

## **Древо фаз и моделирование химического взаимодействия в трехкомпонентной системе NaF–KF–BeF<sub>2</sub>**

© Гаркушин\*<sup>+</sup> Иван Кириллович, Лаврентьева Ольга Владимировна,  
Замалдинова Алена Игоревна

Кафедра «Общая и неорганическая химия». Самарский государственный технический  
университет. ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100. Россия.

Тел.: +7 (846) 278-44-77. E-mail: gik49@yandex.ru

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** трехкомпонентная система, фториды, моделирование, стабильные и нестабильные секущие, химическое взаимодействие, двойные соединения, тройные соединения.

### **Аннотация**

Компоненты тройной системы NaF–KF–BeF<sub>2</sub>, как и тройные смеси, имеют важное значение в качестве жидкофазных теплоносителей, теплоаккумулирующих материалов, растворителей неорганических веществ, в производстве специальных стекол. В системе отмечается образование соединений NaF·BeF<sub>2</sub>, 2NaF·BeF<sub>2</sub>, KF·BeF<sub>2</sub>, KF·2BeF<sub>2</sub>, 2KF·BeF<sub>2</sub>, 3KF·BeF<sub>2</sub> и NaF·KF·BeF<sub>2</sub> конгруэнтного и инконгруэнтного плавления в двойных системах ограничения и тройной системе. Построено древо фаз, имеющее разветвленный характер и состоящее из восьми симплексов – вторичных стабильных треугольников, соединяющихся между собой семью стабильными секущими. Моделирование химического взаимодействия при стандартных условиях по термодинамическим данным исходных веществ, двойных и тройных соединений проведено для семнадцати фигуративных точек состава, отвечающих пересечениям стабильных и нестабильных секущих. Для шести смесей при стандартных условиях энтальпии реакций и энергии Гиббса имеют значения больше нуля. Показано, что тройное соединение NaKBeF<sub>4</sub> теоретически может быть синтезировано по нескольким реакциям, а с учетом термодинамических данных только по реакции Na<sub>2</sub>BeF<sub>4</sub>+K<sub>2</sub>BeF<sub>4</sub>. Предложенная методика описания химического взаимодействия (реакции обмена-метатезиса), может быть использована для других типов тройных систем как с образованием двойных соединений на смежных сторонах треугольника, так и с наличием тройных соединений.

### **Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:**

Гаркушин И.К., Лаврентьева О.В., Замалдинова А.И. Древо фаз и моделирование химического взаимодействия в трехкомпонентной системе NaF–KF–BeF<sub>2</sub>. *Бутлеровские сообщения*. 2025. Т.82. №4. С.36-42. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-82-4-2

### **Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:**

Гаркушин И.К., Лаврентьева О.В., Замалдинова А.И. Древо фаз и моделирование химического взаимодействия в трехкомпонентной системе NaF–KF–BeF<sub>2</sub>. *Бутлеровские сообщения В*. 2025. Т.10. №2. Id.2. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-82-4-36/ROI-jbc-RB/25-10-2-2

### **The output for citing the English online version of the article:**

Ivan K. Garkushin, Olga V. Lavrenteva, Alena I. Zamaldinova. Tree of phases and modeling of chemical interaction in ternary system NaF–KF–BeF<sub>2</sub>. *Butlerov Communications B*. 2025. Vol.10. No.2. Id.2. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-82-4-36/ROI-jbc-B/25-10-2-2