

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ  
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ им. Л.В. КИРЕНСКОГО

Препринт № 798 Ф

**КУБИЧЕСКИЕ ГАЛОИДНЫЕ  
ЭЛЬПАСОЛИТОПОДОБНЫЕ КРИСТАЛЛЫ**

Б.В. Безносиков

К.С. Александров

Красноярск 2000

УДК 548.3

Проведен кристаллохимический анализ галоидных эльпасолитоподобных структур составов  $A_2B^+V^{3+}X_6^-$ , где А, В катионы, Х анион. Определена область существования кубических фаз. Прогнозируются соединения, в которых структурные фазовые переходы маловероятны. Приведены структурные данные известных соединений.

Часть материала препринта опубликована в журнальном варианте: Безносиков Б.В. Прогноз галоидных эльпасолитоподобных кристаллов // Перспективные материалы. 2001. № 3. С. 34–39.

	Оглавление	Стр.
1.	Введение	2
2.	Определение области существования кубических структур	7
3.	Структуры с фазовыми переходами	15
4.	Заключение	17
5.	Приложение. Структуры соединений $A_2^+B^+V^{3+}X_6^-$	19
6.	Литература	39

© Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН

*Работы по данной тематике выполняются в лаборатории кристаллофизики Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты: 00–15–96790, 99–02–17375), гранта INTAS 97–10177*

## **1. Введение**

Соединения составов  $A_2B^+V^{3+}X_6^-$ , где А, В – катионы, Х – анион, встречаются среди галогенидов, оксидов, оксигалогенидов, цианидов, гидридов и насчитывают несколько десятков структурных типов. Наиболее вероятны структуры с упорядоченными катионами В в составах  $A_2B^+V^{3+}X_6^-$ . Поведение структуры в эльпасолитоподобных галоидных кристаллах, при изменении термодинамических условий, подобно изменению ее в галоидных перовскитах. При понижении температуры во многих кубических кристаллах происходят ротационные фазовые переходы с понижением симметрии и поворотами анионных октаэдров. Ромбоэдрические политипы под высоким давлением могут переходить в кубические структуры, как в  $Cs_2AgAlF_6$ ,  $Cs_2NaFeF_6$ ,  $Rb_2LiFeF_6$  (см. приложение). Встречаются соединения не испытывающие фазовых переходов.

Многие кристаллы представляют интерес для изучения физических свойств, как с фазовыми переходами, так и без них, но желательно предварительно знать поведение структуры при изменении термодинамических условий (в первую очередь – температуры). Пока достоверно известны только четыре соединения, остающиеся кубическими при охлаждении до 4 К. Это  $Cs_2NaHoF_6$ ,  $Rb_2NaErF_6$ ,  $Rb_2NaEuF_6$ ,  $Rb_2NaYbF_6$  [12, 24].

Целями настоящей работы являются:

- 1. Определение границ существования галоидных кубических эльпасолитоподобных структур.*
- 2. В каких кристаллах возможны фазовые переходы при изменении температуры?*
- 3. В каких соединениях фазовые переходы при понижении температуры маловероятны?*
- 4. Публикация структурных данных.*

Из структурных типов, представленных в табл. 1, к основным, наиболее распространенным, следует отнести структуры семейства эльпасолита ( $K_2NaAlF_6$ ) и родственного им семейства криолита ( $\beta$ -,  $\alpha$ - $Na_3AlF_6$ ). Среди соединений  $A_2^+B^+V^{3+}X_6^-$  известны шестислойные политипы (*hcc*), структурный тип  $Cs_2NaCrF_6$ , подобные гексагональному  $BaTiO_3$  [107, 124],.

Таблица 1. Структурные типы соединений  $A_2B'B''X_6$ .

Обозначения. Симметрия:  $c$  - кубическая,  $h$  - гексагональная,  $rh$  - ромбоэдрическая,  $t$  - тетрагональная,  $r$  - ромбическая,  $m$  - моноклинная.  $Z$  - число формульных единиц  $A_2B'B''X_6$  в элементарной ячейке. ВТФ - высокотемпературная фаза. НТФ - низкотемпературная фаза.

№ п/п	Тип или представитель	Сингония	Пространств. группа	Z	Литература	Примечание
1	$K_2NaAlF_6$	$c$	$O_h^5-Fm3m$	4	[94]	
2	$\beta-Na_3AlF_6$	$c$	$O_h^5-Fm3m$	4	[13, 119]	$\beta$ -криолит
3	$K_3TlF_6$	$c$	$T_h^4-Fd3$	4,16,32	[21]	
4	$K_2NaAlF_6$	$c$	$T_h^6-Pa3$	4	[93, 119]	эльпасолит
5	$Cs_2LiAlF_6$	$rh$	$D_{3d}^3-PTm1$	1	[88]	
6	$Hg_3NbF_6$	$rh$	$D_{3d}^1-PT1m$	1	[23]	
7	$K_2LiAlF_6$	$rh$	$D_{3d}^3-PTm1$	3	[13, 21]	ВТФ
8	$Cs_2NaCrF_6$	$rh$	$D_{3d}^5-RTm$	6	[11,12, 117]	$hcc$ -упаковка
9	$Na_3EuCl_6$	$rh$	$C_{3i}^2-RT$	3	[8, 75]	
10	$\beta-(NH_4)_3ScF_6$	$t$	$D_{4h}^6-P4/mnc$	2	[13, 21]	НТФ
11	$K_3HoF_6$	$t$	$D_{4h}^{14}-P4_2/mnm$	2	[126]	
12	$Rb_3TlF_6$	$t$	$D_{4h}^{17}-I4/mmm$	2	[13]	
13	$Rb_3DyF_6$	$t$	$D_{4h}^{19}-I4_1/amd$	4,16	[64]	
14	$Cs_2NaPrCl_6$	$t$	$C_{4h}^5-I4/m$	2	[105]	
15	$Rb_3BiBr_6$	$r$	$D_{2h}^{16}-Pnma$	8	[68]	
16	$(N_2H_5)_3CrF_6$	$r$	$D_2^4-P2_12_12_1$	4	[60]	
17	$Li_3AlF_6$	$r$	$C_{2v}^9-Pna2_1$	8	[25]	

№ п/п	Тип или представитель	Сингония	Пространств. группа	Z	Литература	Примечание
18	$\text{Cs}_2\text{LiAlF}_6$	<i>r</i>	?	4	[9]	
19	$\text{Li}_3\text{CrF}_6$	<i>r</i>	?	4	[62]	
20	$\text{Rb}_2\text{LiAlF}_6$	<i>r</i>	?	8	[42]	
21	$\alpha\text{-Na}_3\text{AlF}_6$	<i>m</i>	$C_{2h}^5\text{-}P2_1/n$	2	[13, 93]	$\alpha$ -криолит
22	$\text{Rb}_2\text{LiCrF}_6$	<i>m</i>	$C2_1; C2/m$	4	[63]	
23	$\text{Cs}_3\text{BiCl}_6$	<i>m</i>	$C_{2h}^6\text{-}C2/c$	8	[17]	

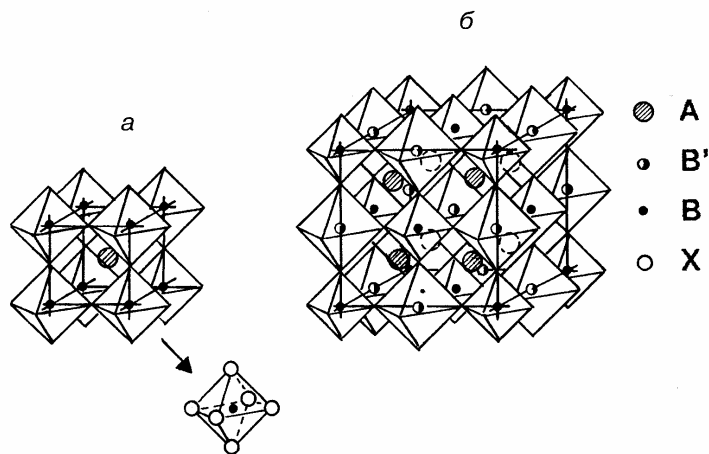


Рис. 1. Структуры типов перовскита (а) и эльпасолита (б).

Представители этих структурных семейств составляют около 80% от числа всех известных галогидных соединений. Структуры их основаны на объемном каркасе из октаэдров  $\text{B}^{3+}\text{X}_6^-$  и  $\text{B}^+\text{X}_6^-$  (или  $\text{A}^+\text{X}_6^-$ ), который может быть различным образом искажен.

Элементарную ячейку кубического эльпасолита (см. рис. 1) можно представить как ячейку перовскита с удвоенными параметрами и атомами галогена, смещенными в сторону высокозарядного катиона.

Минерал эльпасолит ( $\text{K}_2\text{NaAlF}_6$ ) (Округ Эль Пасо, Калифорния) имеет кубическую структуру, но с пониженной симметрией и пространственной группой  $T_h^6\text{-}Pa3$ . Состав его отличается от теоретического. В нем недостаток калия (~4%), небольшой избыток натрия и алюминия, есть примеси Mg и Ca

[119]. Для большинства синтетических кристаллов приводится пространственная группа  $O_h^5-Fm3m$  [13, 53, 88, 94]. Это позволяет предположить, что пространственная группа  $Ra3$  присуща только минералу эльпасолиту.

Частным случаем соединений  $A_2^+B^+V^{3+}X_6^-$  являются кристаллы, в которых ионы  $A^+$  и  $B^+$  химически тождественны. При этом один и тот же тип атомов занимает все кубооктаэдры и половину октаэдрических пустот. Формулу такого соединения принято писать как  $A_3BX_6$ , но ее можно представить в виде  $A_2[AB]X_6$ , подчеркивая тем самым родство с эльпасолитом. Кубическая фаза таких соединений принадлежит тоже к пространственной группе  $Fm3m$  ( $Z = 4$ ) и имеет несколько обозначений:  $\beta$ -криолит ( $\beta$ - $Na_3AlF_6$ ),  $K_3FeF_6$  и  $(NH_4)_3AlF_6$ .

Имеющиеся данные свидетельствуют о том, что 24 иона  $X$  смещены с линии связи  $[A^+-X-B^{3+}]$  и статистически размещены по 192 позициям ( $x, y, z$ ) с вероятностью  $1/8$ . Из геометрических представлений можно считать, что при существенных различиях в размерах октаэдров  $V^{3+}X_6$  и  $V^+X_6$  и при сильном несоответствии иона  $A$  размеру кубооктаэдрической пустоты (симметрия места  $T_h$ ) в структуре эльпасолита появляются искажения разных типов. Эти ограничения особенно характерны для соединений  $A_3BX_6$ , и все кристаллы таких составов при нормальных температурах имеют искаженные структу-

ры. Таким образом описанные структуры различаются величиной искажений анионного октаэдрического каркаса или упаковкой слоев  $AX_3$  и могут быть отнесены к единому семейству и по аналогии со структурами перовскита названы семейством эльпасолитоподобных структур, см. таблицу структурных данных в приложении. Структуры типов эльпасолита и  $\beta$ -криолита могут иметь однотипные низкотемпературные искаженные фазы. Примером являются низкотемпературные фазы  $Rb_2KYF_6$  [1] и  $\alpha$ - $NaAlF_6$  [12] (рис. 7-2).

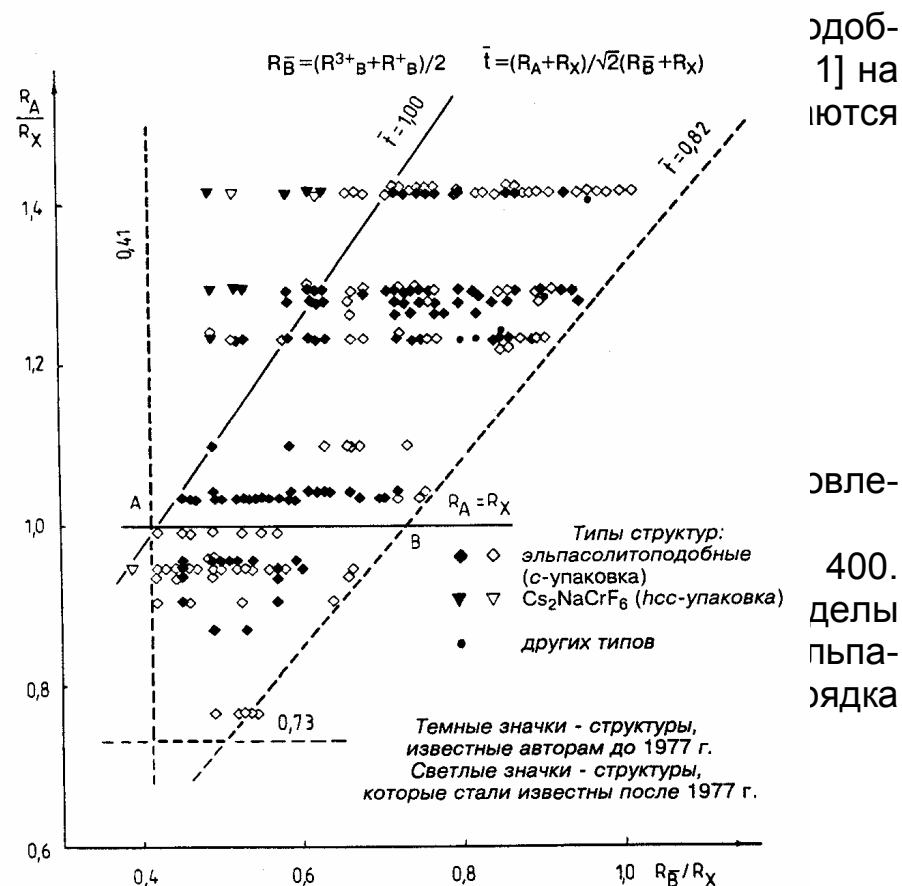


Рис. 2. Область существования эльпасолитоподобных структур.

К началу выращивания кристаллов – эльпасолитов (1975 г.) ротационных структурных фазовых переходов (СФП) в них нам не было известно, но по аналогии с перовскитами их следовало ожидать. При изучении кристаллов  $Cs_2NaB^{3+}Cl_6$ ,  $B^{3+} = Pr, Nd, Bi$ , были обнаружены СФП при температурах 153, 132, 114 К, соответственно [108]. В кубических эльпасолитах анионные октаэдры, как правило, разновелики. Анионный кубооктаэдр, в котором находится катион А, деформирован. Поэтому состояние связей А–Х сильно влияет на устойчивость кубической фазы.

Оказалось, что напряженности связей А–Х

$$\mu_A = \{[l_{A-X}/(R_A+R_X)]-1\} \cdot 100 (\%), \quad (5)$$

где  $l_{A-X}$  длина связи А–Х,  $R_A$ ,  $R_X$  радиусы ионов А и Х,

в кубических структурах, как правило, положительны и значения  $\mu_A$  возрастают с увеличением радиуса 3-х валентного катиона. В трех изученных эльпасолитах температуры переходов повышались с увеличением  $\mu_A$ . Были синтезированы кристаллы фтористых эльпасолитов с крупными катионами  $Bi^{3+}$ ,  $Dy^{3+}$ ,  $Ho^{3+}$ , в которых обнаружили СФП и их по-

следовательности [19, 35]. Результаты наших исследований и данные других авторов подтверждают предсказанную тенденцию к повышению СФП по мере возрастания  $\mu_A$ .

Из-за разницы в зарядах катионов  $B^+$  и  $B^{3+}$ , даже при одинаковых размерах, анион, расположенный между ними, всегда смещен в сторону высокозарядного катиона. При уменьшении параметра аниона Х от величины  $0,25a$  (как могло быть в структуре типа перовскита) до  $0,21a$ , расстояния А–Х в кубооктаэдрах увеличиваются, но не намного (при  $a = 10\text{\AA}$ ,  $\Delta = 0,022\text{\AA}$ ). В такой структуре анионы, расположенные вокруг катиона  $B^{3+}$  сближаются и существенно, а анионы, расположенные вокруг катиона  $B^+$  расходятся (октаэдр разбухает). Расчет показывает, что при этом расстояния: А–Х увеличиваются на 0,6%, расстояния Х–Х и  $B^{3+}$ –Х уменьшаются на 16%, и состояние их тоже будет влиять на устойчивость структуры.

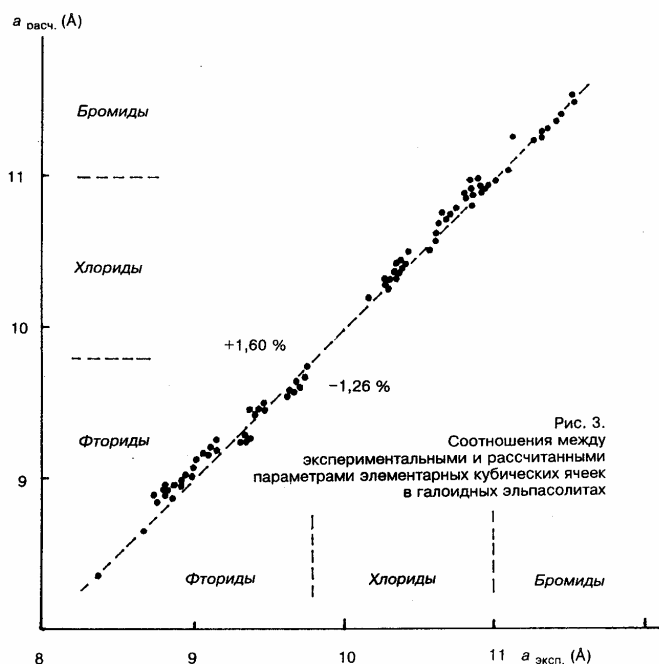
## 2. Определение области существования кубических структур

### 2.1. Расчет параметров элементарных ячеек

Формула для расчета параметров элементарных ячеек кубических эльпасолитов была определена по методике, описанной в [109, 110] в виде линейного уравнения:

$$a_p = 1,336R_A + 0,796R_B^+ + 1,586R_B^{3+} + 3,326R_X, \quad (6)$$

где  $R$  – радиусы ионов  $A$ ,  $B$ ,  $X$  по системе Шеннона [89] в соответствии с координациями.

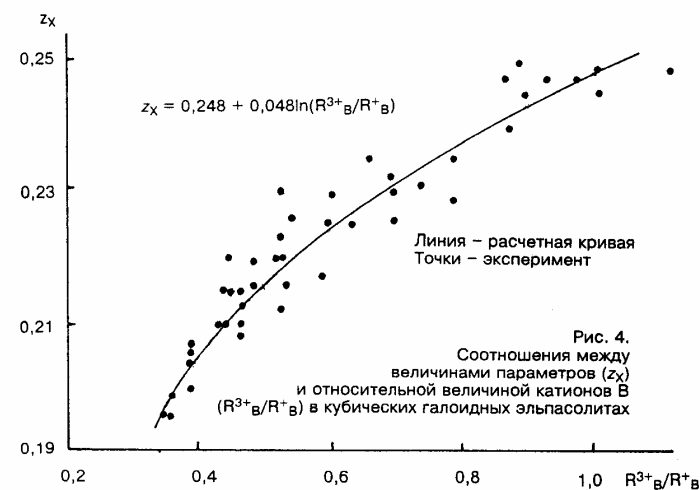


Соотношения между экспериментальными и рассчитанными параметрами представлены на рис. 3. Проверка производилась путем сравнения рассчитанных и экспериментальных значений для 98 кубических фаз. Максимальное расхождение рас-

считанных параметров кубических ячеек для фторидов, хлоридов, бромидов составляет от +1,60 до -1,26%.

## 2.2. Расчет параметра аниона

В  $\text{Cs}_2\text{NaNdCl}_6$  [105] при понижении температуры от 278 до 148 К относительная величина свободного параметра хлора практически не меняется, но уменьшается размер кубической ячейки. Исходя из строения структуры (см. рис. 1), считая ионы шарами, параметр аниона можно определить по формуле:  $z_X = (R_B^{3+} + R_X)/2(R_B^{3+} + R_B^+ + 2R_X)$ . Максимальные отклонения рассчитанных значений от экспериментальных составляют  $\pm 5\%$ .



Точность немного повышается при усреднении экспериментальных значений относительного свободного параметра выражением (см. рис. 4)

$$z_X = 0,248 + 0,048 \cdot \ln(R_{B^{3+}}/R_{B^+}). \quad (7)$$

В дальнейших расчетах мы пользовались этой формулой.

### 2.3. Расчет напряженностей связей

Напряженности связей по Фесенко [124] представляют собой результат сравнения межатомных расстояний с суммой радиусов соответствующих ионов (ненапряженных расстояний) в относительных единицах. Для кубических эльпасолитов эти формулы имеют вид:

$$\mu_{B^{3+}} = \left( \frac{a \cdot z_X}{R_{B^{3+}} + R_X} - 1 \right) \cdot 100 (\%) \quad (8)$$

$$\mu_{B^+} = \left( \frac{a \cdot (0,5 - z_X)}{R_{B^+} + R_X} - 1 \right) \cdot 100 (\%) \quad (9)$$

$$\mu_A = \left( \frac{a \cdot \sqrt{2}}{4(R_A + R_X)} - 1 \right) \cdot 100 (\%) \quad (10)$$

Усредненную напряженность связей катионов В можно определить, минуя величину свободного параметра аниона, по формуле:

$$\mu_B = \{ [a / (R_{B^{3+}} + R_{B^+} + 2R_X)] - 1 \} \cdot 100 (\%) \quad (11)$$

Результаты расчетов для 44 кубических галогидных эльпасолитов, у которых известны координа-

ты анионов (фториды и хлориды), показали, что связи А–Х, как правило немного растянуты, а связи В–Х сжаты. За пределы существования кубических структур были выбраны значения:

$$\mu_A = (\text{от } 0 \text{ до } + 8)\% \quad (12)$$

$$\mu_B = (\text{от } 0 \text{ до } - 6,5)\% \quad (13)$$

Далее был выполнен расчет напряженностей в связях катион–анион для различных комбинаций ионов с помощью электронной таблицы Excel 7. Результаты для разных составов графически представлены на рис. 5. Видно, что область существования кубических фаз (с) имеет замкнутые границы. Слева от нее должны существовать *hcc*-политипы, справа искаженные эльпасолитоподобные структуры (с').

На рисунке 5 приведены области существования кубических фаз в различных составах галогидных эльпасолитов (при комнатной температуре).

Обозначения структур:

- 1 - *кубический эльпасолит.*
- 2 - *искаженный эльпасолит.*
- 3 - *α-криолит.*
- 4 - *hcc – политип*
- 5 - *другие структуры*



В некоторых системах искаженные фазы обнаруживаются вблизи границ. Эти закономерности подтверждаются структурными данными соединений  $A_2NaV^{3+}F_6$  и  $A_2KB^{3+}F_6$ .

В таблице 2 структурные данные для ряда галлоидных соединений  $A_2V^{\prime}V^{\prime\prime}X_6$  представлены на фоне рассчитанной области существования кубических фаз. Видно, что потенциальные возможности

этих систем еще не исчерпаны полностью, можно синтезировать не одну сотню новых кубических эльпасолитов. В табл. 2 не вошли структуры со смешанными катионами. Эти сведения можно найти в работах, цитируемых в приложении.

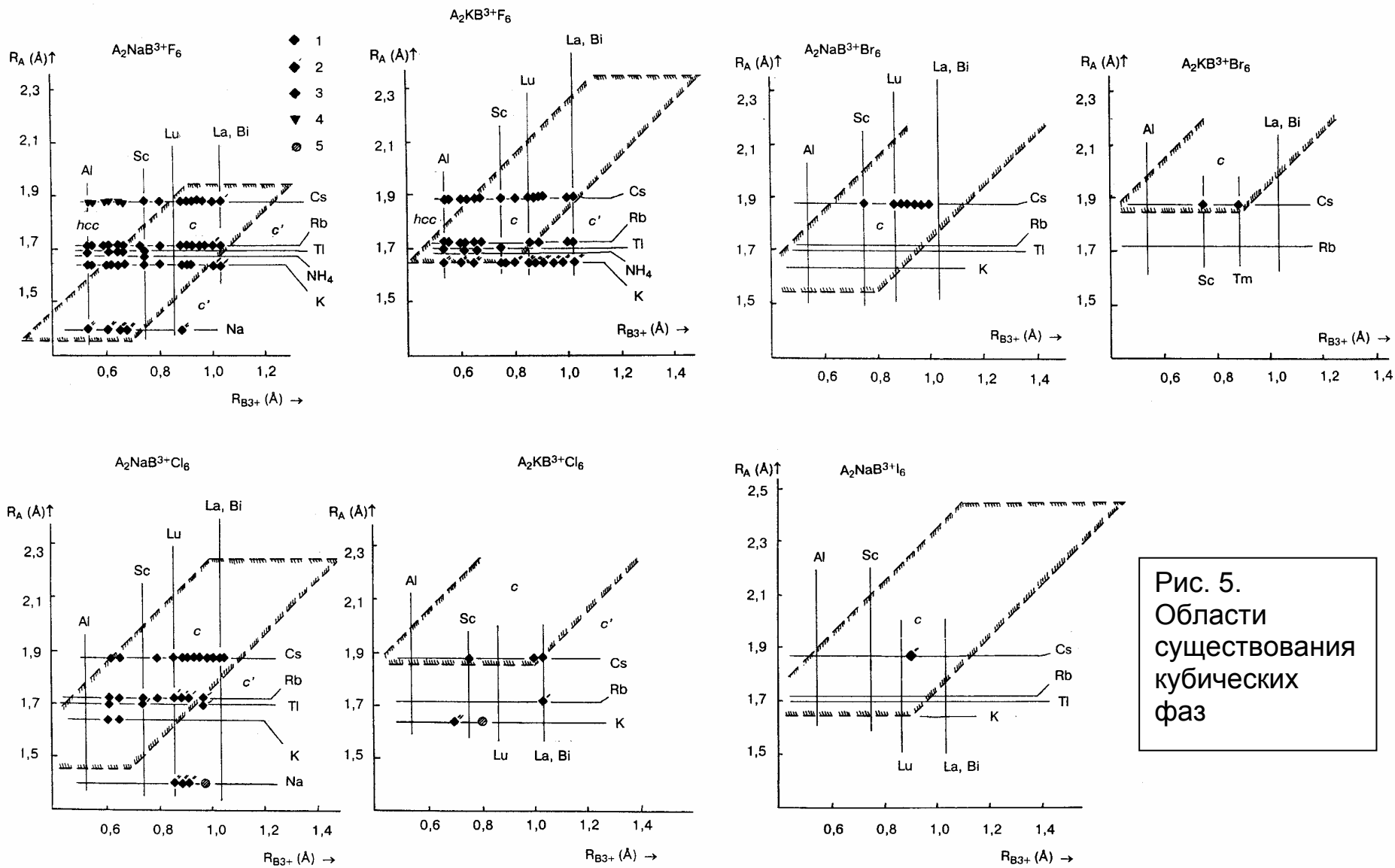


Рис. 5.  
Области  
существования  
кубических  
фаз



Таблица 2 (продолжение)

**Хлориды  $B^+ = Li$**

	$B^{3+} \rightarrow$														$B^{3+} \rightarrow$							$B^{3+} \rightarrow$								
A ↓	Al	Cu	Ni	Co	Cr	Ga	V	Fe	Mn	Ti	Sc	In	Lu	Yb	Tm	Tl	Er	Y	Ho	Dy	Tb	Gd	Eu	Sm	Pm	Nd	Pr	Ce	Bi	La
Cs					◆								◆																	◆
Rb					◆		◆				◆	◆	◆		◆		◆	◆	◆	◆			◆	◆	◆					
Tl					◆						◆		◆	◆	◆															
NH <sub>4</sub>					◆																									
K					◆						◆				◆															
Na																														

**Хлориды  $B^+ = Na$**

	$B^{3+} \rightarrow$														$B^{3+} \rightarrow$							$B^{3+} \rightarrow$								
A ↓	Al	Cu	Ni	Co	Cr	Ga	V	Fe	Mn	Ti	Sc	In	Lu	Yb	Tm	Tl	Er	Y	Ho	Dy	Tb	Gd	Eu	Sm	Pm	Nd	Pr	Ce	Bi	La
Cs					◆			◆		◆		◆	◆	◆	◆	◆	◆	◆	◆	◆	◆	◆	◆	◆	◆	◆	◆	◆	◆	◆
Rb					◆		◆				◆	◆	◆	◆	◆		◆	◆	◆	◆	◆		◆	◆						◆
Tl					◆						◆		◆	◆	◆															◆
NH <sub>4</sub>					◆																									
K					◆																									◆
Na					●		●				◆	◆	◆	◆	◆		◆	◆	◆	◆	◆	●	●	●						

**Хлориды  $B^+ = K$**

	$B^{3+} \rightarrow$														$B^{3+} \rightarrow$							$B^{3+} \rightarrow$								
A ↓	Al	Cu	Ni	Co	Cr	Ga	V	Fe	Mn	Ti	Sc	In	Lu	Yb	Tm	Tl	Er	Y	Ho	Dy	Tb	Gd	Eu	Sm	Pm	Nd	Pr	Ce	Bi	La
Cs					◆						◆										◆		◆							◆
Rb					●																									
Tl																														
NH <sub>4</sub>																														
K					●							●				●								●						

Таблица 2 (продолжение)

**Бромиды  $B^+ = Li$**

	$B^{3+} \rightarrow$						$B^{3+} \rightarrow$						$B^{3+} \rightarrow$																		
A ↓	Al	Cu	Ni	Co	Cr	Ga	V	Fe	Mn	Ti	Sc	In	Lu	Yb	Tm	Tl	Er	Y	Ho	Dy	Tb	Gd	Eu	Sm	Pm	Nd	Pr	Ce	Bi	La	
Cs																															
Rb																															
Tl																															
NH <sub>4</sub>																															
K																															
Na																															

**Бромиды  $B^+ = Na$**

	$B^{3+} \rightarrow$						$B^{3+} \rightarrow$						$B^{3+} \rightarrow$																		
A ↓	Al	Cu	Ni	Co	Cr	Ga	V	Fe	Mn	Ti	Sc	In	Lu	Yb	Tm	Tl	Er	Y	Ho	Dy	Tb	Gd	Eu	Sm	Pm	Nd	Pr	Ce	Bi	La	
Cs										◆					◆			◆	◆	◆		◆		◆		◆		◆			
Rb																															
Tl																															
NH <sub>4</sub>																															
K																															
Na																															

**Бромиды  $B^+ = K$**

	$B^{3+} \rightarrow$						$B^{3+} \rightarrow$						$B^{3+} \rightarrow$																		
A ↓	Al	Cu	Ni	Co	Cr	Ga	V	Fe	Mn	Ti	Sc	In	Lu	Yb	Tm	Tl	Er	Y	Ho	Dy	Tb	Gd	Eu	Sm	Pm	Nd	Pr	Ce	Bi	La	
Cs											◆				◆																
Rb																															
Tl																															
NH <sub>4</sub>																															
K																															

## Таблица 2 (окончание)

### Иодиды $B^+ = Li$

							$B^{3+} \rightarrow$										$B^{3+} \rightarrow$														
A ↓	Al	Cu	Ni	Co	Cr	Ga	V	Fe	Mn	Ti	Sc	In	Lu	Yb	Tm	Tl	Er	Y	Ho	Dy	Tb	Gd	Eu	Sm	Pm	Nd	Pr	Ce	Bi	La	
Cs											❖																				
Rb																															
Tl																															
NH <sub>4</sub>																															
K																															
Na																															

### Иодиды $B^+ = Na$

							$B^{3+} \rightarrow$										$B^{3+} \rightarrow$															
A ↓	Al	Cu	Ni	Co	Cr	Ga	V	Fe	Mn	Ti	Sc	In	Lu	Yb	Tm	Tl	Er	Y	Ho	Dy	Tb	Gd	Eu	Sm	Pm	Nd	Pr	Ce	Bi	La		
Cs																	◆															
Rb																																
Tl																																
NH <sub>4</sub>																																
K																																
Na																																

### 3. Структуры с фазовыми переходами

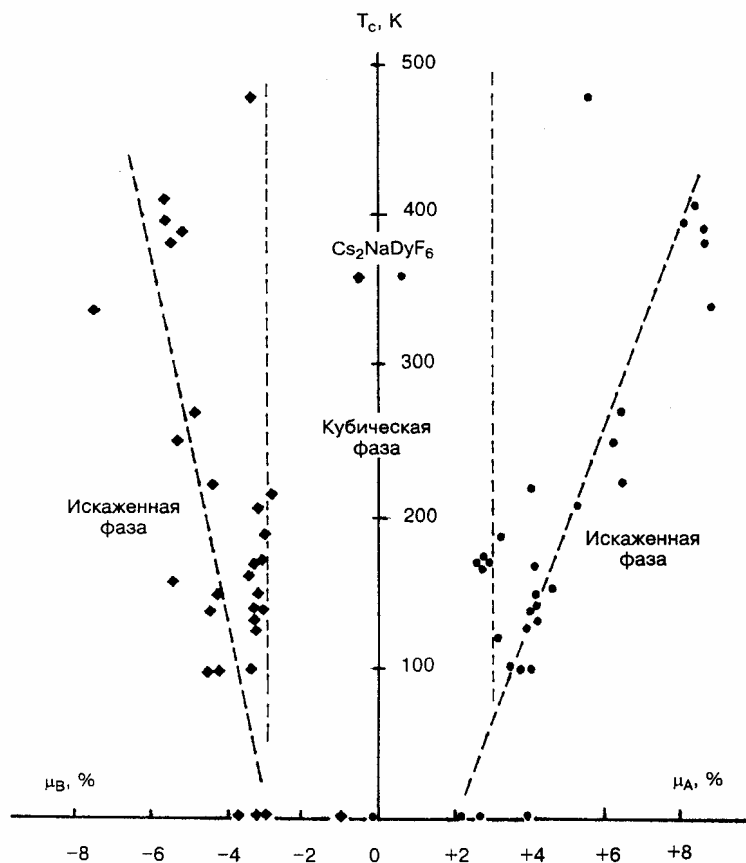


Рис. 6. Соотношения между напряжениями связей и температурами фазовых переходов в кубических галоидных эльпасолитах.

На рис. 6 представлены соотношения между напряжениями связей и температурами переходов в искаженные структуры. Тенденция к повышению температур ротационных фазовых переходов по мере увеличения напряженностей в связях В–Х и А–Х есть, но разброс точек большой и четких зависимостей не прослеживается. На основании этих данных можно сказать, что

1. Максимальные температуры фазовых переходов в кубических галоидных эльпасолитах не будут превышать 500 К.
2. При  $\mu_A =$  (от 0 до +3)% и  $\mu_{B^{3+}} =$  (от 0 до –3)% фазовые переходы маловероятны. Можно ожидать, что в других структурах с такими параметрами, которые представлены в табл. 3, фазовых переходов не будет.

В таблице 3 представлены известные и возможные соединения с кубической решеткой, в которых структурные фазовые переходы при понижении температуры маловероятны.

✓ Галочкой отмечены известные соединения.

**Таблица 3.**

Кристалл	$a_{расч.}$ (Å)	$z_x$	$\mu_{B3+}(\%)$	$\mu_A(\%)$	$\mu_{B+}(\%)$
<b>Фториды</b>					
$Cs_2NaYF_6$ ✓	9,073	0,242	-1,5	-0,1	-0,4
$Cs_2NaHoF_6$ ✓	9,075	0,242	-1,5	0,0	-0,4
$Cs_2NaTbF_6$ ✓	9,110	0,243	-1,7	0,3	-0,5
$Cs_2NaGdF_6$	9,134	0,244	-1,7	0,6	-0,5
$Cs_2NaEuF_6$	9,148	0,244	-1,8	0,8	-0,5
$Cs_2NaSmF_6$ ✓	9,165	0,245	-1,9	0,9	-0,5
$Cs_2NaPmF_6$	9,184	0,246	-1,9	1,2	-0,6
$Cs_2NaNdF_6$	9,205	0,246	-2,0	1,4	-0,6
$Cs_2NaPrF_6$	9,216	0,247	-2,1	1,5	-0,6
$Cs_2NaCeF_6$	9,248	0,248	-2,2	1,9	-0,6
$Cs_2NaBiF_6$	9,280	0,248	-2,3	2,2	-0,7
$Cs_2NaLaF_6$	9,283	0,249	-2,3	2,2	-0,7
<b>Хлориды</b>					
$Cs_2LiGdCl_6$	10,624	0,258	-0,2	1,8	0,0
$Cs_2LiEuCl_6$	10,639	0,259	-0,2	1,9	-0,1
$Cs_2LiSmCl_6$	10,656	0,259	-0,2	2,1	-0,1
$Cs_2LiPmCl_6$	10,675	0,260	-0,3	2,3	-0,2
$Cs_2LiNdCl_6$	10,696	0,260	-0,3	2,5	-0,3
$Cs_2LiPrCl_6$	10,707	0,261	-0,3	2,6	-0,3
$Cs_2LiCeCl_6$	10,739	0,262	-0,4	2,9	-0,4

Кристалл	$a_{расч.}$ (Å)	$z_x$	$\mu_{B3+}(\%)$	$\mu_A(\%)$	$\mu_{B+}(\%)$
<b>Бромиды</b>					
$Cs_2LiLuBr_6$	11,059	0,254	-0,4	1,8	0,0
$Cs_2LiYbBr_6$	11,070	0,254	-0,4	1,9	0,0
$Cs_2LiTmBr_6$	11,088	0,255	-0,4	2,1	-0,1
$Cs_2LiYBr_6$	11,119	0,256	-0,4	2,2	-0,2
$Cs_2LiHoBr_6$	11,121	0,256	-0,4	2,4	-0,3
$Cs_2LiDyBr_6$	11,138	0,257	-0,4	2,5	-0,4
$Cs_2LiTbBr_6$	11,155	0,257	-0,4	2,7	-0,5
$Cs_2LiGdBr_6$	11,178	0,258	-0,4	2,9	-0,6
$Cs_2LiEuBr_6$	11,192	0,259	-0,5	3,0	-0,7
$Rb_2LiScBr_6$	10,105	0,247	-2,3	1,2	-0,5
$Rb_2LiInBr_6$	10,192	0,250	-2,2	2,1	-1,0
$Rb_2LiLuBr_6$	10,288	0,254	-2,2	3,0	-1,5
<b>Иодиды</b>					
$Cs_2LiScl_6$	11,615	0,247	-2,6	0,7	-0,7
$Cs_2LiInI_6$	11,703	0,250	-2,3	1,4	-1,3
$Cs_2LiLuI_6$	11,799	0,254	-2,1	2,2	-1,9
$Cs_2LiYbI_6$	11,810	0,254	-2,1	2,3	-2,0
$Cs_2LiTmI_6$	11,830	0,255	-2,0	2,5	-2,1
$Cs_2LiYI_6$	11,861	0,256	-2,0	2,8	-2,3
$Cs_2LiHoI_6$	11,863	0,256	-2,0	2,8	-2,3
$Cs_2LiDyI_6$	11,880	0,257	-2,0	2,9	-2,4
$Cs_2LiTbI_6$	11,898	0,257	-2,0	3,1	-2,5



Параметры элементарных ячеек в хлоридах и иодидах рассчитывались по формуле (6). Параметры для фторидов определялись по другим формулам, которые дают более точные результаты [109, 110].

Для составов  $\text{Cs}_2\text{V}^+\text{V}^{3+}\text{F}_6$   $a = 1,099R_{\text{V}^+} + 1,587R_{\text{V}^{3+}} + 6,524$ , ( $\pm 1\%$ ).

Для составов  $\text{Cs}_3\text{V}^+\text{V}^{3+}\text{Br}_6$   $a = 0,708R_{\text{V}^+} + 1,548R_{\text{V}^{3+}} + 9,188$  ( $\pm 0,3\%$ ).

#### 4. Заключение

На основании изложенного можно сделать некоторые выводы:

1. Область существования кубических структур при одинаковых анионах, с возрастанием размера катиона  $\text{V}^+$  увеличивается и сдвигается в сторону крупных катионов А. Для формирования таких кубических структур требуются очень крупные катионы А.

2. Большинство кубических фаз реализуется с участием натрия в качестве катиона  $\text{V}^+$ . В бромиде и иодидах есть вероятность синтеза новых соединений с кубическими структурами. Это заключение подтверждается. В банке структурных данных [53]

мы обнаружили соединения  $\text{Cs}_2\text{NaErI}_6$  и  $\text{Cs}_2\text{LiScl}_6$ . Первое в высокотемпературной фазе имеет эльпасолитную структуру, ниже  $110^\circ\text{C}$  становится гексагональным, но эльпасолитоподобным. Второе соединение обладает гексагональной структурой типа  $\text{Cs}_2\text{LiGaF}_6$  (в другом обозначении тип  $\text{Cs}_2\text{LiAlF}_6$ ). Кроме того при исследовании диаграмм состояния были обнаружены соединения  $\text{Cs}_3\text{V}^{3+}\text{I}_6$ , где  $\text{V}^{3+} = \text{La}, \text{Nd}, \text{Pr}, \text{Dy}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Er}$  [67]. Эти данные позволяют рассчитывать на получение новых соединений среди бромидов и иодидов.

3. Возможен синтез новых кубических эльпасолитов с участием лития в качестве катиона  $\text{V}^+$  в составах с крупными анионами  $\text{Br}^-$  и  $\text{I}^-$  (см. табл. 2).

4. Вероятность отсутствия фазовых переходов, оцененная на основании рассчитанных напряженностей в связях, не 100%. В качестве исключения можно привести  $\text{CsNaDyF}_6$  (см. рис. 6), напряженности связей катионов в кубической фазе которого имеют малые значения, а фазовый переход происходит при 360 К.

5. Большинство кубических галоидных эльпасолитов при понижении температуры будут испытывать структурные фазовые переходы.



### Приложение. Структуры соединений $A_2V^+V^3+X_6^-$ (галогениды)

Обозначения. Симметрия: *c* – кубическая, *h* – гексагональная, *rh* – ромбоэдрическая, *t* – тетрагональная, *r* – ромбическая, *m* – моноклинная, *tr* – триклинная. ВТФ – высокотемпературная фаза. НТФ – низкотемпературная фаза. ФП – фазовый переход. ФВД – фаза высокого давления. *hcc* – гексагонально-ромбоэдрический политип. □ – вакансия.

Соединение	Фаза, условия существования	Простран. группа	Ячейка, Å, град.				Z	Примечания	Литература
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	$\alpha, \beta, \gamma$			
<b>Фториды</b>									
Ag <sub>2</sub> LiAlF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	7,67				4	[53]	
Ag <sub>2</sub> NaAlF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	7,94				4	[89]	
Cs <sub>2</sub> AgAlF <sub>6</sub>	<i>hcc</i>	<i>RTm</i>	6,267		30,75		6	[89]	
Cs <sub>2</sub> AgAlF <sub>6</sub>	<i>p</i> > 60 кбар, 500 К	<i>Fm3m</i>	8,72				4	[89]	
Cs <sub>2</sub> AgInF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,059				4	[88]	
Cs <sub>2</sub> CdCoF <sub>6</sub>		<i>RTm</i>	6,288		30,76		6	[53]	
Cs <sub>2</sub> CdNiF <sub>6</sub>		<i>RTm</i>	6,291		30,59		6	[53]	
Cs <sub>2</sub> CoMnF <sub>6</sub>		<i>RTm</i>	6,213		30,22		6	[53]	
Cs <sub>2</sub> MgMnF <sub>6</sub>		<i>RTm</i>	6,219		29,99		6	[53]	
Cs <sub>2</sub> MnNiF <sub>6</sub>		<i>RTm</i>	6,201		29,99		6	[53]	
Cs <sub>2</sub> Cu <sup>2+</sup> <sub>0.5</sub> □ <sub>0.5</sub> Cu <sup>3+</sup> F <sub>6</sub>		<i>I4/mmm</i>	6,234		8,864		2	[51]	
Cs <sub>2</sub> KAlF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,881				4	[89]	
Cs <sub>2</sub> KCeF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,655				4	[32]	
Cs <sub>2</sub> KCeF <sub>6</sub>	>244 К	<i>c</i>	9,610				4	[68]	
Cs <sub>2</sub> KCoF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,998				4	[12]	
Cs <sub>2</sub> KCoF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,979				4	[8]	
Cs <sub>2</sub> KCrF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,990				4	[12]	
Cs <sub>2</sub> KCrF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,004				4	[92]	
Cs <sub>2</sub> KCuF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,935				4	[52]	
Cs <sub>2</sub> KCuF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,894				4	[59]	
Cs <sub>2</sub> KDyF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,470				4	[32]	
Cs <sub>2</sub> KDyF <sub>6</sub>	>169 К	<i>Fm3m</i>	9,464				4	293 К [96, 107, 108]	
Cs <sub>2</sub> KDyF <sub>6</sub>	<169 К	<i>I4/m</i>	6,6803		9,4654		2	113 К [96, 107]	

Cs <sub>2</sub> KDyF <sub>6</sub>		<i>I4/m</i>	9,4474		9,4654	4	113 K	[108]
Cs <sub>2</sub> KErF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,433			4		[32]
Cs <sub>2</sub> KErF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,46			4		[91]
Cs <sub>2</sub> KEuF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,526			4		[32]
Cs <sub>2</sub> KFeF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,046			4		[12]
Cs <sub>2</sub> KFeF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	6,041			4		[7]
Cs <sub>2</sub> KGaF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,975			4		[68]
Cs <sub>2</sub> KGdF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,523			4		[32]
Cs <sub>2</sub> KHoF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,464			4		[32].
Cs <sub>2</sub> KHoF <sub>6</sub>	>150 K	<i>Fm3m</i>	9,450			4		[56, 96]
Cs <sub>2</sub> KHoF <sub>6</sub>	<150K	<i>I4/m</i>	6,6064		9,4503	2	12,5 K	[56, 96]
Cs <sub>2</sub> KInF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,219			4		[50, 68]
Cs <sub>2</sub> KLaF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,689			4		[32]
Cs <sub>2</sub> KLaF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,728			4		[102]
Cs <sub>2</sub> KLuF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,383			4		[32]
Cs <sub>2</sub> KMnF <sub>6</sub>		<i>I4/mmm</i>	8,933		9,265	4		[84]
Cs <sub>2</sub> KMnF <sub>6</sub>	>803 K	<i>Fm3m</i>	9,067			4	при 873 K	[105A]
Cs <sub>2</sub> KMnF <sub>6</sub>	<803 K	<i>I4/mmm</i>	6,319		9,257	2		[105A]
Cs <sub>2</sub> KMoF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,210			4		[49]
Cs <sub>2</sub> KNdF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,610			4		[32]
Cs <sub>2</sub> KNdF <sub>6</sub>	>241 K	<i>c</i>	9,606			4	ФП:241, 163K	[115]
Cs <sub>2</sub> KNiF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,936			4		[4]
Cs <sub>2</sub> KPdF <sub>6</sub>	>328 K	<i>c</i>	9,06			4	при 333 K	[98]
Cs <sub>2</sub> KPdF <sub>6</sub>	<328 K	<i>t</i>	9,04		9,32	4		[98]
Cs <sub>2</sub> KPrF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,696			4		[24]
Cs <sub>2</sub> KPrF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,625			4		[32, 101]
Cs <sub>2</sub> KRhF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,049			4		[104]
Cs <sub>2</sub> KRhF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,055			4		[53]
Cs <sub>2</sub> KScF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,352			4		[50]
Cs <sub>2</sub> KScF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,32			4		[68]
Cs <sub>2</sub> KSmF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,554			4		[32]
Cs <sub>2</sub> KTbF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,499			4		[32]
Cs <sub>2</sub> KTiF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,115			4		[48]
Cs <sub>2</sub> KTiF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,124			4		[6]

Cs <sub>2</sub> KTIF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,365				4	[50, 68]
Cs <sub>2</sub> KTmF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,416				4	[32]
Cs <sub>2</sub> KVF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,044				4	[12]
Cs <sub>2</sub> KVF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,047				4	[5]
Cs <sub>2</sub> KYF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,445				4	[102]
Cs <sub>2</sub> KYbF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,399				4	[32]
Cs <sub>2</sub> LiAlF <sub>6</sub>		<i>h</i>	6,21		5,00		1	[89]
Cs <sub>2</sub> LiAlF <sub>6</sub>		<i>r</i>	6, 21	10,72	4,99		4	[9]
Cs <sub>2</sub> LiCrF <sub>6</sub>		<i>h</i>	6,248		5,106		2	[10]
Cs <sub>2</sub> LiCrF <sub>6</sub>	50 кбар, 600 <sup>0</sup> C	<i>rh</i>	6,162		29,38		6	[10]
Cs <sub>2</sub> LiCrF <sub>6</sub>		<i>Pb, 2/b</i>	5,387	6,249	5,110	β=90.68	1	[63]
Cs <sub>2</sub> LiCuF <sub>6</sub>		<i>rh</i>	6,215		5,033		1	тип Cs <sub>2</sub> LiGaF <sub>6</sub> [52]
Cs <sub>2</sub> LiFeF <sub>6</sub>	50 кбар, 600 <sup>0</sup> C	<i>rh</i>	6,187		29,67		6	ФВД [10]
Cs <sub>2</sub> LiGaF <sub>6</sub>		<i>r</i>	6,247	10,69	29,26			[10]
Cs <sub>2</sub> LiGaF <sub>6</sub>		<i>PTm1</i>						тип Cs <sub>2</sub> LiGaF <sub>6</sub> [77]
Cs <sub>2</sub> LiGaF <sub>6</sub>		<i>h</i>	6,249		5,086		2	[10]
Cs <sub>2</sub> LiGaF <sub>6</sub>	30 кбар, 600 <sup>0</sup> C	<i>rh</i>	6,203		29,26		6	ФВД [10]
Cs <sub>2</sub> NaAlF <sub>6</sub>		<i>hcc</i>	6,188		29,76		6	[12]
Cs <sub>2</sub> NaAlF <sub>6</sub>		<i>hcc</i>	6,176		29,82		6	[117]
Cs <sub>2</sub> NaAlF <sub>6</sub>		<i>hcc</i>	6,183		29,87		6	[89]
Cs <sub>2</sub> NaAlF <sub>6</sub>		<i>hcc</i>	6,179		29,84		6	[10]
Cs <sub>2</sub> NaAlF <sub>6</sub>	70 кбар, 600 <sup>0</sup> C	<i>rh</i>	6,149		14,93		3	ФВД [10]
Cs <sub>2</sub> NaAlF <sub>6</sub>	80 кбар, 600 <sup>0</sup> C	<i>c</i>	8,628				4	ФВД [10]
Cs <sub>2</sub> NaCeF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,26				4	[68]
Cs <sub>2</sub> NaCoF <sub>6</sub>		<i>hcc</i>	6,240		30,30		6	[12]
Cs <sub>2</sub> NaCoF <sub>6</sub>		<i>hcc</i>	6,23		30,32		6	[8]
Cs <sub>2</sub> NaCrF <sub>6</sub>		<i>hcc</i>	6,243		30,33		6	тип Ca <sub>2</sub> NaCrF <sub>6</sub> [11, 10, 117]
Cs <sub>2</sub> NaCrF <sub>6</sub>	25 кбар, 800 <sup>0</sup> C	<i>RTm</i>	6,213		15,11		3	ФВД [10]
Cs <sub>2</sub> NaCrF <sub>6</sub>	30 кбар, 600 <sup>0</sup> C	<i>c</i>	8,706				4	ФВД [10]
Cs <sub>2</sub> NaCrF <sub>6</sub>		<i>hcc</i>	6,231		30,24		6	[12]
Cs <sub>2</sub> NaCrF <sub>6</sub>		<i>C2; C2/m</i>	10,808	6,245	10,261	β=100,06	4	[63]
Cs <sub>2</sub> NaCuF <sub>6</sub>		<i>hcc</i>	6,214		30,03		6	[40]
Cs <sub>2</sub> NaCuF <sub>6</sub>			6,218		30,097		6	[52]

$\text{Cs}_2\text{NaCuF}_6$		<i>m</i>	10,750	6,220	10,183	$\beta=100,25$	4		[29]
$\text{Cs}_2\text{NaDyF}_6$		<i>c</i>	9,096				4		[32]
$\text{Cs}_2\text{NaDyF}_6$	>360 K	<i>Fm3m</i>	9,148				4	при 473K	[96, 107, 108]
$\text{Cs}_2\text{NaDyF}_6$	<360 K	<i>P4/mbm</i>	6,416		9,095		2	при 293K	[96, 107, 108]
$\text{Cs}_2\text{NaErF}_6$		<i>c</i>	9,060				4		[32]
$\text{Cs}_2\text{NaErF}_6$		<i>Fm3m</i>	9,041				4		[3]
$\text{Cs}_2\text{NaEuF}_6$		<i>c</i>	9,154				4		[32]
$\text{Cs}_2\text{NaFeF}_6$		<i>RTm</i>	6,267		30,48		6		[10, 11, 12]
$\text{Cs}_2\text{NaFeF}_6$		<i>RTm</i>	6,291		30,532		6	тип $\text{Cs}_2\text{NaCrF}_6$	[7]
$\text{Cs}_2\text{NaFeF}_6$	15 кбар, 700 <sup>0</sup> C	<i>rh</i>	6,241		15,22		3	ФВД	[10]
$\text{Cs}_2\text{NaFeF}_6$	>30 кбар, 250 <sup>0</sup> C	<i>Fm3m</i>	8,739				4	ФВД	[46]
$\text{Cs}_2\text{NaFeF}_6$	20 кбар, 600 <sup>0</sup> C	<i>c</i>	8,774				4	ФВД	[10]
$\text{Cs}_2\text{NaGaF}_6$	<i>hcc</i>		6,22		30.19		6		[12]
$\text{Cs}_2\text{NaGdF}_6$		<i>c</i>	9,136				4		[32]
$\text{Cs}_2\text{NaHoF}_6$		<i>c</i>	9,078				4		[32]
$\text{Cs}_2\text{NaHoF}_6$		<i>Fm3m</i>	9,073				4	ФП нет	[24]
$\text{Cs}_2\text{NaInF}_6$		<i>Fm3m</i>	8,905				4		[84, 85]
$\text{Cs}_2\text{NaLuF}_6$		<i>c</i>	9,014				4		[32]
$\text{Cs}_2\text{NaMnF}_6$	>5 кбар	<i>Fm3m</i>	8,765				4	ФВД	[71]
$\text{Cs}_2\text{NaMnF}_6$		<i>C2/m</i>						комн. т-ра	[71]
$\text{Cs}_2\text{NaMnF}_6$		<i>R3m</i>	9,265		30,54		6	закаленная ф.	[71]
$\text{Cs}_2\text{NaNiF}_6$		<i>rh</i>	6,20		30,03		6		[40]
$\text{Cs}_2\text{NaScF}_6$		<i>Fm3m</i>	8,853				4		[84]
$\text{Cs}_2\text{NaSmF}_6$		<i>c</i>	9,173				4		[32]
$\text{Cs}_2\text{NaSmF}_6$		<i>c</i>	9,163				4		[3]
$\text{Cs}_2\text{NaTbF}_6$		<i>c</i>	9,099				4		[32]
$\text{Cs}_2\text{NaTbF}_6$		<i>c</i>	9,107				4		[3]
$\text{Cs}_2\text{NaTiF}_6$		<i>PTm1</i>	6,2879		15,309		3	тип $\text{Cs}_2\text{NaCrF}_6$	[16]
$\text{Cs}_2\text{NaTiF}_6$			6,272		30,91		6		[8]
$\text{Cs}_2\text{NaTlF}_6$		<i>Fm3m</i>	8,995				4		[84]
$\text{Cs}_2\text{NaTmF}_6$		<i>c</i>	9,042				4		[32]
$\text{Cs}_2\text{NaVF}_6$		<i>m</i>	10,90	6,25	10,36	$\beta=100,5$	4		[53]
$\text{Cs}_2\text{NaVF}_6$	<i>hcc</i>	<i>rh</i>	6,267		30,40		6		[12]
$\text{Cs}_2\text{NaVF}_6$	<i>hcc</i>	<i>rh</i>	6,265		30,49		6		[10]

Cs <sub>2</sub> NaVF <sub>6</sub>	50 кбар, 600 <sup>0</sup> C	<i>c</i>	8,752				4	[10]
Cs <sub>2</sub> NaYbF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,022				4	[3]
Cs <sub>2</sub> NaYbF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,028				4	[32]
Cs <sub>2</sub> NaYF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,056				4	[3]
Cs <sub>2</sub> NaYF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,075				4	[102]
Cs <sub>2</sub> RbAlF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,051				4	[89]
Cs <sub>2</sub> RbCeF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,817				4	[32]
Cs <sub>2</sub> RbCeF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,75				4	]18, 68]
Cs <sub>2</sub> RbCoF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,135				4	[12]
Cs <sub>2</sub> RbCrF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,15				4	[12]
Cs <sub>2</sub> RbCuF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,106				4	[52]
Cs <sub>2</sub> RbDyF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,661				4	[32]
Cs <sub>2</sub> RbDyF <sub>6</sub>		>251 K	<i>Fm3m</i>	9,644			4	при 293 K [2, 107, 108]
Cs <sub>2</sub> RbDyF <sub>6</sub>		(251j205)K	<i>I4/m</i>	9,7936		9,6513	4	при 208 K [107, 108]
Cs <sub>2</sub> RbDyF <sub>6</sub>		(205j195)K	<i>C<sub>2h</sub><sup>3</sup></i>	6,799	6,826	9,621	2	при 200 K [2]
Cs <sub>2</sub> RbDyF <sub>6</sub>		<195 K	<i>C<sub>2h</sub><sup>5</sup></i>	6,792	6,773	9,596	2	при 113 K [2]
Cs <sub>2</sub> RbErF <sub>6</sub>			<i>c</i>	9,619			4	[32]
Cs <sub>2</sub> RbEuF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,722			4	[32]	
Cs <sub>2</sub> RbGdF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,703			4	[32]	
Cs <sub>2</sub> RbGdF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,710			4	[53]	
Cs <sub>2</sub> RbHoF <sub>6</sub>	>270K	<i>Fm3m</i>	9,642			4	[32, 115]	
Cs <sub>2</sub> RbHoF <sub>6</sub>	(270j197)K	<i>t</i>					[96]	
Cs <sub>2</sub> RbHoF <sub>6</sub>	<197 K	<i>m</i>					[96]	
Cs <sub>2</sub> RbLaF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,871			4	[32]	
Cs <sub>2</sub> RbLuF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,564			4	[32]	
Cs <sub>2</sub> RbNdF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,781			4	[32]	
Cs <sub>2</sub> RbPdF <sub>6</sub>	>383 K	<i>c</i>	9,22			4	при 393 K [98]	
Cs <sub>2</sub> RbPdF <sub>6</sub>	<383 K	<i>t</i>	9,06		9,57	4	[98]	
Cs <sub>2</sub> RbPrF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,806			4	[32, 102]	
Cs <sub>2</sub> RbSmF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,668			4	[32]	
Cs <sub>2</sub> RbTbF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,625			4	[102]	
Cs <sub>2</sub> RbTmF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,602			4	[32]	
Cs <sub>2</sub> RbYF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,625			4	[102]	
Cs <sub>2</sub> RbYbF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,580			4	[32]	

Cs <sub>2</sub> TlAlF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,070			4		[89]
Cs <sub>2</sub> TlCrF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,166			4		[12]
Cs <sub>2</sub> TlFeF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,222			4		[12]
Cs <sub>2</sub> TlFeF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,211			4		[7]
Cs <sub>2</sub> TlGaF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,182			4		[12]
Cs <sub>2</sub> TlInF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,445			4		[88]
Cs <sub>2</sub> TlMoF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,393			4		[49]
Cs <sub>2</sub> TlVF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,234			4		[5, 12]
Cs <sub>3</sub> GdF <sub>6</sub>	β-фаза	<i>c</i>	9,875			4		[65]
Cs <sub>3</sub> GdF <sub>6</sub>	α-фаза	<i>t</i>	6,904	9,803		2	Тип Rb <sub>3</sub> TlF <sub>6</sub>	[122]
CsRb <sub>2</sub> InF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,283			4		[88]
CsRbTlAlF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,979			4		[89]
K <sub>2</sub> AgAlF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,360			4		[89]
K <sub>2</sub> LiAlF <sub>6</sub>		<i>P3m1</i>	5,6145	13,754		2	ВТФ,ФП:743 К	[21, 89, 105]
K <sub>2</sub> LiAlF <sub>6</sub>		<i>RTm</i>	5,574	13,64		2		[53]
K <sub>2</sub> LiAlF <sub>6</sub>		<i>RTm</i>	5,573		α=60.18	1	НТФ	[21, 105]
K <sub>2</sub> LiAlF <sub>6</sub>		<i>RTm</i>	5,62	27,62		6	тип Cs <sub>2</sub> NaCrF <sub>6</sub>	[97]
K <sub>2</sub> LiAlF <sub>6</sub>		<i>RTm</i>	5,617	27,576		6	ВТФ	[41]
K <sub>2</sub> LiAlF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	7,842			4	НТФ	[41]
K <sub>2</sub> LiAlF <sub>6</sub>	50 кбар, 600 <sup>0</sup> С	<i>c</i>	7,865			4	ФВД	[10]
K <sub>2</sub> LiCoF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	7,995			4	при 300 К	[97]
K <sub>2</sub> LiCrF <sub>6</sub>		<i>c</i>	7,98			4		[12, 63]
K <sub>2</sub> LiCuF <sub>6</sub>		<i>c</i>	7,935			4		[97]
K <sub>2</sub> LiCuF <sub>6</sub>		<i>c</i>	7,925			4		[52]
K <sub>2</sub> LiFeF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,02			4		[12]
K <sub>2</sub> LiGaF <sub>6</sub>		<i>RTm</i>	5,863	28,563		6		[41]
K <sub>2</sub> LiGaF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,208			4	ФВД	[41]
K <sub>2</sub> LiGaF <sub>6</sub>		<i>c</i>	7,98			4	при 300 К	[97]
K <sub>2</sub> LiInF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,24			4	при 300 К	[97]
K <sub>2</sub> LiPdF <sub>6</sub>	>200 К	<i>c</i>	8,154			4	при 300 К	[97, 98]
K <sub>2</sub> LiPdF <sub>6</sub>	<200 К	<i>F4/mmm</i>	8,024	8,234		4	при 80 К	[98]
K <sub>2</sub> LiVF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,013			4		[53]
K <sub>2</sub> LiVF <sub>6</sub>		<i>c?</i>	8,02			4		[12]



$K_2NaAlF_6$		<i>Fm3m</i>	8,122				4	[95]
$K_2NaAlF_6$		<i>c</i>	8,09				4	[84, 102, 119]
$K_2NaCoF_6$			8,22				4	[13]
$K_2NaCrF_6$		<i>Fm3m</i>	8,266				4	[13, 92]
$K_2NaCrF_6$		<i>Fm3m</i>	8,273				4	[63]
$K_2NaCrF_6$		<i>Fm3m</i>	8,232				4	[33]
$K_2NaCrF_6$		<i>Fm3m</i>	8,275				4	[74]
$K_2NaCuF_6$		<i>Fm3m</i>	8,204				4	[52, 84]
$K_2NaCuF_6$		<i>Fm3m</i>	8,206				4	[40]
$K_2NaDyF_6$	>480 K	<i>Fm3m</i>	8,871				4	при 573 K [107, 108]
$K_2NaDyF_6$	<480 K	<i>I4/m</i>	6,204	8,799			2	при 293 K [107, 108]
$K_2NaFeF_6$		<i>Fm3m</i>	8,323				4	[13]
$K_2NaFeF_6$		<i>Fm3m</i>	8,112				4	[128]
$K_2NaGaF_6$		<i>c</i>	8,246				4	[28]
$K_2NaInF_6$		<i>Fm3m</i>	8,560				4	[84]
$K_2NaMnF_6$		<i>t</i>	8,171	8,577			4	[13]
$K_2NaMoF_6$		<i>c</i>	8,501				4	[49]
$K_2NaNiF_6$		<i>Fm3m</i>	8,211				4	[4]
$K_2NaPdF_6$	>381 K	<i>c</i>	8,40				4	при 393 K [98]
$K_2NaPdF_6$	<381 K	<i>F4/mmm</i>	8,30	8,72			4	[98]
$K_2NaRhF_6$		<i>c</i>	8,362				4	[104]
$K_2NaScF_6$		<i>Fm3m</i>	8,482				4	[84]
$K_2NaTiF_6$		<i>Fm3m</i>	8,367				4	[13]
$K_2NaTlF_6$		<i>Fm3m</i>	8,668				4	[84]
$K_2NaVF_6$		<i>Fm3m</i>	8,338				4	[53]
$K_2NaVF_6$		<i>Fm3m</i>	8,315				4	[12, 13]
$K_2NaYF_6$		<i>Fm3m</i>	8,752				4	[102]
$K_2NaYF_6$		<i>Fm3m</i>	8,711				4	[84]
$Li_3CrF_6$		<i>r</i>	9,60	8,35	5,02		4	[62]
$Na_2LiAlF_6$	>718 K	<i>c</i>	7,639				4	ВТФ [47]
$Na_2LiAlF_6$		<i>rh</i>	5,300		13,09		2	[53]
$Na_2LiAlF_6$		<i>m</i>	7,538	7,516	7,525	$\beta=90.81$	4	НТФ [47]
$K_3GdF_6$	$\gamma$ -фаза	<i>c</i>	9,305				4	[121]
$K_3GdF_6$	$\beta$ -фаза	<i>t</i>	6,580		9,305		2	Тип $Rb_3TlF_6$ [121]

$K_3GdF_6$	$\alpha$ -фаза	<i>m</i>	6,368	6,520	9,069	$\beta=90,67$	2	НТФ	[121]
$K_3GdF_6$	$\alpha$ -фаза	<i>m</i>	6,390	6,609	9,126	$\beta=90,69$	2	НТФ	[65]
$Na_3VF_6$	<912 K	$P2_1/n$	5,513	5,727	7,958	$\beta=90,33$	2	( $\alpha$ -криолит)	[96, 83]
$NH_4)_2KMnF_6$		<i>m</i>	6,153	6,151	9,346	$\beta=91,37$	2		[72]
$NH_4)_2NaMnF_6$		$I4/mmm$	5,915		8,740		2		[72]
$NH_4)_2NaScF_6$		<i>c</i>	8,599				4		[22, 102]
$NH_4)_3AlF_6$		$FY3m$	8,934				4		[53]
$NH_4)_3CrF_6$		$Fm3m$	9,03				4		[53]
$NH_4)_3FeF_6$		$FY3m$	9,106				4		[53]
$NH_4)_3GaF_6$		<i>t</i>	6,36		9,14		2		[15]
$NH_4)_3InF_6$		<i>c</i>	9,32				4		[15]
$NH_4)_3ScF_6$		$P2_1/n$	6,484	6,494	9,44	$\beta=90,36$	2		[99]
$NH_4)_3VF_6$		<i>c</i>	9,06				4		[53]
$Rb(NH_4)_2FeF_6$	>390 K	<i>c</i>							[98]
$Rb_2AgAlF_6$		$Fm3m$	8,50				4		[89]
$Rb_2AgInF_6$		$Fm3m$	8,897				4		[88]
$Rb_2KAIF_6$		$Fm3m$	8,682				4		[89]
$Rb_2KAIF_6$	>77 K	$Fm3m$	8,680				4	при 295 K	[58, 100]
$Rb_2KAIF_6$	>77 K	$Fm3m$	8,637				4	при 80 K	[58, 100]
$RbK_2AlF_6$		$Fm3m$	8,56				4		[53]
$Rb_2KBiF_6$	>340 K	$Fm3m$	9,38				4	при 360 K	[58, 96, 100]
$Rb_2KBiF_6$	<340 K	$P2_1/n$	6,516	6,721	9,294	$\beta=90,10$	2	при 80 K	[58, 96, 100]
$Rb_2KCeF_6$		<i>c</i>	9,40				4		[18, 68]
$Rb_2KCoF_6$		$Fm3m$	8,810						[12]
$Rb_2KCoF_6$		$Fm3m$	8,809				4		[8]
$Rb_2KCrF_6$	>153 K	$Fm3m$	8,809				4		[12, 96]
$Rb_2KCrF_6$		$Fm3m$	8,810				4	при 295 K	[58, 100]
$Rb_2KCrF_6$		$Fm3m$	8,817				4		[92]
$Rb_2KCrF_6$	<153 K	<i>t</i>	6,152		8.849		2	при 80 K	[58, 96, 100]
$Rb_2KCuF_6$		$Fm3m$	8,738				4		[40]
$Rb_2KCuF_6$		<i>c</i>	8,753				4		[52]
$Rb_2KDyF_6$	>381 K	$Fm3m$	9,370				4	при 443K	[19, 108, 116]
$Rb_2KDyF_6$	<381 K	$P2_1/n$	6,504	6,678	9,239	$\beta=89,85$	2	при 123K	[19, 108]

Rb <sub>2</sub> KFeF <sub>6</sub>	>170 K	<i>Fm3m</i>	8,869				4	[74, 96, 100]
Rb <sub>2</sub> KFeF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,868				4	[7]
Rb <sub>2</sub> KFeF <sub>6</sub>	<170 K		6,162		8,914		2	при 80 K [58, 100]
Rb <sub>2</sub> KGaF <sub>6</sub>	>129 K	<i>Fm3m</i>	8,74				4	[37, 95, 96]
Rb <sub>2</sub> KHoF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,367					>392 K [96, 116]
Rb <sub>2</sub> KHoF <sub>6</sub>	<392 K	<i>P2<sub>1</sub>/n</i>	6,469	6,577	9,276	$\beta=90,22$	2	[96, 116]
Rb <sub>2</sub> KMnF <sub>6</sub>		<i>I4/mmm</i>	6,101		9,160		2	[92]
Rb <sub>2</sub> KMoF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,911				4	[49]
Rb <sub>2</sub> KNiF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,734				4	[4]
Rb <sub>2</sub> KPdF <sub>6</sub>	>493 K	<i>c</i>	8,85				4	при 493 K [98]
Rb <sub>2</sub> KPdF <sub>6</sub>	<493 K		8,74		9,23		4	[98]
Rb <sub>2</sub> KRhF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,876				4	[104]
Rb <sub>2</sub> KScF <sub>6</sub>	>252 K	<i>Fm3m</i>	9,018				4	при 293 K [96, 125]
Rb <sub>2</sub> KScF <sub>6</sub>	(252j223) K	<i>I4/m</i>	6,358	6,358	9,019	$\beta=90$	2	при 230 K [125]
Rb <sub>2</sub> KScF <sub>6</sub>		<i>I4/m</i>	6,366		9,016		2	[31]
Rb <sub>2</sub> KScF <sub>6</sub>	< 223 K	<i>P2<sub>1</sub>/n</i>	6,347	6,348	8,994	$\beta=89,91$	2	при 150 K [125]
Rb <sub>2</sub> KScF <sub>6</sub>		<i>P2<sub>1</sub>/n</i>	6,363	6,349	8,993	$\beta=89,90$	2	[31]
Rb <sub>2</sub> KTbF <sub>6</sub>	>410 K	<i>Fm3m</i>	9,356				4	[95, 116]
Rb <sub>2</sub> KTbF <sub>6</sub>	<410 K	<i>P12<sub>1</sub>/n1</i>	6,506	6,600	9,260	$\beta=90,31$	2	[95, 116]
Rb <sub>2</sub> KTiF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,910				4	[48]
Rb <sub>2</sub> KTiF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,932				4	[8]
Rb <sub>2</sub> KVF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,855				4	[5]
Rb <sub>2</sub> KVF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,875				4	[12]
Rb <sub>2</sub> KYF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,293				4	[102]
Rb <sub>2</sub> KYF <sub>6</sub>	>398 K	<i>Fm3m</i>	9,322				4	при 420 K [96, 100]
Rb <sub>2</sub> KYF <sub>6</sub>	<398 K	<i>P2<sub>1</sub>/n</i>	6,481	6,599	9,219	$\beta=90,26$	2	при 115 K [100]
Rb <sub>2</sub> KYF <sub>6</sub>	<398 K	<i>P12<sub>1</sub>/n1</i>	6,531	6,583	9,271	$\beta=90,07$	2	[44]
Rb <sub>2</sub> LiAlF <sub>6</sub>	<i>hcc</i>		5,802		28,02		6	[12]
Rb <sub>2</sub> LiAlF <sub>6</sub>		<i>r</i>	5,797	11,629	16,203		8	[42]
Rb <sub>2</sub> LiCoF <sub>6</sub>	<i>hcc</i>		5,856		28,55		6	[12]
Rb <sub>2</sub> LiCrF <sub>6</sub>	<i>hcc</i>	<i>rh</i>	5,865		28,61		6	[12]
Rb <sub>2</sub> LiCrF <sub>6</sub>		<i>m</i>	10,255	5,890	9,736	$\beta=100,29$	4	[63]
Rb <sub>2</sub> LiCuF <sub>6</sub>	<i>hcc</i>	<i>RTm</i>	5,844		28,301		6	[40]

Rb <sub>2</sub> LiCuF <sub>6</sub>		<i>rh</i>	5,843		28,328		6	[52]
Rb <sub>2</sub> LiCuF <sub>6</sub>		<i>m</i>	10,160	5,844	9,590	β=100,30	4	[29]
Rb <sub>2</sub> LiFeF <sub>6</sub>		<i>rh</i>	5,891		28,77		6	[10, 12]
Rb <sub>2</sub> LiFeF <sub>6</sub>		<i>RTm</i>	5,880		28,790		6	тип Cs <sub>2</sub> NaCrF <sub>6</sub> [73]
Rb <sub>2</sub> LiFeF <sub>6</sub>	>30 кбар, 250 <sup>0</sup> C	<i>Fm3m</i>	8,244				4	ФВД [57]
Rb <sub>2</sub> LiFeF <sub>6</sub>	50 кбар, 600 <sup>0</sup> C	<i>c</i>	8,248				4	ФВД [53]
Rb <sub>2</sub> LiFeF <sub>6</sub>	60 кбар, 700 <sup>0</sup> C	<i>rh</i>	5,881		14,36		3	ФВД [10]
Rb <sub>2</sub> LiGaF <sub>6</sub>	<i>hcc</i>		5,86		28,59		6	[12]
Rb <sub>2</sub> LIVF <sub>6</sub>		<i>C2/m</i>	10,22	5,89	9,76	β=100,5	4	[53]
Rb <sub>2</sub> LIVF <sub>6</sub>		<i>rh</i>	5,891		28,83		6	[10, 12]
Rb <sub>2</sub> LIVF <sub>6</sub>	50 кбар, 600 <sup>0</sup> C	<i>c</i>	8,248				6	[10]
Rb <sub>2</sub> NaAlF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,298				4	[12, 98]
Rb <sub>2</sub> NaBiF <sub>6</sub>	>193 K	<i>c</i>	9,010				4	[115]
Rb <sub>2</sub> NaCoF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,419				4	[12]
Rb <sub>2</sub> NaCoF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,421				4	[8]
Rb <sub>2</sub> NaCrF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,422				4	[12, 63]
Rb <sub>2</sub> NaCrF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,418				4	[92]
Rb <sub>2</sub> NaCuF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,368				4	[40]
Rb <sub>2</sub> NaCuF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,371				4	[52]
Rb <sub>2</sub> NaDyF <sub>6</sub>	>172 K	<i>Fm3m</i>	8,874				4	при 207 K [96, 107]
Rb <sub>2</sub> NaDyF <sub>6</sub>	<172 K	<i>I4/m</i>	6,223		8,896		2	при 17 K [96, 107]
Rb <sub>2</sub> NaDyF <sub>6</sub>	>190 K	<i>Fm3m</i>	8,909				4	при 293 K [19, 108]
Rb <sub>2</sub> NaDyF <sub>6</sub>	<190 K	<i>I4/m</i>	6,256		8,909		2	при 123 K [19, 108]
Rb <sub>2</sub> NaErF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,859				4	ФП нет [24]
Rb <sub>2</sub> NaErF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,867				4	[3]
Rb <sub>2</sub> NaEuF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,973				4	ФП нет [12, 24]
Rb <sub>2</sub> NaFeF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,465				4	]12]
Rb <sub>2</sub> NaFeF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,462				4	[74]
Rb <sub>2</sub> NaFeF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,464				4	[7]
Rb <sub>2</sub> NaGaF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,406				4	[12, 28]
Rb <sub>2</sub> NaGdF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,952				4	[24]
Rb <sub>2</sub> NaGdF <sub>6</sub>	>218 K	<i>c</i>	8,978				4	[115]
Rb <sub>2</sub> NaHoF <sub>6</sub>	>173 K	<i>Fm3m</i>	8,8735				4	при 207 K [54, 107, 108]
Rb <sub>2</sub> NaHoF <sub>6</sub>	>172 K	<i>Fm3m</i>	8,865				4	при 205 K [55]

Rb <sub>2</sub> NaHoF <sub>6</sub>	<172 K	<i>t</i>	6,223		8,890	2	при 40 K	[55]
Rb <sub>2</sub> NaHoF <sub>6</sub>	<173 K	<i>I4/m</i>	6,2233		8,8957	2	при 17 K	[107, 108]
Rb <sub>2</sub> NaHoF <sub>6</sub>		<i>I4/m</i>	6,1912		8,8490	2	НТФ	[56]
Rb <sub>2</sub> NaInF <sub>6</sub>	(комн. т-ра)	<i>c</i>	8,696			4		[58]
Rb <sub>2</sub> NaInF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,643			4	при 80 K	[58]
Rb <sub>2</sub> NaMnF <sub>6</sub>	>300 K	<i>c</i>						[98]
Rb <sub>2</sub> NaMnF <sub>6</sub>	<300 K	<i>F4/mmm</i>	8,365		8,660	4		[92]
Rb <sub>2</sub> NaMoF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,632			4		[49]
Rb <sub>2</sub> NaNiF <sub>6</sub>	>152 K	<i>c</i>	8,376			4		[4]
Rb <sub>2</sub> NaNiF <sub>6</sub>	<152 K	<i>t</i>	5,99		8,76	2	при 80 K	[58]
Rb <sub>2</sub> NaPdF <sub>6</sub>	>388 K	<i>c</i>	8,57			4		[58]
Rb <sub>2</sub> NaPdF <sub>6</sub>	>388 K	<i>c</i>	8,50			4	при 393 K	[98]
Rb <sub>2</sub> NaPdF <sub>6</sub>	<388 K	<i>t</i>	8,47		8,76	4		[98]
Rb <sub>2</sub> NaRhF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,492			4		[104]
Rb <sub>2</sub> NaScF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,599			4		[27]
Rb <sub>2</sub> NaSmF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,988			4		[3]
Rb <sub>2</sub> NaTbF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,923			4		[24]
Rb <sub>2</sub> NaTbF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,9208			4		[3]
Rb <sub>2</sub> NaTiF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,469			4		[53]
Rb <sub>2</sub> NaTiF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,533			4		[6]
Rb <sub>2</sub> NaTmF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,839			4		[24]
Rb <sub>2</sub> NaTmF <sub>6</sub>		<i>I4/mmm</i>					НТФ	[96]
Rb <sub>2</sub> NaVF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,468			4		[5, 12]
Rb <sub>2</sub> NaYbF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,819			4	ФП нет	[24]
Rb <sub>2</sub> NaYbF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,824			4		[3, 68]
Rb <sub>2</sub> NaYF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,8693			4		[3]
Rb <sub>3</sub> GdF <sub>6</sub>	β-фаза	<i>c</i>	9,377			4		[127]
Rb <sub>3</sub> GdF <sub>6</sub>	β-фаза	<i>c</i>	9,492			4		[65]
Rb <sub>3</sub> GdF <sub>6</sub>	α-фаза	<i>t</i>	6,632		9,377	2	Тип Rb <sub>3</sub> TiF <sub>6</sub>	[127]
Rb <sub>3</sub> GdF <sub>6</sub>	α-фаза	<i>t</i>	6,650		9,520	2	Тип Rb <sub>3</sub> TiF <sub>6</sub>	[66]
Rb <sub>2</sub> TlInF <sub>6</sub>		<i>t</i>	6,449		9,195	2		[88]
RbK <sub>2</sub> AlF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,567			4		[89]
RbTlAgAlF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,517			4		[89]
RbTlAgInF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,896			4		[88]

RbTlKAlF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,685			4		[89]	
RbTlKInF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	9,078			4		[88]	
RbTlNaInF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,686			4		[88]	
Tl <sub>2</sub> AgAlF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,527			4		[89]	
Tl <sub>2</sub> AgInF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,890			4		[88]	
Tl <sub>2</sub> KAlF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,679			4		[89]	
Tl <sub>2</sub> KCrF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,824			4		[12]	
Tl <sub>2</sub> KFeF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,880			4		[12]	
Tl <sub>2</sub> KGaF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,818			4		[12]	
Tl <sub>2</sub> KMoF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,997			4		[49]	
Tl <sub>2</sub> KScF <sub>6</sub>		<i>c</i>	9,03			4		[27]	
Tl <sub>2</sub> KVF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,871			4		[12]	
Tl <sub>2</sub> LiFeF <sub>6</sub>	40 кбар, 400 <sup>0</sup> C	<i>rh</i>	5,925	29,05		6	ФВД	[10, 12]	
Tl <sub>2</sub> LiAlF <sub>6</sub>	40 кбар, 400 <sup>0</sup> C	<i>rh</i>	5,867	28,31		6	ФВД	[10]	
Tl <sub>2</sub> LiCrF <sub>6</sub>	40 кбар, 400 <sup>0</sup> C	<i>rh</i>	5,915	28,78		6	ФВД	[10]	
Tl <sub>2</sub> LiFeF <sub>6</sub>	100 кбар, 400 <sup>0</sup> C	<i>c</i>	8,320			4	ФВД	[10]	
Tl <sub>2</sub> LiGaF <sub>6</sub>	40 кбар, 400 <sup>0</sup> C	<i>rh</i>	5,921	28,77		6	ФВД	[10]	
Tl <sub>2</sub> LiVF <sub>6</sub>	40 кбар, 400 <sup>0</sup> C	<i>rh</i>	5,940	29,02		6	ФВД	[10]	
Tl <sub>2</sub> NaAlF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,370			4		[89]	
Tl <sub>2</sub> NaCrF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,466			4		[12]	
Tl <sub>2</sub> NaCrF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,463			4		[63]	
Tl <sub>2</sub> NaFeF <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	8,501			4		[12]	
Tl <sub>2</sub> NaGaF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,453			4		[12]	
Tl <sub>2</sub> NaMoF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,649			4		[49]	
Tl <sub>2</sub> NaRhF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,526			4		[104]	
Tl <sub>2</sub> NaRhF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,535			4		[53]	
Tl <sub>2</sub> NaScF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,642			4		[27]	
Tl <sub>2</sub> NaVF <sub>6</sub>		<i>c</i>	8,509			4		[12]	
Tl <sub>3</sub> InF <sub>6</sub>	<403 K	<i>t</i>	6,454	9,155		2		[96, 105]	
<b>Хлориды</b>									
Cs <sub>0.25</sub> Rb <sub>1.75</sub> NaTmCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,552	10,618		4		[77]	
Cs <sub>0.4</sub> Rb <sub>0.6</sub> LiSc <sub>0.9</sub> Lu <sub>0.1</sub> Cl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,151			4		[77]	
Cs <sub>0.5</sub> Rb <sub>1.5</sub> NaTmCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,596			4		[77]	
Cs <sub>0.6</sub> Rb <sub>1.4</sub> LiScCl <sub>6</sub>		<i>P3m1</i>	7,192	17,782		3		[77]	

$\text{Cs}_{0.75}\text{Rb}_{1.25}\text{NaTmCl}_6$		<i>Fm3m</i>	10,611				4	[77]
$\text{Cs}_{0.8}\text{Rb}_{1.2}\text{LiSc}_{0.6}\text{Lu}_{0.4}\text{Cl}_6$		<i>Fm3m</i>	10,239				4	[77]
$\text{Cs}_{1.2}\text{Rb}_{0.8}\text{LiSc}_{0.4}\text{Lu}_{0.6}\text{Cl}_6$		<i>Fm3m</i>	10,304				4	[77]
$\text{Cs}_{1.5}\text{K}_{1.5}\text{BiCl}_6$		<i>PP</i>	13,556	7,664	15,320	$\alpha=119,7$ $\beta=106,26$ $\gamma=90,34$	4	[14]
$\text{Cs}_{1.5}\text{Rb}_{0.5}\text{NaTmCl}_6$		<i>Fm3m</i>	10,611				4	[77]
$\text{Cs}_{1.75}\text{K}_{1.25}\text{BiCl}_6$		<i>PP</i>	13,62	7,72	15,46	$\alpha=119,5$ $\beta=106,9$ $\gamma=90,0$	4	[14]
$\text{Cs}_2\text{Au}^+\text{Au}^{3+}\text{Cl}_6$		<i>I4/mmm</i>	7,222		10,824		2	структ. с квадратами [20]
$\text{Cs}_2\text{AgYCl}_6$		<i>Fm3m</i>	10,69				4	[53]
$\text{Cs}_2\text{HgPdCl}_6$		<i>I4/mmm</i>	7,240		10,87		2	[53]
$\text{Cs}_2\text{KBiCl}_6$		<i>Fm3m</i>	11,09				4	[113, 114]
$\text{Cs}_2\text{KBiCl}_6$		<i>Fm3m</i>	11,086				4	[14]
$\text{Cs}_2\text{KCrCl}_6$		<i>Fm3m</i>	10,60				4	[113, 114]
$\text{Cs}_2\text{KCrCl}_6$		<i>Fm3m</i>	10,633				4	[36]
$\text{Cs}_2\text{KEuCl}_6$		<i>Fm3m</i>	11,1633				4	[103]
$\text{Cs}_2\text{KInCl}_6$	>373K	<i>Fm3m</i>						[96]
$\text{Cs}_2\text{KInCl}_6$	<373K	<i>C2/c</i>						[96]
$\text{Cs}_2\text{KScCl}_6$		<i>Fm3m</i>	10,873				4	[79]
$\text{Cs}_2\text{KScCl}_6$		<i>Fm3m</i>	10,875				4	[82]
$\text{Cs}_2\text{KSmCl}_6$		<i>Fm3m</i>	11,21				4	[53]
$\text{Cs}_2\text{KTbCl}_6$		<i>Fm3m</i>	11,1224				4	[103]
$\text{Cs}_2\text{Li}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{ScCl}_6$		<i>P3m1</i>	7,334		18,098		3	[77]
$\text{Cs}_2\text{LiBiCl}_6$	псевдокубич.		10,70				4	[113, 114]
$\text{Cs}_2\text{LiDyCl}_6$		<i>Fm3m</i>	10,49				4	[53]
$\text{Cs}_2\text{LiLuCl}_6$	(6L) >783 K		7,56		18,597		3	при 798 K [78]
$\text{Cs}_2\text{LiLuCl}_6$	(783j598) K	<i>Fm3m</i>	10,549				4	при 598 K [78]
$\text{Cs}_2\text{LiLuCl}_6$	>598 K	<i>Fm3m</i>	10,408				4	[79]
$\text{Cs}_2\text{LiLuCl}_6$	<598 K	<i>rh</i>	7,401		18,228		3	при 323K, тип BT [78]

							K <sub>2</sub> LiAlF <sub>6</sub>	
Cs <sub>2</sub> LiNdCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,61					[53]
Cs <sub>2</sub> LiSc <sub>0,1</sub> Lu <sub>0,9</sub> Cl <sub>6</sub>		<i>P3m1</i>	7,377		18,179			[77]
Cs <sub>2</sub> LiSc <sub>0,2</sub> Lu <sub>0,8</sub> Cl <sub>6</sub>		<i>P3m1</i>	7,365		18,180			[77]
Cs <sub>2</sub> LiSc <sub>0,3</sub> Lu <sub>0,7</sub> Cl <sub>6</sub>		<i>RTm</i>	7,357		36,42		тип Cs <sub>2</sub> NaCrF <sub>6</sub>	[77]
Cs <sub>2</sub> LiSc <sub>0,5</sub> Lu <sub>0,5</sub> Cl <sub>6</sub>		<i>RTm</i>	7,347		36,35		тип Cs <sub>2</sub> NaCrF <sub>6</sub>	[77]
Cs <sub>2</sub> LiSmCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,57					[53]
Cs <sub>2</sub> LiTmCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,44					[53]
Cs <sub>2</sub> NaAmCl <sub>6</sub>			10,855					[82]
Cs <sub>2</sub> NaBiCl <sub>6</sub>	>100 K	<i>Fm3m</i>	10,839					[81, 82, 118]
Cs <sub>2</sub> NaBiCl <sub>6</sub>	>99,8 K	<i>Fm3m</i>	10,866					[107, 108]
Cs <sub>2</sub> NaBiCl <sub>6</sub>	<99,8 K	<i>I4/m</i>	7,590		10,862			[107, 108]
Cs <sub>2</sub> NaBkCl <sub>6</sub>		<i>c</i>	10,805					[82]
Cs <sub>2</sub> NaCeCl <sub>6</sub>		<i>c</i>	10,946					[82]
Cs <sub>2</sub> NaCrCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,27					[113, 114]
Cs <sub>2</sub> NaCrCl <sub>6</sub>		<i>P3m1</i>	7,230		17,912		комн. темп.	[36]
Cs <sub>2</sub> NaDyCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,743					[82]
Cs <sub>2</sub> NaErCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,704					[45, 82]
Cs <sub>2</sub> NaEuCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,810					[82]
Cs <sub>2</sub> NaFeCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,333					[82]
Cs <sub>2</sub> NaGdCl <sub>6</sub>		<i>c</i>	10,792					[82]
Cs <sub>2</sub> NaGdCl <sub>6</sub>		<i>c</i>	10,73					[112]
Cs <sub>2</sub> NaHoCl <sub>6</sub>		<i>c</i>						[30]
Cs <sub>2</sub> NaInCl <sub>6</sub>	>373 K	<i>Fm3m</i>	10,870					[43]
Cs <sub>2</sub> NaInCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,531					[82]
Cs <sub>2</sub> NaInCl <sub>6</sub>	<373 K	<i>C2/c</i>	25,484	7,699	13,225	β=100,69	комн. темп.	[43]
Cs <sub>2</sub> NaLaCl <sub>6</sub>	>208 K	<i>Fm3m</i>	10,992					[82, 96]
Cs <sub>2</sub> NaLaCl <sub>6</sub>	<208 K	<i>I4/m</i>						[86, 96]
Cs <sub>2</sub> NaLuCl <sub>6</sub>		<i>c</i>	10,655					[82]
Cs <sub>2</sub> NaNdCl <sub>6</sub>	>132 K	<i>Fm3m</i>	10,8761				при 293K	[107, 108]
Cs <sub>2</sub> NaNdCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,889					[82]
Cs <sub>2</sub> NaNdCl <sub>6</sub>	<132 K	<i>I4/m</i>	7,6377		10,8631		при 100K	[107, 108]
Cs <sub>2</sub> NaPrCl <sub>6</sub>	>153 K	<i>Fm3m</i>	10,914				при 293K	[107, 108]



Cs <sub>2</sub> NaPrCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,912				4		[34, 82]
Cs <sub>2</sub> NaPrCl <sub>6</sub>	<153 K	<i>I4/m</i>	7,6525		10,9173		2	при 100 K	[107, 108]
Cs <sub>2</sub> NaPuCl <sub>6</sub>		<i>c</i>	10,889				4		[82]
Cs <sub>2</sub> NaSbCl <sub>6</sub>		<i>c</i>	10,778				4	при 293 K	[82]
Cs <sub>2</sub> NaSmCl <sub>6</sub>		<i>c</i>	10,834				4		[82]
Cs <sub>2</sub> NaTbCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>							[30, 86]
Cs <sub>2</sub> NaTbCl <sub>6</sub>		<i>I4/m</i>							[86]
Cs <sub>2</sub> NaTlCl <sub>6</sub>		<i>c</i>	10,623				4		[82]
Cs <sub>2</sub> NaTmCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,686				4		[82]
Cs <sub>2</sub> NaTmCl <sub>6</sub>		<i>c</i>	10,685				4		[77]
Cs <sub>2</sub> NaUCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,937				4		[93]
Cs <sub>2</sub> NaYbCl <sub>6</sub>		<i>c</i>						ВТФ	[30, 86]
Cs <sub>2</sub> NaYbCl <sub>6</sub>		<i>I4/m</i>						НТФ	[86]
Cs <sub>2</sub> NaYCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,732				4	ВТФ	[82]
Cs <sub>2</sub> NaYCl <sub>6</sub>		<i>I4/m</i>						НТФ	[86, 123]
Cs <sub>2</sub> RbBiCl <sub>6</sub>		<i>rh</i>	11,11			$\alpha=88,2$	4		[113, 114]
Cs <sub>2</sub> RbCrCl <sub>6</sub>		<i>r</i>	14,79	11,00	15,01		8		[113, 114]
Cs <sub>2</sub> TiBiCl <sub>6</sub>		<i>rh</i>	11,03			$\alpha=88,2$	4		[113, 114]
Cs <sub>2</sub> TiCrCl <sub>6</sub>		<i>t</i>	10,57		10,78		4		[113, 114]
CsK <sub>2</sub> BiCl <sub>6</sub>		<i>C2/c</i>	25,653	7,799	12,874	$\beta=99,24$	8	КОМН. ТЕМП.	[17]
CsK <sub>2</sub> BiCl <sub>6</sub>		<i>PP</i>	13,503	7,643	15,278	$\alpha=119,15$ $\beta=106,36$ $\gamma=90,54$	4		[14]
CsRbLiLuCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,338				4		[77]
CsRbLiScCl <sub>6</sub>		<i>RTm</i>	7,223		35,86		6	тип Cs <sub>2</sub> NaCrF <sub>6</sub>	[77]
CsRbLiTmCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,370				4		[77]
CsRbNaLaCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,917		10,986		4		[77]
CsRbNaNdCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,842				4		[77]
CsRbNaPrCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,846		10,908		4		[77]
CsRbNaScCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,437				4		[77]
CsRbNaVCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,276				4		[77]
In <sub>2</sub> LiTmCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,198		10,380		4		[77]
K <sub>2</sub> LiScCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	9,946		10,027		4		[77]

$K_2LiTmCl_6$	псевдокубич.	<i>P4/nbm</i>	10,140		10,218		4	[77]
$K_2NaBiCl_6$			10,50				4	]113, 114]
$K_2NaCrCl_6$		<i>Fm3m</i>	10,085				4	[36]
$K_2NaCrCl_6$		<i>Fm3m</i>	9,98				4	[113, 114]
$K_2NaCrCl_6$		<i>P4/mnc</i>	7,080		10,047			[36]
$K_2NaUCl_6$		<i>P3m1</i>	7,28		17,79			[53]
$Rb_2AgTmCl_6$		<i>P4/nbm</i>	10,472		10,583		4	[77]
$Rb_2ErCl_6$		<i>Fm3m</i>	10,307				4	[77]
$Rb_2KCrCl_6$		<i>P2<sub>1</sub>/c</i>	12,884	7,249	12,550	$\beta=108,91$	4	комн. темп. [36]
$Rb_2Li_{0.5}Na_{0.5}ScCl_6$		<i>Fm3m</i>	10,271				4	[77]
$Rb_2Li_{0.5}Na_{0.5}TmCl_6$		<i>P4/nbm</i>	10,415		10,474		4	[77]
$Rb_2LiDyCl_6$		<i>Fm3m</i>	10,354				4	[77]
$Rb_2LiEuCl_6$		<i>P4/nbm</i>	10,404		10,482		4	[77]
$Rb_2LiGdCl_6$		<i>P4/nbm</i>	10,388		10,438		4	[77]
$Rb_2LiHoCl_6$		<i>Fm3m</i>	10,339				4	[77]
$Rb_2LiInCl_6$		<i>Fm3m</i>						[77]
$Rb_2LiLuCl_6$		<i>Fm3m</i>	10,269				4	[77]
$Rb_2LiRhCl_6$		<i>PTm1</i>	6,944		6,012		1	тип $Cs_2LiGaF_6$ [77]
$Rb_2LiRuCl_6$		<i>PTm1</i>	6,960		6,012		1	тип $Cs_2LiGaF_6$ [77]
$Rb_2LiSc_{0.2}Lu_{0.8}Cl_6$		<i>Fm3m</i>	10,240				4	[77]
$Rb_2LiSc_{0.5}Lu_{0.5}Cl_6$	<i>Fm3m</i>	10,207				4	[77]	
$Rb_2LiSc_{0.5}V_{0.5}Cl_6$	<i>RTm</i>	7,097		35,38		6	[77]	
$Rb_2LiSc_{0.6}Lu_{0.4}Cl_6$	<i>Fm3m</i>	10,167				4	[77]	
$Rb_2LiSc_{0.8}Lu_{0.2}Cl_6$	<i>Fm3m</i>	10,137				4	[77]	
$Rb_2LiScCl_6$	<i>Fm3m</i>	10,107				4	[77]	
$Rb_2LiSmCl_6$	<i>P4/nbm</i>	10,427		10,500		4	[77]	
$Rb_2LiTbCl_6$	<i>Fm3m</i>	10,378				4	[77]	
$Rb_2LiTmCl_6$	<i>Fm3m</i>	10,296				4	[77]	
$Rb_2LiVCl_6$	<i>PTm1</i>	6,982		6,029		1	тип $Cs_2LiGaF_6$ [77]	
$Rb_2LiYCl_6$	<i>Fm3m</i>	10,344				4	[77]	
$Rb_2NaBiCl_6$	псевдокубич.		10,64				4	[113, 114]
$Rb_2NaCrCl_6$		<i>Fm3m</i>	10,10				4	[113, 114]
$Rb_2NaCrCl_6$		<i>Fm3m</i>	10,131				4	[36]
$Rb_2NaDyCl_6$		<i>P4/nbm</i>	10,576		10,652		4	[77]

Rb <sub>2</sub> NaErCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,539		10,605	4	[77]
Rb <sub>2</sub> NaEuCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,641		10,699	4	[77]
Rb <sub>2</sub> NaGdCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,613		10,676	4	[77]
Rb <sub>2</sub> NaHoCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,562		10,625	4	[77]
Rb <sub>2</sub> NaInCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,404			4	[77]
Rb <sub>2</sub> NaLuCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,494		10,570	4	[77]
Rb <sub>2</sub> NaSc <sub>0.2</sub> Lu <sub>0.8</sub> Cl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,474		10,536	4	[77]
Rb <sub>2</sub> NaSc <sub>0.4</sub> Lu <sub>0.6</sub> Cl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,445		10,499	4	[77]
Rb <sub>2</sub> NaSc <sub>0.8</sub> Lu <sub>0.2</sub> Cl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,396			4	[77]
Rb <sub>2</sub> NaScCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,364			4	[77]
Rb <sub>2</sub> NaTiCl <sub>6</sub>		<i>c</i>	10,394			4	[82]
Rb <sub>2</sub> NaTmCl <sub>6</sub>	>441 K	<i>Fm3m</i>	10,630			4	BTΦ, 475 K [77]
Rb <sub>2</sub> NaTmCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,530		10,599	4	HTΦ, 293 K [77]
Rb <sub>2</sub> NaTmCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,57		10,63	4	[53]
Rb <sub>2</sub> NaUCl <sub>6</sub>			7,27		35,51		[53]
Rb <sub>2</sub> NaVCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,195			4	[77]
Rb <sub>2</sub> NaYbCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,509		10,576	4	[77]
Rb <sub>2</sub> NaYCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,566		10,633	4	[77]
RbKLiScCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,055			4	[77]
RbTlLiDyCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,298		10,404	4	[77]
RbTlLiScCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,067			4	[77]
RbTlLiTmCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,271			4	[77]
Tl <sub>2</sub> LiLuCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,145		10,251	4	[77]
Tl <sub>2</sub> LiSc <sub>0.25</sub> Lu <sub>0.75</sub> Cl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,139		10,220	4	[77]
Tl <sub>2</sub> LiSc <sub>0.5</sub> Lu <sub>0.5</sub> Cl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,111			4	[77]
Tl <sub>2</sub> LiScCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,029			4	[77]
Tl <sub>2</sub> LiTmCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,194		10,312	4	[77]
Tl <sub>2</sub> LiYbCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,283			4	[77]
Tl <sub>2</sub> LiYbCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,153		10,273	4	[77]
Tl <sub>2</sub> NaBiCl <sub>6</sub>	псевдокубич.		10,60			4	[113, 114]
Tl <sub>2</sub> NaCrCl <sub>6</sub>		<i>Fm3m</i>	10,02			4	[113, 114]
Tl <sub>2</sub> NaScCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,241		10,310	4	[77]
Tl <sub>2</sub> NaTmCl <sub>6</sub>		<i>P4/nbm</i>	10,437		10,515	4	[77]

<b>Бромиды</b>								
$\text{Cs}_2\text{KScBr}_6$		<i>c</i>	11,347				4	[83, 120]
$\text{Cs}_2\text{KTmBr}_6$		<i>c</i>	11,498				4	[83, 120]
$\text{Cs}_2\text{NaCeBr}_6$		<i>c</i>	11,508				4	[75]
$\text{Cs}_2\text{NaDyBr}_6$	>139 K	<i>Fm3m</i>	11,314				4	[26]
$\text{Cs}_2\text{NaDyBr}_6$	<139 K	<i>I4/m</i>						[26]
$\text{Cs}_2\text{NaGdBr}_6$		<i>c</i>	11,370				4	[75]
$\text{Cs}_2\text{NaHoBr}_6$	>126 K	<i>Fm3m</i>	11,293				4	[26]
$\text{Cs}_2\text{NaHoBr}_6$	<126 K	<i>I4/m</i>						[26]
$\text{Cs}_2\text{NaNdBr}_6$		<i>c</i>	11,421				4	[75]
$\text{Cs}_2\text{NaScBr}_6$		<i>c</i>	11,070				4	[83, 120]
$\text{Cs}_2\text{NaSmBr}_6$		<i>c</i>	11,401				4	[83, 120]
$\text{Cs}_2\text{NaTmBr}_6$	>101 K	<i>Fm3m</i>	11,253				4	[26, 83]
$\text{Cs}_2\text{NaTmBr}_6$	(<101;102,4) K	<i>I4/m</i>						[26]
$\text{Cs}_2\text{NaYBr}_6$	<i>c</i> > 140 K		11,304				4	[75]
<b>Иодиды</b>								
$\text{Cs}_2\text{NaErI}_6$	> 383 K		12,20				4	[53]
$\text{Cs}_2\text{NaErI}_6$	< 383 K	<i>h</i>	12,08		12,23		4	[53]
$\text{Cs}_2\text{LiScI}_6$		<i>h</i>	8,191		7,003		1	Тип $\text{Cs}_2\text{LiAlF}_6$ [53]
$\text{Cs}_2\text{Au}^+\text{Au}^{3+}\text{I}_6$	<i>p</i> > 6,8 Гпа, 350 K	<i>Pm3m</i>	5,370					[61]
$\text{Cs}_2\text{Au}^+\text{Au}^{3+}\text{I}_6$		<i>I4/mmm</i>	8,28		12,08		2	[53]
$\text{K}_3\text{GdI}_6$		<i>P2_1/n</i>	8,252	8,820	12,19	$\beta=90,89$	2	[53]

## 6. Литература

1. **Aleksandrov K.S., Bartolome J.** // Phys. Condens. Matter. 1994. V. 6. P. 8219–8235.
2. **Aleksandrov K.S., Melnikova S.V., Misyul S.V.** // Phys. Status Solidi. 1987. V. A104, № 2. P. 545–548.
3. **Aleonard S., Pouret C.** // J. Appl. Aryst. 1968. V. 1, № 2. P. 113–116.
4. **Alter E., Hoppe R.** // Z. anorg. allg. Chem. 1974. Bd. 405. S. 167.
5. **Alter E., Hoppe R.** // Z. anorg. allg. Chem. 1975. Bd. 412, № 2. S. 110–120.
6. **Alter E., Hoppe R.** // Z. anorg. allg. Chem., 1974, Bd. 403, № 2, S. 127–136.
7. **Alter E., Hoppe R.** // Z. anorg. allg. Chem., 1974, Bd. 407, S. 305–312.
8. **Alter E., Hoppe R.** // Z. anorg. allg. Chem., 1974, Bd. 407, S. 313–318.
9. **Amorasit M., Jenssen B., Holm J.L.** // Acta Chem. Scand. 1973. V. 27, № 5. P. 1831–1832.
10. **Arndt J., Babel D., Haegele R., Rombach N.** // Z. anorg. allg. Chem. 1975. Bd. 418, № 3. S. 193–207.
11. **Babel D.** // J. Solid State Chem. 1976. V. 18, № 1. P. 39.
12. **Babel D., Haegele R., Pausewang G., Wall F.** // Mat. Res. Bull. 1973. V. 8. P. 1371–1382.
13. **Babel D., Fajans K., Jorgensen C.K** Strictire and bonding. Vol.3, Berlin-Heidelberg-New-York, Springer-Verlag. 1967.
14. **Barbier P., Drache M., Meiresse** // J. Solid State Chem. 1982. V. 42. P. 130–135.
15. **Beck L.K.** // J. Solid State Chem. 1973. V. 8, № 4. P. 312–317.
16. **Becker S., Hoppe R.** // Z. anorg. allg. Chem., 1989, Bd. 579, № 12, S.16-26.
17. **Benachenhou F., Mairesse G., Nowogrocki G., Thomas D.** // J. Solid State Chem. 1986. V. 65. P. 13–26.
18. **Besse J.P.** // C. r. Acad. sci. 1968. V. C266. P. 551.
19. **Beznosikov B.V., Flerov I.N., Gorev M.V., Melnikova S.V., Misjul S.V., Voronov V.N.** // Ferroelectrics

Letters. 1983. V. 1, № 2. P. 35–41.

20. **Bill J., Lerch K., Laqua W.** // *Z. anorg. allg. Chem.*, 1990, Bd. 589, № 10, S. 7-11.
21. **Bode H., Voss E.** // *Z. anorg. allg. Chem.* 1957. Bd. 290. S. 1–16.
22. **Brosset C.** // *Z. anorg. allg. Chem.* 1938. Bd. 239. S. 304–304.
23. **Brown I.D., Gillespie R.J., Morgan K.R., Tun Zin., Ummat P.K.** // *Inorg. Chem.* 1984. V. 23, № 26. P. 4506–4508.
24. **Bucher E., Guggenheim H.J., Andres K., Hull G.W., Cooper A.S.** // *Phys. Rev. B.* 1974. V. 10, № 7. P. 2945.
25. **Burns J.H., Tennissen A.C., Brunton G.D.** // *Acta Cryst.* 1968. V. B24, № 2. P. 225–230.
26. **Бьрер W., Гьдел H.U.** // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1987. V. 20. P. 3809–3821.
27. **Chassaing J.** // *C. r. Acad. sci.* 1971. V. C272, № 2. P. 209.
28. **Chassaing J.** // *Rev. chem. miner.* 1968. V. 5, № 6. P. 1115–1154.
29. **Chretien A., Chassaing J.** // *C. r. Acad. sci.* 1966. V. C263, № 21. P. 1301–1303.
30. **Dunlap B.D., Shenoy G.K.** // *Phys. Rev. B.* 1975. V. 12, № 7. P. 2716.
31. **Faget H., Grannec J., Tressaud A., Rodriguez V., Roisnel T., Flerov I.N. Gorev M.V.** // *Eur. J. Solid State Inorg. Chem.* 1996. V. 33. P. 893.
32. **Feldner F., Hoppe R.** // *Z. anorg. allg. Chem.* 1980. Bd. 471. S. 131–139.
33. **Figgis B.N., Reynolds P.A., Williams G.A.** // *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* 1980. № 12. P. 2348–2353.
34. **Fish G.E., Narth M.H., Stapleton H.J.** // *J. Chem. Phys.* 1980. V. 73, № 10. P. 4807–4815.
35. **Flerov I.N., Gorev M.V., Aleksandrov K.S., Tressaud A., Grannec J., Couzi M.** // *Materials Science and Engineering.* 1998. V. R24, № 3. P. 81–151.

36. **Friedrich G., Fink H., Seifert H.J.** // Z. anorg. allg. Chem., 1987, Bd. 548, S. 141–150.
37. **Garton G., Wanklyn B.M.** // J. Crystall Growth. 1967. V. 1. P. 49–51.
38. **Grannec J., Fournes L., Lagassie P. et al.** // Mater. Res. Bull. 1990. V. 25, № 6. P. 815–820.
39. **Grannes J., Champarnaud-Mesjard J.C., Cosly J.P., Cousseins J.C., Gaudreau B.** // Rev. chem. miner. 1972. V. 9, № 4. P. 569–580.
40. **Grannes J., Sorbe P., Portier J., Hagenmuller P.** // C. r. Acad. sci. 1975. V. C280, № 2. P. 45–47.
41. **Graulich I., Drücke S., Babel D.** // Z. anorg. allg. Chem. 1998. Bd. 624, № 9. S. 1460–1464.
42. **Grjotheim K., Holm J.L., Malinovsky M., Mikhael S.A.** // Acta Chem. Scand. 1971. V. 25, № 5. P. 1695–1702.
43. **Guedira T., Wignacourt J.P., Drache M., Lorriaux-Rubbens A., Wallart F.** // Phase Transitions. 1988. V. 13. P. 81–85.
44. **Guengard H., Grannec J., Tressaud A. et al.** // C. R. Acad. sci. Ser. 2. 1993. V. 317, № 1. P. 37–42.
45. **Haley L.V., Koningstein J.A.** // J. Raman Spectrosc. 1976. V. 5, № 3. P. 305–310.
46. **Herdtweck E., Massa W., Babel D.** // Z. anorg. allg. Chem. 1986. Bd. 539, № 8. S. 87–94.
47. **Holm J.L., Holm J.B.** // Acta chem. Scand. 1970. V. 24, № 7. P. 2535.
48. **Hoppe R., Becker St.** // Z. anorg. allg. Chem., 1989, Bd. 568, S. 126–135.
49. **Hoppe R., Lehr K.** // Z. anorg. allg. Chem. 1975. Bd. 416, № 3. S. 240–250.
50. **Hoppe R., Schneider S.** // Z. anorg. allg. Chem. 1968. Bd. 361. S. 113.
51. **Hoppe R., Wingefeld G.** // Z. anorg. allg. Chem., 1984, Bd. 519, S. 189–194.
52. **Hoppe R., Wingefeld G.** // Z. anorg. allg. Chem., 1984, Bd. 519, S. 195–203.
53. **ICDD (International Centre for Diffraction Data) PDF–2**, 1997. Database.
54. **Ihringer J.** // Solid State Commun. 1982. V. 41, № 7. P. 525–527.

55. **Ihringer J. et al.** // Z. Kristallogr. 1981. Bd. 156, № 1-2. S. 58.
56. **Ihringer J., Wu G., Hoppe R. et al.** // J. Phys. Chem. Solids. 1984. V. 45. P. 1195–1200
57. **Jouini N.** // J. Solid State Chem. 1986. V. 63, № 3. P. 431–438.
58. **Khairoun S., Tressaud A., Grannec J., Dance J.M., Yacoubi A.** // Phase Transitions. 1988. V. 13. P. 157–163.
59. **Kissel D., Hoppe R.** //Z. anorg. allg. Chem. 1986. Bd. 532. S. 17–22.
60. **Kojic–Prodic B., Scavnicar S., Liminga R., Aljukic M** // Acta Cryst. 1972. V. B28, № 7. P. 2028–2032.
61. **Kojima N., Katagawa H., Sato H. et al.** // KEK Progr. Rept. 1990. № 3. P. 352.
62. **Kozak A.** // C. r. Acad. sci. 1969. V. C268, № 5. P. 416–418.
63. **Kozak A.** // Rev. chim. miner. 1971. V. 8, № 2. P. 301.
64. **Kozak A., Almai M., Samouel M.** // Rev. chim. miner. 1979. V. 16. P. 441–448.
65. **Kozak A., Samouel M.** // Rev. chim. miner. 1977. V. 14. P. 93–102.
66. **Kozak A., Smouel M. et al.** // Rev. chem. min. 1976. V. 10. P. 259–271.
67. **Kutscher J., Schneider A.** // Z. anorg. allg. Chem. 1971. Bd. 386, № 1. S. 38–46.
68. **Landolt-Börnstein** Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik. Neue Serie, Band 4, Teil a. Berlin-Heidelberg-New York, Springer-Verlag, 1970, 367 S.
69. **Lazarini F.** // Acta Cryst. 1978. V. B34, № 7. P. 2288–2290.
70. **Malakhovskii A.V., Vasilev G.G.** // Phys. Status Solidi )b). 1983. V. 118. P. 337–344.
71. **Massa W.** // Z. anorg. allg. Chem. 1982. Bd. 491, № 8. S. 208–216.
72. **Massa W.** // Z. anorg. allg. Chem., 1975, Bd. 415, S. 254–262.
73. **Massa W., Babel D.** // Z. anorg. allg. Chem., 1980, Bd. 469, S. 75–80.



74. **Massa W., Babel D., Epple M., Rьdorff W.** // Rev. chim. miner. 1986. V. 23, № 4-5. P. 508–519.
75. **Mermant G., Primot J.** // Mat. Res. Bull., 1979. V. 14., № 1. P. 45–50.
76. **Meyer G. Ax P., Schleid T., Irmeler M.** // Z. anorg. allg. Chem. 1987. Bd. 554, № 11. S. 26–33.
77. **Meyer G., Dietzel E.** // Rev. chim. miner. 1979. V. 16. P. 189–202.
78. **Meyer G., Duesmann W.** // Z. anorg. allg. Chem., 1982, Bd. 485, S.133-140.
79. **Meyer G., Hwu Shiou-Jyh., Corbet J.D.** // Z. anorg. allg. Chem. 1986. Bd. 535, № 4. S. 208–212.
80. **Meyer G., Linzmeier P.** // Z. Naturforschung. 1977. Bd. 32b, № 5. S. 544.
81. **Morss L.R., Robinson W.R.** // Acta Cryst. 1972. V. B28. P. 653–654.
82. **Morss L.R., Siegal M., Stenger L., Edelstein N.** // Inorg. Chem. 1970. V. 9, № 7. P. 1771.
83. **Pistorius C.W.F.T.** // J. Solid State Chem. 1975. V. 13, № 3. P. 208–214.
84. **Schneider S., Hoppe R.** // Z. anorg. allg. Chem. 1970. Bd. 376, № 3. S. 268–276.
85. **Schneider S., Hoppe R.** // Z. anorg. allg. Chem. 1970. Bd. 376, № 3. S. 277–281.
86. **Schwartz R.W., Watkins S.F., O'Connor C.J., Carlin R.L.** // J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1976. Part 2. V. 72, № 3. P. 565–570.
87. **Seifert H.J., Sandrock J.** // Z. anorg. allg. Chem., 1990, Bd. 587, № 8, S.110-118.
88. **Setter J., Hoppe R.** // Z. anorg. allg. Chem. 1976. Bd. 423, № 2. S. 125–143.
89. **Setter J., Hoppe R.** // Z. anorg. allg. Chem. 1976. Bd. 423. S. 133–143.
90. **Shannon R.D.** // Acta Cryst. 1976. V. A32. P. 751–767.
91. **Siddiqi I., Hoppe R.** // Z. anorg. allg. Chem. 1975. Bd. 414, № 1. S. 91–96.
92. **Siebert G., Hoppe R.** // Z. anorg. allg. Chem., 1972, Bd. 391, S. 117–125.
93. **Spirlet M.R., Rebizant J., Fuger J., Schoebrechts J.P.** // Acta Cryst. 1988. V. C44, № 7. P. 1300–1301.

94. **Strunz H.** Mineralogische Tabellen. Leipzig. Akademische verlags-geseiischafft. 1996. V. 4. 560 s.
95. **Swanson H.E., McMerrdie H.F. Morris M.C., Evans E.H., Paetzkin B.** // U.S. National Bureau of Standards Monogr. 1971. V. 25, № 9. P. 43.
96. **Tomaszewski P.E.** // Phase Transitions, 1992, V. 38, P. 127-220.
97. **Tressaud A., Darriet J., Lagassie P., Grannec J., Hagemuller P.** // Mat. Res. Bull. 1984. V. 19. P. 983–988.
98. **Tressaud A., Khairoun S., Dance J.M., Hagemuller P.** // Z. anorg. allg. Chem. 1984. Bd. 517. S. 43–58.
99. **Tressaud A., Khairoun S., Rabardel L. et al.** // Phys. Status Solidi (a). 1986. V. 96. P. 407–414,
100. **Tressaud A., Khdiroun S., Chaminade J.P., Couzi M.** // Phys. Status Solidi. 1986. V. A98, № 2. P. 417–421.
101. **Urland W., Feldner K., Hoppe R.** // Z. anorg. allg. Chem. 1980. Bd. 465. S. 7–14.
102. **Verdine A., Besse J.P., Baud G., Copes tan M.** // Rev. chim. miner. 1970. V. 7. P.593.
103. **Villafuerte-Castrejon M.E., Estrada M.R., Comez-Lara J., Duque J., Pomes R.** // J. Solid State Chem. 1997. V. 132, № 1. P. 1–5.
104. **Wilhelm V., Hoppe R.** // Z. anorg. allg. Chem. 1975. Bd. 416, № 3. S. 240–250.
105. **Winkler H.G.F.** // Acta Cryst. 1954. V. 7. P. 33–44.
- 105A **Xu Y., Carlson S., Sjцdin A., Narrestam R.** // J. Solid State Chem. 2000. V. 150, № 2. P. 399–403.
106. **Александров К.С., Анистратов А.Т., Безносииков Б.В., Федосеева Н.В.** Фазовые переходы в кристаллах галоидных соединений АВХ<sub>3</sub>. Новосибирск, Наука, 1981.- 264 с.
107. **Александров К.С., Воронов В.Н., Горев М.В. Мельникова С.В., Мисюль С.В., Прокерт Ф., Флёров И.Н.** Фазовые переходы в галоидных кристаллах со структурой эльпасолита. Красноярск, ИФ СО АН СССР, 1985. (Препринт № 345 Ф, часть 1. 40с. Препринт № 346 Ф, часть 2. 40 с.).

108. **Александров К.С., Воронов В.Н., Мисюль С.В., Флёров И.Н.** / В сб. "Проблемы кристаллографии". М.: Наука. 1987. С. 247–267.
109. **Анистратов А.Т., Безносиков Б.В., Гусар В.А.** // ФТТ. 1978. Т. 20, № 12. С. 3699.
110. **Безносиков Б.В.** // Кристаллография, 1993, Т. 38, № 2, С.189–194.
111. **Безносиков Б.В.** Расчет параметров элементарных ячеек в структурах ионных кристаллов. Красноярск. 1990. (Препринт № 632 Ф, ИФ СО АН СССР. 32 с.).
112. **Безносиков Б.В.** Синтез кристаллов и исследование фазовых переходов в галоидных соединениях  $ABX_3$  со структурой типа перовскита: Диссертация канд. физ.-мат. наук, Красноярск, ИФ СО АН СССР, 1977.-150с.
113. **Безносиков Б.В., Мисюль С.В.** // Кристаллография. 1978. Т. 23, № 3. С. 622.
114. **Безносиков Б.В., Мисюль С.В.** // Новые соединения с эльпасолитными структурами. Деп. в ВИНТИ. № 378-77 от 1 февраля 1977 г. (9 стр).
115. **Воронов В.Н.** Синтез и исследование кристаллов типа перовскита и кристаллобалита. Дисс. канд. ф.-мат. наук. Красноярск. ИФ СО АН СССР. 1989.
- 116.. **Воронов В.Н., Горев М.В., Мельникова С.В. и др.** // ФТТ, 1992, Т. 34, С. 316-318.
117. **Головастик Н.И., Белов Н.В.** // Кристаллография. 1978. Т.23, № 1. С. 42–46.
118. **Горев М.В.** // ФТТ. 1983. Т. 25, № 2. С. 566–568.
119. **Минералы.** Справочник. Т.ИИ, вып.1, галогениды - М.: Издат. АН СССР, 1963. 296 с.
120. **Палюра И.П., Палкин А.П.** // Журнал неорган. химии. 1964. Т. 9, № 11. С. 2668–2669.
121. **Решетникова Л.П., Шаймурадов И.Б., Ефремов В.П., Новоселова А.В.** // ДАН СССР. 1973. Т. 213. № 1. С. 98–100.
122. **Решетникова Л.П., Шаймурадов И.Б., Ефремов В.П., Новоселова А.В.** // ДАН СССР. 1974. Т. 215. № 4. С. 877.

123. **Усачев А.Е., Шустов В.А., Яблоков Ю.В.** // Изв. АН СССР, сер. физ. 1989. Т. 53, № 7. С. 1296–1299.
124. **Фесенко Е.Г.** Семейство перовскита и сегнетоэлектричество. М.: Атомиздат, 1972.- 248 с.
125. **Флёров И.Н., Горев М.В., Мельникова С.В. и др.** // ФТТ, 1992, Т.34, С. 2185-2195.
126. **Шаймурадов И.Б., Решетникова Л.П., Ковба Л.И., Ефремов В.Н.** // Журн. неорган. химии. 1973. Т. 18, № 8. С. 2077.
127. **Шаймурадов И.Б., Решетникова Л.П., Новоселова А.В.** // Журн. неорган. химии. 1974. Т. 19, № 11. С. 3003.
128. **Якубович О.В., Симонов М.А., Мельников О.К., Урусов В.С.** // Докл. АН СССР. 1986. Т. 287, № 1-2. С. 97–104.

Ответственный за выпуск Б.В. Безносиков  
Подписано в печать 12.05.2000. Гарнитура "Arial"  
Уч. изд. л. 3.25. Заказ №25. Тираж 60 экз.  
Отпечатано в типографии Института физики  
им. Л.В. Киренского СО РАН