اما اذا اردنا حساب طاقة الشبكية البلورية بدقة لاي مركب ايوني فانه لابد من ادخال اعتبارات غير الكتروستاتيكية في الحسابات أيضاً ومن هذه القوى المؤثرة في الحسابات الاتي:-

(1) السعة الحرارية (Heat Capacity) .

(2) قوى فاندرفالز أو قوى لندن (Van der Waals Forces OR London Forces) .

(3) طاقة نقطة الصفر (Zero Point Energy) .

وتساهم قوى التجاذب والتنافر (معادلة 6) بما يزيد عن (90%) من طاقة الشبكة البلورية الحقيقية بنما قوى فاندرفالز وطاقة نقطة الصفر والسعة الحرارية تساهم بأقل من (10%) من الطاقة الكلية.

ولنأخذ بلورة كلوريد الصوديوم كمثال لبان أهمية معادلة بورن – لاندي لحساب طاقة الشبكية البلورية حيث أن الثوابت في المعادلة رقم (6) تساوي:-

$N = 6.0222\times10^{23} mol^{-1}$	$A = 1.74756$
$Z^+ = 1$	$Z^- = -1$
$e = 1.60210\times10^{-19} coloumb$	$r_o = 281 picometer = 2.81\overset{o}{A}$
$n = \frac{1}{2}(7+9) = \frac{18}{2} = 8$	

وعليه تكون قيمة الشبكية البلورية مساوية إلى:- $U_o = 767 \quad Kj.mol^{-1}$ وهذه القيمة تتفق مع القيمة المقاسة عملياً وهي $U_o = 769 \quad Kj.mol^{-1}$.

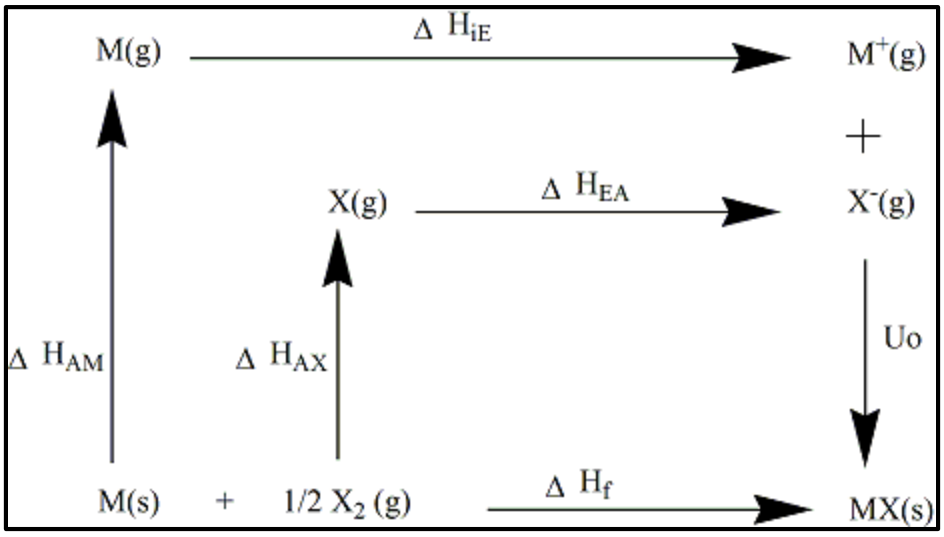
دروة بورن – هابر Born-Haber Cycle :-

في البداية يجب ان نعرف مصطلح اثنالبي التكوين المولي القياسي (ΔH^o) حيث يعرف على انه (مقدار الطاقة المتحررة او المكتسبة لتكوين مول واحد من أي مركب من عناصره في درجة حرارة 298.15 كلفن وضغط جوي مقداره واحد جو). وتحسب تغيرات الانثالبي نسبة إلى الحالة القياسية (درجة حرارة 298.15 كلفن وضغط واحد جو) للعنصر أو المركب نسبة إلى الحالة الاكثر استقراراً في تلك الدرجة وتتأثر قيمة مقدار الانثالبي بالحالة القياسية بالحالة الفيزياوية للمواد المتفاعلة والمواد

الناتجة. وتكون قيمة (ΔH^o) موجبة في حالة التفاعلات الماصة للحرارة (أي تمتص حرارة) في هذه الحالة تفسر الزيادة في الانثالبي نتيجة كون مجموع انثالبي المواد الناتجة أعلى من مجموع انثالبي المواد المتفاعلة كما تكون قيمة (ΔH^o) سالبة في حالة التفاعلات الباعثة للحرارة (أي تبعث حرارة) وفي هذه الحالة يكون مجموع انثالبي المواد المتفاعلة أعلى من مجموع انثالبي المواد الناتجة.

وتعتمد دورة بورن-هابر بصورة اساسية على قانون هيس (Hess) او كما يعرف ايضاً بقانون الكيمياء الحرارية والذي ينص على ان (الحرارة المكتسبة أو المتحررة في تفاعل كيميائي هي كمية ثابتة ولا تعتمد على عدد وطبيعة المراحل التي تستخدم لاحداث ذلك التفاعل).

ويمكن تمثيل دروة بورن-هابر لتكوين مركب أيوني كهاليد فلز قلوي من الزمرة الاولى (MX) من عناصره الاولية (M) و (X_2) كما يلي:-



ويمكن وصف دروة بورن-هابر بالخطوات التالية:-

(1) انثالبي التكوين ΔH_f الذي يمثل عملية اتحاد أيون الفلز القلوي $M_{(s)}$ مع $\frac{1}{2}X_{2(g)}$ لتكوين $MX_{(s)}$ وهو قيمة سالبة (-).

(2) انثالبي التذرية للعنصر الفلزي ΔH_{AM} الذي يمثل تحول $M_{(s)}$ من الحالة الذرية الصلبة إلى الحالة الذرية الغازية أي تساوي انثالبي التسامي وهو قيمة موجبة (+).

(3) انثالبي التذرية للعنصر اللافلزي ΔH_{AX} الذي يمثل تحول $\frac{1}{2}X_{2(g)}$ إلى $X_{(g)}$ وهي تمثل انثالبي التفكك الجزيئي وهو مقدار موجب (+).

(4) انثالبي التأين للفلز ΔH_{IE} الذي يمثل تحول $M_{(g)}$ إلى الأيون $M^{+}_{(g)}$ وهو مقدار موجب (+).

(5) انثالبي الألفة الألكترونية للافلز ΔH_{EA} الذي يمثل تحول $X_{(g)}$ إلى الأيون $X^{-}_{(g)}$ وهو مقدار سالب (−).

(6) انثالبي الشبكية البلورية U_o الذي يمثل اتحاد الأيون الموجب بالحالة الغازية $M^{+}_{(g)}$ مع الأيون السالب بالحالة الغازية $X^{-}_{(g)}$ لتكوين المركب $MX_{(g)}$ في الحالة الصلبة وهو مقدار سالب(−).

واستناداً إلى قانون هيس فأن انثالبي تكوين المركب يكون:-

$$\Delta H_f = \Delta H_{AM} + \Delta H_{AX} + \Delta H_{IE} + \Delta H_{EA} + U_o$$

القيم الموجبة لكل من ΔH_{AM} و ΔH_{AX} و ΔH_{IE} تعمل على معاكسة تكوين المركب الايوني بينما القيم السالبة لكل من ΔH_{EA} و U_o تعمل على تكوين المركب الايوني وبحسب قيم كل واحدة منها سوف يكون الناتج النهائي أما موجب أو سالب ولتوضيح هذا الشيء سنأخذ القيم العملية لكلوريد الصوديوم وهي كالتالي:-

$$\Delta H_{AM} = +25.9 \ \ Kcal.mol^{-1} = +108.3 \ \ Kj.mol^{-1}$$

$$\Delta H_{AX} = +28.9 \ \ Kcal.mol^{-1} = +120.8 \ \ Kj.mol^{-1}$$

$$\Delta H_{IE} = +118.4 \ \ Kcal.mol^{-1} = +494.9 \ \ Kj.mol^{-1}$$

$$\Delta H_{EA} = +83.3 \ \ Kcal.mol^{-1} = +348.2 \ \ Kj.mol^{-1}$$

وبالاعتماد على معادلة بورن-لاندي تكون قيمة طاقة الشبكية البلورية لكلوريد الصوديوم مساوية إلى $U_o = -181 \ \ Kcal.mol^{-1} \ \ = -757 \ \ Kj.mol^{-1}$ وبذلك تكون القيمة المحسوبة نظرياً لانثالبي تكوين

كلوريد الصوديوم مساوية إلى $\Delta H_f = -91.1 \ Kcal.mol^{-1} \ = -381.2 \ Kj.mol^{-1}$ وهذه القيمة تعتبر قريبة كثيراً من القيمة التجريبية (العملية) لانثالبي تكوين كلوريد الصوديوم التي تكون مساوية إلى:-
$\Delta H_f = -98.1 \ Kcal.mol^{-1} \ = -410.5 \ Kj.mol^{-1}$.

الا ان هذه الطريقة لاتعطي نتائج مشجعة دائماً (القيمة المحسوبة من المعادلة 6) فهنالك أيضاً نتائج غير مشجعة حيث يكون الفرق بين القيمة المحسوبة نظرياً والقيمة التجريبية العملية فرق كبير وكما يتضح من المثال التالي لكلوريد الفضة (AgCl) حيث ان قيم الانثالبيات كالتالي:-

$$\Delta H_{AM} = +60.1 \ Kcal.mol^{-1} = +284.5 \ Kj.mol^{-1}$$

$$\Delta H_{AX} = +29.0 \ Kcal.mol^{-1} = +121.4 \ Kj.mol^{-1}$$

$$\Delta H_{IE} = +174.8 \ Kcal.mol^{-1} = +730.9 \ Kj.mol^{-1}$$

$$\Delta H_{EA} = -85.2 \ Kcal.mol^{-1} = -356.1 \ Kj.mol^{-1}$$

$$\Delta H_f = -30.4 \ Kcal.mol^{-1} = -127.2 \ Kj.mol^{-1}$$

وبذلك تكون قيمة طاقة الشبكية البلورية:-

$$U_o = -217.2 \ Kcal.mol^{-1} \ = -907.9 \ Kj.mol^{-1}$$

اما قيمة طاقة الشبكية البلورية المحسوبة من المعادلة رقم(6) فهي:-

$$U_o = -203.2 \ Kcal.mol^{-1} \ = -849.4 \ Kj.mol^{-1}$$

وبالمقارنة مع النتائج المستحصل عليها من كلوريد الصوديوم نلاحظ ان الفرق بين القيم المحسوبة نظرياً والقيم العملية في حالة كلوريد الفضة فرق كبير جداً والجدول التالي كذلك يشير إلى انحرافات اخرى وفروقات اخرى والسبب يعود إلى **التغير في درجة ايونية المركب عن تلك الناتجة من اعتباره**

مكون من أيونات موجبة وسالبة صلدة وذات تماثل كروي وحجم ثابت وغير متداخلة بعضها مع البعض الآخر وهي الشروط المفترضة عند اشتقاق المعادلة رقم (6).

مقارنة بين القيم النظرية والتجريبية لانثالبي الشبكة البلورية لبعض هاليدات الفلزات

المركب	انثالبي الشبكة البلورية U_o (Kj/mol)		الفرق بين القيمتين
	القيمة العملية	القيمة النظرية	
NaF	907.9	907.9	صفر
NaCl	769.9	761.5	8.4
NaBr	736.4	723.8	12.6
NaI	690.4	677.8	12.6
KCl	702.9	694.5	8.4
RbCl	673.6	669.4	4.2
CsCl	644.3	627.6	16.7
AgF	966.5	916.3	50.2
AgCl	916.3	849.4	61.9
AgBr	907.9	824.2	83.7
AgI	895.4	795.0	100.4
MgF_2	2907.9	2861.9	46.0
$MgBr_2$	2405.8	2146.4	259.4
MgI_2	2297.0	1991.6	305.4