

文章编号: 1000- 6524 (2003) 01- 0074- 03

# 西藏罗布莎 Fe- Cr- Ni 合金的 X 射线晶体学研究

代明泉<sup>1</sup>, 施倪承<sup>1</sup>, 马哲生<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块的铬铁矿中, 存在一种 Fe- Cr- Ni 合金, 电子探针分析确定其化学分子式为  $\text{Ni}_{0.45}\text{Cr}_{0.29}\text{Fe}_{0.26}$ 。其 X 射线粉晶衍射数据(括号内为  $I/I_0, hkl$ ) 为: 2.060(100, 111) .1.775(70, 200) .1.261(60, 220) 、1.076(50, 311) .1.027(50, 222), 晶体结构应属于金属元素的  $\gamma\text{-Fe}$  物相。按其所属空间群金属元素的排列方式, 确定其原子坐标并计算了理论粉晶衍射图, 结果表明, 理论粉晶图谱与实测粉晶衍射数据基本一致。该 Fe- Cr- Ni 合金晶体学参数可归纳为:  $a = 3.5622 \text{ \AA}$  空间群  $Fm\bar{3}m$ , 单位晶胞中的分子数  $Z = 4$ ,  $D_c = 8.212 \text{ g/cm}^3$ 。

**关键词:** 西藏罗布莎; Fe- Cr- Ni 合金; 晶体结构

中图分类号: P575.5

文献标识码: A

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

DAI Ming-quan<sup>1</sup>, SHI Ni-cheng<sup>1</sup>, MA Zhe-sheng<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 Fe-Cr-Ni mineral was found in chromite of Luobusa ophiolite in Tibet. EPMA shows that its molecular formula is  $\text{Ni}_{0.45}\text{Cr}_{0.29}\text{Fe}_{0.26}$ , and the powder X-ray diffraction data are shown as follows (inside the parentheses are  $I/I_0, hkl$ ): 2.060(100, 111), 1.775(70, 200), 1.261(60, 220), 1.076(50, 311), 1.027(50, 222). According to the powder diffraction data, the crystal structure of this alloy belongs to the  $\gamma\text{-Fe}$  kind of metal element. The authors determined the atom coordinate and calculated the theoretical powder diffraction pattern in term of the arrangement ways of the metal element. The calculations reveal that the theoretical powder diffraction pattern is basically consistent with the observable powder diffraction data. The crystallographic data of Fe-Cr-Ni alloy can be summed up as follows:  $a = 3.5622 \text{ \AA}$  space group  $Fm\bar{3}m$ , the number of molecules in unit cell  $Z = 4$ ,  $D_c = 8.212 \text{ g/cm}^3$ .

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

西藏罗布莎铬铁矿由于其处于特殊的大地构造位置以及其中金刚石的发现(方青松等, 1981), 20年来一直倍受地质学者的关注。除发现金刚石外, 该区还发现了与金刚石伴生的大量的 Fe- Ni- Cr- Co 及 W、Cr、Cu、Mn、Ag、Au 的金属单质及互化物(合金)。从目前获得的电子探针化学成分数据来看, 这些金属及合金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交生, 用常规的 X 射线粉末衍射仪进行研究十分困难。本次研究采用近年发展起来的 X

射线电荷耦合探测器(CCD)技术对该地区发现的 Fe- Cr- Ni 合金进行单晶及粉晶方面的晶体学研究, 以便从矿物晶体结构及化学成分两个方面阐明其种类及其组合关系。

## 1 样品的化学成分

西藏罗布莎 Fe- Cr- 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 II 矿群 Cr31 号矿体的人工重砂大样(重达 1.5

收稿日期: 2001- 07- 16; 修订日期: 2002- 08- 14

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(49972073)

作者简介: 代明泉(1976- ), 女, 矿物结晶学专业在读博士。

吨)。该合金化学成分分析结果如表 1。从表 1 中可知, 去掉微量 Ti、Al 等元素之后, 其大致分子式为  $Ni_{0.45}Cr_{0.29}Fe_{0.26}$ 。

表 1 样品的化学成分  
Table 1 Chemical composition of the samples

编号	w <sub>B</sub> /%						x <sub>B</sub> /%					
	Al	Ti	Cr	Fe	Ni	合计	Al	Ti	Cr	Fe	Ni	合计
1-3-1	0.27	0.20	27.39	25.95	45.29	99.10	0.56	0.22	29.44	26.01	42.91	100
1-3-2	0.35	0.09	27.53	26.01	45.01	99.17	0.73	0.22	29.65	26.31	42.94	100
1-3-3	0.29	0.08	27.07	26.69	45.29	99.42	0.52	0.18	29.80	26.84	43.22	100
1-3-4	0.58	0.20	27.01	25.68	45.36	98.83	1.14	0.22	29.30	25.92	43.42	100
1-3-5	0.30	0.10	26.89	26.64	45.50	99.43	0.58	0.20	29.11	26.68	43.41	100
平均	0.36	0.13	27.18	26.19	45.33	99.39	0.71	0.21	29.42	26.37	43.29	100

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, Al、Ti、Cr、Fe、Ni 纯金属做标样校准。

## 2 X 射线衍射研究

西藏罗布莎 Fe- Cr- Ni 合金的 X 射线衍射研究是在 Bruker 公司的 SMART APEX CCD 系统上进行的。晶体为等轴粒状,  $0.02 \text{ mm} \times 0.018 \text{ mm} \times 0.016 \text{ mm}$ , 采用旋转照相方法, MoK $\alpha$ , 50 kV, 30 mA, 曝光时间 100s, 得到了十分清晰的 X 射线衍射粉末图谱, 测得的数据见表 2。

表 2 样品的粉末衍射测试数据

Table 2 Powder diffraction data of the samples

<i>d</i>	2.060	1.775	1.261	1.076	1.027
<i>I</i> / <i>I</i> <sub>0</sub>	100	70	60	50	50
<i>hkl</i>	111	200	220	311	222

上述数据表明, 该合金的粉末衍射图谱与 JCPDS 卡片中镍纹石 (taenite,  $\gamma$ -Fe<sub>3</sub>Ni, JCPDS 卡片号 23-297) 及 Ni-Fe 合金 (iron nickel, JCPDS 卡片号 12-0736) 相似。

对于金属及合金化合物, 金属学领域一般按其晶体结构特点分成 3 种类型: 具有立方面心点阵的立方最紧密堆积类型、六方最紧密堆积类型及立方体心最紧密堆积类型。镍纹石及 Ni-Fe 合金, 属于第 1 种类型, 即立方面心点阵类型, 是一种金属原子呈立方最紧密堆积的结果。具有这种立方面心晶体结构的金属有:  $\gamma$ -Fe、Al、Cu、Ag、Pb、Ni、 $\beta$ -Co 等。这种金属的晶体结构由于其轴长短, 原子种类简单 (只有一种原子), 而且是等大球体的立方最紧密堆积, 因此其所有的晶体结构参数 (包括晶胞参数, 原子坐标, 原子间键角、键长, 空间群等) 均已被理论计算及实验测定所证实。为了将实验粉末数据与按晶体结构计算的粉末图进行比较, 现按照该合金的晶胞参数及空间群数据计算模拟理论粉末图, 结果分别见表 3 和图 1。

根据镍纹石及镍铁合金的粉末图谱及其晶体结构, 很容

表 3 样品的理论计算所得 X 射线粉末衍射数据

Table 3 Theoretically calculated X ray powder diffraction data of the samples

<i>hkl</i>	$2\theta(^{\circ})$	<i>d</i>	<i>I</i> / <i>I</i> <sub>abs</sub>	$ F(hkl) $	MU	FWHM
111	19.803	2.0566	7378.09	82.30	8	0.224
200	22.905	1.7811	4145.71	77.10	6	0.224
220	32.616	1.2594	3595.15	62.13	12	0.224
311	38.449	1.0740	4536.00	54.56	24	0.224
222	40.231	1.0283	1321.89	52.49	8	0.224

注:  $a = 3.5622 \text{ \AA}$  空间群  $Fm\bar{3}m$ , MoK $\alpha$ ,  $\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$ 。

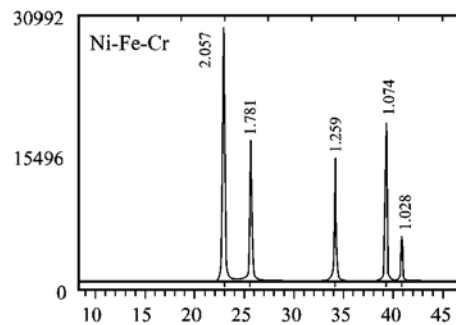


图 1 Ni-Fe-Cr 合金的理论 X 射线粉末衍射图谱

Fig. 1 Theoretically calculated X ray powder pattern of Fe<sub>3</sub>CrNi alloy

易判定结构中的 Ni、Fe 是在同一个晶体化学位置, 其原子坐标为 (0, 0, 0)。由于西藏罗布莎 Fe- Cr- Ni 合金粉末衍射图谱与上述两个物相相似, 图 1 及表 3 的理论粉末图谱计算时也是以 Fe、Cr、Ni 原子处于同一个晶体化学位置进行的, 也就是说, Fe、Cr、Ni 3 种原子是以随机方式分布在同一晶体化学位置, 这种分布的无序方式不可能使晶胞参数 (*a* 轴) 产生加倍现象。

理论计算表明, 罗布莎 Fe- Cr- Ni 合金的粉末衍射数据不论从 *d* 值或从强度来看, 计算值与实测值是严格符合的。

计算结果还表明,此种简单结构的合金的独立的衍射指标不论是采用粉末法或单晶法,只能是表2中列出的5个衍射。

由于Cr原子的原子半径(1.30 Å)略大于Fe(1.26 Å)及Ni(1.24 Å)(马哲生等,1995),因而罗布莎Fe-Cr-Ni合金计算测得的晶胞参数( $a = 3.5622 \text{ \AA}$ )略大于Ni-Fe合金(JCPDS卡片12-0736,  $a = 3.560 \text{ \AA}$ ),这在理论上也是合理的。

**致谢:**北京矿冶研究总院陶淑凤高级工程师、国土资源部矿产资原研究所探针室及中国地质大学熊明副教授均参与了部分测试及实验工作,在此表示感谢。

## Reference

- Bai Wenji, Zhou Meifu, Robison P T, *et al.* 2000. The Mineral Cause of Formation for Been\_pod\_like chromite in Luobusa of Tibet, Diamond and Its Concomitant Minerals[M]. Beijing: Earthquake Publisher(in Chinese).
- Fang Qingsong, Bai Wenji. 1981. The Alps rock's character of the dia-

mond firstly found in Tibet[J]. Geological Review, 27(5): 455~456(in Chinese).

International Centre for Diffraction Data. 1982. Powder Diffraction File, Inorganic Phases[M]. Pennsylvania: the JCPDS.

Lu Jingxian. 1984. Metallurgy[M]. Beijing: Mechanical Industry Publisher(in Chinese).

Ma Zhesheng, Shi Nicheng. 1995. X-ray Crystallography[M]. Wuhan: Chinese University of Geosciences Publisher(in Chinese).

Ralph W G. 1963. Crystal Structure(second edition volume 1)[M]. New York Interscience Publishers.

## 附中文参考文献

- 白文吉,周美付,Robison,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.西藏首次发现含金刚石的阿尔卑斯岩体[J].地质论评,27(5): 455~456.
- 陆景贤.1984.金属学[M].北京:机械工业出版社.
- 马哲生,施倪承.1995.X射线晶体学[M].武汉:中国地质大学出版社.

www.yskw.ac.cn