

ENLACE IÓNICO O ELECTROVALENTE

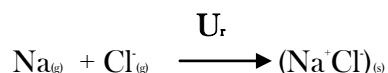
Caracterizado por:

- Cesión de electrones por parte de un metal a un no metal
- Formación de iones de carga contraria, metal (+) y no metal (-)
- El compuesto iónico se forma por atracción de tipo electrostático entre iones de carga contraria (cationes y aniones), dando como resultado una red cristalina altamente ordenada

Si tomamos por ejemplo la formación del NaCl que es compuesto iónico más conocido, hay que analizar qué sucede energéticamente con la pérdida del electrón del sodio y la captación del electrón por parte del cloro, lo cual se pone de manifiesto en las siguientes reacciones

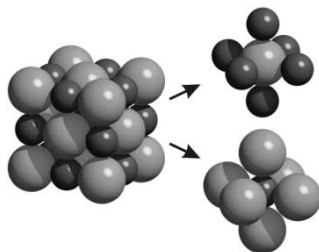


Basados en los datos aportados por la energía de cada una de las reacciones antes planteadas, podemos ver que el proceso requiere una energía total (495 kJ - 349 kJ) de 146 kJ/mol, lo cual parecería indicar que la reacción no es tan favorable como podría pensarse, sin embargo, este gasto de energía se compensa cuando se forma el cristal de NaCl, donde se desprende gran cantidad de energía que se conoce como **Energía Reticular (U_r)**.



Al ser una red cristalina, la misma está formada por aniones y cationes que se encuentran siempre en la misma proporción (relación estequiométrica para mantener la electroneutralidad) y en la misma posición fija, dependiendo de esto el tipo de red cristalina que van a presentar.

Los iones, como toda partícula cargada, generan a su alrededor un campo eléctrico que es igual en las tres direcciones del espacio, por lo cual cada ión tiende a rodearse de un número fijo de de iones de signo contrario a su alrededor, este número recibe el nombre de **índice o número de coordinación**, el cual varía dependiendo del tipo de red cristalina. En el caso del NaCl el número de coordinación es 6, porque tanto el cloro como el sodio se rodean de 6 iones de carga contraria.



El número o índice de coordinación depende de:

Tamaño de los iones:

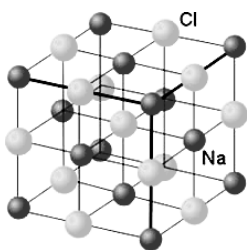
Cuando la diferencia en el tamaño de los iones es considerable el número de coordinación es menor. Ej: NaCl (número de coordinación 6)

Cuando los iones tienen tamaño semejante el número de coordinación es mayor Ej: CsCl (número de coordinación 8)

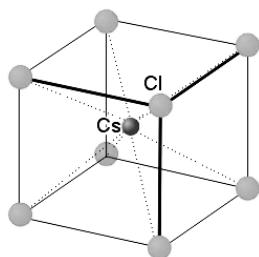
Carga de los iones:

La carga de los iones condiciona la estequiometría del cristal, puesto que debe conservar la neutralidad eléctrica. Así por ejemplo si el catión tiene carga +2 como el caso del calcio en el CaF_2 , tendrá el catión la posibilidad de rodearse de 8 aniones mientras que el anión sólo podrá rodearse de 4 cationes, presentando entonces un número de coordinación (8,4).

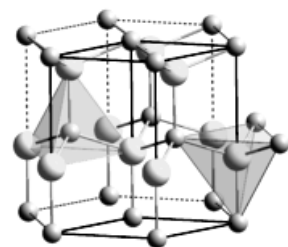
Tipo de red cristalina	Coordinación (catión, anión)	Compuestos iónicos representativos
Cúbica centrada en las caras	(6,6)	NaCl, LiCl
Cúbica centrada en el cuerpo	(8,8)	CsCl, CsBr
Tetraédrica	(4,4)	ZnS, BeO
Tipo fluorita (CaF_2)	(8,4)	CaF_2 , BaCl_2
Tipo rutilo (TiO_2)	(6,3)	TiO_2 , SrO_2



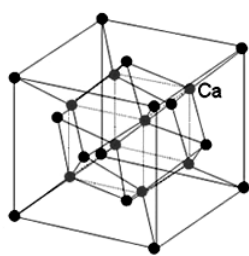
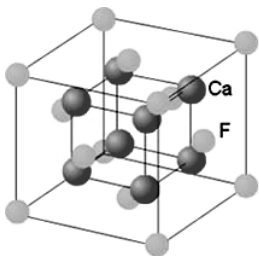
Cúbica centrada en las caras



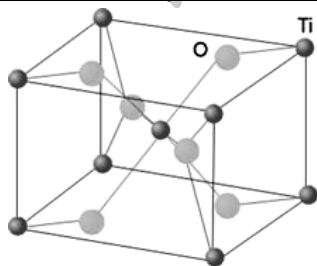
Cúbica centrada en el cuerpo



Tetraédrica



Tipo fluorita (CaF_2)



Tipo rutilo (TiO_2)

La fuerza del enlace iónico depende de lo estable y compacta que sea la red cristalina. Los factores que influyen en la estabilidad del enlace iónico son:

Cargas iónicas. Un compuesto iónico será más estable cuanto menor sea la carga de sus iones.

Tamaño de los iones. Un compuesto iónico es más estable cuanto más compacta sea la red cristalina y, por tanto, cuanto más parecidos sean el tamaño del anión y del catión.

Diferencia de electronegatividades. Un compuesto iónico será más estable cuanto mayor sea la diferencia de electronegatividades.

Energía reticular

La energía reticular, también conocida como energía de red, es la energía que se necesita para poder separar de manera completa un mol de un compuesto de tipo iónico en sus respectivos iones gaseosos.

También se puede definir como la energía desprendida para formar una red cristalina a partir de sus iones en estado gaseoso.

Este tipo de energía muestra la estabilidad que tiene las redes cristalinas, y viene medida como energía/mol, teniendo las mismas unidades de medida que tiene la entalpía estándar (ΔH°), es decir KJ/mol, aunque de signo opuesto.

La energía reticular es imposible de medir de forma directa, sin embargo, conociendo la estructura y la composición que tenga el compuesto iónico que queramos estudiar, podemos calcular o al menos aproximarnos a ella mediante una ecuación que da el modelo iónico, basado en la Ley de Coulomb, entre otras. También existe la posibilidad de calcular la energía reticular de manera indirecta mediante los ciclos termodinámicos, como el ciclo de Born-Haber.

El ciclo de Born-Haber muestra todas las energías implicadas en la formación de la red cristalina y está basado en la ley de Hess.

Energía de Disociación "D"

Energía de sublimación "S"

Energía de ionización "EI"

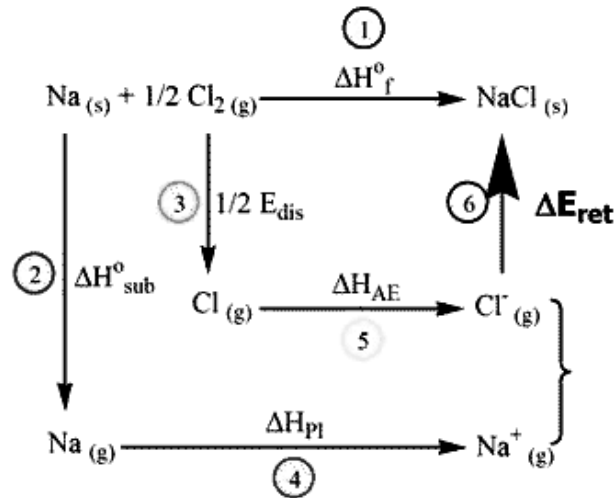
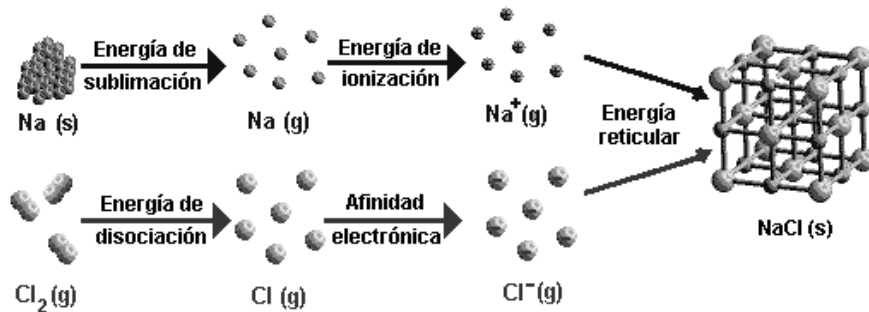
Afinidad electrónica "EA"

Energía reticular "U"

Ciclo de Born-Haber aplicado al NaCl:

- **Entalpía de disociación:** energía que hay que suministrar para separar la molécula de cloro en estado gaseoso (solo necesito la mitad).
- **Entalpía de sublimación:** energía que hay que suministrar para pasar el sodio de estado sólido a estado gaseoso.
- **Energía de ionización:** energía que hay que suministrar para ionizar el átomo de sodio en estado gaseoso.

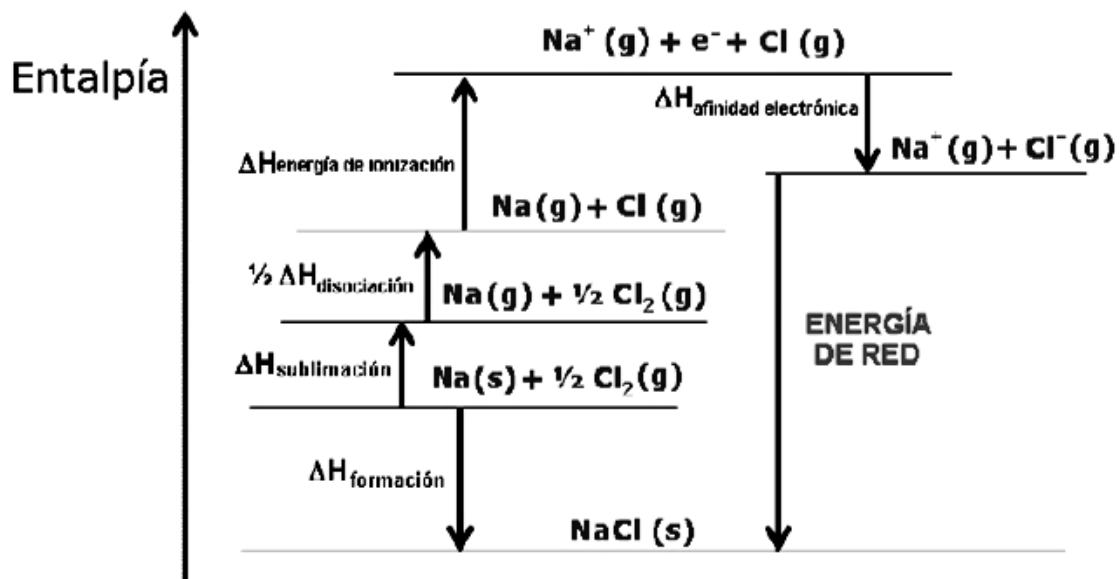
- **Afinidad electrónica:** energía que se desprende al ionizar un átomo de cloro.
- **Energía reticular:** energía que se desprende al formar la red cristalina (más estable).
- **Entalpía de formación:** la suma de todos los procesos anteriores.



Por la Ley de Hess

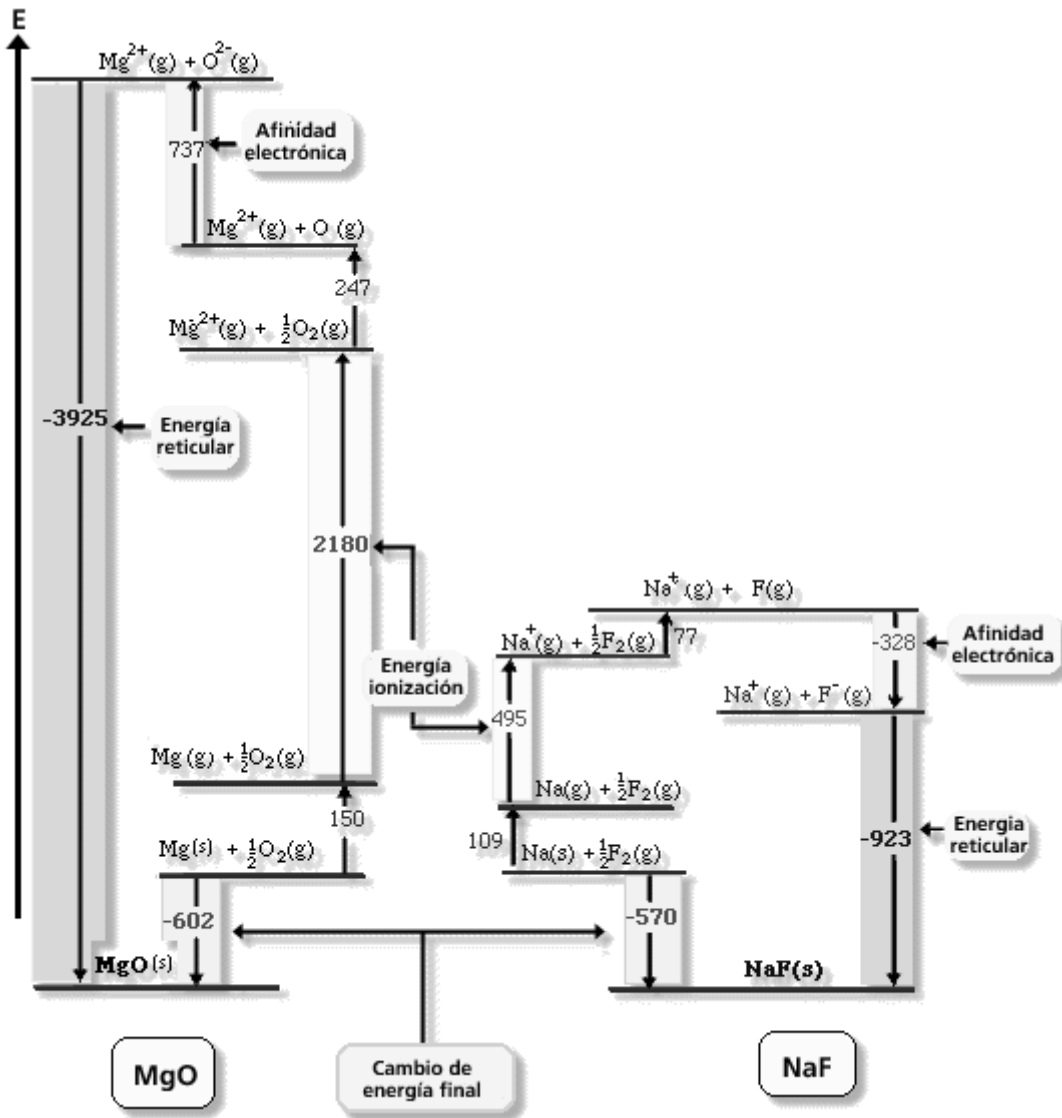
$$\Delta H_f^\circ = \Delta H_{\text{sub}}^\circ + \frac{1}{2} E_{\text{dis}} + \Delta H_{\text{PI}} + \Delta H_{\text{AE}} + \Delta E_{\text{ret}}$$

Otra manera de expresar el Ciclo de Born Haber



$$\Delta H_f = \Delta H_s + \frac{1}{2} \Delta H_d + \Delta H_i + \Delta H_a e + \Delta H_{\text{energía reticular}}$$

Otros ejemplos de Ciclo de Born Haber



Mediante el Ciclo de Born Haber se calcula la energía reticular mediante un modelo práctico, pero también existe el cálculo teórico de la energía reticular, mediante el llamado Ciclo de Born-Landé.

$$U = \frac{-N_A Z_1 Z_2 e^2}{d^0} (1 - 1/n)$$

número de Avogadro → N_A
 números de carga de los iones → $Z_1 Z_2$
 Es una constante, llamada de Madelung → $-N_A$
 distancia reticular → d^0
 parámetro que depende del tipo de red cristalina de que se trate. → $(1 - 1/n)$

Para este ciclo es necesario conocer:

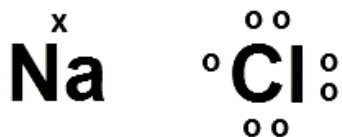
- .- El valor absoluto de las cargas de los iones (Z_1 y Z_2)
- .- La constante de Madelung para cada sustancia (M)
- .- Los coeficientes de Born para los iones: $n = (n_1 + n_2)/2$

Según se ve en la fórmula, a mayor carga de los iones mayor energía reticular y, cuanto menor es la distancia entre los núcleos, mayor es la energía reticular.

Esta ecuación tal como está dada es muy útil justamente en el momento de querer analizar cualitativamente la fuerza el enlace iónico, relacionando en este caso solamente la carga de los iones y la distancia internuclear, para el cálculo completo de la energía reticular a la fórmula hay que sumarle la constante de Coulomb = $9 \cdot 10^9 \text{ N} \cdot \text{m}^2/\text{C}^2$

El enlace iónico y la estructura de Lewis

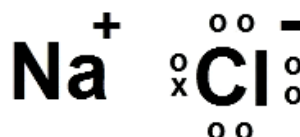
Símbolos de Lewis



Átomos por separado no cumplen la regla del octeto



Estructura de Lewis



Iones que en conjunto forman un cristal

Catión y anión sí cumplen la regla del octeto

Nota: el sodio queda sin electrones de valencia, pero en el siguiente nivel queda con 8, cumpliendo la regla del octeto.