**Soluzione Problema 2: Calculations of lattice energy of ionic compounds**

1.1 Scrivere la reazione del litio con acqua:

$Li + H_2O \rightarrow LiOH + H_2$

1.2 Scrivere la reazione del litio con gli alogeni ($Cl_2$)

$2\ Li\ (s) + Cl_2\ (g) \rightarrow 2\ LiCl\ (s)$

Scrivere la reazione del litio con acido solforico diluito ed acido solforico concentrato:

$4\ Li + H_2SO_4 + 2\ H_2O \rightarrow Li_2SO_4 + 2\ LiOH + 2\ H_2$
$2\ Li + H_2SO_4 \rightarrow Li_2SO_4 + H_2$

2.1 Calcolare l'energia reticolare in base al ciclo di Born-Haber

Il ciclo di Born-Haber si basa sul principio di Hess (additività delle entalpie) per cui si può impostare la risoluzione del problema scrivendo tutte le reazioni e sommando le relative entalpie con i relativi coefficienti:

Consideriamo dapprima la reazione globale del punto 1.2

$2\ Li\ (s) + Cl_2\ (g) \rightarrow 2\ LiCl\ (s)$

In realtà avviene in più passaggi:

$Li\ (s) \rightarrow Li\ (g)$ $\Delta H_1 = 159\ kJ\cdot mol^{-1} \times 2$ (x 2 poiché sono 2 le moli che reagiscono)

$Li\ (g) \rightarrow Li^+ + e^-$ I = 5,40 eV
$\Delta H_2 = 5.40 \times 1,602 \times 10^{-19}\ J \times 6,0221 \times 10^{23} = 521\ kJ\cdot mol^{-1} \times 2$

$Cl_2 \rightarrow 2\ Cl\cdot$ $\Delta H_3 = 242\ kJ\cdot mol^{-1}$

$Cl\cdot + e^- \rightarrow Cl^-$ I = -3,84 eV
$\Delta H_4 = 3,84 \times 1,602 \times 10^{-19}\ J \times 6,0221 \times 10^{23} = -370 \times 2\ kJ\cdot mol^{-1}$

$2\ Li\ (s) + Cl_2\ (g) \rightarrow 2\ LiCl\ (s)$ $\Delta H_{RX} = -\ 402,3 \times 2\ kJ\cdot mol^{-1}$

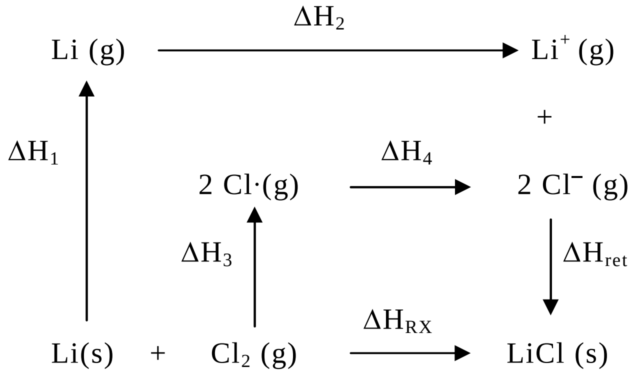
Sommando i valori delle varie entalpie otteniamo:
$\Delta H_{RX} = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3 + \Delta H_4 + \Delta H_{ret} = -402,3\ kJ\cdot mol^{-1}$

2.2 Calcolare l'energia reticolare in base alla formula di Born-Haber:

$$\begin{aligned}\Delta H_{ret} &= -\Delta H_1 - \Delta H_2 - \Delta H_3 - \Delta H_4 + \Delta H_{RX}\\ &= -159 \times 2 - 521 \times 2 - 242 + 370 \times 2 + 402,3 \times 2\\ &= -427 \times 2\ kJ\cdot mol^{-1}\end{aligned}$$

$\Delta H_{ret} = -854\ kJ\cdot mol^{-1}$

Ora scriviamo il ciclo di Born-Haber:




Il calcolo eseguito con la formula di Kapustinskii è:

$$U_0 = -\ 287.2\ \frac{Z_+ Z_- \sum v}{r_+ r_-}\left(1 - \frac{0.345}{r_+ r_-}\right)$$

Sostituendo nella formula al posto di Z le cariche di cationi e anioni ( +1 e -1)
e al posto di r i raggi di cationi e anioni ($r_+$ = 0,62 Å e $r_-$ = 1,83 Å)

si ottiene il valore:

Uo = - 201 kJ·mol$^{-1}$

Per cui solo il calcolo con il ciclo di Born-Haber è in accordo con i dati sperimentali

Infine per calcolare il raggio teorico r degli ioni in un reticolo cubico a facce centrate nel quale gli ioni si toccano lungo la diagonale della faccia del cubo, si usa la relazione
Diagonale(d) = 4 r

Dato che il lato del cubo è noto e vale l = 5,14 Å
la diagonale vale d = $l\sqrt{2}$ cioè d = 7,27 Å
Quindi il raggio ionico del cloro è: r = d/4 $\quad r = \dfrac{7,27}{4} \quad$ r = 1,817 Å
Ora ragioniamo sul fatto che in un lato sono presenti gli ioni alternati $Cl^-$ , $Li^+$ , $Cl^-$
Quindi il lato vale: l = 2 r + 2 R dove r è il raggio del litio e R il raggio del cloro
Risolvendo un'equazione di primo grado si ottiene r ($Li^+$) = 0,753 Å
in accordo con i dati sperimentali.

Soluzione proposta da Paicu Stefan Nicolae
studente dell' ITAS Gallini di Voghera