

ХИМИЯ

ХИМИЯ

CHEMISTRY

Абдыбалиев Д.А., Ибраимова К.Б., Мураталиева А.Р., Кочоков С.К.

АНИЛИНДИН ХИМИЯЛЫК КУЙМАЛАРЫНЫН ПИРОФОСФАТ ЖАНА ЖЕЗДИН КРИСТАЛЛДЫК ЖАНА КРИСТАЛЛОХИМИЯЛЫК ТҮЗҮЛҮШ КУРАМЫНЫН ЧОНДУКТАРЫН АНЫКТОО

Абдыбалиев Д.А., Ибраимова К.Б., Мураталиева А.Р., Кочоков С.К.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ И КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НЕКОТОРЫХ СОЕДИНЕНИЙ ПИРОФОСФАТОВ АНИЛИНА И МЕДИ

D.A. Abdybaliev, K.B. Ibraimova, A.R. Muratalieva, S.K. Kochokov

THE DEFINITION OF CRYSTALLOGRAPHIC AND CRYSTAL CHEMICAL PARAMETERS OF SOME COMPOUNDS WITH PYROPHOSPHATES ANILINE AND COPPER

УДК:548.661.635.66 (04). А-13

Бул макалада пирофосфат анилин жана жездин кошулмаларынан алынган химиялык заттардын кристаллдык өлчөмдөрү a , b , c , α , β , γ , V аныкталган.

Вегнер-Зейтинца уячасындагы молекулаларынын сандары менен алардын массаларынын чондуктары жана көлөмү эсептелген.

Негизги сөздөр: *пирофосфат анилин, химиялык куймалар, Вегнер-Зейтинца жөнөкөй уячалары, рентгенографиялык анализ.*

Впервые определены величины кристаллохимических и кристаллографических параметров элементарной ячейки: a , b , c , α , β , γ и V .

Вычислены: количество молекул содержащийся в ячейке Вегнера - Зейтинца, а также установлены пространственные изображения кристаллической решетки пирофосфатов анилина и меди.

Ключевые слова: *пирофосфат анилина, соединения меди, кристалл, строение, элементарная ячейка Вегнера-Зейтинца, рентгенографический анализ.*

The size of crystal chemical and crystallographic parameters of an elementary cell: a , b , c , α , β , γ and V has been first defined there.

The number of molecules are calculated in Vegner-Zeitins cell. Besides the spatial images of crystal lattice is established with pyrophosphates aniline and copper compounds.

Key words: *pyrophosphates aniline, copper compounds, crystal, structure, Vegner-Zeitins cell, crystal lattice.*

Рентгенографический анализ пирофосфатов анилина и меди был проведен на Всесоюзном институте удобрений им. Я.С. Самойлова города Москвы [1].

Полученные данные анализа: I/I_0 относительная интенсивность дифракционных линий рефлексов и d_{α}/n межплоскостное расстояние показывают кристалличность соединений и имеют определенные формы кристаллов [1,2].

Следовательно, величины I/I_0 и d_{α}/n в Å являются как исходным объектом для дальнейшего изучения строения и структуры кристаллических соединений пирофосфатов анилина и меди.

Целью данной работы является изучение кристаллической и кристаллографической строений некоторых соединений пирофосфатов анилина и меди.

Предварительные поисковые расчеты показывают как из работы [3,4], что данные соединения (табл.1) относятся к моноклинной системе кристаллической сингонии.

Для определения параметров элементарной ячейки кристаллической решетки Вегнера-Зейтинца существуют ряд методов: аналитический, графический, статистический и методы переменного масштаба [3,5].

В этом случае для определения параметров кристаллической решетки элементарной ячейки можно проводить по следующему уравнению [3,7].

$$\sin^2\theta_{hkl} = \frac{\lambda^2 h^2}{4a^2} \sin^2\beta + \frac{\lambda^2 k^2}{4b^2} + \frac{\lambda^2 l^2}{4c^2} \sin^2\beta \quad (1)$$

где h, k, l – Миллеровские индексы плоскостей; a, b, c – параметры элементарной ячейки; β – угол между гранями ячейки.

Уравнение (1) можно преобразовать к виду:

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

отсюда имеем:

$$A h^2 = \sin^2\theta_{h00}, \quad B k^2 = \sin^2\theta_{0k0}, \quad \text{и} \quad C l^2 = \sin^2\theta_{00l} \quad (3)$$

Тогда получим:

$$\sin^2\theta_{hkl} = \sin^2\theta_{h00} + \sin^2\theta_{0k0} + \sin^2\theta_{00l} \dots \quad (4)$$

Пользуясь экспериментальными данными по уравнению (2), (3) и (4) можно определить значения величины: $\sin^2\theta$ или $[h00]$, $\sin^2\theta_{010}$ или $[0k0]$, $\sin^2\theta_{001}$ или $[00l]$, а затем $hk0$ и $0kl$ путем сравнения вычисленных и экспериментально полученных значений $\sin^2\theta$ [3,4,7].

Результаты сравниваются по величине $1/d^2_{hkl}$ или $\sin^2\theta_{hkl}$ эксперимента и вычисленными значением по уравнению (3) и (4).

Угол β определяется по методике [2,8] комбинаций Миллеровских индексов плоскостей.

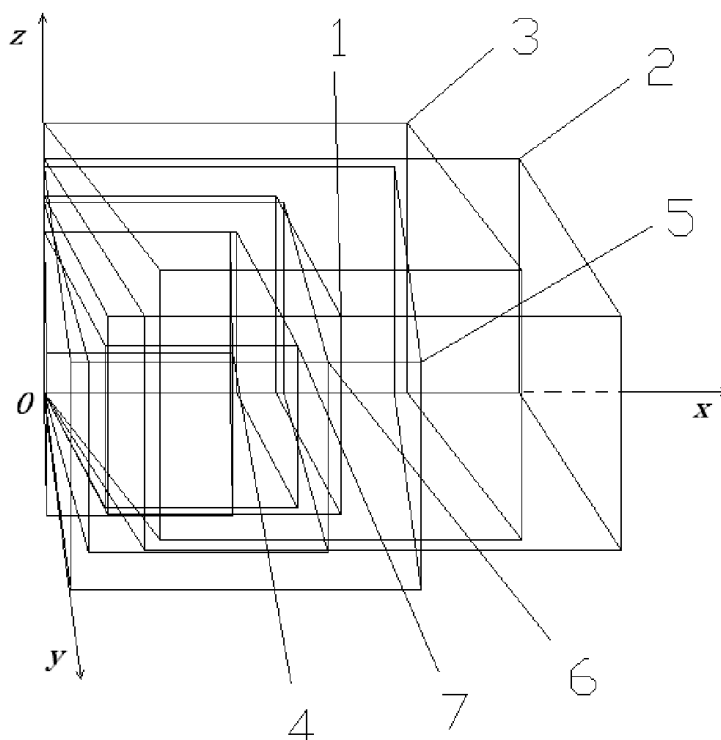
Полученные данные занесены в таблицу 1, а пространственное изображение элементарной ячейки кристаллической решетки на рис. 1.

Вывод

1. Впервые определены параметры элементарной ячейки $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ и объемы V .
2. Определены линейные размеры молекулы, а также их количество молекул, содержащиеся в элементарной ячейке.
3. Результаты работы могут быть использованы на практических занятиях по физике твердого тела.

Рентгенографические параметры некоторых соединений пирофосфатов анилина и меди

№	Названия соединений		$C_6H_5NH_2 \cdot C_6H_5COOH$	$CuSO_4 \cdot 2C_6H_5NH_2$	$2C_6H_5NH_2 \cdot H_4P_2O_7$	$Cu_2P_2O_7 \cdot 2H_2O$	$(NH_4)_4P_2O_7$	$2,5Cu_2P_2O_7(NH_4)_4 \cdot P_2O_7 \cdot 17H_2O$	$(NH_4)_2SO_4$
	Элементы кристаллич. Решетки пирофосфатов анилина и меди								
1	Молекулярный вес, а.е.м		215,24	345,87	364,24	336,88	341,21	161,03	131,9
2	Удельный вес, ρ , г/см ³		2,987	1,523	1,778	4,38	0,399	9,83	1,51
3	Удельный объем, V_u , см ³ /г		3,335	0,656	0,562	0,228	2,506	0,102	0,662
4	Молекулярный объем V_m , см ³ /моль		72,06	227,09	204,86	76,91	855,16	16,38	87,35
5	Значение позиционных координат, в 10^{-6} см	a	6,4364	13,1106	10,3766	5,2699	9,8100	6,7050	5,4008
		b	3,8034	5,2400	5,3966	3,3845	5,5267	4,6490	5,3633
		c	5,5187	6,5170	7,5140	4,5298	6,3550	5,3833	4,5549
6	Соотношение значений позиционных координат	c/a	0,857	0,497	0,724	0,856	0,647	0,803	0,843
		c/b	1,451	0,497	1,392	1,338	1,149	1,158	0,849
7	Углы между гранями, в градусах	α	90	90	90	90	90	90	90
		β	62,15	57,2	52	80,24	82	74,24	80,48
		γ	90	90	90	90	90	90	90
8	Количество формульных единиц		29	34	41	17	29	227	15
9	Объем элементарной ячейки, V , 10^{-24} см ³		357,29	376,84	339,9	336,6	341,21	161,03	131,9
10	Масса одной молекулы, m , 10^{-29} г		35,65	57,36	56,37	55,84	22,59	26,27	14,48
11	Линейные размеры молекулы, L , 10^{-8} см		1,528	1,791	1,817	1,813	1,312	2,789	1,297
12	Диаметры молекулы, D , 10^{-8} см		0,49	0,57	0,58	0,58	0,42	0,88	0,41
13	Количество молекул в элементарной ячейке, Z		3	1	7	1	6	6	9
14	Относительные ошибки, в%		0,04	0,01	0,04	0,001	0,01	0,02	0,003



Формы и виды пространственного изображения элементарной ячейки некоторых соединений пирофосфатов анилина и меди кристаллографической решетки в моноклинной системы:

1. $C_6H_5NH_2 \cdot C_6H_5COOH$
2. $CuSO_4 \cdot 2C_6H_5NH_2$
3. $2C_6H_5NH_2 \cdot H_4P_2O_7$
4. $Cu_2P_2O_7 \cdot 2H_2O$
5. $(NH_4)_4 \cdot P_2O_7$
6. $2,5Cu_2P_2O_7(NH_4)_4 \cdot P_2O_7 \cdot 17H_2O$
7. $(NH_4)_2SO_4$

Литература:

1. Акбаев А.А. Взаимодействие солей тяжелых металлов с азотосодержащими соединениями и синтез физактивных веществ. – Фрунзе – Илим -1984 – 470 с.
2. Миркин Л.И. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов. – М. – Физматгиз. -1961 – 863 с.
3. Липсон Г., Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм//Пер. с англ. Е. Н. Беловой и Г.П. Литвинской. Под ре. Академика Н.В. Белова. – М. – Мир – 1972 – 384 с.
4. Ito T.X-ray Studies in Polymorphism, maruren, Tokyo – 1950.
5. Нудельман А. Расшифровка порошковых рентгенограмм методом переменного масштаба. – М. – Госгелогтехиздат – 1962.
6. Абдыбалиев Д.А., Такенеев К.Т., Касымалиев Б.К. Начертательная геометрия с основами инженерной графики. – Б. – 2013 – 42 с.
7. Мильбурн Г. Рентгеновская кристаллография. М. – Мир – 1975 – 484 с.
8. Абдыбалиев Д.А., Ибраимова К.Б., Мураталиева А.Р. Изучение кристаллической структуры и строение фениланина и тиодифениланина сульфатом хлорида меди – Б. – Наука, новые технологии и инновации Кыргызстана, №4. – 2015. С. 15-16.

Рецензент: к.ф.-м.н. Байтерекев А.Т.