

*Абдыбалиев Д.А., Ибраимова К.В., Мураталиева А.Р.*

**ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И СТРОЕНИЕ НЕКОТОРЫХ МЕДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НАТРИЯ И ФОСФОРА**

*D.A. Abdybaliev, K.V. Ibraimova, A.R. Muratalieva*

**THE STUDY OF THE CRYSTAL STRUCTURE AND IS SOME COPPER COMPOUNDS WITH PHOSPHORIES AND SODIUM**

УДК: 548.3:546.18(04).

*Бул макалада жездин натрий жана фосфор менен реакцияга киргенде пайда болгон кээ бир куймаларынын кристаллдык курамы каралган.*

*Алардын жөнөкөй уячаларынын өлчөмдөрү  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$  жана көлөмү  $V$ , ошондой эле ичинде камтылган молекулалардын саны көрсөтүлгөн.*

**Негизги сөздөр:** *жөнөкөй уяча, натрий, фосфор, жез, кристаллдын түзүлүшү курамы, куймасы.*

*В данной работе изучены кристаллические строение некоторых медных соединений натрия и фосфора. Определены параметры элементарной ячейки:  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$  и  $V$ , а также количества молекул содержащего в элементарной ячейке.*

**Ключевые слова:** *ячейка, натрий, фосфор, медь, кристалл, строение, соединение.*

*The crystall structure and is some copper compounds of and phosphorus is studied in this work.*

*The parameter of an elementary cell  $a.b.c.\alpha.\beta.\gamma.V$  is defined together with the number of molecules comfained in elementary cell.*

**Key words:** *crystal, structure, compounds, phosphor, copper parameter and cell.*

Рентгенографические фазовые анализы некоторых медных соединений натрия, фосфора были выполнены в рентгеновской лаборатории Всесоюзного научно-исследовательского института удобрений имени Я. В. Самойлова (руководитель лаборатории доктора наук, профессора В. Г. Кузнецова) г. Москва [1.2]

Полученные данные рентгенографического анализа значение величины  $j/j_0$  относительные интенсивной дифракционной линии и  $d_\alpha/n$  межплоскостное расстояние интерференционной линии является исходным материалом для изучения и продолжение к исследованию.

Проводя много работ, как аналитические, так и графические методы вычисление [3], а также используя методы переменного масштаба, можно предположить, что некоторые медные соединения натрия и фосфора кристаллизуется в моноклинной системе кристаллической решетки.

Поэтому для определения параметров элементарной ячейки можем испытывать пакета математических прикладных программ для установления параметров кристаллической и кристаллографической ячейки Вагнера-Зейтинца. [3.8]

С другой стороны появляется классические возможности где можно определить эти же величины разработанные ряд авторами [4-7] методы, как для ромбической так и для моноклинной сингонии.

С целью интерпретации порошкограммы некоторых медных соединений натрия и фосфора.

так и для ромбической (или моноклинной) систем уравнения величины  $\sin^2 \theta$  имеет вид:

$$\sin^2 \theta_{hkl} = \frac{\lambda^2}{4} \left( \frac{h^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} - 2hl \cos \beta / a * c + \frac{k^2}{b^2} \right) / \sin^2 \beta \quad (1)$$

где ребров перпендикулярно плоскости в который лежат ребра  $a$  и  $c$ . Вычисление сокращаются, если использовать для выражения  $\sin^2 \theta$  исходить из параметров обратной элементарной ячейки, а именно

$$a^* = \frac{1}{a}, b^* = \frac{1}{b}, c^* = \frac{1}{c} \dots \quad (2)$$

Если уравнение (2) поставить на уравнение (1) то имеем следующие:

$$\sin^2 \theta_{hkl} = \frac{\lambda^2}{4} (h^2 a^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hl c^* a^* \cos \beta^*) \quad (3)$$

Тогда для каждой из низших систем можно прибегнуть к дальнейшему упрощению графического метода построение и обратной решетки. [3.8]

Для веществ относящихся моноклинной или ромбической системы при расшифровке рентгенограмм, приходится определить три коэффициенты, которые связаны с экспериментальными значением  $\sin^2 \theta$  уравнением.

$$\sin^2 \theta_{hkl} = Ah^2 + Bk^2 + Cl^2 \quad (4)$$

Вычислив значения трех коэффициентов, составляем таблицы величин:  $Ah^2, Bk^2, Cl^2$  и их суммы дадут возможные значения  $\sin^2 \theta$  [9]. Тогда для коэффициентов, с учетом уравнение (1), (2), (3), и (4) имеем следующие выражение:

$$Ah^2 = \frac{\lambda^2 a^2}{4} = \sin^2 \theta_{hoo} \quad (5)$$

$$Bk^2 = \frac{x^2 b^2}{4} = \sin^2 \theta_{oko} \quad (6)$$

$$Cl^2 = \frac{\lambda^2 c^2}{4} = \sin^2 \theta_{ool} \quad (7)$$

где  $\lambda$  длина волны рентгеновского излучение .

Тогда уравнение (4) принимает вид

$$\sin^2 \theta_{hkl} = \sin^2 \theta_{hoo} + \sin^2 \theta_{oko} + \sin^2 \theta_{ool} \dots (8)$$

Следовательно, используя приемы и методы интерпретации порошковых рентгенограмм, можно и в моноклинных, в некоторых случаях триклинных кристаллах, найти величины (h,k,l из уравнение (5), (6), (7) и проиндицировать для рефлексов hko и okl путем сравнения вычисленных и экспериментально полученных величин  $\sin^2 \theta$  [6,7,9,]

Из формулы (5), (6), (7) считаем известными a, b, c, то  $\cos \beta$  из уравнение (1) можно найти по значению  $\sin^2 \theta$  для еще не проиндицированных линий hkl.

Таким образом, вычисленные значения a.b.c.a.β.γ и объемы V элементарной ячейки занесены на таблице 1, а пространственное изображение элементарной ячейки кристаллической решетки показано на рис. 1.

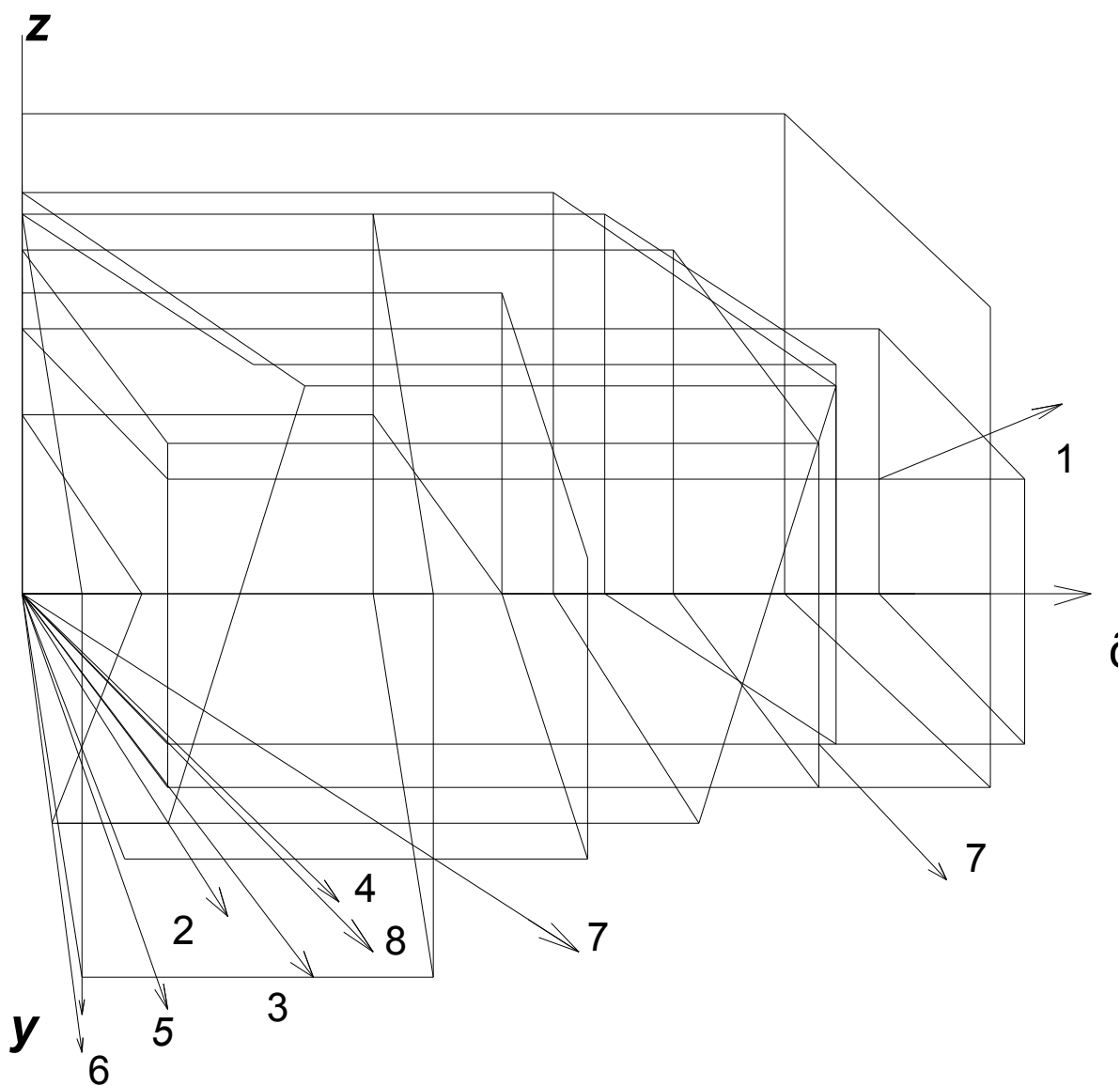


Рис 1.

Форма и виды пространственного изображение элементарной ячейки некоторых медных соединений натрия и фосфора в моноклинной сингонии.

- 1)  $CuCO_3 * Na_2CO_3 * 5H_2O$
- 2)  $CuCO_3 * NaHCO_3 * 5H_2O$
- 3)  $CuSO_4 * Na_2SO_4 * 2H_2O$
- 4)  $CuSO_4(NH_4)_2SO_4 * 6H_2O$
- 5)  $CuCO_3 * Cu(OH)_2$
- 6)  $Cu(CH_3COO)_2$
- 7)  $Cu_3(PO_4)_2 * 3H_2O$
- 8)  $Cu_2HPO_4 * 2H_2O$

Рентгенографические данные фазового анализа некоторых медных соединений натрия и фосфора

№	Название соединений.	$Cu_3(PO_4) \cdot H_2O$	$CuSO_4(NH_4)_2 \cdot SO_4 \cdot 6H_2O$	$CuSO_4 \cdot Na_2SO_4 \cdot 2H_2O$	$CuCO_3 \cdot Na_2CO_3 \cdot 5H_2O$	$CuCO_3 \cdot NaHCO_3 \cdot 5H_2O$	$CuCO_3 \cdot Cu(OH)_2$	$Cu_2HPO_4 \cdot 2H_2O$	$Cu(CH_3COO)_2$	
		Параметры кристаллической решетки.								
1	Молекулярная масса. М.а.е.м.	529,32	399,81	337,68	319,62	297,63	221,11	177,41	159,63	
2	Удельный вес $\rho$ , г/см <sup>3</sup>	1,56	2,77	2,12	0,745	1,675	1,21	4,54	0,61	
3	Молекулярный объем $V_{см^3}/моль$	339,31	144,33	159,28	429,02	180,38	182,73	39,07	261,69	
4	Удельный объем $V_u$ см <sup>3</sup> /гр	0,641	0,361	0,472	0,142	0,597	0,826	0,220	1,639	
5	Масса одной молекулы $m$ , $10^{-29}г$	87,92	66,41	55,44	53,00	49,36	36,73	29,47	26,52	
6	Количества формульных единиц	17	38	19	26	26	10	13	13	
7	Значение позиционных а координатов,	A	9,6867	6,1497	6,3172	8,9817	8,1460	7,390	4,65	7,2833
		b	5,4700	4,2530	4,682	6,3692	5,4350	4,5109	2,464	5,5275
		c	6,5150	5,5759	5,476	12,494	6,7689	5,5353	3,4105	6,515
8	Соотношение позиционных координатов	c/a	0,672	0,854	0,864	1,391	0,831	0,749	0,733	0,894
		c/b	3,191	1,311	1,169	1,962	1,245	1,227	1,384	1,179
9	Углы между гранями в градусах	$\alpha$	90	90	90	90	90	90	90	90
		$\beta$	79,42	81,13	83,24	85,01	79,47	81,12	88,12	85,9
		$\gamma$	90	90	90	90	90	90	90	90
10	Количества молекул, Z	4	2	3	4	6	6	1	6	
11	Диаметр молекул D, $10^{-12}см$	2,09	1,88	1,78	1,73	1,71	1,51	1,44	1,36	
12	Объем элементарной ячейки V, $10^{-36}см^3$	339,99	399,66	349,78	742,21	294,92	220,65	177,38	260,47	
13	Радиусы молекул r, $10^{-12}см$	1,04	1,44	0,89	0,86	0,85	0,75	0,72	0,68	
14	Линейные размеры молекул L, $10^{-12}см$	6,56	5,90	5,59	5,43	5,37	4,74	4,52	4,27	
15	Относительные ошибки, в %	0,01	0,08	0,03	3,75	0,02	0,002	0,01	0,04	

**Вывод**

1. Впервые определены параметры элементарной ячейки: a.b.c.α.β.γ и объемы V.
2. Вычислены: длина и диаметры молекул содержащего в элементарной ячейке.
3. Результаты работы могут быть использованы на практических занятиях по физике твердого тела.

**Библиографический список литературы**

1. Хлапкова А. Н. Кузнецов В.Г Рентгенографический качественный анализ котельных накипей.-М.-Наука-1952
2. Акбаев А.А. Взаимодействия солей тяжелых металлов азотосодержащими соединениями и физически активных веществ. - Фрунзе. -Илим.-1984 – 498 с
3. Миркин Л.И Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов/ под ред. проф Я.С. Уманского. - Изд-во.-Физмат.-1961- 863 с
4. Lipson H. Acta Cryst.2.43.-1949
5. Липсон Г. Кокрен В. Определение структуры кристаллов. ИЛ, - М. 1956
6. Нудельман А. Расшифровка порошковых рентгенограмм методом переменного масштаба. - М.- Госгеологтехиздат. -1952
7. Липсон Г. Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм // Перев. С англ. Е.Н. Беловой и Г. П. Литвинской.-М.-1972.-384 с
8. Абдыбалиев Д.А Изучение кристаллической структуры соединений пиперазин сульфата и М- нитробензойнокислого и пиперазина с солями 2-х валентных металлов// Международ. конф. посвящ. к 20 летию образования ИГД и ГТ им. академика У.А. Асаналиева. Изв. КГТУ им. Раззакова Б. -2013. -Т28. С. 458-461
9. Абдыбалиев Д.А., Султаналиева Р. М. и др. Изучение структуры и строение анализа с солями 2-х и 3-х валентными металлами// Хабаршы. Вестник серий «Начальная школа и физкультура» - Казахский. НПУ им. Абая. – Алматы.-2014. -№ 4(43).- с 36-38

Рецензент: д.ф.-м.н, профессор Чечейбаев Б.Ч.