

ФИЗИКА МАТЕМАТИКА ИЛИМДЕРИ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
PHYSICO-MATHEMATICAL SCIENCE

Абдыбалиев Д.А., Ибраимова К.Б., Мураталиева А.Р., Тургунбаев Н.А.

**ИЗУЧЕНИЕ КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКОГО И КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОГО
СТРОЕНИЯ НЕКОТОРЫХ КАРБАМИДНЫХ СОЛЕЙ МЕДИ**

D.A. Abdybaliev, K.B. Ibraimova, A.R. Muratalieva, N.A. Turgunbaev

**THE STUDY OF CRYSTALL-CHEMICAL AND CRYSTALLOGRAPHIC
STRUCTURE OF CARBAMIDE SALTS OF COPPER**

УДК: 548.3: 544.228 (04)

Бул макалада жез менен карбамиддин өз ара химиялык кошулмаларынан алынган кээ бир туздарынын кристаллдык жана кристаллографиялык түзүлүшү курамы каралган. Элементардык чөйчөкчөлөрүнүн чоңдуктары: a , b , c , α , β , γ жана көлөмү V аныкталып, алардын молекулаларынын узундуктары эсептелинген.

Негизги сөздөр: карбамид, жездин туздары, кристалл, кристаллография, элементардык (уяча) чөйчөкчө.

В данной статье изучены кристаллохимическое и кристаллографическое строения некоторых солей карбамида меди. Определены параметры элементарной ячейки: a , b , c , α , β , γ и объемы V , а также количество молекулы содержащей в элементарной ячейке.

Ключевые слова: карбамид, соли меди, строение, кристаллография, структура, элементарная ячейка.

The crystal-chemical and crystallographic structure of some carbamide salts of copper was studied in this article. The parameter of an elementary cell: a , b , c , α , β , γ and volume was defined, with the number of molecule contained in an elementary cell.

Key words: carbamide, copper, volume, cell, molecule, crystal.

Работа выполненной авторами [1,2] имеют как теоретический, так и практический интерес, т.е. соединение карбамида с медью являются физиологически активными веществами [3].

Экспериментальные данные значения относительных интенсивностей I/I_0 и межплоскостные расстояния d_{hkl} является исходным объектом для дальнейшего изучения.

Целью настоящей статьи является определения и установления кристаллографических и кристаллохимических параметров элементарной ячейки.

Для этих целей можно использовать следующие комбинированные уравнения авторами [4-7]:

$$\sin^2\theta_{hkl} = Ah^2 + Bk^2 + Cl^2, \dots \quad (1)$$

где $A = (\lambda^2/4a^2)\sin^2\beta = \sin^2\theta_{100}, \dots \quad (2)$

$$B = \lambda^2/4b^2 = \sin^2\theta_{010}, \dots \quad (3)$$

$$C = (\lambda^2/4c^2)\sin^2\beta = \sin^2\theta_{001}, \dots \quad (4)$$

где λ – длина волны рентгеновского излучения; h , k , l – индексы плоскостей; a, b, c – параметры элементарной ячейки.

Отсюда из уравнения (2), (3) и (4)

$$Ah^2 = \sin^2\theta_{h00}, Bk^2 = \sin^2\theta_{0k0}, Cl^2 = \sin^2\theta_{00l}.$$

Тогда, можно написать следующие уравнения:

$$\sin^2\theta_{hkl} = \sin^2\theta_{h00} + \sin^2\theta_{0k0} + \sin^2\theta_{00l} \dots \quad (5)$$

Таким образом, используя различные методы и приемы идентификации рентгенограмм как ромбических [5,6], так и моноклинных кристаллах [5] можно найти величины: $\sin^2\theta_{100}$, $\sin^2\theta_{010}$ и $\sin^2\theta_{001}$, а затем, используя уравнения (2), (3) и (4), проиндексировать миллеровских рефлексов $hk0$ и $0kl$ путем сравнения вычисленных и экспериментально [2] полученных $\sin^2\theta$.

В результате, нами получены для данных соединений величины: a , b , c , α , β , γ и вычислены объемы элементарной ячейки моноклинной сингонии кристаллической решетки.

Угол $\sin \beta$, можно определить используя смешанных величин Миллеровских индексов: h_1, k_1, l_1 и h_2, k_2, l_2 .

Применив, методы и способы начертательной геометрии [8,9] построены формы пространственного изображения элементарной ячейки Вегнера-Зейтинца, где показано на рис.1.

Следовательно, все значения величины: a , b , c , α , β , γ и другие параметры нанесены на таблице 1. Как видно из таблицы, линейные размеры молекулы изменяется от $1,587 \cdot 10^{-12}$ см до $0,915 \cdot 10^{-12}$ см, а также диаметры молекулы от $0,505 \cdot 10^{-12}$ см до $0,291 \cdot 10^{-12}$ см.

Вычислены объемы элементарной ячейки и количество молекул содержащегося в элементарной ячейке.

Таблица 1.

Кристаллические и кристаллографические параметры некоторых соединений карбамидов меди

Наименование соединений	$\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CO} \cdot \text{H}_2\text{O}$	$\text{CuHPO}_4(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CO}$	$(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CO}$
1. Молекулярный вес, M , а.е.м.	241,68	220,12	42,03
2. Молекулярный объем, V_m , см ³ /моль	151,05	95,70	55,03
3. Удельный вес, ρ , г/см ³	1,6	2,3	0,76
4. Удельный объем, V_y , см ³ /г	0,62	0,43	1,31
5. Значение позиционных координатов, в Å			
a	10,3000	12,3564	4,23
b	8,2293	4,7014	3,56
c	7,4796	10,5486	3,73
6. Соотношение позиционных координатов			
c/a	0,726	0,854	0,882
c/b	0,909	2,244	1,048
7. Углы между гранями, в градусах,			
α	90	90	90
β	71,30	79,24	78,13
γ	90	90	90
8. Количество формульных единиц	26	18	5
9. Масса одной молекулы, m , $\cdot 10^{-29}$ г	40,15	36,56	7,026
10. Линейные размеры, L , $\cdot 10^{-12}$ см	1,587	1,541	0,915
11. Объем элементарной ячейки, V , $\cdot 10^{-36}$ см ³	601,69	602,34	56,17
12. Количество молекулы, Z	3	2	6
13. Диаметры молекул, D , $\cdot 10^{-12}$ см	0,505	0,491	0,291
14. Радиусы молекул, r , $\cdot 10^{-12}$ см	0,252	0,245	0,145
15. Относительные ошибки, в %	0,002	0,01	0,045

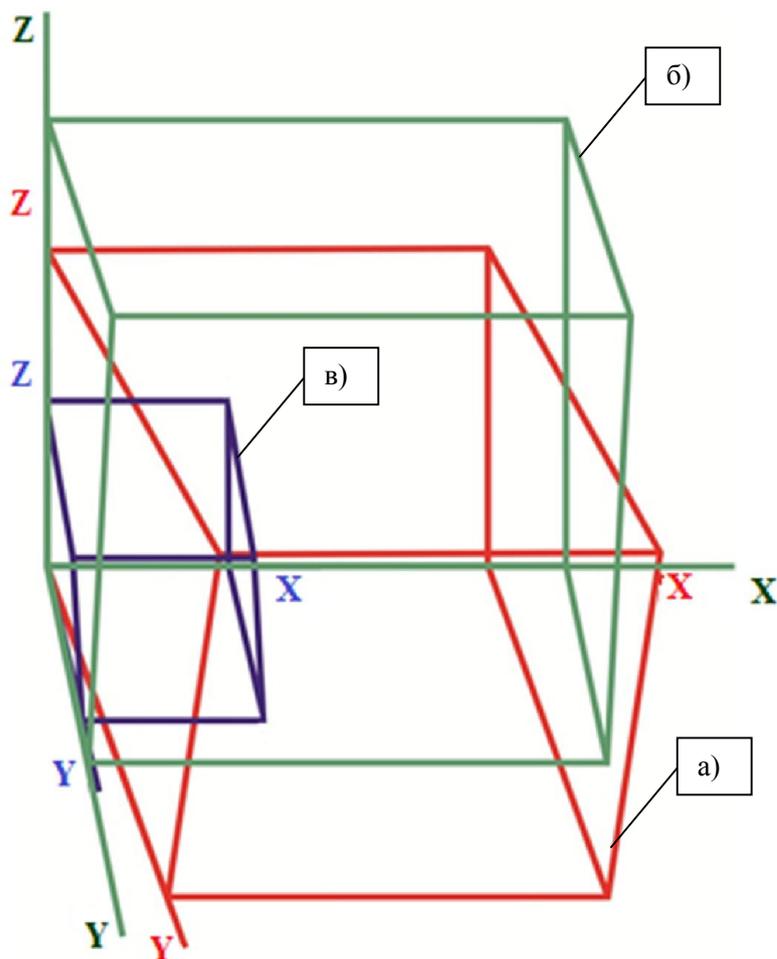


Рис. 1. Формы и типы пространственного изображения некоторых карбамидных солей меди.

а) $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CO} \cdot \text{H}_2\text{O}$ б) $\text{CuHPO}_4(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CO}$ в) $(\text{NH}_2) \cdot \text{CO}$

Вывод.

1. Определены параметры элементарной ячейки: a , b , c , α , β , γ и объемы V .
2. Вычислены: длина и диаметры молекул, а также количество атомов содержащегося в элементарной ячейке.
3. Результаты могут быть использованы при проведении практических занятий по физике твердого тела.

Литература:

1. Хлапкова А.Н., Кузнецов В.Г. Рентгенографический качественный анализ котельных накипей. – М.: Наука, 1952.
2. Акбаев А.А. Взаимодействие солей тяжелых металлов с азотосодержащими соединениями и физактивных веществ. – Фрунзе: Илим, 1984. – С. 470.
3. Акбаев А.А. и др. Способ получения карбамидного комплекса ацетата меди. Авт. свидетельство СССР №316333. – 1969.
4. Липсон Г., Кокрен В. Определение структуры кристаллов. – ИЛ. – 1956.
5. Lipson H. Acta Cryst. 2. 43. (1949).
6. Липсон Г., Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм // Пер. с англ. Е.Н. Беловой и Г.П. Литвинской. Под ред. академика Н.В. Белова. – М: Мир, 1972. – С. 384.
7. Миркин Л.И. Справочник по рентгеноструктурному анализу полукристаллов // Под ред. проф. Я.С. Уманского. Изд-во физмат. лит. – М., 1961. – С. 860.
8. Абдыбалиев Д.А. и др. Исследование кристаллической структуры и строения некоторых соединений магния и кальция с биуретом. Журнал «Наука и новые технологии». – Бишкек, 2015. – № 4.
9. Абдыбалиев Д.А., Такенеев К.Т., Касымалиев Б.К. Начертательная геометрия с основами инженерной графики. – Бишкек, 2013. – С. 30.

Рецензент: д.т.н., профессор Татыбеков А.Т.