# Formulari i Taules de Química General

## Jordi Villà i Freixa

## 2 de març de 2025

# $\mathbf{\acute{I}ndex}$

	Taula periòdica  Constants	$egin{array}{c} 2 \\ 2 \end{array}$
		_
	Fórmules	3
4	Unitats de mesura	3
5	Dades termodinàmiques	6
	5.1 Calor de Combustió	7
6	Enllaços d'interès	9

# e E Sb **е ц** CADMI Spring. Pd 10 NOUE NO **.** € ∞ Small RUTENIS NEODIMI NEODIMI URANI NIOBI Pa 72 | | **H**#FN| | [36] 40°153 La La SCO

## 1 Taula periòdica

## 2 Constants

Taula 1: Constants rellevants per a aquest curs

Constant	Valor
Número d'Avogadro	$6,022 \times 10^{23} \mathrm{mol}^{-1}$
Càrrega d'un electró	$1,602 \times 10^{-19} \mathrm{C}$
Massa d'un electró	$9{,}109 \times 10^{-31} \mathrm{kg}$
Massa d'un protó	$1,673 \times 10^{-27} \mathrm{kg}$
Massa d'un neutró	$1,675 \times 10^{-27} \mathrm{kg}$
Constant de Planck	$6,626 \times 10^{-34} \mathrm{Js}$
Constant de Boltzmann	$1.381 \times 10^{-23} \mathrm{JK^{-1}}$



Constant dels gasos	$8,314\mathrm{JK^{-1}mol^{-1}}$
Constant de Faraday	$96485 \mathrm{C}\mathrm{mol}^{-1}$
Constant de gravitació universal	$6.674 \times 10^{-11} \mathrm{N} \mathrm{m}^2 \mathrm{kg}^{-2}$

#### 3 Fórmules

Taula 2: Fórmules rellevants per a aquest curs

Fórmula	Descripció
p = mv	Relació entre el moment lineal, la massa i la velocitat
$KE = \frac{1}{2}mv^2$ $P = \frac{F}{A}$	Energia cinètica d'un cos en moviment
$P = \frac{F}{A}$	Definició de pressió
PV = nRT	Llei dels gasos ideals
$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$	Equacó de van der Waals
$\dot{w} = -P\Delta V$	Treball exercit sobre un gas
U = q + w	Primera llei de la termodinàmica
H = U + PV	Definició d'entalpia
$dS = \frac{dq_{\text{rev}}}{T}$	Definició d'entropia
G = H - TS	Definició d'energia lliure de Gibbs
$q_v = n\Delta U$	Calor a volum constant
$q_p = n\Delta H$	Calor a pressió constant
$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$	Canvi d'energia lliure de Gibbs

#### 4 Unitats de mesura

Taula 3: Algunes unitats del SI rellevants per a aquest curs, incloent la seva anàlisi dimensional. El sistema CGS (centímetregram-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	$\operatorname{mol}$	mol	N
temps	segon	S	Т
Freqüència	hertz	${ m Hz}$	$T^{-1}$
Energia	joule	J	$ML^2T^{-2}$



Força	newton	N	$MLT^{-2}$
Pressió	pascal	Pa	$ML^{-1}T^{-2}$
Potencial elèctric	volt	V	$ML^2T^{-3}I^{-1}$
Potència	watt	W	$ML^2T^{-3}$

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

Magnitud	Unitat (EUA)	Equivalència en SI
Volum	$1  \mathrm{in}^3$	$16,387{\rm cm}^3$
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 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)	$101325\mathrm{Pa}$
Kilopascal (kPa)	$101.325\mathrm{kPa}$
Bar	$1.01325\mathrm{bar}$
Mil·límetre de mercuri (mmHg)	$760\mathrm{mmHg}$
Torra (Torr)	$760\mathrm{Torr}$
Pounds per square inch (psi)	$14.696\mathrm{psi}$

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

Valor de la constant dels gasos R	${\bf Unitats}$
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	$ m JK^{-1}mol^{-1}$
62,363	$\mathrm{L}\mathrm{Torr}\mathrm{K}^{-1}\mathrm{mol}^{-1}$



$1,9872 \times 10^{-3}$	$\operatorname{kcal} K^{-1} \operatorname{mol}^{-1}$
$8,205 \times 10^{-5}$	$\mathrm{m}^{3}\mathrm{atm}\mathrm{K}^{-1}\mathrm{mol}^{-1}$



### 5 Dades termodinàmiques

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

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

La taula següent mostra els valors clau de termodinàmica per a diverses substàncies, extrets de la taula CODATA KEY VALUES FOR THERMODY-NAMICS a [1, 2]. 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  $10^5$  Pa (1 bar).

Taula 8: Valors termodinàmics per a diverses substàncies [1]

Substància	$\Delta_f H^{\circ} \text{ (298.15 K)}$ $\text{(kJ/mol)}$	S° (298.15 K) (J/K/mol)	$H^{\circ}$ (298.15 K)- $H^{\circ}$ (0) (kJ/mol)
Ar (g)	0	$154.846 \pm 0.003$	$6.197 \pm 0.001$
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	$130.680\pm0.003$	$8.468 \pm 0.001$
$H_2O(g)$	$-241.826 \pm 0.040$	$188.835\pm0.010$	$9.905 \pm 0.005$
$H_2O(l)$	$-285.830 \pm 0.040$	$69.95 \pm 0.03$	$13.273 \pm 0.020$
$\mathrm{H_2PO_4^-}\left(\mathrm{aq}\right)$	$-1302.6 \pm 1.5$	$92.5 \pm 1.5$	
$H_2S$ (aq, undissoc.)	$-38.6 \pm 1.5$	$126 \pm 5$	



Substància	$\Delta_f H^{\circ} (298.15 \text{ K})$	$S^{\circ} (298.15 \text{ K})$	$H^{\circ} (298.15 \text{ K}) - H^{\circ} (0)$
	(kJ/mol)	(J/K/mol)	(kJ/mol)
$H_2S(g)$	$-20.6 \pm 0.5$	$205.81 \pm 0.05$	$9.957 \pm 0.010$
N(g)	$472.68 \pm 0.40$	$153.301\pm0.003$	$6.197 \pm 0.001$
$NH_3$ (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	$191.609 \pm 0.004$	$8.670 \pm 0.001$
S(g)	$277.17 \pm 0.15$		$6.657 \pm 0.001$
$SO_2(g)$	$-296.81 \pm 0.20$	$248.223\pm0.050$	$10.549 \pm 0.010$
$SO_4^{2-}$ (aq)	$-909.34 \pm 0.40$	$18.50 \pm 0.40$	

Taula 8: Valors termodinàmics per a diverses substàncies [1]

#### 5.1 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:

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

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.

Taula 9: Calor estàndard de combustió de diverses substàncies. Adaptat de la taula *Heat of Combustion* a [2]

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		
$\mathrm{CH_2O}$	Formaldehid (g)	726.1
$C_2H_2O$	Cetè (g)	1366.8
$C_2H_4O$	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
$C_2H_4$	Etilè (g)	1411.2
$C_2H_6$	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
FACULTAT PROJUMENTS AFONOLOGIA	- (C)	

Taula 9: Calor estàndard de combustió de diverses substàncies. Adaptat de la taula *Heat of Combustion* a [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
$\mathrm{C_{7}H_{16}}$	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 (l)	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
$\mathrm{C_2H_4O_2}$	Àcid acètic (l)	874.2
$C_2H_4O_2$	Formiat de metil (l)	972.6
$\mathrm{C_3H_6O_2}$	Acetat de metil (l)	1592.2
$\mathrm{C_4H_8O_2}$	Acetat d'etil (l)	2238.1
$\mathrm{C_7H_6O_2}$	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
$\mathrm{C_5H_5N}$	Piridina (l)	2782.3
$C_6H_7N$	Anilina (l)	3392.8

## 6 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: [3].



#### Referències

- [1] 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).
- [2] David R Lide et al. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. en. Boca Raton, FL: CRC Press, 2005.
- [3] Vern Lindberg. *Uncertainties and Error Propagation*. 2000. URL: http://www.geol.lsu.edu/jlorenzo/geophysics/uncertainties/Uncertaintiespart1. html (cons. 22-02-2025).

