

ХИМИЯ ИЛИМДЕРИ
ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ
CHEMICAL SCIENCE

Абдыбалиев Д.А., Абдыбалиев Т.Д.

**СЕЙРЕК КЕЗДЕШҮҮЧҮ ЭЛЕМЕНТТЕРДИН НИТРАТТАР МЕНЕН БИУРЕТТИН
 КОШУЛМАЛАРЫНАН АЛЫНГАН КОМПЛЕКСТИК ТУЗДАРДЫН КРИСТАЛДЫК
 ТҮЗҮЛҮШ КУРАМЫН ОКУП ҮЙРӨНҮҮ**

Абдыбалиев Д.А., Абдыбалиев Т.Д.

**ИЗУЧЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И СТРОЕНИЯ
 РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С БИУРЕТОМ**

D.A. Abdybaliev, T.D. Abdybaliev

**STUDY CRYSTAL STRUCTURE OF THE NITRATE OF ARE EARTH
 ELEMENTS BIURET**

УДК: 548.3:546. 65:547.495(04).

Бул макалада Me (NO₃)₃ Б тибиндеги сейрек кездешүүчү элементтердин нитрат жана биурет менен кошулганда пайда болгон химиялык куймаларынын кристаллдык түзүлүшү курамы каралган.

Алардын жөнөкөй уячаларынын чоңдуктары :a, b с α, β, γ, жана көлөмү V аныкталган.

Негизги сөздөр: кристаллдык параметрлер, нитраттар, биурет, кристаллдык түзүлүш курамы молекула, көлөм.

Изучены кристаллические структуры и строения соединений типа Me (NO₃)₃ Б. где Me: La, Tb, Yb, Gd, Eu, Ce, Nd, Ho, Dy, Er, Pr, Tm, Lu, Sm.

Установлена параметры элементарной ячейки кристаллической решетки: a, b, c, α, β, γ, V. Соединение кристаллизуются в моноклинной системе.

Ключевые слова: кристаллические параметры нитраты, биурет, кристаллические структуры объемы и молекула.

The study of the crystal structure and the structure of compounds Me:Ln, Vb, Tm, Tb, Gd/ Eu, Ct, La, Nd, Er, Sm, Ho, Dy and Pr Establish the parameters of the unit cell of the crystal lattia: a, b, c, α, β, γ, and the volume V

Compounds type Me (NO₃)₃ B lattia shape are in the monoclinic crystal system and defines number of atoms confined in the unit cell.

Key words: crystal structure, crystal parameters, compounds, cell, volume, biuret, monoclinis.

Рентгенофазовые анализы были выполнены в рентгеновской лаборатории в ИХ и ХТ НАН КР [2]. Полученные результаты фазового анализа: J/J_0 и d_{α}/n в \tilde{A} является исходным материалом для дальнейшего продолжения исследованию.

Целью настоящей работы является определения и установления параметров элементарной ячейки кристаллической решетки.

Для интерпретации порошковых рентгенограмм существуют ряд методов: расчет рентгенограмм в случае неизвестной ячейки и в случае известной ячейки, графические, аналитические, а так же методы переменного масштаба [3-5].

При определении параметров элементарной ячейки можно пользоваться уравнением как ромбической, так и моноклинной системы [6-7].

Проводе некоторые поисковые аналитические вычисления можно предполагать, что рассматриваемые, нами соединения кристаллизуются в моноклинной системе. Поэтому методы для интерпретации ромбических кристаллов успешно используется при расшифровки моноклинной системы кристаллической сингонии [8].

Квадратичная форма уравнение для моноклинной сингонии [4] имеет вид:

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

где h, k, l – Миллеровские индексы плоскостей; a, b, c – параметры элементарной ячейки; λ – длина волны рентгеновских лучей; β – угол между ребрами ячейки.

Уравнение (1) можно представить в другой форме:

$$\sin^2 \theta_{hkl} = h^2 \sin^2 \theta_{100} + l^2 \sin^2 \theta_{001} - 2hl \sin \theta_{100} \cdot \sin \theta_{001} \cdot \cos \beta + k^2 \sin^2 \theta_{010}, \dots \quad (2).$$

Решение уравнение (1) сложно и очень трудоемка. Вычисления сокращаются, если использовать более простые соотношения, которые получаются, если для выражения $\text{Sin}^2\theta$ исходить из параметров обратной решетки элементарной ячейки, а именно

$$a^*=1/a_1 \quad b^*=1/b \quad c^*=1/c \dots \quad (3)$$

и тогда для моноклинной системы уравнение (1) имеет вид:

$$\text{Sin}^2\theta_{hkl} = \frac{\lambda^2}{4}(h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} - 2hlc^* a^* \cos\beta^*) \dots \quad (4)$$

Уравнение (4) можно решить используя методы Ито и Когена, Липсона [6, 7, 9], где были разработаны способы индцирования любых порошковых рентгенограмм не зависимо от симметрии кристаллов и является полезным, особенно для кристаллов триклинной системы.

В вычислениях Ито -это выявление зон $h \ 0 \ 0$, $0 \ k \ 0$, $h \ 0 \ l$ и $0 \ 0 \ l$. Тогда из уравнение (4), получим следующие выражение:

$$\text{Sin}^2\theta_{h00} = \frac{\lambda^2}{4} h^2 a^{*2} = \text{Sin}^2\theta_{100} \dots \quad (5)$$

$$\text{Sin}^2\theta_{0k0} = \frac{\lambda^2}{4} k^2 b^{*2} = \text{Sin}^2\theta_{010} \dots \quad (6)$$

$$\text{Sin}^2\theta_{00l} = \frac{\lambda^2}{4} l^2 c^{*2} = \text{Sin}^2\theta_{001} \dots \quad (7)$$

Таким образом, имеем для моноклинной системы:

$$\text{Sin}^2\theta_{hkl} = \text{Sin}^2\theta_{100} + \text{Sin}^2\theta_{010} + \text{Sin}^2\theta_{001} + 2hl \text{Sin}^2\theta_{100} \cdot \text{Sin}^2\theta_{001} \cdot \cos\beta \quad (8)$$

Известно, что уравнение (8) с некоторым допущением совпадает с уравнением (1,2) [5-7]. Тогда параметры: b , c можно найти из экспериментальных значений $\text{Sin}^2\theta$.

Для интерпретация порошковых рентгенограмм учитывается, что $\text{Sin}^2\theta_{h00}$ есть [100], $\text{Sin}^2\theta_{0k0}$ есть [010] есть $\text{Sin}^2\theta_{00l}$ [001].

Если считать известными h , k и l , то по уравнению (5), (6) и (7) можно определить параметры элементарной ячейки : a , b , c .

Угол β определяется с комбинированием $[h_1, k_1, l_1]$ и $[h_2, k_2, l_2]$ индексов плоскостей [8,9] или по формуле (4) или (2).

Таким образом, все вычисление значения параметров элементарной ячейки занесены на таблице 1 и 2, а формы и типы пространственного изображения элементарной ячейки моноклинной сингонии показано на рис 1 и 2.

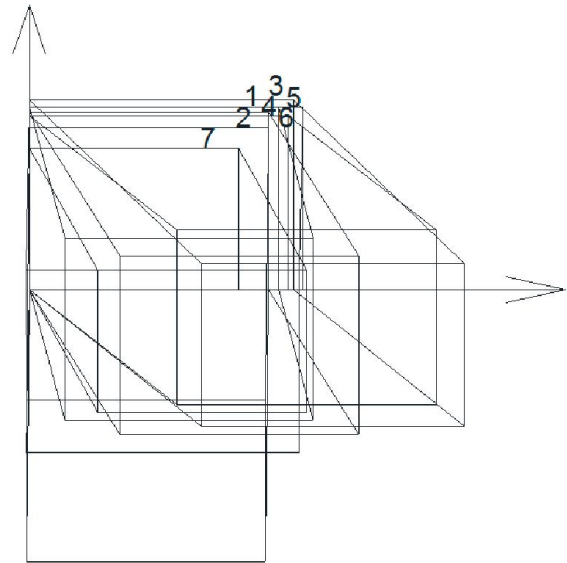


Рис 1. Формы пространственного изображения элементарной ячейки нитратов РЗЭ с биуретом кристаллической решетки моноклинной системы:

1. $\text{Lu}(\text{NO}_3)_3 \cdot 4\text{B} \cdot \text{H}_2\text{O}$
2. $\text{Yb}(\text{NO}_3)_3 \cdot 4\text{B}$
3. $\text{Tm}(\text{NO}_3)_3 \cdot 4\text{B}$
4. $\text{Tb}(\text{NO}_3)_3 \cdot 4\text{B}$
5. $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3 \cdot 4\text{B}$
6. $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 \cdot 4\text{B}(\text{сп})$
7. $\text{Ce}(\text{NO}_3)_3 \cdot 2\text{B} \cdot 5\text{H}_2\text{O}$

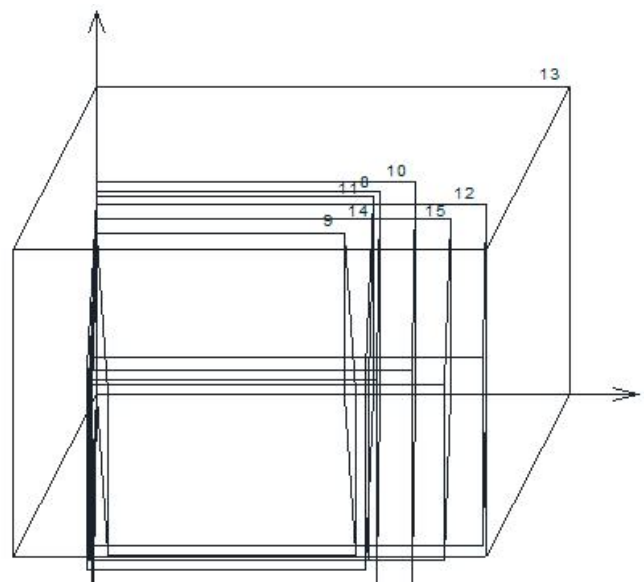


Рис 2. Формы пространственного изображения элементарной ячейки нитратов РЗЭ с биуретом кристаллической решетки моноклинной системы:

8. $\text{La}(\text{NO}_3)_3 \cdot 2\text{B} \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, 12. $\text{Sm}(\text{NO}_3)_3 \cdot 2\text{B} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
9. $\text{Nd}(\text{NO}_3)_3 \cdot 2\text{B} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, 13. $\text{Ho}(\text{NO}_3)_3 \cdot 4\text{B} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
10. $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3 \cdot 2\text{B}$, 14. $\text{Dy}(\text{NO}_3)_3 \cdot 4\text{B} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
11. $\text{Er}(\text{NO}_3)_3 \cdot 4\text{B} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, 15. $\text{Pr}(\text{NO}_3)_3 \cdot 2\text{B} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Таблица 1

Параметры элементарной ячейки кристаллической решетки нитратов редкоземельных элементов с биуретом

№	Названий соединений	Молекулярный вес, М а.е.м	Объем элементарной ячейки, V 10 ⁻³⁶ см ³	Значение позиционных координат, в Å			α	β	γ	Удельный вес ρ г/см ³	Количества формульных единиц	Относительные погрешности в%
				а	в	с						
1	Lu(NO ₃) ₃ · 4Б · H ₂ O	891,13	579,46	9,4954	7,8165	8,7457	90,00	63,13	90,00	2,55	64	0,009
2	Yb(NO ₃) ₃ · 4Б	771,38	1079,45	9,9782	13,4045	8,2411	90,00	91,00	90,00	1,88	61	0,002
3	Tm(NO ₃) ₃ · 4Б	767,27	553,13	10,9264	7,8586	9,2421	90,00	44,11	90,00	2,303	61	0,001
4	Tb(NO ₃) ₃ · 4Б	757,59	608,5	11,5740	6,6262	8,8083	90,00	78,00	90,00	2,06	61	0,01
5	Gd(NO ₃) ₃ · 4Б	755,59	812,24	10,2756	7,6989	9,1957	90,00	91,00	90,00	1,544	61	0,06
6	Eu(NO ₃) ₃ · 4Б(сн)	750,3	549,7	10,4574	8,5464	8,7703	90,00	44,31	90,00	2,26	61	0,03
7	Ce(NO ₃) ₃ · 2Б · 5H ₂ O	622,29	357,5	8,7266	6,5542	6,8467	90,00	65,6	90,00	2,88	52	0,04
8	La(NO ₃) ₃ · 2Б · 5H ₂ O	621,08	458,19	9,8253	7,9001	8,6724	90,00	91,00	90,00	2,25	52	0,001
9	Nd(NO ₃) ₃ · 2Б · 2H ₂ O	572,42	381,2	8,5667	6,5834	6,7678	90,00	87,00	90,00	2,49	43	0,05
10	Gd(NO ₃) ₃ · 2Б	549,43	754,1	10,7106	7,8622	8,8011	90,00	91,00	90,00	1,21	37	0,002
11	Er(NO ₃) ₃ · 4Б · 2H ₂ O	801,16	633,72	9,6992	7,4375	8,5949	90,00	92,5	90,00	2,098	69	0,002
12	Sm(NO ₃) ₃ · 2Б · 2H ₂ O	578,56	736,26	13,5500	6,3366	8,3569	90,00	91,00	90,00	1,304	69	0,02
13	Ho(NO ₃) ₃ · 4Б · 2H ₂ O	799,3	2271,69	16,2850	7,5800	13,3000	90,00	112,5	90,00	0,584	69	0,01
14	Dy(NO ₃) ₃ · 4Б · 2H ₂ O	796,87	488,6	9,6101	6,6250	7,4429	90,00	92,00	90,00	2,707	69	0,01
15	Pr(NO ₃) ₃ · 2Б · 2H ₂ O	383,07	490,4	12,5140	6,6789	7,4750	90,00	92,05	90,00	1,298	43	0,01

Таблица 2

Параметры элементарной ячейки кристаллической решетки нитратов редкоземельных элементов с биуретом

№	Названий соединений	Кол-во атомов элементарных ячейки, Z	Соотношение позиционных координат		Массы отдельной молекулы m · 10 ⁻²⁹ кг	Линейные размеры молекулы, L 10 ⁻¹² см	Количества атомов		Удельный объем V _y см ³ / гр	Молекулярный V _m см ³ /моль объем /моль	Диаметр молекулы, D 10 ⁻¹² см
			с/а	с/в			кислорода	водорода			
1	Lu(NO ₃) ₃ · 4Б · H ₂ O	10	0,92	1,12	14,803	2,466	18	21	0,392	349,46	0,785
2	Yb(NO ₃) ₃ · 4Б	15	0,82	0,61	12,814	2,097	17	20	0,434	410,31	0,668
3	Tm(NO ₃) ₃ · 4Б	10	0,84	1,18	12,745	2,058	17	20	0,532	333,16	0,655
4	Tb(NO ₃) ₃ · 4Б	10	0,83	1,33	12,579	1,981	17	20	0,485	367,61	0,631
5	Gd(NO ₃) ₃ · 4Б	6	0,81	1,19	12,551	1,967	17	20	1,075	490,64	0,626
6	Eu(NO ₃) ₃ · 4Б(сн)	10	0,84	1,03	12,463	1,925	17	20	0,442	331,99	0,613
7	Ce(NO ₃) ₃ · 2Б · 5H ₂ O	10	0,08	1,04	10,337	1,099	18	15	0,347	216,06	0,350
8	La(NO ₃) ₃ · 2Б · 5H ₂ O	10	0,88	1,09	10,317	1,090	18	15	0,444	276,03	0,347
9	Nd(NO ₃) ₃ · 2Б · 2H ₂ O	10	0,79	1,03	9,509	1,020	15	12	0,402	229,88	0,328
10	Gd(NO ₃) ₃ · 2Б	10	0,82	1,12	9,126	1,000	13	10	0,826	454,07	0,318
11	Er(NO ₃) ₃ · 4Б · 2H ₂ O	10	0,88	1,15	13,308	2,0021	19	24	0,477	381,87	0,638
12	Sm(NO ₃) ₃ · 2Б · 2H ₂ O	10	0,62	1,32	13,049	2,044	15	14	0,767	443,68	0,651
13	Ho(NO ₃) ₃ · 4Б · 2H ₂ O	10	0,82	1,75	13,277	2,0014	19	24	1,880	1368,67	0,637
14	Dy(NO ₃) ₃ · 4Б · 2H ₂ O	10	0,77	1,12	13,237	2,0012	19	24	0,370	294,37	0,637
15	Pr(NO ₃) ₃ · 2Б · 2H ₂ O	10	0,59	1,11	6,363	1,865	15	12	0,444	170,25	0,594

ВЫВОД

1. Впервые определены параметры элементарной ячейки: a , b , c , α , β , γ или V .

2. Вычислены: масса и длина молекулы, а так же количество молекул содержащегося в элементарной ячейке.

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

Литература:

1. Акматова М.Р. Координационные соединения нитратов РЗЭ, Mg и Ca с биуретом и их физико-химические свойства, Канд. дис.на соискание уч. степени хим. наук. - Бишкек. - 1997. с -14.

2. Абдыбалиев Д.А. Синтез и изучение соединений анилина методами физико-химического анализа //Изв. Кирг. ССР. сер.хим-биол. науки-Фрунзе.Деп.во ВИНТИ от 15.08.89. N 5483-B89.

3. Lipson H. Acta. Cryst. 2, 49.-1949.

4. Азаров Л.Б., Бургер М.И. Метод порошка в рентгенографии. - ИЛ. – 1949.

5. Липсон Г. Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм //Пер.с англ. Е.Н.Беловой и Г.П. Литвинской. Под ред. Академика Н.В.Белова. - М.- Мир. - 1972-384 с.

6. de Wolff P.M. Adv, in X-ray Analysis. Vol. 6. Plenum Press. New.York.-1963

7. Ito T. X-ray Studies in Polymorphism. Maruzen.-Tokyo.-1950.

8. Нудельман С.А. Расшифровка рентгенограмм методом переменного масштаба, - М. - Госгеологтех-издат. -1962

9. Миркин Л.И. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов. - М. Физматиздат. -1961.-863 с.

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