

## FUNDAMENTOS QUÍMICOS DE LA INGENIERÍA - I. Mecánica - Septiembre 2015 - ORIGINAL

### PROBLEMA (3,5 puntos)

Un vehículo consume un promedio de 5 litros de gasolina cada 100 Km. Suponiendo que la fórmula de la gasolina es  $C_8H_{18}$ , se pide:

- 1.- Formular y nombrar 5 posibles isómeros de cadena abierta de  $C_8H_{18}$ .
- 2.- Escribir y ajustar la reacción de combustión de la gasolina supuesto un rendimiento del 100 por cien. Definir la energía de enlace teórica de un compuesto y determinar la de  $C_8H_{18}$ , por mol. Sabiendo que la energía de enlace C-H es 413 kJ/mol y la de C-C 346 kJ/mol
- 3.- Determinar el calor de la reacción de combustión de la gasolina.
- 4.- Calcular las emisiones a la atmósfera por Km recorrido de dióxido y monóxido expresadas en kg. Sabiendo que el análisis de los gases de combustión indica que la eficacia de la combustión es del 95% en la formación de dióxido de carbono, formándose solo un 5% de monóxido. La densidad de la gasolina es 0,760 g/cm<sup>3</sup>
- 5.- Si por litro de gasolina consumida se emiten 8 m<sup>3</sup> de gases medidos en condiciones normales de P y T, expresar la concentración de dióxido de carbono en g/m<sup>3</sup> y en ppm en volumen.

DATOS: Masas atómicas de C;H;O; son respectivamente: 12; 1 y 16. R= 0,082 atm L /K mol

$\Delta H_f^\circ$  de  $C_8H_{18}$ ;  $CO_2$  y  $H_2O$  son respectivamente: 252,25 . 393,5 y 241,8 kJ /mol

### CUESTIONES (1 punto cada una)

- 1- Razonar según la Teoría del Orbital Molecular, cuáles de las moléculas siguientes son paramagnéticas y determinar su orden de enlace:  $O_2$ ;  $N_2$ ;  $Ne_2$ .
- 2- Se quiere mezclar 25 mL de  $NaI$   $1,4 \times 10^{-9}$  M y 35 mL de  $AgNO_3$   $7,9 \times 10^{-17}$  M. El Kps del AgI es  $8,5 \times 10^{-17}$ . Determinar si se produce precipitación del yoduro de plata.
- 3- Para cada uno de los siguientes cambios indique el signo algebraico de:  $\Delta H$ ,  $\Delta S$  y  $\Delta G$  y precise si es espontáneo.
  - a). Expansión de un gas ideal en el vacío.
  - b). Ebullición del agua a 100° C, 1 atm.
  - c). Combustión de hidrógeno en oxígeno.
- 4- Algunos de los tipos de reacciones en química orgánica son **ciclación, reducción, eliminación, transposición, condensación, sustitución y polimerización**. Identifique el tipo de las siguientes reacciones:
  - a)  $CH_3-CH_2-CH_3 + Cl_2 \rightarrow CH_3-CHCl-CH_3 + HCl$
  - b)  $CH_3-CH_2-CH_2-CH_3 \rightarrow CH_3-\underset{\substack{| \\ CH_3}}{CH}-CH_3$
  - c)  $HC \equiv CH \rightarrow CH_2 = CH_2$
  - d)  $n(CH_2 = CH-R) \rightarrow (CH_2 = \underset{\substack{| \\ R}}{CH})_n$
  - e)  $CH_2 = C - C = CH_2 + CH \equiv CH \rightarrow \begin{array}{c} CH = CH \\ / \quad \backslash \\ CH \quad \quad CH \\ \backslash \quad / \\ CH = CH \end{array}$
- 5- Escriba la ecuación que expresa el balance de materia en un proceso y explique los términos de la ecuación.

### TEMA ( 1,5 puntos)

Materiales cerámicos y refractarios

---

## SOLUCIONES

### PROBLEMA (3,5 puntos)

Un vehículo consume un promedio de 5 litros de gasolina cada 100 Km. Suponiendo que la fórmula de la gasolina es  $C_8H_{18}$ , se pide:

- 1.- Formular y nombrar 5 posibles isómeros de cadena abierta de  $C_8H_{18}$ .
- 2.- Escribir y ajustar la reacción de combustión de la gasolina supuesto un rendimiento del 100 por cien. Definir la energía de enlace teórica de un compuesto y determinar la de  $C_8H_{18}$ , por mol. Sabiendo que la energía de enlace C-H es 413 kJ/mol y la de C-C 346 kJ/mol
- 3.- Determinar el calor de la reacción de combustión de la gasolina.
- 4.- Calcular las emisiones a la atmósfera por Km recorrido de dióxido y monóxido expresadas en kg. Sabiendo que el análisis de los gases de combustión indica que la eficacia de la combustión es del 95% en la formación de dióxido de carbono, formándose solo un 5% de monóxido. La densidad de la gasolina es 0,760 g/cm<sup>3</sup>
- 5.- Si por litro de gasolina consumida se emiten 8 m<sup>3</sup> de gases medidos en condiciones normales de

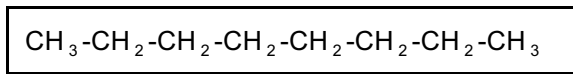
*P y T, expresar la concentración de dióxido de carbono en g/m<sup>3</sup> y en ppm en volumen.*

**DATOS:** Masas atómicas de C;H;O; son respectivamente: 12; 1 y 16. R= 0,082 atm L /K mol

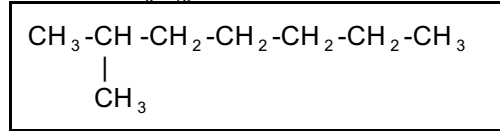
$\Delta H_f^\circ$  de C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>: CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O son respectivamente: -252,25 ; -393,5 y -241,8 kJ/mol (Estos valores son negativos, por lo que en el enunciado original, que aparecen con signo positivo, se trata obviamente de un error de transcripción)

**RESOLUCIÓN**

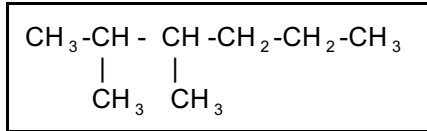
1- Formular y nombrar 5 posibles Isómeros de cadena abierta del C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>



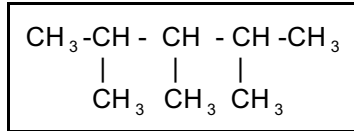
**n-octano**



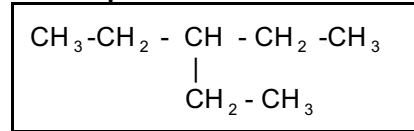
**2-metilheptano**



**2-3-dimetilhexano**

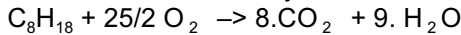


**2,3,4-trimetilpentano**



**3-etilhexano**

2.- Escribir y ajustar la reacción de combustión de la gasolina supuesto un rendimiento del 100 por cien. Definir la energía de enlace teórica de un compuesto y determinar la de C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>, por mol. Sabiendo que la energía de enlace C-H es 413 kJ/mol y la de C-C 346 kJ/mol



La **energía de enlace** se define como la variación de entalpía que se produce en la ruptura de un enlace en una molécula en fase gaseosa. Para este caso será la suma de las energías correspondientes a todos los enlaces: 7 enlaces C-C y 18 enlaces C-H:

**ENERGÍA DE ENLACE TEÓRICA:** 7.(346) + 18.(413) = **9856 KJ/mol**

3.- Determinar el calor de la reacción de combustión de la gasolina.

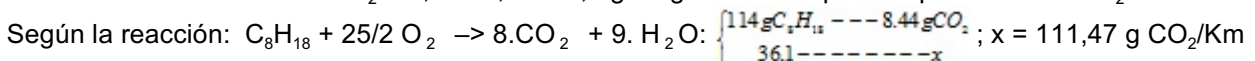
La reacción que tiene lugar en la combustión completa es: C<sub>8</sub>H<sub>18</sub> + 25/2 O<sub>2</sub> → 8.CO<sub>2</sub> + 9. H<sub>2</sub>O

Y la entalpía de será:  $\Delta H^\circ_{\text{REACCIÓN}} = \Delta H^\circ_{\text{f-PRODUCTOS}} - \Delta H^\circ_{\text{f-REACTIVOS}} = 8.(-393,5) + 9.(-241,8) - 1.(-252,25) =$   
 $\Delta H^\circ_{\text{REACCIÓN}} = - 5071,95 \text{ KJ}$

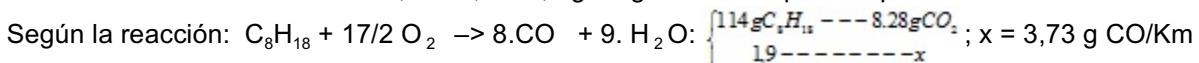
4.- Calcular las emisiones a la atmósfera por Km recorrido de dióxido y monóxido expresadas en kg. Sabiendo que el análisis de los gases de combustión indica que la eficacia de la combustión es del 95% en la formación de dióxido de carbono, formándose solo un 5% de monóxido. La densidad de la gasolina es 0,760 g/cm<sup>3</sup>

Consumo por Km:  $\frac{5L}{100Km} = 50 \text{ cm}^3/\text{Km}$  ;  $50 \frac{\text{cm}^3}{\text{Km}} \cdot 0,76 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} = 38,0 \frac{\text{g}}{\text{Km}}$

El 95% se convierte en CO<sub>2</sub> = 0,95.38,0 = 36,1 g de gasolina se queman produciendo CO<sub>2</sub>



El 5% se convierte en CO = 0,05.38,0 = 1,9 g de gasolina se queman produciendo CO



5.- Si por litro de gasolina consumida se emiten 8 m<sup>3</sup> de gases medidos en condiciones normales de P y T, expresar la concentración de dióxido de carbono en g/m<sup>3</sup> y en ppm en volumen.

De acuerdo con los cálculos del apartado anterior, con 50 cm<sup>3</sup> de gasolina se producen 111,47 g de CO<sub>2</sub> y 3,73 g de CO, por lo que con cada litro (1000 cm<sup>3</sup>) se producirán: 2229,3 g de CO<sub>2</sub> y 74,6 g de CO.

La concentración de CO<sub>2</sub> en g/m<sup>3</sup> será:  $\frac{2229,3\text{gCO}_2}{8\text{m}^3} = 278,67 \text{ g CO}_2/\text{m}^3$

Para determinar esta concentración en ppm, calculamos el volumen de los 278,67 g CO<sub>2</sub> emitidos, aplicando

la ecuación general de los gases:  $1V = \frac{278,67}{44} \cdot 0,082 \cdot 273$  ; V = 141,87 litros de CO<sub>2</sub> emitido por m<sup>3</sup>(1000L)

Así, la concentración en ppm será:  $\left\{ \begin{array}{l} 1000L \text{ --- } 141,87L \\ 10^5 \text{ --- } x \end{array} \right.$  x = 141870 ppm en volumen de CO<sub>2</sub> emitido

**CUESTIONES (1 punto cada una)**

1- Razonar según la Teoría del Orbital Molecular, cuáles de las moléculas siguientes son paramagnéticas y determinar su orden de enlace: O<sub>2</sub>; N<sub>2</sub>; Ne<sub>2</sub>.

## RESOLUCIÓN

Las configuraciones electrónicas de las moléculas nos indicarán tanto su existencia: cuando el orden de enlace sea mayor de cero, como el paramagnetismo de las mismas: si tienen algún electrón desapareado.

Vamos a determinar el número de electrones de cada átomo, y por tanto, de cada molécula, que distribuiremos después en los correspondientes orbitales moleculares, observando si hay electrones desapareados (será paramagnética) y calculando el orden de enlace para determinar su existencia, teniendo en cuenta que su valor viene dado por la expresión:

$$\text{Orden de enlace} = \frac{\text{N}^\circ \text{ electrones enlazantes} - \text{N}^\circ \text{ electrones antienlazantes}}{2}$$

**O:**  $1s^2 2s^2 2p^4$  Por tanto la molécula **O<sub>2</sub>** tendrá 12 electrones de enlace, y su configuración electrónica es:

$$K; K'; \sigma_{2s}^2; \sigma_{2s}^{*2}; \sigma_{2p_x}^2; \pi_{2p_y}^2 = \pi_{2p_z}^2; \pi_{2p_y}^{*1} = \pi_{2p_z}^{*1}; \text{O.E.} = \frac{8-4}{2} = 2, \text{ SI EXISTE y SI es}$$

**paramagnética pues tiene dos electrones desapareados**

**N:**  $1s^2 2s^2 2p^3$  Por tanto la molécula **N<sub>2</sub>** tendrá 10 electrones de enlace, y su configuración electrónica es:

$$K; K'; \sigma_{2s}^2; \sigma_{2s}^{*2}; \sigma_{2p_x}^2; \pi_{2p_y}^2 = \pi_{2p_z}^2; \text{O.E.} = \frac{8-2}{2} = 3 \text{ SI EXISTE pero No es}$$

**paramagnética pues no tiene electrones desapareados**

**Ne:**  $1s^2 2s^2 2p^6$  Por tanto la molécula **Ne<sub>2</sub>** tendrá 16 electrones de enlace, y su configuración electrónica es:

$$K; K'; \sigma_{2s}^2; \sigma_{2s}^{*2}; \sigma_{2p_x}^2; \pi_{2p_y}^2 = \pi_{2p_z}^2; \pi_{2p_y}^{*2} = \pi_{2p_z}^{*2}; \sigma_{2p_x}^{*2}; \text{E.} = \frac{8-8}{2} = 0, \text{ por tanto NO EXISTE}$$

**2- Se quiere mezclar 25 mL de NaI  $1,4 \times 10^{-9}$  M y 35 mL de  $\text{AgNO}_3$   $7,9 \times 10^{-17}$  M. El Kps del AgI es  $8,5 \times 10^{-17}$ . Determinar si se produce precipitación del yoduro de plata.**

### RESOLUCIÓN

La disociación del Yoduro de plata es:  $\text{AgI} \rightleftharpoons \text{Ag}^+ + \text{I}^-$ , y su Ps =  $[\text{Ag}^+][\text{I}^-]$  por lo que si se mezclan en una disolución ambos iones:  $\text{Ag}^+$  y  $\text{I}^-$ , y el producto de sus concentraciones supera el valor de su Ps, se producirá la precipitación del AgI.

En este caso se mezclan 25 mL de NaI  $1,4 \times 10^{-9}$  M y 35 mL de  $\text{AgNO}_3$   $7,9 \times 10^{-17}$  M, por lo que en la disolución resultante (60 mL) tendremos:

NaI: Cada mol disuelta y disociada nos dará un mol de  $\text{I}^-$ :  $n = 0,025 \text{ L} \cdot 1,4 \times 10^{-9} \text{ mol/L} = 0,35 \cdot 10^{-9}$  moles de  $\text{I}^-$   
 $\text{AgNO}_3$ : Cada mol disuelta y disociada nos dará un mol de  $\text{Ag}^+$ ;  $n = 0,035 \cdot 7,9 \times 10^{-17} = 0,28 \cdot 10^{-17}$  mol de  $\text{Ag}^+$

En la disolución resultante de esta mezcla, que tiene un volumen de  $25 + 35 = 60$  mL (0,060 L), las concentraciones de ambos iones serán:

$$[\text{I}^-] = \frac{0,35 \cdot 10^{-9}}{0,06} = 5,83 \cdot 10^{-9} \text{ Mol/L} \quad [\text{Ag}^+] = \frac{0,28 \cdot 10^{-17}}{0,06} = 4,67 \cdot 10^{-16} \text{ Mol/L}$$

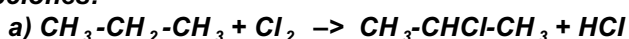
El producto de sus concentraciones es:  $[\text{Ag}^+][\text{I}^-] = 4,67 \cdot 10^{-16} \cdot 5,83 \cdot 10^{-9} = 2,72 \cdot 10^{-24}$  por lo que como es MENOR que el producto de solubilidad del AgI, NO PRECIPITARÁ

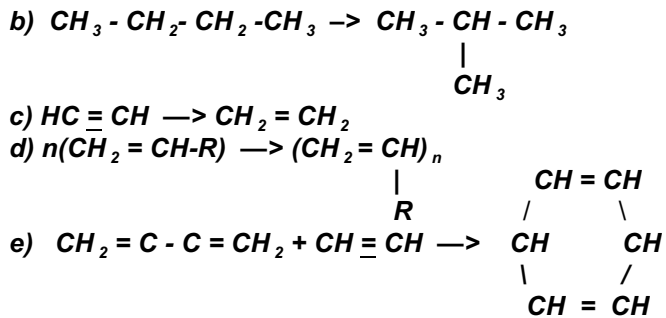
**3- Para cada uno de los siguientes cambios indique el signo algebraico de:  $\Delta H$ ,  $\Delta S$  y  $\Delta G$  y precise si es espontáneo.**

- Expansión de un gas ideal en el vacío.
- Ebullición del agua a  $100^\circ \text{C}$ , 1 atm.
- Combustión de hidrógeno en oxígeno.

Cambio	$\Delta H$	$\Delta S$	$\Delta G$	¿Espontáneo?
a)	< 0	> 0	< 0	SÍ
b)	> 0	> 0	> 0	NO
c)	< 0	> 0	< 0	SI

**4- Algunos de los tipos de reacciones en química orgánica son ciclación, reducción, eliminación, transposición, condensación, sustitución y polimerización. Identifique el tipo de las siguientes reacciones:**





### RESOLUCIÓN

- a) Sustitución
- b) Trasposición
- c) Reducción
- d) Polimerización
- e) Ciclación

5- *Escriba la ecuación que expresa el balance de materia en un proceso y explique los términos de la ecuación.*

RESOLUCIÓN:

Ver páginas 723 y siguientes del texto recomendado:

Ecuación : **ACUMULACIÓN = ENTRADA - SALIDAS + GENERACIÓN - CONSUMO**

- **ACUMULACIÓN** = Materia que se acula a lo largo del proceso que tiene lugar en el reactor
- **ENTRADA** = Materiales que entran (o se aportan) en el reactor
- **SALIDAS** = Materiales que salen del reactor
- **GENERACIÓN** = Materia que se genera durante el proceso
- **CONSUMO** = Materia que se consume durante el proceso

**TEMA ( 1,5 puntos)**

***Materiales cerámicos y refractarios***

Ver páginas 401 y siguientes del texto recomendado

Texto recomendado: QUÍMICA APLICADA A LA INGENIERÍA. Caselles, M., Gómez, R. Y otros. Ed. UNED.