

# Energías de Enlace y Entalpía

## Estudiante:

Martín Pérez Comisso

## Ramo:

Introducción y  
Orientación a la Carrera  
de Química

## Profesores:

**Dra. Else Lemp M.**

**Dr. German Günter  
S.**

De Richard S.  
Trepton

Chicago State University

# Energía de Enlace

- La **energía de enlace** es comúnmente definida como la energía requerida para romper el enlace entre dos átomos. Para estudiarla se requiere una medida termodinámica, que en química se utiliza mayormente la Entalpía Estándar ( $\Delta H_{298}^0$ ).

# Concepto de Entalpía

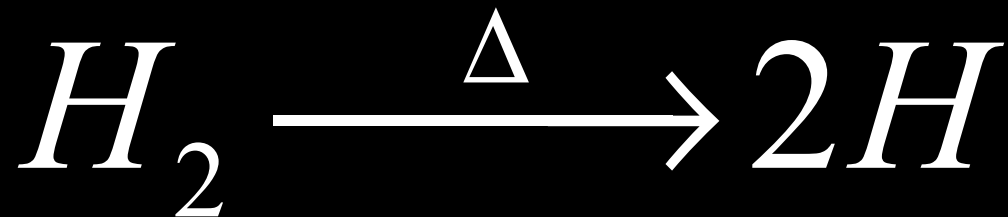
- **Entalpía** (del prefijo *en* y del griego *thalpein* calentar), tal palabra fue acuñada en 1850 por el físico alemán Clausius.
- La entalpía es una magnitud de termodinámica simbolizada con la letra  $H$ , la variación de entalpía expresa una medida de la cantidad de energía absorbida o cedida por un sistema termodinámico, o, lo que es lo mismo, la cantidad de energía que tal sistema puede intercambiar con su entorno.

# Objetivo

- El estudio propone la utilización de otro método para aproximarse aún más al valor de esta energía, considerando más variables que afectan el sistema.
- La pregunta es **¿La entalpía estándar es propiedad correcta para asociar con la fuerza de un enlace?**

# Contexto de Análisis

- Esta Practica toma la disociación térmica del hidrogeno para plantear este modelo, donde además define ciertos factores que no son considerados en el calculo de  $\Delta H_{298}^0$ .



# Nuevos factores

- Este proceso (Isobarico) realiza un trabajo el cual aumenta su temperatura, que aumentara el volumen del sistema. La entalpía se puede calcular por medio de la suma de la energía interna mas la recibida por el trabajo.

$$\Delta H = \Delta E + P\Delta V$$

$$\frac{P}{T} = k$$

# Nuevos factores

- El segundo tópico que se agrega es que las moléculas tienen energía vibracional, rotacional y traslacional. Entonces la energía cinética total de los reactantes difiere de la energía de los productos.
- Ya que estas energías son irrelevantes en la fuerza  $\Delta H_{298}^0$  del enlace, se hacen inabordables para el valor de

# Energía...

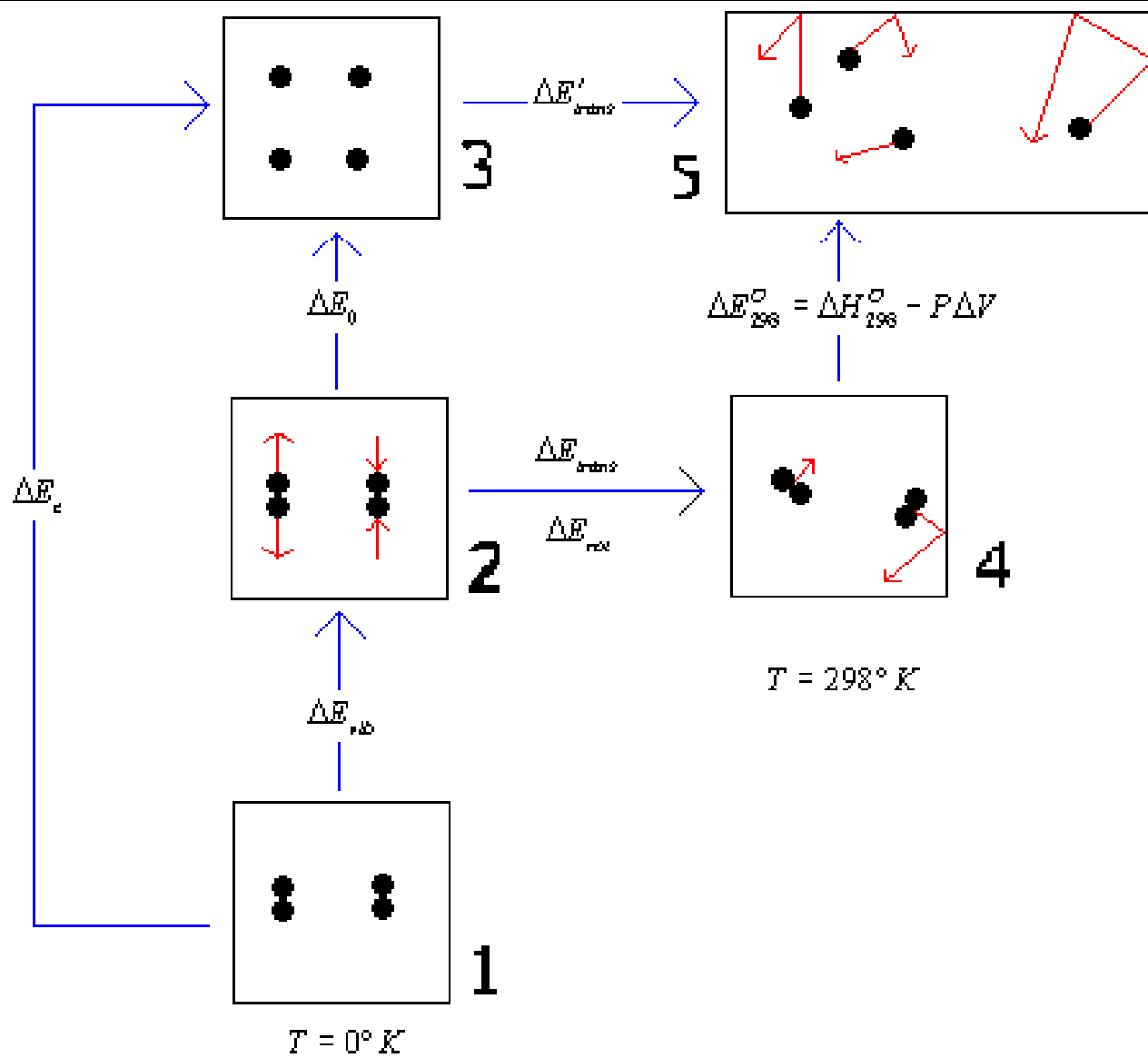
- **Vibracional:** Es la energía cinética y energía potencial que poseen las moléculas debido al movimiento de vibración. Al no ser rígidas las moléculas, la flexibilidad de las mismas da como resultado el movimiento vibratorio.
- **Traslacional:** Esta se debe al movimiento que tiene una molécula en virtud de su cambio de posición en el espacio



# Energía...

- **Rotacional:** Se dice de la energía cinética que poseen las moléculas debido a la rotación de su centro de gravedad alrededor de un eje.

# MODELLO



# Características del Modelo

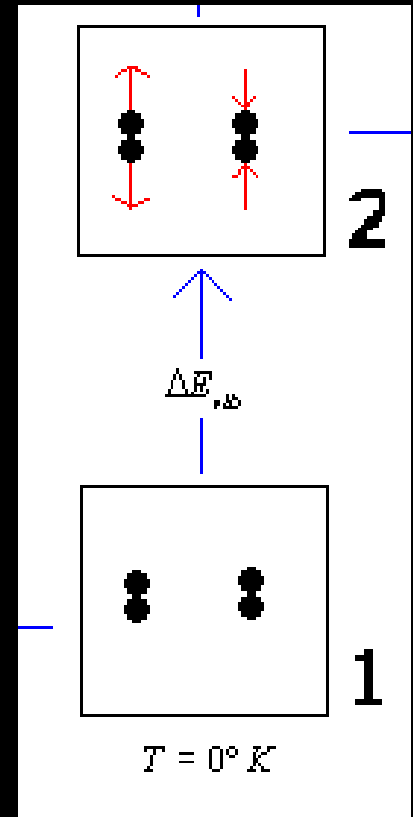
- En el modelo propuesto se realizan una serie de transformaciones desde un mol de hidrogeno diatómico a  $0^{\circ}\text{K}$ , sin ninguna clase de movimiento hasta 2 moles de átomos de hidrogeno en TPN con energía rotacional, traslacional y vibracional ( $25^{\circ}\text{C}$  y 1 atm). Este presenta 2 condiciones ficticias
- **TPN: Temperatura y presión normales ( $25^{\circ}\text{C}$  y 1 atm)**

# Condiciones ficticias

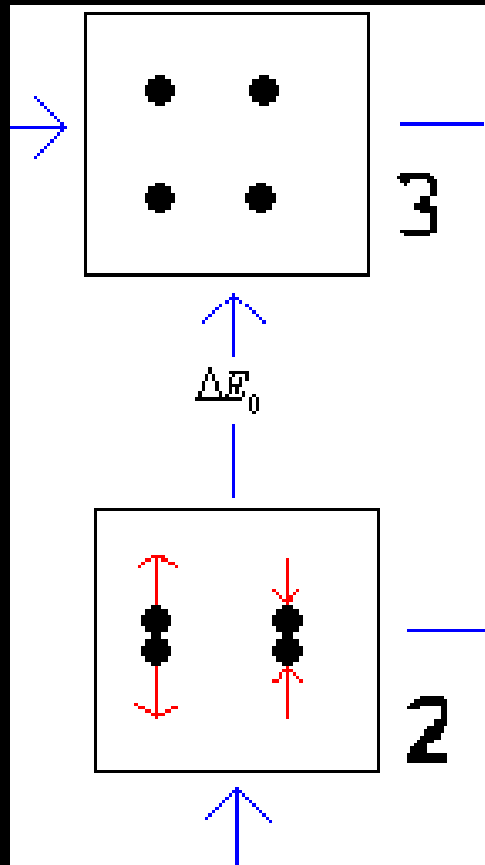
- La Primera es que estas moléculas sin movimiento son irreales, pues se supone que a  $0^{\circ}\text{K}$  existe aún el movimiento de los electrones, es decir, la **energía del punto cero**. La otra es que el Hidrogeno es sólido a los  $0^{\circ}\text{K}$ .
- Esto no limita el modelo, pues es en parte hipotético y **la termodinámica no se limita a solo lo que ocurre en la realidad.**

# Procesos de Modelo (1 a 2)

- El modelo parte con el mol de Hidrogeno (representado por 2 moléculas) a  $0^{\circ}\text{K}$ , a el cual se le agrega la energía vibracional.
- Esto produce que las moléculas tengan interacciones de atracción y repulsión.



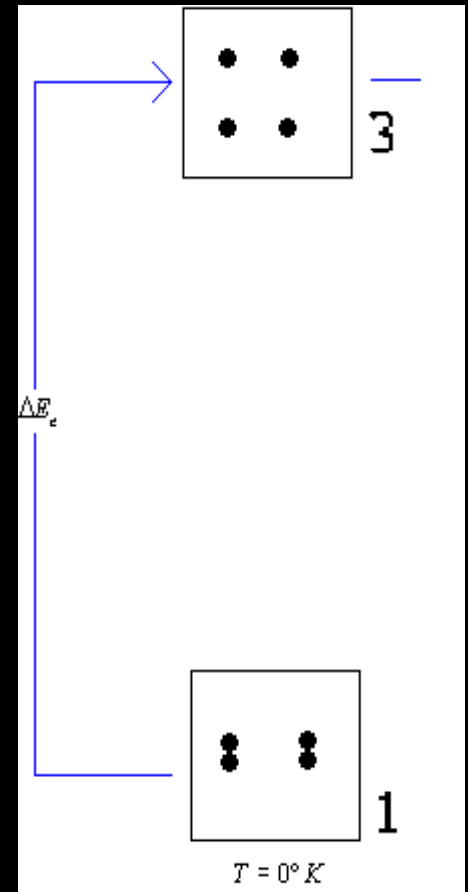
## Procesos de Modelo (2 a 3)



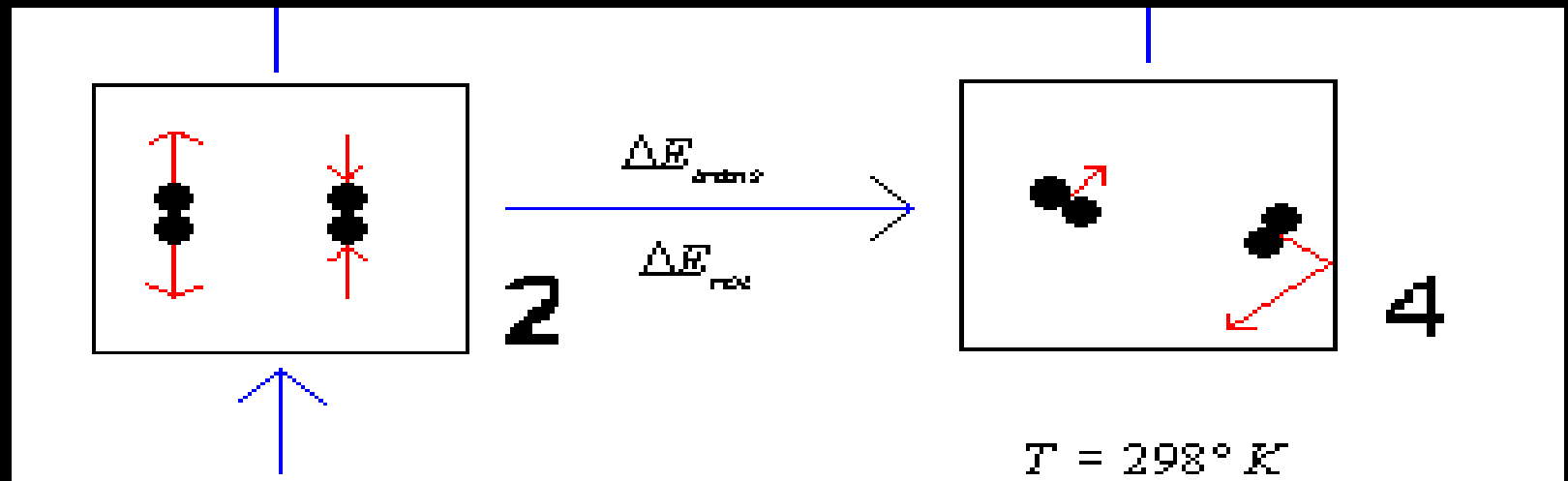
- Al aplicar la energía de enlace, cada molécula se disocia en 2 átomos de H, que vibran sin su enlace.

# Procesos de Modelo (1 a 3)

- Los pasos 1-2 y 2-3 pueden ser realizados de una sola vez al disociar con energía electrónica.



# Procesos de Modelo (2 a 4)

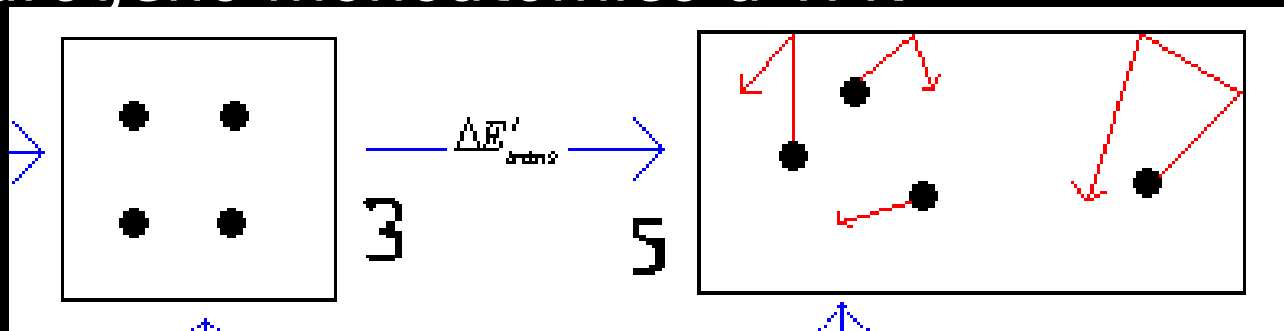


- Desde el estado descrito en 2, al aumentar la temperatura a  $25^{\circ}C$  aparecen  $\Delta E_{rot}$   $\Delta E_{trans}$  con las que la molécula adquirirá desplazamiento y rotación según el eje del enlace.



## Procesos de Modelo (3 a 5)

- A partir del estado 3, donde las moléculas se hallaban disociadas, simplemente con aumentar la temperatura y mantener la presión constante se aplica una energía traslacional que brinda de movimiento el sistema y se obtienen los 2 moles de hidrogeno monoatómico a TPN

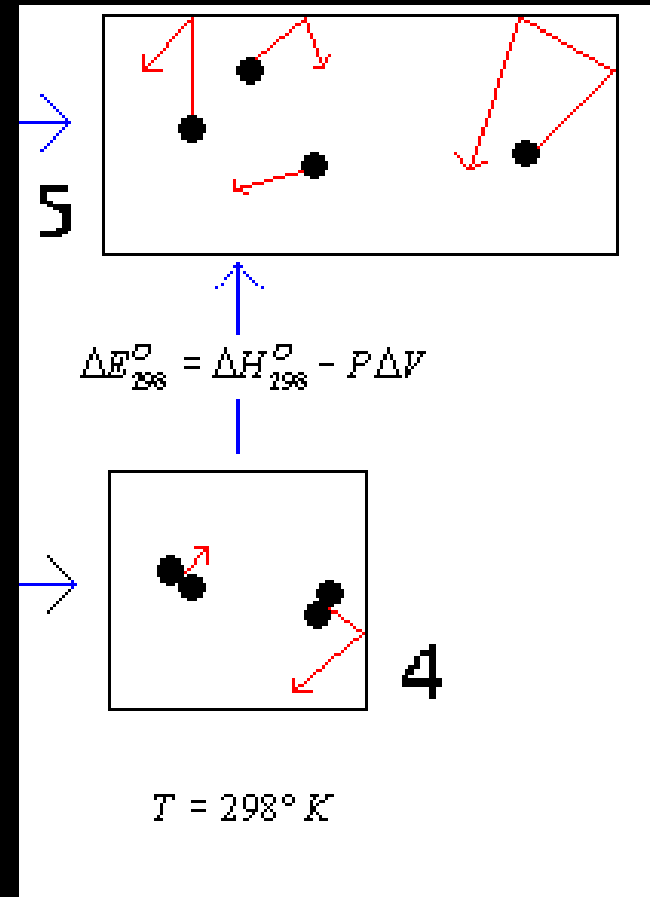


## Procesos de Modelo (4 a 5)

Desde el estado 3 para llegar a los 2 moles de H en TPN se debe realizar un trabajo que disocie a la molécula, este se define por:

$$\Delta E_{298}^O = \Delta H_{298}^O - P\Delta V$$

y se obtendrá el estado de 2 moles hidrogeno en TPN.



Símbolo	Descripción	Valor (kJ)	Método o referencia
$\Delta E_e$	<b>Energía Electrónica</b>	<b>457.8</b>	$\Delta E_0 + \Delta E_{vib}$
$\Delta E_{vib}$	<b>Energía vibracional a 0°K</b>	<b>25.5</b>	<b>Ref 4, p 132</b>
$\Delta E_0$	<b>Energía de Enlace a 0°K</b>	<b>432.3</b>	<b>Ciclo</b>
$\Delta E_{trans}$	<b>Energía Traslacional de H molecular a 298°K</b>	<b>3.7</b>	$\left(\frac{3}{2}\right) RT$
$\Delta E_{rot}$	<b>Energía Rotacional a 298°K</b>	<b>2.5</b>	$RT$
$\Delta E'_{trans}$	<b>Energía Traslacional de H atómico a 298°K</b>	<b>7.4</b>	$2\left(\frac{3}{2}\right) RT$
$\Delta E_{298}^O$	<b>Energía de enlace a 298°K</b>	<b>433.5</b>	$\Delta H_{298}^O - P\Delta V$
$P\Delta V$	<b>Trabajo expansivo a 298°K</b>	<b>2.5</b>	$\Delta nRT$
$\Delta H_{298}^O$	<b>Entalpía de enlace a 298°K</b>	<b>436.0</b>	<b>Ref 3, p 1211</b>

# Aplicación en otras Moléculas

- Este modelo también es aplicable a otras moléculas, donde la disociación implique más enlaces sigma como el Amoniacó y el metano o en moléculas que incluyan enlaces pi, como lo es el nitrógeno molecular. Donde como regla básica, a mayor cantidad de enlaces en una molécula, mayor energía de disociación tienen.

# Propiedades termodinámicas de enlace en las reacciones de disociación (kJ)

Reacción	$\Delta E_e$	$\Delta E_0$	$\Delta E_{298}^O$	$\Delta H_{298}^O$
$H_2 \longrightarrow 2H$	457.8	432.3	433.5	436.0
$N_2 \longrightarrow 2N$	955.8	941.7	942.9	945. 4
$NH_3 \rightarrow N + 3H$	1243	1157.7	1165.2	1172.6
$CH_4 \longrightarrow C + 4H$	1756	1642.5	1653.7	1663.6

# Resultados del Modelo

- Para responder la pregunta si es la mejor propiedad el modelo nos dice que hay una propiedad aun mayor que esta, que da mejores resultados, que es , (Energía de Enlace o electrónica), la cual entrega la mayor información de la fuerza del enlace, pues a diferencia de , la energía electrónica es la única que considera la **energía de punto cero**.

# ¿Qué es la Energía del Punto Cero?

- El concepto de la energía del punto cero surge del **principio de la incertidumbre**.
- Este principio fue enunciado por W. Heisenberg en 1927, impone la imposibilidad de definir la ubicación de un electron en un momento preciso.
- Pero, si en el **cero absoluto**, si la partícula no se mueve, su momento y su posición se conocen simultáneamente, violando el principio de la incertidumbre y por lo tanto debe poseer algún movimiento y alguna energía de donde proceda.

# Resultados del método

- Otras que son utilizadas son  $\Delta H_{298}^0$  y  $\Delta E_0$ , donde la última es de mayor uso. La **energía de Punto Cero** es lo que diferencia de  $\Delta H_{298}^0$  y  $\Delta E_e$  cuya relación está dada por:

$$\Delta H_{298}^0 = \Delta E_e - (\text{Energía del Punto Cero}) - (\Delta E_{rot} + \Delta E_{trans}) + W$$

- La entalpía estándar es menor que la energía de enlace, aunque algunos pocos autores utilizan valores obtenidos de ella.



# Conclusión

- Finalmente se concluye que los cambios de entalpía entregan algo mas que la energía de ruptura y formación, pero no definen la fuerza del enlace, por no ser realmente aproximado
- El Modelo funciona y es mas aproximado a la realidad.