Pauta Interrogación 1

Pregunta 1 (40 Puntos)

Pregunta 1: Selección Múltiple

1.1.- En relación a las propiedades termoquímicas y termodinámicas de las reacciones químicas, diga cuál de estas afirmaciones es falsa:

a) Una reacción será espontánea cuando $\Delta G < 0$
b) ΔE y ΔH son funciones de estado
c) Una reacción será espontánea cuando $\Delta S_{universo} > 0$
d) Un sistema cerrado intercambia calor con el medio ambiente, pero no materia
e) Ninguna de las anteriores

1.2.- La celda cubica para átomos metálicos presenta algunas características. ¿Cuál(es) de esta(s) afirmaciones es(son) <u>verdadera(s)</u>?

I La estructura BCC tiene un factor de empaquetamiento 0,68
II El número de coordinación de los átomos en una estructura FCC es 12.
III Existen 2 átomos por celda unitaria en una estructura BCC

a) I, II
b) II, III
c) I, III
d) I, II y III
e) Ninguna de las anteriores

1.3.- De las siguientes interacciones intermoleculares ¿Cuál es la más fuerte?

a) Puente de hidrógeno
b) Dispersión de London
c) dipolo-dipolo
d) dipolo-dipolo inducido
e) ión-dipolo

1.4.- Un proceso será espontáneo a cualquier temperatura si:

a) ΔH y $\Delta S > 0$
b) $\Delta H < 0$ y $\Delta S > 0$
c) ΔH y $\Delta S < 0$
d) $\Delta H > 0$ y $\Delta S < 0$
e) ninguna de las anteriores

1.6.- Con respecto a la entropía es correcto afirmar que:

I Es una medida cuantitativa del número de microestados disponibles para una molécula en un sistema
II Da cuenta de la cantidad de calor que se desprende de un proceso
III Para un proceso espontáneo $\Delta S_{universo} < 0$
IV Es una función de estado

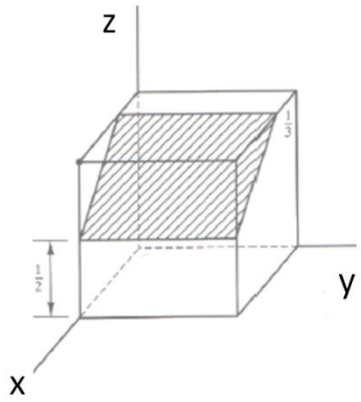
a) II y III
b) I y III
c) I y IV
d) I, III y IV
e) Todas son correctas

1.7.- En relación a las fuerzas intermoleculares, ¿cuál de estas afirmaciónes es verdadera?

a) La distancia de equilibrio entre los átomos de un enlace corresponde al estado de fuerza y energía igual a cero.
b) La distancia de equilibrio entre los átomos de un enlace corresponde al estado de mínima energía y mínima fuerza.
c) La distancia de equilibrio entre los átomos de un enlace corresponde al estado de mínima energía y fuerza igual a cero.
d) La distancia de equilibrio entre los átomos de un enlace corresponde al estado de mínima fuerza y energía igual a cero.
e) ningún da las anteriores

1.8.- ¿Cuál de los siguientes índices de Miller corresponde al plano de la figura? (no cambie los ejes).

a) (403)
b) (304)
c) (203)
d) (302)
e) ninguna de las anteriores



1.1	E
1.2	D
1.3	E
1.4	B
1.6	C
1.7	C
1.8	B

5 puntos c/u = 40 puntos

Pregunta 2 (15 puntos)

Una muestra de 40 g bronce, constituida por un 90% Cu (0.385 J/g°C) y 10% Sn (0.250 J/g°C), fue calentada a 85 °C e introducida en un calorímetro con 150 g de H_2O a 10 °C y, luego de alcanzado el equilibrio, el trozo de bronce se sacó en inmediatamente fue introducido en un calorímetro con 100 g de agua a 95 °C. ¿Cuál es la temperatura final del trozo de bronce? Considere: C_{cal}: 5.35 J/°C; C_{H2O}: 4.184 J/g °C

Desarrollo:

1er experimento:

40 g 90% Cu y 10% Sn => 36 g Cu y 4 g Sn **(1 punto)**

$Q_{aleación} + Q_{agua} + Q_{calorímetro} = 0$

$m_{Cu} \cdot C_{Cu} \cdot (T_f - T_i) + m_{Sn} \cdot C_{Sn} \cdot (T_f - T_i) + m_{H2O} \cdot C_{H2O} \cdot (T_f - T_i) + C_{cal} \cdot (T_f - T_i) = 0$

$36\ g \cdot 0.385\ J/g°C \cdot (T_f - 85°C) + 4\ g \cdot 0.250\ J/g°C \cdot (T_f - 85°C) + 150 \cdot 4.184\ J/g\ °C (T_f - 10°C) + 5.35 J/°C \cdot (T_f - 10°C) = 0$

$13.86T_f - 1178.1 + T_f - 85 + 627.6T_f - 6276 + 5.35T_f - 53.5 = 0$

$647.81\ T_f = 7588.6$

$T_f = 11.71\ °C$ **(7 puntos)**

2° experimento:

$Q_{aleación} + Q_{agua} + Q_{calorímetro} = 0$

$m_{Cu} \cdot C_{Cu} \cdot (T_f - T_i) + m_{Sn} \cdot C_{Sn} \cdot (T_f - T_i) + m_{H2O} \cdot C_{H2O} \cdot (T_f - T_i) + C_{cal} \cdot (T_f - T_i) = 0$

$36\ g \cdot 0.385\ J/g°C \cdot (T_f - 11.71°C) + 4\ g \cdot 0.250\ J/g°C \cdot (T_f - 11.71°C) + 150 \cdot 4.184\ J/g\ °C (T_f - 95°C) + 5.35 J/°C \cdot (T_f - 95°C) = 0$

$13.86T_f - 162.30 + T_f - 11.71 + 627.6T_f - 59622 + 5.35T_f - 508.25 = 0$

$647.81\ T_f = 60155.82$

$T_f = 92.86°C$ **(7 puntos)**

Pregunta 3 (25 puntos)

El cromo tiene una estructura BCC cuyo radio atómico es 0,125 nm, determine:

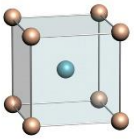
a) Parámetro de Celda
b) Densidad Teórica en g/cm^3.
c) Densidad planar del plano (011)

$\rho = \frac{(átomos/celda)(masa\ atómica\ )}{Volumen\ N_{Av}}$ $\rho_p = \frac{átomos\ dentro\ del\ plano}{Área\ plano}$ $N_{Av} = 6.02 * 10^{23}$

Desarrollo:

Radio: 0.125 nm

Falta el valor del radio. Usando la siguiente ecuación se logra obtener el parámetro de celda a partir del radio atómico.



$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} = \frac{4\ (0.125\ nm)}{\sqrt{3}}$]= 0.289 nm = **2.89 *10^{-8} cm** **(6 puntos)**

Sudando la ecuación de densidad teórica:

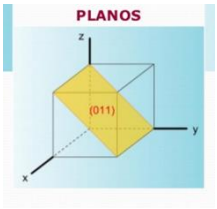
Densidadteorica = número de átomos * masa atómica / volumen de la celda * Nav

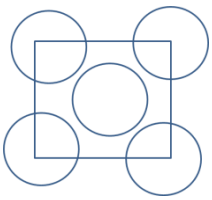
$densidad = \frac{2*52\ g/mol}{(2.89*10^{-8})^3*6.022*10^{23}} =$ **$7.16 g/cm$** **(8 puntos)**

Densidad planar

En el plano (011) hay **2 átomos**. **(5 puntos)**

Densidad= átomos / área del plano





Área = parámetro de celda x diagonal del lado (a $\sqrt{2}$)

Área = 2.89 *10^{-8} cm x 2.89 *10^{-8} cm$\sqrt{2}$ = 1,18x10^{-15} cm^2

Densidad = 2 /1,18x10^{-15} cm^2 = **1,69 x10^{15} átomos /cm^2** **(6 puntos)**

Pregunta 4 (20 puntos)

Encuentre los valores de $\Delta H°$, $\Delta S°$ y $\Delta G°$ (25°C y 1 atm) para el proceso que describe la síntesis de etano (C_2H_6) a partir de CO y H_2 y justifique, mediante los cálculos, si el proceso es espontaneo o no.

$2C_2H_6(g) + 7O_2(g) \text{ ----------> } 4CO_2(g) + 6H_2O(g)$

$H_2(g) + 1/2\ O_2(g) \text{ ----------> } H_2O(g)$

$CO(g) + 1/2\ O_2(g) \text{ ----------> } CO_2(g)$

Sustancia	$\Delta H°_f$ (kJ/mol)	$\Delta S°_f$ (J/K mol)
$C_2H_6(g)$	- 84.7	229.5
$CO_2(g)$	-393.5	213.6
$H_2O(g)$	-241.8	188.7
$H_2(g)$	---	131
$O_2(g)$	---	205
CO(g)	-110.5	197.9

Desarrollo:

Balance de la ecuación y cálculo de ΔH

Método 1:

$2C_2H_6(g) + 7O_2(g) \text{ ----------> } 4CO_2(g) + 6H_2O(g)$
$\Delta H_1° = [(4 \bullet -393.5)+(6 \bullet -241.8)]-[(2 \bullet -84.7)+(7 \bullet 0)]$
$\Delta H_1° = [-3024.8]-[-169.4]$
$\Delta H_1° = -2855.4$ kJ **(2 puntos)**

$H_2(g) + 1/2\ O_2(g) \text{ ----------> } H_2O(g)$
$\Delta H_2° = [-241.8]-[(1 \bullet 0)+(1/2 \bullet 0)]$
$\Delta H_2° = [-1450.8]-[0]$
$\Delta H_2° = -241.8$kJ **(2 puntos)**

$CO(g) + 1/2\ O_2(g) \text{ ----------> } CO_2(g)$
$\Delta H_3° = [1 \bullet -393.5]-[(1 \bullet -110.5)+(1/2 \bullet 0)]$
$\Delta H_3° = [-393.5]-[-110.5]$
$\Delta H_3° = -283$kJ **(2 puntos)**

$2C_2H_6(g) + 7O_2(g)$ ----------> $4CO_2(g) + 6H_2O(g)$ $\Delta H_1°$= -2855.4 kJ inviertiendo
$H_2(g) + 1/2\ O_2(g)$ ----------> $H_2O(g)$ $\Delta H_2°$= -241.8kJ *6
$CO(g) + 1/2\ O_2(g)$ ----------> $CO_2(g)$ $\Delta H_3°$= -283kJ *4

(3 puntos)

$4CO_2(g) + 6H_2O(g)$ ----------> $2C_2H_6(g) + 7O_2(g)$ $\Delta H_1°$= +2855.4 kJ
$6H_2(g) + 3O_2(g)$ ----------> $6H_2O(g)$ $\Delta H_2°$= -1450.8 kJ
$4CO(g) + 2\ O_2(g)$ ----------> $4CO_2(g)$ $\Delta H_3°$= -1132 kJ

$6H_2 + 4CO$ ----------> $2C_2H_6 + 2O_2$ $\Delta H°$= 272.2 kJ
(3 puntos)
$3H_2 + 2CO$ ----------> $C_2H_6 + O_2$ $\Delta H°$= 136.1 kJ

} Ambas son correctas

Método 2:
Consiste en encontrar la ecuación y luego de eso calcular ΔH para la reacción

i) $2C_2H_6(g) + 7O_2(g)$ ----------> $4CO_2(g) + 6H_2O(g)$ Invirtiendo **(2 puntos)**
ii) $H_2(g) + 1/2\ O_2(g)$ ----------> $H_2O(g)$ Multiplicando * 6 **(2 puntos)**
iii) $CO(g) + 1/2\ O_2(g)$ ----------> $CO_2(g)$ Multiplicando * 4 **(2 puntos)**

$4CO_2(g) + 6H_2O(g)$ ----------> $2C_2H_6(g) + 7O_2(g)$
$6H_2(g) + 3O_2(g)$ ----------> $6H_2O(g)$
$4CO(g) + 2\ O_2(g)$ ----------> $4CO_2(g)$

$6H_2 + 4CO$ ----------> $2C_2H_6 + 2O_2$
(2 puntos)
$3H_2 + 2CO$ ----------> $C_2H_6 + O_2$

} Ambas son correctas

ΔH°= [(1•-84.7)+ (1/2•0)]-[(3•0)+(2•-110.5)]
ΔH°= 136.3 kJ **(4 puntos)**

Calculo de la entropía **$3H_2 + 2CO$ ----------> $C_2H_6 + O_2$**

ΔS°= [(1•229.5)+ (1/2•205)]-[(3•131)+(2•197.9)]
ΔS°= -456.8 J/K ≅ −0.457 kJ/K **(3 puntos)**

Cálculo de ΔG $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$

ΔG = 136 kJ – (298K * -0.457 kJ/K) ≅ 272 kJ **(3 puntos)**

Por lo tanto, el proceso no es espontaneo **(2 puntos)**