

## 1 FORMULARI DE QUÍMICA 1.4 PROPIETATS COL·LIGATIVES

## 1.1 TERMODINÀMICA

$$U = Q - pV, \quad dU = T dS - p dV \quad (1.1)$$

$$H = U + pV \quad (1.2)$$

$$\begin{aligned} A &= U - TS \\ G &= H - TS \end{aligned} \quad (1.3)$$

$$dG = V dp - S dT + \sum \mu_i dn_i \quad (1.4)$$

$$dS_s = \frac{dq_{\text{rev}}}{T_s} \quad (1.5)$$

$$dS_e = -\frac{dq_{\text{rev}}}{T_e} = -\frac{dH}{T_e} \quad (1.6)$$

## 1.2 CANVIS DE FASE

$$\text{Clausius-Clapeyron: } \frac{dp}{dT} = \frac{L_m}{T \Delta v_m} \quad (1.7)$$

$$\ln \left( \frac{p_A}{p_B} \right) = \frac{L}{R} \left( \frac{1}{T_B} - \frac{1}{T_A} \right) \quad (1.8)$$

## 1.3 DISSOLUCIONS

Dalton:  $p_i = p \chi_i$  (gasos ideals)

Raoult:  $p_i = p_i^* \chi_i$  (líquids ideals) (1.9)

Henry:  $p_i = k_i \chi_i$  (líquid diluït)

Gasos id.:  $\mu_i = \mu_o^g + RT \ln \chi_i$

Líquids id.:  $\mu_i = \mu^* + RT \ln \chi_i$  (1.10)

Líquids dil.:  $\mu_i = \mu_o^l + RT \ln \chi_i$

Líquids reals:  $\chi_i \mapsto a_i = \gamma_i \chi_i$

$$\text{Solubilitats: } \frac{p_A}{p_B} = \frac{S_A}{S_B} \quad (1.11)$$

$$\Delta T_e = k_b m \quad (1.12)$$

$$\Delta T_c = k_f m \quad (1.13)$$

$$\Delta p_1 = p_1^* \chi_2 \quad (1.14)$$

$$\pi = mRT \quad (1.15)$$

## 1.5 ESTRUCTURA DE LA MATÈRIA

- $n$ : nre. quàntic principal  $(0, \dots, \infty)$ .
- $l$ : nre. quàntic azimutal  $(0, \dots, n-1)$ .
- $m_l$ : nre. quàntic magnètic  $(-l, \dots, l)$ .
- $m_s$ : nre. quàntic d'spin  $(-1/2, +1/2)$ .

## ORBITALS

- $l = 0$ : orbital  $s$  (2 electrons màxim).
- $l = 1$ : orbital  $p$  (6 electrons màxim).
- $l = 2$ : orbital  $d$  (10 electrons màxim).
- $l = 3$ : orbital  $f$  (14 electrons màxim).

## 1.6 CANVI QUÍMIC

## EQUILIBRI QUÍMIC

Sigui  $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$  una reacció química.

$$\Delta_r G = \Delta_r G^0 + RT \ln Q_p \quad (1.16)$$

$$\Delta_r G \begin{cases} < 0 & \text{reacciona cap a la dreta} \\ = 0 & \text{està en l'equilibri} \\ > 0 & \text{reacciona cap a l'esquerra} \end{cases}$$

on  $Q$  és el quocient de reacció. Quan reacciona cap a la dreta es diu que la reacció és espontània.

$$\Delta_r G = \Delta_r H - T \Delta_r S \quad (1.17)$$

Per a gasos ideals tenim:

$$Q_p = \frac{\prod (p_{\text{prod}}/p^0)^{\nu_{\text{prod}}}}{\prod (p_{\text{reac}}/p^0)^{\nu_{\text{reac}}}} \quad (1.18)$$

on  $p^0 = 1 \text{ atm}$ .

Per a dissolucions ideals tenim:

$$Q_c = \frac{\prod (C_{\text{prod}}/C^0)^{\nu_{\text{prod}}}}{\prod (C_{\text{reac}}/C^0)^{\nu_{\text{reac}}}} \quad (1.19)$$

on  $C^0 = 1 \text{ M}$ .

$$Q_x \begin{cases} < K_x & \text{reacciona cap a la dreta} \\ = K_x & \text{està en l'equilibri} \\ > K_x & \text{reacciona cap a l'esquerra} \end{cases}$$

Es pot demostrar que existeix la següent relació entre les constants  $k_p$  en funció de la temperatura:

$$\ln \frac{k_p^0(T_2)}{k_p^0(T_1)} = -\frac{\Delta H^0}{R} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \quad (1.20)$$

## REACCIONS ÀCID-BASE

Hi ha diferents definicions d'àcid:

- Brønsted: que dóna protons ( $H^+$ ).
- Lewis: que agafa un parell d'electrons.

$$\begin{aligned} K_w &= [H_3O^+][OH^-] \\ &= K_a K_b = 10^{-14} \\ 14 &= pH + pOH \end{aligned} \quad (1.21)$$

$$\begin{aligned} pH &= -\log[H_3O^+] \\ pOH &= -\log[OH^-] \end{aligned} \quad (1.22)$$

## REACCIONS DE PRECIPITACIÓ

Sigui  $cAB \rightarrow aA^+ + bB^-$  una reacció química.

$$Q_{ps} = [A^+]^a [B^-]^b \quad (1.23)$$

$$Q_{ps} \begin{cases} \leq K_{ps} & \text{no precipita} \\ > K_{ps} & \text{precipita} \end{cases}$$

on  $Q_{ps}$  s'anomena el producte de solubilitat.

CELLES ELECTROQUÍMIQUES  
(REACCIONS D'OXIDACIÓ-REDUCCIÓ)

Si una cel·la opera reversiblement, es compleix

$$\begin{aligned} W_{\text{elec}} &= -\nu F E_{\text{cel·la}} \\ &= \Delta_r G = -RT \ln K \end{aligned} \quad (1.24)$$

on  $F$  és la constant de Faraday ( $9.6485 \times 10^4 \text{ C mol}^{-1}$ ),  $E_{\text{cel·la}}$  és la força electromotriu de la cel·la, i  $\nu$  és el nre. de mols d'electrons transferits en la reacció de la cel·la.

$$\text{Eq. Nernst: } E_c = E_c^0 - \frac{RT}{\nu F} \ln Q \quad (1.25)$$

on  $Q$  és el quocient de reacció.

$$E_{\text{cel·la}}^0 = E_{\text{càtode}}^0 - E_{\text{ànode}}^0 \quad (1.26)$$

$$E_{\text{cel·la}}^0 \begin{cases} < 0 & \text{no espontània} \\ > 0 & \text{espontània} \end{cases}$$

on el càtode és a on es produeix la reducció (guany d'electrons) i l'ànode és a on es produeix l'oxidació (pèrdua d'electrons).

## 1.7 CINÈTICA QUÍMICA

### VELOCITAT D'UNA REACCIÓ

Sigui  $aA + bB \longrightarrow cC + dD$  una reacció química.

$$\begin{aligned} v &= -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} \\ &= \frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{d} \frac{d[D]}{dt} \end{aligned} \quad (1.27)$$

on  $v$  és la velocitat de la reacció.

### ORDRE D'UNA REACCIÓ

$$\text{Llei de velocitat: } v = k[A]^x[B]^y \quad (1.28)$$

on  $k$  s'anomena constant de velocitat, que, com el seu nom indica, és constant  $\forall t$ ;  $x$  i  $y$  són els ordres de cada reactiu i són determinats experimentalment; poden o no coincidir amb el coeficient estequiomètric. S'anomena ordre de reacció a la suma  $x+y$ .

### REACCIONS D'ORDRE ZERO

Sigui  $aA \longrightarrow bB$  una reacció química. Mitjançant el càlcul podem arribar a la següent expressió:

$$[A]_t = [A]_0 - akt \quad (1.29)$$

### REACCIONS DE PRIMER ORDRE

Sigui  $aA \longrightarrow bB$  una reacció química. Mitjançant el càlcul podem arribar a la següent expressió:

$$\ln[A]_t = \ln[A]_0 - akt$$

o alternativament

$$\ln([B]_{\infty} - [B]_t) = \ln[B]_{\infty} - akt \quad (1.30)$$

### REACCIONS DE SEGON ORDRE

Sigui  $aA \longrightarrow bB$  una reacció química. Mitjançant el càlcul podem arribar a la següent expressió:

$$\frac{1}{[A]_t} = \frac{1}{[A]_0} + akt \quad (1.31)$$

### REACCIONS ELEMENTALS

Sigui  $aA \longrightarrow bB$  una reacció química. Llavors, l'ordre de la reacció és el coeficient estequiomètric  $a$ .

### ENERGIA D'ACTIVACIÓ

$$\text{Eq. Arrhenius: } k = Ae^{-E_a/RT} \quad (1.32)$$

on  $A$  és la freqüència de col·lisió i  $E_a$  és l'energia d'activació de la reacció.