

II.1 Termochimie

II.1.1. Termochimie - glosar de termeni și concepte

Termochimia este ramura chimiei care se ocupă cu studiul efectelor calorice care însoțesc reacțiile chimice.

Factorii macroscopici caracteristici unui sistem termodinamic, adică **parametri de stare**, sunt: presiunea, volumul, temperatura și cantitatea de substanță.

Energia degajată sau absorbită într-o reacție chimică se numește **căldură de reacție**; măsurată la presiune constantă, căldura de reacție reprezintă **entalpia de reacție**, care se notează cu $\Delta_r H$.

Semnul efectului termic a fost stabilit convențional:

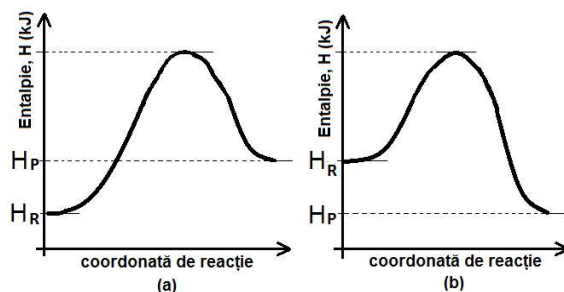
- în raport cu mediul exterior: dacă mediul exterior primește căldură de la sistemul de reacție, efectul termic, Q , este negativ;

- în raport cu sistemul, efectul termic se raportează la variația de entalpie: dacă sistemul cedează energie, entalpia se notează (minus) $-\Delta H$, iar dacă sistemul absoarbe energie, entalpia se notează (plus) $+\Delta H$.

Din punct de vedere energetic, un sistem este cu atât mai stabil cu cât este mai sărac în energie.

Reacțiile endoterme sunt reacțiile care au loc cu absorbție de căldură (situația (a) din figură).

Reacțiile exoterme sunt reacțiile în care se eliberează căldură (situația (b) din figură).



Energia acceptată sau cedată de un sistem **depinde numai de starea inițială și de starea finală a sistemului.**

Pentru o reacție chimică Reactanți $\rightarrow$ Produși de reacție, variația de entalpie este:

$$\Delta_r H^0 = \sum n_p H_p^0 - \sum n_r H_r^0$$

Într-o reacție chimică, variația de energie este consecința scindării legăturilor în moleculele reactanților și formarea altor legături în moleculele produșilor de reacție:

- scindarea legăturilor din moleculele reactanților este un fenomen endoterm
- formarea legăturilor din moleculele produșilor de reacție este un fenomen exoterm.

Variația de entalpie în reacția de sinteză a unui mol de substanță din elementele chimice componente se numește **entalpie de formare ($\Delta_f H^0$)** sau căldură de formare și se determină în condiții standard de presiune și temperatură. Convențional, entalpia molară de formare standard a unei substanțe chimice elementare este considerată zero, iar dintre stările alotropice cea mai stabilă are, de asemenea, valoarea zero. Entalpia molară de formare se exprimă în kilojouli pe mol.

Entalpia unui sistem este o funcție de stare, o măsură a energiei sistemului disponibilă sub formă de căldură la presiune constantă.

Schimbările energetice care însoțesc fenomenele fizice sau chimice **au loc cu respectarea legii conservării energiei**.

Legea lui Hess – Căldura absorbită sau degajată într-o reacție chimică este constantă și depinde numai de stările inițială și finală a sistemului, indiferent de calea urmată de reactanți pentru a se transforma în produși de reacție (căldura absorbită sau degajată într-o reacție chimică este aceeași indiferent dacă transformarea are loc într-o singură etapă sau în mai multe).

Această lege poate fi considerată o consecință a legii conservării energiei și are avantajul de a permite calculul căldurilor de formare ale unor substanțe care nu pot fi obținute prin sinteză directă sau care au loc în condiții dificile ce nu permit măsurarea practică a acestora.

Entalpiile, ca funcții de stare, **sunt aditive** ca și reacțiile pe care le însoțesc. Ecuația termochimică a reacției globale este rezultatul însumării ecuațiilor termochimice ale diferitelor etape ale mecanismului de reacție.

Legea lui Hess poate fi utilizată pentru:

- determinarea energiei de rețea;
- determinarea căldurilor de formare pentru anumite substanțe din căldurile de reacție.

Arderea combustibililor, numită și combustie, se desfășoară în mod obișnuit, în condiții izobare. De aceea, **căldura de combustie** reprezintă variația de entalpie în procesul de ardere a unui combustibil.

Puterea calorică a unui combustibil reprezintă căldura degajată la arderea unității de masă sau de volum a combustibilului. Deoarece căldura degajată la arderea combustibililor diferă în funcție de starea de agregare a apei care rezultă din reacție, se definesc două puteri calorice:

- putere calorică superioară, dacă din reacție rezultă apă în stare lichidă;
- putere calorică inferioară, dacă din reacție rezultă apă în stare gazoasă

Căldura molară de neutralizare sau entalpia molară de neutralizare reprezintă căldura degajată în reacția unui mol de ioni hidroniu (H_3O^+) cu un mol de ioni hidroxid (HO^-). Căldura molară de neutralizare a acizilor monoprotici tari cu baze monoacide tari, în soluție apoasă diluată, nu depinde de natura reactanților și are o valoare constantă de $-57,27 \text{ kJ/mol}$. Căldura degajată sau absorbită la dizolvarea unui mol dintr-o substanță într-o cantitate foarte mare de solvent se numește **căldura molară de dizolvare**.

Principală sursă energetică a lumii vii o reprezintă **zaharidele**. Acestea sunt sintetizate în plante utilizând energia luminii solare. O parte din energia eliberată prin degradarea oxidativă a substanțelor energetice este înmagazinată ca energie chimică în legăturile macroergice din ATP. Prin desfacerea acestor legături, în reacții de hidroliză, o parte din energia stocată se eliberează pentru a fi utilizată în alte procese biologice. O altă parte din această energie este transformată în energie calorică sau în alte forme de energie. Alimentele reprezintă combustibilul care ne furnizează energia; valoarea energetică a acestora se măsoară în kilocalorii raportate la o anumită cantitate de produs. Rația alimentară trebuie să asigure organismului cantități suficiente de proteine, glucide, grăsimi, vitamine și minerale (microelemente).