

El Ciclo de Born - Haber

Prof. S. Casas-Cordero E.

Entalpía reticular ΔH_{red}

Cuando un mol de iones gaseosos positivos y un mol de iones gaseosos negativos se aproximan desde el infinito hasta las posiciones de equilibrio que ocupan en el cristal, se produce un ΔH llamado entalpía reticular (ΔH_{red}).



La entalpía reticular (Energía reticular) es siempre negativa, se trata de un proceso exotérmico.

Muestra la estabilidad de la red cristalina.

Se puede calcular en base a la Ley de Coulomb y mediante [el ciclo de Born - Haber](#).

Considerando el modelo cristalino del compuesto y la Ley de Coulomb, la ecuación corresponde a:

$$\Delta H^{\circ} \text{ red} = - \frac{N^{\circ} \text{Avogadro} \times A \times Z^{+} \times Z^{-} \times q^2}{4 \times \pi \times \epsilon_0 \times D_i} \times \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

Donde A es la constante de Madelung, que varía dependiendo de la estructura del compuesto iónico.
Z⁺ y Z⁻ las cargas del catión y del anión.
q la carga del electrón.

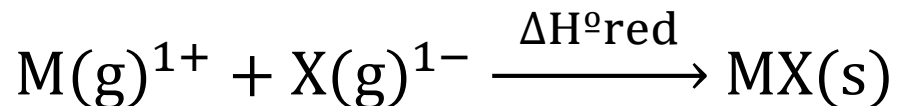
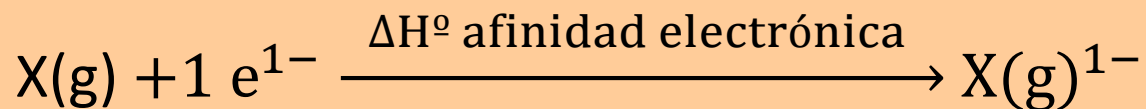
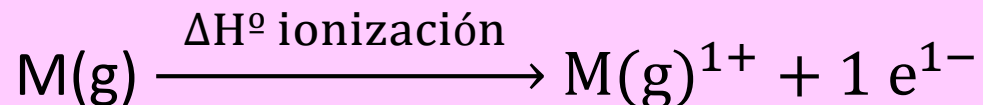
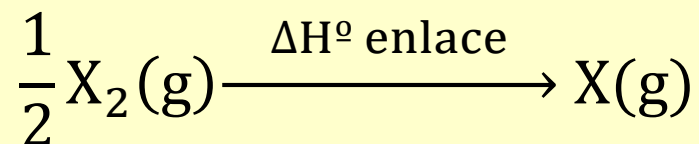
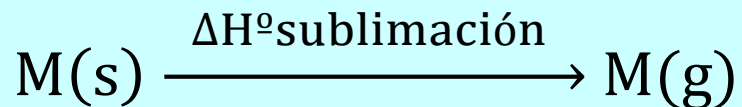
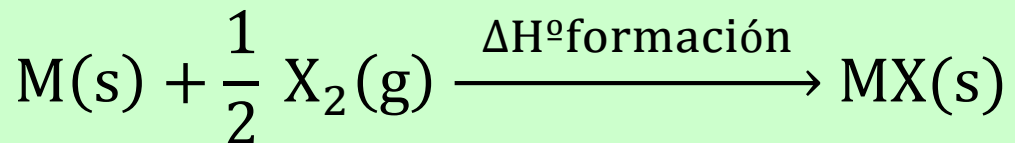
ε₀ permitividad del vacío.

D_i la distancia entre el anión y el catión

n los exponentes de Born.

(wikipedia)

El ciclo de Born - Haber



Es un ciclo termodinámico consecuencia de la ley de Hess

$$\sum_i^n \Delta H^\circ = 0$$

$$\Delta H^\circ_{\text{formación}} + \Delta H^\circ_{\text{sublimación}} + \frac{1}{2} \Delta H^\circ_{\text{enlace}} + \Delta H^\circ_{\text{ionización}} + \Delta H^\circ_{\text{afinidad electrónica}} + \Delta H^\circ_{\text{red}} = 0$$

A mayor $\Delta H^\circ_{\text{red}}$:

menor distancia interionica ($D_i = R_c + R_a$)

mayor intensidad del enlace químico

menor solubilidad en agua del cristal

La variación de energía reticular en los óxidos de alcalinotérreos (estructura sal gema) es:



La dureza varía en el mismo sentido. La dureza es la resistencia que tienen los sólidos a rayarse superficialmente.

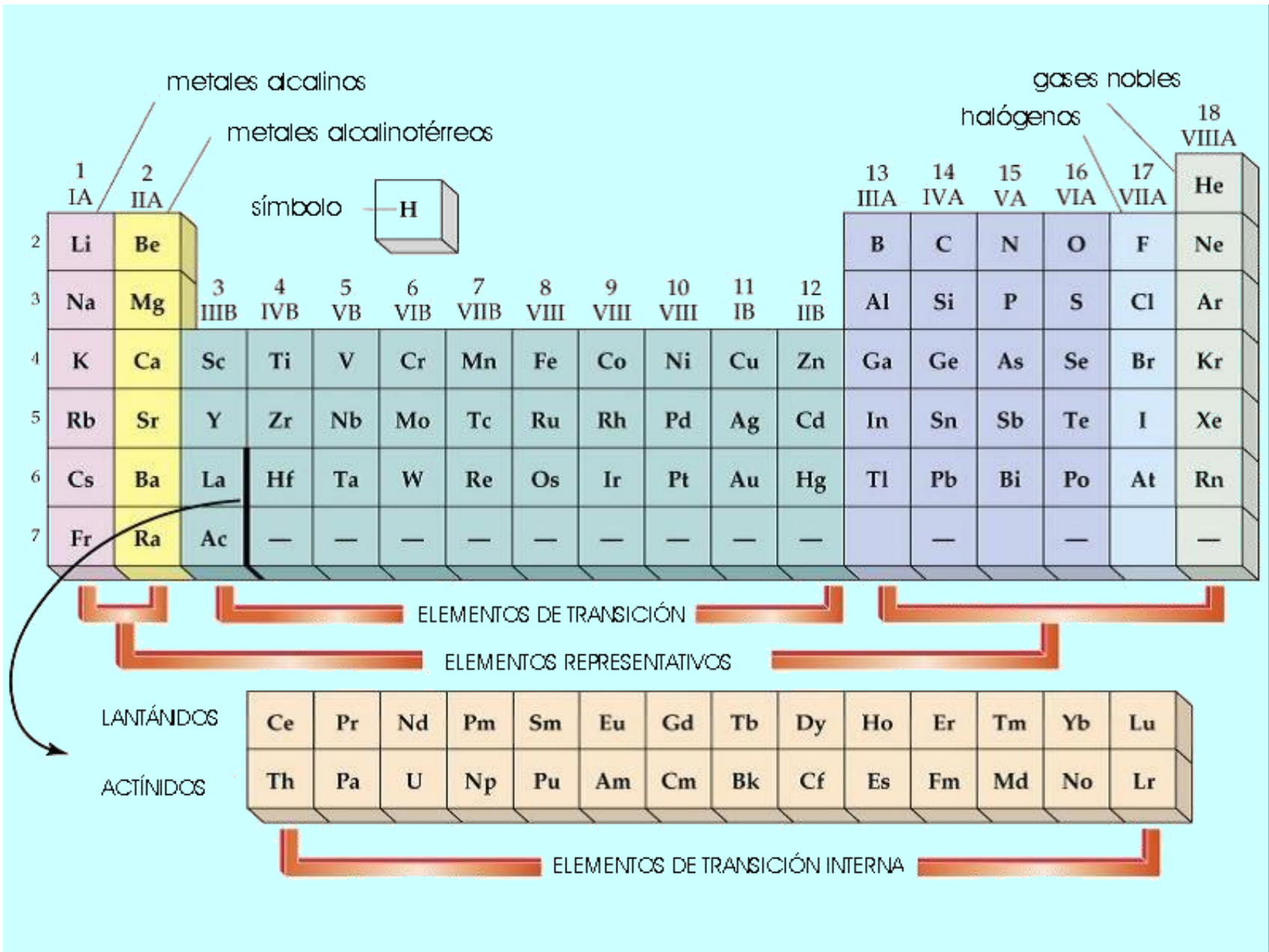
Tabla comparativa

Ión	M(OH) ₂ S (g/L)	Radio (en pm)
Mg	0,0001	72
Ca	1,2	100
Sr	10,0	113
Ba	47,0	136

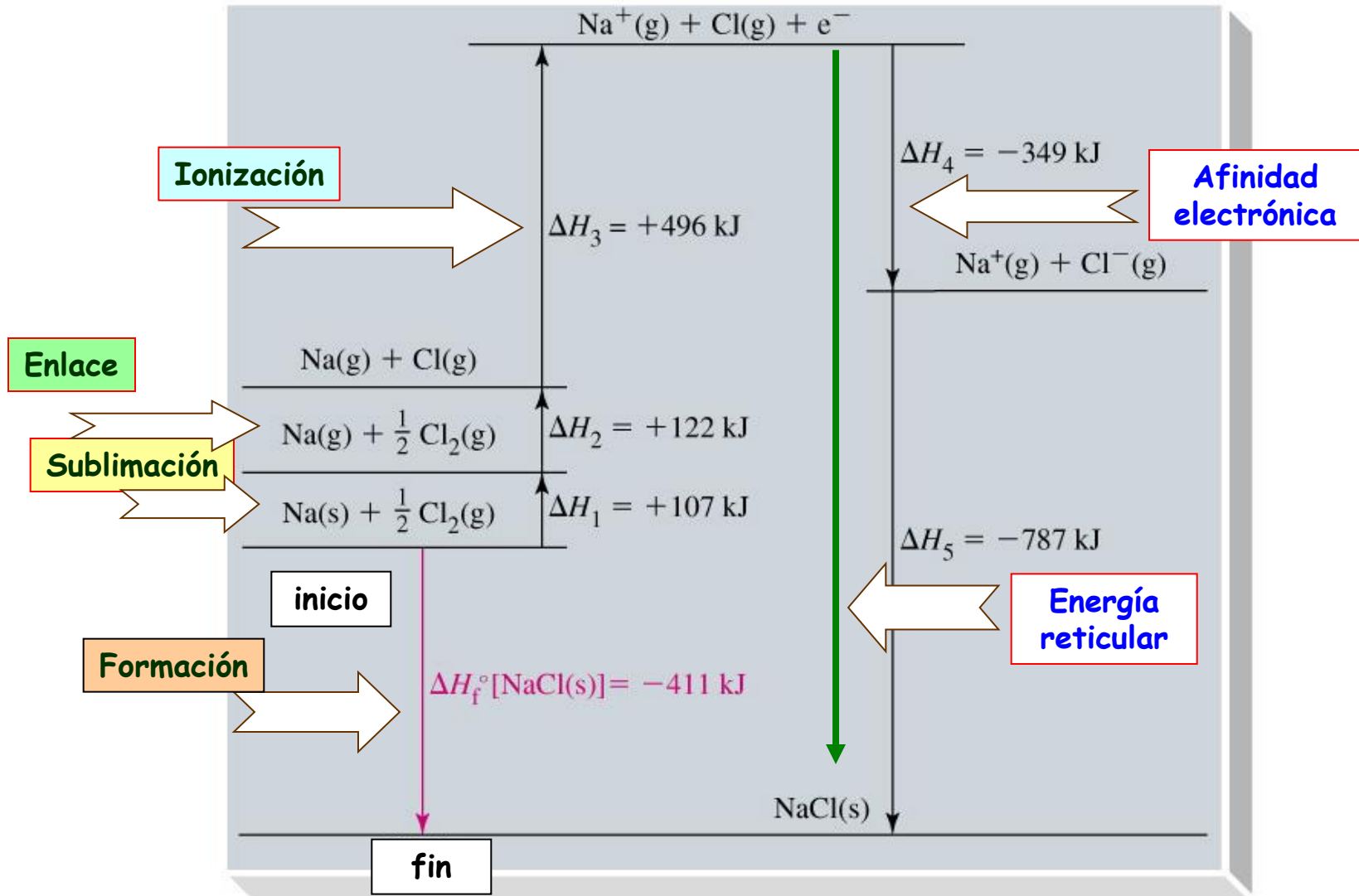
COMPUESTO	ΔH° red	COMPUESTO	ΔH° red	COMPUESTO	ΔH° red
LiF	1030	KF	808	MgCl₂	2326
LiCl	834	KCl	701	SrCl₂	2127
LiI	730	KBr	671	MgO	3795
NaF	922	CsF	734	CaO	3414
NaCl	788	CsCl	660		
NaBr	752	CsBr	636		
NaI	704	CsI	600		

Distancia Interionica (DI) en picometro (pm)

	Li¹⁺	Na¹⁺	K¹⁺	Rb¹⁺	Cs¹⁺
F¹⁻	201	231	266	282	300
Cl¹⁻	257	281	314	327	356
Br¹⁻	275	298	329	343	371
I¹⁻	300	323	353	366	395



Ciclo de Born - Haber para el NaCl



Propiedades Termodinámicas

Energía de Enlace: Energía necesaria para romper los enlaces de un mol de moléculas en estado gaseoso.



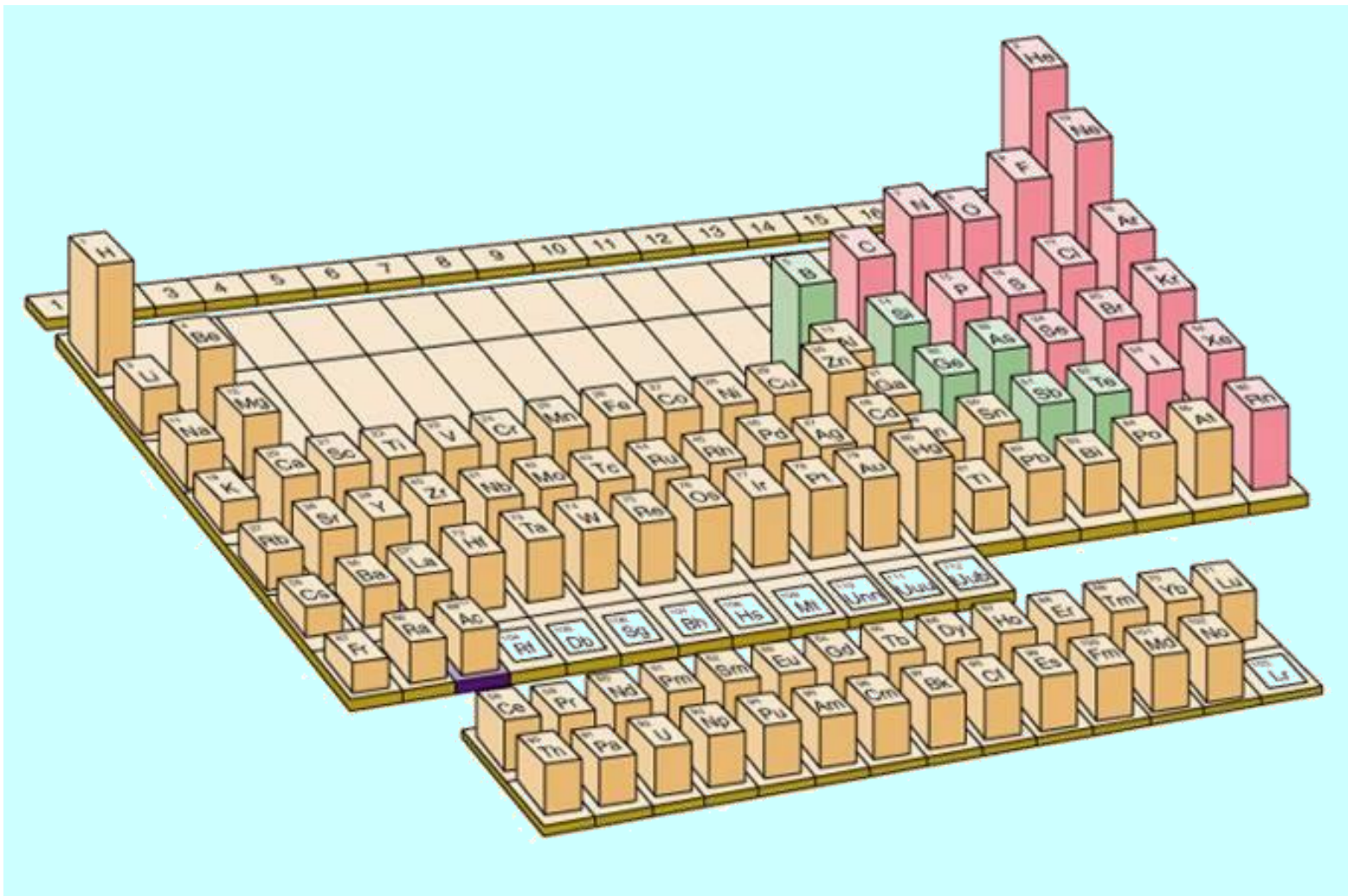
Energía de Sublimación: Energía necesaria para transformar al estado gaseoso un mol de una sustancia en estado sólido.



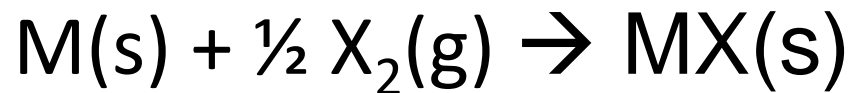
Energía de Ionización: Energía necesaria para sacar un mol de electrones a un mol de átomos en estado gaseoso.



Energía de Ionización



Energía de Formación: Energía liberada o absorbida cuando se forma un mol de compuesto desde sus elementos en estado natural (forma más abundante).

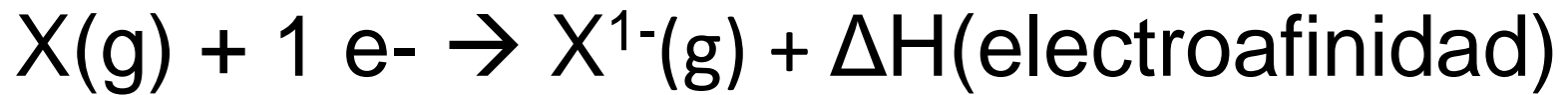


$\Delta\text{H} < 0$ proceso exotérmico

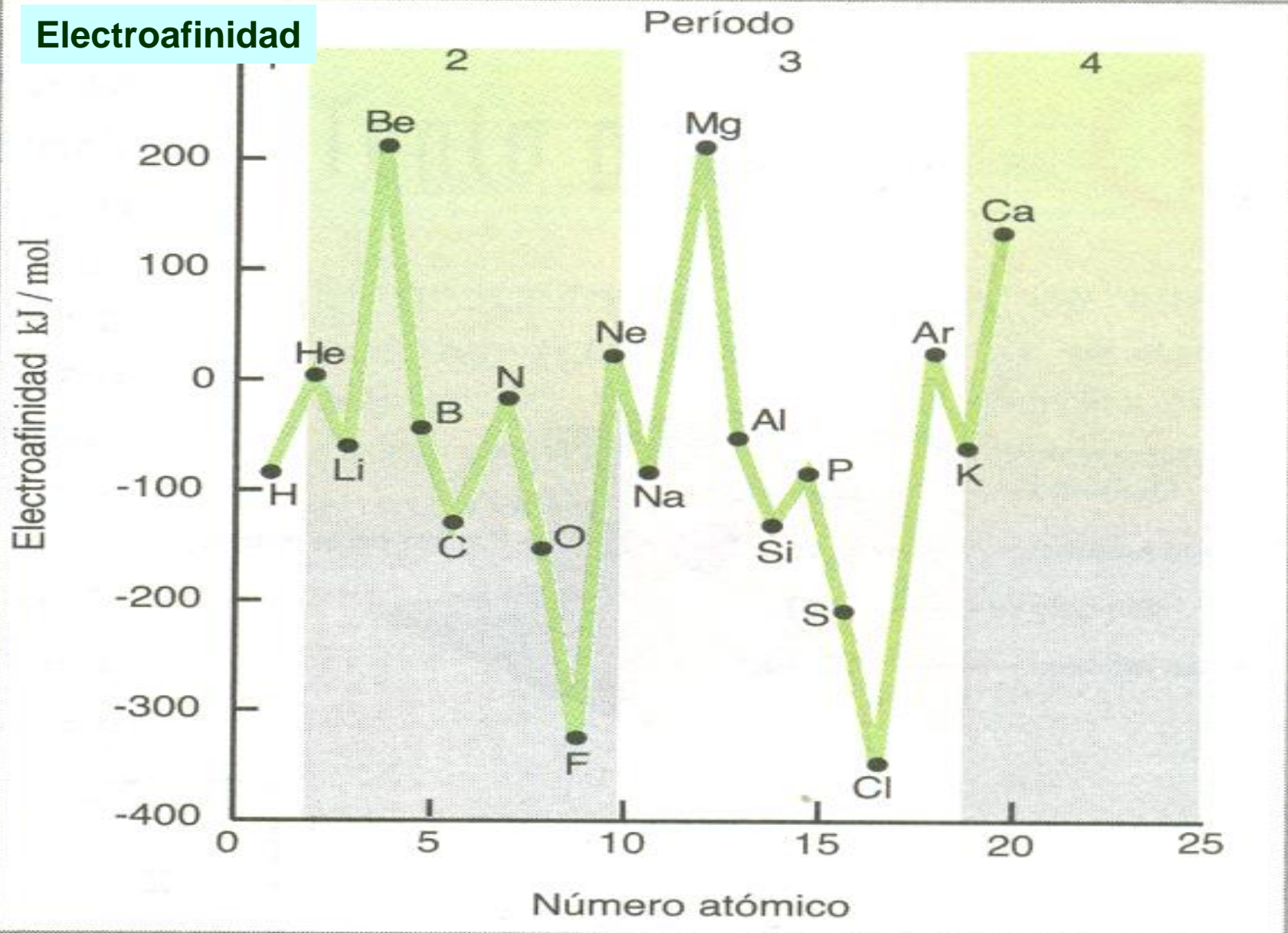
$\Delta\text{H} > 0$ proceso endotérmico

Energía de Afinidad electrónica

(Electroafinidad): Es la Energía liberada cuando un mol de átomos gaseosos ganan un mol de electrones.



Electroafinidad



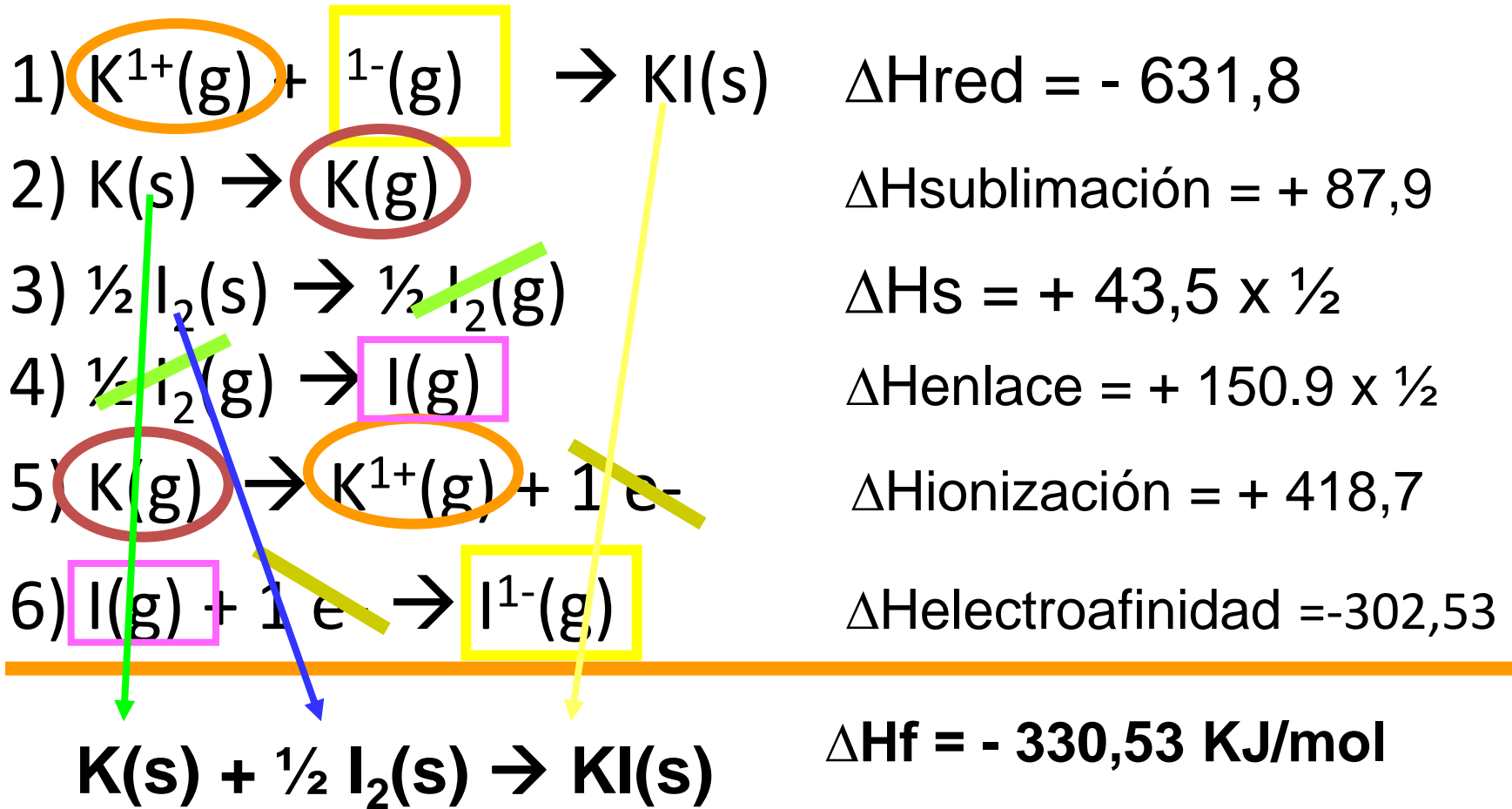
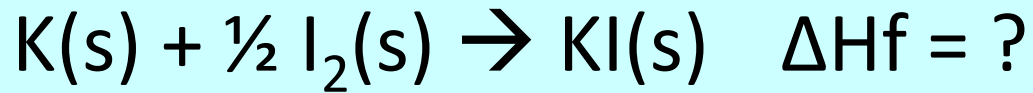
Energía Red: Energía liberada cuando se forma un mol de celdas cristalinas a partir de los iones gaseosos.



Calcular la entalpía de formación del Yoduro de Potasio, KI (ΔH_f) a partir del ciclo de Born-Haber.

DATOS:

1. $\Delta H^{\circ}_{\text{red}} = - 631,8 \text{ KJ/mol}$
2. ΔH° sublimación del K(s) = + 87,9 KJ/mol.
3. ΔH° sublimación del I₂(s) = + 43,5 KJ/mol.
4. ΔH° enlace del I₂(g) = + 150,9 KJ/mol.
5. ΔH° ionización del K(g) = + 418,7 KJ/mol.
6. ΔH° afinidad electrónica del I(g) = - 302,53 KJ/mol.



fin

Fritz Haber, nació en Breslau, Alemania el 9 de diciembre de 1868



Max Born, Nacido el 11 de diciembre de 1882 en Breslau

- El proceso de Born - Haber es la reacción del nitrógeno y el hidrógeno para producir amoníaco.
- Como la reacción es muy lenta se acelera con un catalizador conteniendo hierro, es un óxido de hierro.
- También para acelerar la reacción, se opera bajo condiciones de 200 atmósferas y 450 °C:



La reacción es exotérmica, libera calor.

$\Delta H^\circ = -46,2 \text{ KJ/mol}$ y $\Delta S^\circ < 0$

25 °C K = 6,8 a 105 atm. 450 °C K = 7,8 a 10^{-2} atm.

- Este descubrimiento, permitió a Alemania producir de manera industrial explosivos, sin necesidad de depender de la mayor fuente de nitratos del mundo en aquellos momentos, las reservas de guano depositadas en las costas del norte Chile.

[volver](#)