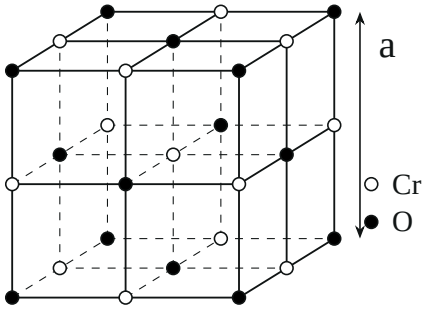
Плотность оксида хрома

Задача 5. [Курчатов 2022/23, 7 класс, задача 5] Элементарная ячейка оксида хрома(II) (CrO) представляет собой куб с длиной ребра $a = 4{,}45 \cdot 10^{-10}$ м, изображённый на рисунке. Чёрные кружки на рисунке обозначают положение атомов кислорода, а белые — атомов хрома. Весь кристалл оксида хрома(II) является повторением таких элементарных ячеек. Относительная атомная масса кислорода $m_{r\mathrm{O}} = 16$ а. е. м., хрома $m_{r\mathrm{Cr}} = 24$ а. е. м., где а. е. м. — атомная единица массы. Найдите плотность оксида хрома(II), если масса атома водорода $m_{\mathrm{H}} = 1{,}67 \cdot 10^{-27}$ кг, а относительную массу атома водорода принято считать равной 1 а. е. м.



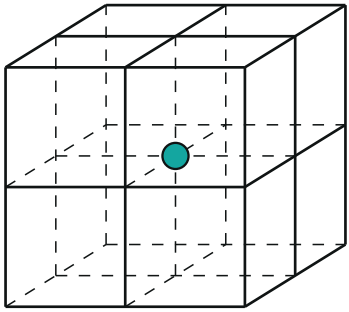
▲ **Решение. Что происходит.** Это задача на плотность через строение кристалла. Кристалл — повторение одинаковых ячеек, поэтому его плотность равна плотности одной ячейки: масса атомов, *принадлежащих* ячейке, делённая на её объём a^3. Главная тонкость — атомы на вершинах, рёбрах и гранях принадлежат сразу нескольким ячейкам, и каждой достаётся только доля атома.

Обозначения. N_{Cr}, N_{O} — число атомов хрома и кислорода, приходящихся на одну ячейку; $m_{\text{я}}$ — масса ячейки; ρ — плотность.

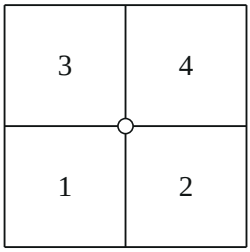
1. Где стоят атомы. По рисунку условия: кислород (чёрные) — в 8 вершинах куба и в центрах 6 граней; хром (белые) — в серединах 12 рёбер и 1 в центре куба.

2. Какая доля атома достаётся ячейке. Сколько ячеек сходится в точке, на столько частей и делится атом:

- вершина — общая для 8 ячеек (рисунок 2): доля $\frac{1}{8}$;
- середина ребра — общая для 4 ячеек (рисунок 3): доля $\frac{1}{4}$;
- центр грани — общий для 2 ячеек (рисунок 4): доля $\frac{1}{2}$;
- центр куба принадлежит только этой ячейке: доля 1.

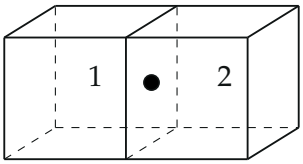


Атом в вершине ячейки (бирюзовый) — общая вершина восьми соседних ячеек: каждой достаётся $\frac{1}{8}$ атома.



ребро перпендикулярно рисунку

Вид вдоль ребра: четыре ячейки (номера в квадратах) сходятся на одном ребре. Атом хрома в середине ребра (белый) делится между ними — каждой $\frac{1}{4}$.



Атом на грани (чёрный, кислород) лежит на общей грани двух ячеек (1 и 2) — каждой $\frac{1}{2}$.

3. Атомы на ячейку.

$$N_{\text{O}} = 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 1 + 3 = 4, \qquad N_{\text{Cr}} = 12 \cdot \frac{1}{4} + 1 \cdot 1 = 3 + 1 = 4.$$

Атомов хрома и кислорода поровну, как и требует формула CrO — хорошая проверка подсчёта.

4. Масса ячейки. Масса атома равна его относительной массе, умноженной на массу 1 а. е. м.; по условию это масса атома водорода m_{H}:

$$m_{\text{я}} = N_{\text{Cr}}\, m_{r\text{Cr}}\, m_{\text{H}} + N_{\text{O}}\, m_{r\text{O}}\, m_{\text{H}} = 4\,(m_{r\text{Cr}} + m_{r\text{O}})\, m_{\text{H}} = \\ = 4 \cdot 40 \cdot 1{,}67 \cdot 10^{-27}\ \text{кг} \approx 2{,}67 \cdot 10^{-25}\ \text{кг}.$$

5. Плотность. Ячейки заполняют кристалл без промежутков, поэтому

$$\rho = \frac{m_{\text{я}}}{a^3} = \frac{4\, m_{\text{H}}\,(m_{r\text{Cr}} + m_{r\text{O}})}{a^3} = \frac{2{,}672 \cdot 10^{-25}}{(4{,}45 \cdot 10^{-10})^3}\ \frac{\text{кг}}{\text{м}^3} \approx 3{,}03 \cdot 10^3\ \text{кг/м}^3.$$

Обратите внимание. Если просто пересчитать кружки на рисунке (14 чёрных и 13 белых), масса ячейки выйдет больше почти в 3,5 раза. Атомы на поверхности ячейки — общие с соседями, и их надо делить.

Проверка. Размерность: $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$. Второй способ подсчёта: на ячейку приходится 4 «молекулы» CrO — столько же, сколько у ячейки поваренной соли такого же строения, 4 формульные единицы. Порядок величины: плотность в несколько тысяч кг/м^3, как у твёрдых тел. В условии масса хрома взята 24; с настоящей относительной массой хрома 52 та же формула дала бы около $5{,}2 \cdot 10^3$ кг/м^3.

Смысл: плотность кристалла определяется тем, сколько вещества приходится на одну ячейку и как она мала: 4 пары атомов в кубике со стороной меньше нанометра дают около 3000 кг/м^3.

Ответ. $\rho = \dfrac{4\, m_{\text{H}}\,(m_{r\text{Cr}} + m_{r\text{O}})}{a^3} \approx 3032\ \text{кг/м}^3.$