

# Tema 8. Sólidos iónicos

## Definiciones

## Estructuras iónicas

Derivadas de CCP

Derivadas de HCP

Derivadas de empaquetamientos no compactos



## Racionalización de las estructuras iónicas

Principios de Laves

[http://www.chem.ox.ac.uk/icl/heyess/structure\\_of\\_solids/Strucsol.html](http://www.chem.ox.ac.uk/icl/heyess/structure_of_solids/Strucsol.html)

Reglas de Pauling

<http://www.univ-lemans.fr:80/enseignements/chimie/01/theme0.html>

## Aspectos energéticos

Energía reticular

Ciclo de Bohr-Haber

<http://chemed.chem.purdue.edu/genchem/topicreview/bp/ch7/sizeframe.html>

## Covalencia

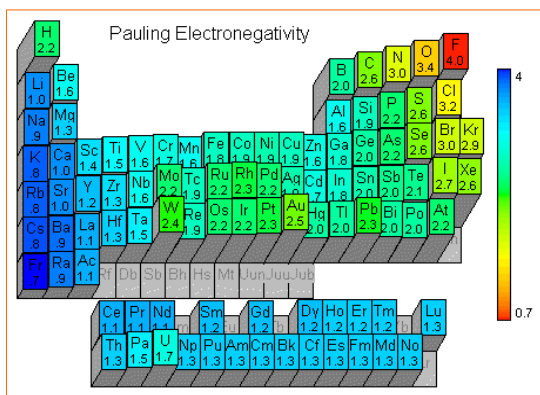
Reglas de Fajans



Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Definiciones

- El **enlace iónico** es una consecuencia de las interacciones electrostáticas entre iones, que se forman mediante la transferencia de uno o más electrones desde un átomo muy electropositivo a otro muy electronegativo. Generalmente, los electrones se transfieren para lograr la configuración electrónica de gas noble.



- Cuando un elemento muy electronegativo reacciona con otro muy electropositivo se forma un compuesto iónico (**sal**).
- Un **sólido iónico** es una distribución tridimensional ordenada de cationes y aniones que se mantienen unidos por la acción de fuerzas electrostáticas.
- La relación más simple representa la **fórmula unidad**.

Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Propiedades generales de los compuestos iónicos

### ↪ Estequiometría

Enlaces fuertes y omnidireccionales.

### ↪ Puntos de fusión y ebullición

Poseen puntos de fusión y ebullición altos.

### ↪ Dureza

Los cristales iónicos son duros.

### ↪ Fragilidad

Son frágiles.

### ↪ Solubilidad

Son solubles en disolventes polares.

### ↪ Conductividad

Conducen la electricidad en estado fundido (formación de iones libres).

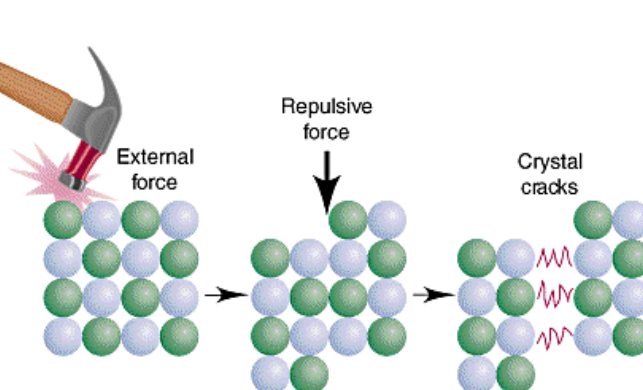


Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Fragilidad



A

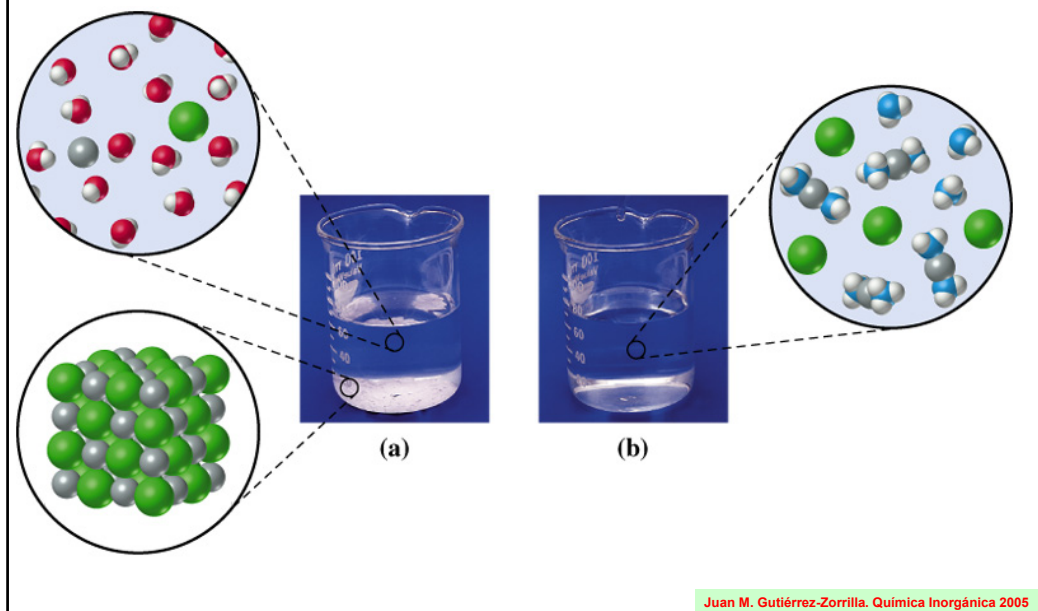


B

[http://www.chem.ufl.edu/~chm2040/Notes/Chapter\\_11/types.html](http://www.chem.ufl.edu/~chm2040/Notes/Chapter_11/types.html)

Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

# Solubilidad



## Reglas de solubilidad

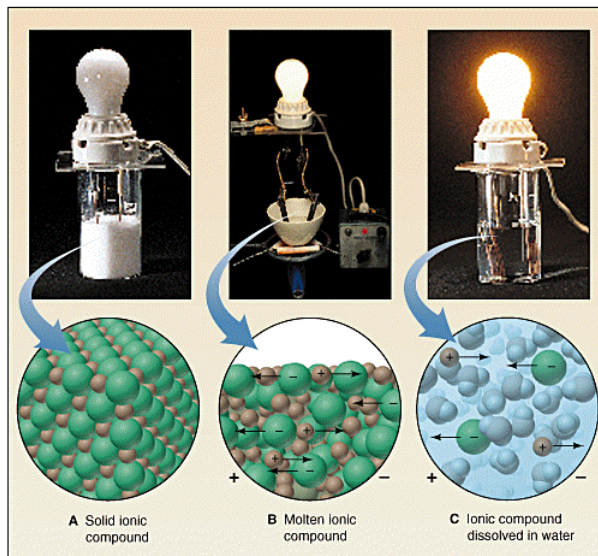
Category	Ions	Except with these ions	Examples
Soluble cations	Group 1 metallic ions and ammonium, $\text{NH}_4^+$	No exceptions	$\text{Na}_2\text{CO}_3$ , $\text{LiOH}$ , and $(\text{NH}_4)_2\text{S}$ are soluble.
Soluble anions	$\text{NO}_3^-$ and $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2^-$	No exceptions	$\text{Bi}(\text{NO}_3)_3$ , and $\text{Co}(\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2)_2$ are soluble.
Usually soluble anions	$\text{Cl}^-$ , $\text{Br}^-$ , and $\text{I}^-$	Soluble with some exceptions, including with $\text{Ag}^+$ and $\text{Pb}^{2+}$	$\text{CuCl}_2$ is water soluble, but $\text{AgCl}$ is insoluble.
	$\text{SO}_4^{2-}$	Soluble with some exceptions, including with $\text{Ba}^{2+}$ and $\text{Pb}^{2+}$	$\text{FeSO}_4$ is water soluble, but $\text{BaSO}_4$ is insoluble.
Usually insoluble anions	$\text{CO}_3^{2-}$ , $\text{PO}_4^{3-}$ , and $\text{OH}^-$	Insoluble with some exceptions, including with group 1 elements and $\text{NH}_4^+$	$\text{CaCO}_3$ , $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ , and $\text{Mn}(\text{OH})_2$ are insoluble in water, but $(\text{NH}_4)_2\text{CO}_3$ , $\text{Li}_3\text{PO}_4$ , and $\text{CsOH}$ are soluble.

## Conductividad

**Ionic compounds** conduct electricity when dissolved in water, because the dissociated ions can carry charge through the solution.

Ionic solids melt when the ions have enough energy to slide past one another. They are mobile and can act to carry electrical charge through the liquid..

**Molecular compounds** don't dissociate into ions and so don't conduct electricity in solution.

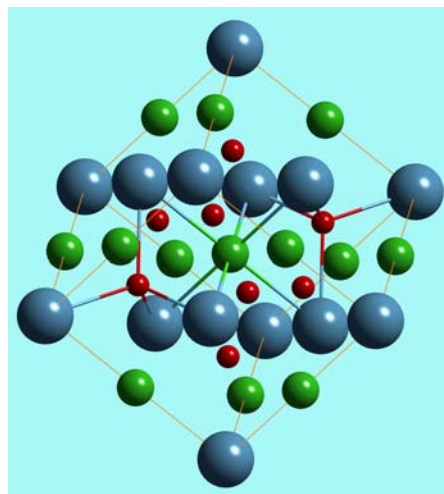
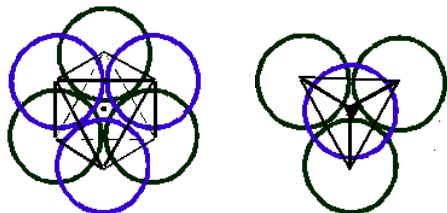


[http://www.chem.ufl.edu/~chm2040/Notes/Chapter\\_11/types.html](http://www.chem.ufl.edu/~chm2040/Notes/Chapter_11/types.html)

Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Estructuras basadas en empaquetamientos compactos

- Entre las capas de un empaquetamiento compacto existen huecos octaédricos y tetraédricos.
- Existen varias formas de construir estructuras iónicas a partir de un empaquetamiento compacto, según se ocupen total o parcialmente dichos huecos con cationes.



Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Estructuras binarias derivadas de empaquetamientos compactos

Fórmula	Tipo y ocupación de huecos	CCP	HCP
AB	Octaédrico (N)	Halita (NaCl)	NiAs
	Tetraédrico (N, T+ o T-)	Esfalerita (ZnS)	Wurtzita (ZnS)
AB <sub>2</sub>	Tetraédrico (2N)	Fluorita (CaF <sub>2</sub> ) Antifluorita (Na <sub>2</sub> O)	
AB <sub>3</sub>	Octaédrico (N) + Tetraédrico (2N)	Li <sub>3</sub> Bi	
A <sub>2</sub> B	Octaédrico (N/2, capas alternativamente llenas y vacías)	CdCl <sub>2</sub>	CdI <sub>2</sub>
	Octaédrico (N/2)	Anatasa (TiO <sub>2</sub> )	CaCl <sub>2</sub> Rutilo (TiO <sub>2</sub> )
A <sub>3</sub> B	Octaédrico (N/3, capas alternativamente 2/3 llenas y vacías)	YCl <sub>3</sub>	BiI <sub>3</sub>

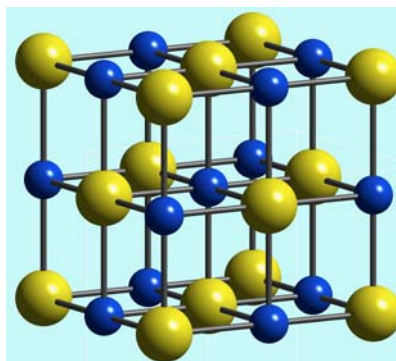
Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Estructuras basadas en un CCP (1)

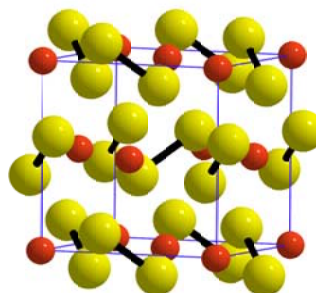
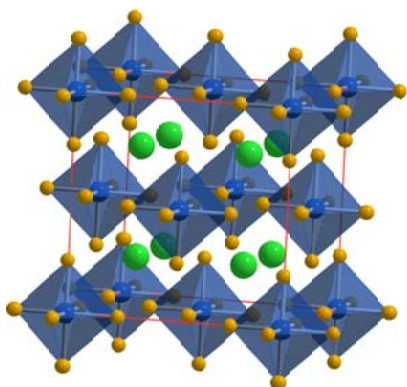
- En un empaquetamiento cúbico compacto (CCP) de **N** aniones existen **N** huecos octaédricos y **2N** huecos tetraédricos susceptibles de ser ocupados por cationes.
- Estructuras tipo: halita, antifluorita (antifluorita), blenda de cinc, ...

### ➤ Halita (NaCl)

- CCP de iones Cl<sup>-</sup> + iones Na<sup>+</sup> en todos los huecos octaédricos: estequiometría MX.
- Red fcc: Cl (0, 0, 0); Na (0.5, 0, 0).
- Z: 4 NaCl
- Coordinación: octaédrica (6:6).
- Compuestos con estructura tipo NaCl:
  - Haluros alcalinos (mayoría).
  - Óxidos (calcogenuros) de metales alcalinotérreos.
  - Nitruros carburos y haluros.
- Estructuras relacionadas: FeS<sub>2</sub> y SrO<sub>2</sub>

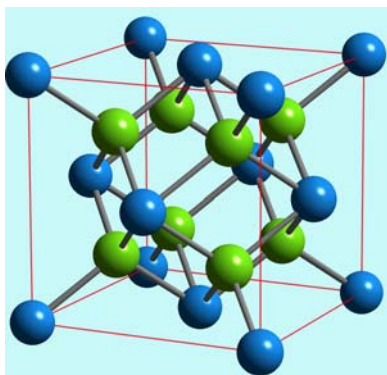


Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005



Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Estructuras basadas en un CCP (2)



### ⇒ Fluorita ( $\text{CaF}_2$ ); Antifluorita ( $\text{Na}_2\text{O}$ )

- CCP de iones  $\text{Ca}^{2+}$  ( $\text{O}^{2-}$ ) + iones  $\text{F}^-$  ( $\text{Na}^+$ ) en todos los huecos tetraédricos: estequiometría  $\text{MX}_2$  ( $\text{M}_2\text{X}$ ).
- Red fcc: Ca (0, 0, 0); 2 F (0.25, 0.25, 0.25) (0.75, 0.75, 0.75).
- Z: 4  $\text{CaF}_2$
- Coordinación: Ca (8: cúbica);  
F (4: tetraédrica).

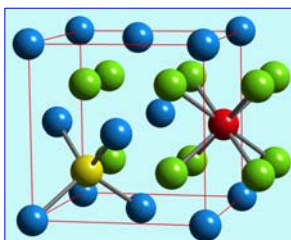
### ⇒ Compuestos con estructura tipo $\text{CaF}_2$ :

- Fluoruros de cationes divalentes voluminosos.
- Óxidos de cationes tetravalentes.

### ⇒ Compuestos con estructura tipo $\text{Na}_2\text{O}$ :

- Óxidos / calcogenuros de metales G1.

### ⇒ Estructuras complejas relacionadas: $\text{K}_2\text{PtCl}_6$



Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

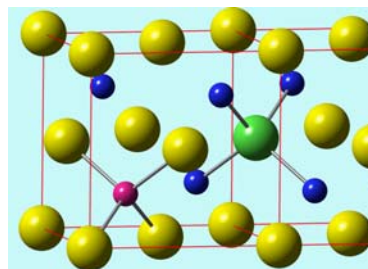
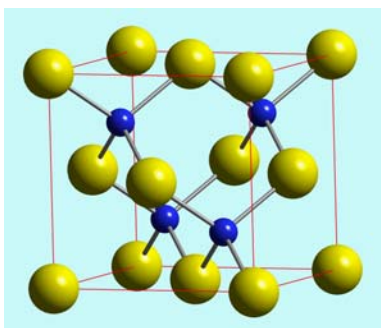
## Estructuras basadas en un CCP (3)

### ⇒ Esfalerita, blenda de cinc (ZnS)

- CCP de iones  $S^{2-}$  + iones  $Zn^{2+}$  en la mitad de los huecos tetraédricos (sólo T+ o T-): estequiometría MX.
- Red fcc: S (0, 0, 0); Zn (0.25, 0.25, 0.25).
- Z: 4 ZnS
- Coordinación: tetraédrica (4:4).

### ⇒ Compuestos con estructura tipo ZnS:

- cationes polarizantes ( $Cu^+$ ,  $Ag^+$ ,  $Cd^{2+}$ ,  $Ga^{3+}$ ...) + aniones polarizables ( $I^-$ ,  $S^{2-}$ ,  $P^{3-}$ )



Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

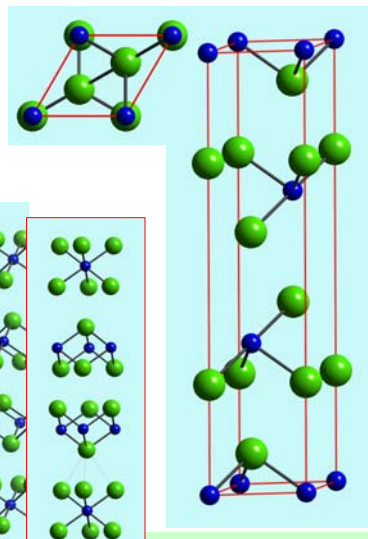
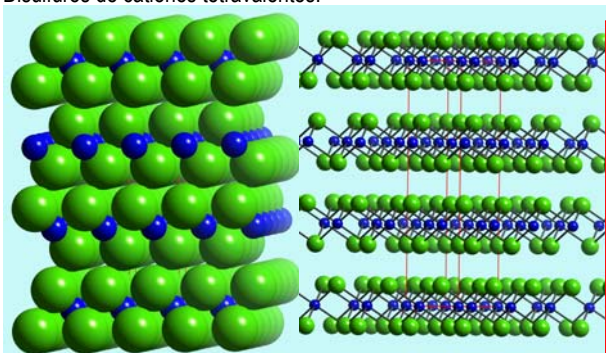
## Estructuras basadas en un CCP (4)

### ⇒ Cloruro de cadmio ( $CdCl_2$ )

- CCP de iones  $Cl^-$  + iones  $Cd^{2+}$  en huecos octaédricos de capas alternas, ( $MX_2$ ).
- Red hexagonal R: Cd (0, 0, 0); Cl ( $2/3$ ,  $1/3$ ,  $1/12$ ).
- Z: 3  $CdCl_2$
- Coordinación: Cd (6: octaédrica) Cl (3: base piramidal).

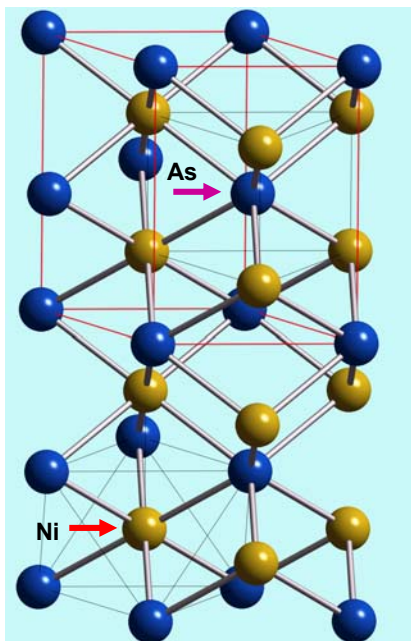
### ⇒ Compuestos con estructura tipo $CdCl_2$

- Cloruros de cationes polarizantes.
- Disulfuros de cationes tetravalentes.



Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Estructuras basadas en un HCP (1)



### ⇒ Arseniuro de níquel (NiAs)

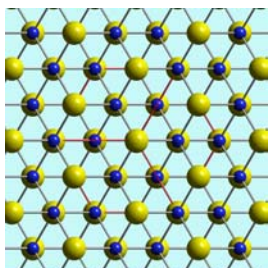
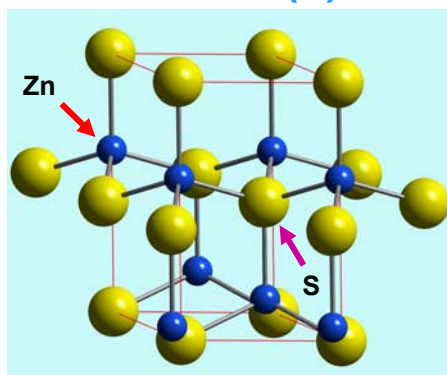
- HCP de iones As + iones Ni en todos los huecos octaédricos: estequiometría MX.
  - Red hexagonal P:
    - 2 As: (0, 0, 0) ((2/3, 1/3, 0.5);
    - 2 Ni: (1/3, 2/3, 0.25) (1/3, 2/3, 0.75).
  - Z: 2 NiAs
  - Coordinación: Ni (6: octaédrica) As (6: prisma trigonal).
- ⇒ Compuestos con estructura tipo NiAs:
- calcogenuros y As, Sb y Bi de metales de transición.

Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Estructuras basadas en un HCP (2)

### ⇒ Wurtzita (ZnS)

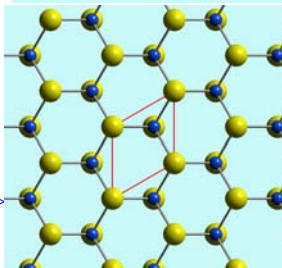
- Red hexagonal P:
  - 2 S: (0, 0, 0) ((2/3, 1/3, 0.5);
  - 2 Zn: (2/3, 1/3, 0.125) (0, 0, 0.625).
- HCP de iones S<sup>2-</sup> + iones Zn<sup>2+</sup> en la mitad de los huecos tetraédricos (sólo T+ o T-): estequiometría MX.
- Z: 2 ZnS
- Coordinación: tetraédrica (4:4).



blenda [111]

direcciones de empaquetamiento compacto

wurtzita [001]



Química Inorgánica 2005

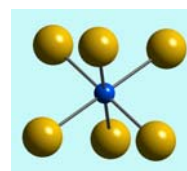
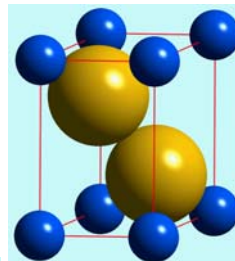
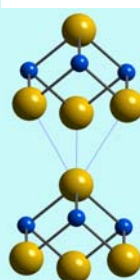
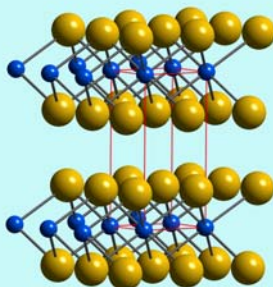
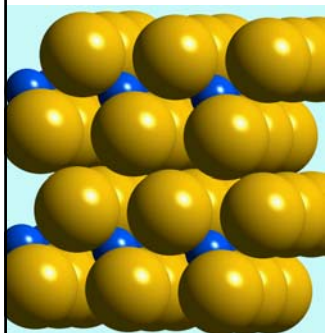
## Estructuras basadas en un HCP (3)

### ⇒ Yoduro de cadmio ( $\text{CdI}_2$ )

- HCP de iones  $\text{I}^-$  + iones  $\text{Cd}^{2+}$  en los huecos octaédricos de capas alternas ( $\text{MX}_2$ ).
- Red hexagonal P: Cd: (0, 0, 0); I: (2/3, 1/3, 0.25).
- Z: 1  $\text{CdI}_2$
- Coordinación: Cd (6: octaédrica) I (3: base piramidal).

### ⇒ Compuestos con estructura tipo $\text{Cd}_2\text{I}$ :

- Ioduros, bromuros y cloruros de cationes polarizantes.
- Dicalcogenuros de cationes tetravalentes.



Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

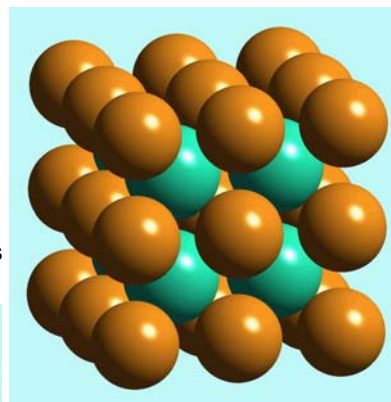
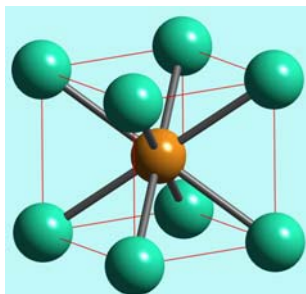
## Estructuras basadas en empaquetamientos no compactos

### ⇒ Cloruro de cesio ( $\text{CsCl}$ )

- CSP de  $\text{Cl}^-$  + iones  $\text{Cs}^+$  en los huecos cúbicos.
- Red cúbica P: Cl (0, 0, 0); Cs (0.5, 0.5, 0.5).
- Z: 1  $\text{CsCl}$
- Coordinación: cúbica (8:8).

### ⇒ Compuestos con estructura tipo $\text{CsCl}$ :

- Cloruros, bromuros y yoduros de cationes voluminosos.



Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

# Racionalización de las estructuras iónicas

## Principios de Laves

- **Principio del espacio**  
El espacio se ocupa de la manera más eficiente posible.
- **Principio de la simetría**  
La simetría que se adopta es la más alta posible.
- **Principio de la conexión**  
El número de conexiones posibles entre componentes será el más alto posible.



Fritz Laves (1906-1978)

Laves, 1955, "Crystal Structure and Atomic Size"

Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

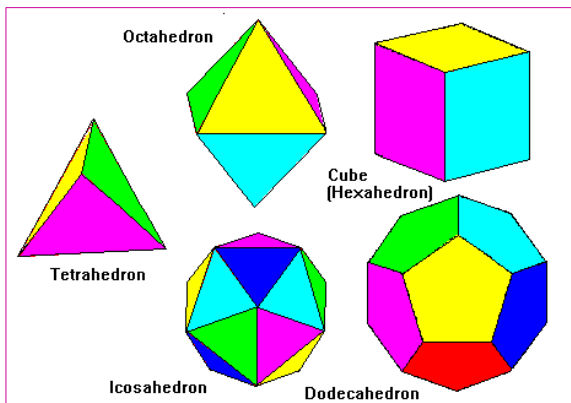
## Reglas de Pauling (1929)

### ➤ Regla 1. Poliedro de coordinación

Alrededor de cada catión se forma un poliedro de coordinación de aniones y viceversa. Sólo será estable si el catión está en contacto con cada uno de sus aniones vecinos.

Los cristales iónicos se pueden considerar como conjuntos de poliedros unidos.

La distancia catión-anión se considera que es la suma de los radios iónicos correspondientes.



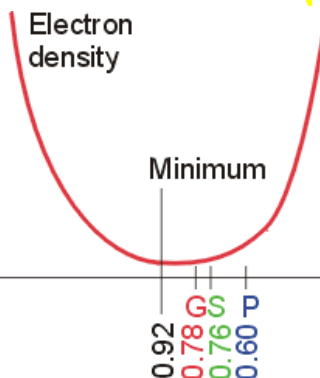
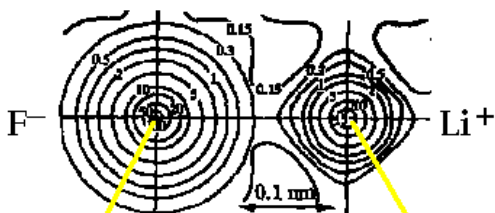
<http://www.chemistry.ohio-state.edu/~woodward/ch754/pauling.htm>

<http://www.tulane.edu/~sanelson/geol211/paulingsrules.htm>

Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

# Radio iónicos

- El radio iónico se refiere a la distancia de máxima aproximación a otro ion.
- El radio cristalino de un ion dado no es necesariamente constante en todos los cristales que forme dicho ion. Depende del número de coordinación.



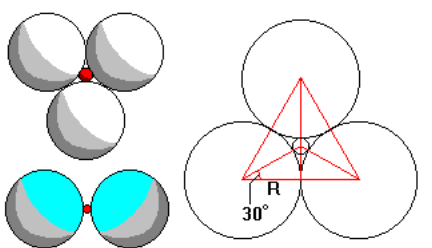
## TENDENCIAS

- En elementos s y p el radio aumenta con Z.
- En una serie isoelectrónica de cationes el radio disminuye con la carga.
- Para un mismo elemento:
  - el radio disminuye al aumentar la carga.
  - el radio aumenta con el número de coordinación.
- Contracción lantánida.

Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Relación de radios y poliedro de coordinación (1)

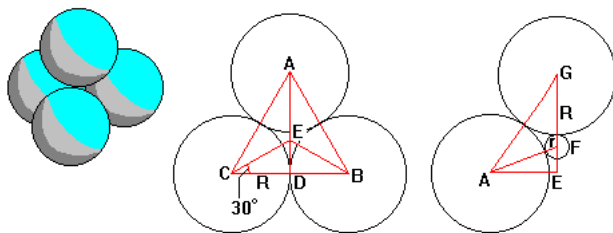
- En un compuesto  $MX_n$ , el poliedro de coordinación viene determinado por el tamaño relativo del catión (M) y el anión (X).



$$(r_M + r_X) \cos 30 = r_X$$

$$\left(1 + \frac{r_M}{r_X}\right) \frac{\sqrt{3}}{2} = 1$$

$$\frac{r_M}{r_X} = \frac{2}{\sqrt{3}} - 1 = 0.155$$



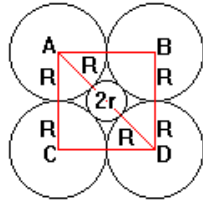
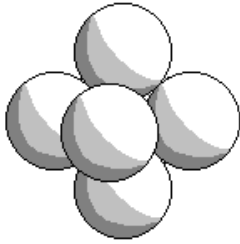
$$(r_M + r_X) \cos 35.26 = r_X$$

$$\left(1 + \frac{r_M}{r_X}\right) \sqrt{\frac{2}{3}} = 1$$

$$\frac{r_M}{r_X} = \sqrt{\frac{3}{2}} - 1 = 0.225$$

Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

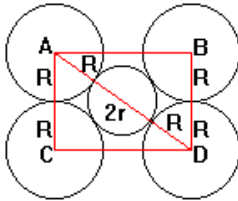
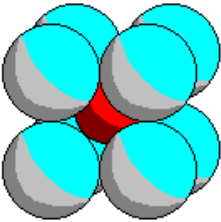
## Relación de radios y poliedro de coordinación (2)



$$(r_M + r_X) \cos 45 = r_X$$

$$\left(1 + \frac{r_M}{r_X}\right) \frac{\sqrt{2}}{2} = 1$$

$$\frac{r_M}{r_X} = \sqrt{2} - 1 = 0.414$$



$$(r_M + r_X) \operatorname{sen} 35.26 = r_X$$

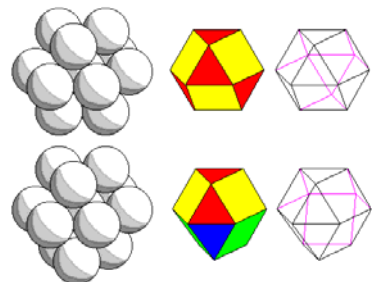
$$\left(1 + \frac{r_M}{r_X}\right) \frac{1}{\sqrt{3}} = 1$$

$$\frac{r_M}{r_X} = \sqrt{3} - 1 = 0.732$$

Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Relación de radios y poliedro de coordinación (3)

Tipo de coordinación	N.C.	$r_M / r_X$	Estructuras tipo
HCP, CCP	12	$> 1$	hcp o ccp
Cúbica	8	1.00 - 0.73	CsCl
Octaédrica	6	0.73 - 0.42	NaCl
Tetraédrica	4	0.42 - 0.23	ZnS
Trigonal	3	0.23 - 0.16	
Lineal	2	$< 0.16$	



## Reglas de Pauling

### ➤ Regla 2. Principio electrostático de valencia ("Fuerza de enlace")

En una estructura iónica estable, la carga sobre un ion debe estar compensada por la suma de las **fuerzas de enlace electrostático** (f.e.e.) a los iones de su poliedro de coordinación.

Un cristal iónico debe ordenarse de manera que se conserve la electroneutralidad local.

Para un catión  $M^{m+}$  rodeado de  $n$  aniones  $X^{x-}$  la fuerza de un enlace electrostático se define como:

$$f.e.e. = \frac{m}{n}$$

Para cada anión (catión) la suma de las fuerzas de enlace electrostática de los cationes (aniones) que le rodean debe compensar la carga negativa (positiva) sobre el anión (catión).

$$\sum \frac{m}{n_c} = x \quad \sum \frac{x}{n_a} = m$$

Para un compuesto binario  $A_xB_y$  los números de coordinación de A y B están en la relación  $y:x$ .

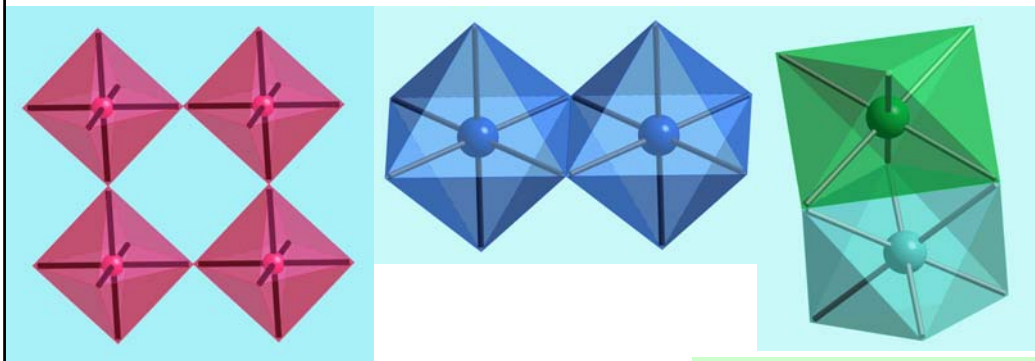
Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Reglas de Pauling

### ➤ Regla 3. Compartición de poliedros

La estabilidad de estructuras con diferentes tipos de uniones entre poliedros es:  
**vértice compartido > arista compartida > cara compartida**

El efecto es mayor cuanto mayor sea la carga del catión y menor su número de coordinación.



Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Reglas de Pauling

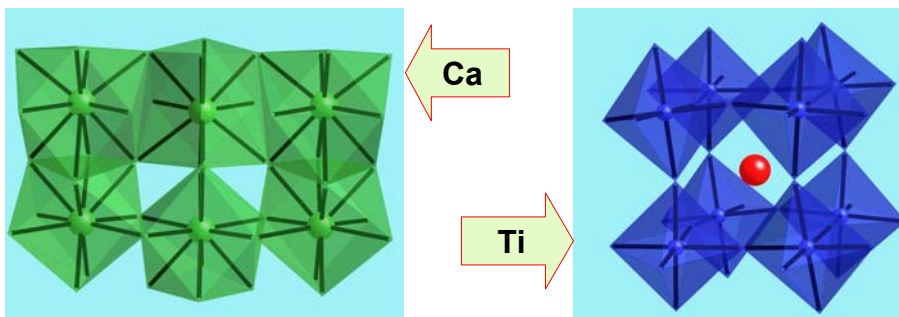
### Regla 4. Evasión de cationes

En una estructura cristalina que contiene varios cationes, aquellos con valencia elevada y bajo número de coordinación tienden a NO compartir elementos del poliedro entre sí.

En la perovskita,  $\text{CaTiO}_3$ :

$\text{Ca}^{\text{II}}$  coordinación 12 ( $\text{CaO}_{12}$ ) cubooctaedros que comparten CARAS

$\text{Ti}^{\text{IV}}$  coordinación 6 ( $\text{TiO}_6$ ) octaedros que comparten VÉRTICES



Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

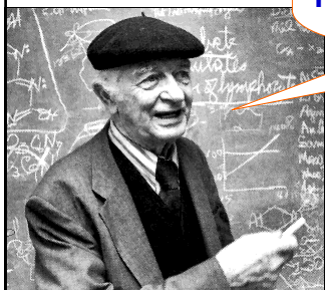
## Reglas de Pauling

### Regla 5. Principio de parsimonia (homogeneidad ambiental)

El número de tipos constituyentes esencialmente diferentes en un cristal tiende a ser pequeño.

Entornos similares para átomos químicamente similares.

**Todas las reglas tienden a maximizar las atracciones catión-anión y minimizar las repulsiones anión-anión y catión-catión**



Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Energía reticular (1)

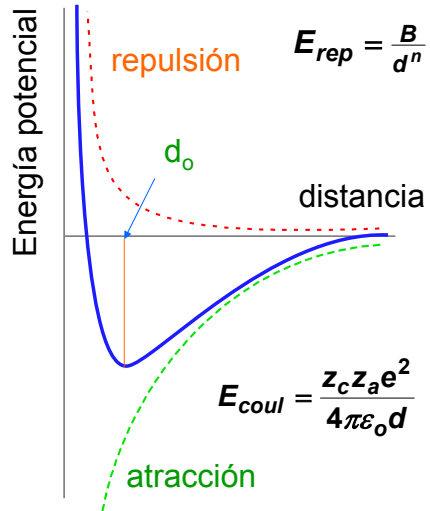
La **energía reticular** se define como la energía liberada cuando los iones gaseosos, necesarios para la formación de **un mol** de producto, se aproximan desde el infinito hasta las posiciones que ocupan dentro de la red cristalina de dicho producto.

Energía reticular de un **par iónico**:

$$U = E_{coul} + E_{rep} = \frac{z_c z_a e^2}{4\pi\epsilon_0 d} + \frac{B}{d^n}$$

Mínimo de energía en la distancia de equilibrio  $d_0$ :

$$U_0 = \frac{z_c z_a e^2}{4\pi\epsilon_0 d_0} \left( 1 - \frac{1}{n} \right)$$



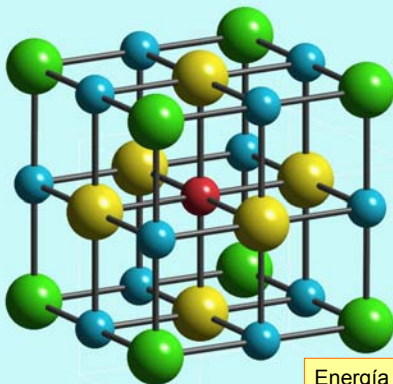
Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Energía reticular (2)

Para determinar la energía reticular de un cristal hay que tener en cuenta todas las interacciones coulombianas presentes (repulsiones y atracciones).

Energía coulombiana de un **ion** en un cristal

$$E_{coul} = 6 \times \frac{z_c z_a e^2}{4\pi\epsilon_0 d_0} - 12 \times \frac{z_c z_a e^2}{4\pi\epsilon_0 d_0 \sqrt{2}} + 8 \times \frac{z_c z_a e^2}{4\pi\epsilon_0 d_0 \sqrt{3}} - 6 \times \frac{z_c z_a e^2}{4\pi\epsilon_0 d_0 2} + \dots$$



$$E_{coul} = \frac{z_c z_a e^2}{4\pi\epsilon_0 d_0} \left( 6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{\sqrt{4}} + \frac{24}{\sqrt{5}} - \dots \right)$$

A: constante de Madelung = 1.74758

$$E_{coul} = \frac{z_c z_a e^2 A}{4\pi\epsilon_0 d_0}$$

+  $E_{rep}$

$$U_0 = \frac{z_c z_a e^2 A}{4\pi\epsilon_0 d_0} \left( 1 - \frac{1}{n} \right)$$

Energía reticular de un ion en un cristal

Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Madelung

### Estequiometría MX

ZnS 1.63805 1.63805

NaCl 1.74756 1.74756

CsCl 1.76167 1.76167

### Estequiometría MX<sub>2</sub>

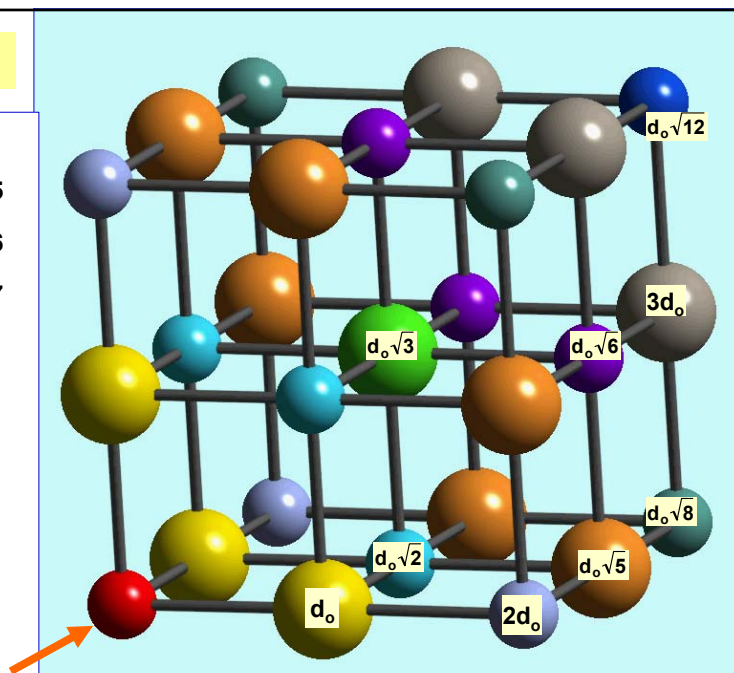
SiO<sub>2</sub> 2.201 1.467

TiO<sub>2</sub> 2.408 1.605

CaF<sub>2</sub> 2.51939 1.6796

### Estequiometría M<sub>2</sub>X<sub>3</sub>

Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 4.1719 1.668



<http://www.chemistry.ohio-state.edu/~woodward/ch754/ionicbonding.htm>

Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Energía reticular (3)

- ⇒ **Ecuación de Born-Landé** : Para determinar la energía reticular es necesario multiplicar  $U_o$  por el número de Avogadro:

$$U_r = U_o N_A = \frac{z_c z_a e^2 A N_A}{4\pi\epsilon_o d_o} \left(1 - \frac{1}{n}\right) = \frac{N_A e^2}{4\pi\epsilon_o} \frac{z_c z_a A}{d_o} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

$$U_r = \frac{138860 z_c z_a A}{d_o} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

Exponente de Born, n	5	7	9	10	12	14
Nº cuántico principal, n	1	2	3	4	5	6
Electrones	2	10	18-28	36-46	57-78	86
Tipo de ion	[He]	[Ne]	[Ar]	[Kr]	[Xe]	[Rn]

- ⇒ **Ecuación de Born-Meyer**

$$U_r = \frac{138860 z_c z_a A}{d_o} \left(1 - \frac{\rho}{d_o}\right)$$

- ⇒ **Ecuación de Kapustinskii**

$$U_r = \frac{121400 v z_c z_a}{r_c + r_a} \left(1 - \frac{34.5}{r_c + r_a}\right)$$

$d_o$  (pm),  $U_r$  (kJ/mol)  
 $r_c, r_a$  (radios iónicos NC 6)  
 $v$  (nº de iones en la fórmula)

Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

## Ciclo de Born-Haber

- No es posible medir la energía reticular directamente.
- Se deduce a partir de un ciclo termodinámico (Ley de Hess).

Para un haluro MX:

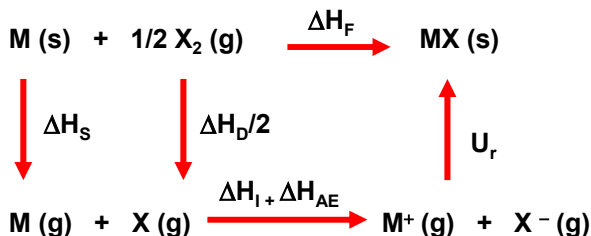
1. Atomizar los elementos en estado estándar:



2. Ionizar los átomos gaseosos:



3. Disponer los iones gaseosos en una red cristalina:



Valor experimental de la energía reticular

$$\Delta H_f = \Delta H_S + \frac{1}{2} \Delta H_D + \Delta H_I + \Delta H_{AE} + U_r \quad \rightarrow \quad U_r = \Delta H_f - \left( \Delta H_S + \frac{1}{2} \Delta H_D + \Delta H_I + \Delta H_{AE} \right)$$

Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005

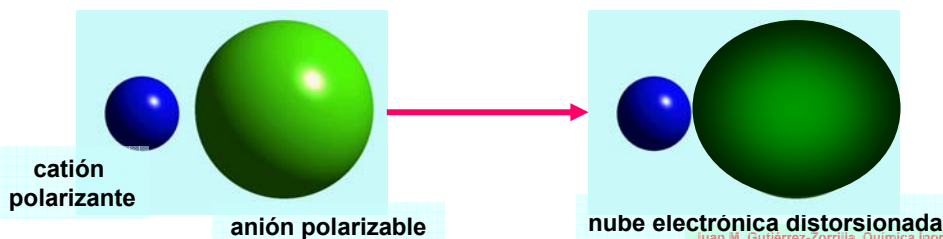
## Polarizabilidad. Reglas de Fajans

- Los compuestos iónicos presentan una **contribución covalente** considerable a su enlace cuando contienen cationes polarizantes.

- **Cationes polarizantes:** son cationes capaces de distorsionar la nube electrónica del anión.

### Reglas de Fajans

- Los cationes pequeños con carga elevada son muy **polarizantes**.
- Los aniones grandes con carga elevada son muy **polarizables**.
- La polarización se ve favorecida en cationes que no presentan estructura electrónica de gas noble:  $\text{Ag}^+$ ,  $\text{Cu}^+$ ,  $\text{Hg}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{Tl}^+$  ...



Juan M. Gutiérrez-Zorrilla. Química Inorgánica 2005