

关于用原子半径比讨论 A-15 相 Nb_3Si 结构稳定性的商榷*

罗 柴 光

(中国科学院物理研究所)

近来接连在一些文献里^[1-3]应用原子半径比讨论 A-15 相 Nb_3Si 的结构不稳定性时,混淆了两种涵义不同的原子半径。例如,他们用 Hartsough 依据 Goldschmidt CN 12 半径所概括出来的半径比判据来讨论 A-15 相 Nb_3Si 的结构不稳定性,但在计算化合物 Nb_3Si 的 Nb、Si 原子半径比时,却使用了 Johnson 和 Douglass 的 A-15 半径,因而给出了错误的数据和讨论。

查其根源,可能是受 Dew-Hughes 所写“超导 A-15 化合物:评论”一文的熏染^[4]。该文给出含糊不清的 Nb_3Si 的半径比数据及可能是错误的讨论。本文提出一点初浅见解与该文作者商榷。

Dew-Hughes 引述了 Johnson 和 Douglass 修正的 A-15 半径^[5]之后,接着又介绍了 Hartsough 的工作^[6]。在其后的讨论中指出:化合物 Nb_3Si 的 Nb、Si 原子半径比为 1.14,正好是在稳定形成 A-15 相的范围外。Dew-Hughes 给出的这个原子半径比的数值和讨论至少是含糊也可能是错误的。据前、后文的联系及按通常的理解,其所指的 A-15 相的生成范围应当是该文所引述的“Hartsough 结论”,即 0.84 至 1.12 的半径比范围。但所给的 Nb、Si 半径比值 1.14 则看来和文献 [1-3] 一样,是用 Nb 与 Si 的 Johnson 和 Douglass 的 A-15 半径求得的。如果不是这样,则该文的这一数据与讨论就至少是含糊不清的,需要给予进一步的补充说明。若确实这样,则这一讨论是错误的。该文引述的 Hartsough 结论里亦已指出,生成稳定 A-15 相的 0.84 至 1.12 的判据范围是以 Goldschmidt CN 12 的原子半径表述的。显然,用这个结论来判断某个特定化合物的 A-15 相的稳定性时,应当采用 Goldschmidt CN 12 半径。而按严格的意义要求,一般还应引用在数值上也完全和 Hartsough 相同的同一套的 Goldschmidt CN 12 半径数据,这样方能使得到的种种结论保持有效与准确。从 Hartsough 原作的图 5 读出的 Nb 与 Si 的 Goldschmidt CN 12 半径值与文献 [7] 的数据来源^[8]相符, $r_{\text{Nb}} = 1.468 \text{ \AA}$, $r_{\text{Si}} = 1.319 \text{ \AA}$, $r_{\text{Nb}}/r_{\text{Si}} = 1.113$, 不同于 Dew-Hughes 所给的 1.14, 并在 0.84 至 1.12 的 A-15 相的稳定形成范围内,与 Dew-Hughes 所说的“正好在生成 A-15 相的稳定范围外”的结论恰恰相反。数据即使取自其它参考文献,差别也是不大的。更早期的一些数据如^[9]: $r_{\text{Nb}} = 1.47 kX$, $r_{\text{Si}} = 1.335 kX$, $r_{\text{Nb}}/r_{\text{Si}} = 1.101$; 及其后的一些数据如^[10]: $r_{\text{Nb}} = 1.46 \text{ \AA}$, $r_{\text{Si}} = 1.32 \text{ \AA}$, $r_{\text{Nb}}/r_{\text{Si}} = 1.106$ 。这些数据都与 Hartsough 原作基本一致,但与 Dew-Hughes 所述有别。

* 1978 年 12 月 11 日收到。

以 Dew-Hughes 文中表 II 列出的金属半径 ($r_{\text{Nb}} = 1.47 \text{ \AA}$, $r_{\text{Si}} = 1.34 \text{ \AA}$) 及 Johnson 和 Douglass A-15 半径 ($r_{\text{Nb}} = 1.51 \text{ \AA}$, $r_{\text{Si}} = 1.33 \text{ \AA}$) 计算, 则 Nb 与 Si 的原子半径比分别为 1.10 和 1.14. 可见, Dew-Hughes 所给的 Nb₃Si 的 Nb, Si 原子半径比很可能就是以 Johnson 和 Douglass A-15 半径求得的. 这样, 就有如前面所述混淆了两种涵义不同的原子半径, 这是不能允许的.

A-15 相 Nb₃Si 的超导性与结构不稳定性等有关问题, 作者已有论述, 详见文献[11].

参 考 文 献

- [1] 朱宰万、徐济安, 物理学报, **27** (1978), 112.
- [2] 徐济安、朱宰万, 物理学报, **25** (1976), 533.
- [3] 陶瑞宝, A-15 超导体高, T_c 的可能上限 (1976 年全国 A-15 超导材料讨论会报告).
- [4] D. Dew-Hughes, *Cryogenics*, **15** (1975), 435.
- [5] G. R. Johnson and D. H. Douglass, *J. Low Temp. Phys.*, **14** (1974), 465.
- [6] L. D. Hartsough, *J. Phys. Chem. Solids*, **35** (1975), 1691.
- [7] L. Brewer, "Electronic Structure and Alloy Chemistry of the Transition Metals" (Edited by P. A. Beck) Interscience, New York (1963), pp. 101—178.
- [8] E. Teatum, K. Gschneidner, Jr. and J. Waber, Los Alamos Scientific Laboratory Report (1960) No. LA-2345.
- [9] Hume-Rothery and Raynor, "The Structure of Metals and Alloys" (Inst. of metals monograph and Report Series No. 1. 3rd-ed. (1954), London pp. 60—96).
- [10] R. P. Elliott, "Constitution of Binary Alloys", First Supplement McGraw-Hill, New York (1965).
- [11] 罗紫光, 物理学报, **28** (1979), 638.

COMMENTS ON THE STABILITY OF THE Nb₃Si A-15 STRUCTURE BASED ON THE ATOMIC RADII RATIO

LUO QI-GUANG

(Institute of Physics, Academia Sinica)

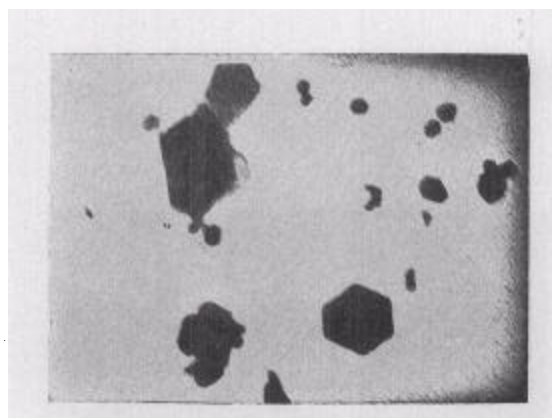


图1 样品 A 的电子显微镜照片 $\times 20,000$

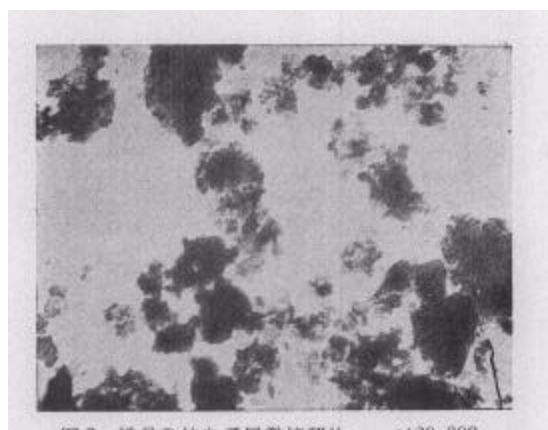


图2 样品 B 的电子显微镜照片 $\times 30,000$

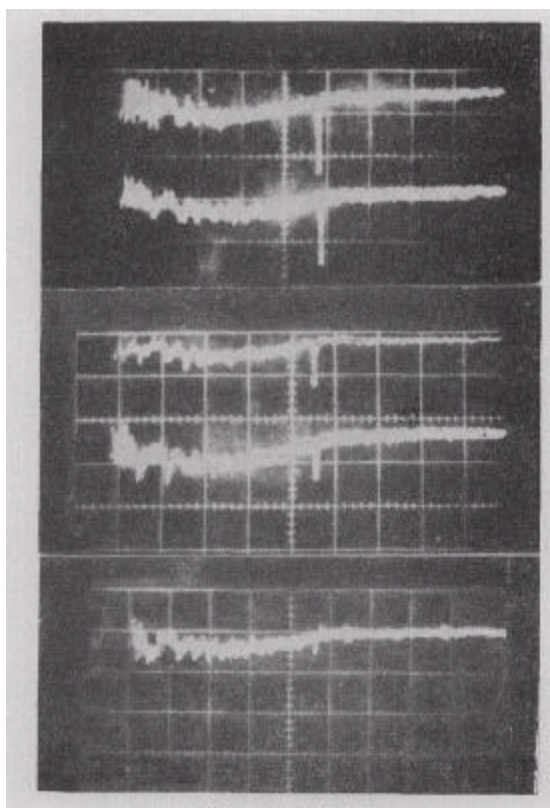
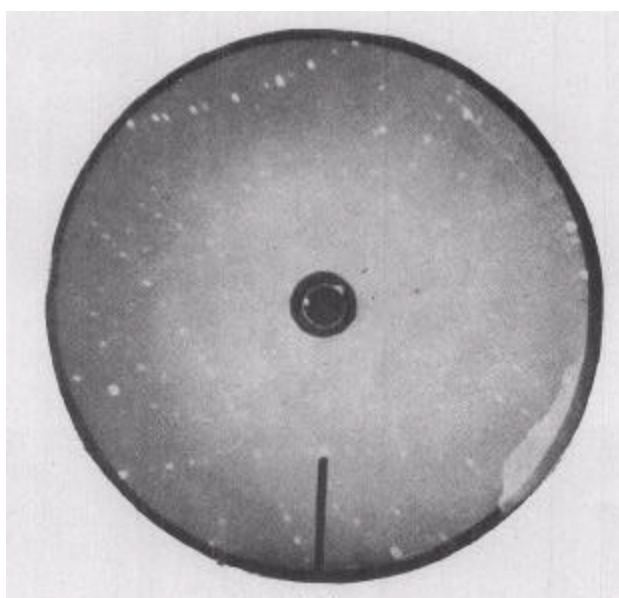
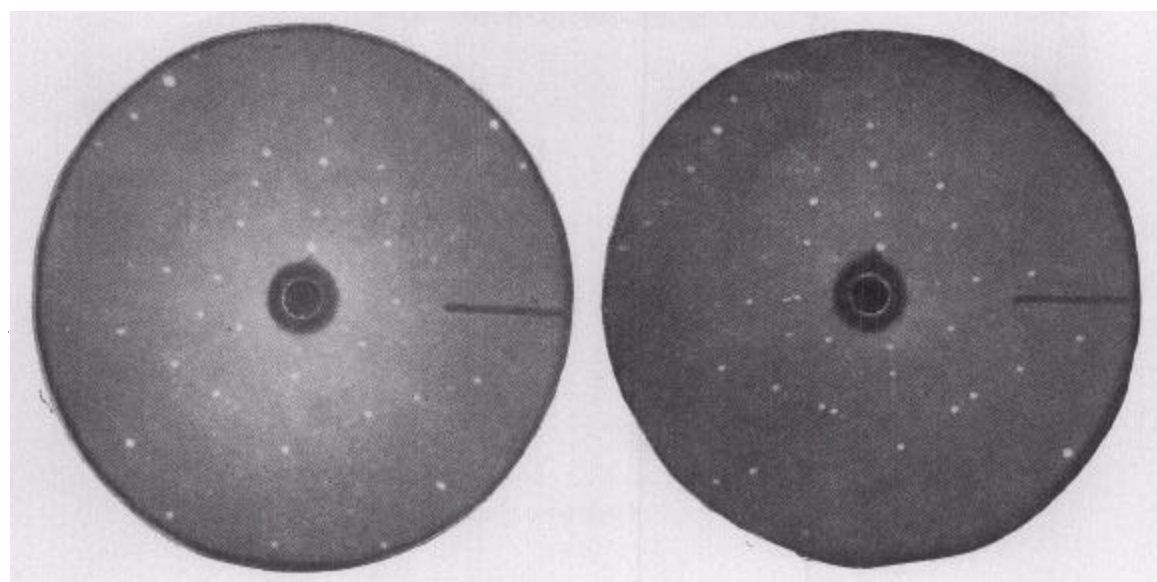


图 2 散射信号图

(纵坐标为 $100\text{mV}/\text{格}$ ；横坐标为 $0.5\mu\text{s}/\text{格}$)



(a) 籽晶



(b) 头部

(c) 尾部

图 8 片状铌酸锂单晶的劳厄像 $[11(10\bar{1}0)]$

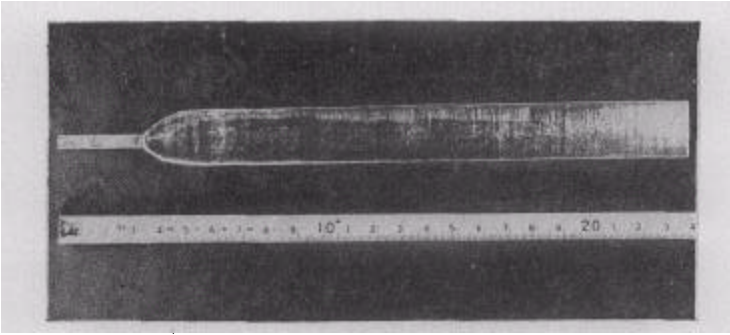


图 7 片状铌酸锂单晶的实物像

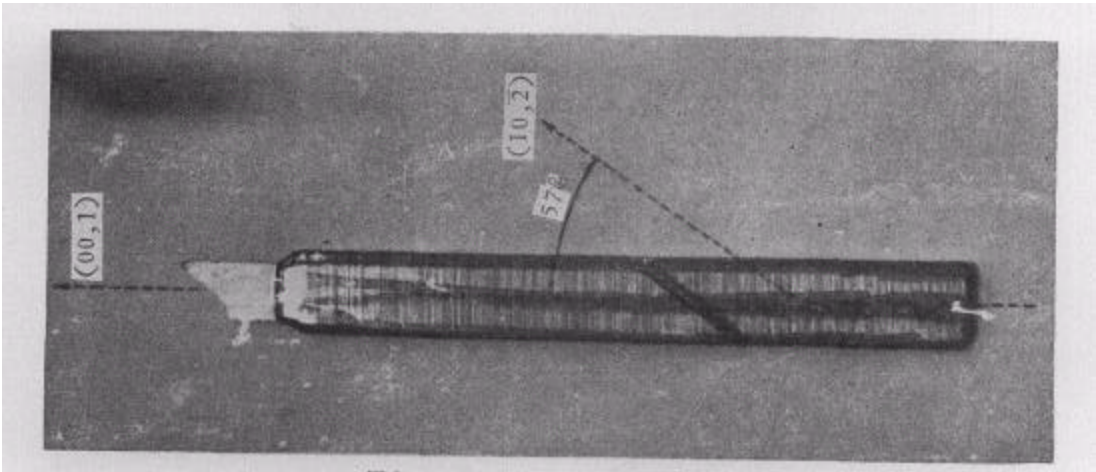
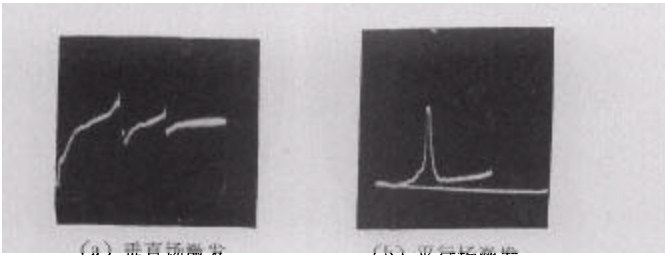
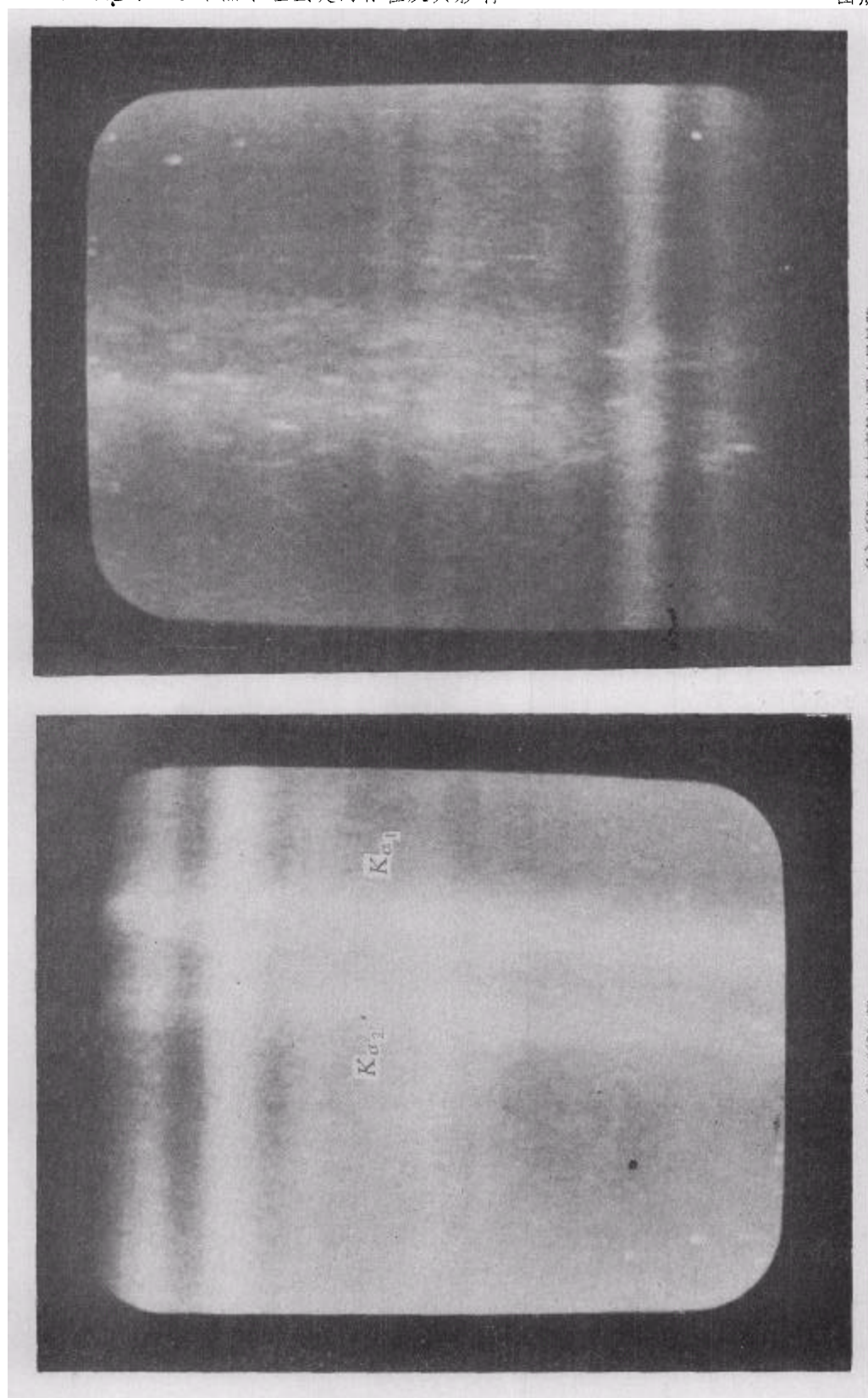


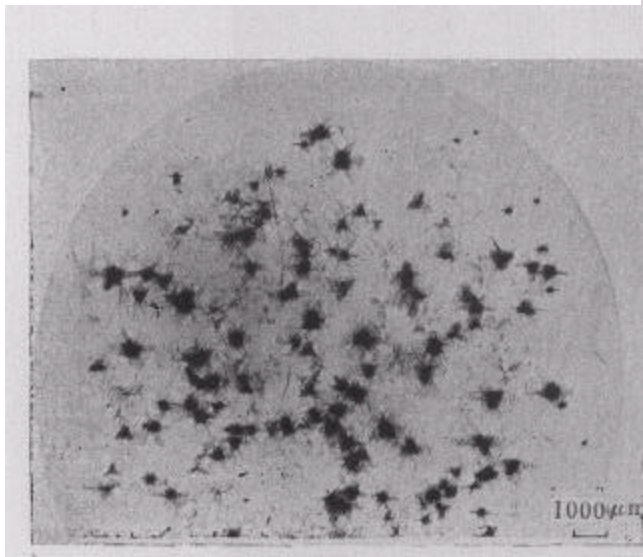
图 9 $y\bar{z}$ 取向片状铌酸锂单晶的开裂像



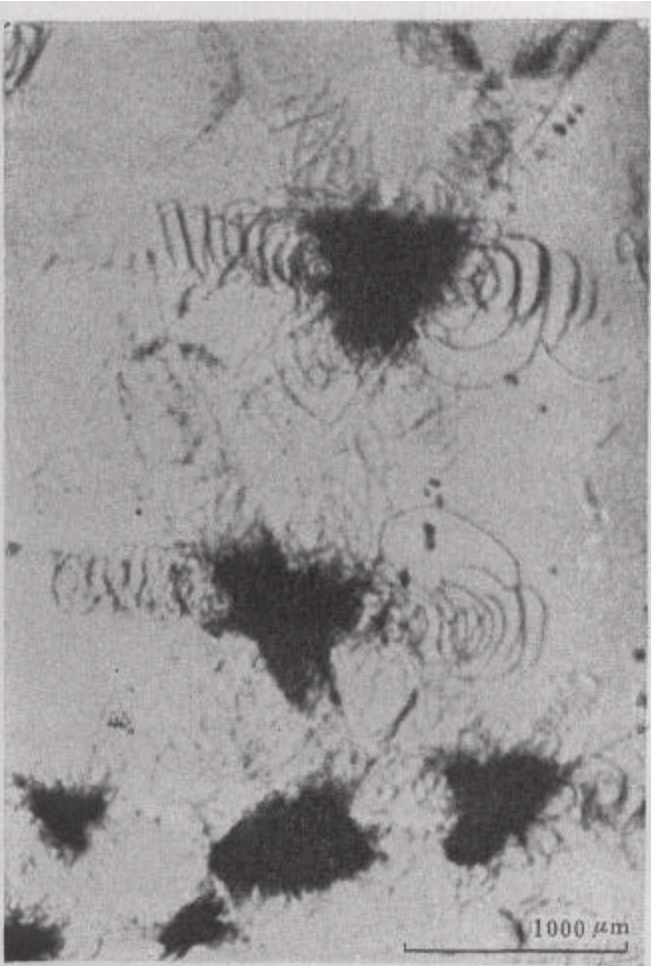
(a) 垂直场激发 (b) 平行场激发
图 10 $y\bar{z}$ 片状铌酸锂单晶的体波模式



(a) 600°C前
(b) 660°C左右突然出現大量缺陷
图6 氢气氛浮区硅单晶热处理 X 射线动态观察电视屏幕照片(横的条纹和照片下部的一些圆点是电视屏幕上原有的)

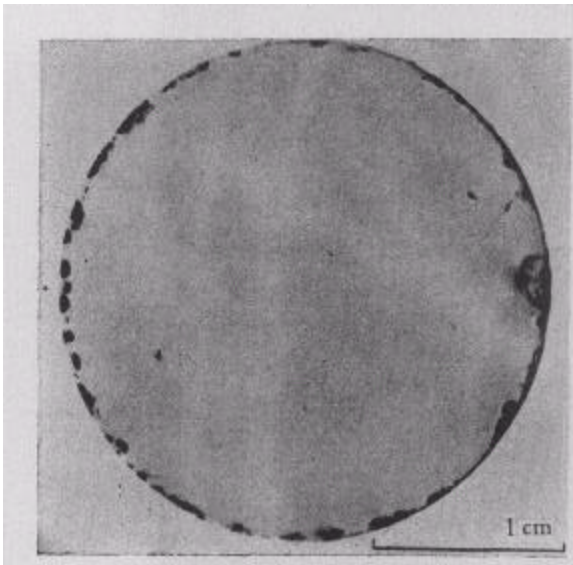


(a)

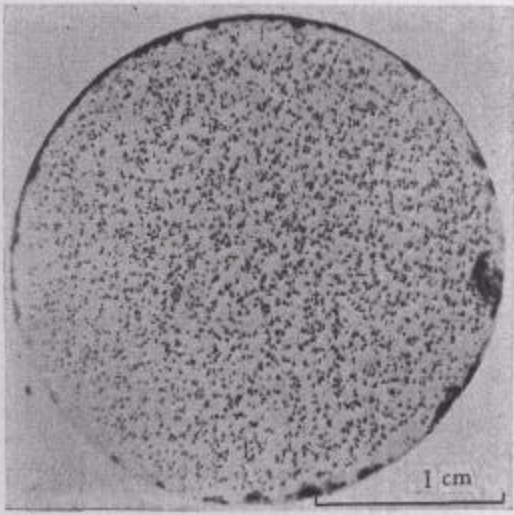


(b)

图 5 氢气氛浮区硅单晶热处理后出现的“雪花”形缺陷
(a) (111) 晶片 $220\text{ AgK}\alpha_1$ 透射形貌
(b) (a) 的局部放大照片



(a) 加热前



(b) 850℃ 加热后

图 7 样品热处理动态观察前后的 X 射线形貌照片 $\text{AgK}\alpha_1 220$ 透射