

Абдыбалиев Д.А., Ибраимова К.Б., Тынышова А.М., Мураталиева А.Р.

ИЗУЧЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И СТРОЕНИЯ ФЕНИЛАМИНА И ТИОДИФЕНИЛАМИНА СУЛЬФАТА И ХЛОРИДА МЕДИ

Абдыбалиев Д.А., Ибраимова К.Б., Тынышова А.М., Мураталиева А.Р.

ЖЕЗДИН СУЛЬФАТЫ ЖАНА ХЛОРИДДЕРИНИН ФЕНИЛ-ТИО-ДИФЕНИЛАМИНДЕРИНИН ТАТААЛ КУЙМАЛАРЫНАН АЛЫНГАН ХИМИЯЛЫК ТУЗДАРЫНЫН КРИСТАЛЛДЫК ТҮЗҮЛҮШ КУРАМЫН ОКУП ҮЙРӨНҮҮ

D.A. Abdybaliev, K.B. Ibraimova, A.M. Tynyshova, A.R. Muratalieva

THE STUDY OF THE CRYSTAL STRUCTURE AND ITS PHENYL AMINE AND TIODIPHENYL SULFATE AND CHLORIDE COPPER

УДК: 548.3:678.048.212:541.6(04)

Впервые определены кристаллические и кристаллографические параметры элементарной ячейки: $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ и V фениламина и тиодифениламина сульфата и хлорида меди.

Вычислены линейные размеры и диаметры молекулы, а также количество молекул содержащейся в ячейке.

Ключевые слова: кристаллические параметры, кристаллографические параметры, молекулы.

Бул макалада фениламин жана тиодифениламиндин жез хлориди менен сульфатынан алынган татаал химиялык куймаларынын жөнөкөй уячаларынын чоңдуктары: $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ аныкталган.

Кристалл торчолорундагы молекуланын узундугу жана диаметри, ошондой эле ээлеген көлөмү өлчөнгөн.

Негизги сөздөр: кристаллдык параметрлер, кристаллографиялык параметрлер, молекулалар.

First the crystal and the crystallographic unit cell parameters: $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ and V phenylamine and thiodiphenylamine sulfate and copper chloride. The calculated linear dimensions and diameters of molecules and the number of molecules contained in the cell.

Key words: crystal parameters, crystallographic parameters of the molecule.

Для рентгенографического исследование твердые фазы тщательно отделялись от маточного раствора. После чего подвергались сушки в сушильном шкафу при температуре (30°-40°С). Далее образцы измельчались на агатовой ступке до получение мелкого состояния.

После исследуемые пробы смешивались специальным клеем в соотношении 1:10, а затем набивались на кварцевую кюветы.

Готовые образцы устанавливается держатели гониометрические головки прибора. Таким образом, дифрактограммы были сняты на рентгеновском аппарате УРС-50 ИМ на медном излучении ($\lambda_{\text{ср}}=1,54178 \text{ \AA}$) с никелевым фильтром при режиме работы: $J=25 \text{ mA}$, $V=60 \text{ kV}$.

Исследуемые образцы были выполнены в рентгеновской лаборатории Всесоюзного института удобрений им. Я.В. Самойлова, г. Москва [1,2].

Полученные дифрактограммы исследуемых образцов, вычисляем и получим значение J/J_0 – относительные интенсивностей линии и d_0/n межплоскост-

ное расстояние [6,7,8]. Эти экспериментальные значения величины: J/J_0 и d_0/n в Å является исходным объектом для дальнейшего продолжения к исследованию.

Целью настоящей статьи является определение кристаллографических и кристаллохимических параметров: a, b, c, α, β и γ элементарной ячейки Вегнера-Зейтца[3,4] кристаллической решетки, а также установить формы и типы пространственного изображения элементарной ячейки кристаллической системы.

Для определение (или установление) параметров элементарной ячейки кристаллической решетки существует как аналитической, так и графические методы исследования [5,6].

Проводим некоторые поисковые вычисления, после чего можно предполагать, что вышеназванные соединения могут быть кристаллические системы типа ромбической или скорее всего моноклинной системы, т.е. вычисление проводится по формуле [6,7].

$$\sin^2 \Theta_{hkl} = \frac{\lambda^2}{4} \cdot \frac{\frac{h^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2hlc \cos \beta}{ac}}{\sin^2 \beta}, \dots \quad (1)$$

где h, k, l – индексы плоскостей, a, b, c – длина ребра элементарной ячейки, β – угол между ребрами a и c .

Уравнение (1) упрощается, если ромбической и моноклинной системы считать в какой-то мере близки по строению и составу аналитической формы. Поскольку в моноклинной системе ось « b » перпендикулярно плоскости в которой лежит ребра « b », a и c тогда можно пользоваться методом Липсона [6,7] для индцирования моноклинных рефлексов hko и okl .

Для отражения при $l=0$ имеем:

$$\sin^2 \Theta_{hko} = Ah^2 + Bk^2, \dots \quad (2)$$

где

$$A = \frac{\lambda^2}{4a^2} \cdot \sin^2 \beta = \sin^2 \Theta_{100} \quad \text{и} \quad B = \frac{\lambda^2}{4b^2} = \sin^2 \Theta_{010}$$

Аналогично

$$\sin^2 \Theta_{okl} = Bk^2 + Cl^2 \dots \quad (3)$$

где

$$C = \frac{\lambda^2}{4c^2} \cdot \sin^2 \beta = \sin^2 \theta_{001}$$

Из формулы (2) имеем

$$\sin^2 \theta_{hko} = \sin^2 \theta_{h00} + \sin^2 \theta_{ok0}$$

Точно так же из (3) следует

$$\sin^2 \theta_{okl} = \sin^2 \theta_{ok0} + \sin^2 \theta_{00l}$$

Таким образом, используя приемы и методы, также способы расшифровки порошковых ромбических кристаллов [7-10], можно и для моноклинных кристаллах, найти величины $\sin^2 \theta_{100}$, $\sin^2 \theta_{010}$ и $\sin^2 \theta_{001}$, а затем используя уравнение (1), (2) и (3), можно проиндцировать hko и okl путем сравнения вычисленных и экспериментально полученных величин $\sin^2 \theta$.

Параметр «в» определяется из уравнения:

$$\sin^2 \theta_{010} = \frac{\lambda^2}{4a^2} \dots \quad (4)$$

Таким образом полученные параметры элементарной ячейки ($a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ и V) приведены на табл.1. Кроме того определены длины и диаметры молекулы, а также количество молекулы содержащейся в элементарной ячейке. Построены формы пространственного изображения элементарной ячейки фениламина и тиодифениламина сульфата и хлорида меди (рис.1).

Кристаллографические параметры элементарной ячейки кристаллической решетки фенил амина и тио дифениламина сульфата и хлорида меди.

№	Название соединения		CuCl ₂ ·2(C ₆ H ₅) ₂ ·NH	Cu ₂ SO ₄ ·3(NH ₂) ₂ ·CS·5H ₂ O	CuCl ₂ ·2(C ₆ H ₅) ₂ ·NH ₂	CuCl ₂ ·2S(C ₆ H ₅) ₂ ·NH
	Элементы кристаллической решетки					
1	Молекулярный вес, М, кг/кмоль		457,74	453,46	316,68	231,35
2	Удельный вес, ρ, кг/м ³		9,02	0,985	0,32	1,79
3	Молекулярный объем, V _m , кг ³ /кмоль		50,75	460,36	98,96	129,24
4	Удельный объем, V _y , м ³ /кг		0,111	1,176	3,125	0,559
5	Позиционные координаты, в Å	a	5,3558	9,6832	5,4617	9,6550
		b	2,5607	6,2531	2,5666	3,7128
		c	3,7442	7,7367	3,5768	5,6675
6	Углы между гранями, в градусах	α	90	90	90	90
		β	81,2	79,1	70,2	71,3
		γ	90	90	90	90
7	Количество формульных единиц		50	46	49	42
8	Объем элементарной ячейки, V, м ³		81,34	459,9	57,72	382,65
9	Количество молекул в ячейке, Z		1	6	3	2
10	Масса одной молекулы, m, 10 ⁻²⁷ кг		7,59	7,51	5,35	3,54
11	Линейные размеры, L, Å		1,965	1,958	3,361	1,538

12	Диаметры молекулы, D, Å · 10 ⁻¹⁰		0,62	0,62	0,43	0,49
13	Соотношение величины	c/a	0,69	0,79	0,65	0,59
		c/b	1,46	1,24	1,39	1,53
14	Относительные ошибки, в %		0,001	0,003	0,05	0,07

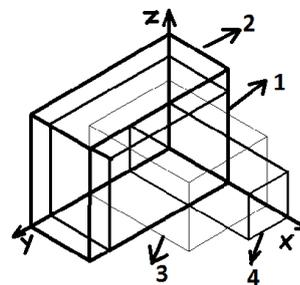


Рис. 1. Формы пространственного изображения элементарной ячейки фениламина и тиодифениламина сульфата и хлорида меди кристаллической решетки моноклинной системы:

1. CuCl₂·2(C₆H₅)₂·NH
2. CuCl₂·2S(C₆H₄)₂·NH
3. CuCl₂·2(C₆H₅)₂·NH₂
4. Cu₂SO₄·3(NH₂)₂·CS·5H₂O

Вывод

1. Впервые определены параметры элементарной ячейки фениламина и тиодифениламина хлорида и сульфата меди.
2. Вычислены длины и диаметры молекулы, а также количество молекулы содержащий в элементарной ячейки.
3. Результаты могут быть использованы при проведении практических занятиях по физике твердого тела.

Литература:

1. Хлопкова А.Н., Кузнецов В.Г., Рентгенографический качественный фазовый анализ котельных накипей. - М.: Наука - 1952.
2. Акбаев А.А., Взаимодействие солей тяжелых металлов с азотосодержащими соединениями и физактивных веществ. - Фрунзе - И «Илим» - 1984 - 498 с. - илл.
3. Китайгеродский А.И., Рентгеноструктурный анализ мелкокристаллических и аморфных тел. - М.- Л. - 1952.
4. Мильбурн Г., Рентгеновская кристаллография. - М.: Мир. - 1975. - 256 с.
5. Бургер М.Д., Рентгеновская кристаллография //Пер. с англ. В.П. Тарасовой и М.П. Шаскольской. - М. - Издательство ИНЛИТ. - 1948. - 484 с.
6. Миркин Л.И., Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов - М. - Физматиздат - 1961. - 863 с.
7. Порай - Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений. - М. - Высш. шк.- 1982. - 151 с.
8. Липсон Г., Стипл Г., Интерпретация порошковых рентгенограмм // Пер. с англ. Е.Н.Беловой и Е.П.Литвинской - М. - Мир. - 1972. - 384 с. - илл.
9. Абдыбалиев Д.А., Взаимодействие анилина с молибденовой, сульфаминовой и некоторыми карбоновыми кислотами. - Ташкент. - 1991. - 190 с. - илл.
10. Абдыбалиева Д., Ибраимова К.Б. Определение кристаллографических параметров соединений нитрат гадолиния с биуретом. Вестник КГУ им. И.Арабаева, №2, 2015.- с.275-277.

Рецензент: к.ф.м.н., доцент Байтерек А.Т.