Problemas Tema 2. La energía de las reacciones químicas.

- ¿Qué trabajo externo se produce en la combustión de benzeno a 27 °C?
 Sol: 3743.4J
- 2. Calcular el trabajo realizado al comprimir isotérmica y reversiblemente 50 g de nitrógeno desde una presión de 1 atm hasta 20 atm a la temperatura de 25 °C. Calcular, también, el trabajo efectuado por el gas en su expansión isotérmica al volver al estado inicial contra un presión constante de 1 atm. Suponer que el nitrógeno se comporta idealmente. Sol: 13.26kJ, -4.21 kJ
- Para la reacción 2 CO(g) + O₂(g) → 2 CO₂ (g), la variación de entalpía a 25 °C tiene un valor de 563 kJ. Calcular la variación de energia interna a la misma temperatura. Sol: 565.5 kJ
- 4. Hacer un estimación del valor de ΔH° para las siguientes reacciones gaseosas utilizando datos de energía de enlace:
 a) HCl + H₂C=CH₂ → C2H5Cl

b) $C_2H_5OH \rightarrow H_2O + C_2H_4$ c) $CH_4 + Cl_2 \rightarrow HCl + CH_3Cl$

Energías medias de enlace: (H-Cl) = 432; (C=C) = 615; (C=O) = 728; (C-H) = 413; (C-Cl) = 328; (O-H) = 463; (C-C) = 348; (Cl-Cl) = 243; (C-O) = 351 kJ/mol. Sol: -42 kJ, -34 kJ, -104 kJ

5. Parte del butano, C₄H₁₀(g), contenido en una botella de 200 L a 26 °C se extrae y se quema a presión constante en un exceso de aire. Como resultado la presión del gas en la botella se reduce de 2.35 atm a 1.10 atm. El calor liberado se utiliza para elevar la temperatura de 132.5 L de agua de 26.0 a 62.2 °C. Suponiendo que los productos de la combustión son exclusivamente CO₂(g) y H₂O(l) determinar el rendimiento de este calentador de agua, es decir, ¿qué tanto por ciento del calor de combustión fue absorbido por el agua?

Sol: 69.1 %

6. Un procedimiento para reducir las emisiones de CO₂(g) es utilizar combustibles que generen una gran cantidad de calor por mol de CO₂(g) producido. Con esta perspectiva ¿cuál es el mejor combustible, la gasolina [considerar que es octano, C₈H₁₈(l)] o el metano, CH₄(g).

Sol: metano mejor combustible

7. En el metabolismo de la glucosa, $C_6H_{12}O_6(s)$, se obtiene $CO_2(g)$ y $H_2O(l)$ como productos. El calor liberado en el proceso se transforma en trabajo útil con un rendimiento del 70%. Calcular la masa de glucosa metabolizada por una persona de 58.0 kg que sube una montaña de 1450 m. Suponga que el trabajo realizado al subir es aproximadamente cuatro veces el necesario para elevar 58.0 kg a una altura de 1450m.

especie $C_6H_{12}O_6(s)$, $CO_2(g)$ $H_2O(l)$ $\Delta H^{\circ}_f(kJ/mol)$ -1273,3 -393.5 -285.83 Sol. 303g

- 8. En la combustión del hexano, C₆H₁₄, se desprenden 11.57 kcal por gramo de hexano. Calcular el calor de formación del hexano sabiendo que el calor de formación, a 25 °C, del CO₂(g) es -94 kcal/mol y el del agua líquida -68.3 kcal/mol Sol: -47.08 kcal/mol
- 9. Calcular la entalpía de formación del Ca(OH) 2 (s) a 18 °C y 1 atm a partir de los siguientes datos:

 $\Delta H^{o}_{f,291}(H_{2}O,l)$ =-68.370kcal/mol $\Delta H^{o}_{f,291}$ (CaO,s)= -151.800 kcal/mol CaO(s) + H₂O(l) → Ca(OH) ₂ (s) ΔH^{o}_{291} = -15.260 kcal/mol Sol: -235.4 kcal/mol

10. Calcular el cambio de entalpía y de energía interna, a 25 °C, para la reacción:

 $H_2(g) + 1/2 O_2(g) \rightarrow H_2O(l)$

a partir de los datos siguientes:

 $\begin{array}{ll} C(s) + 2H_2O(g) \to CO_2 \ (g) + 2H_2(g) & \Delta H1 = \ 21.5 \ kcal \\ C(s) + 1/2O_2 \ (g) \to CO(g) & \Delta H2 = -26.4 \ kcal \\ H_2O(g) \to H_2O(l) & \Delta H3 = -10.5 \ kcal \\ CO(g) + 1/2O_2 \ (g) \to CO_2 \ (g) & \Delta H4 = -67.6 \ kcal \\ \end{array}$

Sol: -74.8 kcal: -73.9 kcal/mol

11. Se encuentran los siguientes datos de calores de formación a 298 K:

 $C_2H_5OH(l)$ =-66.0kcal/mol $CO_2(g)$ =-94.0kcal/mol $H_2O(l)$ = -68.3 kcal/mol

Calores de combustión a 298 K para dar H₂O(l) y CO₂(g):

CO(g)=-68kcal/mol $CH_4(g)$ = -212 (kcal/mol)

Capacidades caloríficas, Cp:

 $CH_4(g) = 5.0 \text{ cal/mol K}; \quad CO_2(g) = 7.0 \text{ cal/mol K}; \quad C_2H_5OH(l) = 32.0 \text{ cal/mol K}$

a) Calcular ΔH_{298} e ΔE_{298} para la reacción 3 $CH_4(g) + CO_2(g) \Rightarrow$ 2 $C_2H_5OH(l)$

b) Calcular ΔH_(-100 °C) para la reacción anterior.

Sol: 17.8 kcal, 120.2 kcal, 2.6 kcal,

12. Considerando la siguiente información a 298 K:

 $4 C_2H_5Cl(g) + 13 O_2(g)$ → $2 Cl_2(g) + 8 CO_2(g) + 10H_2O(g)$ $\Delta H^0 = -1229.6$ kcal Calor de combustión del etano, $C_2H_6(g) = -372.8$ kcal/mol

Calores de formación: $H_2O(g) = -57.8$ kcal/mol, $H_2O(l) = -68.3$ kcal/mol, HCl(g) = -21 kcal/mol

- a) Calcular ΔH_{298} e ΔE_{298} para la reacción $C_2H_6(g) + Cl_2(g) \rightarrow C_2H_5Cl(g) + HCl(g)$.
- b) Calcular ΔH_{398} , suponiendo que ΔCp es igual a 10 cal/K.

Sol: -26 kcal, -26 kcal, -25.86 kcal,

13. Añadiendo el calor necesario se vaporizan 15 g de benceno por vía reversible a su temperatura de ebullición de 80.2 °C. Suponiendo que la presión es de 1 atm y que el calor de vaporización es de 94.4 cal/g. Calcular q, w, ΔΕ°, ΔΗ°, ΔS° e ΔG°.

Sol: 1416 cal, -135 cal, 1281 cal, 1416 cal, 4.0 cal/K, 0.

14. El cambio de entalpía estándar durante la desnaturalización (o desenrollamiento) de la proteína inhibidora de la tripsina de soya es 238 kJ/mol. La desnaturalización se produce espontáneamente a 50 °C. Estimar la entropía para este proceso e interpretar el signo y magnitud de este valor en términos del comportamiento molecular que se observa. Sol: >736 J/mol

15. A partir de los valores de la tabla siguiente medidos a 25 °C,

Sustancia	S° (cal/molK)	Entalpía de combustión ΔH° (kcal/mol)
C(grafito)	1.4	-94.2
H2 (g)	31.2	-68.4
C2H4 (g)	52.2	-333.2
C2H6 (g)	55.6	-372.8

calcular ΔH° , ΔS° e ΔG° para las dos reacciones siguientes:

- $2 C(grafito) + 2 H_2(g) \rightarrow C_2H_4(g)$
- $2 \text{ C(grafito)} + 3 \text{ H}_2(g) \rightarrow \text{ C}_2\text{H}_6(g)$

Indicar también si en estas condiciones ambas reacciones son espontáneas

Sol: 8 kcal, -13 cal/K, 11.88 kcal; -20.8 kcal, -40.8 cal/K, -8.6 kcal

16. Para la reacción de fotosíntesis:

$$6 \text{ CO}_2(g) + 6 \text{ H}_2\text{O}(l) \rightarrow \text{ C}_6\text{H}_{12} \text{ O}_6(g) + 6 \text{ O}_2(g)$$

calcular los valores de ΔH° , ΔS° e ΔG° a partir de los siguientes datos:

especie	$C_6H_{12}O_6(s)$	$CO_2(g)$	$H_2O(1)$	$O_2(g)$
$\Delta H_{f}^{o}(kcal/mol)$	-304.60	-94.85	-68.32	0.0
So (kcal/mol)	50.70	51.06	16.72	49.00

a) Indicar si la reacción es exotérmica o endotérmica. b) Comentar la espontaneidad de la reacción y su relación con los valores de ΔH^o , ΔS^o e ΔG^o . Sol:

17. Calcular los valores de ΔH° , ΔS° e ΔG° para la reacción:

 $C_2H_6(g) + 7/2 O_2(g) \rightarrow 2 CO_2(g) + 3 H_2O(l)$

a partir de los siguientes datos:

Sustancia	$\Delta H^{\circ}_{f}(kcal/mol)$	$\Delta G^{o}_{f}(kcal/mol)$	$S^{o}_{f}(cal/mol \cdot K)$
$C_2H_6(g)$	-20.236	-7.860	54.850
$O_2(g)$	0.000	0.000	49.003
$CO_2(g)$	-94.052	-94.260	51.061
$H_2O(1)$	-68.317	-56.700	16.716

- a) Indicar si la reacción es exotérmica o endotérmica.
- b) Comentar la espontaneidad de la reacción y su relación con los valores de $\Delta H^o, \Delta S^o$ e $\Delta G^o.$

Sol: -372.8 kcal, -74.1 cal/K, -350.6 kcal

18. La oxidación de la glucosa, $C_6H_{12}O_6(s)$, en los tejidos corporales produce $CO_2(g)$ y $H_2O(l)$. $C_6H_{12}O_6(g) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g) + H_2O(l)$

En cambio la descomposición anaerobia, que se lleva a cabo durante la fermentación, produce alcohol etílico, C_2H_5OH , y $CO_2(g)$.

 $C_6H_{12} O_6 (g) \rightarrow CO_2 (g) + C_2H_5OH$,

Determinar la energía libre estándar de estos procesos

	C			
especie	$C_6H_{12}O_6(s)$	$CO_2(g)$	$H_2O(1)$	$C_2H_5OH(1)$
$\Delta G_{\rm f}^{\rm o}({\rm kJ/mol})$	-249.07	-393.5	-285.83	-74.8

Sol: ΔG°_f (kJ/mol)(oxidación aeróbica)=-2879; ΔG°_f (kJ/mol)(oxidación anaerobia)=-220

19. Las células emplean la hidrólisis del trifosfato de adenosina, ATP, como fuente de energía. La conversión de ATP en ADP tiene un cambio de energía libre estándar de -30.5 kJ/mol.

Si toda la energía libre proveniente del metabolismo de la glucosa, se consume en la conversión de ADP en ATP, ¿cuántos moles de ATP se pueden producir por cada mol de glucosa?

especie	$C_6H_{12}O_6(s)$	$CO_2(g)$	$H_2O(1)$
$\Delta G_{f}^{o}(kJ/mol)$	-249.07	-393.5	-285.83

Sol: 94.4 moles ATP/mol glucosa

20. Calcular los valores de ΔH^o , ΔS^o e ΔG^o a 298 K y a 398 K, para la reacción:

 $SO_2(g) + 2 H_2S(g) \rightarrow 3 S(r\'{o}mbico) + 2 H_2O(l)$ a partir de los siguientes datos: Substància $? H^{\circ}f(kcal/mol)$ $S^{\circ}(cal/mol.K)$ Cp (cal/mol.K)

? H°f(kcal/mol)	S°(cal/mol.K)	Cp (cal/mol.K)
-70,960	59.24	9,841
-5,300	49.15	8,911
0,000	7.62	5,674
-68,317	16.72	18,014
	-70,960 -5,300 0,000	-70,960 59.24 -5,300 49.15 0,000 7.62

Sol: -56.0 kcal, -101.4 cal/K, -25.8 kcal; -11.7 kcal, -104.8 cal/K, -15.5 kcal

21. El interés en la producción bacteriana de proteinas a partir de alimentos sintéticos, se ha centrado en la reacción que da glicina (NH₂CH₂COOH) a partir de compuestos sencillos como el amoniaco, el metano y el oxigeno.

$$NH_3(g) + 2 CH_4(g) + 5/2 O_2(g) \rightarrow NH_2CH_2COOH(s) + 3 H_2O(l)$$

Considerando la siguiente información a 25°C:

Entalpia de formación del NH₃(g) =-11.02 kcal/mol

Entalpia de combustión del CH₄ (g)= -212.72 kcal/mol

Entalpia de formación de la NH₂CH₂COOH(s) = -128.40 kcal/mol

Entalpia de formación del H₂O(1)=-68.32 kcal/mol

Entalpia de formación del $CO_2(g) = -94.53 \text{ kcal/mol}$

	$NH_3(g)$	$CH_4(g)$	$O_2(g)$	$NH_2CH_2COOH(s)$	$H_2O(1)$
Cp(cal/molK)	8.38	8.44	7.02	23.71	17.99
S ^o ₂₉₈ (cal/molK)	46.00	44.52	49.03	24.74	16.71

- a) Calcular la entalpia estándar a 25°C para dicha reacción.
- b) Calcular ? H° a 90°C para la misma reacción considerando Cp constante en el intervalo (25°C-90°C)
- c) Decir si la reacción será expontánea o no a 25°C.

Sol: a)-285.44 kcal; b) -283.2 kcal; c) Si, -230.98 kcal