## Unitats de mesura

Magnitud	Unitat a SI	Símbol SI	Unitat a CGS	Símbol CGS	Dimensió
Longitud	metre	m	centímetre	cm	
Volum	litre	${f L}$			
Massa	kilogram	kg	gram	g	
Temperatura	kelvin	K			
$\operatorname{mol}^{-}$	$\operatorname{mol}$	mol			
temps	segon	$\mathbf{s}$	segon	S	
Freqüència	hertz	Hz			$s^{-1}$
Inductància	henry	H			
Energia	joule	J			
Força	newton	N	dines	dynes	
Pressió	pascal	Pa		v	
Potencial elèctric	volt	V			
Potència	watt	W			

Taula 1: Algunes unitats del SI rellevants per a aquest curs

Magnitud	Unitat (EUA)	Equivalència en SI
Volum	$1  \mathrm{in}^3$	$16.387\mathrm{cm}^3$
Volum	$1\mathrm{ft}^3$	$28.317\mathrm{L}$
Volum	$1\mathrm{gal}\;(\mathrm{US})$	$3.785\mathrm{L}$
Pressió	1 psi	$6.895\mathrm{kPa}$
Pressió	$1\mathrm{atm}$	$101.325\mathrm{kPa}$
Pressió	$1\mathrm{inHg}$	$3.386\mathrm{kPa}$
Temperatura	1 F	$T_C = (T_F - 32) \times \frac{5}{9}$
Massa	1 oz	$28.35\mathrm{g}$
Massa	$1  \mathrm{lb}$	$0.4536\mathrm{kg}$
Massa	1 t (US)	$907.184\mathrm{kg}$

Taula 2: Conversió d'unitats del sistema americà al SI

Unitat de Pressió	Pressió (en relació a 1 atm)
Atmosfera (atm)	1 atm
Pascal (Pa)	$101325\mathrm{Pa}$
Bar	$1.01325\mathrm{bar}$
Mil·límetre de mercuri (mmHg)	$760\mathrm{mmHg}$
Torra (Torr)	$760\mathrm{Torr}$
Pounds per square inch (psi)	$14.696\mathrm{psi}$
Kilopascal (kPa)	$101.325\mathrm{kPa}$

Taula 3: Comparació de les unitats de pressió amb 1 atmosfera

Valor de la constant dels gasos R	Unitats
0.082	$\mathrm{atm}\mathrm{L}\mathrm{mol}^{-1}\mathrm{K}^{-1}$
8.3145	${ m m}^3{ m Pa}{ m K}^{-1}{ m mol}^{-1}$
8.3145	$\mathrm{JK^{-1}mol^{-1}}$
62.363	$L \operatorname{Torr} K^{-1} \operatorname{mol}^{-1}$
$1.9872 \times 10^{-3}$	$\operatorname{kcal} K^{-1} \operatorname{mol}^{-1}$
$8.205 \times 10^{-5}$	${ m m}^3{ m atm}{ m K}^{-1}{ m mol}^{-1}$

Taula 4: Conversió de la constant dels gasos en diferents unitats

### Dades termodinàmiques

Substància	Calor de Fusió		Calor de	Vaporització
	$\Delta H_{\rm fus} \; ({\rm J/g})$	$\Delta H_{\rm fus}~({\rm kJ/mol})$	$\Delta H_{\mathrm{vap}} \; (\mathrm{J/g})$	$\Delta H_{\rm vap}~({\rm kJ/mol})$
Alumini	321	8.66	11400	307.6
Benzè	127.4	10.0	390	30.5
Coure	207	13.2	5069	322.1
Or	67	13.2	1578	310.9
Ferro	209	11.7	6340	354.1
Plom	22.4	4.64	871	180.5
Metà	59	0.946	537	8.61
Mercuri	11.6	2.33	295	5.92
Metanol	98.8	3.17	1100	35.2
Nitrogen	25.5	0.715	200	5.60
Sodi	113	2.60	4237	97.42
Aigua	334	6.02	2260	40.7

Taula 5: Calor de Fusió i Vaporització d'algunes substàncies pures (específic  $\Delta H$  en J/g i Molar  $\Delta H$  en kJ/mol)

#### Valors Clau de Termodinàmica

La taula següent mostra els valors clau de termodinàmica per a diverses substàncies, extrets de la taula ÇODATA KEY VALUES FOR THERMODYNAMICS" a [1]. La taula inclou l'entalpia estàndard de formació a 298.15 K, l'entropia a 298.15 K i la quantitat  $H^{\circ}$  (298.15 K)- $H^{\circ}$  (0 K). Un valor de 0 a la columna  $\Delta_f H^{\circ}$  per a un element indica l'estat de referència per a aquest element. La pressió de l'estat estàndard és 100 000 Pa (1 bar).

Substància	$\Delta_f H^{\circ} \ (298.15 \ {\rm K})$	$S^{\circ} (298.15 \text{ K})$	$H^{\circ} (298.15 \text{ K}) - H^{\circ} (0)$
	(kJ/mol)	(J/K/mol)	(kJ/mol)
Ar (g)	0	$154.846\pm0.003$	$6.197 \pm 0.001$
C (cr, graphite)	0	$5.74 \pm 0.10$	$1.050 \pm 0.020$
C(g)	$716.68 \pm 0.45$	$158.100\pm0.003$	$6.536 \pm 0.001$
CO(g)	$-110.53 \pm 0.17$	$197.660\pm0.004$	$8.671 \pm 0.001$
$CO_2$ (aq, undissoc.)	$-413.26 \pm 0.20$	$119.36 \pm 0.60$	
$CO_2$ (g)	$-393.51 \pm 0.13$	$213.785\pm0.010$	$9.365 \pm 0.003$
$CO_3^{2-}$ (aq)	$-675.23 \pm 0.25$	$-50.0 \pm 1.0$	
$H_2(g)$	0	$130.680 \pm 0.003$	$8.468 \pm 0.001$
$H_2O(g)$	$-241.826 \pm 0.040$	$188.835\pm0.010$	$9.905 \pm 0.005$
$H_2O(1)$	$-285.830 \pm 0.040$	$69.95 \pm 0.03$	$13.273 \pm 0.020$
$H_2PO_4^-$ (aq)	$-1302.6 \pm 1.5$	$92.5 \pm 1.5$	
$H_2S$ (aq, undissoc.)	$-38.6 \pm 1.5$	$126 \pm 5$	

Substància	$\Delta_f H^{\circ} (298.15 \text{ K})$	S° (298.15 K)	<i>H</i> ° (298.15 K)− <i>H</i> ° (0)
	(kJ/mol)	(J/K/mol)	(kJ/mol)
$H_2S$ (g)	$-20.6 \pm 0.5$	$205.81\pm0.05$	$9.957 \pm 0.010$
N(g)	$472.68 \pm 0.40$	$153.301\pm0.003$	$6.197 \pm 0.001$
$NH_3$ (g)	$-45.94 \pm 0.35$	$192.77 \pm 0.05$	$10.043 \pm 0.010$
$NH_4^+$ (aq)	$-133.26 \pm 0.25$	$111.17 \pm 0.40$	
$NO_3^-$ (aq)	$-206.85 \pm 0.40$	$146.70 \pm 0.40$	
$N_2$ (g)	0	$191.609\pm0.004$	$8.670 \pm 0.001$
S(g)	$277.17 \pm 0.15$	$167.829\pm0.006$	$6.657 \pm 0.001$
$SO_2(g)$	$-296.81 \pm 0.20$	$248.223\pm0.050$	$10.549 \pm 0.010$
$SO_4^{2-}$ (aq)	$-909.34 \pm 0.40$	$18.50 \pm 0.40$	
$C_3H_8(g)$	$-104.7 \pm 0.4$	$269.91 \pm 0.10$	$14.66 \pm 0.05$
$H_2(g)$	0	$130.680\pm0.003$	$8.468 \pm 0.001$
$H_2O(g)$	$-241.826 \pm 0.040$	$188.835\pm0.010$	$9.905 \pm 0.005$
$H_2O(l)$	$-285.830 \pm 0.040$	$69.95 \pm 0.03$	$13.273 \pm 0.020$
$\mathrm{H_2PO_4^-}\left(\mathrm{aq}\right)$	$-1302.6 \pm 1.5$	$92.5 \pm 1.5$	
$H_2S$ (aq, undissoc.)	$-38.6 \pm 1.5$	$126 \pm 5$	
$H_2S(g)$	$-20.6 \pm 0.5$	$205.81 \pm 0.05$	$9.957 \pm 0.010$
N(g)	$472.68 \pm 0.40$	$153.301 \pm 0.003$	$6.197 \pm 0.001$
$NH_3(g)$	$-45.94 \pm 0.35$	$192.77 \pm 0.05$	$10.043 \pm 0.010$
$NH_4^+$ (aq)	$-133.26 \pm 0.25$	$111.17 \pm 0.40$	
$NO_3^-$ (aq)	$-206.85 \pm 0.40$	$146.70 \pm 0.40$	
$N_2$ (g)	0	$191.609\pm0.004$	$8.670 \pm 0.001$
S(g)	$277.17 \pm 0.15$	$167.829 \pm 0.006$	$6.657 \pm 0.001$
$SO_2(g)$	$-296.81 \pm 0.20$	$248.223\pm0.050$	$10.549 \pm 0.010$
$SO_4^{2-}$ (aq)	$-909.34 \pm 0.40$	$18.50 \pm 0.40$	

Taula 6: Valors clau de termodinàmica per a diverses substàncies [wagman'codata'1989]

#### Calor de Combustió

El calor de combustió d'una substància a 25°C es pot calcular a partir de les dades d'entalpia de formació ( $\Delta_f H^{\circ}$ ). Podem escriure la reacció general de combustió com:

$$X + O_2 \longrightarrow CO_2(g) + H_2O(l) + Y$$

Per a un compost que conté només carboni, hidrogen i oxigen, la reacció és simplement:

$$\mathrm{C_aH_bO_c} + \left(a + \frac{b}{4} - \frac{c}{2}\right)\mathrm{O_2} \, \longrightarrow \, \mathrm{aCO_2(g)} + \frac{b}{2}\,\mathrm{H_2O(l)}$$

i la calor estàndard de combustió  $\Delta_c H^{\circ}$ , que es defineix com el negatiu del canvi d'entalpia per a la reacció (és a dir, el calor alliberat en el procés de combustió),

es dóna per:

$$\Delta_c H^{\circ} = -a\Delta_f H^{\circ}(CO_2, g) - \frac{b}{2}\Delta_f H^{\circ}(H_2O, l) + \Delta_f H^{\circ}(C_a H_b O_c)$$
$$= 393.51a + 142.915b + \Delta_f H^{\circ}(C_a H_b O_c)$$

Aquesta equació s'aplica si els reactius comencen en els seus estats estàndard (25°C i una atmosfera de pressió) i els productes tornen a les mateixes condicions. La mateixa equació s'aplica a un compost que conté un altre element si aquest element acaba en el seu estat de referència estàndard (per exemple, nitrogen, si el producte és  $N_2$ ); en general, però, els productes exactes que contenen els altres elements han de ser coneguts per calcular el calor de combustió.

La taula següent dóna la calor estàndard de combustió calculat d'aquesta manera per a algunes substàncies representatives (adaptat de la taula "Heat of Combustion" a [1]).

Fórmula Molecular	Nom	$\Delta_c H^{\circ} \text{ (kJ/mol)}$
$C_3H_8O$	1-Propanol (l)	2021.3
$C_3H_8O_3$	Glicerol (l)	1655.4
$C_4H_{10}O$	Èter dietílic (l)	2723.9
$C_5H_{12}O$	1-Pentanol (l)	3330.9
$C_6H_6$	Fenol (s)	3053.5
Substàncies Inorgàniques		
$\mathbf{C}$	Carboni (grafit)	393.5
CO	Monòxid de carboni (g)	283.0
$\mathrm{H}_2$	Hidrogen (g)	285.8
$\mathrm{H_{3}N}$	Amoníac (g)	382.8
$\mathrm{H_4N_2}$	Hidrazina (g)	667.1
$N_2O$	Òxid nitrós (g)	82.1
Compostos de Carbonil		
$\mathrm{CH_{2}O}$	Formaldehid (g)	726.1
$C_2H_2O$	Cetè (g)	1366.8
$\mathrm{C_2H_4O}$	Acetaldehid (l)	1460.4
$C_3H_6O$	Acetona (l)	1189.2
$C_3H_6O$	Propanal (l)	1822.7
$C_4H_8O$	2-Butanona (l)	2444.1
Hidrocarburs		
$\mathrm{CH}_4$	Metà (g)	890.8
$C_2H_2$	Acetilè (g)	1301.1
$\mathrm{C_2H_4}$	Etilè (g)	1411.2
$\mathrm{C_2H_6}$	Età (g)	1560.7
$C_3H_6$	Propilè (g)	2058.0
$C_3H_6$	Ciclopropà (g)	2091.3
$C_3H_8$	Propà (g)	2219.2

Fórmula Molecular	Nom	$\Delta_c H^{\circ} \text{ (kJ/mol)}$
$C_4H_6$	1,3-Butadiè (g)	2541.5
$C_4H_{10}$	Butà (g)	2877.6
$\mathrm{C_{5}H_{12}}$	Pentà (l)	3509.0
$C_6H_6$	Benzè (l)	3267.6
$C_6H_{12}$	Ciclohexà (l)	3919.6
$C_6H_{14}$	Hexà (l)	4163.2
$C_7H_8$	Toluè (l)	3910.3
$C_7H_{16}$	Heptà (l)	4817.0
$C_{10}H_{8}$	Naftalè (s)	5156.3
Alcohols i Èters		
$\mathrm{CH_{4}O}$	Metanol (l)	570.7
$C_2H_6O$	Etanol (1)	1025.4
$C_2H_6O$	Èter dimetílic (g)	1166.9
$C_2H_6O_2$	Etilè glicol (l)	1789.9
Àcids i Èsters		
$\mathrm{CH_2O_2}$	Àcid fòrmic (1)	254.6
$C_2H_4O_2$	Àcid acètic (1)	874.2
$C_2H_4O_2$	Formiat de metil (1)	972.6
$C_3H_6O_2$	Acetat de metil (l)	1592.2
$C_4H_8O_2$	Acetat d'etil (l)	2238.1
$C_7H_6O_2$	Àcid benzoic (s)	3226.9
Compostos de Nitrogen		
CHN	Cianur d'hidrogen (g)	671.5
$\mathrm{CH_{3}NO_{2}}$	Nitrometà (l)	709.2
$\mathrm{CH_5N}$	Metilamina (g)	1085.6
$C_2H_3N$	Acetonitril (l)	1247.2
$C_2H_5NO$	Acetamida (s)	1184.6
$C_3H_9N$	Trimetilamina (g)	2443.1
$C_5H_5N$	Piridina (l)	2782.3
$\mathrm{C_6H_7N}$	Anilina (l)	3392.8

Taula 7: Calor estàndard de combustió de diverses substàncies. Adaptat de la taula "Heat of Combustion" a [1]

# Bibliografia

[1] David R Lide et al. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. en. Boca Raton, FL: CRC Press, 2005.