

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР ТЕТРАФТОРОБРОМАТОВ  
НАТРИЯ И РУБИДИЯ**А.А. Воробьева

Научный руководитель: ассистент, С.И. Ивлев

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: [anechka\\_vorobyova@mail.ru](mailto:anechka_vorobyova@mail.ru)**DETERMINATION OF CRYSTAL STRUCTURES OF SODIUM AND RUBIDIUM  
TETRAFLUOROBROMATES**A.A. Vorobyova

Scientific Supervisor: S.I. Ivlev

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: [anechka\\_vorobyova@mail.ru](mailto:anechka_vorobyova@mail.ru)

***Annotation.** In this study the determination of the crystal structures of sodium and rubidium tetrafluorobromates was carried out using powder X-ray diffraction data. Indexing of the diffraction patterns was conducted in the software package WinXPow. Then the patterns were processed in the software package Jana2006. In the result the cell parameters, space groups, and atom positions were determined.*

Важное место в технологии редких элементов и материалов, применяющихся в атомной промышленности, занимают процессы получения фтористых соединений элементов. Многие из фторирующих агентов, например, трифторид брома  $\text{BrF}_3$ , нашли применение в промышленности, они могут эффективно применяться для вскрытия различных руд и концентратов. Но высокая реакционная способность фторокислителей, применяющихся в настоящее время, сильно осложняет их использование в промышленности, создаёт определённые сложности при их хранении и транспортировке [1].

В настоящее время заменой традиционным фторокислителям является применение тетрафтороброматов щелочных металлов, которые способны также одновременно окислять весь ряд радиоактивных и редкоземельных элементов. Они представляют собой твёрдые вещества, состав которых может быть описан формулой  $\text{MeBrF}_4$ . Многие из физико-химических свойств тетрафтороброматов не могут быть определены прямыми методами вследствие их высокой активности и коррозии материалов аппаратуры. В настоящее время для определения их свойств могут быть использованы расчётные методы современной квантовой химии твёрдого тела, поэтому одним из важных вопросов является изучение кристаллических структур тетрафтороброматов, что является исходными данными для таких расчётов [2].

Литературный поиск показал, что на сегодняшний день кристаллические структуры, необходимые для проведения таких расчётов, установлены не для всего ряда тетрафтороброматов. Целью данной работы являлось устранение этого пробела, а именно, определение кристаллических структур тетрафтороброматов натрия и рубидия.

Синтез тетрафтороброматов натрия и рубидия в настоящем исследовании проводился по методике, основанной на следующем взаимодействии:



Смесь реагентов в начальный момент времени представляла собой систему, состоящую из твердого хлорида щелочного металла и двух несмешивающихся жидкостей: трифторида брома и инертного хладона. В качестве хладона использовался фреон с температурой кипения 47,5 °С. При этом плотность трифторида брома больше плотности хладона, поэтому  $\text{BrF}_3$  находился на дне реактора. Полученные в ходе синтеза тетрафтороброматы после измельчения помещались в стеклянные капилляры Линдемманна, которые далее герметично запаивались и использовались в дифракционных экспериментах.

Съёмка дифрактограмм тетрафтороброматов натрия и рубидия проводилась на дифрактометре Stoe Stadi-P с использованием  $\text{Cu-K}\alpha$  излучения. Шаг сканирования составил 0,015 °, время сбора данных при каждом значении угла – 10 секунд. Пример полученной дифрактограммы для случая  $\text{RbBrF}_4$  представлен на рисунке 1.

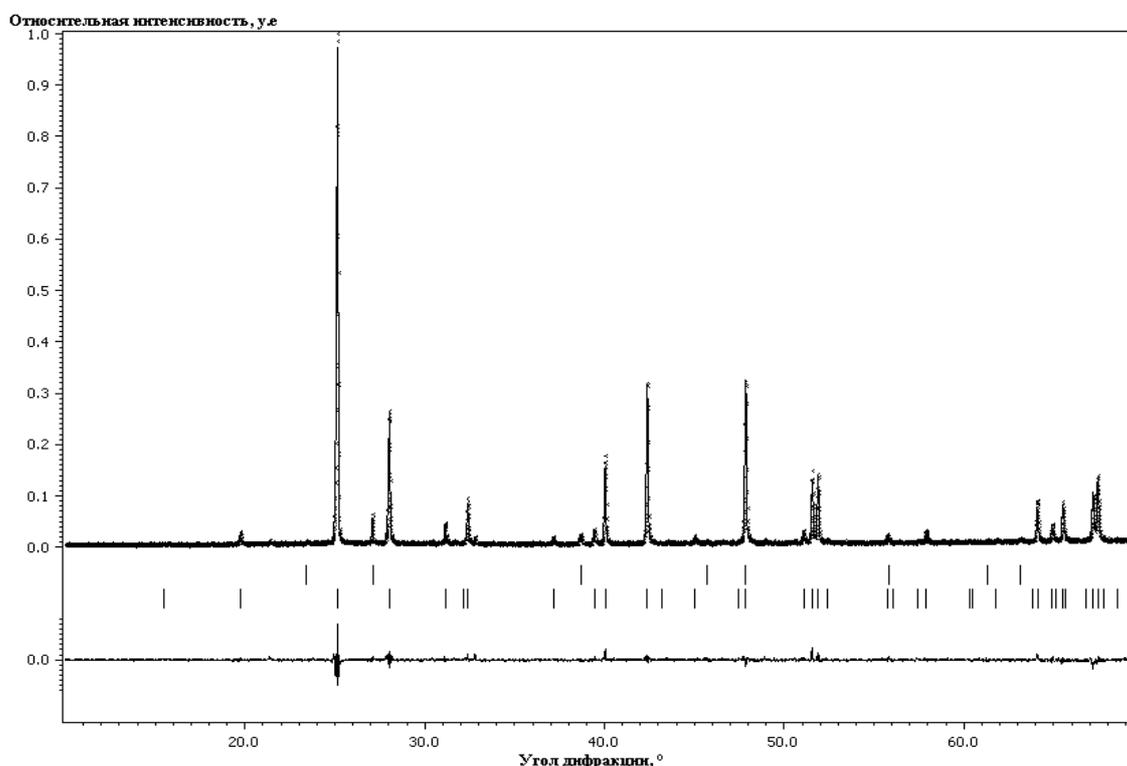


Рис. 1. Дифрактограмма  $\text{RbBrF}_4$

Затем проводилось индексирование дифрактограмм в штатном программном обеспечении дифрактометра – WinXPow. В обоих случаях были получены решения в центрированных тетрагональных типах решётки с достаточно достоверными показателями. В обоих случаях найденное решение представляло собой тетрагональную центрированную решётку. Дальнейшая обработка дифрактограмм проводилась в программном комплексе Jana2006. Определение кристаллических структур тетрафтороброматов натрия и рубидия проводилось исходя из предположения, что соединения  $\text{NaBrF}_4$  и

## «ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУК»

RbBrF<sub>4</sub> изоструктурны соединению KBrF<sub>4</sub>. Некоторые кристаллографические данные полученных структур приведены в таблице 1. Фрагмент элементарной ячейки RbBrF<sub>4</sub> представлен на рисунке 2.

Таблица 1

Основные результаты NaBrF<sub>4</sub> и RbBrF<sub>4</sub>

Соединение	Пространственная группа	Параметры решётки, Å	Z	R <sub>p</sub>	R <sub>all</sub>
NaBrF <sub>4</sub>	I4/mcm	a=5.7847, b=5.7847, c=10.4005	4	0.064	0.96
RbBrF <sub>4</sub>	I4/mcm	a=6.3655, b=6.3655, c=11.4816	4	0.098	0.837

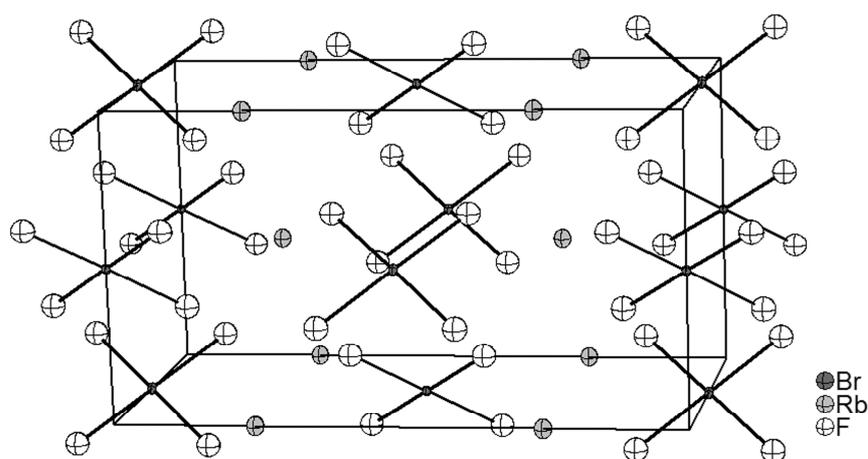


Рис. 2. Фрагмент элементарной ячейки тетрафторобромата рубидия

Опубликованные в настоящей работе кристаллические структуры тетрафтороброматов натрия и рубидия экспериментально установлены впервые и в настоящее время подготавливаются для внесения в международную кристаллографическую базу данных ICSD.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Опаловский А.А. Фторгалогены щелочных металлов // Успехи химии. – 1967. – Т. 36. – №10. – С. 1674–1700.
2. Митькин В. Н. Фторокислители в аналитической химии благородных металлов // ЖАХ. – 2001. – Т. 56. – № 2. – С. 118–142.