

*Абдыбалиев Д.А., Ибраимова К.Б., Абдыбалиев Т.Д.*

**КЭЭ БИР ТИОКАРБАМИДДЕРДИН ООР МЕТАЛЛДАР МЕНЕН  
КОШУЛМАЛАРЫНАН ПАЙДА БОЛГОН ТУЗДАРЫНЫН  
КРИСТАЛЛОГРАФИЯЛЫК ЖАНА КРИСТАЛЛОХИМИЯЛЫК ТУЗУЛУШ  
КУРАМЫН ОКУП ҮЙРӨНҮҮ**

*Абдыбалиев Д.А., Ибраимова К.Б., Абдыбалиев Т.Д.*

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ И  
КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НЕКОТОРЫХ ТИОКАРБАМИДНЫХ  
СОЛЕЙ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ**

*D.A. Abdybaliev, K.B. Ibraimova, T.D. Abdybaliev*

**THE DEFINITION OF CRYSTALLOGRAPHIC  
AND CRYSTALCHEMIC PARAMETER OF SOME TIOCARBAMIDE  
SALTS OF HEAVY METALS**

УДК: 548:54-162:678.044,45,549,25(04)

*Бул макалада кээ бир оор металлдардын тиокарба-  
миддери жана анын туздарынын элементардык кичинекей  
узчаларынын өлчөмдөрү: a, b, c, α, β, γ жана V чоңдуктары  
аныкталган.*

*Андагы молекулаларынын массасы, узундуктары,  
диаметрлери менен алардын кичинекей уячаларындагы  
жалпы молекулаларынын саны эсептелип чыккан.*

***Негизги сөздөр:** оор металлдар, тиокарбамиддер,  
туздар, уячалар.*

*В данной статье определены параметры элемен-  
тарной ячейки тиокарбамидных солей тяжелых метал-  
лов: a, b, c, α, β, γ и V.*

*Определены следующие величины: масса, длина и  
диаметры молекулы, а также количество молекул содер-  
жащихся в элементарной ячейке.*

***Ключевые слова:** тиокарбамид, соли тяжелых  
металлов, ячейка, кристаллография, кристаллохимия.*

*The crystallographic and crystalchemic parameter of  
simple cells such as: a, b, c, α, β, γ, V and crbamide and  
tiocrbamide salts of metals. Besides, the lineal measures,  
molecule diameters and quantity of molecule in simple cell  
have been.*

***Key words:** crbamide, tiocrbamide, salts, metals,  
parameter, simple, quantity.*

Подготовка исследуемых объектов (пробы) и их съемки проводились на рентгеновском аппарате УРС-50 ИМ на медном излучении с никелевым фильтром в режиме U=70кВ и i=35мА, в рентгеновской лаборатории ИНФХ НАН КР [2].

В результате экспериментально получены значения относительных интенсивностей  $I/I_0$  дифракционных линий, а также межплоскостные расстояния  $d_{hkl}/n$  в Å. Полученные значения  $I/I_0$  и  $d_{hkl}/n$  в Å является исходным объектом для дальнейшего изучения строения и структуры тиокарбамидных солей тяжелых металлов [1].

Необходимо испробовать следующие ана-литические методы вычисления для системы:

кубической, тетрагональной, гексагональной, тригональной и иногда ромбической (или моноклинной) типы кристаллической решетки [3,4,6]).

Таким образом, можно найти признаки о принадлежности и соответствующие закономерность в той или иной кристаллической решетки системы. Кроме того, существуют графические методы для установление и определения параметров кристаллической решетки элементарной ячейки [1,2].

Рассматривая сложные химические соединения, и тиокарбамидных солей и некоторых тяжелых металлов можно проводить вычисления ряд методов разработанные авторами [4]. В результате стало известно, что образцы выше названных соединений тяжелых металлов кристаллизуются в моноклинной системе кристаллической решетки.

Для определения величин  $\sin^2\Theta$  ромбической (или моноклинной) сингонии в квадратной форме параметров элементарной ячейки выражается по формуле [6]:

$$\sin^2\Theta_{hkl} = (\lambda^2/4a^2\sin^2\beta)h^2 + (\lambda^2/4c^2\sin^2\beta)\ell^2 - (\lambda^2\cos\beta/2acs\sin^2\beta)h\ell + (\lambda^2/4b^2k^2)\dots \quad (1)$$

Уравнение (1) можно написать в другой форме:

$$\sin^2(\lambda^2/4)*((h^2/a^2 + \ell^2/c^2 - 2h\ell\cos\beta/ac + k^2/b^2)/\sin^2\beta)\dots \quad (2)$$

где a, b, c параметры элементарной ячейки, λ - длина волны рентгеновского излучения, ребро b перпендикулярно плоскости в которой лежат ребра a и c, а угол β составляющее между гранями элементарной ячейки a и c.

Рентгенографические параметры некоторых соединений тиюкарбаледных солей тяжелых металлов

№	Название соединений	Параметры элементарной ячейки кристаллической решетки	PbSO <sub>4</sub> *4(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> *CS	Cd SO <sub>4</sub> *4(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> *CS*5H <sub>2</sub> O	Cd SO <sub>4</sub> *4(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> *CS* 3 H <sub>2</sub> O	Cd SO <sub>4</sub> *4(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> *CS*3 H <sub>2</sub> O	Zn SO <sub>4</sub> *4(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> CS
			1	Молекулярный вес М.а.е.м	475,52	470,78	434,69
2	Молекулярный объем, <i>V<sub>m</sub></i> , см <sup>3</sup> /моль	208,4	474,5	637,2	141,5	214,5	
3	Удельный вес, ρ, г/ см <sup>3</sup>	1,3	1,7	2	1,7	1,9	
4	Удельный объем, <i>V<sub>υ</sub></i> , см <sup>3</sup> /гр	0,757	0,558	0,497	0,595	0,532	
5	Значение позиционных координат, в Å	a	9,6017	13,2052	13,2684	8,4239	8,425
		b	4,425	6,3890	9,534	4,491	6,493
		c	6,7317	9,7375	10,268	6,4001	7,4587
6	Соотношение между величинами: а, в, с.	c/a	0,701	0,737	0,774	0,759	0,885
		c/a	1,521	1,524	1,077	1,425	1,149
7	Углы между составляющими гранями, в градусах	α	90	90	90	90	90
		β	72,44	79	70	80,1	81,13
		γ	90	90	90	90	90
8	Количество формульных единиц	20	39	37	23	32	
9	Масса одной молекулы, m, 10 <sup>-29</sup> гр	78,99	78,21	72,22	56,25	55,43	
10	Линейные размеры, L, 10 <sup>-12</sup> см	1,99	1,98	1,93	1,77	1,76	
11	Объем элементарной ячейки, V, 10 <sup>-36</sup> см <sup>3</sup>	275,12	806,67	1280,78	237,36	403,32	
12	Количество молекулы, Z	4	17	17	7	7	
13	Диаметры молекулы, D, 10 <sup>-12</sup> см	0,634	0,630	0,615	0,564	0,560	
14	Радиусы молекулы, r, 10 <sup>-12</sup> см	0,317	0,315	0,307	0,282	0,280	
15	Относительные ошибки в %	0,03	0,04	0,05	0,01	0,03	

Вычисления по уравнению (2) очень сложны и трудоемки. Для индексирования рентгенограммы введем обозначение уравнение (2) и имеем:

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

где  $A = (\lambda^2/4a^2)\sin^2\beta = \sin^2 \Theta_{h00} \dots \quad (4)$

$$B = (\lambda^2/4b^2)\sin^2\beta = \sin^2 \Theta_{0k0} \dots \quad (5)$$

$$C = (\lambda^2/4c^2)\sin^2\beta = \sin^2 \Theta_{00l} \dots \quad (6)$$

С учетом уравнения (4), (5) и (6), также (3) получим следующее выражения:

$$\sin^2 \Theta_{hkl} = \sin^2 \Theta_{h00} + \sin^2 \Theta_{0k0} + \sin^2 \Theta_{00l} - 2hl \sin \Theta_{h00} \cdot \sin \Theta_{00l} \cos \beta \dots \quad (7)$$

Из эксперимента можно найти следующие значения:

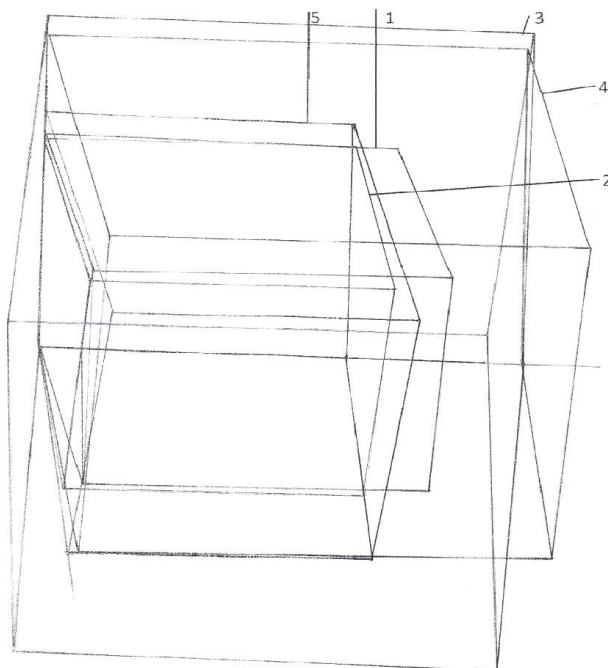
$\sin^2 \Theta_{h00}$  соответствующие к  $\sin^2 \Theta_{100}$   
 $\sin^2 \Theta_{0k0}$  соответствующие к  $\sin^2 \Theta_{010}$   
 $\sin^2 \Theta_{00l}$  соответствующие к  $\sin^2 \Theta_{001}$   
 где h, k и l-может принимать значение ряд натуральных целых и дробных чисел, как положительные, так и отрицательные.

После чего можно идентифицировать рентгенограммы, а для рефлексов hko и okl, методом сравнения по значениям  $\sin^2 \Theta$  из экспериментальных и вычисленных данных.

Далее угол β определяется по уравнению (2) или (6). [5,6]. Таким образом, все полученные данные параметры элементарной ячейки занесены на таблице 1.

Построены формы и виды пространственного изображения элементарной ячейки моно-

клинной системы кристаллической решетки [5] показано на рис.1.



**Рис. 1.** Виды и формы пространственного изображения элементарной ячейки некоторых тиокарбамидных солей тяжелых металлов в кристаллической решетке моноклинной системы.

- |  |   |  |
|--|---|--|
| 1. $PbSO_4 \cdot 4(NH_2)_2 \cdot CS,$            | 2. $CdSO_4 \cdot 4(NH_2)_2 \cdot CS \cdot 5H_2O,$ | 3. $CdSO_4 \cdot 4(NH_2)_2 \cdot CS \cdot 3H_2O$ |
| 4. $CdSO_4 \cdot (NH_2)_2 \cdot CS \cdot 3H_2O,$ | 5. $ZnSO_4 \cdot 4(NH_2)_2 \cdot CS$              |  |

### Вывод

1. Определены параметры элементарной ячейки кристаллической решетки: (a, b, c,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  и V.) тиокарбамидных солей тяжелых металлов.

2. Вычислены: масса, длина, и диаметры молекулы, а также количество молекул содержащихся в элементарной ячейки.

3. Результате работы могут быть использованы на практических занятиях по физике твердого тела.

### Литература:

1. Акбаев А.А. Взаимодействие солей тяжелых металлов с азотсодержащими соединениями и физактивных веществ. - Фрунзе. - Илим. - 1984. - 470 С.

2. Абдыбалиев Д.А. Методическое руководство к лаб. работам = «Физические основы рентгеноструктурного анализа» для студентов Кыргызского горно-металлургического института им. академика У.А.Асаналиева - Бишкек. - ИЦ Техник. - 2000.-14 с.
3. Миркин Л.И. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов//Под ред. проф. Я.С. Уманского. Изд-во физмат. лит. - 1961. - 860 с.
4. Липсон Г. Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм. / Пер. с англ. Е.Н. Беловой и Г.П. Литвинской// Под ред. академика Н.В. Белова. - Мир. - М-1972 - 384 с.
5. Абдыбалиев Д.А. и др. Начертательная геометрия с основами инженерной графики. - Б.- 2013. - 30 с.
6. Lipson H. The interpretation of X-ray Diffraction Photographs, Macmillan. London. -1960.

**Рецензент: к.ф-м.н., доцент Байтереков А.Т.**