

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Е. С. МАКАРОВ

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА  $\text{In}_2\text{Bi}$**

(Представлено академиком Г. Г. Уразовым 18 VII 1949)

В системе индий — висмут образуется два химических соединения:  $\text{InBi}$  и  $\text{In}_2\text{Bi}$  (1). Кристаллическая структура первого соединения  $\text{InBi}$  определена нами ранее (2). Ниже мы приводим в краткой форме результаты определения кристаллической структуры  $\text{In}_2\text{Bi}$ , сделанного из порошковой рентгенограммы, снятой на медном фильтрованном излучении.

Кристаллическая структура  $\text{In}_2\text{Bi}$  принадлежит к гексагональной системе с отношением осей  $c/a = 0,98$ ; постоянные решетки  $a = 5,487 \pm 0,001 \text{ \AA}$ ;  $c = 3,284 \pm 0,001 \text{ \AA}$ . Плотность, измеренная в воде при  $20^\circ$ , равна  $8,25 \text{ г/см}^3$ . Отсюда число атомов в ячейке равно 2,94, т. е. 3, а именно 2  $\text{In} + \text{Bi}$ . Анализ интенсивностей линий дебаеграммы приводит к пространственной группе  $D_{6h} - C_{6h}/mmm$  и статистическому распределению атомов индия и висмута по трем местам ячейки:  $000, \frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{2}, \frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{2}$ .

В табл. 1 приведено сравнение экспериментально наблюдаемых и теоретически рассчитанных данных для  $\text{In}_2\text{Bi}$ . В первом столбце даются миллеровские индексы  $hkl$ . Во втором и третьем столбцах приводятся теоретические и экспериментальные значения квадратов синусов рассеяния  $\theta$ . В четвертом столбце дается теоретически рассчитанная интенсивность для „упорядоченного варианта“ (I) структуры, когда атом висмута находится в положении  $000$ , а два атома индия — в структурно эквивалентных положениях  $\frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{2}$  и  $\frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{2}$ . В пятом столбце приведены теоретически рассчитанные интенсивности для „неупорядоченного варианта“ (II) структуры, когда один атом висмута

Таблица 1

$hkl$	$\sin^2 \theta_{\text{теор}}$	$\sin^2 \theta_{\text{эксп}}$	$I_{\text{теор}}$		$I_{\text{эксп}}$
			I	II	
1	2	3	4	5	6
100	0,026	—	15,0	0	—
001	0,055	0,054	0,2	6,3	сл.
110	0,078	0,078	100,0	100,0	о. с.
101	0,081	0,080	102,0	84,0	о. с.
100	0,104	—	3,2	0	—
111	0,133	0,133	0,2	10,5	сп.
201	0,159	0,159	39,0	30,0	сп.-с.
120	0,183	—	2,4	0	—
002	0,219	0,219	7,5	7,6	сл.-сп.
300	0,235	0,235	19,0	19,0	сп.
211	0,238	0,237	40,0	33,5	с.
102	0,245	—	1,8	0	—
301	0,290	0,290	0,05	3,1	сл.
112	0,297	0,297	28,0	28,0	сп.-с.
220	0,313	0,313	11,0	11,0	сл.-сп.
202	0,323	—	1,0	0	—

Таблица 1 (продолжение)

1	2	3	4	5	6
130	0,340	—	1,0	0	—
221	0,368	0,370	0,02	2,2	о. сл.
311	0,395	0,395	15,0	12,0	ср.
122	0,402	—	1,5	0	—
400	0,418	—	0,3	0	—
302	0,454	0,456	13,0	13,0	ср.
401	0,473	0,473	7,0	5,7	о. сл.
003	0,493	—	0,001	0,2	—
230	0,496	—	0,6	0	—
103	0,519	0,519	7,0	5,4	о. сл.
222	0,532	0,534	12,0	12,0	сл.-ср.
410	0,549	—	11,0	11,8	—
231	0,551	} 0,551	13,0	10,4	} ср.
132	0,559	—	1,2	0	—
203	0,597	0,598	6,0	5,0	о. сл.
141	0,604	—	0,03	2,5	—
402	0,637	—	0,6	0	—
500	0,653	—	0,3	0	—
213	0,676	0,677	11,0	9,3	сл.
330	0,705	—	5,0	5,0	—
501	0,708	} 0,707	5,0	4,5	} сл.
232	0,715	—	1,0	0	—
303	0,728	—	0,001	1,1	—
240	0,732	—	0,65	0	—
331	0,760	—	0,05	0	—
412	0,768	0,770	19,4	19,4	ср.
421	0,787	0,787	10,0	8,6	сл.
223	0,806	—	12,0	4,1	—
150	0,810	—	0,7	0	—
313	0,833	0,834	13,0	11,1	сл.-ср.
511	0,865	0,866	17,0	13,6	сл.-ср.
502	0,872	—	0,8	0	—
004	0,877	—	2,5	2,5	—
104	0,903	—	0,9	0	—
403	0,911	0,912	8,0	6,5	о. сл.
332	0,924	0,926	20,5	20,5	сл.-ср.
600	0,941	0,942	13,0	13,0	сл.
242	0,951	—	2,8	0	—
114	0,955	0,955	28,7	28,7	ср.
340	0,967	—	1,6	0	—
204	0,981	—	1,9	0	—

и два атома индия статистически распределены в решетке по местам ячейки  $000$ ,  $\frac{1}{3}$   $\frac{2}{3}$   $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{2}{3}$   $\frac{1}{3}$   $\frac{1}{2}$ . Как в I, так и во II случае расчет производился по формуле  $I \cong HLS^2$ , где  $H$  — фактор повторяемости,  $L$  — поляризационно-лоренцовский фактор,  $S$  — структурная амплитуда. В шестом столбце даны визуально оцененные интенсивности линий на дебаеграмме  $In_2Bi$  по шкале: о. сл. — очень слабая, сл. — слабая, сл.-ср. — слабо-средняя, ср. — средняя, ср.-с. — средне-сильная, с. — сильная, о. с. — очень сильная; черта означает отсутствие линии на рентгенограмме.

Из табл. 1 видно, что экспериментально наблюдаемые интенсивности хорошо согласуются со II вариантом распределения атомов в ячейке  $In_2Bi$  и находятся для ряда линий в резком противоречии с I вариантом. Это приводит к выбору II варианта, рассмотренного выше и представляющего собою неупорядоченную структуру типа  $A1B_2$  (С-32-тип).

Институт общей и неорганической химии  
им. Н. С. Курнакова Академии наук СССР

Поступило  
12 VII 1949

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

<sup>1</sup> С. А. Дубинский, Диссертация, ИОНХ АН СССР, М., 1947. <sup>2</sup> Е. С. Макаров, ДАН, 59, № 5 (1948).