

# Die H-Phasen $Ti_2InC$ , $Zr_2InC$ , $Hf_2InC$ und $Ti_2GeC$

Von

W. Jeitschko, H. Nowotny und F. Benesovsky

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

(Eingegangen am 17. September 1963)

Die Doppelcarbide  $Ti_2InC$ ,  $Zr_2InC$ ,  $Hf_2InC$  und  $Ti_2GeC$  werden hergestellt und kristallchemisch als H-Phasen identifiziert.

In Fortsetzung früherer Untersuchungen<sup>1</sup> an Kombinationen: T (Übergangsmetall)—M (Metametall)—X (Metalloid) wurden in den Systemen: Ti—In(Ge)—C, Zr(Hf)—In—C weitere H-Phasen bei der Zusammensetzung  $T_2MeX$  aufgefunden. Es konnte auch gezeigt werden, daß die früher bereits beobachteten H-Phasen<sup>1</sup> ebenfalls bei dieser Zusammensetzung homogen sind.

Zur Herstellung der In-haltigen Proben wurde von einem Gemisch von Übergangsmetall, dem jeweiligen Carbid (TiC, ZrC, HfC) und Indium ausgegangen. Die in Quarzampullen eingeschlossenen Ansätze wurden auf 850° C erhitzt und 350 Stdn. auf dieser Temperatur gehalten. Die auf diese Weise hergestellten Proben erwiesen sich als praktisch homogen; sie ergaben nach röntgenographischer Untersuchung jeweils die Existenz einer H-Phase. Die Herstellung der analogen Verbindung  $Ti_2GeC$  erfolgte dagegen durch Heißpressen der Komponenten und nachfolgendes Glühen bei 1300° C (12 Stdn.) unter Zr-gegetertem Argon. Auch diese Legierung war vollkommen homogen und ließ sich unschwer als H-Phase identifizieren. Die Auswertung der Röntgenogramme führt auf die nachstehenden Gitterparameter:

	a (Å)	c (Å)	c/a	$\rho_{R\ddot{O}}$ (g/cm <sup>3</sup> )
$Ti_2InC$	3,13 <sub>2</sub>	14,06	4,49 <sub>0</sub>	6,19
$Ti_2GeC$	3,07 <sub>9</sub>	12,93	4,19 <sub>9</sub>	5,64
$Zr_2InC$	3,34 <sub>7</sub>	14,91	4,45 <sub>5</sub>	7,10
$Hf_2InC$	3,30 <sub>7</sub>	14,73	4,45 <sub>5</sub>	11,51

<sup>1</sup> W. Jeitschko, H. Nowotny und F. Benesovsky, Mh. Chem. **94**, 672, 844 (1963).

Tabelle I. Auswertung einer Pulveraufnahme von  $Ti_2InC$ ;  $CuK_{\alpha}$ -Strahlung

$(hkl)$	$10^3 \cdot \sin^2 \vartheta$ beobachtet	$10^3 \cdot \sin^2 \vartheta$ berechnet	Intensität beobachtet	Intensität berechnet	
(002)	12,0	12,0	st	53	
(004)	48,3	48,1	m	31	
(100)	80,7	80,8	st	53	
(101)	84,5	83,8	mst	47	
(102)	93,4	92,8	s	22	
(103)	108,8	107,9	ssst	{ 260	
(006)		108,2			{ 53
(104)	—	128,9	—	5	
(105)	156,5	155,9	s	18	
(106)	189,4	189,0	st	42	
(008)	—	192,4	—	4	
(107)	228,9	228,1	sss	16	
(110)	242,5	242,4	st	51	
(112)	256,1	254,4	sss	9	
(108)	275,1	273,2	ss	15	
(114)	291,6	290,5	sss	12	
(0010)	—	300,6	—	1	
(200)	325,7	323,1	st	{ 6	
(109)		324,3			{ 42
(201)		326,1			{ 6
(202)	—	335,1	—	3	
(203)	352,8	350,2	sst	{ 37	
(116)		350,6			{ 46
(204)	—	371,2	—	1	
*	.	.	.	.	
.	.	.	.	.	
.	.	.	.	.	
.	.	.	.	.	
.	.	.	.	.	
(2012)	757,5	756,0	m	{ 6	
(1015)		757,2			{ 20
(218)		757,9			{ 1
(0016)	—	769,6	—	1	
(304)	—	775,2	—	5	
(219)	809,7	809,0	mst	43	
(2013)	835,5	831,1	m	{ 4	
(1114)		831,6			{ 3
(306)		835,3			{ 29
(1016)	—	850,4	—	1	
(2110)	—	866,1	—	4	
(2014)	—	912,3	—	2	
(308)	—	919,5	—	8	
(2111)	—	929,2	—	9	
(1017)	—	949,5	—	5	
(220)	969,5	969,4	m	40	
(0018)	—	973,9	—	5	

\* Ein Teil der Tabelle wird nicht wiedergegeben.

Die berechnete Röntgendichte ist ebenfalls obiger Aufstellung zu entnehmen. Die Auswertung der Röntgenogramme ist in Tab. 1—4 wiedergegeben. Für die Intensitätsberechnung, die durchwegs gute Überein-

Tabelle 2. Auswertung einer Pulveraufnahme von  $Zr_2InC$ ;  $CrK_{\alpha}$ -Strahlung

$(hkl)$	$10^3 \cdot \sin^2 \phi$ beobachtet	$10^3 \cdot \sin^2 \phi$ berechnet	Intensität beobachtet	Intensität berechnet
(002)	—	23,6	—*	2
(004)	—	94,4	—	1
(100)	159,1	156,1	st	61
(101)	164,5	162,0	sss	1,5
(102)	181,6	179,7	ss	4
(103)	211,4	209,2	ssst	270
(006)	214,2	212,4	m	54
(104)	—	250,5	—	0,05
(105)	—	303,6	—	2
(106)	369,7	368,5	m	42
(008)	—	377,7	—	1
(107)	—	445,2	—	0,05
(110)	469,5	468,4	m	37
(112)	—	492,0	—	0,5
(108)	—	533,8	—	0,2
(114)	—	562,8	—	0,5
(0010)	—	590,1	—	0,02
(200)	625,5	624,6	ss	10
(201)	—	630,5	—	0,3
(109)	634,8	634,1	st	67
(202)	—	648,2	—	0,6
(203)	679,4	677,7	sst	69
(116)		680,8		
(204)	—	719,0	—	0,02
(1010)	—	746,2	—	0,1
(205)	—	772,1	—	0,05
(206)	837,2	837,0	s—m	32
(118)	849,6	846,1	s	4
(0012)		849,7		
(1011)	—	870,1	—	3
(207)	—	913,7	—	0,1

\* Linie verschwindet im Untergrund.

stimmung zeigt, wurde der  $z$ -Parameter im Falle von  $Ti_2InC$  mit 0,082 angenommen, während für die anderen H-Phasen, so wie früher, mit  $z = 0,086$  gerechnet wurde. Charakteristisch sind wieder die kurzen Abstände: Übergangsmetall—Kohlenstoff sowie auch Übergangsmetall—Metametall.

Durch ähnliche Herstellungsmethoden gelang es auch, die H-Phasen:  $Zr_2PbC$ ,  $Hf_2PbC$  und  $Nb_2GaC$  aufzufinden. Darüber wird im einzelnen gesondert berichtet.

Tabelle 3. Auswertung einer Pulveraufnahme von  $\text{Hf}_2\text{InC}$ ;  $\text{CrK}_\alpha$ -Strahlung

$(hkl)$	$10^3 \cdot \sin^2 \vartheta$ beobachtet	$10^3 \cdot \sin^2 \vartheta$ berechnet	Intensität beobachtet	Intensität berechnet.
(002)	24,8	24,2	s	36
(004)	97,6	96,7	sss	9
(100)	160,8	159,9	st	145
(101)	167,4	166,0	ss	17
(102)	—	184,1	—	0,4
(103)	216,0	214,3	ssst	625
(006)	218,2	217,6	st	130
(104)	258,2	256,6	sss	8
(105)	—	311,0	—	0,7
(106)	379,0	377,5	mst	96
(008)	—	386,8	—	0,03
(107)	457,8	456,1	ssss	8
(110)	480,6	479,8	st	127
(112)	—	504,0	—	4
(108)	—	546,7	—	0,4
(114)	578,1	576,5	ssss	6
(0010)	—	604,4	—	2,5
(200)	640,6	639,8	ss	27
(201)	—	645,8	—	4
(109)	650,3	649,5	st *	168
(202)	—	664,0	—	0,2
(203)}	696,8	694,2	sst	}172
(116)}		697,4		
(204)	—	736,5	—	3
(1010)	—	764,3	—	2
(205)	—	790,9	—	1,5
(206)	857,5	857,4	m	82
(118)	—	866,6	—	0,5
(0012)	870,4	870,3	s	57
(1011)	—	891,2	—	0,01
(207)	*	936,0	sss	16

\* Linie nicht genau vermeßbar.

Tabelle 4. Auswertung einer Pulveraufnahme von  $\text{Ti}_2\text{GeC}$ ;  $\text{CuK}_\alpha$ -Strahlung

$(hkl)$	$10^3 \cdot \sin^2 \vartheta$ beobachtet	$10^3 \cdot \sin^2 \vartheta$ berechnet	Intensität beobachtet	Intensität berechnet
(002)	14,4	14,2	s	5
(004)	57,0	56,9	s	4,5
(100)	84,0	83,6	st	30
(101)	87,9	87,2	s	5,5
(102)	98,4	97,8	m	8
(103)	116,0	115,6	ssst	145
(006)	128,6	128,0	st	22
(104)	—	140,5	—	0,03

$(hkl)$	$10^3 \cdot \sin^2 \vartheta$ beobachtet	$10^3 \cdot \sin^2 \vartheta$ berechnet	Intensität beobachtet	Intensität berechnet
(105)	172,7	172,5	m	4
(106)	212,6	211,6	st	21
(008)	228,2	227,5	sss	1
(110)	251,2	250,7	st	29
(107)	—	257,8	—	0,8
(112)	265,6	264,9	sss	1
(114)	308,8	307,6	ss	1,8
(108)		311,1		0,4
(200)	335,5	334,2	s	3
(201)		337,8		0,8
(202)	—	348,4	—	0,8
(0010)	—	355,5	—	0,02
(203)	369,3	366,2	sst diff.	20
(109)		371,6		19
(116)	379,3	378,7	st	22
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
(1112)	763,3	762,6	st	17
(2011)		764,4		1
(302)	—	766,2	—	0,4
(1014)	—	780,4	—	0,7
(304)	—	808,9	—	0,8
(218)	—	812,4	—	0,05
(2012)	846,0	846,1	s	3,5
(219)	870,4 bis 886,4	872,9	sst	35
(306)		880,0		19
(1015)		883,5		16
(0016)	—	910,8	—	0,1
(2013)	—	935,0	—	0,2
(2110)	—	940,4	—	0,6
(1114)	947,8	947,6	s	2

Diese Arbeit kam mit teilweiser Unterstützung des US-Governments zustande.