

¹Заводяний В.В., ²Заводяний В.В., ³Дашковська В.І

¹Херсонський державний університет

^{2,3}Херсонський державний аграрний університет

ІНДЕКСУВАННЯ РЕНТГЕНОГРАМИ СПОЛУКИ K_3VF_6

Синтез, кристалічна структура та властивості змішаних вторидів металів стають областю інтересів вчених матеріалознавців через ізоелектронну та ізоструктурну природи з їх оксидними аналогами [1].

На відміну від оксидів, синтез змішаних фторидів металів обмежений через складності, що зустрічаються під час його синтезу, і тому багато цікавих властивостей, що притаманні цим фторидам металів інтенсивно досліджуються [1, 2].

Загальні методи, що прийняті для синтезу це висока температура твердофазового синтезу, високий гідротермальний тиск (100МПа), золь-гель синтез і розчин на основі хімічного синтезу.

Сполуку K_3VF_6 можна отримати за допомогою легкого синтезу при кімнатній температурі для V(III) і вториду що містить калій KF.

Негігроскопічна природа K_3VF_6 робить його ідеальним компонентом електроліту для електрорафінування або електрострикції ванадію у порівнянні з іншими кандидатами, такими як VCl_2 і VCl_3 , а також в електрохімічних комірках [3, 4].

Тому дослідження кристалічної структури цієї сполуки залишається актуальним.

Метою даного повідомлення є індексування рентгенограми α фази сполуки K_3VF_6 .

Згідно з [5] дифракційний спектр 00-037-0738 в базі даних PDF-2 сполуки K_3VF_6 отриманий при 298 °К, як α - фаза, індексується в моноклінній сингонії з постійними кристалічної ґратки $a=12.1120$ Å, $b=17.4740$ Å, $c=12.0190$ Å, $\beta=92.59^\circ$.

Спектр сполуки отриманий із бази даних PDF-2 за 2004 рік, за допомогою програми HighScorePlus 3.0 індексується в тетрагональній сингонії з періодами решітки $a=12.35507$ Å, $b=12.35507$ Å, $c=16.7461$ Å. Можлива просторова група симетрії I4122 (98) Рис.1.

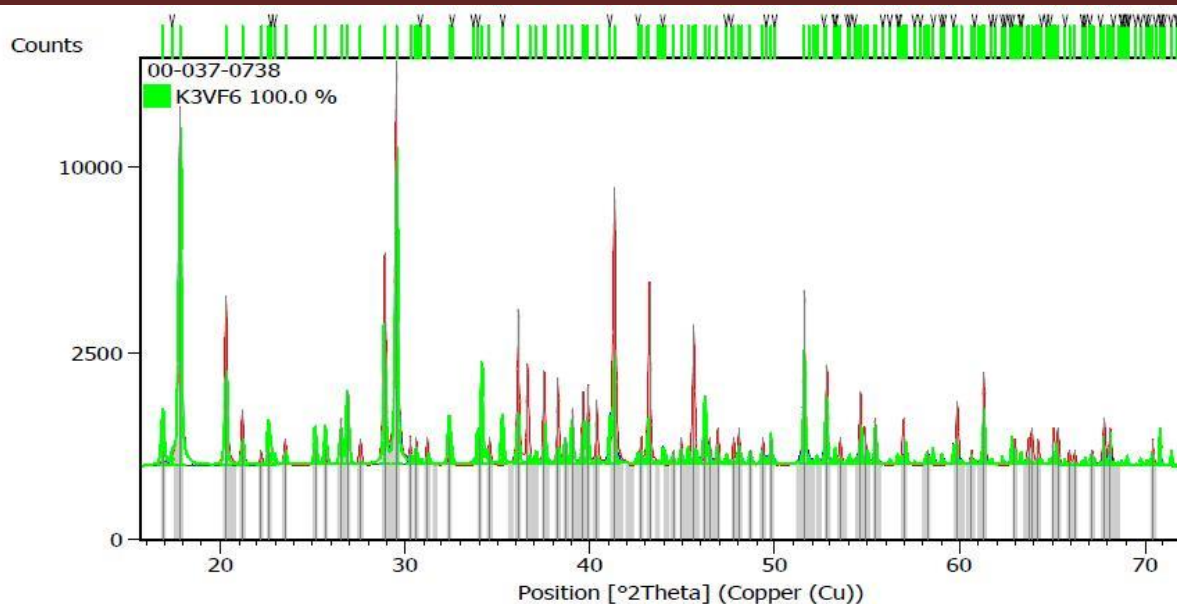


Рис.1. Дифрактограма сполуки K_3VF_6

За допомогою програми TREOR проведено індексування рентгенограми сполуки K_3VF_6 під номером 00-037-0738 в базі даних PDF-2 за 2004 рік.

Дифракційний спектр сполуки індексується в тетрагональній сингонії. Можлива просторова група симетрії $I4122$ (98).

Кристалічна структура даної сполуки може потребувати більш детальнішого вивчення. Зокрема методом монокристалу або отриманням більшої кількості рефлексів з геометрією зйомки Брег-Бертрано.

Література

1. R. Nagarajan, Neetu Tyagi a, Samuel Lofland, K.V. Ramanujachar Spectroscopic, thermal, magnetic and structural characterization of K_3VF_6 prepared at room temperature // Polyhedron 30 (2011) 1425–1429 <http://dx.doi.org/10.1016/j.poly.2011.03.012>
2. B.G. Muller Fluorides of Copper, Silver, Gold, and Palladium ../ Journal Article published in Angewandte Chemie International Edition in English 1987. volume 26 issue 11 on pages 1081 to 1097 <https://doi.org/10.1002/anie.198710811>
3. Henry Selig, John H. Holloway Cationic and anionic complexes of the noble gases // Book Chapter published 1984 in Topics in Current Chemistry on pages 33 to 90 https://doi.org/10.1007/3-540-13534-0_2
4. Werner Harnischmacher, Rudolf Hoppe Tetravalent Copper: $Cs_2[CuF_6]$ // Article published Jul 1973 in Angewandte Chemie International Edition in English volume 12 issue 7 on pages 582 to 583 <https://doi.org/10.1002/anie.197305822>
5. Koyama, K., Hashimoto, Y., Omori, S., Terawaki, K., Indexing of X-Ray Powder Diffraction Data for Potassium Hexafluorovanadate(III) // Bulletin of the Chemical Society of Japan volume 57 issue 8, 1984.-P.2311-2312. <https://doi.org/10.1246/bcsj.57.2311>

**Рекомендує до друку
науковий керівник**

доцент Віктор Заводяний