FACULTAD DE QUÍMICA
PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

Pontificia Universidad Católica de Chile
Facultad de Química
Dirección Académica
Santiago, 6 de mayo de 2022

QUÍMICA GENERAL PARA INGENIERÍA

Pauta Interrogación I 2022

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.
- En algunos casos, las preguntas pueden resolverse de varias formas diferentes, si el estudiante tiene correcto el resultado final se le debe asignar todo el puntaje de la pregunta.

Pregunta 1: Selección Múltiple (32 puntos)

1.- En relación a la Charla Magistral, diga cuál de estas afirmaciones es **FALSA**.

a) La disminución de los álcalis en el cemento favorece su durabilidad
b) Las burbujas presentes en el hormigón disminuyen la posibilidad de microfisuras
c) La hidratación del cemento es exotérmica
d) El proceso de endurecimiento del cemento es exotérmico
e) El proceso Dormant involucra generación significativa de calor de los componentes del cemento

2.- Indique cuál de las siguientes afirmaciones **SON CORRECTAS** con respecto a qué tipo de interacciones intermoleculares se presentan entre el $HCl_{(ac)}$ y el $NaF_{(ac)}$:

I Fuerzas de Van Der Waals
II Puentes (enlace) de Hidrógeno
III Interacciones de tipo dipolo-dipolo inducido
IV Interacciones de tipo ion-dipolo

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

3.- ¿Cuál de los siguientes enunciados representa mejor la primera ley de la termodinámica?

a) La entropía de un cristal perfecto a 0 K es cero.
b) Si dos sistemas están en equilibrio térmico con un tercer sistema, todos están en equilibrio entre sí.
c) Después de caer por la colina, la energía cinética de una pelota más la energía térmica es igual a la energía potencial inicial.
d) El calor específico de un objeto explica la facilidad con la cual este cambia de temperatura.
e) Mientras se derrite, un cubo de hielo permanece a la misma temperatura.

4.- En relación a la química del estado sólido, indique cuál de las siguientes afirmaciones **SON VERDADERAS**:

I Los compuestos cristalinos pueden organizarse en 14 tipos de celdas unitarias
II Cada átomo de un sólido cristalino que se organiza en una estructura BCC estará rodeado de seis átomos vecinos
III Una estructura BCC presenta cuatro sitios intersticiales octaédricos
IV El plano (011) y el plano (101) pertenecen a la misma familia de planos {110}

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

5.- Indique qué tipo de enlace espera que se forme entre un átomo del grupo IA (alcalinos) y el grupo VIIA (halógenos):

a) Enlace metálico
b) Enlace covalente
c) Enlace iónico
d) Ion-dipolo
e) Dipolo-dipolo

6.- Considerando la siguiente reacción:

$$2N_2O_{(g)} \rightarrow 2N_{2(g)} + O_{2(g)}$$

La cual presenta valores de ΔS y ΔH (negativos). ¿La reacción será espontánea?

a) La reacción será espontánea si y solo si la magnitud de ΔH es mayor que la magnitud del producto entre ΔS y temperatura.
b) La reacción será espontánea si y solo si la magnitud de ΔH es mayor que la magnitud de ΔS.
c) La reacción será espontánea si y solo si la magnitud de ΔS es mayor que la magnitud del producto entre ΔH y la temperatura.
d) La reacción es espontánea a cualquier temperatura.
e) La reacción nunca será espontánea.

7.- Identifique qué geometría molecular posee el H_2S y prediga si es una molécula polar o apolar: (Número atómico H = 1, S = 16)

a) Angular, polar
b) Trigonal plana, apolar
c) Tetraédrica, polar
d) Tetraédrica, apolar
e) Lineal, apolar

8.- El cloruro de sodio sólido (NaCl) se organiza formando una estructura cristalina cúbica FCC en la cual los cationes sodio se ubican en los sitios intersticiales. Al respecto, indique cuál de las siguientes afirmaciones **SON VERDADERAS**:

I Los iones cloruro se encuentran posicionados en los puntos reticulares
II La arista de la celda unitaria corresponde a la suma entre los radios de dos iones sodio y dos iones cloruro [$2r(Na^+) + 2r(Cl^-)$]
III Los cationes sodio se ubican utilizando todos los sitios intersticiales tetraédricos
IV Cada ion cloruro se encuentra rodeado de 12 iones cloruro

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

Pregunta 2: Nivelación (18 puntos)

El dióxido de nitrógeno, NO_2, es un contaminante atmosférico que puede ser utilizado en la nitrificación de compuestos químicos orgánicos y en la manufactura de explosivos. Esta especie se puede obtener mediante la reacción de cobre, Cu, con ácido nítrico, HNO_3, según la siguiente ecuación química:

$$Cu(s) + HNO_3(ac) \rightarrow Cu(NO_3)_2(ac) + NO_2(g) + H_2O(l)$$

a) Considere que 1,662 g de cobre impuro reaccionaron totalmente con 0,088 mol de HNO_3, determine la pureza del cobre utilizado.

b) En un nuevo experimento se hicieron reaccionar 88,94 g de cobre con 378 g de ácido nítrico, determine la masa de reactivo en exceso que quedó sin reaccionar.

Datos masa molar: Cu: 63,5 g/mol; HNO_3: 63,0 g/mol

Desarrollo:

a)

Balance de la ecuación química:

$$Cu(s) + 4HNO_3(ac) \rightarrow Cu(NO_3)_2(ac) + 2NO_2(g) + 2H_2O(l)$$

(2 puntos)

Por tratarse de una reacción estequiométrica (el Cu reaccionó totalmente con el HNO_3) se puede decir que:
1 mol de Cu = 4 mol de HNO_3
x mol de Cu = 0,088 mol de HNO_3

x = 0,022 mol Cu

(2 puntos)

Gramos Cu:

1 mol de Cu = 63,5 g
0,022 mol Cu = x

x = 1,4 g de Cu

(2puntos)

Pureza Cu

1,662 g muestra = 100 %
1,4 g Cu = x

x = 84 %

(4 puntos)

b)

Determinación del reactivo limitante y en exceso
n Cu = 88.94 g / 63,5 g/mol = 1,4 mol
n HNO3 = 378 g / 63 g/mol = 6 mol

1 mol Cu = 4 mol HNO_3
1,4 mol Cu = x

X= 5,6 mol de HNO_3

Se agregaron 6 mol, por lo tanto
HNO_3 en exceso
Cu reactivo limitante

(4 puntos)

Reactivo sin reaccionar:
6 mol – 5,6 mol= 0,4 mol
Masa = 0,4 mol * 63 g/mol= 25,2 g

(4 puntos)

Pregunta 3: Termoquímica (25 puntos)

1.- En un calorímetro que se encuentra a 20ºC de constante calorimétrica de 6 J/ºC, se agregan 100 mL de agua a 20 ºC, luego 80 mL de agua 80 ºC y además se agrega un trozo de 10 g de hierro a 120 ºC. Considere que la densidad del agua es de 1 g/mL, que el calor específico de del agua $C_e(H_2O)$=4,18 J/gºC, y el calor específico de hierro es de C_e(Fe)=0,450 J/gºC.

a) Calcule la temperatura de equilibrio de este sistema.

b) Suponga que, una vez alcanzado el equilibrio anterior, se agrega un cubo de hielo de 10 g a -20 ºC. Evalúe si el hielo se derrite y cuál es la temperatura de equilibrio del sistema. Considere que el calor específico del hielo es de 2,050 J/g K y el calor latente de fusión del hielo es de 334 J/g.

Desarrollo:

a)

El primer paso es considerar las temperaturas en K. así:

20ºC = 293,15 K
80ºC = 353,15 K
120ºC = 393,15 K

(6J/K)*(T_{eq}-293,15K) + 100g*[4,18 J/(gK)]*(T_{eq}-293,15K)+80g*[4,18 J/(gK)]*(T_{eq}-353,15K) + 10g*[0,450J/(gK)]*(T_{eq}-393K) = 0

(Planteamiento: 2 puntos)

T_{eq}*[6 J/K+ 418 J/K+ 334,4 J/K +4,5 J/K] + [-1758,9 J –122536,7 J – 118093,36 J – 1768,5 J] = 0

T_{eq} [762,9 J/K] – 244157,46 J = 0

T_{eq} = (244157,46 J)/(762,9 J/K) = 320,4 K

T_{eq} = 320,4 K = 46,9 ºC

(Desarrollo: 3 puntos)

b) Independientemente de la T_{eq} de la parte a), considerar todo el puntaje si el procedimiento matemático es correcto

El sistema ahora contiene 180 mL de agua, el calorímetro y 10 g de hierro todos a la temperatura 320,4 K (T_{cal}). Entonces al agregar 10 g de hielo se debe considerar que este se calienta hasta la Temperatura de fusión (T_f) y se derrite. Además, que ese proceso incluye finalmente el equilibrio térmico:

$m_{hielo}*C_e(hielo)*(T_f - T_{hielo}) + m_{hielo}*\Delta H^o_{fusión}(agua) + m_{hielo}*C_e(agua)*(T_{eq} - T_f) + m_{agua}*C_e(agua)*(T_{eq} - T_{cal}) + m_{Fe}*C_e(Fe)*(T_{eq} - T_{cal}) + C_k*(T_{eq} - T_{cal}) = 0$

$10*2{,}05\ J/K\ *(20K) + 10*334\ J + 10g*4{,}18\ J/K*(T_{eq} - 273{,}15K) + 180*4{,}18\ J/K*(T_{eq} - 320{,}4\ K) + 10*0{,}450\ J/K*(T_{eq} - 320{,}4\ K) + 6\ J/K*(T_{eq} - 320{,}4\ K) = 0$

(Planteamiento: 2 puntos)

$410\ J + 3340\ J + 41{,}8\ J*T_{eq} - 11417{,}67\ J + 752{,}4\ J/K*T_{eq} - 241068{,}96\ J - 4{,}5\ J/K*T_{eq} - 1441{,}8\ J + 6\ J/K*T_{eq} - 1922{,}4\ J = 0$

$T_{eq}*(41{,}8\ J/K + 752{,}4\ J/K + 4{,}5\ J/K + 6{,}0\ J/K) = 252100{,}83\ J$

$T_{eq}*(804{,}7\ J/K) = 252100{,}83\ J$

$T_{eq} = 313{,}29\ K = 40{,}14\ ^oC$

(Desarrollo: 3 puntos)

2.- En los yacimientos de Hierro se obtiene principalmente pirita, un disulfuro de hierro (II) (FeS_2). Para extraer el hierro, el primer paso que se emplea es lo que se le llama tostar el mineral en abundante presencia de oxígeno, formando así óxido de hierro (III) (Fe_2O_3) y dióxido de azufre (SO_2). La reacción que describe este proceso se muestra a continuación es:

$$FeS_2(s) + 11O_2(g) \rightleftarrows 2Fe_2O_3(s) + 8SO_2\ (g)$$

Considerando las siguientes propiedades termodinámicas a 25 ºC. Determine si la reacción es espontanea, justifique con cálculos.

Sustancia	ΔH_f^o (kJ/mol)	S^o (J/mol)
FeS_2 (s)	-178,2	52,93
Fe_2O_3 (s)	-824,2	87,40
O_2 (g)	---	205,138
SO_2 (g)	-296,83	248,22

Desarrollo 1: Considerando la estequiometría y balance de ecuación

$$4FeS_2(s) + 11O_2(g) \rightleftarrows 2Fe_2O_3(s) + 8SO_2\ (g)$$

Para evaluar la espontaneidad de una reacción se debe calcular la variación de la energía libre de Gibbs (ΔG_r^o) a presión y temperatura constante, que sigue la siguiente expresión:

$\Delta G_r^o = \Delta H_r^o - T\Delta S_r^o$ (P= 1,0 atm; T=298,15 K)

Para calcular $\Delta H_r^o = \Sigma n_{productos} \Delta H_f^o(productos) - \Sigma n_{reactivos}\ \Delta H_f^o(reactivos)$

Entonces:

$\Delta H_r^o = \{8*\Delta H_f^o[SO_{2(g)}] + 2*\Delta H_f^o[Fe_2O_{3(s)}]\} - \{4*\Delta H_f^o[FeS_{2(s)}] + 11*\Delta H_f^o[O_{2(g)}]\}$

$\Delta H_r^o = \{8*(-296,83\ kJ/mol) + 2*(-824,2\ kJ/mol)\} - \{4*(-178,2\ kJ/mol) + (11*0\ kJ/mol)\}$

(Planteamiento: 2 puntos)

$\Delta H_r^o = \{-2374,64\ kJ/mol - 1648,4\ kJ/mol\} - \{-713,6\ kJ/mol\}$

$\Delta H_r^o = \{-4023,04\ kJ/mol\} + 713,6 = -3309,44\ kJ/mol$

ΔH_r^o = -3309,44 kJ/mol

(Desarrollo: 4 puntos)

Para calcular la variación de la entropía es necesario emplear las entropías absolutas de acuerdo a:

$\Delta S_r^o = \Sigma n_{productos} S^o(productos) - \Sigma n_{reactivos} S^o(reactivos)$

$\Delta S_r^\circ = \{8*S^o[SO_{2(g)}]+2*S^o[Fe_2O_{3(s)}]\} - \{4*S^o[FeS_{2(s)}]+11*S^o[O_{2(g)}]\}$

$\Delta S_r^\circ = \{8*(248,22\ J/mol\cdot K) + 2*(87,40\ J/mol\cdot K)\} - \{4*(52,93\ J/mol\cdot K)+11*(205,138\ J/mol\cdot K)\}$

(Planteamiento: 2 puntos)

$\Delta S_r^\circ = \{1985,76\ J/mol\cdot K + 174,8\ J/mol\cdot K\} - \{211,72\ J/mol\cdot K + 2256,318\}$

$\Delta S_r^\circ = \{2160,56\ J/mol\cdot K\} - \{2468,04\ J/mol\cdot K\} = -307,48\ J/mol\cdot K$

$\Delta S_r^\circ = -307,48\ J/mol\cdot K = -0,30748\ kJ/mol\cdot K$

(Desarrollo: 4 puntos)

Resumiendo, los valores principales para calcular ΔG_r^o:

$\Delta H_r^o = -3666,63\ kJ/mol$; $\Delta S_r^o = -0,30748\ kJ/mol\cdot K$; $T = 298,15\ K$

Entonces

$\Delta G_r^o = \Delta H_r^o - T\ \Delta S_r^o =$ **-3309,44** $kJ/mol - (298,15\ K)*(-0,30748\ kJ/mol\cdot K)$ (**1 pt**)

$\Delta G_r^o =$ **-3309,44 kJ/mol** $+91,68\ kJ/mol = -3217,76\ kJ/mol$ (**1 pt**)

$\Delta G_r^o = -3217,76\ kJ/mol$

(2 puntos)

El valor negativo de ΔG_r^o indica que la reacción es espontanea en el sentido directo liberando un total de -3217.76 kJ/mol.

(1 punto)

Desarrollo 2: Sin balance de ecuación

$$FeS_2(s) + 11O_2(g) \rightleftarrows 2Fe_2O_3(s) + 8SO_2\ (g)$$

Para evaluar la espontaneidad de una reacción se debe calcular la variación de la energía libre de Gibbs (ΔG_r^o) a presión y temperatura constante, que sigue la siguiente expresión:

$\Delta G_r^o = \Delta H_r^o - T\Delta S_r^o$ (P= 1,0 atm; T=298,15 K)

Para calcular $\Delta H_r^o = \Sigma n_{productos} \Delta H_f^o(productos) - \Sigma n_{reactivos}\ \Delta H_f^o(reactivos)$

Entonces:

$\Delta H_r^\circ = \{8*\Delta H_f^o[SO_{2(g)}] + 2*\Delta H_f^o[Fe_2O_{3(s)}]\} - \{1*\Delta H_f^o[FeS_{2(s)}] + 11*\Delta H_f^o[O_{2(g)}]\}$

$\Delta H_r^\circ = \{8*(-296,83\ kJ/mol) + 2*(-824,2\ kJ/mol)\} - \{1*(-178,2\ kJ/mol) + (11*0\ kJ/mol)\}$

(Planteamiento: 2 puntos)

$\Delta H_r^\circ = \{-2374,64\ kJ/mol - 1648,4\ kJ/mol\} - \{-178,2\ kJ/mol\}$

$\Delta H_r^\circ = \{-4023,04\ kJ/mol\} + 178,2\ kJ/mol = -3844,84\ kJ/mol$

$\mathbf{\Delta H_r^\circ = -3844,84\ kJ/mol}$

(Desarrollo: 4 puntos)

Para calcular la variación de la entropía es necesario emplear las entropías absolutas de acuerdo a:

$\Delta S_r^o = \Sigma n_{productos} S^o(productos) - \Sigma n_{reactivos}\ S^o(reactivos)$

$\Delta S_r^\circ = \{8*S^o[SO_{2(g)}] + 2*S^o[Fe_2O_{3(s)}]\} - \{1*S^o[FeS_{2(s)}] + 11*S^o[O_{2(g)}]\}$

$\Delta S_r^\circ = \{8*(248,22\ J/mol\cdot K) + 2*(87,40\ J/mol\cdot K)\} - \{1*(52,93\ J/mol\cdot K) + 11*(205,138\ J/mol\cdot K)\}$

(Planteamiento: 2 puntos)

$\Delta S_r^\circ = \{1985,76\ J/mol\cdot K + 174,8\ J/mol\cdot K\} - \{52,93\ J/mol\cdot K + 2256,318\}$

$\Delta S_r^\circ = \{2160,56\ J/mol\cdot K\} - \{2309,25\ J/mol\cdot K\} = -148,69\ J/mol\cdot K$

$\Delta S_r^\circ = -148,69\ J/mol\cdot K = -0,14869\ kJ/mol\cdot K$

(Desarrollo: 4 puntos)

Resumiendo, los valores principales para calcular ΔG_r^o:
ΔH_r^o = -3844,84 kJ/mol ; ΔS_r^o = -0,14869 kJ/mol·K ; T = 298,15 K

Entonces
$\Delta G_r^o = \Delta H_r^o - T\,\Delta S_r^o$ = -3844,84 kJ/mol – (298,15 K)*(-0,14869 kJ/mol·K) (**1 pt**)

ΔG_r^o = -3844,84 kJ/mol + 44,33 kJ/mol = -3800,51 kJ/mol (**1 pt**)

ΔG_r^o = -3800,51 kJ/mol

(2 puntos)

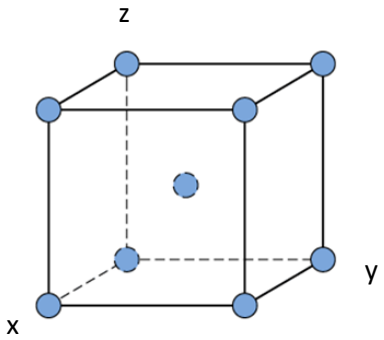
El valor negativo de ΔG_r^o indica que la reacción es espontánea en el sentido directo liberando un total de -3800,51 kJ/mol.

(1 punto)

Pregunta 4: Química del Estado Sólido (25 puntos)

El Niobio (Nb) es utilizado en magnetos superconductores en los aceleradores de partículas, además de equipamiento como Resonancia Magnética Nuclear (RMN) o Imágenes por Resonancia Magnética (IRM). Se sabe que Nb posee una estructura BCC. Sin embargo, se ha observado que cuando esta estructura posee defectos, tales como la incorporación de un átomo de Nb en la cara del plano (100) y otro átomo de Nb en la cara del plano (010), presenta mejores propiedades superconductoras. Respecto a la estructura del Niobio:

a) Dibuje la posición de los defectos indicados para el material de Nb (utilice eje de coordenadas dado).

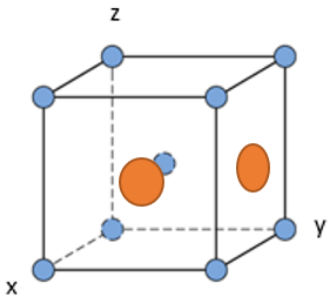


b) Si el radio atómico de Nb es 0,164 nm y su masa molar Nb = 92,91 g/mol, determine la densidad teórica del material considerando los defectos señalados. Además, suponga que dichos defectos no afectan el parámetro de red inicial de la estructura BCC.

c) Determine la densidad planar del plano (200).

Desarrollo:

a)



(5 Puntos)

b)

$r = 0{,}164\ nm$

$M = 92{,}91\ \frac{g}{mol}$

$\rho = \frac{\frac{átomos}{celda} x\ masa\ atómica}{volumen\ de\ celda\ x\ N_{avogadro}}$

$volumen\ de\ celda = a^3$

$r = \frac{a\sqrt{3}}{4} \qquad reemplazando \qquad a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$

$a = \frac{4\ x\ 0{,}164\ nm}{\sqrt{3}} = 0{,}379\ nm = 3{,}79\ x\ 10^{-8} cm$ **(Parámetro de red: 5 puntos)**

$volumen\ de\ celda = (3{,}79\ x\ 10^{-8}\ cm)^3 = 5{,}44\ x\ 10^{-23}\ cm^3$

(Volumen de celda: 2 puntos)

Considerando 3 átomos en celda

$\frac{átomos}{celda} = \left(8\ vértices\ x\ \frac{1}{8}\right) + (1\ átomo\ en\ centro) + \left(\frac{1}{2} x\ 2\ átomo\ de\ defectos\right)$

$\frac{átomos}{celda} = 3\ átomos$ **(Átomos/celda: 3 puntos)**

$\rho = \frac{\frac{3\ átomos}{celda} x\ 92{,}91 \frac{g}{mol}}{5{,}44\ x\ 10^{-23}\ cm^3\ x\ 6{,}02\ x\ 10^{23} \frac{átomos}{mol}}$ $\rho = 8{,}26\ \frac{g}{cm^3}$

(Densidad: 5 puntos)

Considerando 4 átomos en celda

$\frac{átomos}{celda} = \left(8\ vértices\ x\ \frac{1}{8}\right) + (1\ átomo\ en\ centro) + (1/2\ x\ 4\ átomos\ de\ defectos)$

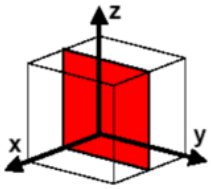
$\frac{átomos}{celda} = 4\ átomos$ **(Átomos/celda: 3 puntos)**

$\rho = \frac{\frac{4\ átomos}{celda} x\ 92{,}91 \frac{g}{mol}}{5{,}44\ x\ 10^{-23}\ cm^3\ x\ 6{,}02\ x\ 10^{23} \frac{átomos}{mol}}$ $\rho = 11{,}34\ \frac{g}{cm^3}$

(Densidad: 5 puntos)

c)

El plano (200) corresponde a:



Considerando 1,5 átomos en celda

$$\rho_p = \frac{número\ de\ átomos\ dentro\ del\ plano}{área\ del\ plano}$$

$$número\ de\ átomos\ en\ plano = 1\ átomo\ en\ centro + \frac{1}{2}\ del\ defecto$$

$$área\ del\ plano = a^2 = (0{,}379\ nm)^2 = 0{,}144\ nm^2$$

$$\rho_p = \frac{1{,}5\ átomos}{0{,}144\ nm^2} = 10{,}41\ \frac{átomos}{nm^2}$$ **(5 puntos)**

Considerando 2 átomos en celda

$$\rho_p = \frac{número\ de\ átomos\ dentro\ del\ plano}{área\ del\ plano}$$

$$número\ de\ átomos\ en\ plano = 1\ átomo\ en\ centro + \frac{1}{2}x2\ del\ defecto$$

$$área\ del\ plano = a^2 = (0{,}379\ nm)^2 = 0{,}144\ nm^2$$

$$\rho_p = \frac{2\ átomos}{0{,}144\ nm^2} = 13{,}89\ \frac{átomos}{nm^2}$$ **(5 puntos)**