

*Абдыбалиев Д.А., Абдыбалиев Т.Д., Кочоков С.К.*

**ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И СТРОЕНИЯ НЕКОТОРЫХ СОЕДИНЕНИЙ МАГНИЯ И КАЛЬЦИЯ С БИУРЕТОМ**

*Абдыбалиев Д.А., Абдыбалиев Т.Д., Кочоков С.К.*

**МАГНИЙ ЖАНА КАЛЬЦИЙДИН БИУРЕТ МЕНЕН БОЛГОН КОШУЛМАЛАРЫНЫН КРИСТАЛЛДЫК ТҮЗҮЛҮШ КУРАМЫН ОКУП ҮЙРӨНҮҮ**

*D.A. Abdybaliev, T.D. Abdybaliev, S.K. Kochokov*

**STUDY-CRYSTAL STRUCTURE AND BUILDING SOME CALCIUM AND MAGNUM COMPOUNDS WITH BURIED**

УДК: 548:034.721:546.41:542.495.5(04)

V = 70к В, J = 40 мА.

В данной статье изучена кристаллическая структура и строение некоторых соединений магния и кальция с биуретом.

Установлены кристаллографические параметры элементарной ячейки кристаллической решетки:  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ , и вычислены объемы  $V$ .

**Ключевые слова:** кристалл, структура, строение, вычисление, магний, кальций.

Бул макалада магний менен кальцийдин нитраттар жана тиоциониттеринин биурет менен болгон татаал химиялык кошулмаларынын түзүлүш курамы жана жөнөкөй уячаларынын өлчөмдөрү:  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$  жана көлөмү  $V$  аныкталган.

**Негизги сөздөр:** кристалл, түзүм, курулуш, вычисление, магний, кальций.

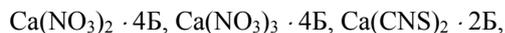
The paper studies crystal structure and building of same calcium and magnum compounds with buried.

Established crystallographic unit cell parameters – crystal latte:  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$  and calculate the volume  $V$ .

**Key words:** crystal, structure, structure, computation, magnesium, calcium.

Жөнөкөй уячалардын мейкиндиктеги көрүнүш тузуму менен анын ичиндеги молекулаларынын саны эсептелип чыгарылган.

Изучен процесс химического взаимодействия соединения магния и кальция в системах, состоящих с биуретом в водных растворах классическим методом физико-химического анализа {1}. В результате с установлением концентрационных пределов равновесных растворов, получены новые комплексные соединения:



Целью настоящей статьи является исследование кристаллической структуры и строения соединений кальция и магния с биуретом.

Мелко растертые исследуемые образцы, специально приготовленные клеём набиваются в кюветы из органического стекла и устанавливают на рентгеновскую аппаратуру ДРОН-1,5 на медном излучении Ni-евым фильтром.

Съёмка проводится при режиме работы:

Регистрация дифрактограммы производится с помощью самопишущего прибора ЭП-09 М на бумажной ленте. Расчет дифрактограммы производится измерительной линейкой. Интенсивность  $J/J_0$  оценивается по сто или десяти бальной шкале, а расстояние между атомными плоскостями  $d_\alpha / n b \text{ \AA}$ , измеряются с точностью порядка  $\pm 0,01 \text{ \AA}$  (2,3).

Таким образом, имеем относительные интенсивность дифракционных линий  $J/J_0$  и межплоскостные расстояния  $d_\alpha / n b \text{ \AA}$ . Именно эти величины являются объектом для дальнейшего изучения строения и структуры кальциевых и магниевых соединений.

Вычисление углов  $\theta$  рекомендуется заменить вычислением значений  $\sin^2 \theta [4,5,6]$  ибо  $\sin^2 \theta_{nhl}$  связаны с индексами:  $h, k, l$  наиболее простой зависимостью для кубической, тетрагональной и гексагональной системы. Для этих систем вычисляется и сравнивается с экспериментальными данными  $\sin \theta_{nhl}$ .

Предварительные расчеты показывают, что исследуемые соединения кальция и магния принадлежат к ромбической или моноклинной системе и они близки к ромбической, так как для моноклинной и особенно триклинной системе уравнения имеющей  $\sin^2 \theta_{nhl}$ , выраженные в параметрах прямой решетки, очень сложны, поэтому для индицирования моноклинной системе берем следующие формулы:

$$\sin^2 \theta_{nhl} = \frac{\lambda^2}{4} \cdot \frac{\frac{h^2}{a^2} + \frac{t^2}{c^2} - \frac{2hl \cos \beta}{a \cdot c} + k^2 / b^2}{\sin^2 \beta}, \quad (1)$$

где ребро « $b$ » перпендикулярно плоскости, в которой лежат ребра,  $a$  и  $c$ ,  $\alpha \beta$  – угол между,  $a$  и  $c$ .

Пользуясь этими уравнениями, можно сравнить экспериментальные вычисленные значения  $\sin^2 \theta$ , но эта процедура исключительно

трудоёмка. Поэтому в качестве примера к моноклинному кристаллу и отражениям от него, для которых  $l = 0$  и берем выражения

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

где  $A = \frac{\lambda^2}{4a^2} \cdot \sin^2 \beta = \sin^2 \theta_{100}$  и

$$B = \frac{\lambda^2}{4\hat{a}^2} = \sin^2 \theta_{010}$$

Аналогично  $\sin^2 \theta_{okl} = Bk^2 + Cl^2 \dots$ , (3)

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

Из формулы (2) следует, что  $\sin^2 \theta_{oko} = Bk^2$  и

$$Ah^2 = \sin^2 \theta_{hoo}$$

и поэтому  $\sin^2 \theta_{hko} = \sin^2 \theta_{hoo} + \sin^2 \theta_{oko}$

Точно так же из (3) имеем

$$\sin^2 \theta_{okl} = \sin^2 \theta_{oko} + \sin^2 \theta_{ool}$$

Таким образом, используя приемы расшифровки рентгенограмм ромбических кристаллов, можно в моноклинных кристаллах, найти величины  $\sin^2 \theta_{100}$ ,  $\sin^2 \theta_{010}$  и  $\sin^2 \theta_{001}$ , а затем, используя уравнения (2) и (3) можно проиндифицировать рефлексы hko, и okl путем сравнения вычисленных и экспериментально полученных величин  $\sin^2 \theta_{hkl}$ , (4).

Параметр «b» определяется непосредственно из уравнения:

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

где  $\lambda$  – длина волны рентгеновского излучения.

Следовательно, выполненные расчеты показывают, что имеющие соединения кристаллизуются в моноклинной системе (таблица 1 и 2).

**Определение кристаллографических параметров некоторых соединений Ca и Mg с биуретом. табл. 1 и табл. 2.**

№	Название соединений	Молекулярная масса в кг/моль	Объём элементарной ячейки $\Lambda^3$	Значение позиционных координат в А			Углы составляющие между гранями, а градусах			Количество формульных единиц	Относительные погрешности измерения в %
				a	b	c	a	p	y		
1.	Ca(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> *4Б	564,40	238,30	10,0481	3,5571	6,5527	90,00	91,00	90,00	57	0,08
2.	Ca(CNS) <sub>2</sub> *4Б	586,62	555,34	10,9432	6,4533	7,7078	90,00	87,00	90,00	55	0,06
3.	Ca(CNS) <sub>2</sub> *2Б	362,45	543,56	11,1696	7,5191	6,2061	90,00	91,00	90,00	31	0,07
4.	Mg(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> *2Б*2H <sub>2</sub> O	452,52	2889,52	16,8600	9,7280	14,3500	90,00	103	90,00	37	0,02
5.	Ca(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> *4Б	640,44	21,25	2,6346	2,5486	2,5779	90,00	91,00	90,00	61	0,065

**Определение параметров элементарной ячейки кристаллической решетки некоторых соединений Ca и Mg с биуретом**

№	Название соединений	Количество атомов элементарной ячейки	c/a	c/b	Масса одной молекулы $10^{-27}$ кг.	Количество атомов		Линейный размер молекулы, в $10^{-10}$ м	Удельный вес, в кг/м <sup>3</sup> р	Удельный объем, в кг/м <sup>3</sup> р	Молекулярный объём V <sub>м</sub> , м <sup>3</sup> /кмоль	Диаметры молекулы в, м
						кислорода	водорода					
1.	Ca(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> · 4Б	6	0,652	1,842	9,359	20	20	2,08	2,368	0,422	238,3	0,66
2.	Ca(CNS) <sub>2</sub> · 4Б	6	0,704	1,194	9,729	8	20	2,15	1,056	0,947	555,51	0,68
3.	Ca(CNS) <sub>2</sub> · 2Б	4	0,556	0,825	6,011	4	10	1,81	0,667	1,499	543,4	0,58
4.	Mg(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> · 2Б · 2H <sub>2</sub> O	10	0,851	1,475	7,504	8	14	1,965	0,2599	3,847	1741,13	0,82
5.	Ca(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> · 4Б	6	0,978	1,011	10,621	20	20	3	-	-	-	0,955

Достоверность полученных результатов, можно убедиться сравнением вычисленных  $\sin^2 \theta_{hkl}$ , и экспериментальных данных  $\sin^2 \theta_{hkl}$ , а также  $1/d_{hkl}^2$  (вычисленное) и  $1/d_{hkl}^2$  (экспериментальное).

#### Вывод

1. Определены кристаллические параметры элементарной ячейки:  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  и  $V$ .

2. Вычислены количество атомов, содержащихся в элементарной ячейке кристаллической решетки, а также линейные размеры молекулы и их диаметры.

3. Результаты могут быть использованы как справочный материал для проведения практических занятий по физике твердого тела.

#### Литература:

1. Акматова М.Р. Координационные соединения нитратов РЗЭ, Mg, Ca с биуретом и их физико-химические свойства. дисс. к.хим. наук.-Бишкек - 1997. - 154 с.

2. Абдыбалиев Д.А. Авто реферат. канд. хим. наук. – Ташкент – 1991 г. – 26 с.
3. Миркин Л.И. Рентгеноструктурный анализ. Получение и измерение рентгенограмм - М. -Наука- 1976. 8-10 с.
4. Липсон Г., Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм // Пер. с англ. Е.Н.Беловой и Г.П.Литвинской. Под редакцией академика Н.В.Белова – М. – 1972. – 384 с.
5. Недома И. Расшифровка рентгенограмм порошков// Пер.с польск. Г.Н. Мехеда. Под.ред. Л.Н. Расторгуева – М. – Металлургия – 1975. 423 с.
6. Хейкер Л.М. рентгеновская дифрактометрия монокристаллов/ Под. общ. ред. Н.И. Комяка – Л. – Машиностроение, выш.2 1973. – 236 с.
7. Абдыбалиев Д.А. Геометрическая структура  $H_2MoO_4 \cdot 2H_2O \cdot C_6H_5NH_2$ . Изв.Вузов – Б. – 2009 – с 3-6.
8. Миркин Л.И. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов// под. ред. Проф. Я.С. Усманского. Изд-во физмат. лит. – М. – 1961.-860 с.

Рецензент: к.т.н., профессор Авдубалиев А.А.