Pauta interrogación I

Química para Ingeniería (QIM100E)

Estimados/as estudiantes:

La siguiente pauta constituye parte de la retroalimentación de la interrogación 1 y contiene todas las preguntas realizadas con sus respectivas respuestas y puntaje asignado.

La interrogación consta de 100 puntos totales de los cuales 30 corresponden a las preguntas de alternativas (3 ptos c/u) y los 70 puntos restantes se especifican en cada una de las preguntas de desarrollo. La nota debe calcularse con la siguiente ecuación:

$$\boldsymbol{Nota = \left[\frac{Ptos.obtenidos}{Ptos.totales} x\ 6,0\right] +\ 1,0\ (Pto.base)}$$

Notas para los ayudantes correctores:

- En las preguntas de desarrollo considere en las respuestas un margen de error de ±5%
- Si la respuesta no incluye unidades de medida descuente 1 punto del puntaje asociado a la pregunta
- Si la respuesta tiene el signo erróneo, descuente 2 puntos del puntaje total de la pregunta.

QUÍMICA DEL ESTADO SÓLIDO

1.- Respecto al enlace químico, indique cuál de estas afirmaciones es **FALSA**

a) A una temperatura de 0 K, la distancia de equilibrio entre los átomos de un enlace corresponde a la condición de energía cero y fuerza neta mínima.

b) La formación del enlace químico siempre va acompañada de un desprendimiento de energía.

c) La energía de enlace corresponde a la energía necesaria para romper un mol de cualquier enlace químico.

d) En el enlace metálico, los electrones de valencia de los átomos metálicos se mueven libremente, generando un mar de electrones deslocalizados.

e) El enlace iónico se da por interacciones electrostáticas entre los átomos.

2.- Respecto al estado sólido, indique cuál de estas afirmaciones es **FALSA**

a) Los sólidos amorfos carecen de una distribución tridimensional regular de los átomos en su estructura.

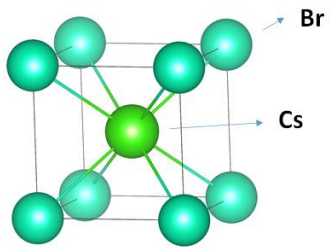
b) La estructura molecular de materiales cristalinos se puede determinar a partir de la difracción de rayos X.

c) Los cristales de tipo molecular presentan interacción por fuerzas de London, fuerzas dipolo-dipolo o enlaces de hidrógeno (puentes de hidrógeno).

d) Los materiales que tienen la misma composición química y distinto ordenamiento atómico presentarán las mismas propiedades macroscópicas.

e) Las estructuras de los cristales se pueden describir en términos de 14 redes cristalinas conocidas como Redes de Bravais.

3.- El bromuro de cesio, CsBr, es un compuesto iónico que presenta la siguiente estructura cúbica:



Al respecto indique cuál(es) de las siguientes afirmaciones es(son) **VERDADERAS:**

I) El átomo de cesio se ubica en el hueco octaédrico de la celda cúbica simple.
II) La celda unitaria se compone de 1 átomo de cesio y 1 átomo de bromo
III) La relación entre la arista de la celda (a) y el radio atómico (r) viene dada por la fórmula $a= 2r_{Cs}$
IV) El número de coordinación de la estructura es 8.
V) Es una celda cúbica centrada en el cuerpo (BCC)

a) I, II y IV
b) II y IV
c) III, IV y V
d) II, IV y V
e) I y III

4.- En relación a la teoría de bandas, indique cuál de estas afirmaciones es **FALSA**

a) Nos permite entender los fenómenos de conductividad eléctrica en los materiales sólidos.
b) El solapamiento de un gran número de orbitales atómicos, muy próximos en energías, forman lo que se conoce como una banda.
c) Los materiales aislantes de electricidad presentan una amplia separación energética entre la banda de valencia y banda de conducción.
d) Los materiales aislantes de electricidad presentan solapamiento de las bandas de valencia y de conducción.
e) La existencia de electrones en la banda de conducción, es crucial para el proceso de conducción eléctrica.

CINÉTICA QUIMICA

1.- Considere las siguientes reacciones químicas que ocurren a 25 °C

$2NO(g) + O_2(g) \rightarrow 2NO_2(g)$ $k_1 = 0{,}066\ mol^{-1}L^{-1}\ s^{-1}$ (1)

$2NH_4^+(ac) + NO_2^-(ac) \rightarrow N_2(g) + H_2O(l)$ $k_2 = 3{,}0x10^{-4}\ mol^{-1}L^{-1}\ s^{-1}$ (2)

Al respecto, indique cuál(es) de las siguientes afirmaciones es(son) **VERDADERAS**

I) Ambas reacciones son de primer orden
II) La reacción (1) ocurre a una velocidad mayor que la reacción (2)
III) En ambas reacciones, la variación de la concentración de reactivos cambiará el valor de la respectiva constante cinética, k.

a) Sólo I
b) Sólo II
c) I, II
d) II y III
e) I, II y III

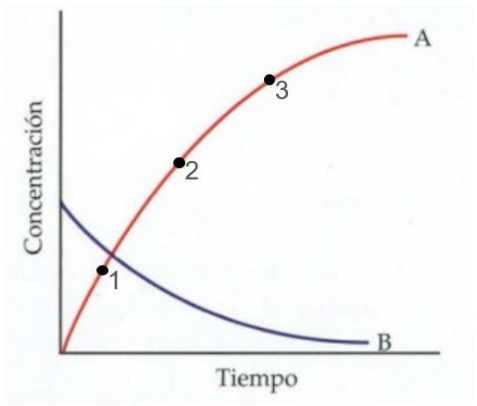
2.- La ley de velocidad para la reacción: a A + b B → Productos
Viene dada por la expresión: $v =$ [A] $[B]^2$
Por tanto, se puede afirmar que:

a) $a = 1$ y $b = 2$.
b) La reacción es de orden 2.
c) La velocidad de la reacción se hace cuatro veces mayor al duplicar la concentración de B, manteniendo constante la de A.
d) La constante de velocidad, k, es independiente de la temperatura.
e) Las unidades de la constante de velocidad para esta reacción son mol L^{-1} s^{-1} .

3.- Con respecto a la cinética química, se puede decir que:

a) Una reacción química espontánea, ocurre siempre rápidamente
b) La constante de velocidad (*k*) para una reacción varía en función de las concentraciones de los reactivos durante la reacción
c) La velocidad de una reacción (*v*) indica cómo cambia la concentración de un reactivo o producto con el tiempo.
d) Que una reacción sea de orden cero indica que la reacción no ocurrirá
e) La determinación de la velocidad instantánea de una reacción es equivalente a la velocidad promedio de la reacción

4.- Considere el siguiente gráfico de concentración (mol/L) de las especies A y B en función del tiempo:



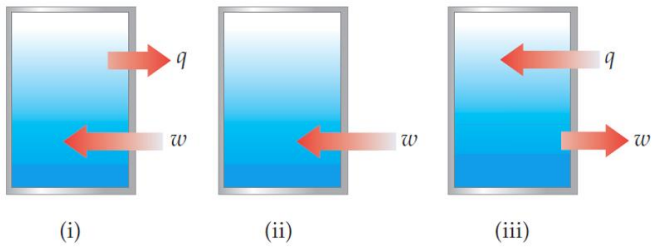
Indique cuál(es) de las siguientes afirmaciones es(son) **VERDADERAS**:

I) La ecuación química correspondiente a la gráfica es: ***A*** → ***B***
II) La ecuación química correspondiente a la gráfica es: ***B*** → ***A***
III) ***A*** corresponde al producto de la reacción ***B*** → ***A***. Para esta reacción, la velocidad promedio entre los puntos 1 y 2 será mayor que entre los puntos 2 y 3
IV) ***A*** corresponde al reactivo de la reacción ***A*** → ***B***. Para esta reacción, la velocidad promedio entre los puntos 1 y 2 será menor que entre los puntos 2 y 3
V) ***A*** corresponde al producto de la reacción ***B*** → ***A***. Para esta reacción, la velocidad promedio entre los puntos 2 y 3 será mayor que entre los puntos 1 y 2

a) Sólo I
b) Sólo II
c) Sólo I y IV
d) Sólo II y III
e) Sólo II y V

TERMOQUÍMICA

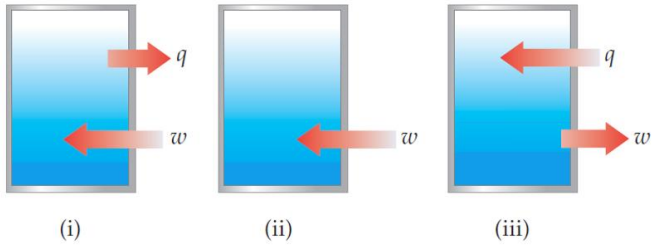
1.- En el siguiente esquema, se muestran tres situaciones (i, ii, iii) que representan el intercambio de energía (ΔE), en forma de calor (*q*) y/o trabajo (*w*) entre un sistema y el ambiente:



Considerando que la longitud de las flechas representa las magnitudes relativas de calor (*q*) y trabajo (*w*), Indique cuál de las siguientes afirmaciones es **VERDADERA**:

a) El sistema (i) es exotérmico, y está realizando trabajo (w) sobre el ambiente
b) El sistema (ii) es un sistema aislado
c) El sistema (iii) es endotérmico, y está realizando un trabajo (w) sobre el ambiente
d) Para los sistemas (i) y (ii), el cambio neto de energía interna del sistema será $\Delta E < 0$
e) Los tres sistemas son exotérmicos.

2.- En el siguiente esquema, se muestran tres situaciones (i, ii, iii) que representan el intercambio de energía (ΔE), en forma de calor (*q*) y/o trabajo (*w*) entre un sistema y el ambiente:



Considerando que la longitud de las flechas representa las magnitudes relativas de calor (*q*) y trabajo (*w*), indique cuál de estas afirmaciones es **FALSA**:

a) El sistema (i) es exotérmico, y está realizando trabajo sobre el ambiente
b) El ambiente realiza trabajo (w) sobre el sistema (ii)
c) El sistema (iii) es endotérmico, y está realizando un trabajo (w) sobre el ambiente
d) Para los sistemas (i) y (ii), el cambio neto de energía del sistema será $\Delta E > 0$
e) En el sistema (ii) no hay intercambio de calor con el ambiente

3.- Con respecto al cambio de energía interna de un sistema (ΔE), indique cuál de estas afirmaciones es **FALSA:**

a) Se determina en función del intercambio de calor (q) y trabajo (w) con su entorno durante un cambio de estado
b) Corresponde a la energía que contiene un sistema en forma de calor (q) y trabajo (w)
c) Es una función de estado
d) Es la suma de todas las energías (cinética y potencial) de todos los componentes del sistema
e) Para un sistema aislado, $\Delta E=0$

4.- El benceno (C_6H_6) es un compuesto orgánico comúnmente utilizado como disolvente de grasas. Su punto de ebullición a una presión de 1 atm es de 80 °C. Si este compuesto se encuentra a 100 °C y 1 atm, se puede decir que:

a) La ebullición del benceno será espontánea, por lo que se tendrá que $\Delta G < 0$ y $\Delta H > T\Delta S$.
b) La ebullición del benceno será espontánea, por lo que se tendrá que $\Delta G < 0$ y $\Delta H < T\Delta S$.
c) La ebullición del benceno será espontánea, por lo que se tendrá que $\Delta G > 0$ y $\Delta H > T\Delta S$.
d) La ebullición del benceno no será espontánea, por lo tanto $\Delta G > 0$ y $\Delta H > T\Delta S$
e) Con los datos entregados, no se puede saber si el benceno ebullirá espontáneamente o no a esta temperatura y presión

FUERZAS INTERMOLECULARES

1.- Respecto a los estados de la materia, indique cuál de las siguientes afirmaciones es **FALSA:**

a) La energía cinética es más alta en un gas que en un sólido
b) La compresibilidad de un líquido es menor que la de un gas
c) La energía potencial de un gas es más alta que la de un líquido
d) La habilidad para fluir de un gas es más alta que la de un líquido
e) El volumen y forma de un sólido es la del propio sólido

2.- ¿Cuál (es) de las siguientes interacciones corresponden a fuerzas de Van der Waals?

I) Enlace covalente
II) Ión-dipolo inducido
III) Enlace de hidrógeno (puente de hidrógeno)
IV) Enlace metálico

a) Sólo I
b) Sólo II
c) I y II
d) II y III
e) II, III y IV

3.- En relación al diagrama de fases del compuesto mostrado en la Figura 1, indique cuál (es) de las siguientes afirmaciones es (son) **VERDADERAS:**

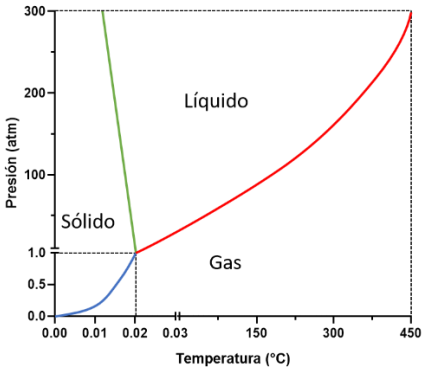


Figura 1: Diagrama de fases compuesto

I) A la presión de 300 atm y una temperatura de 450 ºC se encuentra el punto triple del compuesto
II) La línea verde representa los diferentes puntos de fusión del compuesto a diferentes presiones y temperaturas dadas
III) A 100 atm y 300 ºC el compuesto se encuentra en estado gaseoso
IV) Bajo 1 atm y a una temperatura mayor a 150 ºC el compuesto solo puede existir en estado sólido

a) I y II
b) Solo II
c) Solo III
d) II y IV
e) II y III

4.- En relación a la polarizabilidad de los elementos químicos, indique cuál de las siguientes afirmaciones es **FALSA:**

a) La de cationes es menor que la del átomo original
b) Aumenta con el aumento del número atómico (Z) en un grupo
c) La de aniones es mayor que la del átomo original
d) Es mayor en moléculas apolares grandes que en moléculas apolares pequeñas
e) Aumenta con el aumento del número atómico (Z) en un periodo

5.- Respecto a las fuerzas de dispersión de London, indique cuál(es) de las siguientes afirmaciones es(son) **VERDADERAS:**

I) Corresponden a fuerzas ion-dipolo inducido
II) Se requiere mayor energía para romperlas que para romper un enlace covalente
III) Involucran la intervención de dipolos instantáneos
IV) Corresponden a las fuerzas responsables de los estados condensados de sustancias polares

a) Sólo III
b) I y III
c) Solo IV
d) II y III
d) III y IV

6.- Con respecto a las interacciones que involucran enlaces de hidrógeno (puentes de hidrógeno), es **VERDADERO** afirmar que:

a) Se requiere mayor energía para romper un puente de hidrógeno que para romper un enlace iónico.
b) Corresponde a una fuerza dipolo-dipolo inducido
c) Corresponden a fuerzas predominantes en moléculas apolares
d) Resultan de interacciones entre un metal y un no metal
e) El amoníaco (NH_3) es una molécula capaz de formar este tipo de enlace (puente)

CHARLA MAGISTRAL

1.- En relación al hormigón, indique cuáles de las siguientes afirmaciones son **VERDADERAS:**

I La hidratación del cemento tiene un $\Delta H < 0$
II Su deformación no se relaciona con el equilibrio de fuerzas atómico.
III Su alta resistencia se debe a fuerzas de interacción de tipo Van der Waals.
IV Su resistencia se relaciona directamente con el equilibrio de fuerzas atómico.

a) I, II y III
b) II, III y IV
c) I, II y IV
d) I, III y IV
e) I, II, III y IV

1.- En relación al hormigón, indique cuáles de las siguientes afirmaciones son **VERDADERAS:**

I La hidratación del cemento tiene un $\Delta H > 0$

II A nivel de micrómetros y nanómetros es posible identificar estructuras cristalinas y amorfas.
III Su alta resistencia se debe a fuerzas de interacción de tipo Van der Waals.
IV Su resistencia se relaciona directamente con el equilibrio de fuerzas atómico.

a) I, II y III
b) II, III y IV
c) I, II y IV
d) I, III y IV
e) I, II, III y IV

1.- En relación al hormigón, indique cuáles de las siguientes afirmaciones son **VERDADERAS:**

I La hidratación del cemento tiene un $\Delta H < 0$

II A nivel de micrómetros y nanómetros es posible identificar estructuras cristalinas y amorfas.
III Su alta resistencia se debe a fuerzas de interacción de tipo Van der Waals.
IV Su resistencia se relaciona directamente con el equilibrio de fuerzas atómico.

a) I, II y III
b) II, III y IV
c) I, II y IV
d) I, III y IV
e) I, II, III y IV

2.- En relación a la Charla Magistral, indique cuál de las siguientes afirmaciones es **FALSA:**

a) Hormigón es sinónimo de concreto.
b) En la medida que el hormigón gana resistencia, se libera energía.
c) El hormigón se endurece en la medida que se forman productos de hidratación.
d) Un desafío actual de la ingeniería es disminuir el uso de cemento.
e) El hormigón no se comporta como un resorte.

2.- En relación a la Charla Magistral, indique cuál de las siguientes afirmaciones es **FALSA:**

a) Hormigón es sinónimo de concreto.
b) En la medida que el hormigón gana resistencia, se libera energía.
c) El hormigón se endurece en la medida que se evapora el agua.
d) Un desafío actual de la ingeniería es disminuir el uso de cemento.
e) El hormigón, bajo cierto umbral, se comporta como un resorte.

2.- En relación a la Charla Magistral, indique cuál de las siguientes afirmaciones es **FALSA:**

a) Hormigón es sinónimo de concreto.
b) En la medida que el hormigón gana resistencia, absorbe energía.
c) El hormigón se endurece en la medida que se forman productos de hidratación.
d) Un desafío actual de la ingeniería es disminuir el uso de cemento.
e) El hormigón, bajo cierto umbral, se comporta como un resorte.

ESTEQUIOMETRÍA (10 PUNTOS)

La mayoría de los automóviles modernos vienen equipados con un sistema de seguridad contra colisiones, comúnmente conocido como “Airbags”. En el evento de un choque, los airbags se inflan de manera instantánea a través de una serie de reacciones químicas gatilladas por el sistema de seguridad interno, el cual es capaz de producir decenas de litros de gas en menos de 0,004 segundos. El principio químico de este proceso se basa en las propiedades de la azida de sodio, NaN_3, un compuesto que puede producir nitrógeno gas (N_2) de manera instantánea durante el impacto. Esta reacción también genera sodio metálico (Na) que, por su naturaleza reactiva, es capturado por una mezcla sólida de nitrato de potasio (KNO_3) y sÍlica (SiO_2) contenido en el sistema. Las ecuaciones (no balanceadas) que describen este proceso son las siguientes:

$$NaN_3(s) \rightarrow Na(s) + N_2(g)$$

$$Na(s) + KNO_3(s) \rightarrow K_2O(s) + Na_2O(s) + N_2(g)$$

$$K_2O(s) + Na_2O(s) + SiO_2(s) \rightarrow Na_2K_2SiO_4(s)$$

Si 65,1 L de N_2 (g) (densidad = 0,916 g/L) son generados por NaN_3 para inflar un airbag por completo, determine:

a) Los gramos de NaN_3 necesarios para producir esta cantidad de N_2 gaseoso, considere solamente el generado en la primera reacción. (4 puntos)

b) La cantidad de $Na_2K_2SiO_4$ producida durante el mismo proceso, expresada en kilogramos. Asuma que el KNO_3 se encuentra en exceso. (6 puntos)

Compuesto	Masa molar (g/ mol)
N_2	28
NaN_3	65
$Na_2K_2SiO_4$	216,26

Desarrollo:

Ecuaciones balanceadas

$2\ NaN_{3(s)} \rightarrow 2\ Na_{(s)} + 3\ N_{2(g)}$

$10\ Na_{(s)} + 2\ KNO_{3(s)} \rightarrow K_2O_{(s)} + 5\ Na_2O_{(s)} + N_{2(g)}$

$K_2O_{(s)} + Na_2O_{(s)} + SiO_{2(s)} \rightarrow Na_2K_2SiO_{4(s)}$

a) $65{,}1\ L \times 0{,}916\ \frac{g}{L} = 59{,}6\ g\ N_2$

$$\frac{59{,}6\ g\ N_2}{28\ \frac{g}{mol}} = 2{,}13\ moles\ de\ N_2$$

$$\frac{3\ moles\ N_2}{2\ moles\ NaN_3} = \frac{2{,}13\ moles\ N_2}{X\ moles\ NaN_3}$$

$$moles\ NaN_3 = 1{,}42$$

$$g\ NaN_3 = 1{,}42 \times 65{,}0 \frac{g}{mol} = 92{,}3\ g$$ 4 puntos

b) Hay dos formas de resolver esta pregunta

Forma 1:

$$moles\ NaN_3 = moles\ Na = \ 1{,}42\ moles$$

$$\frac{10\ moles\ Na}{5\ moles\ Na_2O} = \frac{1{,}42\ moles\ Na}{X\ moles\ Na_2O}$$

$$X\ moles\ Na_2O = 0{,}71\ mol$$

$$\frac{1\ mol\ Na_2K_2SiO_4}{1\ mol\ Na_2O} = \frac{X\ mol\ Na_2K_2SiO_4}{0{,}71\ mol\ Na_2O}$$

$$mol\ Na_2K_2SiO_4 = 0{,}71\ mol$$

$$masa\ Na_2K_2SiO_4 = 0{,}71\ mol\ \times 216{,}26 \frac{g}{mol} = 153{,}5\ g$$

$$153{,}5\ g \times \frac{1\ kg}{1000\ g} = 0{,}1535\ kg$$ 6 puntos

Forma 2

Dado que el problema no especifica si se produce o no un exceso de K_2O desde KNO_3 bajo las condiciones explicitadas, es posible también asumir que se produce una cantidad estequiométrica de K_2O, junto con el Na_2O. Si este camino es considerado, entonces K_2O se convierte en el reactivo limitante:

$$\frac{10\ mol\ Na}{1\ mol\ K_2O} = \frac{1{,}42\ mol\ Na}{X\ mol\ K_2O}$$

$$X\ mol\ K_2O = 0{,}142\ mol$$

Pero $X\ mol\ Na_2O = 0{,}71\ mol$

Como la relación estequiométrica es 1:1, K_2O es el reactivo limitante y la cantidad a producir de $Na_2K_2SiO_4$ sería:

$$\frac{1\ mol\ Na_2K_2SiO_4}{1\ mol\ K_2O} = \frac{X\ mol\ Na_2K_2SiO_4}{0{,}142\ mol\ K_2O}$$

$$mol\ Na_2K_2SiO_4 = 0{,}142\ mol$$

$$masa\ Na_2K_2SiO_4 = 0{,}142\ mol\ \times 216{,}26\frac{g}{mol} = 30{,}7\ g$$

$$30{,}7\ g \times \frac{1\ kg}{1000\ g} = 0{,}0307\ kg$$ 6 puntos

Hay que considerar que se obtienen entre 29,2g a 32,2 g.

Química Estado Sólido

FORMA 1

Un pilar metálico es golpeado por un meteorito. El análisis del impacto muestra que el metal fue deformado y se encontró un deslizamiento en el plano (011), cuya densidad planar fue 11,9 átomos/nm^2. También se determinó que la estructura del metal es FCC. De acuerdo a esta información determine:

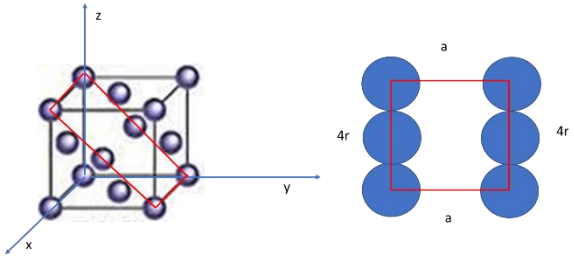
a) El radio de los átomos que conforman la estructura metálica y el parámetro de celda en nm.

b) La densidad del metal si su masa molar es 63,5 g/mol. Exprese la densidad en g/cm^3.

c) La densidad planar en los planos (111) y (100),¿ cuál es mayor?, demuestre con numeros.

Desarrollo.

a) Se busca el plano (011) en la estructura FCC



En este plano hay 2 átomos:

$$densidad\ planar = \frac{atomos\ en\ el\ plano}{area\ del\ plano}$$

$$11{,}9\frac{atomos}{nm^2} = \frac{2}{area\ del\ plano}$$

Área de plano: 0,168 nm^2

Área= a*4r usando relación de diagonal y parámetro de celd$a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$

$$Area = \frac{4r*4r}{\sqrt{2}}$$

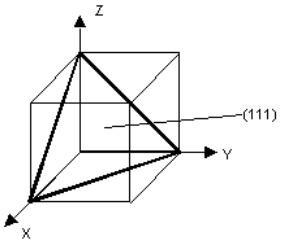
radio **r= 0,122 nm (4 puntos)**

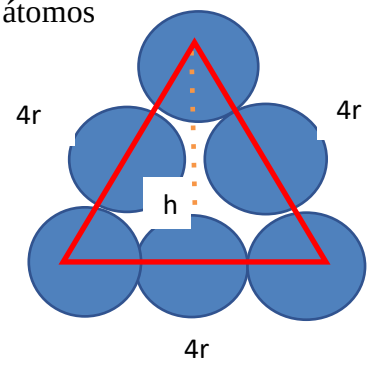
Parámetro de celda **a= 0,345 nm (4 puntos)**

b) $densidad = \frac{4*63{,}5\ gr/mol.}{(0{,}345\ nm)^3*\left(1*10^{-7}\frac{cm}{nm}\right)^3 * Nav}$

Densidad = 10,27 gr/cm^3 (6 puntos)

c) Identificar el plano (111), en este plano hay 2 átomos





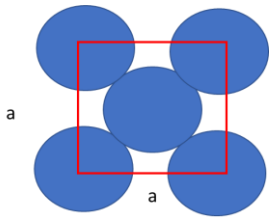
Cálculo del área del plano

$h^2 + (2r)^2 = (4r)^2$

h = 0,423 nm

Área = $\frac{1*(0{,}423\ nm)*(4*0{,}122nm)}{2} = 0{,}103\ nm^2$ densidad planar = $\frac{2}{0{,}1032\ nm^2} =$ $19{,}4\ \frac{atomos}{nm^2}$ **(2 puntos)**

Plano (100)



En este plano hay 2 átomos.

Densidad planas = $\frac{2}{(0{,}345\ nm)^2} = 16{,}7\ \frac{atomos}{nm^2}$ **(2 puntos)**

El plano con mayor densidad es el plano (111). (2 puntos)

FORMA 2

Un pilar metálico es golpeado por un meteorito. El análisis del impacto muestra que el metal fue deformado y se encontró un deslizamiento en el plano (011), cuya densidad planar fue 11,43 átomos/nm^2. También se determinó que la estructura del metal es FCC. De acuerdo a esta información determine:

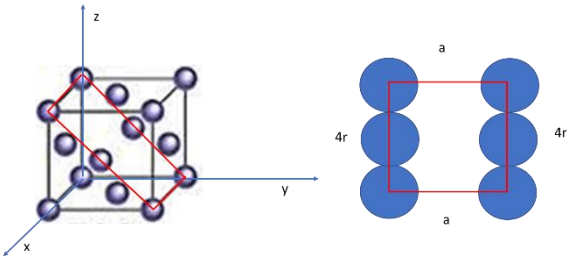
a) El radio de los átomos que conforman la estructura metálica y el parámetro de celda en nm.

b) La densidad del metal si su masa molar es 58,7 g/mol. Exprese la densidad en g/cm^3.

c) La densidad planar en los planos (111) y (110),¿ cuál es mayor? , demuestre con numeros.

Desarrollo.

a) Se busca el plano (011) en la estructura FCC



En este plano hay 2 átomos:

$$densidad\ planar = \frac{atomos\ en\ el\ plano}{area\ del\ plano}$$

$$11{,}43\,\frac{atomos}{nm^2} = \frac{2}{area\ del\ plano}$$

Área de plano: 0,175 nm^2

Área= a*4r usando relación de diagonal y parámetro de celd$a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$

$$Area = \frac{4r*4r}{\sqrt{2}}$$

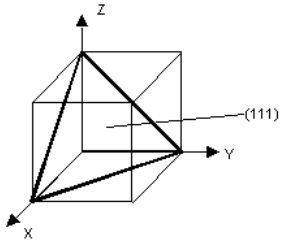
radio **r= 0,1244 nm (4 puntos)**

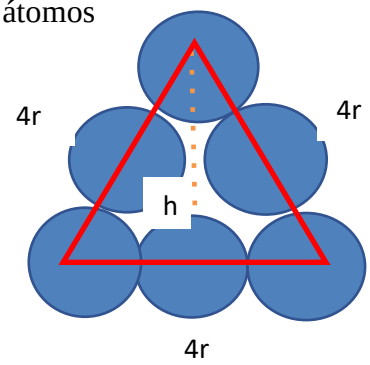
Parámetro de celda **a= 0,352 nm (4 puntos)**

b) $$densidad = \frac{4*58{,}7\ gr/mol.}{(0{,}352\ nm)^3*\left(1*10^{-7}\frac{cm}{nm}\right)^3 * Nav}$$

Densidad = 8,94 gr/cm^3 (6 puntos)

c) Identificar el plano (111), en este plano hay 2 átomos





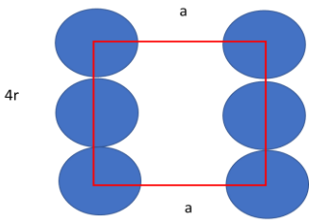
Cálculo del área del plano

$h^2 + (2r)^2 = (4r)^2$

h = 0,431 nm

Área = $\frac{1*(0{,}431\ nm)*(4*0{,}1244\ nm)}{2} = 0{,}107\ nm^2$ densidad planar = $\frac{2}{0{,}107\ nm^2} =$ $18{,}7\ \frac{atomos}{nm^2}$ **(2 puntos)**

Plano (110)



En este plano hay 2 átomos.

Densidad planas = $\frac{2}{0{,}175\ \text{nm}} = 11{,}43\ \frac{atomos}{nm^2}$ **(2 puntos)**

El plano con mayor densidad es el plano (111). (2 puntos)

FORMA 3

Un pilar metálico es golpeado por un meteorito. El análisis del impacto muestra que el metal fue deformado y se encontró un deslizamiento en el plano (011), cuya densidad planar fue 11,43 átomos/nm^2. También se determinó que la estructura del metal es FCC. De acuerdo a esta información determine:

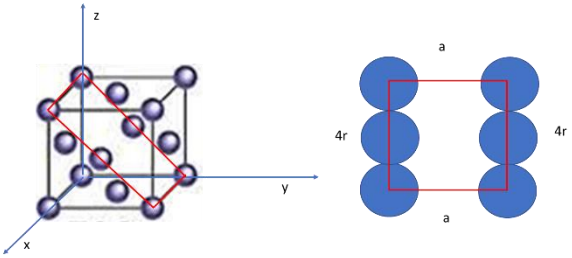
a) El radio de los átomos que conforman la estructura metálica y el parámetro de celda en nm.

b) La densidad del metal si su masa molar es 55,8 g/mol. Exprese la densidad en g/cm^3.

c) La densidad planar en los planos (111) y (101),¿ cuál es mayor? , demuestre con numeros.

Desarrollo.

a) Se busca el plano (011) en la estructura FCC



En este plano hay 2 átomos:

$$densidad\ planar = \frac{atomos\ en\ el\ plano}{area\ del\ plano}$$

$$11{,}43\,\frac{atomos}{nm^2} = \frac{2}{area\ del\ plano}$$

Área de plano: 0,1750 nm^2

Área= a*4r usando relación de diagonal y parámetro de celd$a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$

$$Area = \frac{4r*4r}{\sqrt{2}}$$

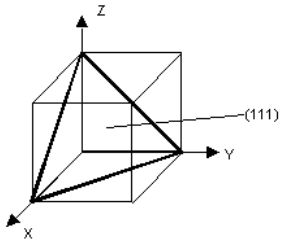
radio **r= 0,1243 nm (4puntos)**

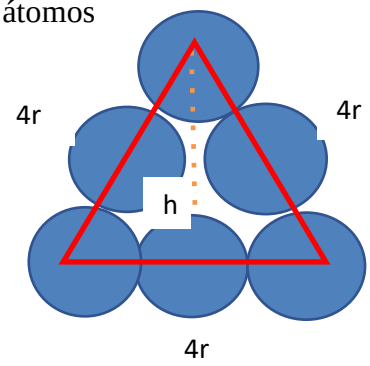
Parámetro de celda **a= 0,3520 nm (4 puntos)**

b) $densidad = \frac{4*55{,}8\ gr/mol.}{(0{,}3520\ nm)^3*\left(1*10^{-7}\frac{cm}{nm}\right)^3 * Nav}$

Densidad = 8.50 gr/cm^3 (6 puntos)

c) Identificar el plano (111), en este plano hay 2 átomos





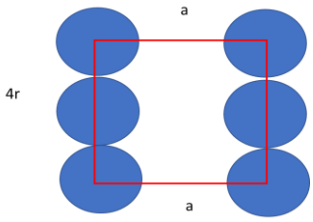
Cálculo del área del plano

$h^2 + (2r)^2 = (4r)^2$

h = 0,430 nm

Área = $\frac{1*(0{,}430\ nm)*(4*0{,}1243\ nm)}{2} = 0{,}107\ nm^2$ densidad planar = $\frac{2}{0{,}107\ nm^2} =$ $18{,}7\ \frac{atomos}{nm^2}$ **(2 puntos)**

Plano (101)



En este plano hay 2 átomos.

Densidad planas = $\frac{2}{0{,}1750\ \text{nm}} = 11{,}43\ \frac{atomos}{nm^2}$ **(2 puntos)**

El plano con mayor densidad es el plano (111). (2 puntos)

Termoquímica

Forma A

1.- La nitroglicerina ($C_3H_5(NO_3)_3$) es un potente explosivo que se utilizó por primera vez en 1866 por Alfred Nobel para elaborar dinamita. Se descompone según la siguiente reacción:

$$2C_3H_5(NO_3)_{3(l)} \rightarrow 3N_{2(g)} + \tfrac{1}{2}O_{2(g)} + 6CO_{2(g)} + 5H_2O_{(g)}$$

a) Usando los valores de entalpía de formación (ΔH_f^o) y entropía molar (S^o) a 298 K, determine la entalpía (ΔH^o), entropía (S^o) y energía de Gibbs (ΔG^o) de la reacción. Indique si el proceso es espontáneo a cualquier temperatura. Justifique su respuesta. (8 puntos)

b) Un estudiante de ingeniería requiere medir el calor de descomposición de la nitroglicerina. Para esto, debe obtener la capacidad calorífica (C) de la bomba calorimétrica que va a utilizar. El estudiante combustiona 1,6 g de ácido benzoico (C_6H_5COOH, calor de combustión -3226 kJ/mol) registrando un cambio de temperatura desde 22 ºC a 27 ºC. Calcule la capacidad calorífica de la bomba calorimétrica. (6 puntos)

c) Considerando que se utiliza una bomba calorimétrica con una capacidad calorífica (C) de 9,55 kJ/ºC el estudiante determinó una variación de temperatura de 1,48 ºC para 2 g de nitroglicerina. Calcule el calor liberado por la descomposición para 3 moles de nitroglicerina. (6 puntos)

	ΔH_f^o (kJ/mol)	S^o (J/mol K)
$C_3H_5(NO_3)_{3(l)}$	-364	546
$H_2O_{(g)}$	-242	189
$CO_{2(g)}$	-394	214
$N_{2(g)}$	0	192
$O_{2(g)}$	0	205

Elemento	Masa molar (g/ mol)
H	1
C	12
N	14
O	16

Desarrollo

$$2C_3H_5(NO_3)_{3(l)} \rightarrow 3N_{2(g)} + \frac{1}{2}O_{2(g)} + 6CO_{2(g)} + 5H_2O_{(g)}$$

a)

$$\Delta H^o_{reacción} = \sum n_p \Delta H^o_f (productos) - \sum n_p \Delta H^o_f (reactantes)$$

$\Delta H^{\circ}_{reacción}$= -394 kJ/mol*6mol + 5mol*(-242 kJ/mol) – (2mol*-364 kJ/mol)= -2846 kJ

(2 puntos)

$$\Delta S^o_{reacción} = \sum n_p S^o (productos) - \sum n_p S^o (reactantes)$$

$\Delta S^{\circ}_{reacción}$=(3mol*192J/molK+0.5mol*205J/molK+6mol*214 J/molK +5mol*189 J/molK) - 2mol*546J/molK)=1815,5 J/K=1,8155 kJ/ K **(2 puntos)**

$\Delta G^{\circ}_{reacción}$= ΔH^o-TΔS^o = -2846 kJ –(298K*1,8155kJ/K)= -3387,019 kJ **(2 puntos)**

Para que sea un proceso espontáneo ΔG^o debe ser menor a 0.

ΔG^o=ΔH^o-TΔS^o => 0=-2846 – 1,8155*T=> T=-1567,61 K

Considerando que la escala de Kelvin se define desde el cero absoluto, no existe el valor -1567,61 K. De esta manera la reacción va a ser espontánea incluso a 0 K. Es un proceso espontáneo a cualquier temperatura.
Además, como dH < 0 y dS > 0 la reacción será espontánea a cualquier temperatura.

(2 puntos)

b) Masa molar ácido benzoico=122 g/mol

3226 kJ/mol * (1,6g/122 g mol^{-1}) = 42,308 kJ

42,308 kJ /(27-22)ºC=8,46 kJ/ºC

La capacidad calorífica del calorímetro es 8,46 kJ/ºC **(6 puntos)**

c) qr=-C_{cal} * ΔT => qr=-9,55 kJ/ºC * 1,48 ºC=-14,134 kJ

Masa molar nitroglicerina 227 g/mol, 3 mol~~es~~= 227*3 g=681g

-14,134 kJ → 2 g
X → 681 g

X= - 4812,63 kJ

(6 puntos)

Forma B

1. La nitroglicerina ($C_3H_5(NO_3)_3$) es un potente explosivo que se utilizó por primera vez en 1866 por Alfred Nobel para fabricar dinamita. Se descompone según la siguiente reacción:

$$2C_3H_5(NO_3)_{3(l)} \rightarrow 3N_{2(g)} + \tfrac{1}{2}O_{2(g)} + 6CO_{2(g)} + 5H_2O_{(g)}$$

a) Usando los valores de entalpía de formación (ΔH_f^o) y entropía molar (ΔS^o) a 298 K, determine la entalpía (ΔH^o), entropía (ΔS^o) y energía de Gibbs (ΔG^o) de la reacción. Indique si el proceso es espontáneo a cualquier temperatura. Justifique su respuesta. (8 puntos)

b) Un estudiante de ingeniería requiere medir el calor de descomposición de la nitroglicerina. Para esto, debe obtener la capacidad calorífica (C) de la bomba calorimétrica que va a utilizar. El estudiante combustiona 3,15 g de ácido benzoico (C_6H_5COOH, calor de combustión -3226 kJ/mol) registrando un cambio de temperatura desde 21,5 ºC a 30,8 ºC. Calcular la capacidad calorífica de la bomba calorimétrica. (6 puntos)

c) Considerando una bomba calorimétrica con una capacidad calorífica (C) de 7,89 kJ/ºC el estudiante determinó una variación de temperatura de 4,3 ºC para 5,8 g de nitroglicerina. Calcular el calor liberado por la descomposición para 2,3 moles de nitroglicerina. (6 puntos)

	ΔH_f^o (kJ/mol)	S^o (J/mol K)
$C_3H_5(NO_3)_3(l)$	-364	546
$H_2O(g)$	-242	189
$CO_2(g)$	-394	214
$N_2(g)$	0	192
$O_2(g)$	0	205

Elemento	Masa molar (g/ mol)
H	1
C	12
N	14
O	16

Desarrollo

a)

$$\Delta H^o_{reacción} = \sum n_p \Delta H^o_f (productos) - \sum n_p \Delta H^o_f (reactantes)$$

$\Delta H^{\circ}_{reacción}$= -394 kJ/mol*6mol + 5mol*(-242 kJ/mol) – (2mol*-364 kJ/mol)= -2846 kJ

(2 puntos)

$$\Delta S^o_{reacción} = \sum n_p S^o (productos) - \sum n_p S^o (reactantes)$$

$\Delta S^{\circ}_{reacción}$=(3mol*192J/molK+0.5mol*205J/molK+6mol*214 J/molK +5mol*189 J/molK) - 2mol*546J/molK)=1815,5 J/K=1,8155 kJ/ K **(2 puntos)**

$\Delta G^{\circ}_{reacción}$= ΔH^o-TΔS^o = -2846 kJ –(298K*1,8155kJ/K)= -3387,019 kJ **(2 puntos)**

Para que sea un proceso espontáneo ΔG^o debe ser menor a 0.

$\Delta G^o=\Delta H^o$-TΔS^o => 0=-2846 – 1,8155*T=> T=-1567,61 K

Considerando que la escala de Kelvin se define desde el cero absoluto, no existe el valor -1567,61 K. De esta manera la reacción va a ser espontánea incluso a 0 K. Es un proceso espontáneo a cualquier temperatura.
Además, como dH < 0 y dS > 0 la reacción será espontánea a cualquier temperatura.

(2 puntos)

b) Masa molar ácido benzoico=122 g/mol

3226 kJ/mol * (3,15g/122 g mol^{-1}) = 83,29 kJ

83,29 kJ /(30,8-21,5)ºC=8,96 kJ/ºC

La capacidad calorífica del calorímetro es 8,96 kJ/ºC **(6 puntos)**

c) qr=-C_{cal} * ΔT => qr=-7,89 kJ/ºC * 4,3 ºC=-33,927 kJ

Masa molar nitroglicerina 227 g/mol, 2,3 mol= 227*3 g=522,1 g

-33,927 kJ → 5,8 g
X → 522,1 g

X= - 3054,01 kJ

(6 puntos)

Pregunta Cinética Química (Forma A)

1.- La síntesis de nitrógeno molecular (N_2) se puede realizar a partir de la reacción entre óxido nítrico (NO) e hidrógeno (H_2), según la siguiente ecuación química:

$$2NO(g) + 2H_2(g) \rightarrow N_2(g) + 2H_2O(g)$$

a) Un grupo de investigación realizó un estudio cinético para evaluar la velocidad de producción de nitrógeno (N_2), para lo cual se efectuaron cuatro experimentos de forma independiente, a una temperatura de 70°C. Los resultados obtenidos se indican en la siguiente tabla:

Experimento	**$[NO]_0$ (mol L^{-1})**	**$[H_2]_0$ (mol L^{-1})**	**Velocidad inicial (mol L^{-1} s^{-1})**
1	0,0235	0,0125	$7{,}98 \cdot 10^{-3}$
2	0,0235	0,0250	$1{,}59 \cdot 10^{-2}$
3	0,0470	0,0125	$3{,}20 \cdot 10^{-2}$
4	0,0470	0,0250	$6{,}36 \cdot 10^{-2}$

A partir de los datos obtenidos, determine la ley de velocidad y el valor de la constante cinética, k (15 puntos)

b) En otros experimentos el grupo de investigación determinó que al aumentar la temperatura de la reacción de 25°C a 40°C su constante de velocidad aumenta 10 veces. Determine la energía de activación (Ea) en kJ/mol para esta reacción. (5 puntos)

Desarrollo:

a) Para determinar el orden parcial de hidrógeno se seleccionan los datos del experimento 1 y 2, según se muestra: (al seleccionar los datos del experimento 3 y 4 se obtiene el mismo resultado)

$$\frac{v_2}{v_1} = \frac{k\,[NO]_{exp2}{}^{x}[H_2]_{exp2}{}^{y}}{k\,[NO]_{exp1}{}^{x}[H_2]_{exp1}{}^{y}}$$

$$\frac{1{,}59x10^{-2}}{7{,}98x10^{-3}} = \frac{k\,(0{,}0235)^x(0{,}0250)^y}{k(0{,}0235)^x(0{,}0125)^y}$$

$$2 = 2^y$$

$Y = 1$ (orden parcial para H_2)

Para determinar el orden parcial de NO se seleccionan los datos del experimento 1 y 3, según se muestra: (al seleccionar los datos del experimento 2 y 4 se obtiene el mismo resultado)

$$\frac{v_3}{v_1} = \frac{k\,[NO]_{exp3}{}^{x}[O_2]_{exp3}{}^{y}}{k\,[NO]_{exp1}{}^{x}[O_2]_{exp1}{}^{y}}$$

$$\frac{3{,}20x10^{-2}}{7{,}98x10^{-3}} = \frac{k\,(0{,}0470)^x(0{,}0125)^y}{k(0{,}0235)^x(0{,}0125)^y}$$

$$4 = 2^x$$

$X = 2$ (orden parcial para NO)

Orden total de la reacción: orden 3 (orden 2 en NO y orden 1 en H_2)

Ley de velocidad: $v = k[NO]^2[H_2]$ **(10 puntos)**

Para calcular k, se pueden seleccionar cualquiera de los datos de la tabla.

$$v = k[NO]^2[O_2]$$

Exp.1: $7{,}98x10^{-3}(\frac{mol}{L\,s}) = k(0{,}0235\,mol/L)^2(0{,}0125\,mol/L);\;\; k = 1{,}16x10^3\;(L^2mol^{-2}s^{-1})$

Exp.2: $1.59x10^{-2}(\frac{mol}{L\,s}) = k(0{,}0235\,mol/L)^2(0{,}0250\,mol/L);\;\; k = 1{,}16x10^3\;(L^2mol^{-2}s^{-1})$

Exp.3: $3{,}20x10^{-2}(\frac{mol}{L\,s}) = k(0{,}0470\,mol/L)^2(0{,}0125\,mol/L);\;\; k = 1{,}16x10^3\;(L^2mol^{-2}s^{-1})$

Exp.4: $6{,}36x10^{-2}(\frac{mol}{L\,s}) = k(0{,}0470\,mol/L)^2(0{,}0250\,mol/L);\;\; k = 1{,}16x10^3\;(L^2mol^{-2}s^{-1})$

$k = 1{,}16x10^3\;L^2mol^{-2}s^{-1}$ **(5 puntos)**

b)

Utilizando la ecuación de Arrhenius, se tiene que:

$$ln\frac{k_1}{k_2} = \frac{E_a}{R}\left(\frac{1}{T2} - \frac{1}{T1}\right)$$

$$ln\frac{k_1}{10 \cdot k_1} = \frac{E_a}{8{,}314\left(\frac{J}{mol * K}\right)}\left(\frac{1}{313\ K} - \frac{1}{298\ K}\right)$$

$$ln\ 1/10 = Ea \cdot (-1{,}93 \cdot 10^{-5}\ J/mol)$$

$$-2{,}30 = Ea \cdot (-1{,}93 \cdot 10^{-5}\ J/mol)$$

$$Ea = 119170{,}9\ \ (J/mol)$$

$$Ea = 119{,}2\ \ (kJ/mol)$$ **(5 puntos)**

Pregunta Cinética Química (Forma B)

1.- La síntesis de nitrógeno molecular (N_2) se puede realizar a partir de la reacción entre óxido nítrico (NO) e hidrógeno (H_2), según la siguiente ecuación química:

$$2NO(g) + 2H_2(g) \rightarrow 2H_2O(g) + N_2(g)$$

a) Un grupo de investigación realizó un estudio cinético para evaluar la velocidad de producción de nitrógeno (N_2), para lo cual se efectuaron cuatro experimentos de forma independiente, a una temperatura de 60°C. Los resultados obtenidos se indican en la siguiente tabla:

Experimento	**$[NO]_0$ (mol L^{-1})**	**$[H_2]_0$ (mol L^{-1})**	**velocidad inicial (mol L^{-1} s^{-1})**
1	0,047	0,025	$1,60 \cdot 10^{-2}$
2	0,047	0,050	$3,18 \cdot 10^{-2}$
3	0,094	0,025	$6,40 \cdot 10^{-2}$
4	0,094	0,050	$1,27 \cdot 10^{-1}$

A partir de los datos obtenidos, determine la ley de velocidad y el valor de la constante cinética, k (15 puntos).

b) En otros experimentos el grupo de investigación determinó que al aumentar la temperatura de la reacción de 35°C a 80°C su constante de velocidad aumenta 18 veces. Determine la energía de activación (Ea) en kJ/mol para esta reacción. (5 puntos)

Desarrollo:

a) Para determinar el orden parcial de hidrógeno se seleccionan los datos del experimento 1 y 2, según se muestra: (al seleccionar los datos del experimento 3 y 4 se obtiene el mismo resultado)

$$\frac{v_2}{v_1} = \frac{k\,[NO]_{exp2}{}^{x}[H_2]_{exp2}{}^{y}}{k\,[NO]_{exp1}{}^{x}[H_2]_{exp1}{}^{y}}$$

$$\frac{3{,}18x10^{-2}}{1{,}60x10^{-2}} = \frac{k\,(0{,}047)^x(0{,}050)^y}{k(0{,}047)^x(0{,}025)^y}$$

$$2 = 2^y$$

$Y = 1$ (orden parcial para H_2)

Para determinar el orden parcial de NO se seleccionan los datos del experimento 1 y 3, según se muestra: (al seleccionar los datos del experimento 2 y 4 se obtiene el mismo resultado)

$$\frac{v_3}{v_1} = \frac{k\,[NO]_{exp3}{}^{x}[O_2]_{exp3}{}^{y}}{k\,[NO]_{exp1}{}^{x}[O_2]_{exp1}{}^{y}}$$

$$\frac{6{,}40x10^{-2}}{1{,}60x10^{-2}} = \frac{k\,(0{,}094)^x(0{,}025)^y}{k(0{,}047)^x(0{,}025)^y}$$

$$4 = 2^x$$

$X = 2$ (orden parcial para NO)

Orden total de la reacción: orden 3 (orden 2 en NO y orden 1 en H_2)

Ley de velocidad: $v = k[NO]^2[H_2]$ **(10 puntos)**

Para calcular k, se pueden seleccionar cualquiera de los datos de la tabla.

$$v = k[NO]^2[H_2]$$

Exp. 1: $1{,}60x10^{-2}(\frac{M}{s}) = k(0{,}047\,M)^2(0{,}025\,M);\;\; k = 2{,}9x10^2\;(L^2mol^{-2}s^{-1})$

Exp. 2: $3{,}18x10^{-2}(\frac{M}{s}) = k(0{,}047\,M)^2(0{,}050\,M);\;\; k = 2{,}9x10^2\;(L^2mol^{-2}s^{-1})$

Exp. 3: $6{,}40x10^{-2}(\frac{M}{s}) = k(0{,}094\,M)^2(0{,}025\,M);\;\; k = 2{,}9x10^2\;(L^2mol^{-2}s^{-1})$

Exp. 4: $1{,}27x10^{-1}(\frac{M}{s}) = k(0{,}094\,M)^2(0{,}050\,M);\;\; k = 2{,}9x10^2\;(L^2mol^{-2}s^{-1})$

$k = 2{,}9x10^2\;(L^2mol^{-2}s^{-1})$ **(5 puntos)**

b) Utilizando la ecuación de Arrhenius, se tiene que:

$$ln\frac{k_1}{k_2} = \frac{E_a}{R}\left(\frac{1}{T2} - \frac{1}{T1}\right)$$

$$ln\frac{k_1}{18 \cdot k_1} = \frac{E_a}{8{,}314\left(\frac{J}{mol * K}\right)}\left(\frac{1}{353\ K} - \frac{1}{308\ K}\right)$$

$$ln\ 1/18 = Ea \cdot (-4{,}98 \cdot 10^{-5}\ J/mol)$$

$$-2{,}89 = Ea \cdot (-4{,}98 \cdot 10^{-5}\ J/mol)$$

$$Ea = 58032{,}1\ J/mol$$

$$Ea = 58{,}03\ (kJ/mol)$$ **(5 puntos)**