## DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Taller: FUNDAMENTOS FISICOQUÍMICA (QUIM-2518)

1. Considere un determinado número de moles de gas ideal, contenido en un recipiente con volumen V1, a una determinada presión y temperatura. El volumen cambia a V2 (V2 > V1). ¿Qué hay que hacer para que la presión se mantenga constante?

Supongamos  $V_2 = 2V_1$  para cumplir con  $V_2 > 2V_1$ 

Como estamos hablando de un gas ideal entonces  $P_1V_1=n_1RT_1$  ahora como  $P_1=P_2$  y  $n_1=n_2$  tenemos:

$$\frac{P_1}{n_1 R} = \frac{T_1}{V_1} \quad y \quad \frac{P_2}{n_2 R} = \frac{T_2}{V_2}$$

es decir

$$\frac{T_1}{V_1} = \frac{T_2}{V_2}$$
 reemplazando V tenemos:  $\frac{2V_1}{V_1} * T_1 = T_2$ 

Por lo tanto  $T_2 = 2T_1$ 

2. La amanitina (C<sub>39</sub>H<sub>54</sub>N<sub>10</sub>O<sub>14</sub>S) una molécula tóxica presente en algunas setas venenosas como la Amanita phalloides. Recientemente se ha encontrado que esta está presente en dos conformeros de los cuales la conformación cuya energía es 2.67 kcal más alta que la otra es la responsable de los efectos nocivos. Usando la distribución de Boltzmann calcule el número de moles que se requieren de la conformación tóxica para matar a una persona de 65.0 kg si la dosis letal de amanitina (mezcla de conformeros) es 0.1 mg/kg. Asuma que la temperatura corporal es de 36.5 grados Celsius.

Primero calculamos el número de moles de toxina necesaria de amanitina (Am) para matar a una persona de 65 Kg, el peso molecular de Am es (918 g/mol)

$$65 Kg * 0.1 \frac{mg Am}{Kg} * \frac{1 mmol Am}{918 mg Am} = 7.1 * 10^{-3} mmol Am$$

Ahora calculamos el número de moles del enantiómero en un estado energético superior:

$$\frac{N_i}{N_o} = e^{-\Delta E/RT} \implies \Delta E = 2,67Kcal * \frac{10^3 cal}{1 Kcal} * \frac{4,184 J}{1 cal} = 11171,28 J$$

$$\frac{N_i}{N_o} = e^{-\Delta E/RT} \implies RT = 309.5 \ K * 8.314 \frac{J}{mol * K} * 1mol = 2573.183 J$$

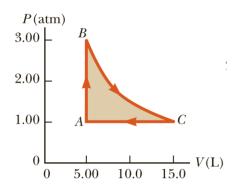
$$\frac{N_i}{N_o} = 0.013 \ mol \ \text{en} \ \text{estado} \ \text{exitado}$$

 $0,013 \ mol$  en estado exitado  $+ 1 \ mol$  en estado basal  $= 1,013 \ mol$  totales

Ahora encontramos las moles en la dosis letal:

$$7.1 * 10^{-3} \ mmol \ Am * \frac{0.013 \ mmol \ Est. \ exit.}{1.013 \ mmol \ Am} * \frac{1 \ mol}{10^{3} \ mmmol} = 9.08 * 10^{-8} \ moles$$

- 3. ¿Cuál de estas afirmaciones es correcta? Durante un proceso termodinámico:
  - a) un sistema puede intercambiar energía con el entorno, aumentando o disminuyendo su contenido de calor y trabajo, pero la energía total del "Universo" se quedará constante
  - b) un sistema puede intercambiar calor y energía con el entorno, aumentando o disminuyendo su contenido de calor y trabajo y la energía total del "Universo" cambiará según  $\Delta U = w + q$
  - c) un sistema puede intercambiar electrones caloríficos con capacidad energética aislada alcanzando un nivel de calor siempre mayor que la función de estado
  - d) un sistema puede intercambiar energía en forma de calor y trabajo con el entorno y su contendido de energía cambiará según  $\Delta U=w+q$
- 4. Un gas ideal se encuentra confinado en un cilindro de pistón movible. El gas empieza en el estado A donde la temperatura es de 3.00x10² K (vea la figura). El proceso B → C es isotérmico. En el proceso C → A se intercambiaron -2.53x10³ J en forma de calor. (a) Halle el número de moles de gas. (b) la temperatura en el punto B. (c) Calcule w, q, ΔU para el proceso B → C. (e) Repita para C→ A. (d) Repita para el ciclo completo.



a) Ya que es un gas ideal entonces tenemos

$$n = \frac{PV}{RT} \Rightarrow n = \frac{1 \text{ atm} * 5 \text{ L}}{0.082 \text{ atm} * L/_{mol * K} 3.00 * 10^2 \text{K}} = 0.203 \text{ mol}$$

b) Como las moles no cambian de A a B entonces:

$$T = \frac{PV}{nR} \Rightarrow T = \frac{3 \text{ atm} * 5 \text{ L}}{0.082 \text{ atm} * L/_{mol * K} * 0.203 \text{ mol}} = 900 \text{ K}$$

c) El proceso B a C es isotérmico por lo tanto  $\Delta U = 0$  es decir w = -q y  $w = -\int P \, dv$  con  $P \neq cte$  entonces:

$$w = -nRT \ln \frac{V_f}{V_i} \Rightarrow w = -0.230 \, mol * 0.082 \, atm * L/_{mol * K} * 900 \, K \ln \frac{15L}{5L}$$

$$w = 16 \, atm * L * \frac{101325 \, Pa}{1 \, atm} * \frac{N/_{m^2}}{1 \, Pa} * \frac{m^3}{10^3 L} = -1669.7 \, N * m \quad o \quad J$$
por lo tanto  $q = 1669.7 \, I$ 

d) El proceso de C a A se lleva a Presión constante entonces:

$$w = -P\Delta V = -1atm * (5 - 15)L * \frac{101325 Pa}{1 atm} * \frac{N/m^2}{1 Pa} * \frac{m^3}{10^3 L} = 1013,25 J$$
  
$$\Delta U = w + q \Rightarrow \Delta U = 1013,25 J - 2,53 * 10^3 J = -1516,75 J$$

e) Como la energía es una función de estado entonces:

$$\Delta U_{ciclo} = 0 \Rightarrow \Delta U_{ciclo} = w_{ciclo} + q_{ciclo} \Rightarrow w_{ciclo} = -q_{ciclo}$$

$$w_{ciclo} = w_{AB} + w_{BC} + w_{CA} \Rightarrow w = 0 - 1669,7 \ J + 1013,25 \ J = -656,45 \ J$$

$$q_{ciclo} = q_{AB} + q_{BC} + q_{CA} \Rightarrow q_{ciclo} = q_{AB} + 1669,7 \ J - 2530 \ J$$

$$w_{ciclo} = -q_{ciclo}$$

$$-656,45 \ J = -(q_{AB} + 1669,7 \ J - 2530 \ J)$$

$$q_{AB} = 656,45 \ J - 1669,7 \ J + 2530 \ J \Rightarrow q_{AB} = 1516,75 \ J$$

- 5. Un determinado sistema, constituido por 100 partículas, está caracterizado por 3 niveles energéticos, A, B y C, con las siguientes poblaciones: N<sub>A</sub>=5, N<sub>B</sub>=80 y N<sub>C</sub>=15 a una determinada temperatura. ¿Cuál de estas afirmaciones es correcta?
  - a) al aumentar T, una posible distribución de poblaciones puede ser:  $N_A=10$ ,  $N_B=70$  y  $N_C=20$ , ya que, subiendo T, los niveles a energía mayor se pueblan más.
  - b) al disminuir T, una posible distribución de poblaciones puede ser:  $N_A=20$ ,  $N_B=50$  y  $N_C=30$ , ya que bajando T, los niveles a energía menor se pueblan más.
  - c) al disminuir el trabajo, el calor de las poblaciones puede ser:  $N_A=208$ ,  $N_B=5$  y  $N_C=3$ , ya que la energía interna T elimina el estado de Planck.
  - d) al aumentar T, las partículas tienden a poblar más los niveles a energía inferior hasta que a una T infinita, todos los niveles tienen la misma población y la distribución es uniforme.
- 6. Calcule w, q, ∆U para un proceso en el cual 1.75 moles de agua experimentan el cambio H<sub>2</sub>O(l, 373 K) → H<sub>2</sub>O(g, 610 K) a 1 atm de presión. El volumen del agua líquida es de 1.89 x 10<sup>-5</sup> m³ por mol a 373 K y el del vapor es 3.03 y 5.06 x10<sup>-2</sup> m³ mol<sup>-1</sup> a 373 y 610 K respectivamente. Para pasar una mol de agua de fase líquida a fase gas se requieren 4,18 J por gramo y para el vapor es posible decir que se invierten 33.58 J de energía en forma de calor para elevar un Kelvin la temperatura de una mol.

Primero dividimos el proceso en las siguientes etapas:

(1) 
$$H_2O_{(l)}(373 K) \rightarrow H_2O_{(q)}(373 K)$$

(2) 
$$H_2O_{(q)}(373 K) \rightarrow H_2O_{(q)}(610 K)$$

Entonces considerando que el  $\Delta T = 273~K$  para el cálculo del calor en el proceso 1 tenemos:

$$1,75 \ mol * \frac{18 \ g \ H_2 O}{1 \ mol \ H_2 O_{(l)}} * \frac{4,18 \ J}{1 \ g \ H_2 O_{(l)}} = 131,67 \ J$$

Ahora para el cálculo del calor en el proceso 2 tenemos:

$$1,75 \ mol \ H_2O_{(g)} * \frac{33,58 \ J}{1 \ mol \ H_2O_{(g)} * K} * 237 \ K = 13927,3 \ J$$

Por el cálculo del calor del proceso completo tenemos:

$$q_{proceso} = q_1 + q_2 \Rightarrow q_{proceso} = 131,67 + 13927,3 J = 14058,975 J$$

Ahora realizamos el cálculo del trabajo para los mismos procesos en el 1 de ellos tenemos:

$$V_{H_2O_{(l)}} = 1,75 \ mol \ H_2O_{(l)} * \frac{1,89*10^{-5}m^3}{1 \ mol} * \frac{10^3L}{m^3} = 3,3*10^{-2}L$$

$$V_{H_2O(g)} = 1,75 \ mol \ H_2O(g) * \frac{3,03 * 10^{-2}m^3}{1 \ mol} * \frac{10^3 L}{m^3} = 53,02 \ L$$

Por lo tanto  $\Delta V = 53,02 - 3,3 * 10^{-2} = 52,99 L$ 

Como el trabajo se realiza a presión constante tenemos:

$$w_{H_2O_{(I)}} = -P\Delta V = -1atm * 52,99 L * \frac{101325 Pa}{1 atm} * \frac{N/m^2}{1 Pa} * \frac{m^3}{10^3 L} * \frac{1 KJ}{10^3 J} = -5,37 KJ$$

Ahora realizamos el cálculo del volumen del agua gas a 610 K

$$V_{H_2O_{(g)}} = 1,75 \ mol \ H_2O_{(g)} * \frac{5,06 * 10^{-2}m^3}{1 \ mol} * \frac{10^3 L}{m^3} = 88,55 \ L$$

Por lo tanto  $\Delta V = 88,55 - 53,02 = 35,53 L$ 

Como el trabajo se realiza a presión constante tenemos:

$$w_{H_2O_{(g)}} = -P\Delta V = -1atm * 35,53 L * \frac{101325 Pa}{1 atm} * \frac{N/m^2}{1 Pa} * \frac{m^3}{10^3 L} * \frac{1 KJ}{10^3 J} = -3,6 KJ$$

Por el cálculo del trabajo del proceso completo tenemos:

$$w_{proceso} = w_1 + w_2 \Rightarrow w_{proceso} = -5.37 \text{ KJ} - 3.6 \text{ KJ} = -8.97 \text{ KJ}$$

Ahora finalmente podemos calcular el cambio en la energía interna de todo el proceso:

$$\Delta U = w + q \Rightarrow \Delta U = -8.97 \text{ KJ} + 14.06 \text{ KJ} = 5.09 \text{ KJ}$$

- 7. ¿Por qué se dice que w y q no son funciones de estado? Explique y dé un ejemplo.
  - w y q son formas de intercambio de energía y ellas no definen el estado de un sistema, si consideramos el ascenso a una montaña el cambio en la energía potencial del escalador está determinado solamente por la diferencia de altura entre su posición inicial y su posición final, mientras que el trabajo realizado para llegar a la cima de la montaña si depende de la trayectoria que el escalador tome para llegar a la cima.
- 8. Considere un gas ideal que levanta un pistón en contra de una  $P_{ext} \neq 0$  hasta llegar a un nuevo estado en el cual tiene la misma energía. ¿Cuál de estas afirmaciones es correcta?
  - a) el trabajo endotérmico puede aumentar negativamente en contra de un calor extensivo cuyo valor es adiabático
  - b) el gas realiza un trabajo cuyo valor es positivo y, durante el proceso recibe energía en forma de calor por parte del entorno, de tal forma que  $\Delta U=0$
  - c) el gas pierde energía en forma de trabajo y recibe la misma cantidad de energía en forma de calor por parte del entorno
  - d) la trasformación es exotérmica porque el entorno recibe energía en forma de calor por el sistema, que realiza el trabajo de tal forma que  $\Delta U=0$
- 9. Considere dos cuerpos A y B en contacto, con T<sub>A</sub> > T<sub>B</sub>. ¿Cuál de estas afirmaciones es correcta?
  - a) al pasar el tiempo, la energía interna de A tiende a disminuir y la de B a aumentar hasta que todas las partículas de A y B tienen la misma velocidad
  - b) A y B no están en equilibrio térmico y la velocidad media de las partículas de A es mayor que la de las partículas de B
  - c) la capacidad del gas ideal de B es térmicamente superior al nivel cuántico de B, hasta que las velocidades del equilibrio mecánico alcanzan un valor infinito
  - d) por efecto de las colisiones entre las partículas de A y B en la frontera entre los dos cuerpos, TA y TB tienden a igualarse y B a disminuir su capacidad de realizar trabajo o transferir energía en forma de calor

10. Una batería eléctrica es cargada suministrándole 250 kJ de trabajo eléctrico, pero en el proceso pierde 25 kJ en forma de calor hacia los alrededores, ¿cuál es el cambio en la energía interna de la batería?, si el proceso es isobárico ¿cuál es el cambio entálpico?

$$\Delta U = w + q \Rightarrow \Delta H \cong q_p$$
  
 $\Delta U = 250 \ KJ - 25 \ KJ = 225 \ KJ$   
 $\Delta H = 25 \ KJ$