

# HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>的 X射线粉末衍射数据\*

## X-Ray Powder Diffraction Data for HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>

严嘉琳      曾令民      郝建民\*\*  
Yan Jialin    Zeng Lingmin    Hao Jianmin

(广西大学材料科学研究所 南宁市西乡塘路 10号 530004)

(Institute of Mat. Sci., Guangxi Univ., 10 Xixiangtanglu, Nanning, Guangxi, 530004)

**摘要** 给出尚未出现在 JCPDS-PDF上的 HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> 相的 X射线粉末衍射数据。该化合物属四方晶系,空间群为 I4/mmm,  $a = 4.0303(1) \text{ \AA}$ ,  $c = 9.7745(4) \text{ \AA}$ 。每个晶胞中有 2个化学式量。衍射数据指标化可靠性因子  $F_2\theta = 54.6(0.009357)$ 。

**关键词** HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>相 X射线衍射 粉末衍射数据

中图法分类号 TG 113.12

**Abstract** X-ray powder diffraction patterns and related crystallographic data for compound HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> are reported. The compound HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> is tetragonal with lattice parameters  $a = 4.0303(1) \text{ \AA}$ ,  $c = 9.7745(4) \text{ \AA}$ , space group I4/mmm and 2 formula units of HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> in unit cell. The Smith and Snyder figure-of-merit  $F_2\theta$  for this compound is 54.6(0.009357).

**Key words** HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> phase, X-ray diffraction, powder diffraction data

三元稀土化合物 RE<sub>2</sub>T<sub>2</sub>X<sub>2</sub> (RE 稀土元素, T 过渡金属, X: IV族元素) 在过去几十年里得到人们广泛的研究。Fukuhara等人<sup>[1]</sup>报道了 CeNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>具有磁和传输性质的各向异性, Ref<sup>[2,3]</sup>指出具有 ThCr<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>型结构的化合物大多有各式各样的磁性能,是潜在的磁性功能材料。PDF (Powder Diffraction File) 是进行物相鉴别的有力工具, Mayer等人<sup>[4]</sup>研究了化合物 EuNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>的 X射线粉末衍射数据, 其研究结果被收入 PDF中 (PDF27-212)。该化合物具有 ThCr<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>型结构, 属四方晶系, 空间群为 I4/mmm。迄今为止, PDF中未见有化合物 HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>衍射数据的报道。在本工作中, 我们研究了 HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>相的 X射线粉末衍射数据。

### 1 实验方法

制备合金试样用的原材料纯度为: Ho 99.9%, Ni 99.999%, Ge 99.9%, 合金试样是在高真空 (约

$10^{-3} \text{ Pa}$ ) 电弧炉中高纯氩气保护下溶炼的, 使用水冷铜坩埚, 反复熔炼 5次以保证成分均匀。将熔好的合金块用钼片包裹, 密封于高真空石英管中在  $1000^\circ\text{C}$  进行为期 10 d 的均匀化退火, 然后以  $1^\circ\text{C}/\text{h}$  的速率冷却至室温。合金试样的成分经电子探针分析证实为 HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>。粉末试样的制取是在玛瑙研钵中丙酮保护下仔细研磨而成的, 粒度约  $10^4 \text{ m}$ 。将粉末密封于抽成真空的玻璃管中在  $500^\circ\text{C}$  保温 5 d 后以  $1^\circ\text{C}/\text{h}$  的速率降至室温即可用于 X射线衍射。实验采用日本 Rigaku D/max-RC型带石墨单色器转靶衍射仪, CuK $\alpha$  辐射 (波长  $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$ ), 管压 50 kV, 管流 180 mA, 发散狭缝  $1^\circ$ , 接收狭缝 0.15 mm。收集衍射数据前, 仪器灵敏度经过由美国国家标准局提供的 NIST SRM 1976 标样进行校准。测量强度时, 用 Rigaku 公司提供的高纯 Si 粉作内标, 采用国际衍射数据中心建议的 Rear loading sample 装样技术将粉末试样装入铝框试样架, 以减少试样的择优取向。在  $10^\circ \sim 145^\circ$   $2\theta$  范围内对试样进行阶梯扫描, 步阶为  $0.02^\circ$ , 每步停留时间为 2 s。测量时温度为  $25 \pm 1^\circ\text{C}$ 。试样衍射的  $2\theta$  值用 Si 内标校正确定, 对于  $K_1, K_2$  未分离的低角度线则采用 D/max 标准软件中的  $K_1, K_2$  分离程序进行处理, 各条衍射线的强

1997-10-20收稿  $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$

\* 国际衍射数据中心资助项目和广西自然科学基金资助项目。

\*\* 天津电子材料研究所, 天津, 300192 (Tianjin Electronic Material Research Institute, Tianjin, 300192)。

度是由背底以上的峰高确定的,并以最强线的百分数来表示。

表 1 HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> 的 X射线衍射数据

Table 1 X-ray powder diffraction data for HoNi<sub>2</sub>Ge

$\vartheta_{\text{obs}} / (^\circ)$	$d / (\text{\AA})$	$H$	$K$	$L$	$I / I_0$	$\Delta \vartheta / (^\circ)$
18.120	4.892	0	0	2	< 1	- 0.017
23.879	3.723	1	0	1	2	0.017
31.367	2.850	1	1	0	26	0.003
35.399	2.534	1	0	3	100	0.001
36.472	2.462	1	1	2	71	0.005
36.751	2.444	0	0	4	7	0.002
44.956	2.015 0	2	0	0	53	0.009
49.090	1.854 3	1	1	4	17	0.021
51.955	1.758 6	1	0	5	34	0.010
58.484	1.576 9	2	1	3	35	0.012
59.401	1.554 7	2	0	4	2	0.000
65.448	1.424 9	2	2	0	8	0.001
66.011	1.414 1	1	1	6	24	0.010
71.096	1.324 9	2	1	5	23	0.012
74.374	1.274 4	3	1	0	3	0.003
76.664	1.242 0	3	0	3	5	0.001
77.325	1.233 0	3	1	2	15	0.018
78.155	1.222 0	0	0	8	7	- 0.012
86.635	1.122 8	1	1	8	4	0.014
93.532	1.057 3	3	2	3	7	0.003
99.714	1.007 7	4	0	0	3	- 0.012
100.227	1.003 9	3	1	6	5	- 0.012
105.105	0.970 26	3	2	5	4	0.018
110.720	0.936 26	4	1	3	4	0.001
112.310	0.927 46	2	2	8	6	0.012
117.472	0.901 16	4	2	0	4	0.009
121.712	0.881 96	3	1	8	2	0.008
123.555	0.874 26	4	1	5	2	0.014
125.167	0.867 76	1	0	11	3	- 0.003

## 2 X射线粉末衍射数据

表 1为 HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> 的 X射线粉末衍射数据,所有

的衍射线均能按四方晶系用 TREOR 指标化程序成功地指标化,点阵常数经最小二乘法精化后得  $a = 4.0303(1) \text{\AA}$ ,  $c = 9.7745(4) \text{\AA}$ 。由指标化可靠性因子公式  $F_N = (1/|\Delta \vartheta|)(N/N_{\text{poss}})^{[5]}$ ,算得  $F_{29} = 54.6(0.009357)$ (式中  $N$ 为观察到的衍射线的总数目,  $N_{\text{poss}}$  是数到第  $N$ 根观察线所可能有的独立衍射线的数目,  $|\Delta \vartheta| = \sum |\vartheta_{\text{obs}} - \vartheta_{\text{cal}}|/N$ ),说明该衍射数据指标化的可靠程度高。从表 1可见 HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> 的 X射线衍射消光规律与空间群  $I4/mmm$  的完全相符,参考  $\text{ThCr}_2\text{Si}_2$ 型结构的原子位置进行理论衍射强度的计算,结果表明衍射强度的计算值和观察值符合得较好,表明 HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> 的晶体结构与  $\text{EuNi}_2\text{Ge}_2$  的类同。HoNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> 的晶体为四方晶系,空间群为  $I4/mmm$ ,晶胞参数  $a = 4.0303(1) \text{\AA}$ ,  $c = 9.7745(4) \text{\AA}$ ,每个晶胞中有 2个化合式量,计算密度  $D_x = 8.942 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

## 参考文献

- 1 Fukuhara T, Maezawa K, Ohkuni H et al. Anisotropic transport and magnetic properties of CeNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>, J Mang Magn Mater, 1995, 140-144: 889-890.
- 2 Szytula A, Leciejewicz J. In: Handbook on Physics and Chemistry of Rare Earth, North Holland, Amsterdam, 1989, 12-133.
- 3 Pearson W B, Villars P. Analysis of the unit cell dimensions of phases with the BaAl<sub>4</sub>(ThCr<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>) structure. Rare earth phases of manganese, iron, cobalt, nickel or copper with silicon or germanium. J Less-Common Met, 1984, 97: 119-132.
- 4 Mayer I, Felner I. Europium silicides and germanides of the EuM<sub>2</sub>X<sub>2</sub> type crystal structure and the valence states of europium. J Phys Chem Solids, 1977, 38(9): 1031-1034.
- 5 Smith G S, Snyder R L.  $F_N$ : a criterion for rating powder diffraction patterns and evaluating the reliability of powder-pattern indexing. I Appl, Cryst, 1979, 12: 60-65.

(责任编辑: 黎贞崇)

(上接第 249页 Continue from page 249)

余的维的方法之间,存在着密切的联系。那 5种 10维弦论假想实际上只是从不同角度表述的同一种基本的 11维假想。

高级研究所的理论物理学家西伯格说:“这让我想起了盲人摸象的故事。我们以前总是考虑不同的侧面,却看不到全局。”

在把众多的假想汇集成为一种假想的过程中,物理学家们意识到,他们的方程所描述的世界不仅是由弦,而且是由薄

膜状的东西所组成的。这种薄膜状的东西叫做 p-膜(p表示维数)。人们通常想到的薄膜是延伸于三维空间内的二维表面(就像床单)。这种情况现在被称为 2-膜。点是 0-膜,线是 1-膜。依次类推,便可以得到 3-膜、4-膜、5-膜,一直到 9-膜:即伸展于 10维空间内的 9维表面。

以 19世纪数学家狄利克雷姓氏的首字母命名的 D-膜是一种特殊类型的膜,它对于 M理论尤其重要。D-膜(也多

(下转第 281页 Continue on page 281)