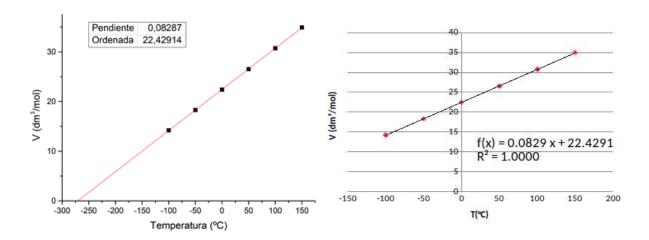
Unidad 1: Introducción a la Química y a la Experimentación

Problema 1

a) A continuación se muestran los gráficos generados en dos programas distintos: Origin (izquierda) y Excel (derecha).



b) Los puntos siguen una tendencia lineal y se puede trazar una recta que aproxime lo mejor posible todos los puntos. En el campus encontrará un apunte de Excel con un instructivo para trazar líneas de tendencia. La variable independiente X es la temperatura en °C y la variable dependiente Y es el volumen en dm³.

Suponiendo válida la Ley de Gases Ideales en las condiciones de estudio (1 mol de H₂, 1 bar, en el intervalo de temperaturas y volúmenes analizado), la pendiente de la recta corresponde a la constante de gases ideales, R.

$$P \times V = n \times R \times T \rightarrow P \times \overline{V} / T = R$$

A partir de la ecuación de la recta se tiene:

$$\overline{V}$$
 (dm³) = 0,0829 dm³/°C × T (°C) + 22,429 dm³

Las unidades de la pendiente deben ser tales que se mantenga la igualdad en unidades en la ecuación. En este caso, como el volumen está en dm³ y la temperatura en °C, la pendiente tiene unidades de dm³/°C.

<u>Pregunta para pensar</u>: ¿Por qué se presenta el gráfico con la temperatura expresada en °C, cuando en la ecuación de Gases Ideales se expresa en K? ¿Se obtienen resultados distintos para la constante de los gases? Es válido probar y ver qué pasa.

c) Si reemplazamos $V = 0 \text{ dm}^3 \text{ y despejamos T, tenemos:}$

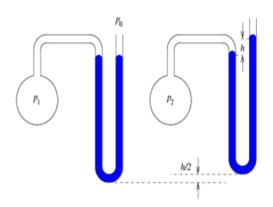
 $0 \text{ dm}^3 - 22,429 \text{ dm}^3 = 0,0829 \text{ dm}^3/^{\circ}\text{C} \times \text{T } (^{\circ}\text{C})$

Luego, T =
$$-22.429 \text{ dm}^3 / (0,0829 \text{ dm}^3 / ^{\circ}\text{C}) = -270,55 ^{\circ}\text{C} \simeq -271 ^{\circ}\text{C}$$
.

¿Es lógico el valor obtenido? ¿Es correcto utilizar la ecuación de estado del gas ideal en estas condiciones? ¿Puede reducirse a cero el volumen de un gas por compresión?

La Ley de Gases Ideales no es válida a temperaturas tan bajas. ¿Cuánto representa la temperatura obtenida en K? Por otro lado, no es posible reducir el volumen de un gas a 0 dm³ por compresión, ya que llegado un cierto punto, las moléculas se encontrarán lo suficientemente cerca como para pasar a una fase condensada.

d) En un termómetro de gas, la temperatura se determina por una variación de presión o de volumen del gas. Son muy precisos y tienen un amplio rango de aplicabilidad que va desde -27 °C hasta 1477 °C. Comúnmente se utilizan como elementos de referencia para estandarizar otros termómetros. Trabajando a volumen constante, se expone una ampolla con el gas a la temperatura



que se desea medir y por medio de un manómetro se mide el cambio en la presión.

Problema 2

El recipiente se evacúa a V y T constantes. ¿Por qué cambia la presión? Lo que sucede es que se extraen moléculas de gas, con la consecuente pérdida de presión dentro del recipiente.

a) Suponiendo válida la Ley de Gases Ideales para los estados inicial y final tenemos:

$$P_1 = \frac{n_1.R.T}{V} P_2 = \frac{n_2.R.T}{V}$$

<u>Importante</u>: al utilizar la Ecuación de Gases Ideales es necesario que la temperatura esté expresada en K y la presión en atm, si se toma $R = 0.082 \text{ L} \times \text{atm} \times \text{K}^{-1} \times \text{mol}^{-1}$.

Datos: V = 1 L; T =
$$20 \,^{\circ}$$
C; P1 = $740 \,^{\circ}$ Torr; P2 = $1 \times 10^{-6} \,^{\circ}$ Torr. $760 \,^{\circ}$ Torr = 1 atm.

Nos piden la masa de aire extraída, es decir, la diferencia entre la masa de aire inicial y final en el recipiente. Para ello, necesitamos saber primero la cantidad de moles inicial y final en el recipiente usando la Ley de Gases Ideales.

Número de moles inicial:

$$n1 = P1 \times V / (RT) = 0.974 \text{ atm} \times 1 \text{ L} / (0.082 \text{ L} \times \text{atm} \times \text{K}^{-1} \times \text{mol}^{-1} \times 293 \text{ K}) = 0.0405 \text{ moles}.$$

Número de moles final:

 $n2 = P2 \times V / (RT) = 1,32 \times 10^{-9} \text{ atm} \times 1 \text{ L} / (0,082 \text{ L} \times \text{atm} \times \text{K}^{-1} \times \text{mol}^{-1} \times 293 \text{ K}) = 5,5 \times 10^{-11} \text{ moles}.$

Comparado con la cantidad inicial este número es "despreciable". Esto quiere decir que restarlo o no restarlo no tiene ninguna consecuencia en el resultado final (intente hacer la cuenta de ambas maneras).

Otra manera más elegante de plantear lo mismo es:

$$n_1 - n_2 = \frac{(P_1 - P_2).V}{R.T} = \frac{(740 - 1.10^{-6})Torr.1L}{0.082 \frac{atm.L}{K.mol}.293,15K.760 \frac{Torr}{atm}} = 0.0405mol$$

Se tiene entonces que se extrajeron 0,0405 moles de aire. A partir de la composición del aire, se puede obtener la cantidad de moles correspondientes a cada gas (ya que bajo el modelo de gases ideales la composición volumétrica es equivalente a la composición expresada en moles):

 $N_2:78\% \to 0,0315 mol N_2$

 $O_2: 21\% \rightarrow 0,0085 mol O_2$

 $Ar: 1\% \rightarrow 0.0005 mol Ar$

Y a partir de las correspondientes masas molares, se puede convertir esos valores de moles a gramo.

Para el nitrógeno: $0.0315 \text{ moles} \times 28 \text{ g mol}^{-1} = 0.89 \text{ g}.$

Para el oxígeno: $0.0085 \text{ moles} \times 32 \text{ g mol}^{-1} = 0.27 \text{ g}.$

Para el argón: $4,05 \times 10^{-4}$ moles $\times 40$ g \times mol⁻¹ = 0,016 g.

Masa de aire extraído = 0.89 g + 0.27 g + 0.016 g = 1.17 g.

b) Del ítem a tenemos el número de moles de aire que quedan en el recipiente es $n2 = 5.5 \times 10^{-11}$ moles. Utilizando el número de Avogadro:

 $6,02 \times 10^{23}$ moléculas/mol $\times 5,5 \times 10^{-11}$ moles = $3,3 \times 10^{13}$ moléculas (Este cálculo también puede pensarse como una regla de tres simple).

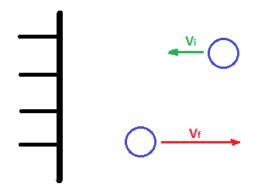
La misma idea planteada más prolijamente, queda:

$$N = n_2. N_A = \frac{P_2.V}{R.T}. N_A = \frac{1.\,10^{-6} Torr.1L.6,02.\,10^{23} mol^{-1}}{760\,^Torr/_{atm}.0,082\,^L.atm/_{K.mol}.293,15K}$$

 $N = 3.30.10^{13}$

En el recipiente quedan 3,3 10¹³ moléculas.

<u>Sugerencia</u>: para trabajar con este Problema, experimentar con el simulador de gases disponible en: https://phet.colorado.edu/en/simulation/gas-properties



Las partículas que forman las paredes del recipiente al estar a una dada temperatura, tienen una energía cinética vibracional media. Un aumento de la temperatura de las paredes, implica un aumento en su energía cinética. Cuando las partículas de gas colisionan con las paredes, parte de la energía cinética se transfiere desde la pared a las partículas

de gas, haciendo que la energía cinética de estas aumente. Y en consecuencia, produciendo el aumento en la temperatura del gas.

Problema 4

Antes de hacer cálculos, ¿Qué resultado esperamos? Tenemos N₂ en un recipiente en ciertas condiciones de presión y temperatura, por lo que sus partículas se moverán en las tres dimensiones caracterizadas por su velocidad cuadrática media. El O₂, en esas mismas condiciones, ¿esperamos que tenga una velocidad cuadrática media menor o mayor?

El movimiento de cualquier partícula, incluyendo las moléculas de un gas, depende entre otros factores de su masa. La masa molar del O₂ es mayor a la del N₂; ¿cuál sustancia tendrá una velocidad cuadrática media mayor a igualdad de presión y temperatura? La respuesta es: el N₂, porque sus moléculas son más "livianas" (recordar que masa y peso en rigor no son lo mismo, pero para los análisis cualitativos podemos tomarnos ciertas licencias en aras de la claridad, siempre que tengamos bien claro lo que estamos diciendo).

Entonces, ¿cómo esperamos que sea la temperatura a la cual las moléculas de O_2 tienen la misma velocidad cuadrática media que el N_2 a 20 °C y 1 bar? Mayor, pues al ser las moléculas de O_2 "más pesadas", requieren de mayor temperatura para moverse con la misma velocidad cuadrática media que moléculas de N_2 "más livianas".

Este análisis cualitativo puede pensarse también en términos "semi-cuantitativos", esto eso, analizando las expresiones matemáticas que describen la Teoría Cinética de los Gases Ideales,

y pensando sin resolver las cuentas cómo afecta al resultado final (en este caso, una temperatura) la modificación en el valor de las otras variables (prueben hacerlo!).

El último nivel de análisis es efectivamente realizar los cálculos. Empecemos recordando las ecuaciones principales de esta teoría. La energía cinética traslacional de un mol de gas ideal es:

$$E_c = \frac{N_A.m}{2} \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} RT$$

La primera igualdad hace referencia a la definición "física" de energía cinética $(1/2 \times m \times v^2)$, mientras que la segunda es un resultado de la Teoría Cinética. $< v^2 >$ representa la velocidad cuadrática media de las moléculas de gas de masa "m" a la temperatura T, con energía cinética molar E_c .

Podemos despejar la velocidad cuadrática media en función de las demás variables:

$$\langle v^2 \rangle \frac{3RT}{N_A.m} = \frac{3RT}{M_R}$$

Planteando el cociente entre ambas expresiones para el N_2 y el O_2 , y recordando que buscamos la temperatura a la cual ambas se igualan (es decir que el cociente es 1):

$$\frac{\langle v^2 \rangle_{N_2}}{\langle v^2 \rangle_{O_2}} = \frac{T_{N_2}.M_{RO_2}}{T_{O_2}.M_{RN_2}} = 1$$

$$T_{O_2} = \frac{T_{N_2}.M_{R_{O_2}}}{M_{R_{N_2}}} = 293,15K.\frac{32 g/_{mol}}{28 g/_{mol}} = 335,03K = 61,88°C$$

La temperatura a la cual el O₂ tiene la misma velocidad cuadrática media que el N₂ a 20°C y 1 bar, es 62 °C. Como esperábamos, es una temperatura mayor.

Problema 5

Para resolver el problema vamos a necesitar considerar las siguientes ecuaciones:

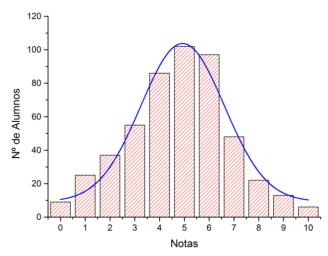
$$E_c = \frac{N_A.m}{2} \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2}RT$$
 $p \times V = n \times R \times T$

Para comenzar, analicemos el comportamiento de estas variables. La energía cinética traslacional de un gas ideal depende únicamente de la temperatura. La velocidad media de las partículas depende de la temperatura y de la masa molar del gas. La presión, la temperatura, el volumen y el número de moles están interrelacionados entre sí. Por ejemplo, en un proceso a temperatura constante el producto $p \times V$ debe ser constante; si disminuye el volumen, la presión debe aumentar consecuentemente.

A partir de este tipo de análisis y teniendo en cuenta las condiciones iniciales del problema, podemos analizar cómo varían las distintas propiedades del sistema frente a las distintos situaciones.

Exp	1	2	3	4
Tf	27 °C	327 °C	27 °C	27 °C
Vf	1 dm ³	10 dm ³	10 dm ³	10 dm ³
n	1 mol de N ₂	1 mol de N ₂	2 mol de N ₂	1 mol de N ₂ , 1mol de H ₂
$\langle \varepsilon_c \rangle$	No varía	Aumenta	No varía	No varía
$\langle v \rangle$	No varía	Aumenta	No varía	Aumenta
p_{N_2}	Aumenta	Aumenta	Aumenta	No varía
P _T	Aumenta	Aumenta	Aumenta	Aumenta

- a) Compresión a temperatura constante: como T no cambia, Ec y la velocidad media permanecen constantes. Como disminuye el volumen a temperatura constante, aumenta la presión.
- **b**) Aumento de la temperatura a volumen constante: como aumenta la temperatura, Ec y la velocidad media aumentan. A V constante, p/T es constante; por lo tanto, dado que aumentó la temperatura, debe aumentar también la presión.
- c) Agregado del mismo gas a temperatura y volumen constantes: como la temperatura no cambia, Ec y la velocidad media de las partículas no cambian. Sin embargo, al haber el doble de partículas de gas en el mismo volumen de antes, la presión aumenta.
- d) Agregado de otro gas, a temperatura y volumen constantes: nuevamente la temperatura no cambia, por lo que Ec tampoco. Sin embargo, al agregar un mol de un gas de partículas de menor masa, que tiene por lo tanto una velocidad media mayor, la velocidad media total de las moléculas en el interior del recipiente aumenta. Una forma de pensar esta idea es que la mayor velocidad y la menor masa del H₂ respecto del N₂ se compensan (ver ecuaciones) de forma tal que la Ec es la misma. Por otro lado, la presión en el interior del recipiente aumenta ya que hay más moléculas de gas; sin embargo, la presión parcial del N₂ es la misma ya que, al tratarse de gases que pueden considerarse ideales en las condiciones del experimento, su presión no se ve afectada por la presencia de otro gas en el interior del recipiente.



En el gráfico se observa que la nota más probable (moda) es 5 (este valor corresponde al punto "más alto" de la curva). Además, simplemente observando los datos en la tabla podíamos determinar que la nota más probable es 5 porque era la que más gente había obtenido. Aproximando el histograma por una función continua (en azul) se observa que

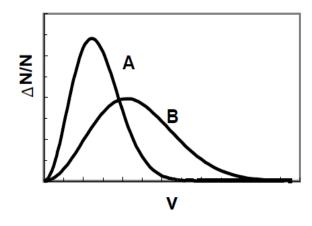
las notas presentan una distribución denominada "normal" o "Gaussiana" (esto se evidencia por la forma de campana de la curva).

Para calcular la nota media es necesario realizar el promedio pesado de las mismas; donde N corresponde a la nota y A al número de alumnos:

$$\overline{N} = \frac{\sum_{i=0}^{10} N_i A_i}{\sum_{i=0}^{10} A_i} = \frac{0 \times 9 + 1 \times 25 + \dots + 9 \times 13 + 10 \times 6}{500} = 4,78$$

Es muy importante notar que la nota más probable y la nota promedio, aunque parecidas, no son iguales. El promedio es un parámetro estadístico que debe ser calculado y, en general, no puede ser determinado a través de la simple inspección de los datos. Más aún: en este caso el promedio ni siquiera es una nota "real" que podrían haber obtenido los/las estudiantes. El hecho de que la nota media sea menor a 5 se debe a que el número de alumnos que obtuvieron notas más bajas es mayor al que obtuvieron notas más altas a 5.

Problema 7



Este gráfico puede pensarse como un histograma que fue suavizado mediante una línea continua, al igual que en el ejercicio anterior. El eje Y representa fracción del total de las moléculas, y el eje X, velocidad.

- a) La energía cinética media en A es mayor que en B: en el gráfico se observa que la velocidad media en la situación B es mayor que en la situación A, y por lo tanto la velocidad cuadrática media en B será mayor que en la situación A. Al tratarse de la misma muestra gaseosa, la masa de las partículas en ambas condiciones es la misma. Dado que la energía cinética es proporcional a la velocidad cuadrática media de las partículas, las moléculas en la condición B tienen mayor energía cinética que en A.
- **b**) La temperatura en B es mayor que en A: la energía cinética y la temperatura se relacionan linealmente bajo la teoría cinética de los gases. Dado que ya establecimos que en B las moléculas tienen mayor energía cinética que en A, se desprende que la temperatura en B debe ser mayor que en A. Esta es la opción correcta.
- c) La presión en A es mayor que en B (considerar volumen constante): dado que ambos sistemas presentan igual número de moles y el mismo volumen, el cociente p/T debe ser el mismo, por la Ley de Gases Ideales. Como la temperatura en B es mayor que en A, la presión en B deberá ser mayor que en A.

La temperatura es una propiedad macroscópica (es decir, de un número relativamente grande de moléculas), y da una idea de la energía cinética total del sistema (recordar por ejemplo que en la teoría cinética de los gases, lo que guarda relación directa con la temperatura es la energía cinética de un mol de partículas). Esta resulta de la distribución de velocidades y energías que tienen las moléculas individuales; en consecuencia, no existe la noción de "temperatura de una molécula". En cambio, la velocidad y la energía cinética sí son propiedades moleculares.

Problema 9

Las reacciones químicas son procesos en los cuáles hay un reordenamiento de enlaces covalentes y/o electrones. A fin de identificar cuáles de las siguientes son reacciones químicas, buscaremos los procesos en los cuales cambian los enlaces químicos del sistema. Los procesos en los que no hay cambios en los enlaces covalentes ni redistribución de electrones los llamamos procesos no reactivos. Algunos de ellos son los cambios de fase, la formación de soluciones, etc. En algunas ocasiones, estos límites pueden ser difusos y

discutibles. ¿Puede identificar algún caso que admita otra respuesta además de la que proporcionamos?

Uno de los principios más importantes de la química es la ley de conservación de masa. Esta establece que durante un proceso químico la materia no puede generarse ni destruirse, sólo transformarse. Debemos por lo tanto balancear las ecuaciones químicas a fin de que en las condiciones iniciales y finales el número de átomos de cada elemento y el número de electrones sea el mismo.

- i) 4 Fe (s) + 3 O₂ (g) \rightarrow 2 Fe₂O₃ (s) Reacción Química
- ii) $I_2(s) + CCl_4(l) \rightarrow I_2(sn)$ Disolución
- iii) NaCl (s) + H₂O (l) \rightarrow Na⁺ (ac) + Cl⁻ (ac) Disolución
- iv) HF (ac) + H₂O (l) \rightarrow H₃O⁺ (ac) + F⁻ (ac) Reacción Química

v)
$$Cu^+$$
 (ac) + Fe^{3+} (ac) $\rightarrow Cu^{2+}$ (ac) + Fe^{2+} (ac) Reacción Química

- vi) $H_2O(s) \rightarrow H_2O(l)$ Cambio de Fase
- vii) 2 HNO (ac) → N₂O (g) + H₂O (l) Reacción Química
- viii) CH₃CH₂OH (1) → CH₃CH₂OH (g) Cambio de Fase
- ix) CH₃CH₂OH (l) + 3 O₂ (g) \rightarrow 2 CO₂ (g) + 3 H₂O (l) Reacción Química
- x) hemoglobina-Fe(II) (ac) + O₂ (g) → hemoglobina-Fe(II)-O₂ (ac) Reacción Química

Problema 10

$$C_2H_5OH(1) + 3 O_2(g) \rightarrow 2 CO_2(g) + 3 H_2O(1)$$

En primer lugar, necesitamos conocer el número de moles de etanol que reaccionan. Para calcularlo, utilizamos el dato de la densidad y también la masa molar del etanol (46 g/mol):

$$n_{etanol} = \frac{v \cdot \delta}{Mr} = \frac{287ml \cdot 0.791g/ml}{46 g/mol} = 4,935mol$$

Si te resulta complicado llegar a la expresión anterior, también se puede pensar usando regla de tres simple:

-Usando la densidad:

$$1 \text{ mL} \rightarrow 0.791 \text{ g}$$

287 mL
$$\rightarrow$$
 x = 287 mL \times 0,791 g / 1 mL = 227,02 g

-Usando la masa molar:

$$46 \text{ g} \rightarrow 1 \text{ mol}$$

$$227,02 \text{ g} \rightarrow \text{x} = 227,02 \text{ g} \times 1 \text{ mol} / 46 \text{ g} = 4,935 \text{ mol}$$

Continuando con el ejercicio, a partir de la relación estequiométrica dada por la ecuación química sabemos que se va a requerir 3 veces más O₂ que etanol:

$$n_{O_2} = 3n_{etanol} = 14,805mol$$

A partir de este resultado podemos calcular qué volumen ocupa esa cantidad de oxígeno, ya que conocemos la presión y la temperatura:

$$V_{O_2} = \frac{n_{O_2} \cdot R \cdot T}{p} = 362l$$

El oxígeno se encuentra en el aire formando parte de una mezcla gaseosa. Considerando que la composición del aire es aproximadamente 21% (en moles o en volumen) de O₂, tenemos:

$$V_{aire} = \frac{V_{o_2}}{0.21} = \frac{362l}{0.21} = 1723l$$

Problema 11

i)
$$P_4(s) + 5 O_2(g) \rightarrow P_4 O_{10}(s)$$

ii) Primero debemos conocer las masas molares de las distintas especies que participan en la reacción: $M(P_4) = 124$ g/mol; $M(O_2) = 32$ g/mol; $M(P_4O_{10}) = 284$ g/mol. En el enunciado se aclara que el rendimiento de la reacción es 100 %; esto quiere decir que, si en base a los cálculos estequiométricos a partir de las cantidades de reactivos disponibles, se espera por ejemplo obtener un mol de productos, en la práctica se observará la formación de un mol de productos (y no menos). En nuestro caso, un mol de P_4 formará un mol de P_4O_{10} . Entonces:

$$124 \text{ g P}_4 \rightarrow 284 \text{ g P}_4\text{O}_{10}$$

$$1,72 \text{ g P}_4 \rightarrow X = 1,72 \text{ g} \times 284 \text{ g} / 124 \text{ g} = 3,94 \text{ g P}_4\text{O}_{10}$$

La cantidad de moles es:

$$n = \frac{m}{M_R} = \frac{3,94g}{284 g/mol} = 1,39.10^{-2} mol$$

- iii) Existen varios motivos por los que el rendimiento de una reacción no alcanza el 100 %:
- Los reactivos contienen impurezas no consideradas en los cálculos estequiométricos: en este caso nunca se obtendrá la cantidad de producto predicha por los cálculos, ya que estos se basan en una cantidad de reactivo mayor a la disponible efectivamente, por lo que el rendimiento experimental nunca alcanzará el 100 %.
- Pérdida de producto en los procesos de separación y/o purificación (filtración, recristalización, etc.)

- Reacciones secundarias no consideradas en el análisis previo: en este caso podría ocurrir por ejemplo la combustión incompleta del fósforo: P_4 (s) + 3 O_2 (g) \rightarrow P_4O_6 , por lo que parte del reactivo se consumiría para formar este subproducto, y de esta manera la cantidad de P_4O_{10} formada nunca podría alcanzar la calculada por estequiometría.
- Que la reacción no se realice en las condiciones experimentales más apropiadas, afectando por ejemplo la constante de equilibrio (Unidad 7) o la velocidad (Unidad 4) de la reacción, de manera tal de obtenerse reacciones incompletas, o demasiado lentas, respectivamente.

a) La primera pregunta que surge es si reaccionará el total de la masa de ambos reactivos. Teniendo en cuenta la estequiometría de la reacción y las masas molares de las especies involucradas:

$$SiO_2(s) + 3C(s) \rightarrow SiC(s) + 2CO(g)$$

se espera que 60 g (1 mol) de SiO₂ reaccionen con 36 g (3 moles) de C. En el experimento se mezclan 3,00 g (0,05 mol) de SiO₂ con 4,50 g (0,375 mol) de C. El cociente en moles (0,375 mol C / 0,05 SiO₂ = 7,5) es bastante mayor al calculado por estequiometría (3), por lo que podemos concluir que los reactivos no están en cantidades estequiométricas y por lo tanto se espera que al concluir la reacción haya exceso del que se encuentra en mayor cantidad. En este caso, el reactivo limitante es el SiO₂, y por lo tanto los cálculos estequiométricos deben estar basados en la cantidad de moles de esta especie. Por lo tanto, la cantidad esperada de producto (considerando un rendimiento del 100 %, es decir, que el reactivo limitante se consume por completo) es:

$$60 \text{ g SiO}_2 \rightarrow 40 \text{ g SiC}$$

$$3g SiO_2 \rightarrow X = 3 g SiO_2 \times 40 g SiC / 60 g SiO_2 = 2 g SiC$$

b) Dado que el reactivo limitante es el SiO₂, podemos calcular cuánto C quedará en exceso al concluir la reacción como:

$$60 \text{ g SiO}_2 \rightarrow 36 \text{ g C}$$

$$3 \text{ g SiO}_2 \rightarrow X = 3 \text{ g SiO}_2 \times 36 \text{ g C} / 60 \text{ g SiO}_2 = 1.8 \text{ g C}$$

El C que no reacciona es la diferencia entre la cantidad que se agregó y la que reaccionó con los 3 g de SiO₂: 4.5 g - 1.8 g = 2.7 g.

c) Finalmente debemos calcular el rendimiento real de la reacción. La cantidad de producto que calculamos en (a) corresponde a un rendimiento del 100%, pero en la práctica se obtuvo

1,32 g. El rendimiento será el porcentaje que representa la masa de producto real respecto a la masa de producto teórica:

$$2 \text{ g SiC} \rightarrow 100 \%$$

$$1,32 \text{ g SiC} \rightarrow X = 1,32 \text{ g SiC} \times 100 \% / 2 \text{ g SiC} = 66 \%$$

Observación: si bien en estequiometría es recomendable efectuar los cálculos utilizando moles en lugar de masa, en este caso es indistinto; ¿por qué?

Problema 13

i) 2 H (g)
$$\rightarrow$$
 H₂ (g)

$$\Delta E = -435.78 \text{ kJ mol}^{-1}$$

<u>Fuente</u>: Lide, David R., CRC Handbook of Chemistry and Physics, 89th Edition, CRC Press/Taylor and Francis, Boca Raton, FL, USA, 2009.

El dato de tablas corresponde a la energía asociada al proceso descripto en la ecuación química. Sin embargo, por convención la Energía de Unión (o Energía de enlace, E_{H-H}) tiene signo positivo, pues corresponde al proceso de ruptura del enlace químico, que siempre es endotérmico. Por lo tanto la respuesta es: $E_{H-H} = -\Delta E = 435,78 \text{ kJ mol}^{-1}$.

ii) Para calcular el valor de RT se debe utilizar la temperatura en Kelvin, y es conveniente tomar R = 8,314 J K⁻¹ mol⁻¹, ya que nos acostumbraremos al uso de J y kJ como unidad de energía (si bien L atm es también una unidad de energía, su uso no nos resulta tan familiar).

A 25 °C
$$R.T = 8,314^{J}/_{K.mol} \times 298K = 2,48^{kJ}/_{mol}$$

A 6000 °C
$$R.T = 8.314^{J}/_{K.mol} \times 6273K = 52.15^{kJ}/_{mol}$$

A
$$15.10^6$$
 °C $R.T = 8.314^{J}/_{K.mol} \times 15.10^6 K = 1.25.10^5 kJ/_{mol}$

A 25 °C, RT << E_{H-H} \rightarrow la molécula de H₂ es estable frente a la disociación en átomos.

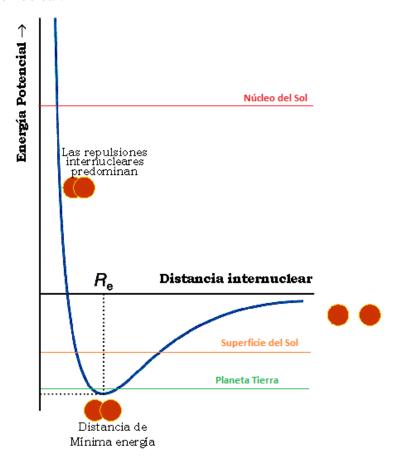
A 6000 °C, RT < E_{H-H} \rightarrow la molécula de H₂ es estable frente a la disociación en átomos.

A 15000000 °C, RT >> $E_{\text{H-H}} \rightarrow$ la molécula de H_2 es inestable frente a la disociación en átomos.

La magnitud "RT" es sumamente importante en física y en química. Puede interpretarse como un indicador de la energía "térmica" de un sistema, esto es, la energía asociada al movimiento de sus partículas (notar que, como era de esperarse, la energía térmica es directamente proporcional a la temperatura). La molécula de H_2 es estable en el planeta ya que la energía térmica disponible no es suficiente para que las moléculas choquen con suficiente fuerza para vencer la energía de enlace y por lo tanto disociar la molécula en sus átomos. Lo mismo

ocurre en la superficie del sol, mientras que en su núcleo la energía térmica disponible es tan elevada que no sólo no existen moléculas de hidrógeno en esas condiciones, sino que también es suficiente para vencer la atracción electrostática entre núcleos y electrones, y por lo tanto la materia se encuentra en forma de partículas subatómicas.

Una manera de racionalizar este análisis es considerar la curva que representa la variación de energía potencial de un sistema formado por dos átomos de hidrógeno en función de la distancia internuclear:



¿Cómo podemos emplear este gráfico para el análisis? A 0 K, la energía térmica disponible es 0 kJ. En esas condiciones cesa todo el movimiento atómico y molecular, y por lo tanto el sistema se encuentra "congelado" en su mínimo de energía (indicado por la línea horizontal punteada en el gráfico; en ese punto pondremos el "cero" de energía térmica), con los dos átomos a distancia Re (línea punteada vertical). A 25 °C, RT = 2,48 kJ mol⁻¹ (línea horizontal verde); esta energía térmica se traduce en vibraciones de las moléculas, que ahora podrán tener sus átomos a distancias distintas (pero no muy lejanas) de Re (más cortas y más largas); las moléculas siguen siendo estables. Algo similar ocurre en la superficie del sol: si bien los

movimientos vibracionales son más violentos, la energía térmica sigue siendo menor en módulo a la energía de enlace, por lo que las moléculas continúan siendo estables.

¿Qué ocurre 15000000 °C? RT = 1,25 × 10⁵ kJ mol⁻¹ (línea roja). La energía térmica supera en varios órdenes de magnitud a la energía potencial de interacción entre los átomos de hidrógeno; las vibraciones en esas condiciones tienen amplitud infinita (¿cómo se ve esto en el gráfico?) o, lo que es análogo, la molécula de H₂ se ha disociado y ya no existe como tal. Podemos imaginar que si vamos calentando hasta esa temperatura las moléculas de H₂, la energía vibracional irá aumentando hasta que la enorme mayoría de estas se hayan disociado. El mínimo (punto 1) representa la distancia de equilibrio en ausencia de energía cinética (es decir, a T = 0 K). A distancias intermoleculares grandes la fuerza con que los átomos se atraen es despreciable frente a la energía térmica, y ya no se puede hablar de "molécula".

<u>Sugerencia</u>: Les dejamos aquí un link de un simulador de energía potencial para moléculas diatómicas que pueden encontrar muy útil y divertido:

https://phet.colorado.edu/en/simulation/atomic-interactions. Pueden cambiar la molécula (la más divertida es O₂) y les recomendamos usar la opción "slow motion" para visualizar mejor el comportamiento de los átomos. Prueben moviendo el átomo a distintas distancias y observando las velocidades a las cuales se mueven luego de que soltarlos.

Problema 14

La energía de sublimación corresponde al proceso: $X_2(s) \rightarrow X_2(g)$

La energía de enlace corresponde al proceso: $X_2(g) \rightarrow 2X(g)$

El cambio de fase requiere de menos energía que la ruptura de las moléculas (entre ambos procesos hay aproximadamente un orden de magnitud de diferencia). En ambos casos el estado final del sistema es similar: podemos como aproximación considerar que se trata de gases ideales, por lo que no hay interacción entre las partículas. En la sublimación es necesario vencer la energía de atracción que mantiene unidas a las moléculas en el sólido (fuerzas intermoleculares de dispersión, en este caso), mientras que en la ruptura del enlace hay que superar la energía asociada a un enlace formado por electrones compartidos de manera equitativa entre los dos núcleos. De esta manera, al comparar los valores de las energías de sublimación y de enlace de los halógenos, estamos comparando de forma la fuerza del enlace covalente frente a las fuerzas intermoleculares.

- i) $CH_4(g) + 2 O_2(g) \rightarrow CO_2(g) + 2 H_2O(l)$
- ii) En los reactivos se rompen 4 uniones C-H y 2 uniones O=O.

En los productos se forman 2 uniones C=O y 4 uniones O-H.

iii) Suponiendo que la "estabilidad" enunciada refiere a la ruptura de un enlace C-H en el metano para dar CH₃ y H, este proceso implica solamente la ruptura de un enlace en el reactivo. Las rupturas de enlaces covalentes siempre están asociados a valores positivos de energía pues se debe entregar energía al sistema para que ocurra la reacción química. De esta forma es necesario que se le entregue energía al sistema para que el metano se descomponga; esto no quiere decir que el proceso no pueda ocurrir, sino que se encuentra "desfavorecido" desde el punto de vista energético (retomaremos estas ideas en la Unidad 5).

¿Qué ocurre en presencia de oxígeno? En este caso, al haber otro reactivo disponible, existen otros productos posibles. Esta reacción involucra no sólo la ruptura de enlaces sino también la formación de enlaces nuevos; este segundo proceso libera energía (es exotérmico). El balance global arroja como resultado -890 kJ mol⁻¹, es decir el sistema libera energía al sufrir ese proceso (una forma de pensarlo es que se libera más energía por la formación de los nuevos enlaces que la que se absorbe por la ruptura de los enlaces en los reactivos). Es decir que la reacción del metano en estas condiciones se encuentra favorecida energéticamente, siendo la consecuencia observable que no es estable, y puede reaccionar con el oxígeno.

¿Por qué se requiere de una chispa para que ocurra esto? En ocasiones, los procesos químicos favorables requieren de una inyección de energía inicial para comenzar; esto suele estar relacionado con que su velocidad es intrínsecamente lenta, por lo que no son apreciables por un observador externo. Un chispazo equivale a un impulso inicial en la velocidad del proceso para que ocurra apreciablemente.

iv) La estabilidad química es un concepto complejo que analizaremos en detalle en la Unidad 5. Como primera aproximación, podemos decir se refiere a la capacidad de un compuesto químico de conservar su entidad, es decir, a su ausencia de reactividad en un determinado conjunto de condiciones. Por ejemplo, de muchas sustancias se dice que no son estables al aire (Na metálico, Mg en polvo), ya que pueden reaccionar con el O₂ del aire o la humedad del ambiente.

Esta "inercia" a reaccionar puede estar influenciada (pero no determinada de manera absoluta y única) por distintos factores, como ser los factores energéticos o de velocidad que enunciamos en el punto anterior.

Recordemos que debemos utilizar las unidades correctas de modo que obtengamos las unidades de velocidad adecuadas al final. Si observamos con atención, las unidades no se cancelan tan fácilmente para obtener m s⁻¹. Recordando la definición de Joule: $J = N \times m$, y $N = kg \times m \times s^{-2}$, tenemos que $J = kg \times m^2 \times s^{-2}$. Por lo tanto, para que las unidades sean las adecuadas debemos expresar la masa molar en kg/mol, lo que equivale a multiplicar la masa molar en g/mol por un factor de 1 kg/1000 g (que refiere a que "por cada kg hay 1000 g)). De esta forma nos queda:

$$\begin{split} \sqrt{\langle v^2 \rangle} &= \sqrt{\frac{3.R.T}{M_R}} \\ \sqrt{\langle v^2 \rangle_{H_2}} &= \sqrt{\frac{3.8,314 J/K. \, mol.293 K.1000 \, g/kg}{2 \, g/mol}} = 1911,6 \, m/s \\ \sqrt{\langle v^2 \rangle_{O_2}} &= \sqrt{\frac{3.8,314 J/K. \, mol.293 K.1000 \, g/kg}{32 \, g/mol}} = 477,9 \, m/s \end{split}$$

Volviendo a la definición de velocidad como la distancia recorrida por unidad de tiempo, podemos calcular el tiempo que tarda una partícula con una velocidad cuadrática media dada en recorrer 1 mm (es decir 0,001 m) como el cociente entre la distancia recorrida y la velocidad ($v = distancia/t \rightarrow t = distancia/v$):

$$t(1mm)_{H_2} = \frac{0,001m}{1911,6\,m/s} = 5,23.\,10^{-7}s$$

$$t(1mm)_{O_2} = \frac{0,001m}{477,9 \ m/s} = 2,09.10^{-6}s$$

Los tiempos característicos de una vibración se encuentran en el orden de 10^{-12} a 10^{-14} s, y los de una rotación en 10^{-9} a 10^{-11} s. Son tiempos extremadamente cortos. Suponiendo que tanto el H_2 como el O_2 no se encuentran con ninguna otra molécula en el intervalo de tiempo que les toma recorrer ese milímetro: ¿cuántas veces vibraron?; ¿cuántas veces rotaron?

Problema 17

<u>Nota</u>: el link que figura en la versión actual de la guía no funciona; utilizar la información disponible en:

https://scaleofuniverse.com/

https://www.youtube.com/watch?v=uaGEjrADGPA

En la figura se muestran algunos ejemplos de escalas de tamaños y qué herramientas necesitamos para poder observarlos: desde los radiotelescopios necesarios para poder estudiar galaxias, hasta microscopios ópticos para poder ver células, distintas clases de microscopios electrónicos que permiten estudian nanomateriales (SEM, TEM), y otros que permiten diferenciar átomos individuales (fuerza atómica, efecto túnel), hasta los aceleradores de partículas que permite estudiar qué hay en el interior de los núcleos atómicos (el Gran Colisionador de Hadrones es el más grande todos).

