

FeGa₃ 的晶体结构* 1)

陸学善 梁敬魁
(中国科学院)

提 要

本文用X射线粉末法测定了 FeGa₃ 的晶体结构。FeGa₃ 属四方晶系。在 20°C 的点阵常数是: $a = 6.2628 \text{ \AA}$, $c = 6.5559 \text{ \AA}$ 。每晶胞包含四个化学式量。空间群为 $D_{4h}^{19} — P4_2/mnm$ 。Fe 原子占据在 4(f) 等效位置上, Ga 原子占据在 4(c) 及 8(i) 等效位置上; 参数为: $x_f = 0.343$, $x_i = 0.157$, $x_j = 0.264$ 。从结构看来, 这是金属互化物的一种新类型。

一、引 言

Fe-Ga 二元合金系至今为止尚研究得很少。Schubert^[1-2] 等人曾对其中的三个金属互化物 FeGa₃, Fe₇Ga₃, Fe₃Ga 作过探讨。他们认为: FeGa₃ 是 IrIn₃ 的同型结构, 其空间群为 $D_{2d}^8 — P\bar{4}n2$, $a = 6.24kx$, $c/a = 1.05$; Fe₇Ga₃ 是 A3 结构, $a = 2.61_2kx$, $c/a = 1.61$; Fe₃Ga 具有 A1 点阵, 可能是有序结构 L1₂, $a = 3.69_4kx$ 。

根据对 Fe-Ga 二元系缓冷合金的 X 射线研究, 可以看到, 这个系统的室温平衡态存在着三个金属互化物。本文只涉及用粉末法测定 FeGa₃ 晶体结构的部分。

二、实验部分

配制 FeGa₃ 合金所用的材料是纯度大于 99.99% 的英国 Johnson Matthey 公司纯铁与纯度大于 99.9% 的国产纯 Ga。合金系用纯 Al₂O₃ 坩埚外加光谱纯石墨套作加热器在真空高频感应电炉中熔制。FeGa₃ 呈灰暗色, 略带金属光泽。熔融冷却后均自动碎为小于 325 筛目的粉末。我们用比重瓶法精确测定了这合金的密度为 6.83 gm/cm³。

粉末封在抽空的耐高温玻璃管中, 在 300°C 熟炼二个月 (因为 FeGa₃ 的熔点未经测定, 处理温度只能低于 Fe 与 Ga 二熔点的连线)。然后以每小时下降 3—5°C 的速度缓冷至室温。

试样经过处理后, 用直径为 19cm 的精密型德拜、谢乐粉末照相机照相。所用辐射是 CoK α , 这样可以获得较为清晰的照片, 并且有足够多的衍射线与适当的分辨本领。

衍射线的相对强度用 Hilger X 射线照相显微光度计测量, 衍射强度和照相密度的关系靠印在同一照片上的连续强度标来校正。

三、衍射线指数的标定与点阵常数的精确测量

要标定粉末照相上衍射线的指数, 首先必须获得准确的 $\sin^2\theta$ 值。

* 1964年6月9日收到。

1) 1963年8月曾在长春市举行的第一届全国物质结构学术会议上宣读过。

在测定 $\sin^2\theta$ 值时,可能引起的系统误差是试品的偏心误差与吸收误差。我们用光谱纯铜作内标准与 FeGa_3 粉末混合照相,根据纯铜的衍射线用图解法求得该混合试品的偏心流移常数 D 与吸收流移常数 E 。然后从 $\sin^2\theta$ 的观察值消去偏心误差 $D\sin^2\theta$ 和吸收误差 $\frac{1}{2}E\left(\frac{1}{\theta} + \frac{1}{\sin\theta}\right)\sin^2\theta$,这样就得到 $\sin^2\theta$ 的校正值。根据 $\sin^2\theta$ 的校正值,我们应用 Hesse^[3]分析法成功地标定了全部衍射线的指数,确定 FeGa_3 属四方晶系。

为了精确测定点阵常数与获得全部衍射线,我们重新摄取了纯 FeGa_3 的德拜、谢乐照相。根据指数为 $hk0$ 的衍射线,用图解外推与反复应用图解求流移常数的方法,求得精确的 a 值与流移常数 D 和 E 。然后校正所有衍射线的 $\sin^2\theta$ 值,从而用加权平均的方法计算出 c 值。这样所求得的 a 值,其准确度为十万分之一, c 值的准确度为五万分之一。

FeGa_3 在 20°C 的点阵常数确定为:

$$a = 6.2628 \text{ \AA}, \quad c = 6.5559 \text{ \AA}, \quad c/a = 1.0468.$$

计算时已进行折射校正,所用波长是:

$$\text{CoK}\alpha_1 = 1.78892 \text{ \AA}, \quad \text{CoK}\alpha_2 = 1.79278 \text{ \AA}, \quad \text{CoK}\alpha = 1.79021 \text{ \AA}.$$

根据点阵常数计算出来的 $\sin^2\theta_{\text{calc}}$ 值和观察校正值 $\sin^2\theta_{\text{obs}}$ 的比较见表 1。

四、空间群与等效位置

从表 1 中可以看到,指数为 $h0l$ 的晶面,在粉末照相上只观察到 $h+l=2n$ 的衍射线。根据这个消光规律,可能的空间群应属于 D_{4h}^{11} — $P4_2/mnm$, D_{2d}^5 — $P\bar{4}n2$, C_{4v}^1 — $P4_2nm$ 三种空间群之一。其中 D_{4h}^{11} 对称性最高,具有对称中心,其他二种空间群均无对称中心。一般说来,金属和合金的结构对称性都较高,因此我们首先考虑 D_{4h}^{11} 这个空间群。以后在强度计算中进一步证实了这一点,当然没有考虑较低对称性的必要了。

从密度与点阵常数的数据可以确定, FeGa_3 合金的每个晶胞含有 4 个化学式量,即每个晶胞含 4 个 Fe 原子与 12 个 Ga 原子。

根据 Fe 与 Ga 的原子半径,并考虑到形成金属互化物时所可能引起的原子间距缩小,我们推断,不管原子的分布如何,只有下列等效位置的组合是可能的:

1. $8(j) + 4(c) + 4(f)$,
2. $8(j) + 4(c) + 4(g)$,
3. $8(j) + 4(d) + 4(f)$,
4. $8(j) + 4(d) + 4(g)$,
5. $8(j) + 4(f) + 4(g)$,
6. $8(j) + 4(c) + 2(a) + 2(b)$,
7. $4(d) + 4(e) + 4(f) + 4(g)$.

第 6 种组合实际上等于 8 个体心立方堆在一起而把体心位置加以移动,但这并不符合强度数据的要求。

我们注意到,指数为(600)的衍射线具有较大的强度,而衍射线(330)的强度却很小。在各种可能出现的等效位置中,只有 $4(c)$ 位置对于(600)与(330)反射才具有符号相反的结构振幅。这等于说,等效位置中必须有 $4(c)$,我们只须考虑第 1 与第 2 两种组合。这两

表 1

<i>h k l</i>	辐射	$\sin^2\theta_{\text{calc.}}$	$\sin^2\theta_{\text{obs.}}$	$I_{\text{calc.}}$	$I_{\text{obs.}}$	<i>h k l</i>	辐射	$\sin^2\theta_{\text{calc.}}$	$\sin^2\theta_{\text{obs.}}$	$I_{\text{calc.}}$	$I_{\text{obs.}}$
1 0 1	CoK α	.03907	.03908	49	56		α_2	.42304	.42325		
1 1 0	"	.04086		3		4 2 1	α_1	.42657		7	
1 1 1	"	.05950	.05950	23	25		α_2	.42842			
0 0 2	"	.07457		2		3 2 3	α_1	.43271		0	
2 0 0	"	.08171		0			α_2	.43458			
2 1 0	"	.10214	.10212	109	122	3 3 2	α_1	.44162	.44164	179	169
1 1 2	"	.11542	.11545	201	211		α_2	.44353	.44368		
2 1 1	"	.12078	.12077	8	vvf	2 2 4	α_1	.46102	.46120	66	72
2 0 2	"	.15628	.15632	188	160		α_2	.46301	.46325		
2 2 0	"	.16342	.16343	81	57	4 2 2	α_1	.48242	.48213	28	43
2 1 2	"	.17670	.17682	644	659		α_2	.48450	.48432		
2 2 1	"	.18206	.18189	15	21	1 0 5	α_1	.48577	.48562	23	31
1 0 3	"	.18820		1			α_2	.48787	.48799		
3 0 1	"	.20249	.20231	50	40	3 1 4	α_1	.50182	.50194	370	396
3 1 0	"	.20427	.20431	412	362		α_2	.50398	.50422		
1 1 3	"	.20863	.20869	48	48	1 1 5	α_1	.50617		1	
3 1 1	"	.22291		1			α_2	.50835			
2 2 2	"	.23798	.23810	39	44	4 3 0	α_1	.50995		1	
3 2 0	"	.26555		3			α_2	.51215			
2 1 3	"	.26991		0		4 1 3	α_1	.51430		0	
3 1 2	"	.27884	.27886	9	10		α_2	.51652			
3 2 1	"	.28420	.28406	10	14	5 0 1	α_1	.52856		1	
0 0 4	"	.29837	.29844	151	107	4 3 1	α_1	.52856	.52964	20	31
4 0 0	"	.32684	.32617	16	14	5 1 0	α_1	.53034		15	
2 2 3	"	.33119	.33103	45	45	5 0 1	α_2	.53085			
1 1 4	"	.33912		2		4 3 1	α_2	.53085	.53177		
3 2 2	"	.34012	.34013	17	20	5 1 0	α_2	.53264			
4 1 0	"	.34726	.34736	27	24	3 3 3	α_1	.53469		0	
3 0 3	"	.35162		1			α_2	.53701			
4 1 1	"	.36590		8		5 1 1	α_1	.54896	.54988	9	vvf
3 3 0	α_1	.36716	.36726	50	40 ^注		α_2	.55133			
	α_2	.36875				3 2 4	α_1	.56301		3	
3 1 3	α_1	.37151		2			α_2	.56544			
	α_2	.37312				2 1 5	α_1	.56736		7	
2 0 4	α_1	.37943		0			α_2	.56981			
	α_2	.38107				4 2 3	α_1	.57549	.57546	38	36
3 3 1	α_1	.38578		0			α_2	.57798	.57790		
	α_2	.38744				4 3 2	α_1	.58441	.58369	8	vvf
2 1 4	α_1	.39983		65			α_2	.58693			
4 0 2	α_1	.40083	.40074	135	219	5 2 0	α_1	.59154	.59170	49	49
2 1 4	α_2	.40155					α_2	.59409	.59432		
4 0 2	α_2	.40256	.40262			5 1 2	α_1	.60480	.60487	89	75
4 2 0	α_1	.40796	.40794	109	130		α_2	.60742	.60754		
	α_2	.40972	.40981			5 2 1	α_1	.61015		0	
4 1 2	α_1	.42122	.42129	179	160		α_2	.61279			

注: 衍射线分开为 α_1, α_2 时, 其强度为 α_1 与 α_2 的总和, 下同。

续 表 1

$h k l$	辐射	$\sin^2\theta_{\text{calc.}}$	$\sin^2\theta_{\text{obs.}}$	$I_{\text{calc.}}$	$I_{\text{obs.}}$	$h k l$	辐射	$\sin^2\theta_{\text{calc.}}$	$\sin^2\theta_{\text{obs.}}$	$I_{\text{calc.}}$	$I_{\text{obs.}}$
4 0 4	α_1	.62420	.62396	19	20	5 3 2	α_1	.76799	.76801	44	52
	α_2	.62690	.62654				α_2	.77131	.77138		
2 2 5	α_1	.62855		1		2 1 6	α_1	.77212	.77201	287	334
	α_2	.63127				6 1 1	α_1	.77334			
4 1 4	α_1	.64460	.64463	38	38	2 1 6	α_2	.77546	.77560		
	α_2	.64739	.64744			6 1 1	α_2	.77668			
3 0 5	α_1	.64895	.64892	74	66	4 3 4	α_1	.80778		3	
	α_2	.65175	.65175			6 0 2	α_1	.80878		4	
4 4 0	α_1	.65273	.65257	89	86	4 3 4	α_2	.81127			
	α_2	.65555	.65551			4 1 5	α_1	.81213	.81184	32	37
3 3 4	α_1	.66500	.66582	72	425	6 0 2	α_2	.81228			
5 2 2	α_1	.66600		381			4 1 5	α_2	.81564	.81548	
3 3 4	α_2	.66787				6 2 0	α_1	.81591		0	
5 2 2	α_2	.66888	.66881				α_2	.81944			
3 1 5	α_1	.66935		0		4 4 3	α_1	.82027	.81974	18	28
0 0 6	α_1	.67013		0			α_2	.82381	.82352		
3 1 5	α_2	.67224				5 1 4	α_1	.82818	.82856	53	162
0 0 6	α_2	.67303				6 1 2	α_1	.82918		63	
4 4 1	α_1	.67135		2		5 1 4	α_2	.83176			
	α_2	.67425				3 3 5	α_1	.83253	.83255	0	
5 0 3	α_1	.67748		0		6 1 2	α_2	.83276			
4 3 3	α_1	.67748		0		2 2 6	α_1	.83332		37	
5 0 3	α_2	.68041				6 2 1	α_1	.83453		2	
4 3 3	α_2	.68041				3 3 5	α_2	.83613			68
5 3 0	α_1	.69353	.69340	90	60	5 4 0	α_1	.83631	.83631	54	
	α_2	.69652	.69634			2 2 6	α_2	.83692			
5 1 3	α_1	.69788	.69758	65	57	6 2 1	α_2	.83813			
	α_2	.70089	.70114			5 4 0	α_2	.83993	.83993		
4 2 4	α_1	.70579	.70576	204	215	5 4 1	α_1	.85493		2	
	α_2	.70884	.70877				α_2	.85862			
1 1 6	α_1	.71093	.71117	68	65	5 3 3	α_1	.86106		5	
5 3 1	α_1	.71214		0			α_2	.86478			
1 1 6	α_2	.71400	.71413			4 2 5	α_1	.87332	.87379	3	20
5 3 1	α_2	.71522				3 1 6	α_1	.87411		20	
4 4 2	α_1	.72719		4		4 2 5	α_2	.87710	.87743		
	α_2	.73033				3 1 6	α_2	.87789			
3 2 5	α_1	.73054	.73022	26	22	5 2 4	α_1	.88937	.88971	187	598
	α_2	.73370	.73351			6 2 2	α_1	.89037		323	
6 0 0	α_1	.73432	.73425	239	215	5 2 4	α_2	.89322	.89350		
	α_2	.73750	.73746			6 2 2	α_2	.89422			
2 0 6	α_1	.75172	.75172	86	73	5 4 2	α_1	.91077	.91044	536	505
6 1 0	α_1	.75472		7			α_2	.91471	.91443		
2 0 6	α_2	.75497	.75451			6 3 0	α_1	.91790		1	
6 1 0	α_2	.75798					α_2	.92187			
5 2 3	α_1	.75907		0		6 1 3	α_1	.92225		0	
	α_2	.76235					α_2	.92624			

续表 1

<i>h k l</i>	辐射	$\sin^2\theta_{\text{calc.}}$	$\sin^2\theta_{\text{obs.}}$	$I_{\text{calc.}}$	$I_{\text{obs.}}$	<i>h k l</i>	辐射	$\sin^2\theta_{\text{calc.}}$	$\sin^2\theta_{\text{obs.}}$	$I_{\text{calc.}}$	$I_{\text{obs.}}$		
1 0 7	α_1	.93252	.93574	9	126	4 4 4	α_2	.95468	.95429	59	332		
3 2 6	α_1	.93531		7		1 1 7	α_2	.95704	.95702				
6 3 1	α_1	.93652		103		5 0 5	α_1	.97532	.97487				
1 0 7	α_2	.93655	.93989	180	178	4 3 5	α_1	.97532	.97917	17	342		
3 2 6	α_2	.93935				7	5 0 5	α_2				.97953	.97917
6 3 1	α_2	.94056				103	4 3 5	α_2				.97953	.97917
4 4 4	α_1	.95057	.95022	564	593	6 2 3	α_1	.98345	.98356				
1 1 7	α_1	.95292	.95246	180	178						因背底太深, 未测量.		

种组合实际上是相同的,任何一种沿 c 轴转动 90° 就可以和另一种重合。

因此, FeGa₃ 晶胞的 16 个原子占据在空间群 D_{16}^{14} 的下列位置上:

$$\begin{array}{ll}
 8(j): & x_j, x_j, z_j; & x_j, x_j, \bar{z}_j; \\
 & \bar{x}_j, \bar{x}_j, z_j; & \bar{x}_j, \bar{x}_j, \bar{z}_j; \\
 & \frac{1}{2} + x_j, \frac{1}{2} - x_j, \frac{1}{2} + z_j; & \frac{1}{2} + x_j, \frac{1}{2} - x_j, \frac{1}{2} - z_j; \\
 & \frac{1}{2} - x_j, \frac{1}{2} + x_j, \frac{1}{2} + z_j; & \frac{1}{2} - x_j, \frac{1}{2} + x_j, \frac{1}{2} - z_j. \\
 4(c): & 0, \frac{1}{2}, 0; & 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \\
 & \frac{1}{2}, 0, 0; & \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}. \\
 4(f): & x_f, x_f, 0; & \bar{x}_f, \bar{x}_f, 0; \\
 & \frac{1}{2} + x_f, \frac{1}{2} - x_f, \frac{1}{2}; & \frac{1}{2} - x_f, \frac{1}{2} + x_f, \frac{1}{2}.
 \end{array}$$

五、原子分布

现在的问题是这 16 个原子的分布问题和参数的准确测定问题。

很明显, $8(j)$ 的位置只能为 Ga 原子所占据, 所以只要能决定 $4(f)$ 与 $4(c)$ 的位置为何种原子所占据, 便可确定整个结构的原子分布。

在德拜、谢乐照相上, 观察到大多数具有较大强度的衍射线的指数都服从 $h \pm k = 3n$ 的规律; 而指数为 $00l$ 的衍射线, 只有 $l = 4n$ 的强度较大, 因而可以推断: x_f 和 x_j 的数值必接近于 $1/3$ 或 $1/6$, 而 z_j 的数值必接近于 $1/4$ 。

这些数值是符合原子半径的几何条件的。从原子半径作最宽余的估计, x_f 只能在 $0.330-0.375$ 范围内变动, x_j 只能在 $0.130-0.180$ 范围内变动。

我们暂时假定 $x_f = \frac{1}{3}$, $x_j = \frac{1}{6}$, 而选择部分 $(h k 0)$ 反射作为初步比较的基础。表 2 是依照两种分布所计算出来的强度和观察值的比较, 计算时未作温度因数校正。

第一种分布 Fe 原子在 $4(f)$ 位置上, 第二种分布 Fe 原子在 $4(c)$ 位置上。不难看出, 虽

然由于参数的不完全准确,因而计算值和观察值不可能完全符合,但是从第二种分布计算出来的(200)反射的强度过大这一事实是肯定的。因此,必须是 Fe 原子占据 4(*f*)位置,而 Ga 原子占据 4(*c*)和 8(*j*)位置。这一结论在参数修正后得到完全证实。

表 2

<i>h</i>	<i>k</i>	0	计 算 强 度		观 察 强 度
			第一种分布	第二种分布	
1	1	0	2	0	—
2	0	0	2	10	—
2	1	0	27	16	122
2	2	0	30	23	57
3	1	0	100	87	362
3	2	0	0	0	—
4	0	0	1	4	14

六、参数修正

原子参数的修正是利用结构振幅与参数关系的曲线图来进行的。所用的结构振幅的公式如下:

$$F(hkl) = F_{\text{Fe}} + F_{\text{Ga}} = f_{\text{Fe}}A_f + f_{\text{Ga}}A_{c+j},$$

这里

$$A_f = 2[\cos 2\pi(h+k)x_j + \cos\pi(h+k+l)\cos 2\pi(h-k)x_j],$$

$$A_{c+j} = [\cos\pi h + \cos\pi k + \cos\pi(k+l) + \cos\pi(l+h)] +$$

$$+ 4\cos 2\pi lz_j[\cos 2\pi(h+k)x_j + \cos\pi(h+k+l)\cos 2\pi(h-k)x_j],$$

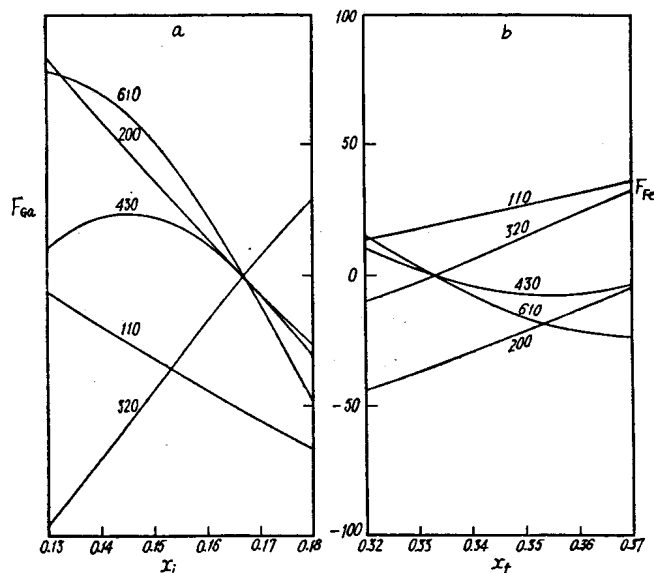


图 1a, b

要满足(110)和(200)的要求, x_j 必须减小, x_f 必须增大。减小增大的结果,应该使未出现

式中 f_{Fe} 和 f_{Ga} 分别是 Fe 和 Ga 的原子散射因数。由于所用辐射 $\text{CoK}\alpha$ 的波长接近 Fe 的吸收限,所以原子散射因数都依据 Hönl^[4] 的理论作了反常散射的校正。

首先利用 ($hk0$) 反射来决定 x_j 与 x_f 。德拜、谢乐照相中没有出现(110), (200), (320), (430), (610)等反射,这说明这些反射的结构振幅一定很小,图 1a, b 分别表示 F_{Ga} 和 F_{Fe} 对 x_j 和 x_f 的关系。

可以看到,除(110)和(200)外,其他未出现的衍射线都要求 x_j 在 1/6 附近, x_f 在 1/3 附近。

衍射线的 $F(hk0)$ 的总值为最小。所以, $0.155 < x_j < 0.158$, $0.342 < x_f < 0.350$ 。这同时符合着出现的衍射线的要求。

我们用近似的原子参数根据已出现的 $(hk0)$ 衍射线用图解法^[5]求得近似的温度因数。从观察强度,多重性因数,洛伦兹、偏振因数,吸收因数和温度因数求得结构振幅的观察值 $F_{obs.}$ 。表 3 是利用在这个范围内的原子参数所计算出来的结构振幅 $F_{calc.}$ 和观察值 $F_{obs.}$ 的比较。这表示, x_j 和 x_f 如果在这个范围内,计算值与观察值的比较是可以满意的。

表 3

$h k 0$		210	220	310*	400	410	330	420	520	440	530	600
$F_{obs.}$		52	56	100	31	29	53	69	39	70	39	98
$F_{calc.}$	$x_j = 0.155$ $x_f = 0.342$	46	58	100	33	25	54	58	38	68	41	94
	$x_j = 0.158$ $x_f = 0.345$	46	60	100	31	31	55	58	36	65	45	96
	$x_j = 0.157$ $x_f = 0.350$	45	51	100	33	31	53	57	35	67	40	92

* 以 310 衍射线强度作为相对比较的标准。

其次是 z_j 的决定问题。我们选择了一系列 $(11l)$ 衍射线而使 $x_j = 0.157$, $x_f = 0.345$ 。图 2 是结构振幅 $F(11l)$ 对参数 z_j 的关系曲线。可以看到,以绝对值而论, (112) 的结构振幅最大,要使 (114) 、 (115) 的结构振幅很小,而 (117) 的结构振幅大于 (111) 的结构振幅,以及 (116) 的结构振幅大于 (117) 的结构振幅,则 z_j 的值必须在 0.260 与 0.270 之间。

我们在这个范围内尝试了三个参数的不同组合。最后确定,和实验结果符合得最好的是:

$$x_j = 0.157, z_j = 0.264, x_f = 0.343.$$

全部衍射线强度的计算值 $I_{calc.}$ 和观察值 $I_{obs.}$ 的比较见表 1。

应该指出,表 1 中的计算强度是经过温度因数校正的。我们用最小二乘法求得温度因数的 B 值 ($B = 0.49$) 和比例常数 K 。设 $I_{obs.}$ 为观察强度,而 $I'_{calc.}$ 为未经温度因数校正的计算强度,则

$$I_{obs.} = KI'_{calc.} \exp(-2B \sin^2\theta/\lambda^2).$$

所以,

$$\sum_N J_i = X \sum_N \sin^2\theta_i - NY,$$

$$\sum_N J_i \sin^2\theta_i = X \sum_N \sin^4\theta_i - Y \sum_N \sin^2\theta_i.$$

这里, $X = 2B \log e/\lambda^2$, $Y = \log K$, $J_i = \log(I'_{calc.}/I_{obs.})_i$, N 是观察方程的数目,也就是衍射线的数目。解这两个正规方程就得到 B 和 K 的值。

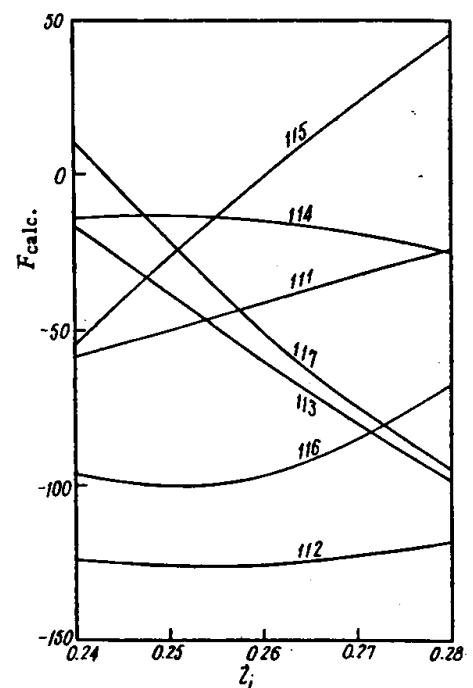


图 2

七、原子間距

FeGa_3 的晶体结构如图 3 所示。图中白圈代表 Ga 原子，黑圈代表 Fe 原子，在 (001) (002) 及 (110) 平面，Fe 原子和 Ga 原子交错地排列着。

原子間距与配位数如下：

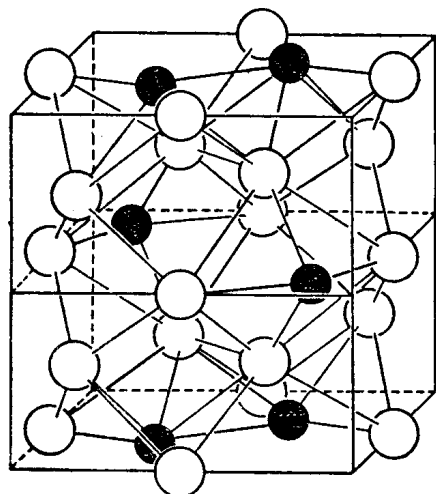


图 3

$\text{Fe}(f)$	{	$2\text{Ga}(c)$, 2.36 Å;
		$2\text{Ga}(j)$, 2.39 Å;
		$4\text{Ga}(j)$, 2.50 Å;
		$1\text{Fe}(f)$, 2.78 Å;
$\text{Ga}(c)$	{	$2\text{Fe}(f)$, 2.36 Å;
		$4\text{Ga}(j)$, 2.82 Å;
		$4\text{Ga}(j)$, 2.93 Å;
		$2\text{Ga}(c)$, 3.28 Å;
$\text{Ga}(j)$	{	$3\text{Fe}(f)$ {
		2Fe , 2.50 Å;
	{	1Fe , 2.39 Å;
		$4\text{Ga}(c)$ {
	{	2Ga , 2.82 Å;
		2Ga , 2.93 Å;
	{	4Ga , 3.35 Å;
		1Ga , 2.78 Å;
		1Ga , 3.09 Å;
		1Ga , 3.46 Å.

从这里可以看出，Ga-Ga, Fe-Fe 間的距离都要比原来在純金属中的原子間距(Ga-Ga 为 2.70 Å, Fe-Fe 为 2.54 Å)为大，而 Ga-Fe 間的距离則比 Ga 与 Fe 的原子半径的总和小。这是合乎形成稳定金属互化物的規律的。

如果用原子半径来计算堆积系数，那末这个结构的堆积系数 $k = 0.6144$ ，这仅次于体心立方 $k = 0.6801$ 的堆积情况。

应该指出，Schubert 等人对 FeGa_3 结构的叙述是不正确的。 FeGa_3 是金属互化物的一种新的结构类型。

王曉堂同志参加了合金的制备工作，我們表示感謝。

参 考 文 献

- [1] Schubert, K., Breimer, H., Gohle, R., Lukas, H. L., Meissner, H. G., und Stolz, E., *Naturwissenschaften*, 45 (1958), 360.
- [2] Schubert, K., Bhan, S., Burkhardt, W., Gohle, R., Meissner, H. G., Pötzschke, M., und Stolz, E., *Naturwissenschaften*, 47 (1960), 303.
- [3] Hesse, R., *Acta Cryst.*, 1 (1948), 200.
- [4] Hönl, H., *Zeit. f. Physik*, 84 (1933), 1.
- [5] Bradley, A. J., and Lu, S. S., *Zeit. f. Krist.*, 96 (1937), 20.

THE CRYSTAL STRUCTURE OF FeGa₃

LU HSUEH-SHAN(S. S. LU) LIANG CHING-KWEI
(*Academia Sinica*)

ABSTRACT

The crystal structure of FeGa₃ has been determined by means of Debye-Scherrer photographs. The unit cell is tetragonal, with $a = 6.2628 \text{ \AA}$ and $c = 6.5559 \text{ \AA}$ at 20°C. There are four formula units per unit cell. The space group is $D_{4h}^{14} - P4_2/mnm$. The four Fe atoms are situated at the 4(*f*) positions, while the twelve Ga atoms are situated at the 4(*c*) and 8(*j*) positions, the atomic parameters being $x_f = 0.343$, $x_j = 0.157$, and $z_j = 0.264$.

This structure represents a new type of intermetallic compound.