

Корисна модель відноситься до нових хімічних речовин координаційної будови, а саме сполук міді(II), цинку, та кадмію з аміаком та йоном дифосфату в твердому кристалічному стані загальної формули  $Cu_{1,0}Zn_{0,5}Cd_{0,5}P_2O_7 \cdot 2,5NH_3 \cdot 2,6H_2O$ .

Найбільш близьким за хімічною суттю і досягнутим результатом до винаходу, що передбачається, є кристалічний гідратований аміачний дифосфат міді (II) [Пат. 62782 А СО ІВ 25/26 UA /Кристалічний гідратований аміачний дифосфат міді та спосіб його одержання. - Бюл. №12, 15.12.2003]. Кристалічний гідратований аміачний дифосфат міді загальної формули  $Cu_2P_2O_7 \cdot nNH_3 \cdot mH_2O$ , де  $n=1-3$ ;  $m=1-5$  одержували шляхом розчинення  $Cu_2P_2O_7 \cdot 5H_2O$  у надлишку 23-25%-го водного розчину аміаку, взятому із розрахунку 110-120% стехіометрично необхідної кількості для утворення йонів  $[Cu(NH_3)_4]^{2+}$ , далі одержаний розчин вливали в ацетон, об'єм якого у 3-5 разів більший за об'єм аміачного розчину дифосфату міді, суміш перемішували протягом 5-10хв. до утворення донної фази, яку потім відділяли від розчину і витримували при 15-25°C до її кристалізації та досягнення постійної маси.

Недоліком прототипу стосовно об'єкту, що заявляється, є: передбачувана наявність у складі речовини лише одного двовалентного металу Cu; недостатні умови для одержання індивідуальної сполуки, яка відноситься до потрібних солей за складом катіонів, і є при цьому кристалічною за своєю структурою; наявність у складі речовини-прототипу лише одного металу Cu, внаслідок чого вона буде односпрямованою за своїми властивостями при використанні.

Корисною моделлю ставиться завдання одержати потрібну сіль акваамінодифосфату міді(II)-цинку-кадмію із заданим мольним співвідношенням між катіонами металів у твердому кристалічному стані.

Поставлене корисною моделлю завдання досягається тим, що кристалічний потрібний акваамінодифосфат міді(II)-цинку-кадмію, загальної формули  $Cu_{1,0}Zn_{0,5}Cd_{0,5}P_2O_7 \cdot 2,5NH_3 \cdot 2,6H_2O$ , одержаний як тверда кристалічна сполука із заданим мольним співвідношенням між катіонами металів на основі розчинення механічної суміші,  $Cu_2P_2O_7 \cdot 5H_2O$ ,  $Zn_2P_2O_7 \cdot 5H_2O$  та  $Cd_2P_2O_7 \cdot 5H_2O$ , взятих у співвідношенні  $CuO:ZnO:CdO=1,0:0,5:0,5$ , у надлишку концентрованого водного розчину аміаку з подальшим осадженням твердої сполуки додаванням ацетону і її витримуванням на повітрі при 15 ÷ 25°C до повного тверднення та постійної маси.

Твердий кристалічний потрібний акваамінодифосфат міді(II)-цинку-кадмію складу  $CuZnCdP_2O_7 \cdot 2,5NH_3 \cdot 2,6H_2O$  одержують шляхом розчинення суміші гідратованих дифосфатів міді(II), цинку та кадмію у надлишку 23-25%-го водного розчину аміаку, взятому із розрахунку 110-120% стехіометрично необхідної кількості для утворення йонів  $[Me(NH_3)_4]^{2+}$ . Як вихідні реагенти використовують гідратовані дифосфати міді(II), цинку та кадмію загальної формули  $Me_2P_2O_7 \cdot (5-6)H_2O$ . Синтез виконують у такому порядку: наважки дрібнодисперсних  $Cu_2P_2O_7 \cdot 5H_2O$ ,  $Zn_2P_2O_7 \cdot 5H_2O$  та  $Cd_2P_2O_7 \cdot 5H_2O$ , взятих в мольному співвідношенні  $CuO:ZnO:CdO$ , змішують між собою та повністю розчиняють у надлишку 23-25%-го водного розчину аміаку, взятого у 110-120%-ному надлишку від стехіометрично розрахованої кількості. Далі до аміачного розчину дифосфатів міді(II), цинку та кадмію додають ацетон, об'єм якого у 3-5 разів більший за об'єм аміачного розчину. Утворену маслянисту донну фазу темно-синього кольору відділяють від маточного розчину і витримують на повітрі при 15 ÷ 25°C до повного тверднення та постійної маси.

Приклад. Дрібнодисперсні наважки дифосфату міді(II) масою 4г, дифосфату цинку масою 1,75г та дифосфату кадмію масою 1,55г (мольне співвідношення  $CuO:ZnO:CdO=1,0:0,5:0,5$ ) змішують і до механічної суміші додають 50мл 25%-го водного розчину аміаку. Розмішують суспензію до повного розчинення наважок дифосфатів. Далі отриманий аміачний розчин вливають до 150мл ацетону. Верхній шар маточного розчину зливають декантацією, а нижню маслянисту темно-синього кольору фазу відділяють від маточного розчину і витримують на повітрі при 15 ÷ 25°C до повного тверднення та постійної маси. Одержують речовину темно-синього кольору, яка за хімічним складом відповідає брутто-формулі речовини  $1,0CuO \cdot 0,5ZnO \cdot 0,5CdO \cdot P_2O_5 \cdot 2,5NH_3 \cdot 2,6H_2O$  або молекулярній формулі  $Cu_{1,0}Zn_{0,5}Cd_{0,5}P_2O_7 \cdot 2,5NH_3 \cdot 2,6H_2O$ .

Обґрунтування умов утворення твердого акваамінодифосфату міді(II)-цинку-кадмію наведено в табл. 1-2.

Загальна формула синтезованої речовини встановлена за її хімічним складом (табл. 1).

Таблиця 1

Визначення хімічної формули твердого акваамінодифосфату міді(II)-цинку-кадмію

Показники складу речовини за прикладом	Компоненти продуктів					
	CuO	ZnO	CdO	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	NH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> O
Вміст компонентів, %	19,23	9,80	15,51	34,2	10,12	11,27
Мольні частки компонентів	0,2419	0,1204	0,1208	0,2409	0,5951	0,626
Стехіометричні коефіцієнти компонентів у брутто-формулі сполуки	1	0,5	0,5	1	2,5	2,6
Брутто-формула речовини за компонентним складом	$1,0CuO \cdot 0,5ZnO \cdot 0,5CdO \cdot P_2O_5 \cdot 2,5NH_3 \cdot 2,6H_2O$					
Хімічна формула за речовинним складом	$[Cu_{1,0}Zn_{0,5}Cd_{0,5}P_2O_7 \cdot 2,5NH_3 \cdot 2,6H_2O]P_2O_7$					

В табл. 2 наведено обґрунтування умов утворення твердого кристалічного акваамінодифосфату міді(II)-цинку-кадмію індивідуального складу. Дані, наведені у табл. 2, свідчать, що індивідуальна кристалічна сполука формується лише при мольному співвідношенні  $CuO:ZnO:CdO=1,0:0,5:0,5$ .

Таблиця 2.

Умови утворення твердого потрібного акваамінодифосфату міді(II)-цинку-кадмію

№	Мольне	Вихід	Хімічний склад продукту, % мас.	Кількість	Склад продуктів
---	--------	-------	---------------------------------	-----------	-----------------

з/п	співвідношення між CuO, ZnO та CdO у вихідній суміші	продукту за MeO, %	CuO	ZnO	CdO	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	NH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> O	фаз у складі твердого продукту за даними рентгенофазового аналізу	
1	0,5:1,0:0,5	~100	9,71	19,87	15,64	34,66	9,15	0,611	2	Cu <sub>0,5</sub> Zn <sub>1,0</sub> Cd <sub>0,5</sub> P <sub>2</sub> O <sub>7</sub> ·2,2NH <sub>3</sub> ·2,5H <sub>2</sub> O (механічна суміш двох речовин)
2	1,0:0,5:0,5	~100	19,23	9,80	15,51	34,2	10,12	11,27	1	Cu <sub>1,0</sub> Zn <sub>0,5</sub> Cd <sub>0,5</sub> P <sub>2</sub> O <sub>7</sub> ·2,5NH <sub>3</sub> ·2,6H <sub>2</sub> O
3	0,5:0,5:1,0	~100	9,10	9,30	29,33	32,46	7,42	12,36	2	Cu <sub>0,5</sub> Zn <sub>0,5</sub> Cd <sub>1,0</sub> P <sub>2</sub> O <sub>7</sub> ·1,9NH <sub>3</sub> ·3,0H <sub>2</sub> O (механічна суміш двох речовин)

Відповідно до наведених у табл. 1 та 2 даних, головними умовами утворення сполуки індивідуального складу - твердого кристалічного потрійного акваамінодифосфату міді(II)-цинку-кадмію - є обов'язкове використання у якості вихідних реагентів суміші дифосфатів міді(II), цинку та кадмію, взятих у мольному співвідношенні CuO:ZnO:CdO=1,0:0,5:0,5.

Координаційну структуру одержаної сполуки підтверджують дані 14 спектроскопії. У табл. 3 наведені частоти смуг поглинання на 14 спектрах вихідних Cu<sub>2</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub>·5H<sub>2</sub>O, Zn<sub>2</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub>·5H<sub>2</sub>O та Cd<sub>2</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub>·5H<sub>2</sub>O і синтезованого Cu<sub>1,0</sub>Zn<sub>0,5</sub>Cd<sub>0,5</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub>·2,5NH<sub>3</sub>·2,6H<sub>2</sub>O та їх віднесення.

Таблиця 3.

Частоти (см<sup>-1</sup>) максимумів смуг поглинання на 14 спектрах вихідних Cu<sub>2</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub>·5H<sub>2</sub>O, Zn<sub>2</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub>·5H<sub>2</sub>O та Cd<sub>2</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub>·5H<sub>2</sub>O і синтезованого Cu<sub>1,0</sub>Zn<sub>0,5</sub>Cd<sub>0,5</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub>·2,5NH<sub>3</sub>·2,6H<sub>2</sub>O

Zn <sub>2</sub> P <sub>2</sub> O <sub>7</sub> ·5H <sub>2</sub> O	Cu <sub>2</sub> P <sub>2</sub> O <sub>7</sub> ·5H <sub>2</sub> O	Cd <sub>2</sub> P <sub>2</sub> O <sub>7</sub> ·5H <sub>2</sub> O	Cu <sub>1,0</sub> Zn <sub>0,5</sub> Cd <sub>0,5</sub> P <sub>2</sub> O <sub>7</sub> ·2,5NH <sub>3</sub> ·2,6H <sub>2</sub> O	Віднесення
3410-3140 с.ш.	3400-3100 с.ш.	3400-3090 с.ш.	3460-3120с.ш.	ν(H <sub>2</sub> O), ν <sub>as</sub> (NH <sub>3</sub> )
1625ср. 1600ср.	1600ср.	1610ср.	1640пл. 1600ср. 1570пл.	ν(H <sub>2</sub> O), δ <sub>as</sub> (NH <sub>3</sub> )
—	—	—	1450пл. 1425сл. 1385пл.	δ <sub>s</sub> (NH <sub>3</sub> )
			1220ср.	δ <sub>s</sub> (NH <sub>3</sub> )
1087с. 1012с. 993с.	1070с. 1020сл. 980пл.	1080с. 1025сл. 985пл.	1120пл. 1070пл.	ν <sub>as</sub> (P <sub>2</sub> O <sub>7</sub> )
942с.	942с.	940с.	1010с. 990пл.	ν <sub>s</sub> (P <sub>2</sub> O <sub>7</sub> )
—	—	—	730сл. 675пл.	ρ <sub>r</sub> (NH <sub>3</sub> )
600с. 555с. 520с.	600с. 555с. 525с.	600с. 550с. 525с.	600ср. 570ср.	ν <sub>as</sub> (POP), [P <sub>2</sub> O <sub>7</sub> ] δ <sub>as</sub> (OPO)
480ср. 460сл	480ср. 460сл.	485ср. 460сл.	470пл.	δ <sub>s</sub> (OPO) Me-N Me-O

с. - сильна; ср. - середня; сл. - слабка; ш. - широка інтенсивна смуга поглинання; пл. - плече.

Результати рентгенофазового аналізу показали, що синтезований твердий потрійний акваамінодифосфат міді(II)-цинку-кадмію Cu<sub>1,0</sub>Zn<sub>0,5</sub>Cd<sub>0,5</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub>·2,5NH<sub>3</sub>·2,6H<sub>2</sub>O має кристалічну структуру, що задовільно індиціюється у моноклінній сингонії.

При співвідношеннях у продуктах синтезу між CuO:ZnO:CdO рівному 0,5:1,0:0,5 та 0,5:0,5:1,0 вони є рентгеноаморфними.

В табл. 4 наведено основні кристалографічні характеристики твердого кристалічного потрійного акваамінодифосфату міді(II)-цинку-кадмію.

Таблиця 4.

Речовина	Параметри кристалічної ґратки, Å			Кути, град			Об'єм комірки, Å <sup>3</sup>	Сингонія
	a	b	c	α	β	γ		
Cu <sub>1,0</sub> Zn <sub>0,5</sub> Cd <sub>0,5</sub> P <sub>2</sub> O <sub>7</sub> ·2,5NH <sub>3</sub> ·2,6H <sub>2</sub> O	10,979	13,386	10,977	90	90	96,41	1603,03	моноклінна