

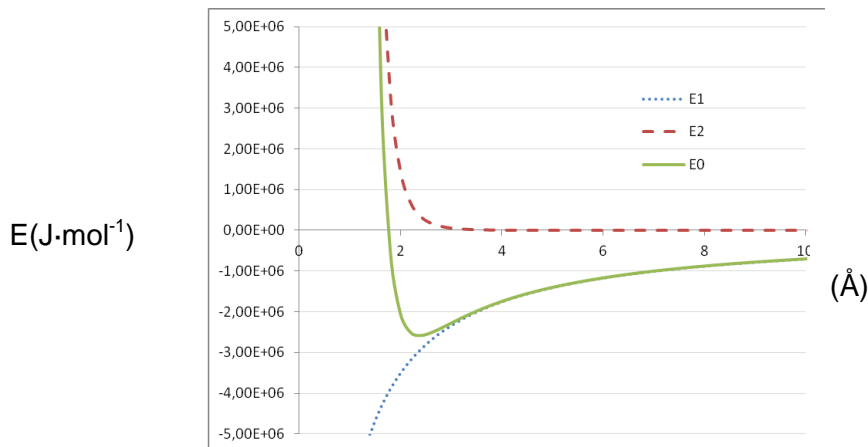
Solido ionikoak



Lan hau Creative Commons-en Nazioarteko 3.0 lizentziaren mendeko Azterketa-Ez komertzial-Partekatu lizentziaren mende dago. Lizentzia horren kopia ikusteko, sartu <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/es/> helbidean.

F. Solido ionikoak

- [1] Ondorengo grafikoan E0 dago irudikatuta r-ren aurrean CaF₂ solido ionikoan (E0=energia potentziala, eta r=kontrako zeinua duten ioien arteko distantzia)



¿Zer dira E1 eta E2?

Grafikoa erabiliz, determinatu, gutxi gora behera, sare-energia eta lotura-distantzia CaF₂ solido ionikoan

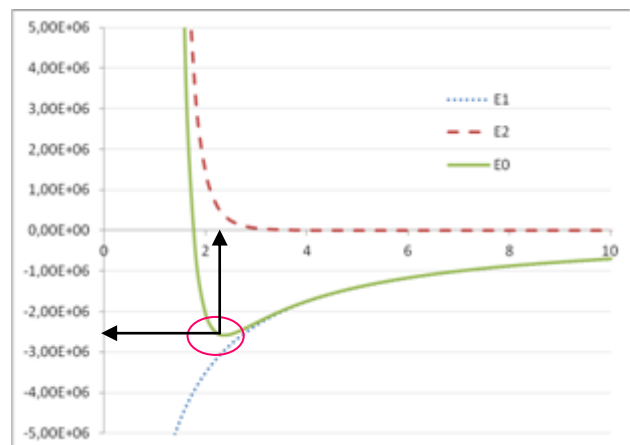
ERANTZUNA

E1, ioien artean dauden erakarpen eta aldarapen guztiei esker dagoen potentziala. Honek $-\infty$ -rantz jotzen du, r distantziak 0-rantz jotzen duenean

E2, geruza elektronikoen artean dauden aldarapenei esker dagoen potentziala. Honek $+\infty$ -rantz jotzen du, r distantziak 0-rantz jotzen duenean

$$r_0 = 2.2 \text{ \AA}$$

$$E_s = -2.5 \cdot 10^6 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} = 2500 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$



- [2] Born-Haber-en ziklo bat diseinatu, CaF₂ solidoaren sare-energia kalkulatzeko.

ERANTZUNA

ΔH_f =CaF₂(s)-aren formazio-entalpia

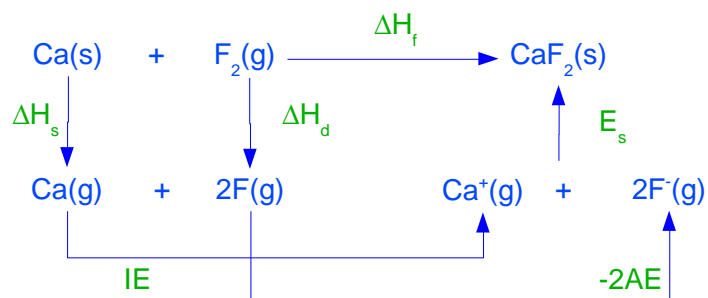
ΔH_s =Ca(s)-aren sublimazio-entalpia

ΔH_d =F₂(s)-aren disoziazio-entalpia

IE=Ca(g)-aren ionizazio energia

AE=F(g)-aren afinitate elektronikoa

E_s =CaF₂(s)-aren sare-energia



$$\Delta H_f = \Delta H_s + \Delta H_d + IE - 2AE + E_s$$

F. Solido ionikoak

- [3] Born-en ekuazioaren bidez, ioien arteko interakzio elektrostatikoei dagokien energia potentziala (E_1) irudikatu ioien arteko distantziaren arabera, NaCl solido ionikoan. Landé-ren proposamenaren bidez, ioien geruza elektronikoen arteko aldarapenei dagokien energia potentziala (E_2) irudikatu ioien arteko distantziaren arabera, NaCl solido ionikoan. B-ren balioa kalkulatu. Energia bien batuketa irudikatu ($E_0=E_1+E_2$), eta sare-energia determinatu. Grafiko berean irudikatu E_1 , E_2 eta E_0 .

Datuak:

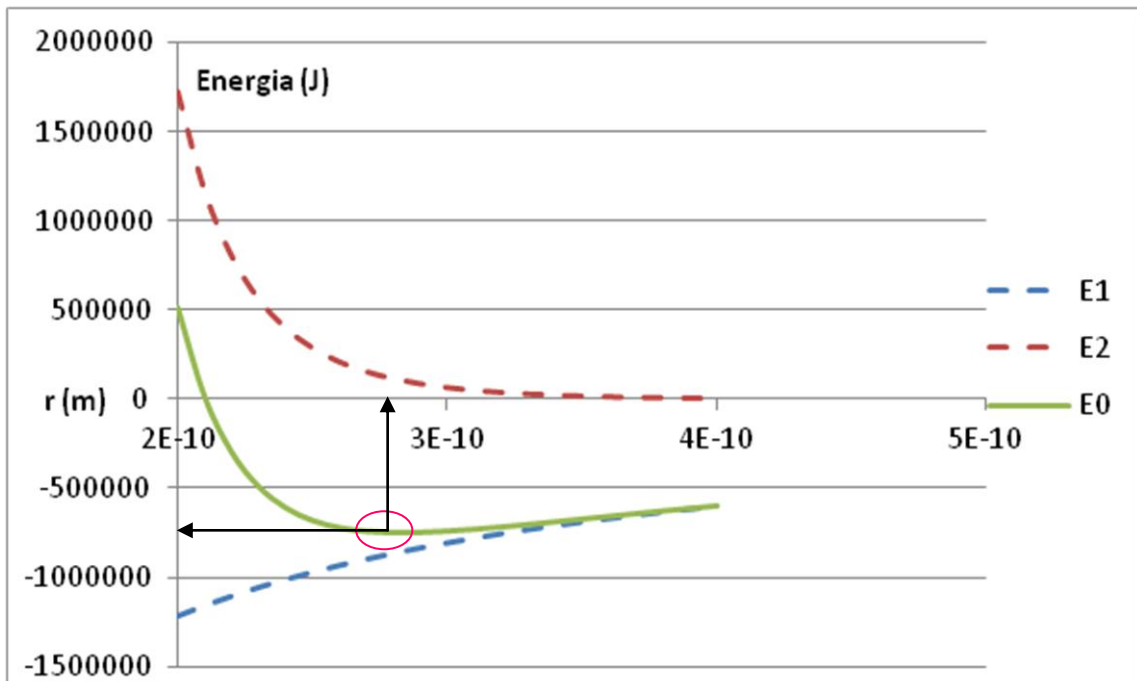
	NaCl	CaF ₂	MgS
Lotura-distantzia, r_0	2.83 Å	2.37 Å	2.56 Å
Madelung-en konstantea, A	1.748	2.5194	1.748
Born-en berretzailea, n	8	8	8

$$E_0 = -K \frac{N_A A e^2 |Z|^2}{r} + \frac{N_A B}{r^n} \quad E_1 = -K \frac{N_A A e^2 |Z|^2}{r} \quad E_2 = \frac{N_A B}{r^n} \quad B = \frac{K A e^2 |Z|^2 r_0^{n-1}}{n}$$

$$K = 9 \cdot 10^9 \text{ N} \cdot \text{m} \cdot \text{C}^{-2}$$

$$N_A = 6.023 \cdot 10^{23}$$

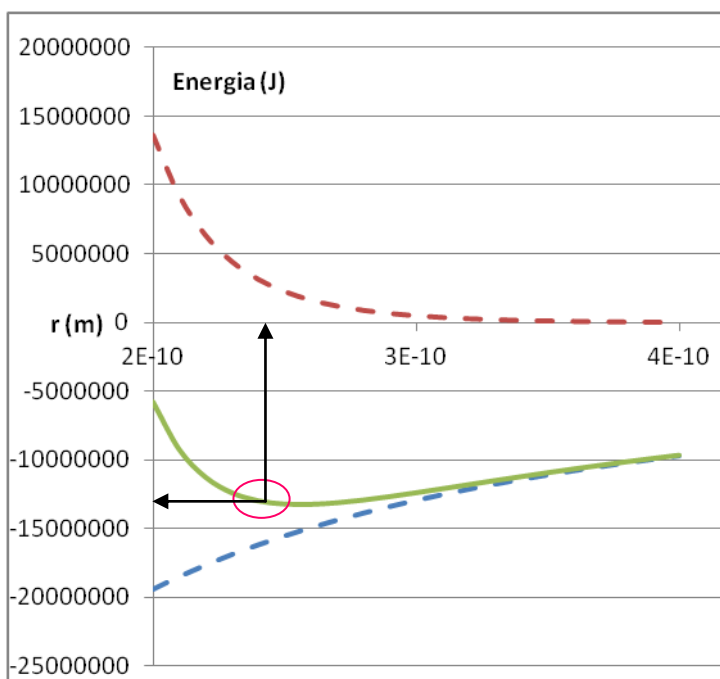
ERANTZUNA



$$E_s = -742.33 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

F. Solido ionikoak

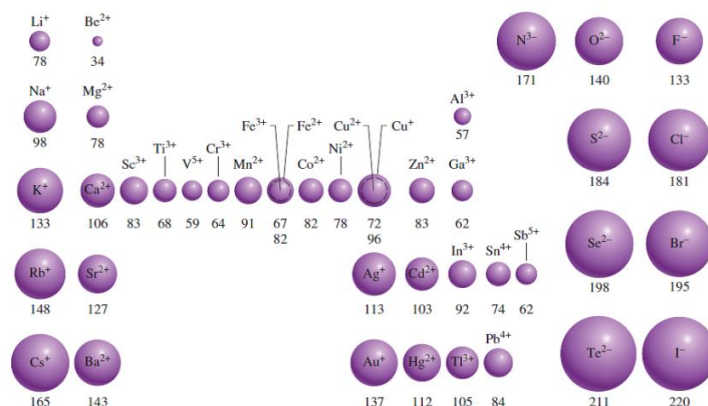
[4] Errepikatu dena MgS solido ionikoan.



$$E_s = -13233.46 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

[5] Erradio ionikoen arteko proportzioa r^+/r^- (r^+ katioiaren erradioa da eta r^- anioiaren erradioa da) baliagarria da solido ionikoen hartzen duten egitura kristalinoa aurreikusteko, baldin eta onartzen baita egitura ionikoetan esfera deformaezinak paketatzen direla.

Ondorengo irudian hainbat ioi mononuklearren erradio ionikoak (pm) ikus daitezke.



Aurreikuste teorikoak ondorengo taulan ikus daitezke, eta bai AB sare kubiko motak (alegia, 1.1 estekiometria dutenak).

Koordinazio-zenbakia	8	6	4
r^+/r^- minimoa	0.732	0.414	0.225
Koordinazio-esfera	kubikoa	oktaedrikoa	tetraedrikoa
AB sare kubikoa	CsCl	NaCl	ZnS (blenda)

F. Solido ionikoak

- a) Ondorengo taulan ikus daitezke egitura kubikoa duten hainbat solido ioniko. Ondorengo taula bete, **ereduari** jarraituz:

Solidoa	r^+ (pm)	r^- (pm)	r^+/r^-	r^+/r^- araberako sare-mota
BaO	143	140	1.02	CsCl
BaS				
BeO				
CsF				
CsI				
FeO				
LiCl				
LiF				
Lil				
MgO				
MgS				
Nal				
SrO				
SrS				

- b) Zuk egindako esleipena eta errealitatea konpara itzazu. Jakiteko zein den sare errealia ondorengo web orrialdea kontsulta dezakezu.

<http://www.webelements.com/compounds/>

Ondorengo taula bete:

Solidoa	r^+/r^- araberako sare-mota	Sare-mota errealia
BaO		
BaS		
BeO		
CsF		
CsI		
FeO		
LiCl		
LiF		
Lil		
MgO		
MgS		
Nal		
SrS		
SrO		

- c) Zeintzuk dira r^+/r^- araberako sare-mota ez daukaten solidoak?
 d) Taulako hainbat solidotan koordinazio-zenbaki teorikoa 8 da, eta errealia, berriz, 6. Zein da?
 e) Zelan azal dezakezu aurreko koherentziarik eza?
 f) Taulako solido batetan koordinazio-zenbaki teorikoa 4 da, eta errealia, berriz, 6. Zein da?
 g) Zelan azal dezakezu aurreko koherentziarik eza?
 h) Solido gehienak sare-mota berean kristaltzen dira. Zein da sare-mota hori?
 i) Zer ondorio ateratzen duzu aurreko erantzunetik?

F. Solido ionikoak

ERANTZUNA:

a) Taula

Solidoa	r^+ (pm)	r^- (pm)	r^+/r^-	r^+/r^- araberako sare-mota
BaO	143	140	1.02	CsCl
BaS	143	184	0.78	CsCl
BeO	34	140	0.24	ZnS (blenda)
CsF	165	133	1.24	CsCl
CsI	165	220	0.75	CsCl
FeO	82	140	0.59	NaCl
LiCl	78	181	0.43	NaCl
LiF	78	133	0.59	NaCl
Lil	78	220	0.35	ZnS (blenda)
MgO	78	140	0.56	NaCl
MgS	78	184	0.42	NaCl
Nal	98	220	0.45	NaCl
SrO	127	140	0.91	CsCl
SrS	127	184	0.69	NaCl

b) Taula

Solidoa	r^+/r^- araberako sare-mota	Sare-mota erreala
BaO	CsCl	NaCl
BaS	CsCl	NaCl
BeO	ZnS (blenda)	ZnS (blenda)
CsF	CsCl	NaCl
CsI	CsCl	CsCl
FeO	NaCl	NaCl
LiCl	NaCl	NaCl
LiF	NaCl	NaCl
Lil	ZnS (blenda)	NaCl
MgO	NaCl	NaCl
MgS	NaCl	NaCl
Nal	NaCl	NaCl
SrS	NaCl	NaCl
SrO	CsCl	NaCl

- c) r^+/r^- araberako sare-mota ez daukaten solidoak BaO, BaS, CsF, Lil eta SrO dira
d) BaO, BaS, CsF eta SrO solidotan koordinazio-zenbaki teorikoa 8 da, eta erreala, berriz, 6.
e) BaO, BaS, CsF eta SrO solidotan katioi bigunak daude, beraz polarizazio-efektuanabaria da.
f) Lil solidoan koordinazio-zenbaki teorikoa 4 da, eta erreala, berriz, 6.
g) Lil, oso katioi txikia eta oso anioi handia daude; beraz, kobalentetasun-maila handiada.

Erantzuna:

- h) Solido gehienak kristaltzen dira NaCl sare-mota berean
i) NaCl sare-motan koordinazio-zenbakia 6 da; beraz, hori da nolabaiteko koordinazio-zenbakirik ioinikoena.