

文章编号: 1000- 6524 (2003) 02- 0155- 02

# 西藏罗布莎 Ir- Fe- Ni 合金的 X 射线晶体学研究

熊明<sup>1</sup>, 施倪承<sup>1</sup>, 代明泉<sup>1</sup>, 白文吉<sup>2</sup>, 方青松<sup>2</sup>, 杨经绥<sup>2</sup>

(1. 中国地质大学, 北京 100083; 2. 中国地质科学院地质研究所, 北京 100037)

**摘要:** 在西藏罗布莎蛇绿岩的铬铁矿矿床中, 存在一种 Ir- Fe- Ni 合金, 电子探针分析确定其化学式为  $\text{Ir}_{0.69}\text{Fe}_{0.28}\text{Ni}_{0.03}$ 。用 CCD 技术测得 X 射线衍射数据(括号内为  $I/I_0$ )为: 2.188(100) .1.896(90) .1.347(50) .1.149(80) .1.096(15) .0.949(5) .0.874(15) .0.852(15) .0.773(10), 晶体结构应属金属元素面心立方结构类型。按其结构确定了原子坐标并计算出理论粉末衍射图, 结果表明理论粉末衍射图谱与实测粉末衍射数据基本一致。该 Ir- Fe- Ni 合金晶体学参数可归纳为:  $a = 3.802(4) \text{ \AA}$  空间群  $Fm\bar{3}m$ , 单位晶胞中的分子数  $Z = 4$ ,  $D_c = 13.84 \text{ g/cm}^3$ 。

**关键词:** 西藏罗布莎; Ir- Fe- Ni 合金; 晶体结构

中图分类号: P575

文献标识码: A

## X-ray crystallographic investigation of Ir-Fe-Ni alloy from Luobusa, Tibet

XIONG Ming<sup>1</sup>, SHI Ni\_cheng<sup>1</sup>, DAI Ming\_quan<sup>1</sup>, BAI Wen\_ji<sup>2</sup>, FANG Qing\_song<sup>2</sup> and YANG Jing\_sui<sup>2</sup>

(1. China University of Geosciences, Beijing 100083, China; 2. Institute of Geology, Chinese Academy of Geological Sciences, Beijing 100037, China)

**Abstract:** A kind of unnamed Ir-Fe-Ni alloy was found in chromite of Luobusa ophiolite in Tibet. EPMA shows that its molecular formula is  $\text{Ir}_{0.69}\text{Fe}_{0.28}\text{Ni}_{0.03}$ , and the powder X-ray diffraction data, measured by SMART APEX- CCD system, are shown as follows (inside the parentheses is  $I/I_0$ ): 2.188(100), 1.896(90), 1.347(50), 1.149(80), 1.096(15), 0.949(5), 0.874(15), 0.852(15), 0.773(10). According to the powder diffraction data, the crystal structure of the alloy belongs to the face-centered cubic kind of metal element. The atom coordinates are determined and the theoretical powder diffraction pattern is calculated according to the structure model. The results show that the theoretical powder diffraction pattern is basically consistent with the observable data. The crystallographic data of Ir-Fe-Ni alloy can be summed up as follows:  $a = 3.802(4) \text{ \AA}$  space group:  $Fm\bar{3}m$ , the number of molecules in unit cell  $Z = 4$ ,  $D_c = 13.84 \text{ g/cm}^3$ .

**Key words:** Luobusa of Tibet; Ir-Fe-Ni alloy; crystal structure

西藏罗布莎铬铁矿矿床由于其特殊的大地构造位置及金刚石的发现(方青松等, 1981), 20 年来一直倍受地质界的关注。除发现金刚石外, 该地区还发现了与金刚石伴生的大量铂族元素金属及其互化物和 W、Cr、Cu、Mn、Ag、Au 的金属及其金属互化物。从目前获得的电子探针化学成分来看, 这些金属互化物大部分罕见或未定名(白文吉等, 2000)。由于结晶颗粒过于细小, 一般以 0.2~0.01 mm 为主, 而且不同种类的晶体互相共生, 且含量较低, 难以分离富集, 用常规的 X 射线粉末衍射仪进行研究有一定困难。本次采用近年发展起来的 X 射线衍射电荷耦合探测器(CCD)技术对其中 Ir- Fe-

Ni 合金进行单晶及粉晶 X 射线晶体学研究, 以便从矿物晶体结构及化学成分两方面阐述其种类及其组合关系。

## 1 样品的化学成分

西藏 Ir- Fe- Ni 合金产于沿雅鲁藏布江—印度河沿岸广泛分布的蛇绿岩块中, 代表性样品取自含豆荚状工业铬铁矿的罗布莎岩块 II 矿群 Cr31 矿体的人工重砂大样(重达 1.5 吨)中, 经选矿获得 Ir- Fe- Ni 合金。该合金化学成分见表 1, 经计算确定其化学式为  $\text{Ir}_{0.69}\text{Fe}_{0.28}\text{Ni}_{0.03}$ 。

收稿日期: 2001- 09- 04; 修订日期: 2003- 02- 24

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(49972072)

作者简介: 熊明(1960-), 女, 在职博士, 副教授, 矿物晶体结构与晶体化学专业。

表1 Ir-Fe-Ni合金的化学成分

Table 1 Chemical composition of Ir-Fe-Ni alloy

样号	Ca	Ti	Mn	Cr	Fe	Ni	Ir	合计	Ca	Ti	Mn	Cr	Fe	Ni	Ir	合计
	<i>w<sub>B</sub>/%</i>								<i>x<sub>B</sub>/%</i>							
46-1	0.04	0.04	0.04	0.02	10.16	1.29	87.88	99.47	0.14	0.11	0.10	0.05	27.15	3.31	68.71	99.57
46-2	0.01	-	0.03	0.03	10.97	0.91	87.86	99.81	0.09	-	0.09	0.09	27.58	2.35	69.69	99.89
46-3	-	-	-	0.38	12.21	0.88	84.41	97.88	-	-	-	1.00	30.38	2.20	64.30	97.88
46-4	0.01	-	-	0.02	8.11	0.79	90.94	99.87	0.04	-	-	0.07	24.20	2.24	73.32	99.87
46-5	-	0.08	-	-	10.71	0.87	86.34	98.00	-	0.26	-	-	28.10	2.25	67.40	98.01
平均	0.01	0.02	0.01	0.09	10.43	0.95	87.49	99.00	0.05	0.07	0.04	0.24	27.48	2.47	68.68	99.03

注:由国土资源部矿产资源研究所使用 JXA-8800R(日本电气公司)电子探针分析,加速电压 20 kV,工作电流  $2 \times 10^{-8}$  A, Ir、Fe、Ni、Cr、Mn、Ti 以纯金属做标样校准;-表示未检测出。

## 2 X射线衍射分析

样品 X 射线衍射研究是在 Bruker 公司的 SMART APEX - CCD 系统上进行的。所测颗粒为扁平粒状,大小约为 0.1

mm  $\times$  0.1 mm  $\times$  0.05 mm, 采用旋转照相方法,实验备件为 Moka ( $\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$ ), 石墨单色器, 50kV, 30mA, 曝光时间  $\omega = 0^\circ$  为 100s,  $\omega = -30^\circ$  为 200s, 得到十分清晰的 X 射线衍射环, 其粉末衍射数据见表 2。

表2 理论计算的衍射数据与实测的衍射数据

Table 2 Theoretically calculated and observable X ray powder diffraction data of Ir-Fe-Ni alloy

实测数据			理论计算数据			
$2\theta(^{\circ})$	$d(\text{ \AA})$	$I/I_0$	$2\theta(^{\circ})$	$d(\text{ \AA})$	$I/\text{abs}$	$hkl$
18.694	2.188	100	18.643	2.194	50034.90	111
21.605	1.896	90	21.560	1.900	29487.61	200
30.594	1.347	50	30.675	1.344	30529.02	220
36.032	1.149	80	36.138	1.146	43103.48	311
37.839	1.096	15	37.804	1.097	12991.90	222
43.884	0.949	5	43.933	0.950	6865.06	400
47.982	0.874	15	48.112	0.8718	21986.29	331
49.303	0.852	15	49.445	0.8497	20534.25	420
54.738	0.773	10	54.534	0.7757	15987.82	422
			58.147	0.7313	13520.28	511, 333
			63.878	0.6717	5272.10	440

## 3 Ir-Fe-Ni合金的结构讨论

根据金属及其合金的晶体结构,如果两种金属组成固熔体,其构成形式与纯金属相同,只是一种原子部分地被另一种原子统计地置换,即每一原子位置两种金属均有可能存在。为此按金属原子 Ir、Fe、Ni 的晶体结构类型可确定该矿物属立方面心结构(Caroline, 1962)。根据空间群  $Fm\bar{3}m$  及晶胞参数  $a = 3.802 \text{ \AA}$  可得到 Ir-Fe-Ni 合金理论计算的粉末衍射数据,通过与实测的 Ir-Fe-Ni 衍射数据比较(表 2),可以发现计算值与实测值十分吻合,说明该空间群归属是正确的。由此可以得出所测 Ir-Fe-Ni 合金的晶体结构及晶胞学参数如下:等轴晶系,晶胞参数  $a = 3.802(4)$ , 空间群:  $Fm\bar{3}m$ , 晶体结构属金属元素面心立方结构类型,晶体化学

式为  $\text{Ir}_{0.69}\text{Fe}_{0.28}\text{Ni}_{0.03}$ ,  $Z = 4$ 。

在 Ir-Fe-Ni 合金中, Ir(Fe, Ni) 为等大球体, 作立方最紧密堆积, 每个等大球的原子配位数为 12, 原子间的键长为  $2.688 \text{ \AA}$ 。Ir、Fe、Ni 随机地分布在同一晶体化学位置, 从而保持了整个结构仍为  $Fm\bar{3}m$  对称。

在铂族元素矿物中, Ir-Fe 的金属互化物较为罕见, 但在自然界已发现了大量等轴晶系的 Pt-Fe 矿物。由于 Ir 与 Pt 的原子半径十分接近, 分别为  $1.26 \text{ \AA}$  与  $1.29 \text{ \AA}$ 。因此考察 Pt-Fe 矿物化学成分与晶体结构的关系对于 Ir-Fe 矿物的研究具有借鉴作用。中国科学院贵阳地球化学研究所(1981)总结了面心等轴结构( $Fm\bar{3}m$ ) Pt-Fe 矿物  $a$  值与化学成分的关系: 随着 Fe 含量的增加,  $a$  变小, 当 Fe 为 10.3% 时, PtFe 的晶胞  $a = 3.848 \text{ \AA}$ 。对于本文 Ir-Fe-Ni 金属互化物来说,

(下转第 161 页)(to be continued on p. 161)

www.yskw.ac.cn

(上接第 156 页)(Continued from p. 156)

Fe 为 10% 左右, 而且 Ir 的原子半径略小于 Pt, 因此其晶胞参数为  $3.802 \text{ \AA}$  符合晶体化学规律。

## Reference

- Bai Wenji, Zhou Meifu, Robibson P T, *et al.* 2000. Origin of Podiform Chromitites, Diamonds and Associated Mineral Assemblage in the Luobusa Ophiolite, Tibet [M]. Beijing: Earthquake Press (in Chinese).
- Caroline H M and Rieck G. 1962. International Tables for X-ray Crystallography (Vol. III): Physical and Chemical Tables [M]. Birmingham, England: The Kynoch Press.
- Fang Qingsong, Bai Wenji. 1981. The Alps rock's character of the diamond firstly found in Tibet [J]. Geological Review, 27(5): 455~ 456 (in Chinese).
- Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Sciences. The Identification Handbook for Minerals of Platinum Group [M]. Beijing: Science Press (in Chinese).

## 附中文参考文献

- 白文吉, 周美付, Robibson P T, 等. 2000. 西藏罗布莎豆荚状铬铁矿、金刚石及伴生矿物成因 [M]. 北京: 地震出版社.
- 方青松, 白文吉. 1981. 西藏首次发现金刚石的阿尔卑斯岩体特征 [J], 地质论评, 27(5), 445~ 447.
- 中国科学院地球化学研究所. 1981. 铂族元素矿物鉴定手册 [M]. 北京: 科学出版社.