

PAUTA P2. CONTROL 3

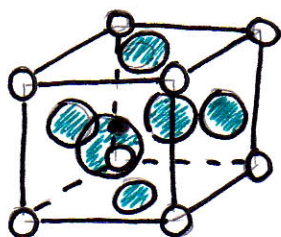
QI 21-A prof: Ricardo Letelier

- a)
- | |
|---|
| Nº de átomos de Itrio en la celda = 1 |
| Nº " " " Bario " " " = 2 |
| Nº " " " Cobre " " " = $(8 \times \frac{1}{8} + 8 \times \frac{1}{4}) = 3$ |
| Nº " " " Oxígeno " " " = $(12 \times \frac{1}{4} + 8 \times \frac{1}{2}) = 7$ |

∴ la fórmula mínima es: $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_7$

(2 pts)
(total)

b)

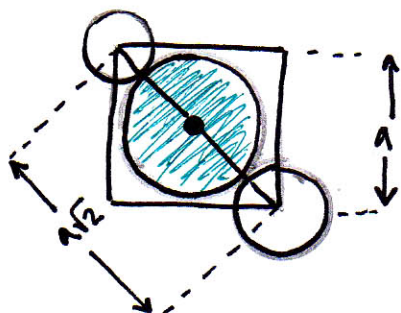


- → 1 átomo de Ti P.A(O) = 15,999
- → 8 átomos de Ca P.A(Ca) = 40,08
- (blue) → 6 átomos de O P.A(Ti) = 47,90

Radio atómico Ca = 1,14 Å
" " O = 1,26 Å

i)

En una cara se tiene:



$$\Rightarrow 2a^2 = [2(r_o + r_{ca})]^2$$

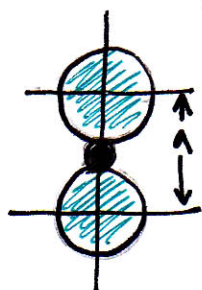
$$a = \sqrt{\frac{4(r_o + r_{ca})^2}{2}} = \sqrt{2}(r_o + r_{ca})$$

$$\sqrt{2}(1,26 + 1,14)$$

$$a = 3,394 \text{ Å}$$

(1 pto)

Mirando eje O-Ti-O
(vertical)



$$\Rightarrow a = 2r_{Ti} + 2r_o$$

$$r_{Ti} = \frac{a}{2} - r_o = 0,437 \text{ Å}$$

(1 pto)

$$1,697 - 1,26 = 0,437$$

ii) calculamos la densidad de la PEROSKOVITA (CaTiO_3)

$$\rho = \frac{P.A_{\text{Ca}} + P.A_{\text{Ti}} + 3P.A_{\text{O}}}{N_A \cdot a^3}$$

$$\rho = \frac{(40,08 + 47,9 + 3 \times 16)}{6,022 \times 10^{23} (3,794)^3 \times 10^{-24}} = 5,78 \text{ [g/cm}^3\text{]}$$

(1 pto)

iii) calculamos la eficiencia del empaquetamiento del cristal

$$\text{eff} = \eta = \frac{\frac{4}{3}\pi (r_{\text{Ca}}^3 + r_{\text{Ti}}^3 + 3r_{\text{O}}^3)}{a^3}$$

$$\eta = \frac{4}{3}\pi \left[\frac{(1,14)^3 + 3(1,26)^3 + (0,437)^3}{(3,394)^3} \right]$$

$$\eta = 0,810$$

(1 pto)

por lo tanto, existe una eficiencia del 81%, en el empaquetamiento del cristal de Perovskita.

total(6) 4 pto