

## OPCIÓN A

**CUESTIÓN 1.- Indica razonadamente cuál de las siguientes combinaciones de números cuánticos son correctas y, en su caso, el nombre de los orbitales que representan los valores de  $n$  y  $l$ , así como el número de electrones que pueden alojar dichos orbitales.**

- a)  $n = 2; l = 0; m_l = -1; m_s = \frac{1}{2}$ .
- b)  $n = 3; l = 2; m_l = 1; m_s = -\frac{1}{2}$ .
- c)  $n = 2; l = 1; m_l = -1; m_s = -\frac{1}{2}$ .
- d)  $n = 1; l = -1; m_l = 0; m_s = \frac{1}{2}$ .
- e)  $n = 4; l = 3; m_l = -2; m_s = -\frac{1}{2}$ .

Solución:

- a) Esta combinación de números cuánticos es incorrecta, pues si  $l = 0$ ,  $m_l$  nunca puede tomar el valor  $-1$ , sino el valor  $0$ .
- b) Esta combinación de números cuánticos es correcta, pues los valores asignados están dentro de los permitidos para cada número cuántico. Según los valores de  $n$  y  $l$  representa a los 5 orbitales 3d, y como en cada orbital caben como máximo 2 electrones, el número total de electrones que pueden alojar estos orbitales es 10.
- c) También es correcta esta combinación de números cuánticos, pues los valores asignados entra dentro de los permitidos. Los valores de  $n$  y  $l$  indican que representan a los 3 orbitales 2p, siendo 6 el número total de electrones que caben en ellos.
- d) Esta combinación de números cuánticos no es válida, pues  $l$  nunca puede tomar un valor negativo.
- e) Es correcta esta combinación de números cuánticos por encontrarse los valores asignados dentro de los permitidos. De los valores de  $n$  y  $l$  se deduce que representa a los 7 orbitales 4f en los que caben un total de 14 electrones.

**PROBLEMA 2.- La reacción de hierro con ácido sulfúrico concentrado conduce a la formación de sulfato de hierro (II) sólido e hidrógeno gas. Si se hacen reaccionar 5,0 g de hierro con 5,0 mL de ácido sulfúrico concentrado del 95 % de riqueza en peso y  $1,98 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1}$  de densidad:**

- a) **Escribe y ajusta la reacción que tiene lugar.**
- b) **Determina cual es el reactivo limitante y cuál es el que se encuentra en exceso.**
- c) **Calcula la masa de hidrógeno que se formará y cuál será el volumen que ocupará dicho gas medido a  $30^\circ\text{C}$  y 2,5 atmósferas de presión.**

**DATOS:**  $A_r(\text{H}) = 1 \text{ u}; A_r(\text{O}) = 16 \text{ u}; A_r(\text{S}) = 32 \text{ u}; A_r(\text{Fe}) = 55,8 \text{ u}; R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ .

Solución:

a) La ecuación correspondiente a la reacción química es:  $\text{Fe} + \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{FeSO}_4 + \text{H}_2$ , que por contener el mismo número de átomos de cada elemento en ambos miembros se encuentra ajustada.

b) Al transcurrir la reacción mol a mol, es decir, reacciona un mol de hierro con un mol de ácido, determinando los moles de cada una de las especies reaccionantes, se determina la que se encuentra en exceso y en defecto. Para ello, aplicando a las cantidades dadas los correspondientes factores de conversión se tiene los moles de cada una de ellas:

$$5,0 \text{ mL disolución} \cdot 1,98 \frac{\text{g disolución}}{\text{mL disolución}} \cdot \frac{95 \text{ g } \text{H}_2\text{SO}_4}{100 \text{ g disolución}} \cdot \frac{1 \text{ mol } \text{H}_2\text{SO}_4}{98 \text{ g } \text{H}_2\text{SO}_4} = 0,096 \text{ moles de } \text{H}_2\text{SO}_4.$$

$$5,0 \text{ g Fe} \cdot \frac{1 \text{ mol Fe}}{55,8 \text{ g Fe}} = 0,09 \text{ moles de Fe.}$$

De los valores obtenidos se deduce, fácilmente, que el hierro es la especie o reactivo limitante por ser el que se encuentra en menor cantidad molar y, por ello, se consume antes mientras queda ácido sulfúrico en exceso.

c) Al consumirse todo el hierro en la reacción implica que de hidrógeno se obtendrán los mismos moles que de este elemento se han consumido, es decir, 0,09 moles, por lo que aplicándoles los factores de conversión correspondientes se obtienen los gramos:  $0,09 \text{ moles } H_2 \cdot \frac{2 \text{ g } H_2}{1 \text{ mol } H_2} = 0,18 \text{ g de } H_2$ .

Aplicando a los moles de  $H_2$  obtenidos la ecuación de estado de los gases ideales, despejando el volumen, sustituyendo las demás variables por sus valores y operando se obtiene el volumen que ocupa el gas desprendido:

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T \Rightarrow V = \frac{n \cdot R \cdot T}{P} = \frac{0,09 \text{ moles} \cdot 0,082 \text{ atm} \cdot L \cdot \text{mol}^{-1} \cdot K^{-1} \cdot 303 \text{ K}}{2,5 \text{ atm}} = 0,89 \text{ L.}$$

**Resultado: b) Fe limitante;  $H_2SO_4$  exceso; c) 0,18 g  $H_2$ ; V = 0,89 L.**

**CUESTIÓN 2.- Para la reacción química  $a A + b B \rightarrow c C + d D$ , se sabe que si la concentración inicial de A se duplica y la concentración de B se mantiene constante, la velocidad inicial se multiplica por 8. Por otro lado, si la concentración de A se mantiene constante y la concentración inicial de B se duplica, la velocidad inicial se duplica. Con estos datos:**

- Calcula el orden total de la reacción y escribe la expresión de la velocidad de reacción.
- Determina las unidades que debe tener la constante de velocidad para dicho proceso.

Solución:

a) El orden de un reactivo en una reacción se determina del modo siguiente: “Si al multiplicar la concentración inicial de un reactivo por un número **m** manteniendo constante la concentración del otro, la velocidad se multiplica por una potencia del número **m**, el exponente de la potencia es el orden de la reacción respecto de dicho reactivo. Este exponente es además al que aparece elevada la concentración del reactivo en la expresión de la velocidad de reacción. Luego,

Si al duplicar (multiplicar por 2) la concentración inicial de A manteniendo constante la de B se multiplica por 8 ( $2^3$ ) la velocidad, esto pone de manifiesto que el orden de la reacción respecto del reactivo A es 3.

Si la que se duplica en otra experiencia es la concentración inicial de B manteniendo constante la de A y la velocidad también se duplica (ambas se multiplican por 2), en este caso el orden de la reacción respecto del reactivo B es 1.

La expresión de la velocidad es  $v = k [A]^3 \cdot [B]$ , y por ser el orden total de una reacción la suma de los exponentes a los que se encuentran elevadas las concentraciones en la ecuación de la velocidad, el orden total es 4.

b) Despejando la constante de velocidad k de la expresión anterior, sustituyendo las variables por sus unidades y operando sale para las unidades de k:

$$k = \frac{v}{[A]^3 \cdot [B]} = \frac{\text{moles} \cdot L^{-1} \cdot s^{-1}}{\text{moles}^3 \cdot L^{-3} \cdot \text{mol} \cdot L^{-1}} = \text{moles}^{-3} \cdot L^3 \cdot s^{-1}.$$

### OPCIÓN B

**CUESTIÓN 1.- a) Indica la configuración electrónica de un átomo de cinc, Zn, (Z = 30).  
b) Indica los cuatro números cuánticos de cada electrón de un átomo de nitrógeno (Z = 7).**

Solución:

a) El átomo de cinc, por ser neutro, tiene en la corteza tantos electrones como protones en el núcleo 30, siendo su configuración electrónica: Zn (30):  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$ .

b) La configuración electrónica de un átomo de nitrógeno es N (Z = 7):  $1s^2 2s^2 2p^3$ .

Para los electrones del primer orbital,  $1s^2$ , sus números cuánticos son:  $n = 1$ ;  $l = 0$ ;  $m_l = 0$  para los dos y  $m_s = \frac{1}{2}$  para uno y  $m_s = -\frac{1}{2}$  para el otro.

Para los electrones del segundo orbital,  $2s^2$ , sus números cuánticos son:  $n = 2$ ;  $l = 0$ ;  $m_l = 0$  para los dos y  $m_s = \frac{1}{2}$  para uno y  $m_s = -\frac{1}{2}$  para el otro.

Los números cuánticos de los 3 electrones del orbital  $2p$  son:  $n = 2$  y  $l = 1$  para los tres;  $m_l = -1$ ,  $m_l = 1$  y  $m_l = 0$  para cada uno de ellos y  $m_s = \frac{1}{2}$  para los tres.

También pueden representarse las combinaciones de números cuánticos de cada electrón de la forma:  $(1, 0, 0, \frac{1}{2})$ ,  $(1, 0, 0, -\frac{1}{2})$ ,  $(2, 0, 0, \frac{1}{2})$ ,  $(2, 0, 0, -\frac{1}{2})$ ,  $(2, 1, -1, \frac{1}{2})$ ,  $(2, 1, 1, \frac{1}{2})$ ,  $(2, 1, 0, \frac{1}{2})$ .

**CUESTIÓN 2.- Cuando la reacción  $A + B \rightarrow C + D$  se realiza con cantidades estequiométricas de reactivos y a  $25^\circ\text{C}$ , es ligeramente exotérmica ( $\Delta H = -10,0 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ), su  $K_c = 2,60$  y la velocidad, medida experimentalmente,  $3,60 \cdot 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ .**

- Si la reacción se repite en las mismas condiciones, pero en presencia de un catalizador ¿qué magnitudes variarán respecto a las del primer experimento?**
- ¿Cómo actúa un catalizador positivo?**

Solución:

a) Un catalizador es una sustancia que no se consume durante la reacción química y actúa modificando el valor de la velocidad de reacción. Ello se debe a que al modificar el valor de la energía de activación, modifica el valor de la constante cinética y, por ello, el de la velocidad de reacción. Las otras magnitudes, la variable termodinámica entalpía,  $\Delta H$ , y la constante de equilibrio  $K_c$  quedan inalteradas.

b) Si el catalizador es positivo disminuye el valor de la energía de activación,  $E_a$ , (energía que deben absorber las moléculas de reactivos para poder formar el complejo activado). Luego, si se analiza la ecuación de Arrhenius, se observa que al ser  $k = A \cdot e^{\frac{-E_a}{RT}}$ , si disminuye  $E_a$ , manteniendo constante la temperatura, aumenta la potencia y, en consecuencia aumenta el valor de la constante de velocidad,  $k$ , lo que provoca que la velocidad de reacción también aumente.

**PROBLEMA 2.- En un recipiente cerrado de 2 L se introducen 0,4 moles de dióxido de carbono,  $\text{CO}_2$ , y 0,6 moles de hidrógeno. Se calienta el recipiente a  $1.500^\circ\text{C}$ , estableciéndose el equilibrio:**



**Se analiza el contenido en dióxido de carbono y resulta ser de 6,16 g.**

- Calcula el valor de  $K_c$  a esa temperatura.**
- Calcula la presión final en el recipiente.**

**DATOS:  $A_r(\text{C}) = 12 \text{ u}$ ;  $A_r(\text{O}) = 16 \text{ u}$ ;  $R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ .**

Solución:

a) Los moles de dióxido de carbono que quedan en el reactor, cuando se alcanza el equilibrio, se obtienen aplicando a su masa los correspondientes factores de conversión:

$$6,16 \text{ g } \text{CO}_2 \cdot \frac{1 \text{ mol } \text{CO}_2}{44 \text{ g } \text{CO}_2} = 0,14 \text{ moles } \text{CO}_2, \text{ deduciéndose, que si se introdujeron inicialmente en}$$

el reactor 0,4 moles, han reaccionado  $0,4 - 0,14 = 0,26$  moles de  $\text{CO}_2$  para transformarse en 0,26 moles de monóxido de carbono,  $\text{CO}$ , y 0,26 moles de agua,  $\text{H}_2\text{O}$ . Por transcurrir la reacción mol a mol, también han reaccionado 0,26 moles de  $\text{H}_2$ , quedando en el reactor de este reactivo  $0,6 - 0,26 = 0,34$  moles. En resumen, los moles de cada sustancia al inicio y en el equilibrio son:

	$\text{CO}_2(\text{g})$	$+$	$\text{H}_2(\text{g})$	$\rightleftharpoons$	$\text{CO}(\text{g})$	$+$	$\text{H}_2\text{O}(\text{g})$
Moles iniciales:	0,4		0,6		0		0
Moles en el equilibrio:	$0,4 - x$		$0,6 - x$		$x$		$x$
	0,14		0,34		0,26		0,26

Conocido el volumen del reactor, las concentraciones de las sustancias en el equilibrio son:

$$[\text{CO}_2] = \frac{0,14 \text{ moles}}{2 \text{ L}} = 0,07 \text{ M}; \quad [\text{H}_2] = \frac{0,34 \text{ moles}}{2 \text{ L}} = 0,17 \text{ M}; \quad [\text{CO}] = [\text{H}_2\text{O}] = \frac{0,26 \text{ moles}}{2 \text{ L}} = 0,13 \text{ M},$$

que llevadas a la constante de equilibrio  $K_c$  y operando se obtiene su valor:

$$K_c = \frac{[\text{CO}] \cdot [\text{H}_2\text{O}]}{[\text{CO}_2] \cdot [\text{H}_2]} = \frac{0,13 \text{ M} \cdot 0,13 \text{ M}}{0,07 \text{ M} \cdot 0,17 \text{ M}} = 1,42.$$

b) Los moles totales en el equilibrio son  $n_t = 0,14 + 0,34 + 0,26 + 0,26 = 1 \text{ mol}$ , que llevado a la ecuación de las gases ideales, despejando la presión, sustituyendo las variables por sus valores y operando sale el valor:

$$P \cdot V = n_t \cdot R \cdot T \Rightarrow P = \frac{n_t \cdot R \cdot T}{V} = \frac{1 \text{ mol} \cdot 0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 1.773 \text{ K}}{2 \text{ L}} = 72,69 \text{ atm}.$$

**Resultado: a)  $K_c = 1,42$ ; b)  $P = 72,69 \text{ atm}$ .**