

QG101 - Química Geral
Aula 6 - Ligações Iônicas
Justifique suas respostas.

Questões

1. O **cloreto de potássio** (KCl) e o **óxido de magnésio** (MgO) são dois sólidos iônicos com a mesma estrutura cristalina (tipo NaCl).

- (a) Escreva as configurações eletrônicas dos íons K^+ , Cl^- , Mg^{2+} e O^{2-} . Identifique com quais gases nobres eles são isoeletrônicos.
- (b) A equação de Born–Landé para a energia de rede é:

$$U = -\frac{N_A A |z_+||z_-| e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

Usando *apenas* os parâmetros $|z_+||z_-|$ e r_0 ($r_0(\text{KCl}) = 319$ pm; $r_0(\text{MgO}) = 211$ pm), explique **qualitativamente** por que $|U(\text{MgO})| \gg |U(\text{KCl})|$.

- (c) O ponto de fusão do MgO é 2852°C e o do KCl é 770°C . Relacione essa diferença à energia de rede.
2. **Constante de Madelung unidimensional.** Considere uma cadeia linear infinita de íons com cargas alternadas $+e$ e $-e$, separados por distância d :

$$\dots + - + - + - + \dots$$

- (a) Tomando um íon de referência $+$ na origem, mostre que a energia eletrostática por par é proporcional à série:

$$S = 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n}$$

- (b) Aplique o **critério de Leibniz** para mostrar que S converge. (Enuncie as condições do critério e verifique cada uma.)
- (c) Sabendo que $S = \ln 2$, calcule a constante de Madelung unidimensional $A_{1D} = 2 \ln 2$ e compare com $A_{3D} = 1,748$ (estrutura NaCl). Por que a constante tridimensional é maior?
3. **Ciclo de Born–Haber para o KCl.** Use os dados abaixo para calcular a energia de rede U do KCl.

Grandeza	ΔH (kJ mol^{-1})
$\Delta H_f^\circ(\text{KCl}, \text{s})$	-437
$\Delta H_{\text{sub}}(\text{K})$	+89
$\frac{1}{2}D(\text{Cl}_2)$	+121
$\tilde{E}_1(\text{K})$	+419
$AE(\text{Cl})$	+349

- (a) Desenhe o ciclo de Born–Haber indicando cada etapa e sua variação de entalpia.
- (b) Aplique a Lei de Hess para obter a expressão de U em função das grandezas tabeladas e calcule o valor numérico.
- (c) O valor experimental de $U(\text{KCl})$ é -717 kJ/mol. Compare com o seu resultado e comente.