

УДК 548.31

А. М. Г о л у б е в, А. В. Д з я б ч е н к о,
С. В. П о д г у р с к и й

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР КУБИЧЕСКИХ ДВОЙНЫХ ФТОРИДОВ MR_3F_{10}

Проведено кристаллохимическое моделирование кристаллических структур кубических двойных фторидов KTb_3F_{10} и $RbEu_3F_{10}$ с использованием кластеров $M_8R_6F_{68}$. Стартовые модели для компьютерного уточнения найдены на основе анализа возможных способов соединения кластеров в кристаллической решетке. Получено хорошее соответствие между рассчитанными и экспериментальными параметрами рассматриваемых структур.

**Simulation of Crystal Structures for Cubic Bifluorides MR_3F_{10} /
A.M. Golubev, A.V. Dzyabchenko, S.V. Podgursky // Vestnik MGТУ.
Natural Sciences. 2001. No. 2. P.100–107.**

Crystallochemical simulation of crystal structures for the cubic bifluorides KTb_3F_{10} and $RbEu_3F_{10}$ with the use of clusters $M_8R_6F_{68}$ is conducted. Starting-models for further refinements using computer are found on the basis of analysis of possible ways of joining the clusters within the crystal lattice. Good agreement is obtained between the calculated and experimental parameters of the structures under consideration. Refs.17. Figs.3. Tabs.3.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Е р е м и н Н. Н., У р у с о в В. С. Компьютерное моделирование структуры и свойств кристаллов — современные достижения и возможности // Проблемы кристаллологии. Вып. 5. — М.: ГЕОС, 1999. — С. 228–266.
2. Г о л у б е в А. М. // Координационная химия. — 1991. — № 12. — Т. 17. — С. 1718.
3. Г о л у б е в А. М. // Неорган. материалы. — 1994. — № 9. — Т. 30. — С. 1142.
4. S o b o l e v В. Р. // Butll. Soc. Catalana Cienc. Fiz. Quim. Mat. — 1991. — № 2. — V. 12. — P. 276.
5. D z y a b c h e n k o А. V. Acta Crystallografica. — 1994. — № 2. — V. B50. — P. 425.
6. Д з я б ч е н к о А. В., Б е л ь с к и й В. К., З о р к и й П. М. // Кристаллография. — 1979. — № 2. — Т. 24. — С. 221.
7. Д з я б ч е н к о А. В. // Кристаллография. — 1983. — № 6. — Т. 28. — С. 226.
8. У р у с о в В. С., Д у б р о в и н с к и й Л. С. ЭВМ-моделирование структуры и свойств минералов. — М.: Изд-во МГУ, 1989. — 200 с.
9. Г о л у б е в А. М. // Журн. неорган. хим. — 1996. — № 3. — Т. 41. — С. 505.

10. Г о л у б е в А. М. // Кристаллография. – 1997. – № 1. – Т. 42. – С. 129.
11. P a u l i n g L. // J. Amer. Chem. Soc. – 1947. – V. 69. – P. 542.
12. У р у с о в В. С., О р л о в И. П. // Кристаллография. – 1999. – № 4. – Т. 44. – С. 756.
13. B r o w n I. D., A l t e r m a t t D. // Acta Cryst. – 1985. – № 1. – V. B41. – P. 244.
14. П о д б е р е з с к а я Н. В., П о т а п о в а О. Г., Б о р и с о в С. В. и др. // Журнал структурной химии. – 1976. – № 5. – Т. 17. – С. 948.
15. A r b u s A., F o u r n i e r M. T., P i s o u d B. et al. // J. Solid State Chem. – 1980. – № 1. – V. 31. – P. 11–21.
16. К и п е р т Д. Неорганическая стереохимия. – М.: Мир, 1985. – 280 с.
17. Г о л у б е в А. М. // Координационная химия. – 1993. – № 12. – Т. 19. – С. 939.

Статья поступила в редакцию 8.12.2000

Александр Михайлович Голубев родился в 1948 г., окончил в 1971 г. МГУ им. М.В. Ломоносова. Канд. хим. наук, доцент кафедры “Химия” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 110 научных работ в области физической и неорганической химии.

A.M. Golubev (b. 1948) graduated from the Lomonosov Moscow State University in 1971. Ph.D (Chem.), ass. professor of “Chemistry” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of over 110 publications in the field of physical and inorganic chemistry.

Александр Валентинович Дзябченко родился в 1948 г., окончил в 1971 г. МГУ им. М.В. Ломоносова. Канд. хим. наук, ведущий научный сотрудник Научно-исследовательского физико-химического института им. Л.Я. Карпова. Автор более 60 научных работ в области физической химии.

A.V. Dzyabchenko (b. 1948) graduated from the Lomonosov Moscow State University in 1971. Ph.D (Chem.), leading researcher of the Research Institute for Physical Chemistry named after L. Ya. Karpov. Author of over 60 publications in the field of physical chemistry.

Сергей Владимирович Подгурский родился в 1980 г. Студент факультета “Робототехника и комплексная автоматизация” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор одной научной работы в области физической химии.

S.V. Podgursky (b. 1980) – student of “Robotics and Complex Automation” faculty of the Bauman Moscow State Technical University. Author of a publication in the field of physical chemistry.