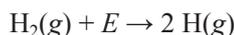


Un altro metodo di calcolo che consente di determinare la variazione di entalpia associata a una reazione consiste nell'elaborare dati sperimentali relativi all'energia di legame. Nel caso di una molecola biatomica la «forza» di un legame viene identificata con l'energia richiesta per dissociare le molecole allo stato gassoso, cioè per rompere il legame tra due atomi: questa energia viene definita **energia di legame**.

Per esempio, la rottura del legame in una molecola di idrogeno gassoso è rappresentata dalla seguente equazione:



La corrispondente energia di legame vale 436 kJ/mol. Ovviamente, quando si forma il legame H—H si libera una uguale quantità di energia.

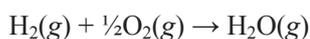
La determinazione della energia di legame tra due atomi uguali o diversi nelle molecole poliatomiche è meno semplice, soprattutto perché essa dipende anche dagli altri legami presenti. Per esempio, l'energia del legame C—H presente nella molecola del metano è diversa da quella del legame C—H nella molecola di etene, ma non è neppure esattamente uguale all'energia dello stesso legame nella molecola di CHCl_3 . Tuttavia, essendo state eseguite numerose determinazioni su composti differenti, è possibile disporre di valori medi di energia di legame tra atomi in diverse situazioni molecolari e questi dati risultano utili per calcoli termodinamici.

Utilizzando i valori riportati in tabella ► 1 è possibile fare previsioni sull'energia potenziale chimica «racchiusa» nelle sostanze di cui è nota la struttura molecolare e quindi calcolare a priori il ΔH approssimativo di una reazione a cui partecipano.

In generale, occorre tener presente che l'effetto energetico di una reazione è il risultato del bilancio dell'energia «in entrata» (cioè quella necessaria per la rottura dei legami nei reagenti) e «in uscita» (quella liberata a seguito della formazione dei nuovi legami che si formano nei prodotti):

$$\Delta H = \sum E_{\text{legami rotti}} - \sum E_{\text{legami formati}}$$

Consideriamo per esempio la reazione di formazione dell'acqua dai suoi elementi la cui equazione di reazione è la seguente:



Dal punto di vista energetico la reazione può essere considerata come la somma di tre distinti processi; per effettuare il bilancio occorre considerare:

- l'energia necessaria per rompere i legami nelle molecole di idrogeno
- l'energia necessaria per rompere i legami nelle molecole di ossigeno
- l'energia ottenuta in seguito alla formazione dei legami delle molecole di acqua (occorre considerare 2 legami O—H per ogni molecola).

Il calcolo può essere sviluppato, tenendo conto dei coefficienti stechiometrici, nel seguente modo:

$$\Delta H = \sum E_{\text{legami rotti}} - \sum E_{\text{legami formati}}$$

$$\Delta H = (1 \text{ mol} \cdot 436 \text{ kJ/mol} + \frac{1}{2} \text{ mol} \cdot 497 \text{ kJ/mol}) - (2 \text{ mol} \cdot 463 \text{ kJ/mol})$$

$$\Delta H = (436 \text{ kJ} + 249 \text{ kJ}) - 926 \text{ kJ} = -241 \text{ kJ}$$

Il ΔH della reazione vale quindi -241 kJ/mol e corrisponde all'entalpia di formazione dell'acqua allo stato aeriforme.

Occorre precisare che il ΔH di reazione corrisponde al valore calcolato utilizzando le energie di legame solamente se la temperatura finale viene riportata al suo valore iniziale.

▼ **Tabella 1** Valori di energia di legame nel caso di molecole biatomiche e valori di energia di legame media negli altri casi

Legame	E (kJ/mol)
H—H	436
O=O	497
F—F	155
Cl—Cl	242
N≡N	945
H—Cl	431
C=O	743
O—H	463
C—C	348
C=C	612
C≡C	838
C—H	412
C—N	305