

## Ti<sub>2</sub>AlN, eine stickstoffhaltige H-Phase

Von

**W. Jeitschko, H. Nowotny und F. Benesovsky**

Aus dem Institut für Physikalische Chemie der Universität Wien und der Metallwerk Plansee A.G., Reutte, Tirol

(Eingegangen am 17. September 1963)

Ti<sub>2</sub>AlN wird hergestellt; die Verbindung ist mit Cr<sub>2</sub>AlC isotyp (H-Phase).

Vor kurzem berichteten wir über eine neue Klasse von Doppelcarbiden (H-Phasen)<sup>1</sup>. Weitere Vertreter dieser Klasse sind in einer anschließenden Arbeit angeführt<sup>2</sup>. Es war von erheblichem Interesse zu prüfen, ob derartige H-Phasen auch mit einem anderen Metalloid gebildet werden können, insbesondere war dies von Stickstoff anzunehmen<sup>1</sup>. Es gelang, eine derartige Verbindung im System: Ti—Al—N aufzufinden, wogegen bei den Dreistoffen: Ti—Ge—N und Ti—Sn—N bei gleichartiger Herstellungsmethode die analoge Kristallart bisher nicht gefaßt werden konnte.

*Die Phase Ti<sub>2</sub>AlN.* Diese wurde durch Heißpressen aus einer Mischung von TiN, Titan-Metall und Aluminium-Metall hergestellt. Eine nennenswerte Aufnahme von Kohlenstoff im untersuchten Mittelteil der Probe kann dabei ausgeschlossen werden, da, wie stets, die Randzone in einer Stärke von 2 mm abgeschliffen wurde. Die Homogenisierung erfolgte bei 850° C (200 Std.) in abgeschlossenen Quarzampullen. Die so behandelte Probe enthielt nach röntgenographischer Untersuchung nur mehr geringe Anteile von unverändertem TiN. Im Falle einer merklichen Kohlenstoff-Aufnahme hätte man unter den gewählten Bedingungen zumindest bei den analogen Ansätzen für: Ti—Ge—N und Ti—Sn—N die Bildung der

<sup>1</sup> W. Jeitschko, H. Nowotny und F. Benesovsky, Mh. Chem. **94**, 672 (1963).

<sup>2</sup> W. Jeitschko, H. Nowotny und F. Benesovsky, Mh. Chem. **94**, 844 (1963).

kohlenstoffhaltigen H-Phase oder von TiC bzw. Ti(C, N) erwarten müssen. Daß tatsächlich keine Stabilisierung durch Kohlenstoff erfolgt ist, konnte an Hand von Proben bewiesen werden, welche aus kaltgepreßten Pulvergemischen der genannten Komponenten durch Glühen in Quarzampullen (850 °C, 600 St.) hergestellt worden waren. Die Gitterparameter verschiedenartig hergestellter Präparate stimmten sehr gut untereinander überein.

Tabelle 1. Auswertung einer Pulveraufnahme von Ti<sub>2</sub>AlN; CuK<sub>α</sub>-Strahlung ( $z_{Ti} = 0,086$ )

(hkl)	10 <sup>3</sup> · sin <sup>2</sup> θ beobachtet	10 <sup>3</sup> · sin <sup>2</sup> θ berechnet	Intensität beobachtet	Intensität berechnet
(002)	12,8	12,8	st	21
(004)	—	51,4	—	0,3
(100)	88,6	88,4	m	11
(101)	92,2	91,6	ss	3
(102)	—	101,2	—	0,5
(006) {	117,1	115,6 {	ssst	} 12
(103) }		117,3 }		
(104)	140,4	139,8	ss	3
(105)	—	168,7	—	0,3
(106) {	204,9	204,0 {	mst	} 14
(008) }		205,4 }		
(107)	247,0	245,7	sss	1
(110)	266,6	265,1	mst	14
(112)	—	277,9	—	1
(108)	—	293,8	—	0,3
(114)	317,9	316,5	sss	2
(0010)	—	321,0	—	0,3
(109)	349,4	348,4	m <sup>+</sup>	12
(200)	—	353,5	—	1
(201)	—	356,7	—	0,2
(202)	—	366,3	—	0,2
(116) {	382,4	380,7 {	st	} 10
(203) }		382,4 }		
(204)	—	404,9	—	0,4
(1010)	—	409,4	—	0,1

Die röntgenographische Auswertung der Ti<sub>2</sub>AlN-Phase geht aus Tab. 1 hervor. Man erkennt die gute Übereinstimmung zwischen beobachteten und berechneten Intensitäten. Die Gitterparameter sind mit:

$$a = 2,99_4 \text{ \AA},$$

$$c = 13,61 \text{ \AA} \text{ und } c/a = 4,54_4$$

merklich von jenen der analogen kohlenstoffhaltigen Phase Ti<sub>2</sub>AlC verschieden und ähnlich kleiner wie der Parameter von TiN gegenüber jenem von TiC. Obwohl ein gewisser Stickstoffdefekt, entsprechend Ti<sub>2</sub>AlN<sub>1-x</sub>,

möglich ist, dürfte zwischen  $\text{Ti}_2\text{AlC}$  und  $\text{Ti}_2\text{AlN}$  vollkommene Mischbarkeit bestehen.

Die kürzesten Atom-Abstände in  $\text{Ti}_2\text{AlN}$  sind:  $\text{Ti—N} = 2,09$ ,  $\text{Ti—Al} = 2,82$  und  $\text{Ti—Ti} = 2,91$  Å. Die Röntgendichte berechnet sich zu  $\rho_{\text{Rönt}} = 4,30$  g/ccm.

Aus den Abständen kann auf eine ähnlich starke Wechselwirkung zwischen dem Übergangsmetall und Stickstoff geschlossen werden wie im Ti-Mononitrid. Ebenso spricht auch der Abstand  $\text{Ti—Al}$  für eine verhältnismäßig kräftige Bindung.