

Die Bildung von $D8_8$ -Phasen zwischen 4 a-Metallen und Al, Ga, In und Sb

Von

H. Boller und E. Parthé

Aus dem Department of Metallurgical Engineering, University of Pennsylvania,
Philadelphia (Pa.), USA

(Eingegangen am 20. November 1962)

Eine systematische Suche nach Verbindungen mit $D8_8$ (Mn_5Si_3)-Struktur in den Systemen von Ti, Zr und Hf mit Al, Ga, In und Sb ergab drei neue Phasen dieses Typs: Ti_5Ga_3 , Hf_5Ga_3 und Zr_5Sb_3 *.

Die Probenherstellung wurde bereits an anderer Stelle beschrieben¹. Die Untersuchung erfolgte auf röntgenographischem Wege mit einem Philips Diffractometer.

Aluminide mit $D8_8$ -Struktur: Die Angaben in der Literatur konnten bestätigt werden. Demnach fehlt eine Phase Ti_5Al_3 ². Dagegen sind die Phasen Zr_5Al_3 ^{3, 4, 5} und Hf_5Al_3 ^{6, 7} metalloidd stabilisiert.

Gallide mit $D8_8$ -Struktur: Alle drei möglichen Gallide existieren. Inwieweit sie metalloidd stabilisiert sind, wurde nicht näher untersucht.

* Inzwischen wurde bereits über die Phasen $Ti_5Ga_3O_x$ und Hf_5Ga_3 (M. Pötzschke und K. Schubert, Z. Metallkde. **53**, 474 [1962]) und Zr_5Sb_3 (K. Schubert, Naturwiss. **49**, 57 [1962]) berichtet. Allerdings fanden wir etwas andere Gitterkonstanten.

¹ H. Boller und E. Parthé, Acta Crystallogr. [Kopenhagen], im Druck.

² K. Anderko, Z. Metallkde. **49**, 165 (1958).

³ C. G. Wilson, D. Sams und T. J. Renouf, Acta Crystallogr. [Kopenhagen] **12**, 947 (1959).

⁴ H. Nowotny, H. Auer-Welsbach, J. Bruss und A. Kohl, Mh. Chem. **90**, 15 (1959).

⁵ L. E. Edshammar und S. Anderson, Acta Chem. Scandin. **14**, 223 (1960).

⁶ H. Boller, H. Nowotny und A. Wittmann, Mh. Chem. **91**, 1174 (1960).

⁷ L. E. Edshammar, Acta Chem. Scandin. **14**, 1220 (1960).

Ti₅Ga₃ besitzt die Zellabmessungen $a = 7,60_4$; $c = 5,28_8$ Å und $c/a = 0,695$. Mit den freien Parametern $x_{\text{Ti}} = 0,24$ und $x_{\text{Ga}} = 0,605$ erzielt man gute Übereinstimmung zwischen berechneten und beobachteten Intensitäten.

Die Phase Zr₅Ga₃² konnte bestätigt werden. Allerdings fanden wir mit $a = 8,02_0$; $c = 5,67_8$ Å und $c/a = 0,708$ etwas andere Zellabmessungen, als in der Literatur² berichtet wurden ($a = 8,04$; $c = 5,71$ Å und $c/a = 0,71$).

Hf₅Ga₃ besitzt die Zellabmessungen $a = 7,96_2$; $c = 5,67_7$ Å und $c/a = 0,713$. Auffallend ist das hohe Achsenverhältnis, das zwischen dem der Silicide der 3a- und der 4a-Gruppe liegt⁸. Als freie Parameter wurden $x_{\text{Hf}} = 0,25$ und $x_{\text{Ga}} = 0,610$ angenommen.

Indium als Partner in D 8₈-Phasen: In keinem der untersuchten Systeme konnte eine binäre D 8₈-Phase mit Indium nachgewiesen werden. Jedoch existieren ternäre Verbindungen dieses Typs¹.

Antimonide mit D 8₈-Struktur: Es existiert lediglich Zr₅Sb₃ mit den Zellabmessungen $a = 8,46_5$; $c = 5,80_6$ Å und $c/a = 0,686$ und mit den üblichen freien Parametern $x_{\text{Zr}} = 0,25$ und $x_{\text{Sb}} = 0,610$. Dies ist das erste bekannte Antimonid mit dieser Struktur. Allerdings sind die Legierungen chemisch sehr unbeständig und zersetzen sich sehr schnell an der Luftfeuchtigkeit. Es ist nicht ausgeschlossen, daß die Zusammensetzung dieser Phase etwas nach der Zirkoniumseite hin verschoben ist (64 At.% Zr statt 62,5 At.%).

In entsprechenden Legierungen mit Hafnium konnte keine D 8₈-Phase nachgewiesen werden. Auch diese Legierungen sind sehr zersetzlich.

Diese Studie ist ein Beitrag des Laboratory for Research on the Structure of Matter, University of Pennsylvania, unterstützt durch die Advanced Research Projects Agency, Office of the Secretary of Defense. Diese Arbeit wurde durch die U. S. Air Force unter Kontrakt AF 49 (638)-1027 unterstützt, wofür wir herzlich danken.

⁸ E. Parthé, Acta Crystallogr. [Kopenhagen] **13**, 868 (1960).