FACULTAD DE QUÍMICA
PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

Pontificia Universidad Católica de Chile
Facultad de Química
Dirección Académica
Santiago, 16 de mayo de 2025

QUÍMICA PARA INGENIERÍA

Pauta Interrogación I 2025

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 áreas urbanas e industriales, la actividad humana genera emisiones que participan en procesos químicos relevantes para la calidad del aire. Algunas de estas reacciones también se estudian en laboratorios para entender su cinética y su impacto ambiental. Considere las siguientes reacciones a 25 °C:

(1) $NO(g) + ½O_2(g) \rightarrow NO_2(g)$ $\quad k_1 = 1{,}2 \cdot 10^{-3}\ L\ mol^{-1}s^{-1}$

(2) $N_2O(g) \rightarrow N_2(g) + ½O_2(g)$ $\quad k_2 = 0{,}055\ mol\ L^{-1}s^{-1}$

Nota: La reacción (2) ocurre en superficies catalíticas.

Respecto de estas reacciones, indique cuál(es) de las siguientes afirmaciones es(son) <u>VERDADERA(S)</u>:

I. Si se aumenta la concentración de NO en la reacción (1), la constante k_1 también aumentará.
II. La velocidad de la reacción (2) no depende de la concentración de N_2O.
III. La reacción (1) es de segundo orden, mientras que la reacción (2) es de primer orden.
IV. Si se modifica la naturaleza del catalizador en la reacción (2), el valor de la constante k_2 podría cambiar.
V. Si se aumenta la temperatura en la reacción (1), la constante k_1 también aumentará.

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

2.- En relación con el efecto de las fuerzas intermoleculares sobre el punto de ebullición, ordene de forma creciente (de menor a mayor) el punto de ebullición de las siguientes sustancias

- HCl
- HI
- HF
- HBr

Masa molar H: 1 g/mol
Masa molar I: 126,9 g/mol
Masa molar Cl: 35,5 g/mol
Masa molar Br: 79,9 g/mol
Masa molar F: 19 g/mol

a) HCl < HBr < HF < HI
b) HCl < HBr < HI < HF
c) HF < HCl < HBr < HI
d) HCl < HF < HBr < HI
e) HF < HI < HBr < HCl

3.- Considere los siguientes cuatro procesos llevados a cabo en sistemas cerrados conteniendo un gas ideal desconocido. En todos los casos, se suministra o retira energía en forma de calor, especificándose las condiciones en que se realiza (P o V constante). ¿Cuál de los siguientes procesos produce un mayor aumento en la energía interna del sistema?

a) Se suministran 100 J de calor a presión constante, y el gas realiza 40 J de trabajo de expansión.
b) Se suministran 100 J de calor a volumen constante.
c) Se suministran 100 J de calor a presión constante, y el gas se expande a una presión constante de 1 atm, desde un volumen de 1,0 L hasta 1,5 L.
d) Se retiran 100 J de calor, mientras el gas se expande 1,0 L a 1,5 L a 2 atm.
e) Se suministran 100 J de calor, mientras el gas se comprime a 1 atm, desde un volumen de 1,5 L a 1,0 L.

4.- Considere la siguiente reacción endotérmica:

$$CaCO_{3(s)} \rightarrow CaO_{(s)} + CO_{2(g)}$$

En relación con esta reacción, ¿cuál de las siguientes alternativas es correcta?

a) La reacción necesariamente debería ser endotérmica para ser espontanea, dado que el cambio de entropía es positivo puesto que se genera un gas.
b) La reacción no ocurre espontáneamente a temperatura ambiente porque ΔH es positivo, y eso impide siempre la espontaneidad.
c) La espontaneidad de la reacción depende de la temperatura.
d) Si el proceso se lleva a cabo lentamente, puede volverse espontáneo sin importar el valor de ΔG.
e) La reacción es siempre espontánea si se lleva a cabo en un sistema cerrado sin intercambiar materia con el entorno.

5.- Indique cuál de estas afirmaciones es **FALSA** con relación a la estructura FCC

a) El número de coordinación es 12
b) El factor de empaquetamiento es 0,74
c) Posee 8 huecos intersticiales tetraédricos propios
d) Posee 12 huecos octaédrico que comparte con celdas vecinas
e) La estructura FCC posee más huecos octaédricos compartidos con otras celdas que la estructura BCC.

6.- Indique cuál(es) de las siguientes afirmaciones es(son) **FALSA(S)**:

I. A 0 K la fuerza y la energía neta es cero
II. Un semiconductor tiene la banda de conducción superpuesta con la banda de valencia.
III. Una estructura BCC tiene un empaquetamiento ABC-ABC.
IV. El factor de empaquetamiento de una celda SC es de 0,45

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

7.- En relación con los contenidos abordados en la Charla Magistral 1 sobre carbono neutralidad en la industria del hormigón, la descarbonización de la piedra caliza (explorada en estudios binacionales entre Chile y Canadá) se plantea como una estrategia emergente para reducir las emisiones de CO_2 asociadas a la producción de clinker. Esta alternativa se basa en:

a) La captura del CO_2 liberado durante la calcinación, seguido de su confinamiento geológico en formaciones subterráneas estables.
b) La conversión electroquímica del $CaCO_3$ en hidróxido de calcio ($Ca(OH)_2$), evitando así la emisión directa de CO_2 por descomposición térmica.
c) La eliminación de la piedra caliza mediante el uso exclusivo de arcilla calcinada y piedra caliza molida para la producción de cemento.
d) La incorporación de sistemas biológicos, como microalgas, para absorber CO_2 atmosférico durante la etapa de mezclado del hormigón.

8.- La reacción entre hidrógeno (H_2) y yodo (I_2) para formar yoduro de hidrógeno (HI) tiene importancia industrial debido a su papel en la síntesis de compuestos organoyodados, catalizadores y materiales intermedios utilizados en procesos químicos especializados. Se conoce que su reacción global de formación es:

$$H_2(g) + I_2(g) \rightarrow 2HI(g)$$

Con base en el siguiente mecanismo, ¿cuál(es) de las siguientes afirmaciones es(son) CORRECTA(S)?

$$H_2(g) \xrightarrow{k1} 2H(g) \qquad \text{(paso rápido)}$$

$$H(g) + I_2\,(g) \xrightarrow{k2} HI(g) + I(g) \qquad \text{(Paso lento)}$$

$$I(g) + H_2\,(g) \xrightarrow{k3} HI(g) + H(g) \qquad \text{(Paso rápido)}$$

I. La velocidad de reacción depende solo de la concentración de I_2, ya que es reactivo en el paso lento.
II. La molecularidad del paso lento es 2, porque participan un átomo de H y una molécula de I_2.
III. El paso lento involucra la formación de un intermediario [el átomo de yodo (I)], por tanto, la velocidad de este paso elemental solo depende de la concentración de ese intermediario.
IV. El paso lento es unimolecular.
V. La velocidad del primer paso se expresa como $v = k_1[H_2]$

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

Pegunta 2: Estequiometria (14 puntos)

La extracción de molibdeno de los yacimientos de cobre constituye un pilar estratégico para la industria minera en Chile. En la actualidad, nuestro país se ha posicionado como el segundo productor a nivel mundial de este preciado metal, solamente superado por China. El consumo mundial de molibdeno se centra fundamentalmente en la producción de aceros inoxidables; en la fabricación de lubricantes, filamentos y pantallas LCD; en la obtención de catalizadores, para la industria del petróleo y gas natural, y de superaleaciones que se usan en motores, turbinas, centrales nucleares y exploración espacial. El principal mineral de molibdeno que se encuentra en las menas de cobre es la molibdenita (MoS_2). Otros dos minerales de molibdeno son la powellita ($CaMoO_4$) y la wulfenita ($PbMoO_4$); sin embargo, solamente la molibdenita posee las propiedades necesarias para que el procesamiento mecánico y posterior obtención de molibdeno y sus derivados sea rentable.

El trioxomolibdeno (MoO_3) es la forma en la que el molibdeno suele comercializarse tras su extracción del mineral de molibdenita, para luego ser refinado y procesado en función de su aplicación. La reacción no balanceada que representa el proceso de transformación del MoS_2 en MoO_3 se muestra a continuación:

$$MoS_2\,(s) \quad + \quad O_2\,(g) \quad \rightarrow \quad MoO_3\,(s) \quad + \quad SO_2\,(g)$$

Si una muestra de 275 g de molibdenita que contiene un 86,5 % de MoS_2 se hace reaccionar con 145 g de dioxígeno (considere que el resto del contenido del mineral no reacciona con O_2):

a) Balancee la ecuación de obtención de MoO_3 a partir de MoS_2. **(3 puntos)**
b) Determine el reactivo limitante de esta reacción. Justifique mediante los cálculos correspondientes. **(5 puntos)**
c) Determine la masa de MoO_3 que se obtiene como producto si esta reacción ocurre con un 95,4% de rendimiento. Justifique mediante los cálculos correspondientes. **(6 puntos)**

Datos:

M(Mo) = 95,94 g/mol	M(O) = 16,00 g/mol	M(S) = 32,07 g/mol
M(Ca) = 40,08 g/mol	M(Pb) = 207,2 g/mol	

Desarrollo:

a) $MoS_2\ (s) + {}^{7}/_{2}\ O_2\ (g) = MoO_3\ (s) + \mathbf{2}\ SO_2\ (g)$ **(3 Puntos)**

También considerar correcto: $\mathbf{2}\ MoS_2\ (s) + \mathbf{7}\ O_2\ (g) = 2\ MoO_3\ (s) + \mathbf{4}\ SO_2\ (g)$

b) Cálculo de las cantidades de sustancia (cantidades iniciales):

$\mathbf{m_i(MoS_2) = 275\ g * 0,865}$ $\mathbf{= 237,9\ g}$ **(1 Punto)** $\mathbf{M(MoS_2) = 95,94 + 2 * 32,07}$ $\mathbf{= 160,08\ g/mol}$ **(0,5 Puntos)** $\mathbf{n_i(MoS_2) = \frac{237,9\ g}{160,08\ g/mol}}$ $\mathbf{= 1,486\ mol}$ **(0,5 Puntos)**	$\mathbf{m_i(O_2) = 145\ g}$ $\mathbf{M(O_2) = 2 * 16,00}$ $\mathbf{= 32,00\ g/mol}$ **(0,5 Puntos)** $\mathbf{n_i(O_2) = \frac{145\ g}{32,00\ g/mol}}$ $\mathbf{= 4,531\ mol}$ **(0,5 puntos)**

Para determinar el reactivo limitante:

Cálculo de la cantidad de sustancia de O_2 que debe reaccionar para consumir totalmente la cantidad de sustancia inicial de MoS_2:

$$\mathbf{\frac{n_r(O_2)}{n_i(MoS_2)} = \frac{3,5}{1}}$$

$$n_r(O_2) = \frac{3,5}{1} * 1,486\ mol = \mathbf{5,201\ mol}$$

$5,201\ mol > 4,531\ mol$

$$\mathbf{n_r(O_2) > n_i(O_2)}$$

Esto indica que la cantidad de sustancia inicial de O_2 no es suficiente para consumir completamente la cantidad de sustancia inicial de MoS_2. **El O_2 es el reactivo limitante.**

(1 Punto) Por considerar que por cada 1 mol de MoS_2 reaccionan 3,5 mol de O_2 y realizar el cálculo que permite determinar la sustancia limitante.
(1 Punto) Por realizar las comparaciones correspondientes e indicar que el O_2 es el reactivo limitante.

Asignar todos los puntos si se llega al mismo resultado y se muestra el procedimiento correspondiente.

c) **(1 Punto)** Por considerar que por cada 3,5 mol que reaccionan de O_2, se obtendría estequiométricamente 1 mol de MoO_3.

$$\frac{n(MoO_3)}{n(O_2)} = \frac{1}{3{,}5}$$

Cálculo de la masa que se obtendría de MoO_3 a partir de la cantidad de sustancia que reacciona de O_2 (reactivo limitante).

$n(MoO_3) = \frac{1}{3{,}5} * 4{,}531 = \mathbf{1{,}294\ mol}$ **(1 Puntos)**

$M(MoO_3) = 95{,}94 + 3 * 16{,}00 = \mathbf{143{,}94\ g/mol}$ **(0,5 Puntos)**

$m(MoO_3) = n(MoO_3) * M(MoO_3) = 1{,}294\ mol * 143{,}94\ g/mol = \mathbf{186{,}2\ g}$ **(1 Puntos)**

Considerando el rendimiento de la reacción:

$m(MoO_3) = 0{,}954 * 186{,}2 = \mathbf{177{,}6\ g}$ **(2 Puntos)**

Considerando las 3 cifras significativas con las que debe expresarse el resultado:

$\mathbf{m(MoO_3) = 178\ g}$

(0,5 Puntos) Por expresar correctamente el resultado con su unidad de medida (g)

Asignar todos los puntos si se llega al mismo resultado y se muestra el procedimiento correspondiente.

Pregunta 3: Química del estado sólido (18 puntos)

En la empresa X-MET un grupo de ingenieros perteneciente al grupo de ciencia de los materiales está desarrollando una aleación a base de níquel, diseñada para aplicaciones a alta temperatura que exigen una elevada resistencia a la deformación plástica y al deslizamiento. Este material podría tener un gran impacto en diversas aplicaciones electrónicas. Los investigadores saben que una mayor densidad planar se traduce en una mayor resistencia a la deformación, y, además, saben que el níquel en estado puro (58,7 g/mol) cristaliza en una estructura cúbica centrada en las caras (FCC), con un parámetro de red de 0,352 nm. Con el fin de caracterizar el material diseñado, los ingenieros realizaron un análisis por difracción de rayos X utilizando radiación monocromática de cobre de 0,154 nm y orden de difracción igual a 1. El difractograma obtenido presentó tres planos cristalográficos claramente identificables, como se muestra en la Figura 1.

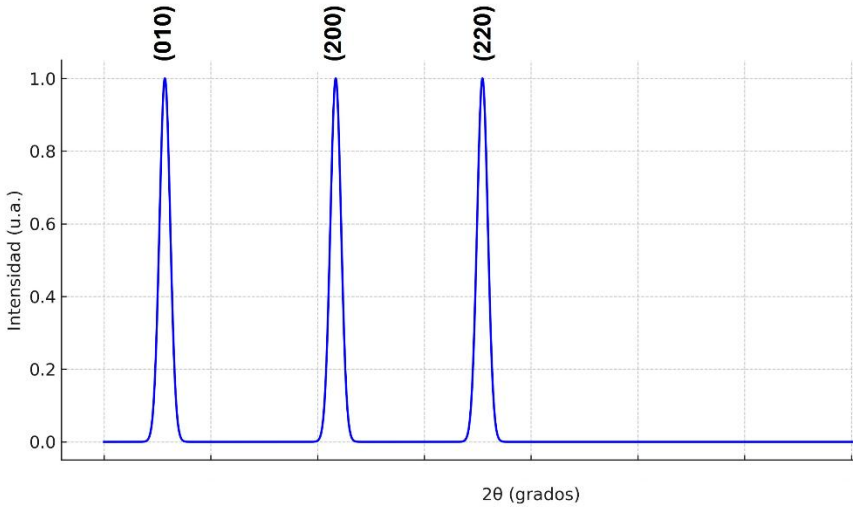


Figura 1: Difractograma de la aleación a base de níquel

En base a esta información, responda lo siguiente:

a) Calcule la densidad teórica del níquel puro **(5 Puntos)**.

b) Determine el ángulo de difracción correspondiente al plano (220). **(5 Puntos)**

c) Calcule la densidad planar de los planos observados en el difractograma. En función de sus resultados, **justifique** cuál de estos planos presenta la mayor resistencia a la deformación plástica o al deslizamiento. **(8 Puntos)**

Desarrollo:

a) Estructura FCC

- 4 átomos por celda
- 58,7 g/mol
- a = 0,352 nm = $3{,}52 \cdot 10^{-8}$ cm

$$\rho_{Ni} = \frac{(\text{átomos por celda}) \cdot (MM)}{V_{celda} \cdot N_{avogadro}}$$

$$\rho_{Ni} = \frac{(4\ \text{átomos}) \cdot (58{,}7\ g/mol)}{(3{,}52 \cdot 10^{-8} cm)^3 \cdot (6{,}022 \cdot 10^{23} \text{átomos}/mol)}$$ **(2 puntos)**

$$\boldsymbol{\rho_{Ni} = 8{,}93\ g/cm^3}$$ **(2 puntos valor y 1 puntos unidades)**

b) Plano (220)

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

$$d_{hkl} = \frac{0{,}352\ nm}{\sqrt{2^2+2^2+0^2}}$$

$$\boldsymbol{d_{hkl} = 0{,}124\ nm}$$ **(1 Punto)**

$$n \cdot \lambda = 2 d_{hkl} \cdot sen\theta$$

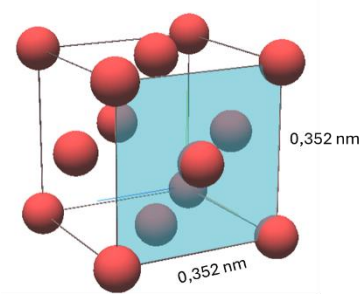
$$1 \cdot 0{,}154\ nm = 2(0{,}124\ nm) \cdot sen\theta$$

$$sen\theta = 0{,}621$$

$$\theta = 38{,}4°$$ **(2 Puntos)**

Angulo de difracción = 2θ = 76,8° **(2 puntos)**

c) Plano (010)



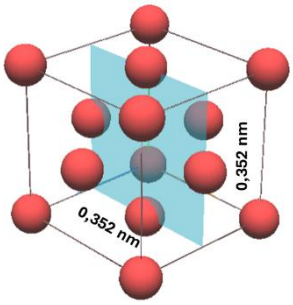
- átomos en el plano = (1/4·4) + 1 = **2 átomos** **(0,5 puntos)**
- Area del plano = (0,352 nm·0,352 nm) = **0,124 nm^2** **(0,5 puntos)**

$$\rho_{(010)} = \frac{(\acute{a}tomos\ en\ el\ plano)}{Area\ del\ plano}$$

$$\rho_{(010)} = \frac{(2\ \acute{a}tomos)}{(0{,}124\ nm^2)}$$

$$\boldsymbol{\rho_{(010)} = 16{,}14\ (atomos/nm^2)}$$ **(0,5 puntos valor y 0,5 puntos unidades)**

Plano (200)



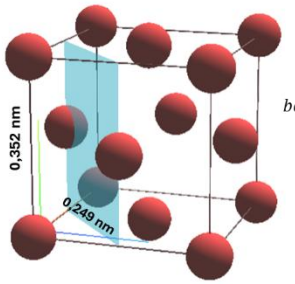
- átomos en el plano = (1/2·4) = **2 átomos** **(0,5 puntos)**
- Area del plano = (0,352 nm·0,352 nm) = **0,124 nm^2** **(0,5 puntos)**

$$\rho_{(010)} = \frac{(\acute{a}tomos\ en\ el\ plano)}{Area\ del\ plano}$$

$$\rho_{(010)} = \frac{(2\ \acute{a}tomos)}{(0{,}124\ nm^2)}$$

$$\boldsymbol{\rho_{(010)} = 16{,}14\ (atomos/nm^2)}$$ **(0,5 puntos valor y 0,5 puntos unidades)**

Plano (220)



$$base\ del\ plano = \sqrt{(0{,}352/2)^2 + (0{,}352/2)^2}$$

$$base\ del\ plano = 0{,}249\ nm$$

- átomos en el plano = (1/2·2) = **1 átomos** **(0,5 puntos)**
- Area del plano = (0,352 nm·0,249 nm) = **0,0876 nm^2** **(0,5 puntos)**

$$\rho_{(010)} = \frac{(\acute{a}tomos\ en\ el\ plano)}{Area\ del\ plano}$$

$$\rho_{(010)} = \frac{(1\ átomos)}{(0{,}0876\ nm^2)}$$

$$\boldsymbol{\rho_{(010)} = 22,8\ (atomos/nm^2)}$$ **(0,5 puntos valor y 0,5 puntos unidades)**

El plano (220) es el que presenta la mayor densidad planar, es decir, es el plano que presenta una mayor cantidad de átomos contenidas en él. Por lo tanto, el plano (220) será el que presenta la mayor resistencia a la deformación plástica o al deslizamiento.

(2 puntos)

Pregunta 4: Termoquímica-Termodinámica (18 puntos)

4.1.- En una refinería de cobre, se producen cátodos con un peso de 4 kg cada uno. Sin embargo, un operario observa que algunos cátodos presentan un color diferente al característico rojo del cobre puro. Tras realizar un análisis químico, se determina la presencia de níquel como impureza en la muestra.

El comprador ha establecido un criterio de aceptación que permite un máximo del 10% de impurezas en los cátodos de cobre. Para determinar si los cátodos cumplen con esta especificación y pueden ser comercializados, se decide llevar a cabo un experimento de calorimetría y determinar la cantidad de impurezas en los cátodos.

Detalles del Experimento

Para la prueba, se utiliza un estanque con 14 L de agua a una temperatura inicial de 20 °C. Uno de los cátodos de cobre se calienta hasta 125 °C y, seguidamente, es sumergido en el agua. Como resultado del intercambio térmico, la temperatura del sistema alcanza el equilibrio a 22,8 °C.

A partir de los datos del experimento, se debe calcular:

a) Masa de Cobre y Níquel presente en el cátodo. **(7 puntos)**

b) Porcentaje de cada metal y si puede ser vendido **(2 puntos)**

Calor específico Cu: 0,385 kJ/(kg °C)

Calor específico Ni: 0,440 kJ/(kg °C)

Desarrollo:

a)

4 kg = masa Cu + masa Ni

Se asignan las variables X para Cu y variable Y para Ni

$q_{cedido} + q_{absorbido} = 0$ **(1 Punto)**

$X * 0{,}385 \frac{kJ}{kg*°C} * (22{,}8\,°C - 125°C) + Y * 0{,}44 \frac{kJ}{kg*°C} (22{,}8\,°C - 125°C) + 14\,kg *$
$4{,}18 \frac{kJ}{kg*°C} * (22{,}8\,°C - 20°C) = 0$ **(2 Puntos)**

$-39{,}347\,X - 44{,}968\,Y = -163{,}856\,J$ **(1 Punto)**

Sabiendo que: $X + Y = 4\ kg$

$$X = 4\ kg - Y$$

Reemplazando:

$-39{,}347\ (4 - Y) - 44{,}968\ Y = -163{,}856\ J$ **(1 Punto)**

$6{,}466\ kJ = 5{,}621\ Y$

$Y = 1{,}15\ kg$ **(1 Punto)**

$X = 4\ kg - 1{,}15\ kg$

$X = 2{,}85\ kg$ **(1 Punto)**

b) Porcentaje de cada metal y si puede ser vendido

$\%\ Ni = \frac{1{,}15\ kg}{4\ kg} x100$

$\%\ Ni = 28{,}75\%$ **(0,5 Puntos)**

$\%\ Cu = \frac{2{,}85\ kg}{4\ kg} x100$

$\%\ Cu = 71{,}25\%$ **(0,5 Puntos)**

El cátodo no puede ser vendido ya que excede el 10% *de impurezas* **(1 Punto)**

4.2.- En los últimos años, el reemplazo de los combustibles fósiles por fuentes de energía más limpias y sostenibles se ha vuelto una prioridad a nivel mundial. Entre las alternativas propuestas, el hidrógeno ha captado gran interés debido a su alta densidad energética y a que su combustión no emite gases contaminantes. Sin embargo, los métodos de obtención y almacenamiento del hidrógeno siguen representando un desafío tecnológico y económico.

Como parte del equipo técnico de una empresa de energía, se nos ha encargado evaluar la viabilidad de obtener hidrógeno a partir de tres compuestos: agua (H_2O), etanol o alcohol etílico (C_2H_5OH) y amoníaco (NH_3). El objetivo es determinar, mediante un análisis termodinámico a 25 °C (298 K), si estos procesos son espontáneos y, por tanto, viables desde el punto de vista energético.

A continuación, se presenta el análisis solicitado:

a) Según la energía libre de cada reacción ordene de mayor a menor espontaneidad las reacciones a 25 °C **(6 puntos)**

b) Al suponer que la entalpía y entropía no varían con la temperatura. Determine el intervalo de temperatura en que las 3 reacciones serán espontáneas **(3 puntos)**

1.- $2\ H_2O_{(l)} \rightarrow 2\ H_{2(g)} + O_{2(g)}$

2.- $2\ NH_{3(g)} \rightarrow N_{2(g)} + 3\ H_{2(g)}$

3.- $C_2H_5OH_{(g)} + 3\ H_2O_{(g)} \rightarrow 2\ CO_{2(g)} + 6\ H_{2(g)}$

Datos:

Compuesto	ΔH° (kJ/mol)	ΔS° (J/mol K)
$H_2O_{(l)}$	-285.83	69.91
$H_{2(g)}$	---	130,68
$O_{2(g)}$	---	205,14
$NH_{3(g)}$	-45.94	192,77
$C_2H_5OH_{(g)}$	-234.83	282,7
$H_2O_{(g)}$	-241.82	188,83
$CO_{2(g)}$	-393.51	213,74
$N_{2(g)}$	---	191,68

Desarrollo:

a) Utilizando: $\Delta G° = \Delta H° - T\Delta S°$, con T = 298 K.

1. Agua:

ΔH = [2 mol x 0 kJ/mol+ 2 mol× 0 kJ/mol] – [2 mol x -285,83 kJ/mol] = 571,66 kJ

(0.6 puntos)

ΔS = [2 mol x 130.68 kJ/mol + 205.14 kJ/mol] – [2 mol x 69.91 kJ/mol] = 326.68 J/K = 0.32668 kJ/K **(0.6 puntos)**

ΔG = (571,66 kJ) - (298 K)x(0. 32668 kJ/K) = 474.26 kJ **(0.6 puntos)**

2.Amoníaco:

ΔH = [0+ 3 mol × 0 kJ/mol] – [2 mol x -45,94 kJ/mol] = 91,88 kJ **(0.6 puntos)**

ΔS = [196,68 kJ/mol + 3 mol ×130,68 kJ/mol] – [2 mol x 192,77 kJ/mol] = 203,18 J/K = 0,20318 kJ/K **(0.6 puntos)**

ΔG = 91,88 kJ - (298 K)x(0,20318 J/K) = 31,33 kJ **(0.6 puntos)**

3.Etanol:

ΔH = [2 mol x-393,51 kJ/mol+ 6 mol ×0] – [-234,83 kJ/mol +3 mol x 241,82 kJ] = 173,27 kJ **(0.6 puntos)**

ΔS = [2 mol x 213,74 kJ/mol + 6 mol × 130,68 kJ/mol] – [282,7 kJ/mol + 3 mol x 188,83 kJ/mol] = 398,37 J/K = 0,39837 kJ/K **(0.6 puntos)**

ΔG = 173,27 kJ - (298 K)(0,39837 kJ/mol) = 54.55 kJ **(0.6 puntos)**

Orden de espontaneidad (mayor a menor): **(0.6 puntos)**
1. Amoníaco (ΔG =31,33 kJ)
2. Etanol (ΔG =54,55 kJ)
3. Agua (ΔG =413,18 kJ)

b) Temperatura espontaneidad de hidrógeno a partir de agua

0< ΔH - TΔS T> 517,66 kJ / 0,53181 kJ= 973 K

La reacción será espontánea sobre 973 K o 700,39 °C **(1 punto)**

Temperatura espontaneidad de hidrógeno a partir de amoníaco

T > 91,88 kJ / 0,20318 kJ= 452,21 K

La reacción será espontánea sobre 452,21 K o 179,2 °C **(1 punto)**

Temperatura espontaneidad de hidrógeno a partir de etanol

T> 173,27 / 0,39837 = 434,94 K

La reacción será espontánea sobre 434,94 K o 161,94 °C **(1 punto)**

Pregunta 5: Cinética Química (18 puntos)

Con el fin de mitigar el cambio climático, usted participa en el desarrollo de un sistema de captura de CO_2 atmosférico mediante su reacción con iones calcio (Ca^{2+}) disueltos en agua. El proceso lleva a la precipitación del carbonato de calcio ($CaCO_3$), un sólido estable que puede almacenarse o reutilizarse en materiales de construcción:

$$CO_2\,(ac) + Ca^{2+}\,(ac) \rightarrow CaCO_3\,(s)$$

Para evaluar la eficiencia del proceso, se estudia la cinética de formación de $CaCO_3$, midiendo la velocidad de precipitación en función de las concentraciones iniciales de CO_2. El sistema se mantiene a 25 °C y pH constante.

Experimento	$[CO_2]$ $(mol \cdot L^{-1})$	$[Ca^{2+}]$ $(mol \cdot L^{-1})$	Velocidad de formación de $CaCO_3$ $(mol \cdot L^{-1} \cdot s^{-1})$
1	0,010	0,050	$2{,}5 \times 10^{-5}$
2	0,020	0,050	$5{,}0 \times 10^{-5}$
3	0,010	0,100	$5{,}0 \times 10^{-5}$
4	0,020	0,100	$1{,}0 \times 10^{-4}$

Al respecto se le solicita lo siguiente:

a) Determine el orden de reacción con respecto a CO_2 y a Ca^{2+}. Escriba la ley de velocidad. **(4 puntos)**

b) Calcule el valor de la constante de velocidad con sus unidades. **(3 puntos)**

c) Estime la velocidad de formación de $CaCO_3$ si $[CO_2] = 0{,}015\ mol \cdot L^{-1}$ y $[Ca^{2+}] = 0{,}075\ mol \cdot L^{-1}$. (**3 puntos)**

d) Para acelerar el proceso, se propone aumentar la temperatura de 25 °C a 60 °C, lo cual eleva la constante de velocidad de $2{,}5 \times 10^{-2}$ a $1{,}0 \times 10^{-1}\ L \cdot mol^{-1} \cdot s^{-1}$. Calcule la energía de activación Ea en kJ/mol. **(4 puntos)**

e) Si se mantiene constante $[Ca^{2+}] = 0{,}050\ mol \cdot L^{-1}$, y la reacción se comporta como de primer orden con respecto al CO_2, determine el tiempo de vida media ($t_{1/2}$) del CO_2 cuando su concentración inicial es $0{,}010\ mol \cdot L^{-1}$. **(4 puntos)**

Desarrollo:

a) El orden parcial de [CO_2] se determina seleccionando los datos de los experimentos 1 y 2 o 3 y 4.

$$\frac{v2}{v1} = \frac{k\,[CO_2]^m\,[Ca^{2+}]^{\boldsymbol{n}}}{k\,[CO_2]^m\,[Ca^{2+}]^{\boldsymbol{n}}}$$

$$\frac{5{,}0 \times 10^{-5}}{2{,}5 \times 10^{-5}} = \frac{k\,[0.02\ \mathrm{M}]^m\,[0.05\mathrm{M}]^{\boldsymbol{n}}}{k\,[0.01\ \mathrm{M}]^m\,[0.05\ \mathrm{M}]^{\boldsymbol{n}}}$$

$2 = 2^m \quad \boldsymbol{m = 1, orden\ parcial\ para\ CO_2}$ **(1 Punto)**

El orden parcial de [Ca^{2+}] se determina seleccionando los datos del experimento 3 y 1 o 2 y 4:

$$\frac{v3}{v1} = \frac{k\,[CO_2]^m\,[Ca^{2+}]^{\boldsymbol{n}}}{k\,[CO_2]^m\,[Ca^{2+}]^{\boldsymbol{n}}}$$

$$\frac{5{,}0 \times 10^{-5}}{2{,}5 \times 10^{-5}} = \frac{k\,[0.01\ \mathrm{M}]^m\,[0.10\mathrm{M}]^{\boldsymbol{n}}}{k\,[0.01\ \mathrm{M}]^m\,[0.05\ \mathrm{M}]^{\boldsymbol{n}}}$$

$2 = 2^n \quad \boldsymbol{n = 1, orden\ parcial\ para\ Ca^{2+}}$ **(1 Punto)**

Ley de velocidad: $v = k[CO_2]^1\,[Ca^{2+}]^{\boldsymbol{1}}, \boldsymbol{orden\ total\ 2}$ **(2 Puntos)**

b) Tomando como ejemplo el experimento 1

$$v = k[CO_2]^1\,[Ca^{2+}]^{\boldsymbol{1}}$$

$$2{,}5 \times 10^{-5}\,\frac{mol}{L \cdot s} = k\left[0.01\ \frac{mol}{L}\right]^1\left[0.05\,\frac{mol}{L}\right]^{\boldsymbol{1}}$$

$$\mathrm{k} = \frac{2{,}5 \times 10^{-5}\frac{mol}{L \cdot s}}{5{,}0 \times 10^{-4}\,\frac{mol^2}{L^2}} = \boldsymbol{0.05\ \frac{L}{s \cdot mol}}$$ **(3 Puntos; 1 por unidades)**

c) Ley de velocidad: $v = k[CO_2]^1\,[Ca^{2+}]^{\boldsymbol{1}}$

$$v = 0.05\ \frac{L}{s \cdot mol}\left[0.015\,\frac{mol}{L}\right]^1\left[0.075\,\frac{mol}{L}\right]^1$$

$$v = \boldsymbol{5.625\ x\ 10^{-5}\,\frac{mol}{L \cdot s}}$$ **(3 Puntos; 1 por unidades)**

d) Utilizando la ecuación de Arrhenius

$$\ln\frac{k_1}{k_2} = \frac{E_a}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

$$\ln\frac{1{,}0\times10^{-1}\frac{L}{s\cdot mol}}{2{,}5\times10^{-2}\frac{L}{s\cdot mol}} = \frac{E_a}{8.314\frac{J}{mol\cdot K}}\left(\frac{1}{298.15\ K} - \frac{1}{333.15\ K}\right)$$

$$\ln 4 = \frac{E_a}{8.314\frac{J}{mol\cdot K}}\left(\frac{35}{99329\ K}\right)$$

$$\ln 4 = \frac{E_a}{8.314\frac{J}{mol\cdot K}}\left(3.524x10^{-4}\ K^{-1}\right)$$

$$E_a = \frac{\ln 4\cdot 8.314\frac{J}{mol\cdot K}}{\left(3.524x10^{-4}\ K^{-1}\right)}$$

$$E_a = 32709{,}47\ \frac{J}{mol} = \mathbf{32.71}\ \frac{\boldsymbol{kJ}}{\boldsymbol{mol}}$$ **(4 Puntos; 1 por unidades)**

e) Si se mantiene **[Ca^{2+}] constante,** entonces esta reacción se comporta como de **orden 1 respecto a CO_2** (cinética de pseudo-primer orden).

La reacción es de pimer orden respecto a CO_2

Calculo k_{obs}

$$v = k_{obs}[CO_2], donde\ k_{obs} = k[Ca^{2+}]$$

$$k_{obs} = 0.05\ \frac{L}{s\cdot mol}\left[0.05\frac{mol}{L}\right]$$

$$k_{obs} = 2.5x10^{-3}\ s^{-1}$$ **(2 Puntos; 1 por unidades)**

Calculo tiempo de vida media

$$t_{1/2} = \frac{0.693}{k}$$

$$t_{1/2} = \frac{0.693}{2.5x10^{-3}s^{-1}}$$

$$t_{1/2} = \mathbf{277,2\ s}$$ **(2 Puntos; 1 por unidades)**

Para las secciones donde se utilizó otro valor de la constante k, considerar el siguiente desarrollo:

$$k_{obs} = 0.025\ \frac{L}{s\cdot mol}\left[0.05\frac{mol}{L}\right]$$

$$k_{obs} = 1.25x10^{-3}\ s^{-1}$$ **(2 Puntos; 1 por unidades)**

Calculo tiempo de vida media

$$t_{1/2} = \frac{0.693}{k}$$

$$t_{1/2} = \frac{0.693}{1.25x10^{-3}s^{-1}}$$

$$t_{1/2} = \mathbf{554,4\ s}$$ **(2 Puntos; 1 por unidades)**