

Die Phase ScBe_{13}

Von

E. Laube und **H. Nowotny**

Aus dem Institut für Physikalische Chemie der Universität Wien

(Eingegangen am 27. April 1962)

Aus den Komponenten werden die isotypen Kristallarten YBe_{13} , LaBe_{13} und CeBe_{13} hergestellt und deren Struktur bestätigt. In gleicher Weise wird die Existenz von ScBe_{13} nachgewiesen; die Struktur ist ebenfalls zu NaZn_{13} isotyp. Der Gitterparameter wird zu $10,08_2 \text{ kX} \cdot \text{E}$. bestimmt.

Be-reiche Kristallarten der Formel AB_{13} sind in Kombination mit Metallen der 2a-, 3a- und 4a-Gruppe bekannt. So wurde kürzlich eine Phase HfBe_{13} mit NaZn_{13} -Struktur nachgewiesen^{1, 2}. Es scheint, daß Übergangsmetalle der 3a- und 4a-Gruppe (einschließlich Lanthanide und Actinide) bevorzugt diesen Typ ergeben. Da über das System Sc—Be keinerlei Daten vorliegen, wurde geprüft, ob die zu CeBe_{13} ³ analoge Sc-Phase existiert. Wegen der weitgehenden Übereinstimmung der Radien von Scandium einerseits und Zr bzw. Hf andererseits ist auch ein ähnlicher Gitterparameter zu erwarten.

Feinteiliges Scandium- und Berylliumpulver (0,47% Sauerstoff) wurden bei 1250°C gesintert, der Regulus zerkleinert und erneut gesintert. Das Gewicht der Reguli betrug etwa 0,3 g.

Pulveraufnahmen einer Probe mit 0,5 At% Sc zeigten neben Beryllium bereits die Existenz einer Phase an, deren Linienmuster dem NaZn_{13} -Typ, im besonderen ZrBe_{13} , entspricht. Eine Legierung gemäß Ansatz $\text{ScBe}(13)$ erwies sich als homogen und konnte eindeutig

¹ E. Rudy, F. Benesovsky, H. Nowotny und L. E. Toth, *Mh. Chem.* **92**, 692 (1961).

² P. I. Kripjakevitsch, M. A. Tyllkina und E. M. Savitzki, *J. Strukturchem.* (russ.) **2**, 424 (1961).

³ N. C. Baenziger und R. E. Rundle, *Acta Cryst.* [London] **2**, 258 (1949).

als ScBe_{13} mit oben genannter Struktur identifiziert werden. In Tab. 1 ist die Auswertung dieser Probe wiedergegeben. Es wurden jedoch nur die ersten und letzten Linien des Röntgenogramms aufgenommen. Als

Tabelle 1. Auswertung einer Pulveraufnahme der Phase ScBe_{13} , Cu-K_α -Strahlung

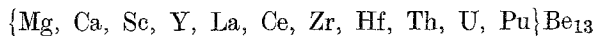
(<i>hkl</i>)	$\sin^2 \theta \cdot 10^3$ beobachtet	$\sin^2 \theta \cdot 10^3$ berechnet	Intensität beobachtet
(200)	23,0	23,2	mst
(220)	45,8	46,5	sst
(222)	69,6	69,7	m
(400)	92,4	93,0	s
(420)	115,9	116,2	sst
(422)	139,1	139,4	sst
(440)	186,0	185,9	sss
(442)	208,9	209,2	sss
(620)	232,9	232,4	ms
(622)	256,1	255,6	ms
:	:	:	:
:	:	:	:
(1042)	697,0	697,2	s
(880)	—	743,7	—
(1044) } (882) }	766,4	766,9	s
(1060) } (866) }	789,6	790,0	ms
(1062)	813,3	813,4	sss
(1200) } (884) }	836,5	836,6	ss
(1220)	859,7	859,8	sss
(1222) } (1064) }	883,0	883,1	mst
(1240)	—	929,6	—
(1242) } (1080) } (886) }	952,8	952,8	m

Gitterkonstante errechnet sich: $a = 10,08_2 \text{ kX} \cdot \text{E.}$, ein Wert, der tatsächlich nur wenig von dem Parameter für ZrBe_{13} ($a = 10,024^1$ bzw. $10,027 \text{ kX} \cdot \text{E.}^3$) abweicht.

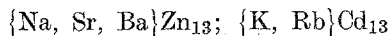
Für die auf dem Sinterwege hergestellten Kristallarten YBe_{13} , LaBe_{13} und CeBe_{13} erhielten wir die Parameter: $a = 10,23_0$, $a = 10,43_6$ bzw. $a = 10,35_7 \text{ kX} \cdot \text{E.}$ in guter Übereinstimmung mit den Literaturwerten⁴. Es wurde ein geringfügiger Homogenitätsbereich beobachtet, doch konnte derselbe bisher nicht näher erfaßt werden. Ebenso ist ein möglicher Einfluß von Sauerstoff auf die Gitterkonstante noch unbekannt.

⁴ R. M. Paine und J. A. Carrabine, Acta Cryst. [London] **13**, 680 (1960).

Der NaZn_{13} -Typ gehört zur Klasse der Polyederstrukturen; dabei besitzt der A-Partner die bemerkenswert hohe Koordinationszahl 24, was in erster Näherung mit dem großen Unterschied in den Radien r_A bzw. r_B in Zusammenhang gebracht werden kann. Dies zeigt sich auch in der Verteilung der AB_{13} -Phasen. Während solche bei Berylliden:



und bei Zinkiden und Cadmiden



vorkommen, fehlen diese offensichtlich bei dem größeren Magnesium als B-Partner.