Tema 5: El Enlace Químico (I): Enlace iónico

5.1 Tipos de enlace químico
5.2 Naturaleza del enlace iónico
5.3 Estructuras cristalinas de los compuestos iónicos
5.4 Energía del enlace iónico y energía de red
AJ2.1-3, PHH13.9, S13.2, C9.3
5.5 Propiedades generales de los compuestos iónicos

AJ6.20, S9↓

5.1 Tipos de enlace químico

Enlace iónico: entre elementos de electronegatividad muy diferente (sólido iónico, cristal iónico)

Metales con no metales ⇒ Transferencia de electrones

Enlace covalente: entre elementos de electronegatividad parecida y ambos muy electronegativos (molécula → fórmula molecular)

No metales entre sí ⇒ Compartición

Enlace metálico: entre elementos de electronegatividad parecida y ambos poco electronegativos

Metales entre sí ⇒ Teoría de Bandas

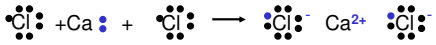
•En algunos casos se transfieren electrones de un átomo a otro formándose iones + y - que se atraen entre sí mediante fuerzas electrostáticas dando lugar a un

ENLACE IÓNICO
(transferencia de e⁻)

•En otros casos se comparten entre los átomos uno o más pares de e⁻ dando lugar a un

ENLACE COVALENTE
(compartir e⁻)

Valencia (de iones): carga del ión



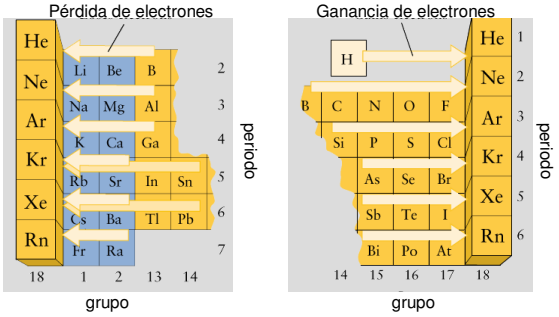
Ca divalente positivo

Cl monovalente negativo

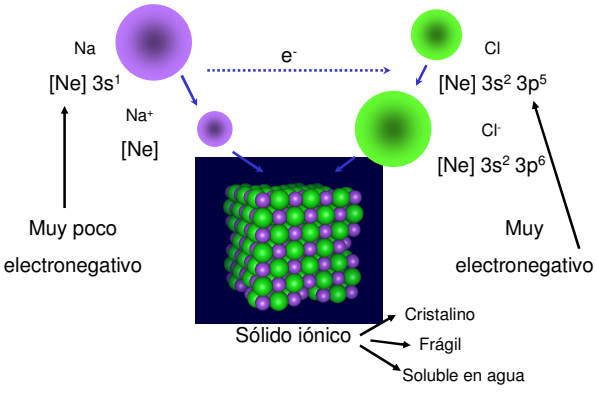
Notación simplificada: $Cl^{-}Ca^{2+}Cl^{-}$, o incluso $CaCl_2$

5.2 Naturaleza del enlace iónico

Se produce entre elementos muy electronegativos y elementos muy poco electronegativos



El cloruro sódico, la combinación de un metal y un no metal



5.3 Estructuras cristalinas de los compuestos iónicos

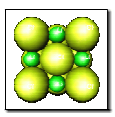
- La mayoría de los compuestos iónicos forman estructuras cristalinas sólidas a temperatura ambiente
- Que se dé una estructura cristalina u otra depende principalmente de los tamaños relativos de los iones constituyentes del cristal

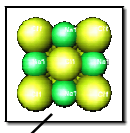
ESTRUCTURAS PRINCIPALES

estequiometría AB	estequiometría AB_2
Tipo CsCl	Tipo CaF_2 (fluorita)
Tipo NaCl	Tipo TiO_2 (rutilo)
Tipo ZnS	

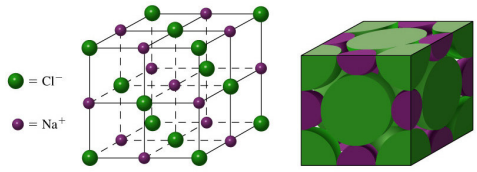
Tema 9

LiCl NaCl ...





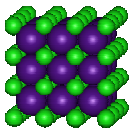
Tipo NaCl

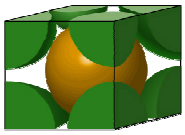


Tipo CsCl

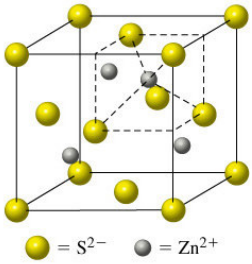
Catión grande comparado con el anión, R(catión)/R(anión) > 0.732

(en este ejemplo incluso $R(Cs^+) > R(Cl^-)$)

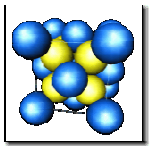




Tipo blenda de cinc (ZnS)



(a) Unit cell of ZnS, the zinc blend structure

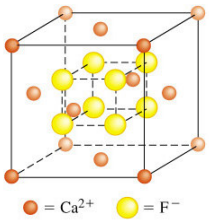


Tipo CaF_2

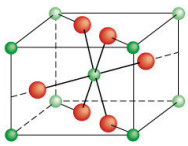
fluorita

(Ca^{2+} en azul, F^- en amarillo)

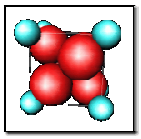
¡ Ca^{2+} más grande que F^- !



(b) Unit cell of CaF_2, the fluorite structure



(c) Unit cell of TiO_2, the rutile structure



Tipo TiO_2

rutilo

(Ti^{4+} en gris, O^{2-} en rojo)

5.4 Energía del enlace iónico y energía de red

La energía de un enlace iónico depende de:

1. La energía de ionización del metal
2. La afinidad electrónica del no metal
3. La energía de atomización de sus componentes
4. La energía (entalpía) de red

Tema 4

Diferencia de energía potencial electrostática entre los iones infinitamente separados y cuando están formando el sólido cristalino

Depende de los radios iónicos, las cargas de los iones y el tipo de estructura cristalina

Ciclo de Born-Haber

Relaciona las cuatro contribuciones anteriores con la energía de formación del compuesto iónico

$$\Delta H_f = \Delta H_{at} + \Delta H(EI) + \Delta H(AE) + \Delta H_L$$

Por ser la energía (o la entalpía) una función de estado

Iones gaseosos

Ionización

Elementos atomizados

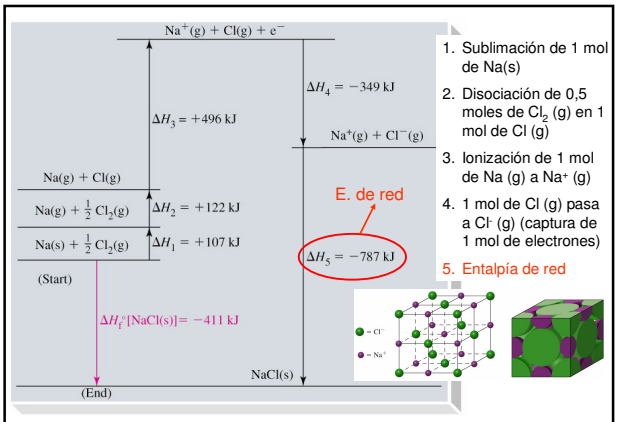
Atomización

Elementos estado estándar

-[*Entalpía Formación*]

Sólido iónico

[*Entalpía de red*]



1. Sublimación de 1 mol de Na(s)
2. Disociación de 0,5 moles de Cl_2 (g) en 1 mol de Cl (g)
3. Ionización de 1 mol de Na (g) a Na^+ (g)
4. 1 mol de Cl (g) pasa a Cl^- (g) (captura de 1 mol de electrones)
5. Entalpía de red

1. **Na (s) → Na (g)** **$\Delta H_1 = \Delta H_{sublimación} = +$ 107 kJ**
2. **½ Cl_2 (g) → Cl (g)** **ΔH_2 = ½ energía de enlace Cl-Cl = +122 kJ**
3. **Na (g) → Na^+ (g) + e⁻** **ΔH_3 = 1ª energía de ionización = +496 kJ**
4. **Cl (g) + e⁻ → Cl^- (g)** **ΔH_4 = -afinidad electrónica del Cl = -349 kJ**
5. **Na^+ (g) + Cl^- (g) → NaCl (s)** **ΔH_5 = E. de Red del NaCl = ?**

neta: Na (s) + ½ Cl_2 (g) → NaCl (s)

ΔH_f^0 = - 411 kJ = $\Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3 + \Delta H_4 + \Delta H_5$

ΔH_5 = entalpía de red = (-411 – 107 – 122 – 496 + 349) kJ =

= - 787 kJ

Cálculo directo de la energía de red

Cargas de los iones

$$V_E = N_A \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{z_A z_B}{d} A$$

Número de Avogadro

Distancia entre iones

Constante de Madelung

Depende de la estructura y simetría de la red

Valores típicos de la constante de Madelung: ≈2

Energía reticular

1. Compuestos con iones divalentes y trivalentes presentan, en términos generales, energías de red o de cohesión más grandes

   Ejemplo: punto de fusión del KI = 677ºC

   Punto de fusión del CaO = 2590 ºC

2. Compuestos con iones más pequeños tienen, en términos generales, energías de red o de cohesión más grandes

   Ejemplo: punto de fusión del KBr = 1003ºC

   Punto de fusión del KCl = 1049 ºC

5.5 Propiedades generales de los compuestos iónicos

- Sólidos a temperatura ambiente y con altos puntos de fusión
  (*materiales con energías de cohesión relativamente altos)*
- Frágiles
  (*la naturaleza del enlace los hace inestables frente a fuerzas de cizalla)*
- Mayormente solubles en agua y otros disolventes polares

Disolución de compuestos iónicos

SOLIDO IÓNICO → DISOLUCIÓN IÓNICA

$MX(s) \rightarrow M^+(aq) + X^-(aq);$

$V(r) = -\frac{q_+ q_-}{4\pi\varepsilon_0 r}$ más atractivo que $V(r) = -\frac{q_+ q_-}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0 r}$

Cte dieléctrica disolvente

Por ejemplo, para el agua $\varepsilon = 78.5$