 \text{ kJ/mol} \quad 73$$

Ejercicio 4: utilizando un ciclo de Born-Haber, calcular el valor de entalpia de hidratación de un mol de cloruro de magnesio.



$$\Delta H_{\text{disol}} = \Delta H_{\text{hidrat}} + (-U) = \Delta H_{\text{C}^+} + \Delta H_{\text{A}^-} - (-U) = -1921 \text{ kJ/mol} - 363 \text{ kJ/mol} + (-(-2526 \text{ kJ/mol}))$$

$$\Delta H_{\text{disol}} = 242 \text{ kJ/mol}$$

## 14. ENTALPÍAS DE DISOLUCIÓN DE ELECTROLITOS

Handbook of Chemistry and Physics 96th Ed., 2015

Soluto	$\Delta H^\circ$ s kJ/mol	Soluto	$\Delta H^\circ$ s kJ/mol
HF	-61,50	KOH	-57,61
HCl	-74,84	KF	-17,73
HClO <sub>4</sub>	-88,86	KCl	17,22
HBr	-85,14	KClO <sub>4</sub>	51,04
HI	-81,67	KBr	19,87
HIO <sub>3</sub>	8,79	KBrO <sub>3</sub>	41,13
HNO <sub>3</sub>	-33,28	KI	20,33
CH <sub>3</sub> COOH	-1,51	KIO <sub>3</sub>	27,74
		KNO <sub>3</sub>	34,89
NH <sub>3</sub>	-30,50	KCN	11,72
NH <sub>4</sub> Cl	14,78	KMnO <sub>4</sub>	43,56
NH <sub>4</sub> ClO <sub>4</sub>	33,47		
NH <sub>4</sub> Br	16,78	RbOH	-62,34
NH <sub>4</sub> I	13,72	RbF	-26,11
NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	25,69	RbCl	17,28
		RbClO <sub>4</sub>	56,74
AgClO <sub>4</sub>	7,36	RbBr	21,88
AgNO <sub>3</sub>	22,59	RbBrO <sub>3</sub>	48,95
		RbI	25,10
LiOH	-23,56	RbNO <sub>3</sub>	36,48
LiF	4,73		

Pag 31 Tabla de constantes

NaOH	-44,51
NaF	0,91
NaCl	3,88
NaClO <sub>4</sub>	13,88
NaBr	-0,60
NaBrO <sub>3</sub>	26,90
NaI	-7,53
NaIO <sub>3</sub>	20,29
NaNO <sub>3</sub>	20,50
NaCN	1,21

75

## 15. ENTALPÍAS DE HIDRATACIÓN DE IONES GASEOSOS<sup>a</sup>

ión	$\Delta H^\circ_{hid}$ (kJ/mol)	ión	$\Delta H^\circ_{hid}$ (kJ/mol)
Al <sup>3+</sup>	-4665	H <sup>+</sup>	-1130
Ba <sup>2+</sup>	-1305	H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	-522
Be <sup>2+</sup>	-2494	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	-384
Br <sup>-</sup>	-336	Hg <sup>2+</sup>	-1824
Ca <sup>2+</sup>	-1577	I <sup>-</sup>	-295
Cd <sup>2+</sup>	-1807	K <sup>+</sup>	-322
Cl <sup>-</sup>	-363	Li <sup>+</sup>	-520
ClO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	-331	Mg <sup>2+</sup>	-1921
ClO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	-238	Mn <sup>2+</sup>	-1841
CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	-1314	Na <sup>+</sup>	-406
Co <sup>2+</sup>	-1996	Ni <sup>2+</sup>	-2105
Cr <sup>2+</sup>	-1904	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	-316
Cs <sup>+</sup>	-276	OH <sup>-</sup>	-519
Cu <sup>2+</sup>	-2100	Rb <sup>+</sup>	-297
F <sup>-</sup>	-505	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	-1035
Fe <sup>2+</sup>	-1946	Sr <sup>2+</sup>	-1443
Fe <sup>3+</sup>	-4430	Zn <sup>2+</sup>	-2046

<sup>a</sup> Y. Marcus, Ion Properties, New York, Marcel Dekker, 1997

Pag 32 Tabla de constantes

76

Solubilidad es la cualidad de soluble (que se puede disolver). Se trata de una medida de la capacidad de una cierta sustancia para disolverse en otra.

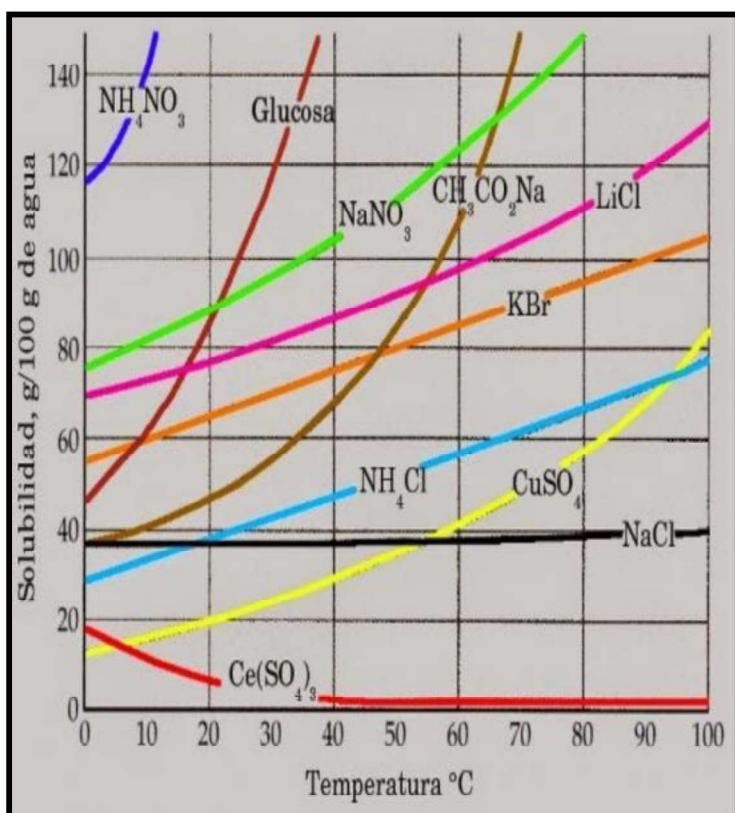
**Solubilidad:** máxima cantidad de una sustancia que se puede disolver en un dado volumen de solvente a una dada temperatura.

**Insoluble:** solubilidad < 0,01 M (arbitrario)

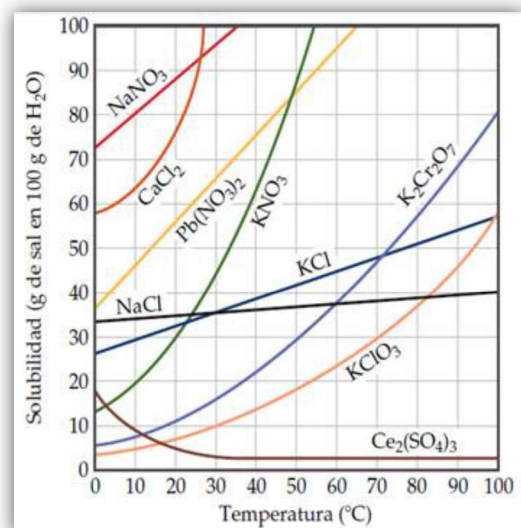
No hay reglas que se basen en propiedades sencillas como carga iónica por ej.

77

## Solubilidad de algunos compuestos en función de la temperatura

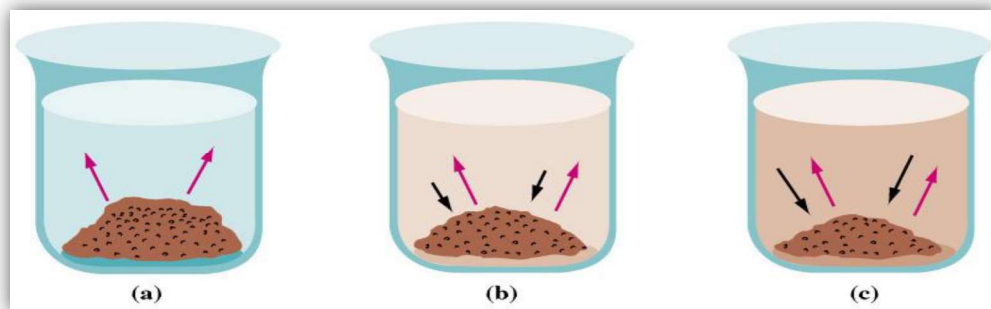


En general, la solubilidad de un sólido en agua aumenta al aumentar la temperatura (proceso endotérmico)



78

## Formación de una solución saturada



- ✓ *No saturada: no tiene la cantidad máxima posible de soluto que puede disolverse para una temperatura y presión dadas.*
- ✓ *Saturada: tienen la mayor cantidad posible de soluto disuelto para una temperatura y presión dadas. En ellas existe un equilibrio entre el soluto y el disolvente.*
- ✓ *Sobresaturada: contiene más soluto disuelto del que puede existir en equilibrio a una temperatura y presión dadas.*

79

## Reglas de solubilidad en agua para compuestos iónicos comunes

Empíricamente:

- 1) Todos los compuestos iónicos comunes del grupo 1 y los del ión amonio son solubles en agua
- 2) Son solubles en agua:
  - ✓ Todos los nitratos y acetatos
  - ✓ Todos los cloruros (salvo AgCl, Hg<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> y PbCl<sub>2</sub>)
  - ✓ Todos los bromuros (salvo AgBr, Hg<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>, PbBr<sub>2</sub> y HgBr<sub>2</sub>)
  - ✓ Todos los yoduros (salvo: idem bromuros)
  - ✓ Todos los sulfatos (salvo los de Ca<sup>2+</sup>, Sr<sup>2+</sup>, Ba<sup>2+</sup> y Pb<sup>2+</sup>)
- 3) Principalmente insolubles en agua:
  - ✓ Sulfuros (salvo grupos 1 y 2 y amonio)
  - ✓ Carbonatos (salvo grupo 1 y amonio)
  - ✓ Fosfatos (salvo grupo 1 y amonio)
  - ✓ Hidróxidos (salvo grupo 1, Ba<sup>2+</sup>, Sr<sup>2+</sup>; Ca<sup>2+</sup>: poco soluble).

80

## Transición entre carácter iónico y covalente

La mayoría de los compuestos químicos tiene uniones intermedias entre iónicas y covalentes.

Los mejores ejemplos de uniones iónicas se encuentran entre los metales de bajo potencial de ionización y no metales de alta afinidad electrónica ( $\Delta$  electronegatividad  $\geq 1,7$ ).

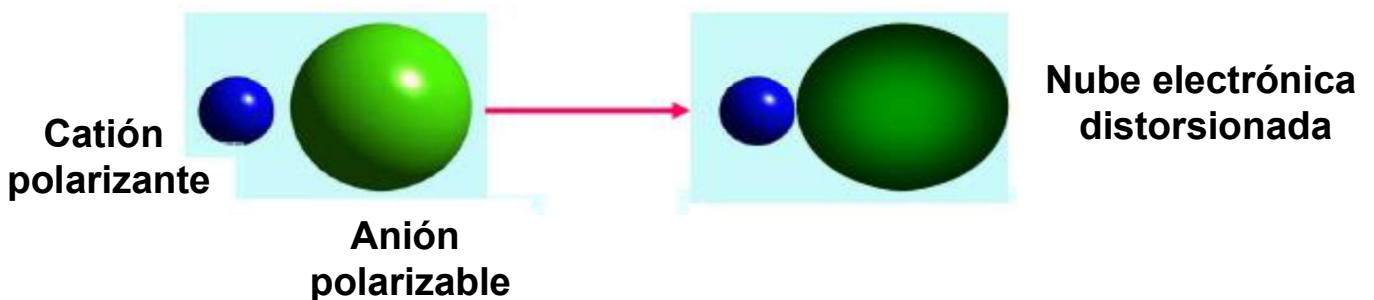
En estos casos hay una transferencia completa de electrones del átomo del metal al del no metal, formándose un cristal iónico.

Una unión covalente pura se forma en general en moléculas diatómicas homonucleares (ej.:  $\text{Cl}_2$ ,  $\text{O}_2$ , etc.), ya que los átomos que forman la unión tienen la misma tendencia a atraer electrones (tienen igual electronegatividad).

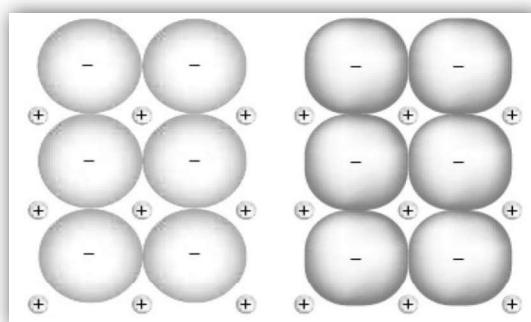
81

### Polarización del anión por la presencia del

cación



Sin polarización



Con polarización

82

## Efectos de polarización (reglas de Fajans)

Estas reglas permiten determinar de forma aproximada el carácter covalente de un enlace iónico.

Mayor polarización de un anión (y > carácter covalente del enlace) se favorecen por:

- 1) Carga eléctrica alta, ya sea en el anión o en el catión (para el catión => potencial iónico alto. Potencial iónico:  $\Phi = \text{carga}/\text{radio}$ )
- 2) catión pequeño
- 3) anión grande
- 4) catión con configuración electrónica de pseudo gas noble: > carga nuclear efectiva (ej.: elementos de transición)

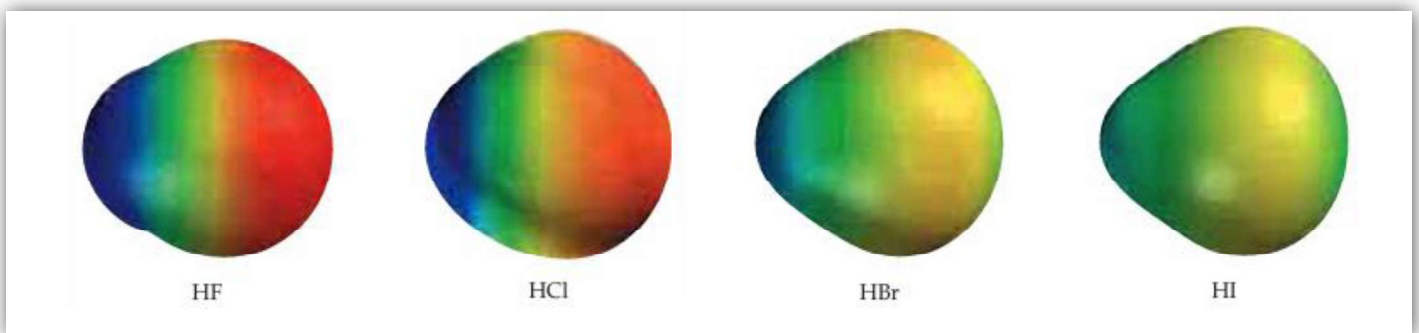
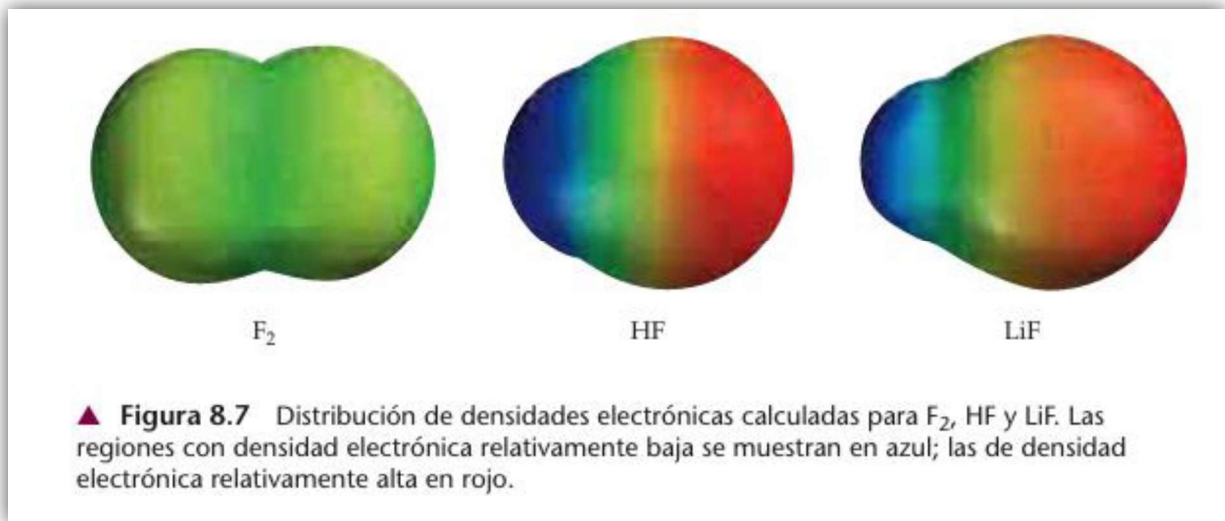
83

El catión tiene mayor carga nuclear efectiva  $Z_{\text{ef}}$  (para radios y cargas similares, cuanto mayor  $Z_{\text{ef}}$  más polarizante es el catión, mayor carácter covalente)

Mayor polarización enlace---- enlace sea mas covalente

Mayor carácter covalente----- menor PF y  $P_{\text{eb}}$

Compuestos iónicos tienen mayor PF y  $P_{\text{eb}}$  que los compuestos covalentes



85

## Reglas de Fajans

**Regla 1:** Cuanto más polarizante es el catión, mayor será el carácter covalente del enlace. El poder polarizante (de deformar) de un catión aumenta al aumentar la relación  $q/r$  (potencial iónico).  $C^+$  sea pequeño y carga grande

**Regla 2:** Cuanto más polarizable es el anión, mayor será el carácter covalente del enlace. La polarizabilidad del anión aumenta al aumentar el tamaño y la carga (facilidad para ser deformado).  $A^-$  sea grande y carga grande

**Regla 3:** La polarización del enlace (y por lo tanto el carácter covalente) aumenta cuando el catión no tiene configuración de gas noble. El catión tiene mayor carga nuclear efectiva  $Z_{ef}$  (para radios y cargas similares, cuanto mayor  $Z_{ef}$  más polarizante es el catión) catión que sea elemento de transición tiene  $>$  carga nuclear efectiva (ej.: elementos de transición) mas covalente

86

## Ej. de aplicación de reglas de Fajans

Sustancia	PF (°C)	Radio iónico (Å)	Regla de Fajans
MgF <sub>2</sub>	1396	F <sup>-</sup> 1,36	anión grande → mas polarizable → mayor carácter covalente
MgI <sub>2</sub>	632	I <sup>-</sup> 2,16	
BeCl <sub>2</sub>	440	Be <sup>2+</sup> 0,31 Ba <sup>2+</sup> 1,35	catión pequeño y de alta carga (alto Φ) → mas polarizante → mayor carácter covalente
BaCl <sub>2</sub>	963		
KCl	776	Cl <sup>-</sup> 1,81	anión alta carga → covalente
K <sub>2</sub> S	471	S <sup>2-</sup> 1,90	
KCl	776	K <sup>+</sup> 1,38	ión metal bloque d → covalente (>> Zefectivo)
CuCl	430	Cu <sup>+</sup> 0,96	

87

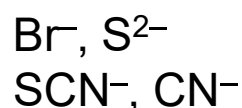
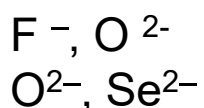
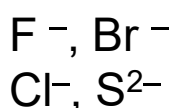
### Ejercicio 6:

En cada uno de los siguientes pares de cationes, elegir el que tenga el mayor poder polarizante:



### Ejercicio 7:

En cada una de los siguientes pares de aniones, elegir al que sea más polarizable:



88