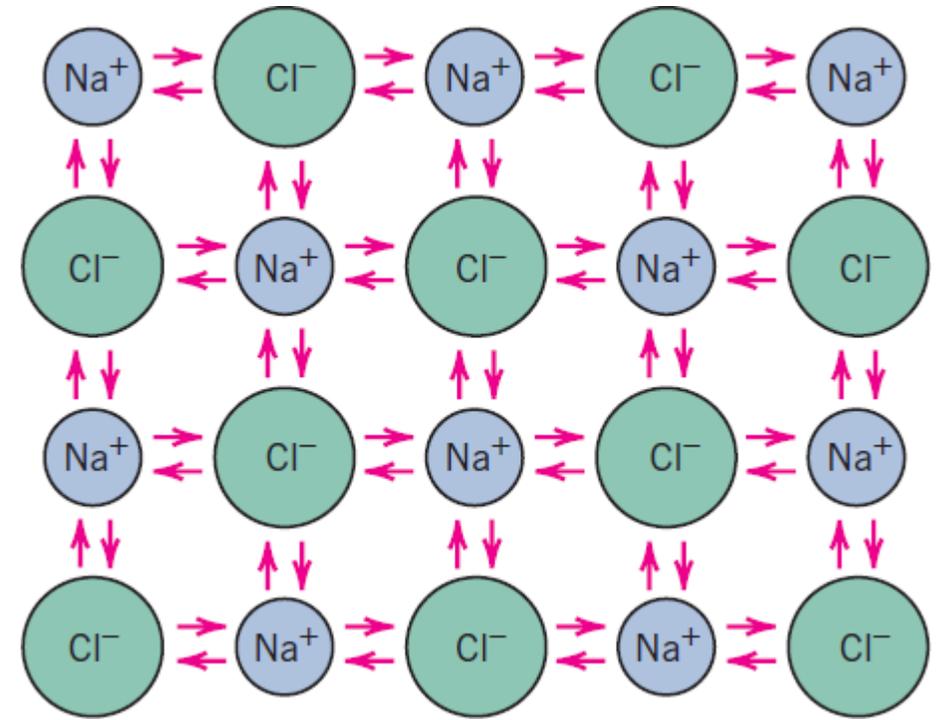
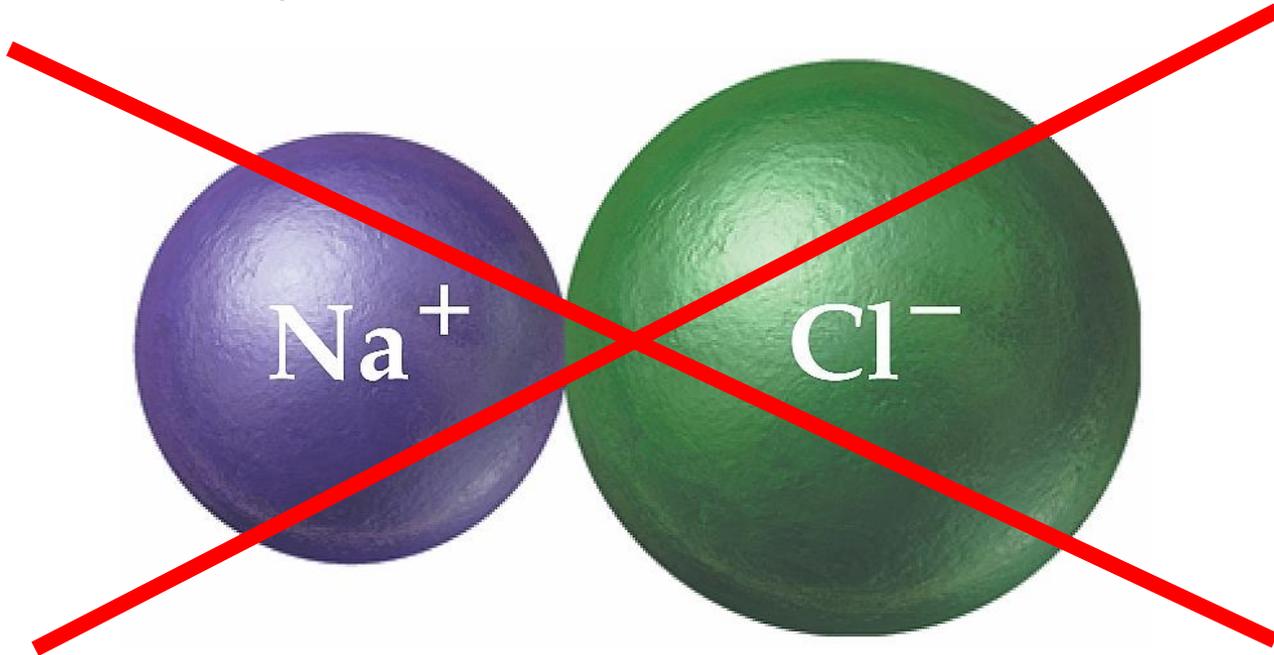


ENLACE IÓNICO

QUÍMICA INORGÁNICA I

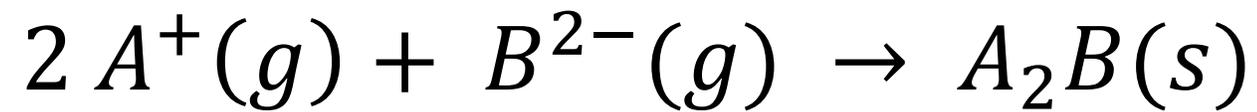
Enlace iónico

Es el enlace entre átomos con una marcada diferencia en electronegatividades. Un enlace iónico se refiere a la interacción electrostática entre cargas positivas y negativas (cationes y aniones).



Energía de red cristalina

Energía obtenida en la formación de un sólido iónico a partir de los iones en fase gas



$U = (\text{valor negativo})$

Es de utilidad para conocer que tan fuerte es una red cristalina, predecir puntos de fusión, solubilidad y comparar sólidos iónicos entre sí.

Energía de red cristalina / Ecuación de Born Landé

- Ecuación de Born Landé

$$U = \left(\frac{N_A A Z_+ Z_- e^2}{4\pi \epsilon_0 d_0} \right) \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

N_A (N) = Número de Avogadro

d_0 = radio del catión mas radio del anión en metros ($r_+ + r_-$)

Z = carga del anión o del catión

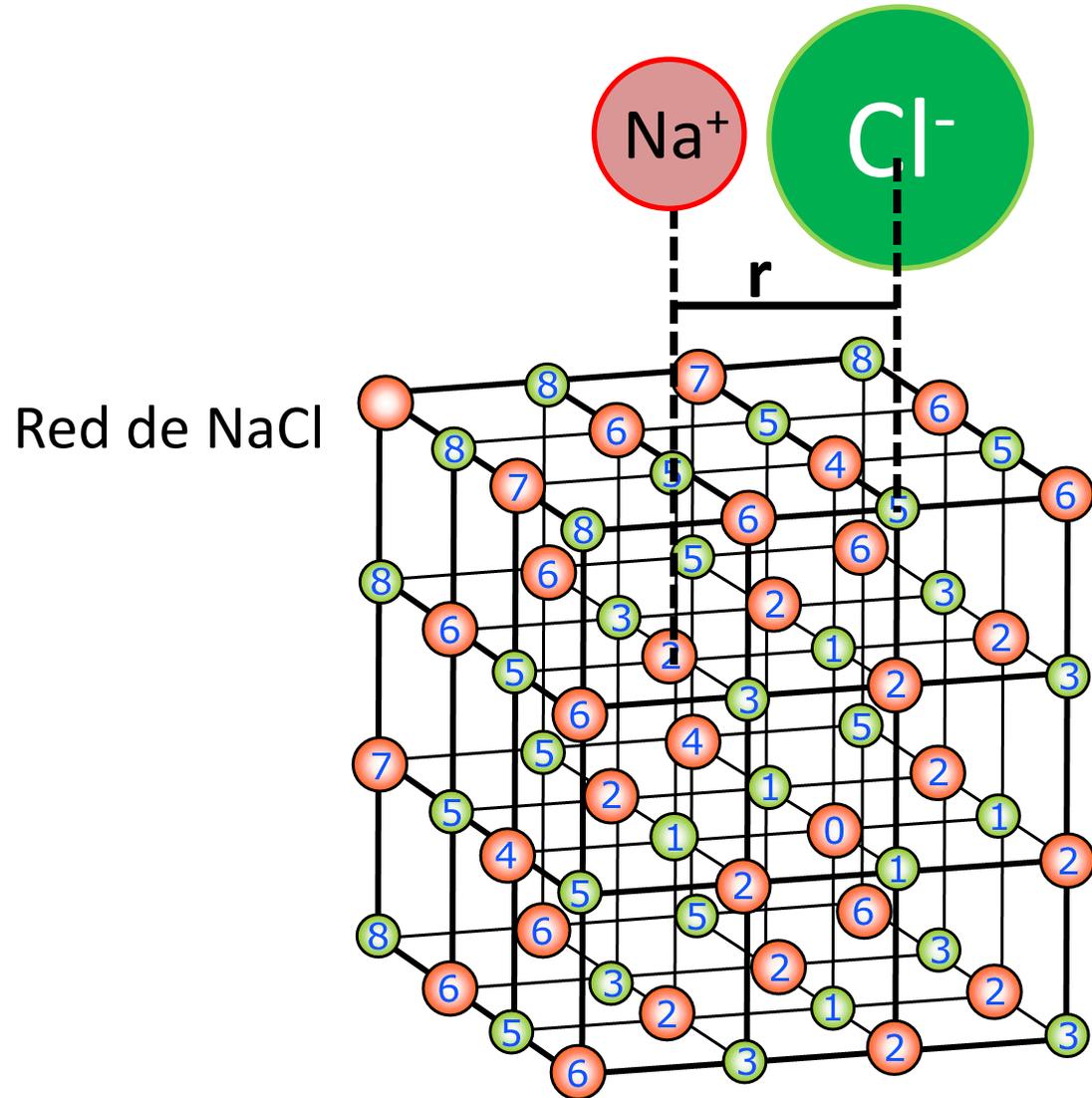
A = constante de Madelung

ϵ_0 = permitividad en el vacío

e = carga fundamental del electrón

n = Factor de Landé

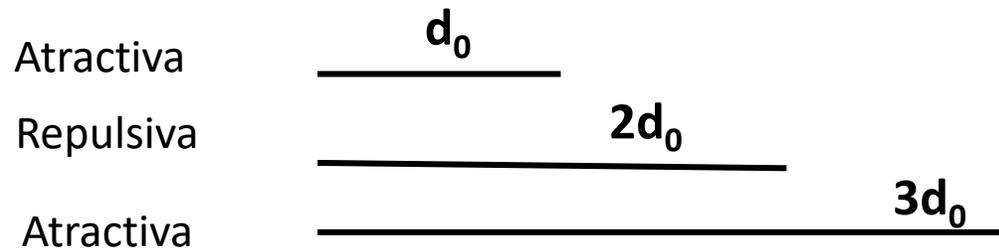
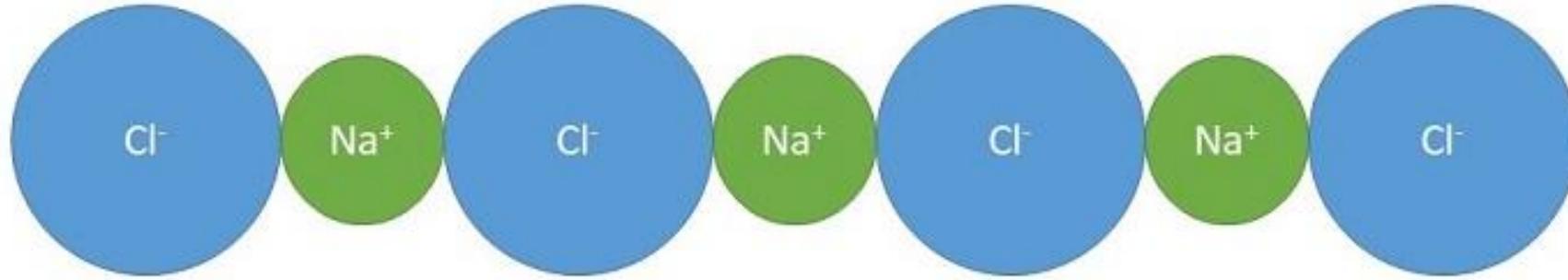
Ecuación de Born-Landé



Ecuación de Coulomb

$$F = \frac{kq_1q_2}{r^2}$$

Red teórica unidimensional



$$E_{Coulomb} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Z_+Z_-e^2}{d} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Z_+Z_-e^2}{2d} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Z_+Z_-e^2}{3d} \dots$$

$$E_{Coulomb} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Z_+Z_-e^2}{d} \left[1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} \dots \right]$$

$$E_{Coulomb} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Z_+Z_-e^2}{d} \times \ln 2$$

La energía de red será $2 \cdot 2 \ln 2$ (1.386) veces más grande que la atracción entre un carga (+) y una (-).

Red tridimensional

Si se consideran las fuerzas atractivas y repulsivas en una red, hay una constante que multiplicada por la fuerza describe las interacciones de la red.



Constante de Madelung (A)

| lattice | A | CN |
|----------------|----------|-----------|
| CsCl | 1.763 | (8,8) |
| NaCl | 1.748 | (6,6) |
| sphalerite | 1.638 | (4,4) |
| wurtzite | 1.641 | (4,4) |
| fluorite | 2.519 | (8,4) |
| rutile | 2.408 | (6,3) |

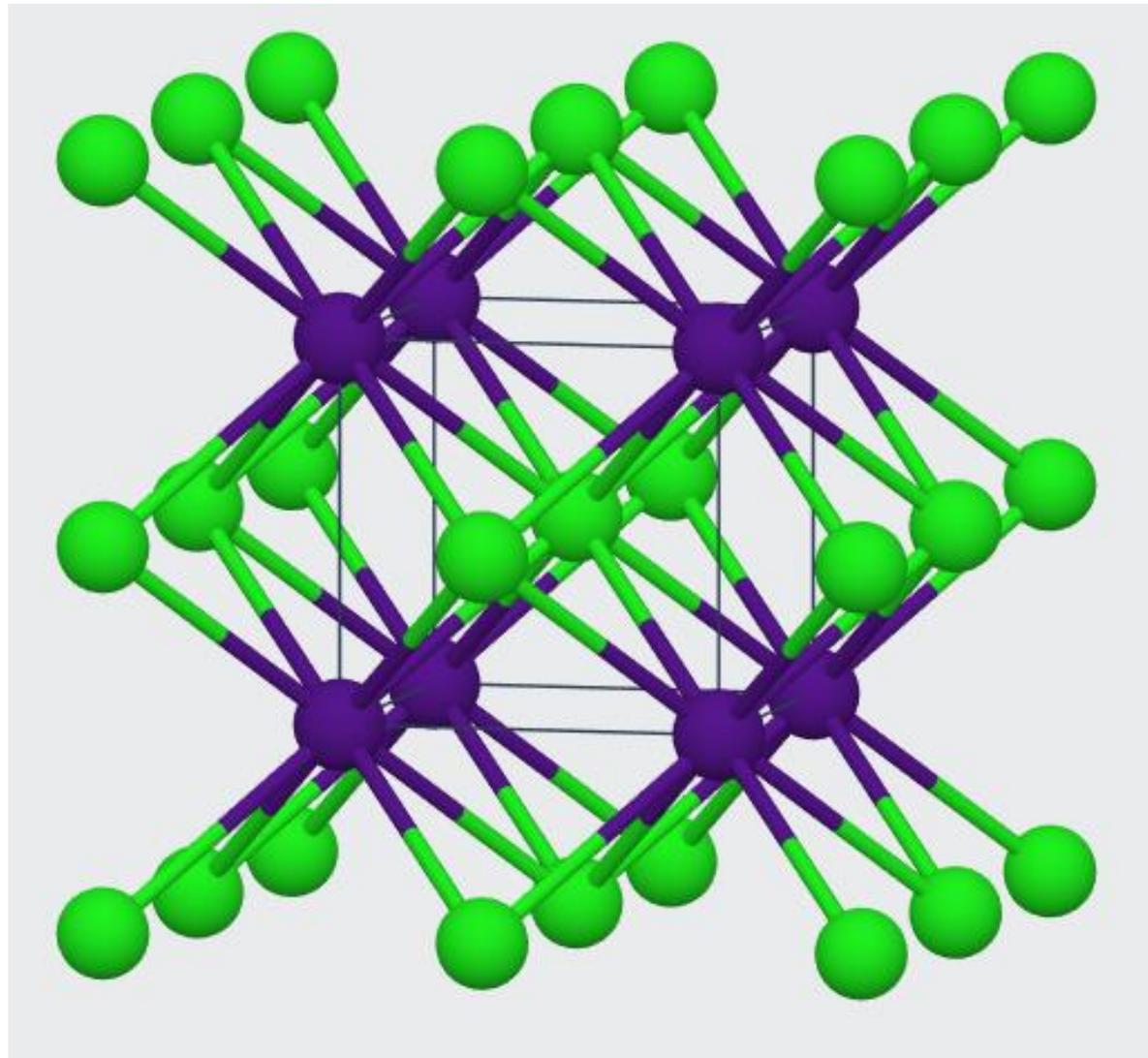
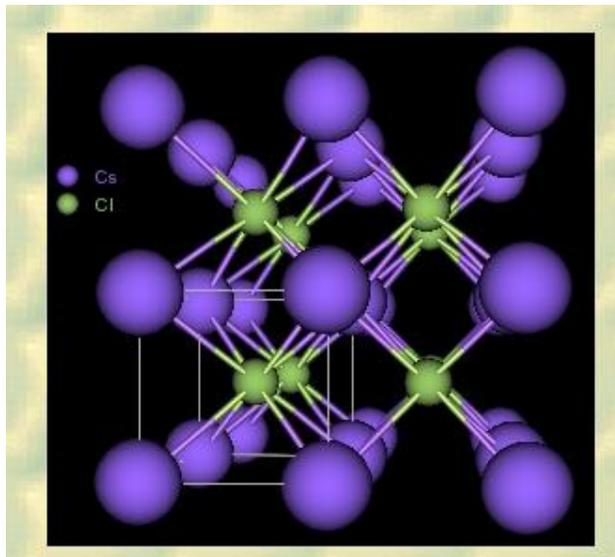
Lattice = Arreglo cristalino

CN (coordination number) = átomos que rodean al ión
(catión, anión)

Arreglo cristalino:

CsCl

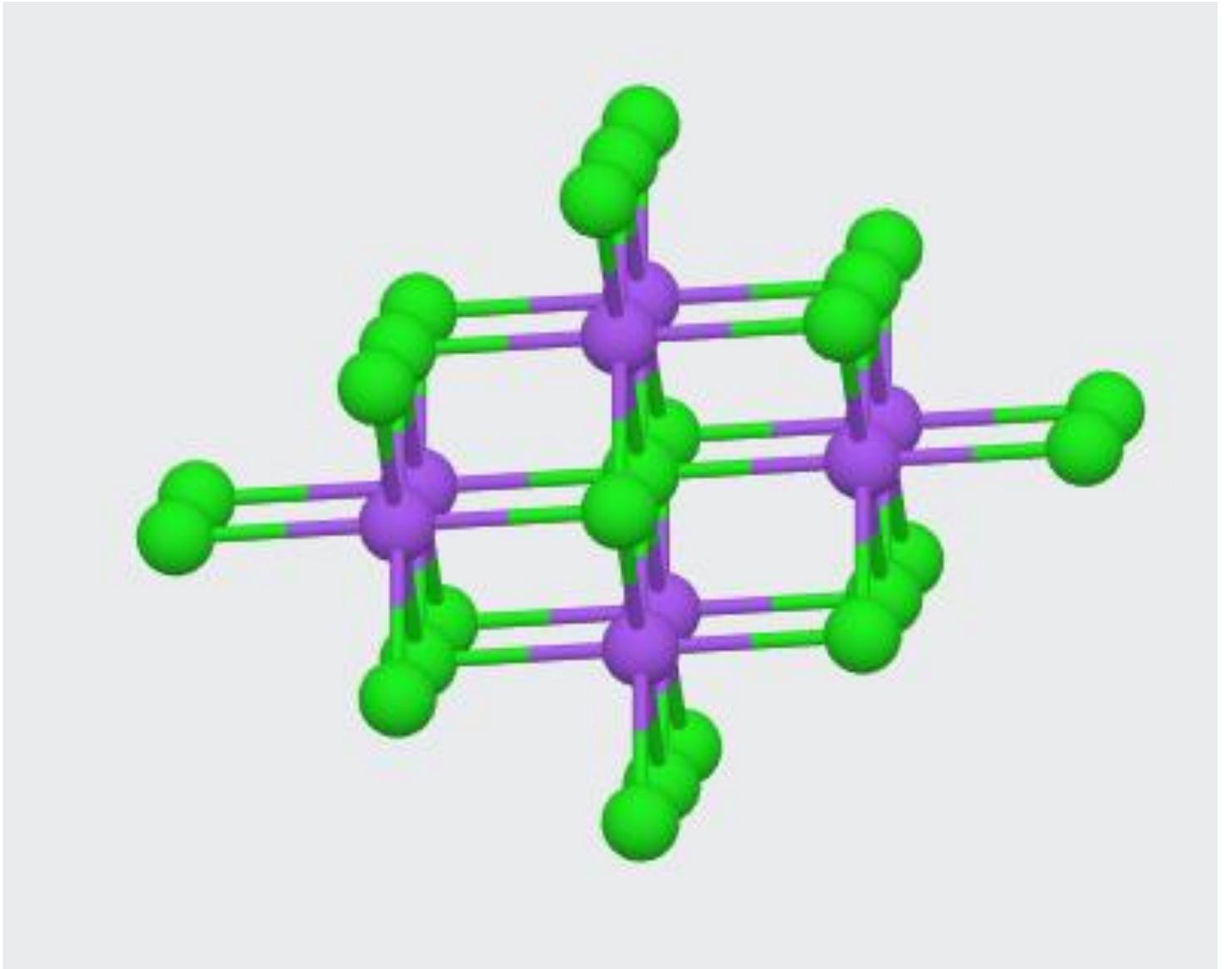
Cúbico



Arreglo cristalino:

Halita (NaCl)

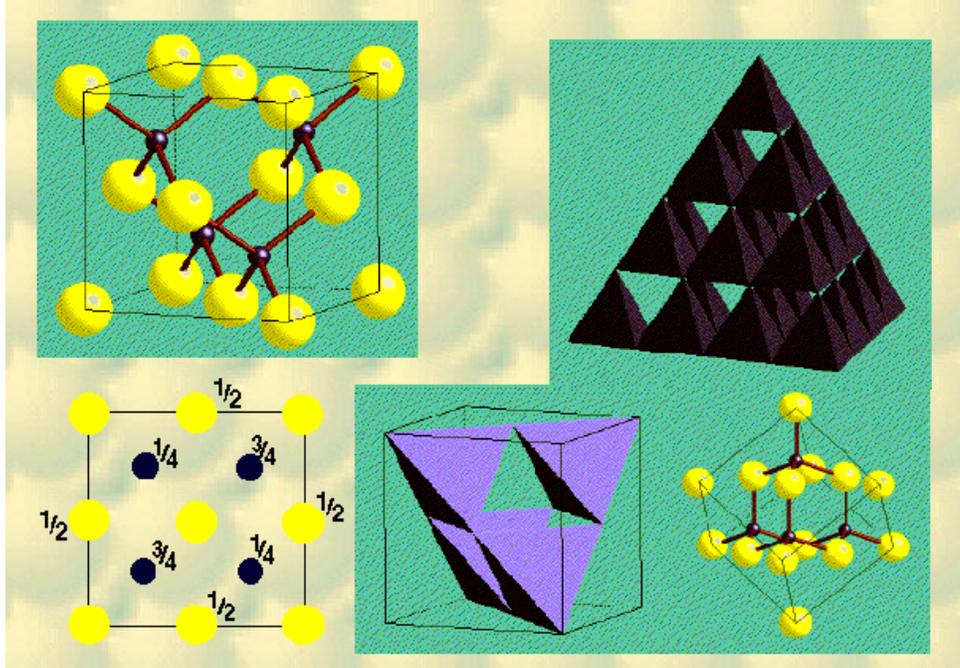
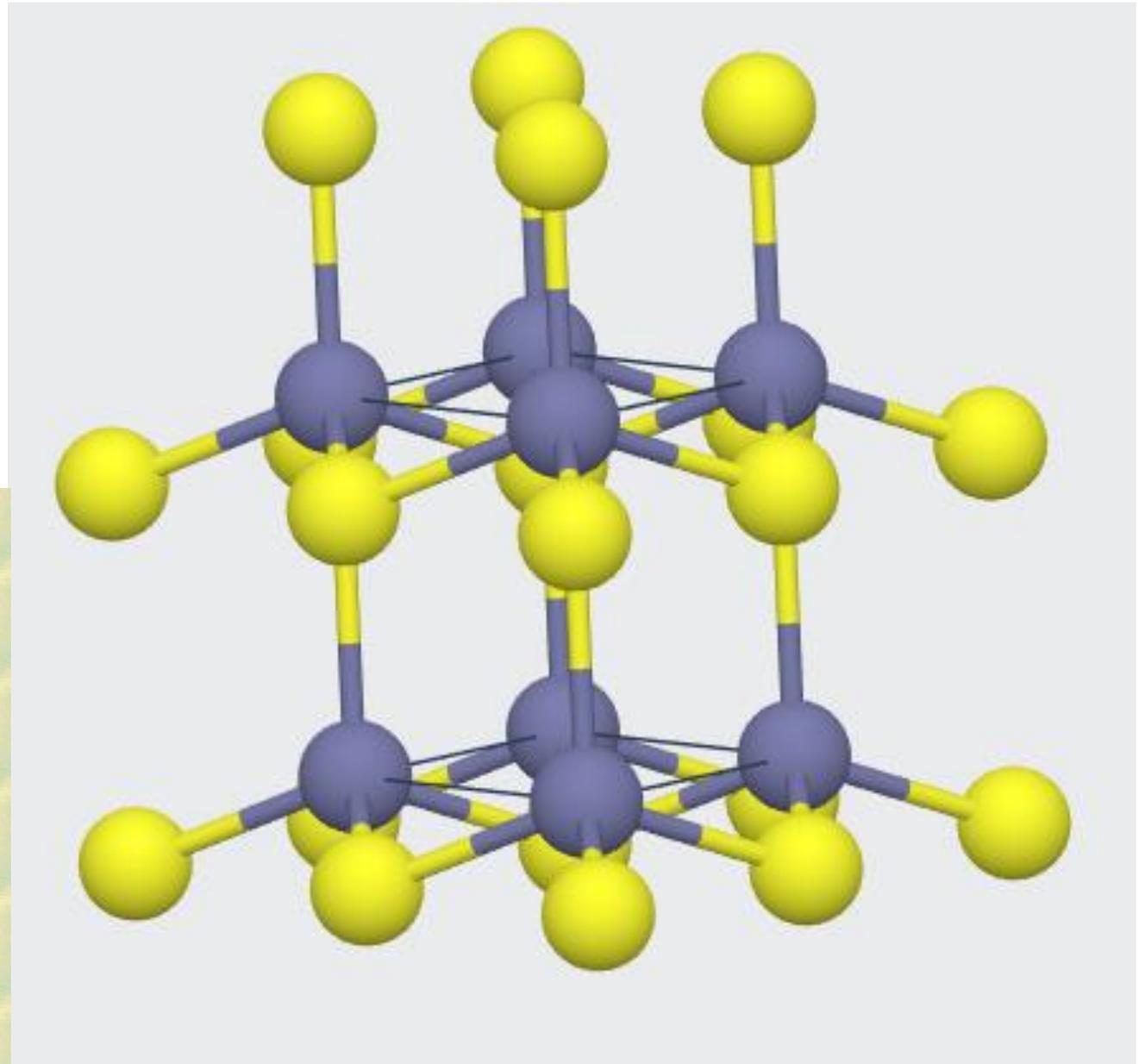
Cúbico compacto
Sitios Oh



Arreglo cristalino:

Sfalerita (ZnS)

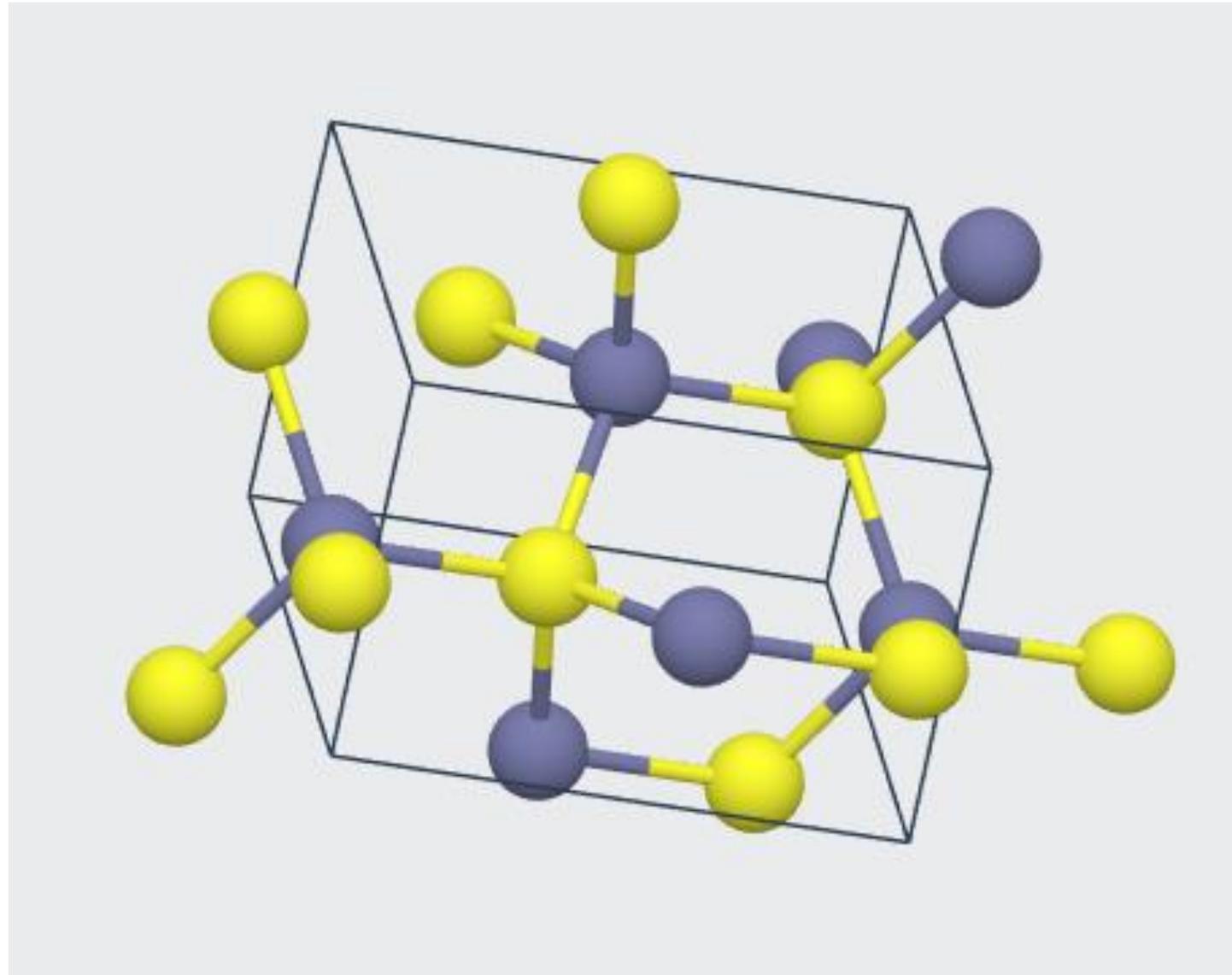
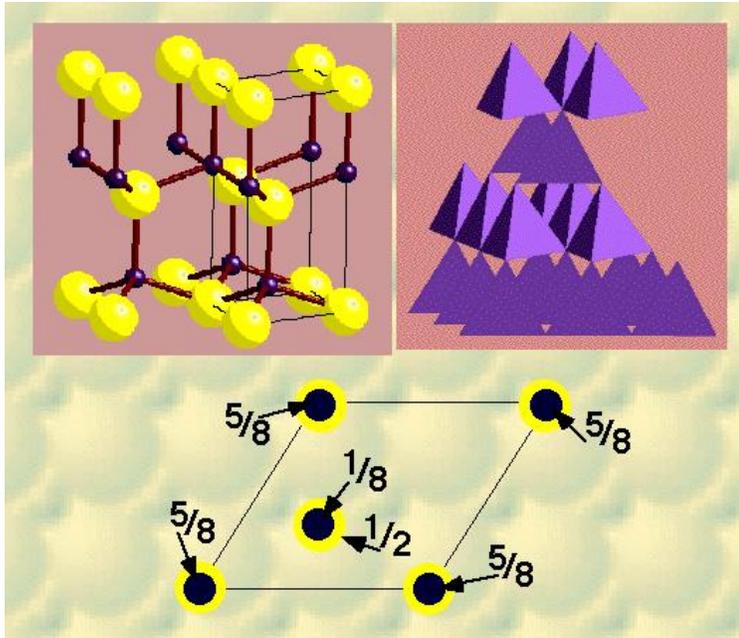
Cúbico compacto para el Zn
Sitios Td



Arreglo cristalino:

Wurtzita (ZnS)

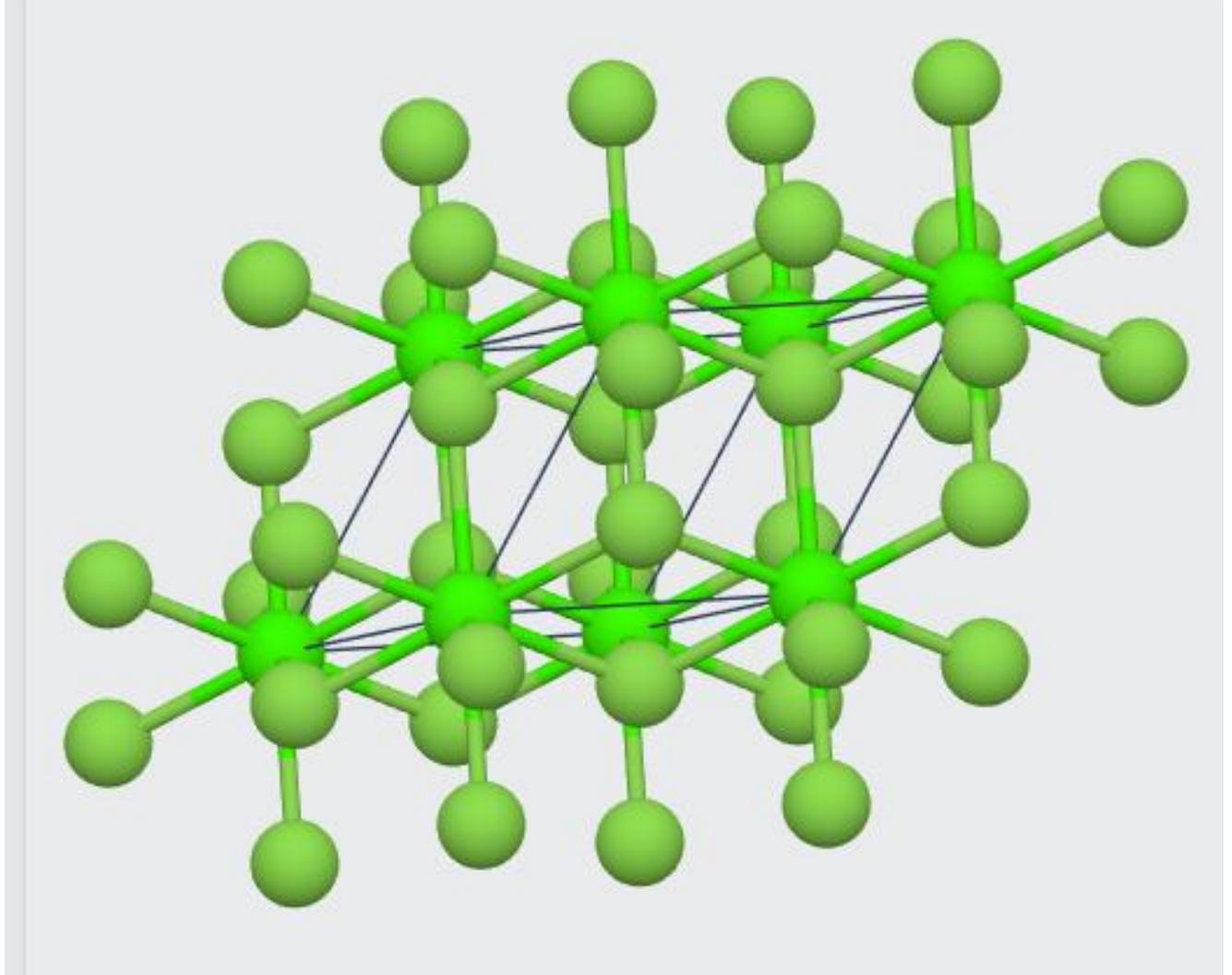
Hexagonal compacto



Arreglo cristalino:

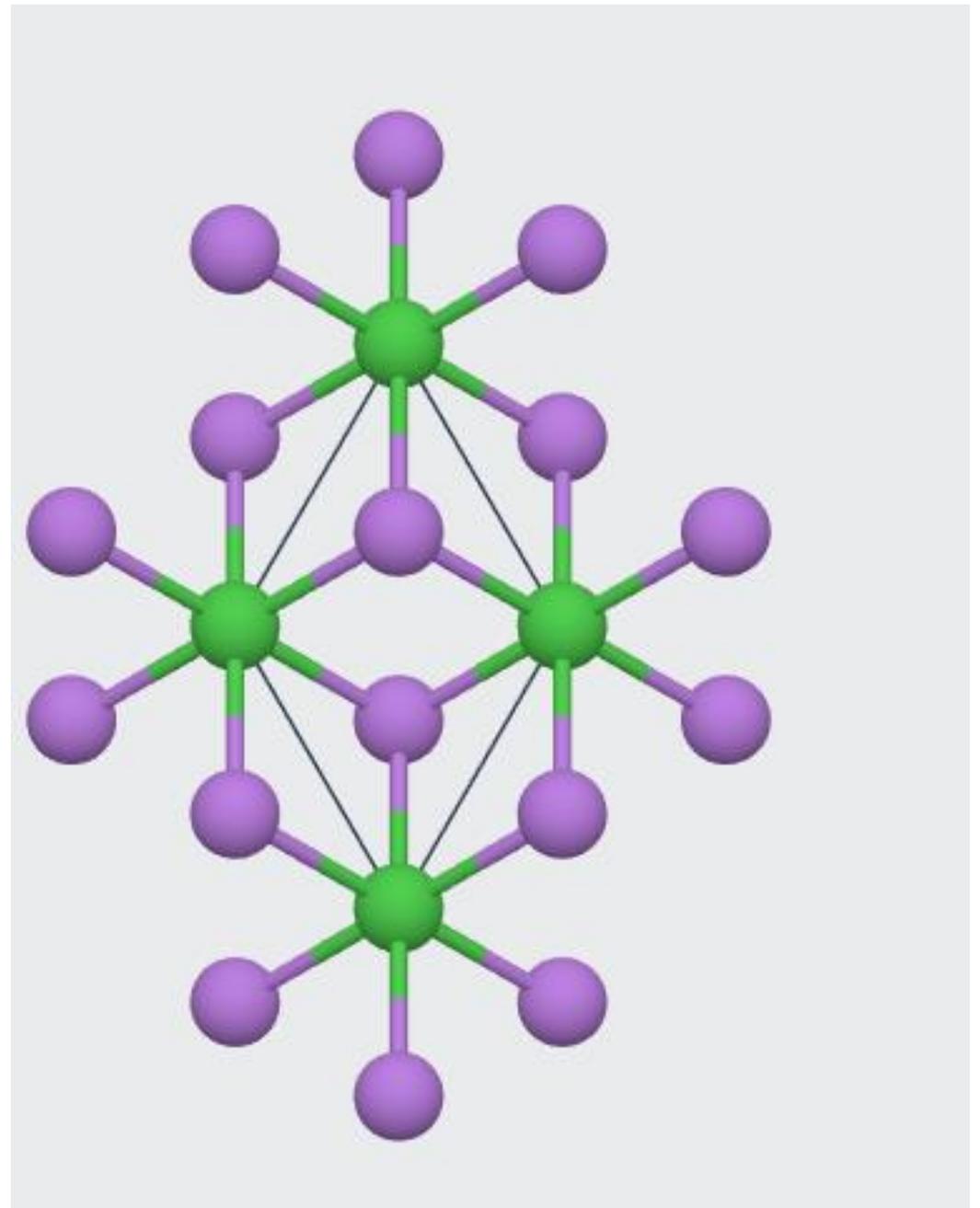
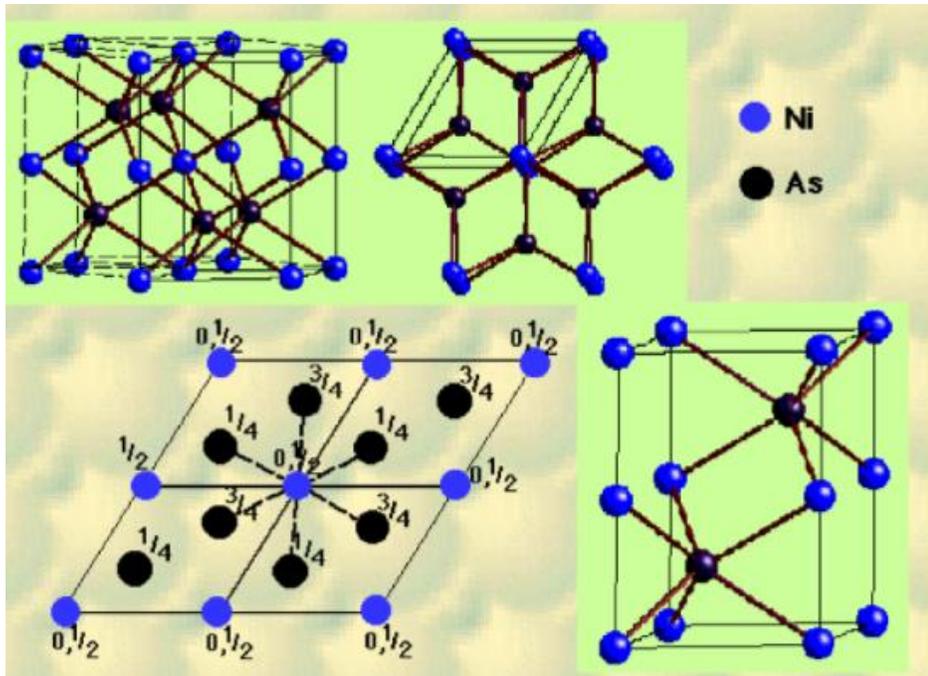
Fluorita (CaF_2)

Cúbico compacto
Sitios Td



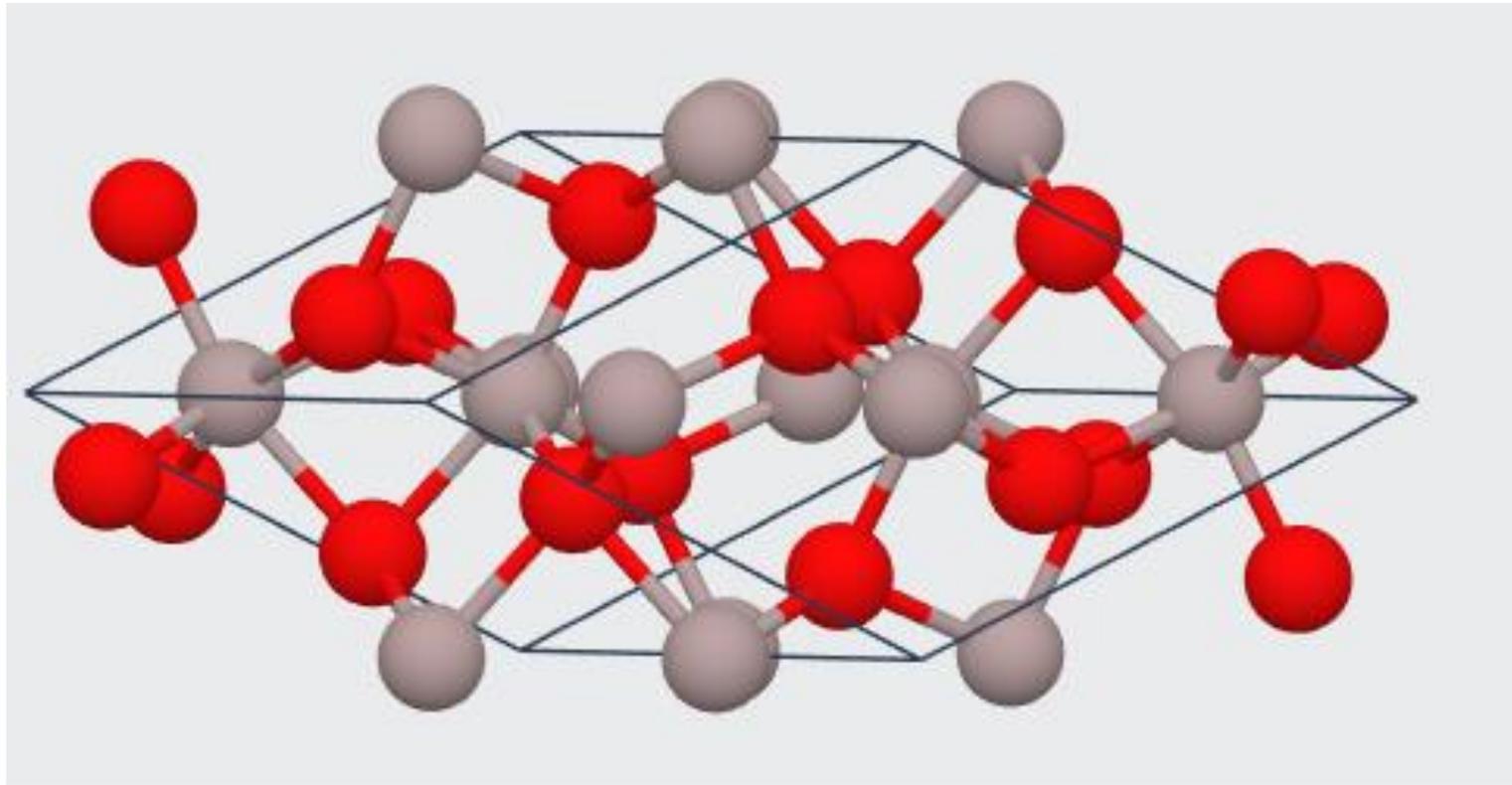
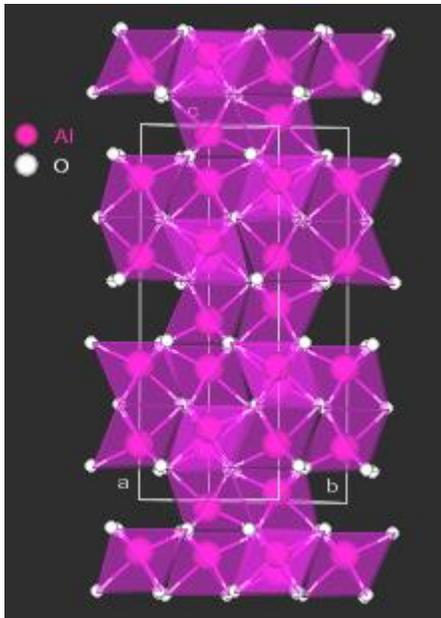
Arreglo cristalino: Niccolita (NiAs)

Hexagonal compacto



Arreglo cristalino:
Corindon (Al_2O_3)

Trigonal



Factor de Landé

...considerando la energía repulsiva de los electrones de capas llenas (core)

$$E_{repulsión} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{NB}{d^n}$$

| FACTOR DE LANDE | |
|-------------------|----|
| Ion Configuration | n |
| He | 5 |
| Ne | 7 |
| Ar | 9 |
| Kr | 10 |
| Xe | 12 |

$$U = E_{coulomb} + E_{repulsión} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{NAZ_+Z_-e^2}{d} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{NB}{d^n}$$

$$U = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{NAZ_+Z_-e^2}{d} + \frac{NB}{d^n} \right]$$

En equilibrio; $d=d_0$

$$\frac{dU}{dd_0} = 0$$

$$\frac{dU}{dd_0} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{NAZ_+Z_-e^2}{(d_0)^2} + \frac{NB}{d_0^{n+1}} \right] = 0$$

$$B = \left[\frac{NAZ_+Z_-e^2 d_0^{n-1}}{4\pi\epsilon_0 n} \right]$$

Ecuación de Born-Landé

$$U = \left(\frac{NAZ_+Z_-e^2}{4\pi\epsilon_0 d_0} \right) \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

Energía de red / Ecuación de Kapustinskii

$$U (\text{kJ mol}^{-1}) = \frac{120,200 m Z_c Z_a}{r_c + r_a} \left(1 - \frac{34.5}{r_c + r_a} \right)$$

Z_c = Carga del catión

Z_a = Carga del anión

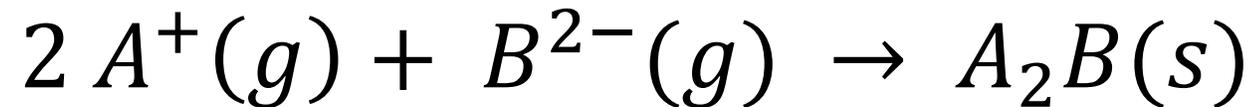
r_c = radio del catión (pm)

r_a = radio del anión (pm)

m = Número de iones en la fórmula

Energía de red / Ciclo de Born-Haber

Se puede deducir la energía de red a partir de la suma de las energías conocidas de manera experimental de los átomos involucrados



Energía de formación de la sal

Afinidad electrónica

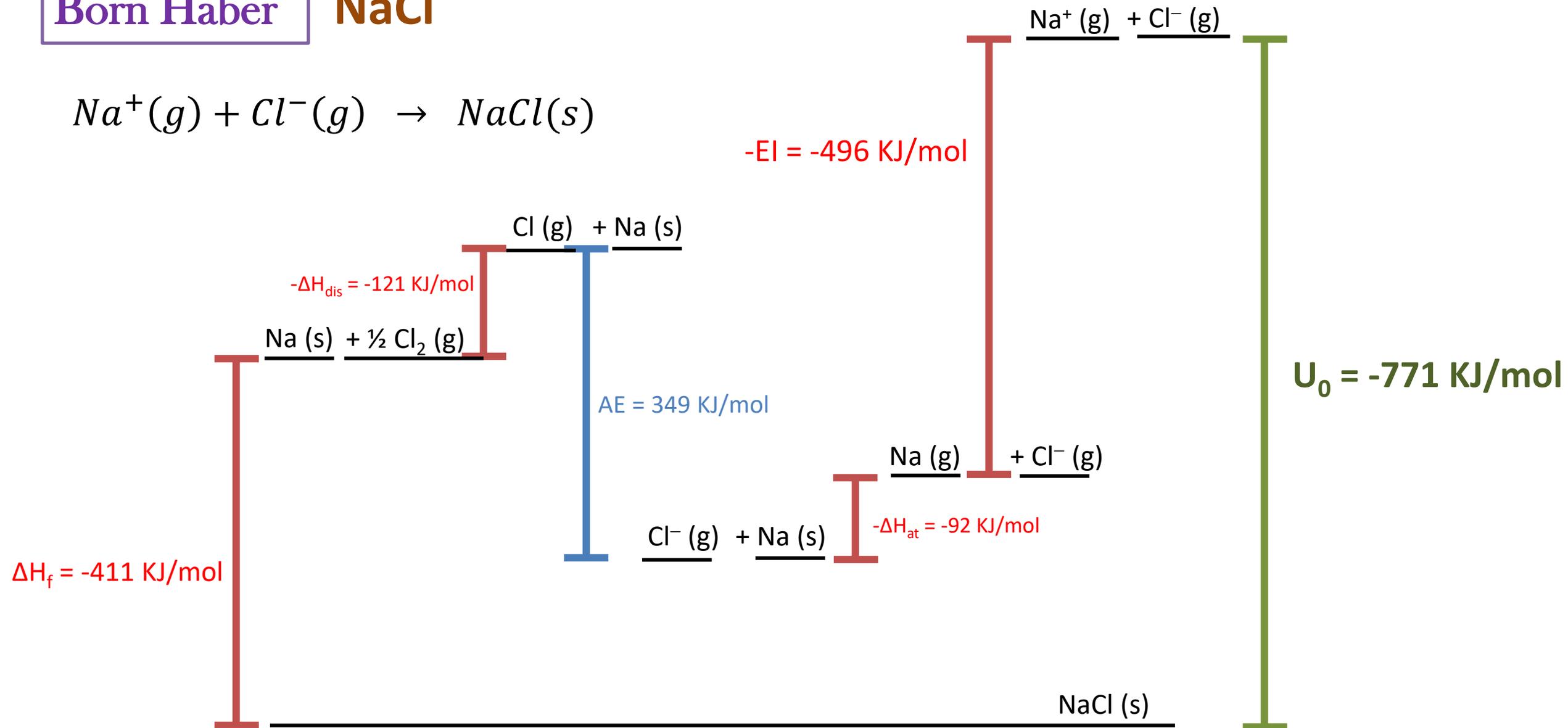
Energía de ionización

Energía de disociación

Energía de atomización

Ciclo de
Born Haber

NaCl



Calculo de la energía de red del NaCl por el método de Born -Haber

| | | |
|--|--|---|
| Energía de formación | $\text{Na}(s) + \frac{1}{2} \text{Cl}_2(g) \rightarrow \text{NaCl}(s) \quad \Delta H_f^\circ = -411 \text{ kJ mol}^{-1}$ | |
| (-) Energía de sublimación | $\text{Na}(g) \rightarrow \text{Na}(s)$ | $-\Delta H_{\text{subl}} = -108 \text{ KJ/mol}$ |
| (-) Energía de disociación | $\text{Cl}(g) \rightarrow \frac{1}{2} \text{Cl}_2(g)$ | $-\Delta H_{\text{dis}} = -121 \text{ KJ/mol}$ |
| (-) Energía de ionización | $1e^- + \text{Na}^+(g) \rightarrow \text{Na}(g)$ | $-EI = -496 \text{ KJ/mol}$ |
| (-) Afinidad electrónica | $\text{Cl}^-(g) \rightarrow \text{Cl}(g) + 1e^-$ | $AE = 349 \text{ KJ/mol}$ |
| Energía de red (U_0) | $\text{Na}^+(g) + \text{Cl}^-(g) \rightarrow \text{NaCl}(s)$ | $U_0 = -787 \text{ KJ/mol}$ |

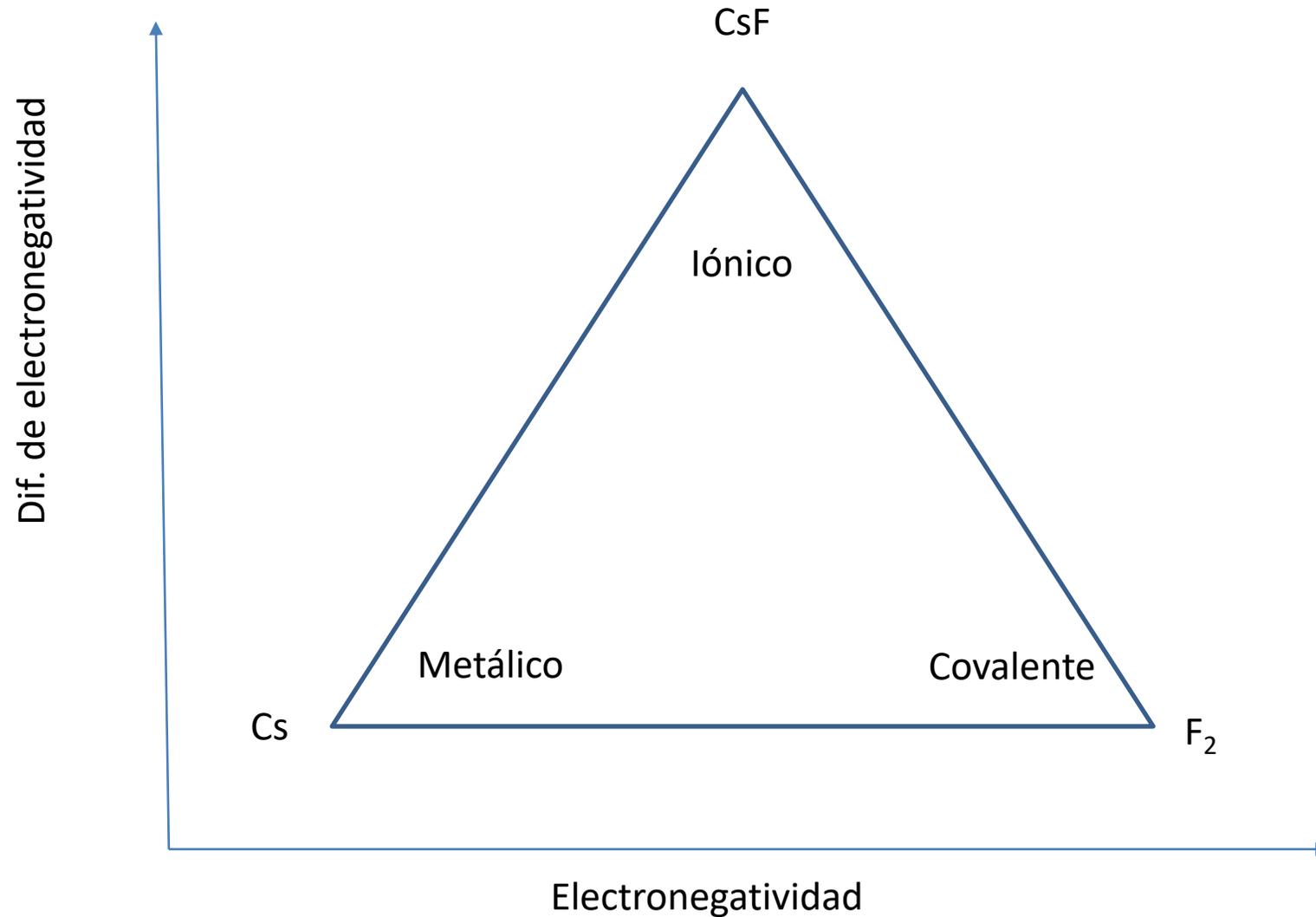
Carácter iónico o covalente de un enlace

L. Pauling estimó el carácter de un enlace entre dos átomos (A y B) con la relación de electronegatividades de los átomos.

$$\textit{Carácter Iónico} = 1 - e^{-\frac{1}{4}(\chi_A - \chi_B)}$$

*El tipo de enlace está estudiado para sólidos generalmente

Triangulo de Ketelaar



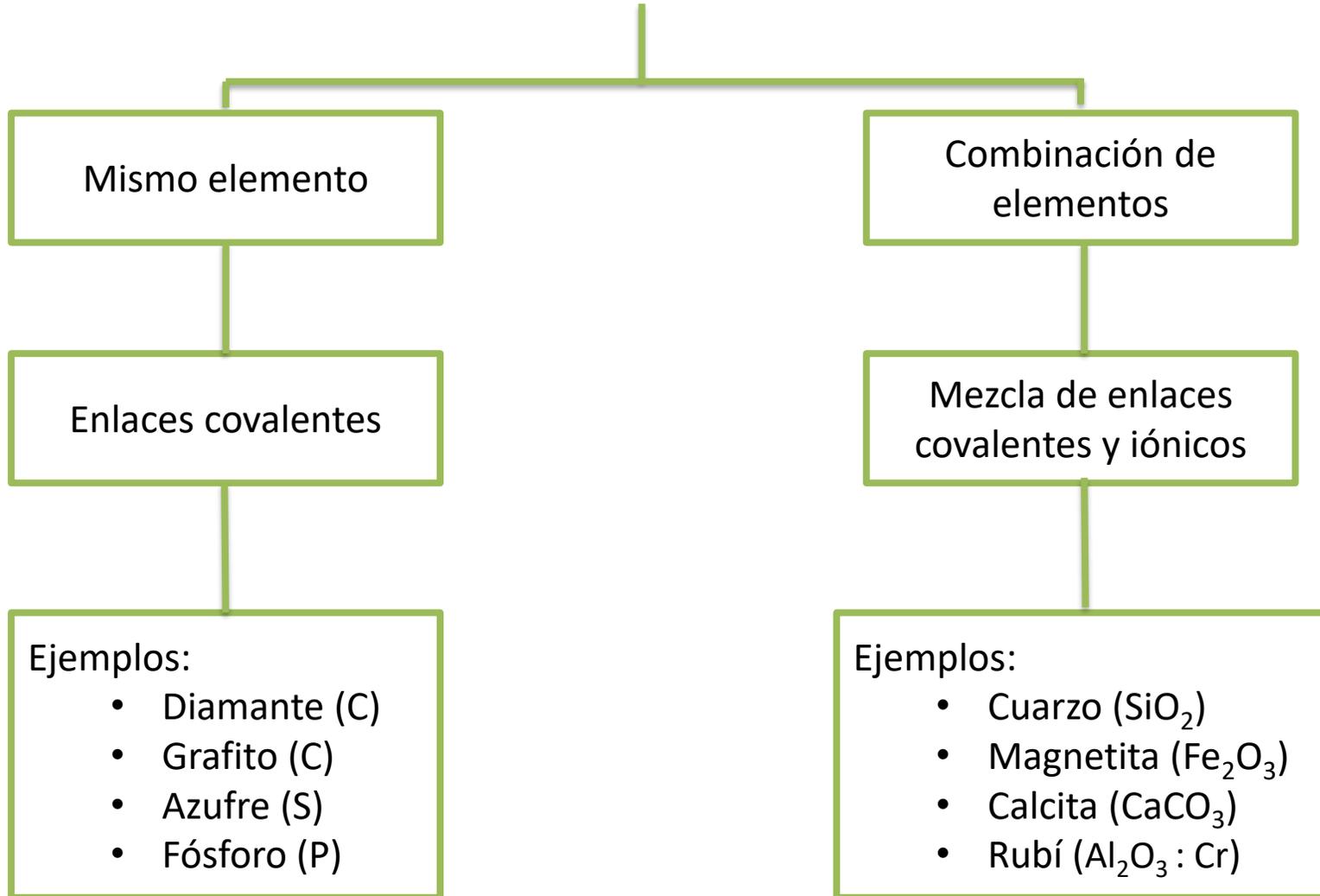
Materiales Cerámicos

- Son sólidos que forman redes cristalinas cuyos enlaces tienen características de covalentes, iónicos e incluso un poco de metálicos.
- Generalidades:
 - Tienen puntos de fusión altos
 - No conducen la corriente eléctrica en estado sólido, son aislantes
 - Son malos conductores de calor
 - Frágiles
 - Resistentes a la compresión mas que a la tensión
 - Poco reactivos
 - Pueden ser transparentes

Nota:

Hay excepciones para cada una de estas generalidades, por lo que es importante tomarlas sólo como una característica que pueden o no tener los materiales cerámicos.

Materiales Cerámicos

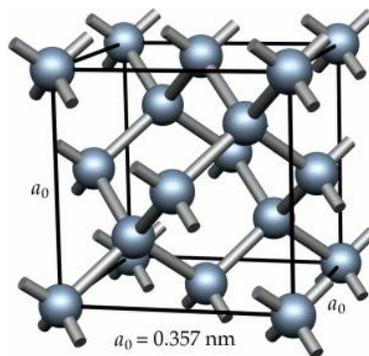


Diferencias estructurales y propiedades

Diamante



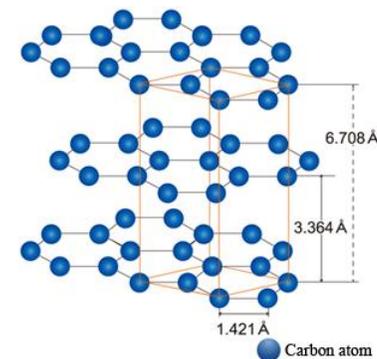
- Estructura tridimensional de enlaces covalentes
- Cada carbono se rodea de 4 átomos de carbono unidos fuertemente.
- Alta conducción térmica (fonones)
- Alta dureza
- No conduce la corriente eléctrica (aislante)
- Estable químicamente
- Incoloro



Grafito



- Estructura bidimensional de enlaces covalentes
- Cada carbono se une a 3 átomos de carbono fuertemente.
- Conduce la corriente eléctrica y térmica (electrones)
- Sólido blando, capaz de formar láminas.
- Buen conductor térmico



Las cerámicas y su clasificación según sus propiedades

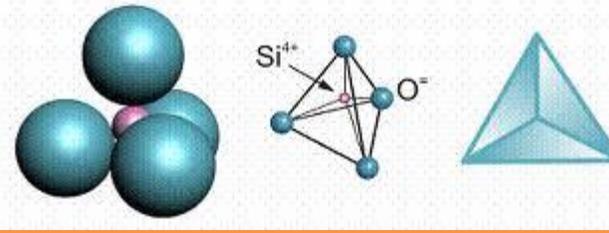
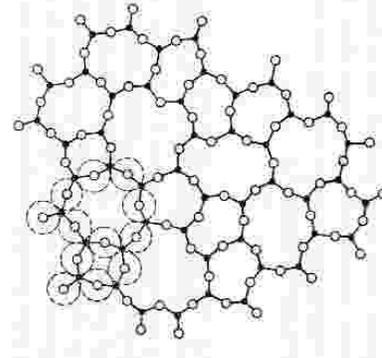
- **Eléctricas**, componentes conductores en resistores ($\text{Bi}_2\text{Ru}_2\text{O}_7$), Electrodo para hornos de fusión (SnO_2)
- **Dieléctricas**, Ladrillos para hornos (SiO_2), Capacitores de chips ($\text{PbMgNb}_2\text{O}_7$).
- **Magnéticas**, cintas grabadoras ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$), Magnetos permanentes en altavoces ($\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$)
- **Ópticas**, Fibras ópticas (SiO_2 dopado), Pantallas fluorescentes para microscopios electrónicos ((ZnS , CdS dopado).
- **Mecánicas**, Abrasivos para pulir (SiC), Componentes de motor (Si_3N_4).
- **Térmicas**, Paquetes para circuitos integrados (Al_2O_3 y AlN), Vidrio pyrex (SiO_2 con impurezas de boro).

Cerámicas silícicas

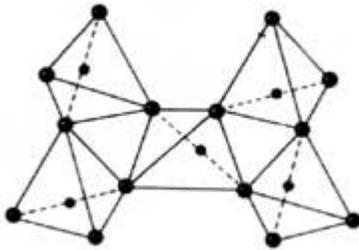
El silicio al ser muy abundante en la corteza terrestre, forma una gran variedad de compuestos con el oxígeno, lo que se conoce como silicatos.

En la forma cristalina del cuarzo, se utiliza de muchas maneras, desde aislante térmico y eléctrico hasta como fibra óptica.

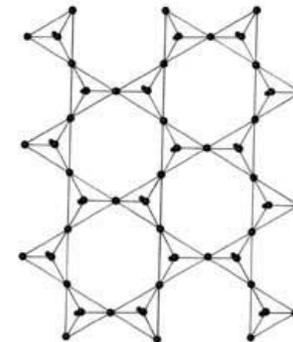
Vidrio (SiO_2 amorfo)



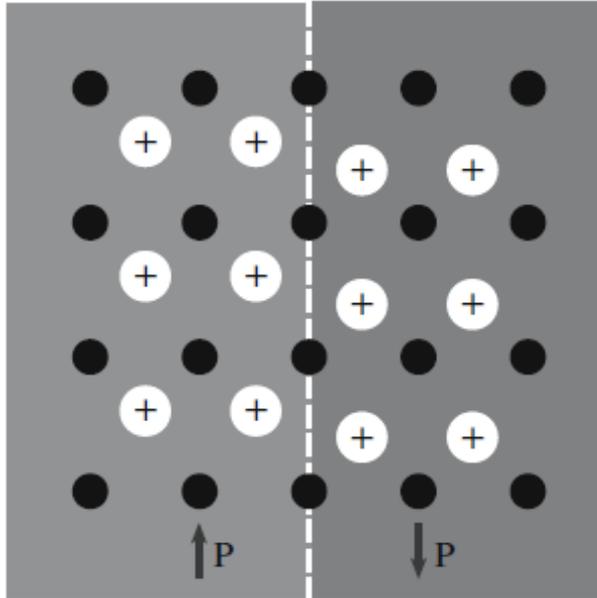
Cuarzo (SiO_2)



Enstatita (MgSiO_3)



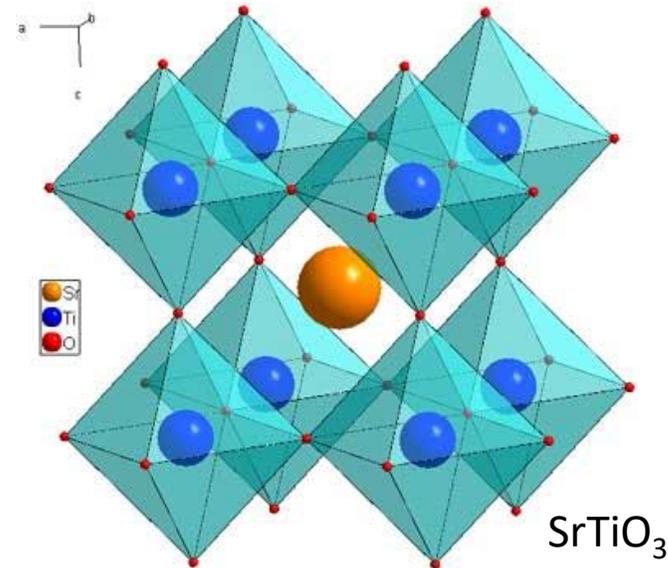
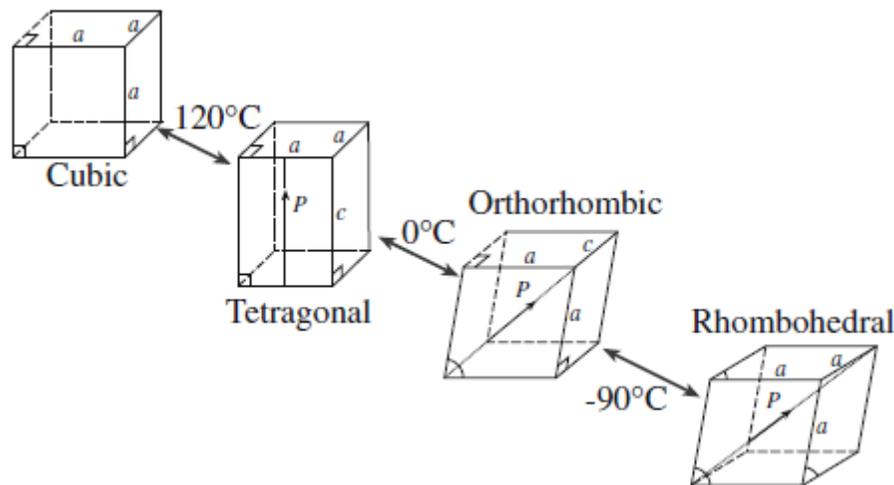
Cerámicas ferroeléctricas



Son sólidos que presentan un momento dipolar en la ausencia de un campo eléctrico.

La dirección del momento dipolar puede ser cambiada imponiendo un campo eléctrico alterno.

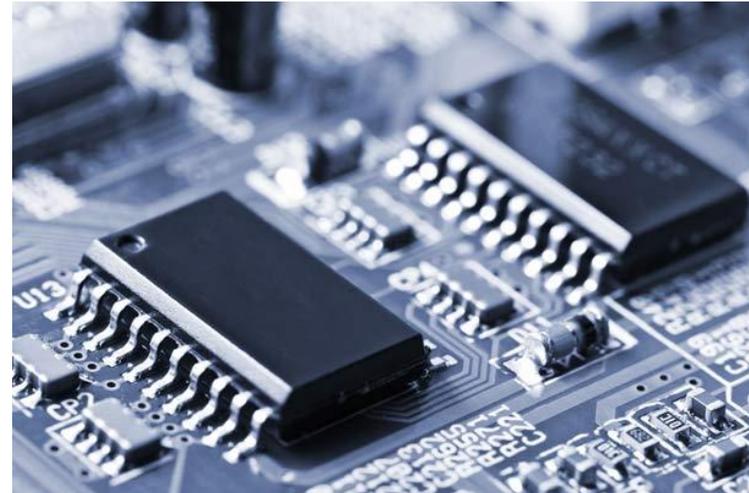
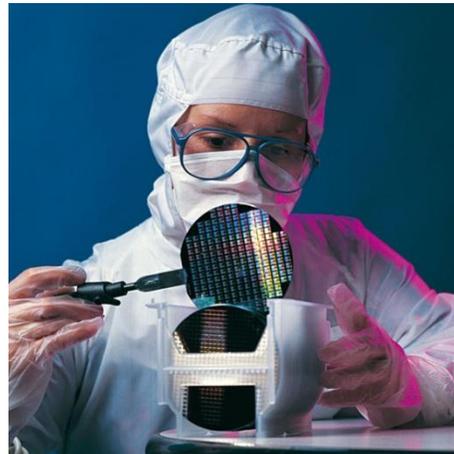
Son utilizados como capacitores.



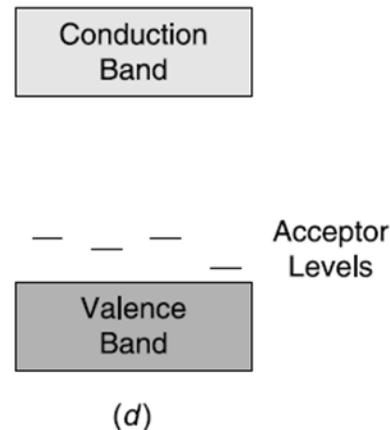
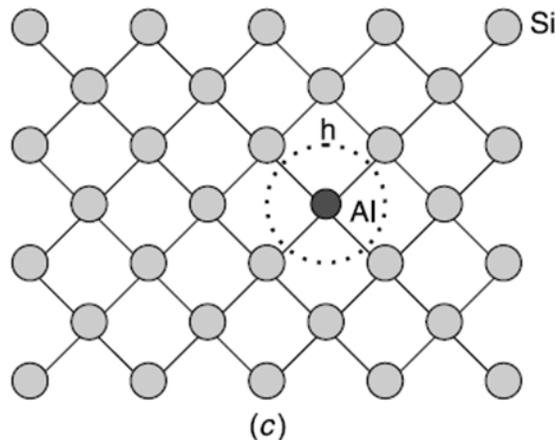
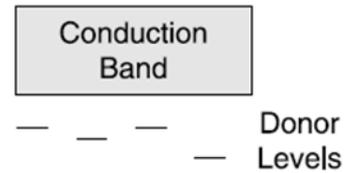
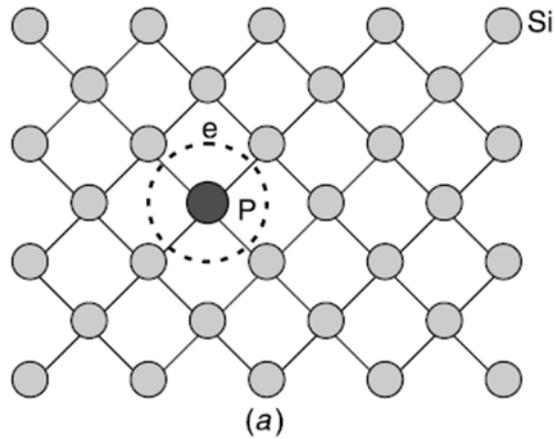
Materiales semiconductores

- Son materiales que tienen una diferencia pequeña entre la banda de conducción y la banda de valencia.
- Para que los electrones puedan transportarse, se tienen que generar electrones o agujeros que permitan el paso de la corriente:
 - Excitación de los electrones a la banda de conducción.
 - Introducción de impurezas (dopantes).
 - Sustitución de átomos en semiconductores no estequiométricos.

El silicio es ocupado como semiconductor en los dispositivos electrónicos



Semiconductores tipo 'n' y 'p'



Se obtienen semiconductores con diferentes características al agregar impurezas.

Si tienen una deficiencia de electrones con respecto a la matriz se les conoce como de tipo "p".

Si tienen un incremento en el número de electrones de valencia con respecto a la matriz serán de tipo "n".