

Formulari i Taules de Química General

Jordi Villà i Freixa

23 de febrer de 2025

Índex

1	Formulari de Química General	1
1.1	Constants	1
1.2	Fórmules	2
2	Unitats de mesura	2
3	Dades termodinàmiques	5
3.1	Calor de Combustió	6
3.2	Energies d'enllaç	8
4	Enllaços d'interès	9

1 Formulari de Química General

1.1 Constants

Taula 1: Constants rellevants per a aquest curs

Constant	Valor
Número d'Avogadro	$6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Càrrega d'un electró	$1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
Massa d'un electró	$9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Massa d'un protó	$1.673 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Massa d'un neutró	$1.675 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Constant de Planck	$6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$
Constant de Boltzmann	$1.381 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
Constant dels gasos	$8.314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
Constant de Faraday	$96\,485 \text{ C mol}^{-1}$
Constant de gravitació universal	$6.674 \times 10^{-11} \text{ N m}^2 \text{ kg}^{-2}$

1.2 Fórmules

Taula 2: Fórmules rellevants per a aquest curs

Fórmula	Descripció
$p = mv$	Relació entre el moment lineal, la massa i la velocitat
$KE = \frac{1}{2}mv^2$	Energia cinètica d'un cos en moviment
$P = \frac{F}{A}$	Definició de pressió
$PV = nRT$	Llei dels gasos ideals
$Q = mc\Delta T$	Calor transferit en un procés de canvi de temperatura
$Q = n\Delta H$	Calor transferit en un procés de canvi d'entalpia

2 Unitats de mesura

Taula 3: Algunes unitats del SI rellevants per a aquest curs, incloent la seva anàlisi dimensional. El sistema CGS (centímetre-gram-segon) és un sistema de mesura que utilitza el centímetre, el gram i el segon com a unitats bàsiques de longitud, massa i temps respectivament.

Magnitud	Unitat a SI	Símbol SI	Dimensió
Longitud	metre	m	L
Volum	litre	L	L ³
Massa	kilogram	kg	M
Temperatura	kelvin	K	Θ
mol	mol	mol	N
temps	segon	s	T
Freqüència	hertz	Hz	T ⁻¹
Energia	joule	J	ML ² T ⁻²
Força	newton	N	MLT ⁻²
Pressió	pascal	Pa	ML ⁻¹ T ⁻²
Potencial elèctric	volt	V	ML ² T ⁻³ I ⁻¹
Potència	watt	W	ML ² T ⁻³

Taula 4: Conversió d'unitats del sistema americà al Sistema Internacional (SI)

Magnitud	Unitat (EUA)	Equivalència en SI
Volum	1 in ³	16.387 cm ³

Volum	1 ft ³	28.317 L
Volum	1 gal (US)	3.785 L
Pressió	1 psi	6.895 kPa
Pressió	1 atm	101.325 kPa
Pressió	1 inHg	3.386 kPa
Temperatura	1 F	$T_C = (T_F - 32) \times \frac{5}{9}$
Massa	1 oz	28.35 g
Massa	1 lb	0.4536 kg
Massa	1 t (US)	907.184 kg

Taula 5: Comparació de les unitats de pressió amb 1 atmosfera

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

Taula 6: Conversió de la constant dels gasos en diferents unitats

Valor de la constant dels gasos R	Unitats
0.082	atm L mol ⁻¹ K ⁻¹
8.3145	m ³ Pa K ⁻¹ mol ⁻¹
8.3145	J K ⁻¹ mol ⁻¹
62.363	L Torr K ⁻¹ mol ⁻¹
1.9872×10^{-3}	kcal K ⁻¹ mol ⁻¹
8.205×10^{-5}	m ³ atm K ⁻¹ mol ⁻¹

3 Dades termodinàmiques

Taula 7: Calor de Fusió i Vaporització d'algunes substàncies pures
(específic ΔH en J/g i Molar ΔH en kJ/mol)

Substància	Calor de Fusió		Calor de Vaporització	
	ΔH_{fus} (J/g)	ΔH_{fus} (kJ/mol)	ΔH_{vap} (J/g)	ΔH_{vap} (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

La taula següent mostra els valors clau de termodinàmica per a diverses substàncies, extrets de la taula *CODATA KEY VALUES FOR THERMODYNAMICS* a [2, 3]. La taula inclou l'entalpia estàndard de formació a 298.15 K, l'entropia a 298.15 K i la quantitat H° (298.15 K) - H° (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 10^5 Pa (1 bar).

Taula 8: Valors termodinàmics per a diverses substàncies [2]

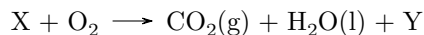
Substància	$\Delta_f H^\circ$ (298.15 K) (kJ/mol)	S° (298.15 K) (J/K/mol)	H° (298.15 K) - H° (0) (kJ/mol)
Ar (g)	0	154.846 ± 0.003	6.197 ± 0.001
C (cr, graphite)	0	5.74 ± 0.10	1.050 ± 0.020
C (g)	716.68 ± 0.45	158.100 ± 0.003	6.536 ± 0.001
CO (g)	-110.53 ± 0.17	197.660 ± 0.004	8.671 ± 0.001
CO ₂ (aq, undissoc.)	-413.26 ± 0.20	119.36 ± 0.60	
CO ₂ (g)	-393.51 ± 0.13	213.785 ± 0.010	9.365 ± 0.003
CO ₃ ²⁻ (aq)	-675.23 ± 0.25	-50.0 ± 1.0	
H ₂ (g)	0	130.680 ± 0.003	8.468 ± 0.001
H ₂ O (g)	-241.826 ± 0.040	188.835 ± 0.010	9.905 ± 0.005
H ₂ O (l)	-285.830 ± 0.040	69.95 ± 0.03	13.273 ± 0.020
H ₂ PO ₄ ⁻ (aq)	-1302.6 ± 1.5	92.5 ± 1.5	
H ₂ S (aq, undissoc.)	-38.6 ± 1.5	126 ± 5	

Taula 8: Valors termodinàmics per a diverses substàncies [2]

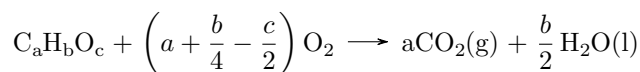
Substància	$\Delta_f H^\circ$ (298.15 K) (kJ/mol)	S° (298.15 K) (J/K/mol)	H° (298.15 K)– H° (0) (kJ/mol)
H ₂ S (g)	-20.6 ± 0.5	205.81 ± 0.05	9.957 ± 0.010
N (g)	472.68 ± 0.40	153.301 ± 0.003	6.197 ± 0.001
NH ₃ (g)	-45.94 ± 0.35	192.77 ± 0.05	10.043 ± 0.010
NH ₄ ⁺ (aq)	-133.26 ± 0.25	111.17 ± 0.40	
NO ₃ ⁻ (aq)	-206.85 ± 0.40	146.70 ± 0.40	
N ₂ (g)	0	191.609 ± 0.004	8.670 ± 0.001
S (g)	277.17 ± 0.15	167.829 ± 0.006	6.657 ± 0.001
SO ₂ (g)	-296.81 ± 0.20	248.223 ± 0.050	10.549 ± 0.010
SO ₄ ²⁻ (aq)	-909.34 ± 0.40	18.50 ± 0.40	
C ₃ H ₈ (g)	-104.7 ± 0.4	269.91 ± 0.10	14.66 ± 0.05
H ₂ (g)	0	130.680 ± 0.003	8.468 ± 0.001
H ₂ O (g)	-241.826 ± 0.040	188.835 ± 0.010	9.905 ± 0.005
H ₂ O (l)	-285.830 ± 0.040	69.95 ± 0.03	13.273 ± 0.020
H ₂ PO ₄ ⁻ (aq)	-1302.6 ± 1.5	92.5 ± 1.5	
H ₂ S (aq, undissoc.)	-38.6 ± 1.5	126 ± 5	
H ₂ S (g)	-20.6 ± 0.5	205.81 ± 0.05	9.957 ± 0.010
N (g)	472.68 ± 0.40	153.301 ± 0.003	6.197 ± 0.001
NH ₃ (g)	-45.94 ± 0.35	192.77 ± 0.05	10.043 ± 0.010
NH ₄ ⁺ (aq)	-133.26 ± 0.25	111.17 ± 0.40	
NO ₃ ⁻ (aq)	-206.85 ± 0.40	146.70 ± 0.40	
N ₂ (g)	0	191.609 ± 0.004	8.670 ± 0.001
S (g)	277.17 ± 0.15	167.829 ± 0.006	6.657 ± 0.001
SO ₂ (g)	-296.81 ± 0.20	248.223 ± 0.050	10.549 ± 0.010
SO ₄ ²⁻ (aq)	-909.34 ± 0.40	18.50 ± 0.40	

3.1 Calor de Combustió

La 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:



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



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 dona per:

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

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 N₂); en general, però, els productes exactes que contenen els altres elements han de ser coneguts per calcular el calor de combustió.

Taula 9: Calor estàndard de combustió de diverses substàncies.
Adaptat de la taula *Heat of Combustion* a [3]

Fórmula Molecular	Nom	$\Delta_c H^\circ$ (kJ/mol)
C ₃ H ₈ O	1-Propanol (l)	2021.3
C ₃ H ₈ O ₃	Glicerol (l)	1655.4
C ₄ H ₁₀ O	Èter dietílic (l)	2723.9
C ₅ H ₁₂ O	1-Pentanol (l)	3330.9
C ₆ H ₆	Fenol (s)	3053.5
Substàncies Inorgàniques		
C	Carboni (grafit)	393.5
CO	Monòxid de carboni (g)	283.0
H ₂	Hidrogen (g)	285.8
H ₃ N	Amoníac (g)	382.8
H ₄ N ₂	Hidrazina (g)	667.1
N ₂ O	Òxid nitrós (g)	82.1
Compostos de Carbonil		
CH ₂ O	Formaldehid (g)	726.1
C ₂ H ₂ O	Cetè (g)	1366.8
C ₂ H ₄ O	Acetaldehid (l)	1460.4
C ₃ H ₆ O	Acetona (l)	1189.2
C ₃ H ₆ O	Propanal (l)	1822.7
C ₄ H ₈ O	2-Butanona (l)	2444.1
Hidrocarburs		
CH ₄	Metà (g)	890.8
C ₂ H ₂	Acetilè (g)	1301.1
C ₂ H ₄	Etilè (g)	1411.2
C ₂ H ₆	Età (g)	1560.7
C ₃ H ₆	Propilè (g)	2058.0
C ₃ H ₆	Ciclopropà (g)	2091.3
C ₃ H ₈	Propà (g)	2219.2

Taula 9: Calor estàndard de combustió de diverses substàncies.
Adaptat de la taula *Heat of Combustion* a [3]

Fórmula Molecular	Nom	$\Delta_c H^\circ$ (kJ/mol)
C ₄ H ₆	1,3-Butadiè (g)	2541.5
C ₄ H ₁₀	Butà (g)	2877.6
C ₅ H ₁₂	Pentà (l)	3509.0
C ₆ H ₆	Benzè (l)	3267.6
C ₆ H ₁₂	Ciclohexà (l)	3919.6
C ₆ H ₁₄	Hexà (l)	4163.2
C ₇ H ₈	Toluè (l)	3910.3
C ₇ H ₁₆	Heptà (l)	4817.0
C ₁₀ H ₈	Naftalè (s)	5156.3
Alcohols i Èters		
CH ₄ O	Metanol (l)	570.7
C ₂ H ₆ O	Etanol (l)	1025.4
C ₂ H ₆ O	Èter dimetilic (g)	1166.9
C ₂ H ₆ O ₂	Etilè glicol (l)	1789.9
Àcids i Èsters		
CH ₂ O ₂	Àcid fòrmic (l)	254.6
C ₂ H ₄ O ₂	Àcid acètic (l)	874.2
C ₂ H ₄ O ₂	Formiat de metil (l)	972.6
C ₃ H ₆ O ₂	Acetat de metil (l)	1592.2
C ₄ H ₈ O ₂	Acetat d'etil (l)	2238.1
C ₇ H ₆ O ₂	Àcid benzoic (s)	3226.9
Compostos de Nitrogen		
CHN	Cianur d'hidrogen (g)	671.5
CH ₃ NO ₂	Nitrometà (l)	709.2
CH ₅ N	Metilamina (g)	1085.6
C ₂ H ₃ N	Acetonitril (l)	1247.2
C ₂ H ₅ NO	Acetamida (s)	1184.6
C ₃ H ₉ N	Trimetilamina (g)	2443.1
C ₅ H ₅ N	Piridina (l)	2782.3
C ₆ H ₇ N	Anilina (l)	3392.8

3.2 Energies d'enllaç

Taula 10: Valors mitjans d'energies d'enllaços senzills a 298 K en kJ mol^{-1} [1]

	S	Si	I	Br	Cl	F	O	N	C	H
H	339	339	299	366	432	563	463	391	413	436
C	259	290	240	276	328	441	351	292	348	
N					200	270		161		
O		369			203	185	139			
F		541	258	237	254	153				
Cl	250	359	210	219	243					
Br		289	178	193						
I		213	151							
Si	227	177								
S	213									

Taula 11: Valors mitjans d'energies d'enllaços múltiples a 298 K en kJ mol^{-1} [1]

C=C	615	N=N	418	O=O	495
C≡C	812	N≡N	946		
C=O	711				

4 Enllaços d'interès

A part de les referències incloses en aquest document, es pot trobar més informació rellevant en les següents fonts:

- Sobre els errors en les mesures i la seva propagació: [4].

Referències

- [1] Aureli Caamaño Ros, Armand Servent Tarragona i Damià Obach Muntada. *Química, COU*. spa. Teide, 1991. ISBN: 978-84-307-3338-5. URL: <https://dialnet.unirioja.es/servlet/libro?codigo=53646> (cons. 09-08-2023).
- [2] J. Cox, D. Wagman i V. Medvedev. "CODATA key values for thermodynamics". A: 1989. URL: <https://www.semanticscholar.org/paper/CODATA-key-values-for-thermodynamics-Cox-Wagman/c2c548403f0478b44fb007d0b0d2acbac313aeb> (cons. 22-02-2025).
- [3] David R Lide et al. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. en. Boca Raton, FL: CRC Press, 2005.

- [4] Vern Lindberg. *Uncertainties and Error Propagation*. 2000. URL: <http://www.geol.lsu.edu/jlorenzo/geophysics/uncertainties/Uncertaintiespart1.html> (cons. 22-02-2025).