Synthesis and Molecular Structure of 
[Cd (NO$_3$)$_2$ (Urea)$_4$]

Tadjarodi, A. - Taeb, A. 
Iran University of Science & Technology, Tehran, Iran

Key Words: Synthesis, Molecular Structure, Cadmium Nitrate, Urea

Abstract: [Cd(NO$_3$)$_2$(urea)$_4$] was synthesized by reaction of cadmium nitrate and urea under certain conditions. The dimensions of used crystal were 0.47×0.40×0.58 mm. The molecular structure has been determined by SHELX-86 program. This complex crystallizes in monoclinic space group $P2_1/a$ with two molecules per unit cell. Lattice parameters of this compound are:

$$a = 7.6060 \, \text{Å} \quad b = 12.7740 \, \text{Å} \quad c = 9.0370 \, \text{Å} \quad \beta = 114.07^\circ$$

After least - square cycle, the final R and $R_w$ values are 0.056 and 0.0685, respectively. According to IR and molecular structure studies, urea molecule is coordinated through oxygen.
تهیه و مطالعه ساختار مولکولی کمپلکس \[ \text{Cd (NO}_3\text{)}_2 (\text{Urea})_4 \]

آزاده تجردی - عباس طابی
دانشگاه علم و صنعت ایران

چکیده: از الکلور برو محلول اشباع کادمیوم نیترات در دمای \(6^\circ\)C، کمپلکس با فرمول \(\text{Cd (NO}_3\text{)}_2 (\text{urea})_4 \) به دست آمد. ساختار مولکولی این کمپلکس به روش پراش سنجی تک بلور برتو ایکس تهیه شده است. بلورهای این کمپلکس در سیستم بلوری تک میل با گروه فضایی \(P2_1/a \) با دو مولکول در باخته یکه تک بلور می‌شود. پردازش‌های باخته یکه عبارتند از:

\[ a = 11.14/11.14 \text{ Å}, b = 11.14/11.14 \text{ Å}, c = 9.37/9.37 \text{ Å}, \beta = 120^\circ \]

پس از تعیین ساختار، ثابت‌پذیری \(R_w \) به ترتیب تا میزان 0.0485 و پذیرایی \(R \) کاوش بافت، انرژی بر این، مطالعات تابش فتو، خر و پراش سنجی، نتیجه‌یکسانی می‌بینیم بر پیوند اوره از طریق اکسیژن به اتم کادمیوم را نشان می‌دهد.

واژه‌های کلیدی: تهیه، ساختار مولکولی، کادمیوم نیترات، اوره.

مقدمه

فعالیت‌های تجربی

اه) تهیه کمپلکس

به ۳۰ ملی‌لیتر محلول اشباع کادمیوم نیترات در آب، به تدریج اوره اضافه شده، تا زمانی که دیگر اوره به سختی در آب حل می‌شود. با کمی گرم کردن آن تا دماي ۷۰ درجه سانتی‌گراد محلول شفافی به دست آمده. محلول حاوی تا دماи محیط به تدریج صرد شد. در این مرحله محصول قابل توجهی به دست نیامده و تنها رسوب‌های رویی که به‌طور جسمانی بودند به جرم می‌خوردند، که قابل جدا کردن بودند. محلول صاف شد، که پس از یک هفته، از محلول زیر صافی در دماي آزمایشگاه، بلورهایی تشکیل شد، که نه بلورهای مناسبی برای بررسی به روش پارسی سنگی پرتو ایکس بودند.

ب) بررسی طیف سنگی فرو سرخ

نتایج طیف سنگی فرو سرخ به قرار زیرند:

IR (KBr, cm⁻¹):

۳۴۵۰ (s); ۳۳۰۰ (s); ۱۸۳۵ (s); ۱۲۶۵ (s); ۱۳۸۴ (s); ۱۱۳۹ (m);
۸۲۵ (m); ۷۰۰ (w).

(ج) تعیین ساختار مولکولی

اندازه‌گیری کلیه شدیدان با به‌کار بردن پرتو سنگی استو و تابش Mo–Kα انجام گرفت. اندازه‌گیری شدیدان با استفاده از برنامه کامپیوتری [v] SHELX و تابع پرسون، ساختار این کمپلکس با استفاده از برنامه کامپیوتری ۸۶–۸۳ روش‌های جداکردن مربوط، تعیین و تصحیح شد. در این بررسی روش اندزاگیری به کار گرفته شد در جدول ۱، داده‌های بلوری کمپلکس [Cd(NO₃)₂(urea)₄]آورده شده‌اند. مختصات اتم‌ها، فواصل پیوندی، زاویای پیوندی و ضرایب دماایی به ترتیب در جدول‌های ۱۳۴ و ۴ نشان داده شده‌اند.
جدول 1 پارامترها و داده‌های تجربی

فرمول شیمیایی: C₄H₁₀O₁₀N₁₀Cd
جرم مولکولی: 476.65 g/mol

a = 7.005 Å
b = 12.764 Å

v = 88.1 Å³

سیستم بلوری: P2₁/a (14)

وزن کولورا در یک‌پانصدس: 1.97 mg/m³

شیپو پیماش: omega scan, Δω = 1.2°

شیب تعداد بازتاب‌های استاندارد به تناسب اندازه گیری آنها: 3/200

تعداد بازتاب‌های اندازه گیری شده:

با بازتاب‌های مستقل: 170
با بازتاب‌های کریستال: 1532

F₀ > 3σ[F₀]

Mo–Kα

پرتو: 0.7106 Å

ضریب جذب (cm⁻¹): 14.6 

ضریب خاموشی (استحلاک): 0.1

International Tables (1974)

پارامترهای حداکثر مربوط:

R₁ = Σ |F₀| - |F_C| / Σ |F₀| = 0.0556

Rw = [Σ hkl W(|F₀| - |F_C|)^2 / Σ hkl F₀^2]^(1/2) = 0.0685

تابع وزن:...

فلکه پیشین در آخرین نشان دهنده اختلاف فوریه (e Å⁻³): 242

Patterson
تنهیه و مطالعه ساختار مولکولی کمپلکس \([\text{Cd(NO}_3\text{)}_2(\text{urea})_4]\)

جدول ۲ پارامترهای \(X, Y, Z\) با مختصات \(B(A2)\)

<table>
<thead>
<tr>
<th>اتم</th>
<th>(x)</th>
<th>(y)</th>
<th>(z)</th>
<th>(B(A2))</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>Cd</td>
<td>0.000</td>
<td>0.000</td>
<td>0.000</td>
<td>7</td>
</tr>
<tr>
<td>O2</td>
<td>0.0738</td>
<td>0.1409</td>
<td>-0.1219</td>
<td>12</td>
</tr>
<tr>
<td>O3</td>
<td>0.1899</td>
<td>-0.1134</td>
<td>-0.0543</td>
<td>12</td>
</tr>
<tr>
<td>O11</td>
<td>0.2899</td>
<td>0.0396</td>
<td>0.2195</td>
<td>19</td>
</tr>
<tr>
<td>O12</td>
<td>0.4566</td>
<td>0.1480</td>
<td>0.4061</td>
<td>37</td>
</tr>
<tr>
<td>O13</td>
<td>0.1963</td>
<td>0.0877</td>
<td>0.4038</td>
<td>30</td>
</tr>
<tr>
<td>N1</td>
<td>0.3095</td>
<td>0.0921</td>
<td>0.3438</td>
<td>14</td>
</tr>
<tr>
<td>N21</td>
<td>0.0737</td>
<td>0.2856</td>
<td>-0.2529</td>
<td>16</td>
</tr>
<tr>
<td>N22</td>
<td>-0.0801</td>
<td>0.1392</td>
<td>-0.3964</td>
<td>22</td>
</tr>
<tr>
<td>N31</td>
<td>0.3193</td>
<td>-0.0244</td>
<td>-0.2034</td>
<td>25</td>
</tr>
<tr>
<td>N32</td>
<td>0.4022</td>
<td>-0.1945</td>
<td>-0.1320</td>
<td>20</td>
</tr>
<tr>
<td>C2</td>
<td>0.0209</td>
<td>0.1870</td>
<td>-0.2536</td>
<td>11</td>
</tr>
<tr>
<td>C3</td>
<td>0.2996</td>
<td>-0.1070</td>
<td>-0.1295</td>
<td>11</td>
</tr>
</tbody>
</table>

جدول ۳ طول بیننده \((A^0)\)

<table>
<thead>
<tr>
<th>اتم 1</th>
<th>اتم 2</th>
<th>فاصله</th>
<th>فاصله</th>
<th>اتم 1</th>
<th>اتم 2</th>
<th>فاصله</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>Cd</td>
<td>O2</td>
<td>2.296</td>
<td>O12</td>
<td>N1</td>
<td>1.251</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Cd</td>
<td>O3</td>
<td>2.236</td>
<td>O13</td>
<td>N1</td>
<td>1.191</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Cd</td>
<td>O11</td>
<td>2.342</td>
<td>N21</td>
<td>C2</td>
<td>1.321</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>O2</td>
<td>C2</td>
<td>1.239</td>
<td>N22</td>
<td>C2</td>
<td>1.350</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>O3</td>
<td>C3</td>
<td>1.276</td>
<td>N31</td>
<td>C3</td>
<td>1.289</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>O11</td>
<td>N1</td>
<td>1.263</td>
<td>N32</td>
<td>C3</td>
<td>1.368</td>
<td></td>
</tr>
</tbody>
</table>
نتایج

به عنوان یک دانشجوی دانشگاه، عمل می‌کنند. این نتایج با نتایج حاصل از طیف سنجی فروسرخ مطابقت دارد، زیرا در طیف فروسرخ این کمپلکس نوار جذبی به صورت دو تایی است. به فاصله بین آنها در حدود 700 cm⁻¹ مشاهده شده است. همچنین وجود یک افزایش است و CO مولکول اوره از این کمپلکس به کادمیوم متمایل شده است.

که مولکول اوره از طریق اکسیژن به کادمیوم می‌شود.

پلورهای این کمپلکس در سیستم بلوری تک میل (مونوکلینیک) و گروه فضایی

با دو مولکول در بافتی یک مولکول می‌شوند. مقدار نهایی

برای

ORTEP

در

1708

با ترتیب 9555/0، 0/485/0 به دست آمده. تصویر

شکل 3 نشان داده شده است.
[Cd(NO₃)₂(urea)₄]

[۱] نمونه مطالعه ساختار مولکولی کمپلکس

[۲] تصویر کمپلکس [Cd(NO₃)₂(urea)₄] ORTEP
پرای تعمیم ساختار این کمپلکس از برنامه 86 - SHELX استفاده شد ولی
متاسفانه به علت عدم همکاری رسام با برنامه جهت اجرای برنامه ORTEP
مشکلی از برنامه MOLEN شد و بدن طریق طول بیده‌ها، زواياي بیده‌ی، و
تصاوبر به دست آمدند. ولی انحراف معیار آنها قابل تطبیق نبود به همین علت در
جدول‌ها درج نشده است.

مراجع

1 - طالب، عباس – تجردی، آزاده – منطقی، فریادکه، بررسی تحقیقاتی تهیه کمپلکس‌های
جدید از کادمیوم نیترات و شناسایی ساختار بلورین آنها، بهمن 1372 دانشگاه علم و
صنعت ایران.


Cryst. (C), 39, 1350.


Trans., 4, 605

7 - SHELXS: (1986) programs for crystal structure determination.

8 - Nakamoto, K. (1986) Infrared and Raman Spectra of Inorganic and
Coordination Compounds, John Wiley & Sons, New York, 4th Ed.