

Die Kristallstruktur von Mo_2FeB_2

Kurze Mitteilung

Von

W. Rieger, H. Nowotny und F. Benesovsky

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

(Eingegangen am 27. Juli 1964)

Mo_2FeB_2 wird aus den Elementen synthetisiert. Diese Phase ist mit U_3Si_2 isotyp, jedoch mit Ordnung der Mo- und Fe-Atome.

Im Laufe von Untersuchungen über Boride¹ der Übergangsmetalle fiel in Mo—Fe—B-Legierungen bei einer Zusammensetzung von ungefähr Mo_2FeB_2 eine homogene Phase an, deren Pulverdiagramm mit einer tetragonalen Elementarzelle indiziert werden konnte. Die Gitterparameter wurden zu: $a = 5,782 \text{ \AA}$, $c = 3,148 \text{ \AA}$ und $c/a = 0,544$ ermittelt. Diese sowie Symmetrie und Intensitätsabfolge weisen sofort auf Isotypie mit der U_3Si_2 -Struktur². Es ist bekannt, daß mehrere Boride der Übergangsmetalle mit einer Formel $T_3\text{B}_2$ oder $T_2T'\text{B}_2$ in diesem Typ auftreten. Vor allem sei auf die von *H. J. Beattie*³ isolierten Phasen $T_2T'\text{B}_2$ aufmerksam gemacht, wobei $T = \text{Ti, Mo, Al}$ und $T' = \text{Cr, Fe, Ni}$ sind.

In Tab. 1 ist eine Auswertung einer Pulveraufnahme wiedergegeben, die beweist, daß die Metallatome geordnet sind, nämlich 4 Mo-Atome auf 4g)- und 2 Fe-Atome auf 2b)-Lagen. Mit den verwendeten Parametern $u_{\text{Mo}} = 0,183$ ($v_{\text{B}} = 0,394$) erkennt man die wesentlich bessere Übereinstimmung der Intensitäten für den Fall der Ordnung als für die Annahme einer statistischen Verteilung, welche bei hohen Temperaturen durchaus möglich ist.

¹ *H. Boller, W. Rieger und H. Nowotny, Mh. Chem.* **95**, 1497 (1964).

² *W. H. Zachariasen, Acta cryst.* [Kopenhagen] **2**, 94 (1949).

³ *H. J. Beattie jr., Acta cryst.* **11**, 607 (1958).

Tabelle 1. Auswertung einer Pulveraufnahme von Mo_2FeB_2 , CrK_α -Strahlung, mit Intensitätsberechnung für geordnete und statistische Verteilung der Mo- und Fe-Atome

(hkl)	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ beob.	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ ber.	$I_{\text{beob.}}$	$I_{\text{ber.}}$	
				geord.	stat.
(110)	—	78,5	—	11,5	107
(001)	133,1	132,4	m	188	59
(200)	159,0	157,0	s	95	12
(210)	197,7	196,3	st	448	326
(111)	211,8	210,9	m	171	278
(201)	290,3	289,4	sst	583	639
(220)	314,3	314,0	m	147	179
(211)	329,8	328,7	sst	526	398
(310)	394,3	392,5	mst	190	239
(320)	512,2	510,2	sss	23	29
(002)	529,7	529,7	m	126	126
(410)	667,7	667,3	mst	220	163
(330)	706,6	706,5	s	53	17
(212)	726,3	726,0	mst	220	159
(401)	760,5	760,4	s	32	61
(420)	785,4	785,0	s	36	68
(411)	800,2	799,7	sst	484	352
(331)	838,4	838,9	sst	476	486
(222)	842,0	843,7	m	186	228
(312)	921,2	922,2	sst	481	609
(430)	982,5	981,2	ss	76	54

d = diffus.