

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Е. Б. ГАСИЛОВА и М. И. СОХОП

РАСШИФРОВКА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ SiC VIII

(Представлено академиком Д. Е. Белянкиным 5 XI 1951)

Среди кристаллов карборунда был найден кристалл прозрачно-желтого цвета без внешне выявленной кристаллической формы. Кристалл был измельчен, так как требовалось определить его фазовый состав. Порошковая рентгенограмма получена в медном фильтрованном излучении в камере диаметром 143,25 мм.

Значения межплоскостных расстояний, вычисленных по рентгенограмме, и визуальная оценка интенсивностей интерференций приведены

Таблица 1

№№	<i>l</i>	<i>2L</i>	<i>d</i>	<i>hkl</i>	№№	<i>l</i>	<i>2L</i>	<i>d</i>	<i>hkl</i>
1	о. о. сл.	84,9	2,66	100	23	ср. с.	228,8	1,075	2011
2	о. о. сл.	85,7	2,64	101	24	ср. сл.	238,5	1,042	2012
3	с.	87,8	2,58	102	25	сл.	242,4	1,029	1018
4	с.	90,0	2,52	008	26	ср. сл.	248,9	1,009	2013
5	с.	91,5	2,48	103	27	ср. сл.	251,6	1,001	212
6	ср. с.	96,2	2,36	104	28	ср. сл.	254,0	0,994	213
7	ср. с.	102,1	2,23	105	29	о. сл.	256,8	0,985	214; 1019
8	ср.	109,1	2,09	106	30	сл.	258,0	0,982	215
9	о. о. сл.	125,1	1,83	108	31	сл.	260,4	0,976	2014
10	о. о. сл.	134,0	1,72	109	32	ср.	261,8	0,972	1116
11	ср. с.	144,0	1,61	1010	33	о. сл.	265,2	0,963	216
12	о. с.	151,0	1,54	110	34	сл.	274,8	0,940	1020
13	с.	154,3	1,51	1011	35	ср.	293,6	0,900	2110
14	ср. с.	165,0	1,418	1012	36	ср. с.	300,8	0,887	300
15	ср. с.	176,4	1,336	1013	37	ср. с.	302,5	0,884	2111
16	ср. сл.	179,0	1,319	202	38	ср.	315,8	0,862	2112
17	о. с.	180,1	1,312	118; 203	39	о. о. сл.	320,2	0,856	2018
18	ср. сл.	184,1	1,288	204	40	ср. с.	329,2	0,843	2113
19	ср.	188,1	1,264	1014; 205	41	о. с.	334,0	0,837	0024; 308
20	ср. сл.	189,5	1,255	0016	42	сл.	341,2	0,828	2019
21	ср. сл.	193,0	1,236	206	43	о. сл.	345,0	0,824	2114
22	ср.	220,0	1,106	2010	44	сл.	367,4	0,802	2020

Таблица 2

Расчетные данные ($n_c = 8$)	$I_{\text{экс}} 100$		$I_{\text{экс}} 200$		$I_{\text{экс}} 210$	
	l_1	l_2	$2u + v_1$	$2u_2 + v_1$	v_1	$2u + v_1$
4	8	7	о. о. сл.	о. о. сл.	о. о. сл.	о. сл.
4	7	6	о. о. сл.	о. о. сл.	о. сл.	о. сл.
4	6	5	ср. с.	ср. с.	ср. сл.	ср. с.
4	5	4	ср. с.	ср. с.	ср. сл.	ср. с.
4	4	3	ср. с.	ср. с.	ср. сл.	ср. с.
4	3	2	ср. с.	ср. с.	ср. сл.	ср. с.
4	2	1	ср. с.	ср. с.	ср. сл.	ср. с.
4	1	0	ср. с.	ср. с.	ср. сл.	ср. с.
4	0	0	ср. с.	ср. с.	ср. сл.	ср. с.

в табл. 1. Эти значения не дают возможности отнести кристалл ни к одному из известных типов структур карбида кремния.

По характеру расположения линий на рентгенограмме надо предполагать, что решетка этого типа SiC гексагональная.

Для гексагональной упаковки слойность по нормали к плоскости базиса n_c равна слойности по кратчайшей трансляции $n = 2m$ ($m = 0, 1, 2$).

Слойность $n_c = 4$ и $n_c = 6$ имеют гексагональные модификации SiC III и SiC II. Следующее возможное значение $n_c = 8$.

Совпадение экспериментальных межплоскостных расстояний с расчетными для $n_c = 8^*$ и рассуждения, аналогичные приведенным в предыдущей нашей работе при расшифровке структуры SiC VII (1), приводят к выводу, что исследуемая структура может быть описана числовым символом 4·4 или, возможно, 2·1·1·2·1·1.

Примитивная решетка гексагональная, так как условие

$$\Delta = \sum p_{2h+1} - \sum p_{2k} = 3m$$

соблюдается.

Выбор одного из двух указанных символов не составит труда, если экспериментальные интенсивности сравнить с вычисленными для обоих вариантов.

В случае гексагональной решетки структурная амплитуда плотной упаковки имеет вид:

$$F_n(hkl) = \sum_p e^{2\pi i \frac{p}{n_c} l} + \sum_q e^{2\pi i \left(\frac{2}{3} h + \frac{1}{3} k + \frac{q}{n_c} l \right)} + \sum_r e^{2\pi i \left(\frac{1}{3} h + \frac{2}{3} k + \frac{r}{n_c} l \right)}$$

Значение параметров p, q, r , определяющих положение атомов шаровой упаковки для каждого из числовых символов, следующие: 4·4: $p = 0, 3, 5$; $q = 1, 4, 7$; $r = 2, 6$; 2·1·1·2·1·1: $p = 0, 6$; $q = 1, 3, 5, 7$; $r = 2, 4$.

* Расчет d производился по квадратичной форме для гексагональной симметрии с учетом плотной упаковки атомов.

Легко доказать, что $|F_n|^2$ гексагональной упаковки является функцией индекса l , а h и k являются параметрами, меняющими значения $|F_n|^2$ при переходе к другим p, q, r . В табл. 2 помещены значения $|F_n|^2$ для двух вариантов числовых символов вместе с оценками интенсивностей по рентгенограмме.

Полученные из расчета структурных амплитуд условия погасания согласуются с экспериментом:

$$\begin{array}{ll} \text{при } h - k \neq 3m & \text{нет погасаний} \\ \text{при } h - k = 3m & l \neq 8t \quad (m, t = 0, 1, 2, \dots) \end{array}$$

Из табл. 2 ясно, что структура найденного кристалла характеризуется символом 4·4, определяющим принадлежность данной упаковки к пространственной группе $D_{6h}^4 = C6/mmc$ и, следовательно, бинарной тетраэдрической полярной структуры к группе $C_{6v}^4 = C6mc$.

Этот новый тип мы назвали SiC VIII.

Рамсделл и Коон сообщили (²), что недавно в минералогической лаборатории Мичиганского университета открыты три новых полиморфа SiC. Один из них — восьмислойный с гексагональной элементарной ячейкой — имеет символ 4·4 (никаких других данных о структуре нет). Очевидно, речь идет о том типе SiC, который мы описали в настоящей работе.

Всесоюзный научно-исследовательский институт
абразивов и шлифования

Поступило
19 VII 1951

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Е. Б. Гасилова, М. С. Белецкий и М. И. Сохор, ДАН, **82**, № 1 (1952). ² L. S. Ramsdell and J. A. Kohn, Acta Crystallogr., **4**, part 1, 75 (1951).