

Die Kristallstruktur von TaNi₂

Von

H. Oesterreicher und H. Nowotny

Aus dem Institut für Physikalische Chemie der Universität Wien

(Eingegangen am 30. April 1964)

TaNi₂ kristallisiert im MoSi₂-Typ.

Im Anschluß an Untersuchungen^{1, 2} über Ta-Tränklegerungen wurde im System Ta—Ni die Kristallart TaNi₂ in homogener Form erhalten. Während eine im Lichtbogen erschmolzene Probe mit 66,6 At% Ni nach Glühen bei 1300°C noch mehrphasig war, ergab sich nach Tempern bei 700°C (240 Stdn.) Homogenität. Die Auswertung einer Pulveraufnahme führt auf eine Isotypie mit MoSi₂. Die gute Übereinstimmung zwischen berechneten und beobachteten Intensitäten für einen Parameter $z_{\text{Ni}} = 0,33$ geht aus Tab. 1 hervor.

Tabelle 1. Auswertung einer Pulveraufnahme von TaNi₂; CuK α -Strahlung

<i>(hkl)</i>	10 ⁴ · sin ² ϕ beobachtet	10 ⁴ · sin ² ϕ berechnet	Intensität beobachtet	Intensität berechnet
(002)	384	379	ms	7,1
(101)	705	691	mst	13,6
(110)	1197	1193	st	22,3
(103)	1452	1449	sst	33,1
(004)	1520	1516	s	1,2
(112)	1577	1572	s+	4,4
(200)	2395	2385	mst	7,4
(114)	2715	2709	s	1,9
(202)	2768	2764	s	1,8
(105)	2974	2965	s	1,7
(211)	3079	3076	s+	3,1

¹ R. Kieffer, St. Windisch und H. Nowotny, Metall **17**, 669 (1963).

² H. Nowotny und H. Oesterreicher, Mh. Chem. **95**, 982 (1964).

Fortsetzung von Tabelle 1

(hkl)	10 ⁴ · sin ² φ beobachtet	10 ⁴ · sin ² φ berechnet	Intensität beobachtet	Intensität berechnet
(006)	3405	3412	s ⁺	2,0
(213)	3841	3843	st	13,5
(204)	3909	3901	ss	1,1
(116)	4599	4604	mst	5,2
(220)	4773	4770	s ⁺	2,3
(222)	5140	5149	ss	0,8
(107)	5244	5240	ss	0,8
(215)	5349	5350	s	1,5
(301)	5453	5461	ss	0,7
(206)	5799	5797	ms ⁺	4,1
(310)	5954	5963	ms ⁺	4,2
(008)	—	6065	—	0,1
(303)	6210	6219	ms diffus	4,0
(224)		6286		0,7
(312)		6345		6342
(118)	7254	7257	ss	0,7
(314)	7470	7479	s	1,5
(217)	7635	7625	s	1,5
(305)	7738	7735	ss	0,8
(321)	7839	7848	s	1,6
(226)	8174	8182	mst	4,8
(109)	8267	8272	mst	4,9
(208)	8448	8450	ss	0,9
(323)	8597	8604	st	10,9
(316)	9373	9374	st ⁺	16,3
(0010)	—	9476	—	0,4
(400)	9539	9540	ms	4,8

Die Gitterkonstanten sind: $a = 3,157$, $c = 7,919 \text{ \AA}$ und $c/a = 2,508$.

Die Röntgengichte errechnet sich zu $\rho_{R\ddot{o}} = 12,5 \text{ g/cm}^3$. Bezüglich der Struktur sei bemerkt, daß infolge des etwas größeren c/a -Wertes (verglichen mit MoSi₂) keine so vollkommene pseudohexagonale Symmetrie besteht wie bei MoSi₂ ($c/a = \sqrt{6}$).