

Die H-Phasen: Ti_2CdC , Ti_2GaC , Ti_2GaN , Ti_2InN , Zr_2InN und Nb_2GaC

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 5. November 1963)

Die ternären Phasen Ti_2CdC , Ti_2GaC , Ti_2GaN , Ti_2InN , Zr_2InN und Nb_2GaC werden aus Monocarbide bzw. -nitrid, Übergangsmetall und Metametal hergestellt. Die Verbindungen erweisen sich sämtlich mit Cr_2AlC (H-Phase) isotyp. Die Gitterparameter werden ermittelt.

Die Zahl der aufgefundenen H-Phasen hat sich insbesondere durch die Einbeziehung aller Metalle erheblich vermehrt¹. Im folgenden wird über eine Reihe weiterer H-Phasen berichtet, die erkennen lassen, daß in vielen Fällen Stickstoff anstelle von Kohlenstoff treten kann².

Zur Herstellung der oben angeführten Verbindungen wurden Pulvermischungen von Monocarbide oder Mononitrid mit Übergangsmetall und Metametal im stöchiometrischen Verhältnis in Quarzampullen eingeschlossen. Es sei bemerkt, daß die Pulver dabei möglichst dicht eingepreßt sein müssen. Im anderen Fall erfolgt nur teilweise Legierungsbildung, die aber nicht unbedingt zur H-Phase führt. Die Glühbedingungen gehen aus Tab. 1 hervor.

Eine röntgenographische Untersuchung der so hergestellten Proben ergab das Vorhandensein der H-Phasen Ti_2CdC , Ti_2GaC , Ti_2GaN , Ti_2InN , Zr_2InN und Nb_2GaC . Lediglich bei Zr_2InN war neben der H-Phase noch Mononitrid anwesend. Die Auswertung der Pulveraufnahmen führt auf die in Tab. 2 angegebenen Gitterparameter. Von einer Intensitätsberechnung kann nunmehr abgesehen werden, da genügend viele gleich

¹ W. Jeitschko, H. Nowotny und F. Benesovsky, *Mh. Chem.* **94**, 1201 (1963).

² W. Jeitschko, H. Nowotny und F. Benesovsky, *Mh. Chem.* **94**, 1198 (1963).

streuende Verbindungen bereits vorliegen und bezüglich der Intensitäten rechnerisch kontrolliert wurden.

Tabelle 1. Herstellungsbedingungen

	Zeit (Stdn.)	Temperatur (°C)
Ti_2CdC	900	750
Ti_2GaC	800 + 200	850; 750
Ti_2GaN	850	850
Ti_2InN	500	850
Zr_2InN	500	850
Nb_2GaC	800	750

Interessant ist der Gang des Achsenverhältnisses c/a in Abhängigkeit einerseits vom Metametal und andererseits vom Metalloid. Eine Übersicht der bekannten H-Phasen zeigt klar, daß c/a beim 2 b-Metametal

Tabelle 2. Gitterparameter und Röntgendichte von H-Phasen

	a (Å)	c (Å)	c/a	Dichte (röntg.) g/cm^3
Ti_2CdC	3,09 ₉	14,41	4,65 ₃	6,10
Ti_2GaC	3,06 ₄	13,30 ₅	4,34 ₂	5,45
Ti_2GaN	3,00 ₄	13,30	4,42 ₈	5,73
Ti_2InN	3,07 ₄	13,97 ₅	4,54 ₇	6,52
Zr_2InN	3,27 ₇	14,84	4,52 ₆	7,49
Nb_2GaC	3,13 ₁	13,56 ₅	4,33 ₂	7,71

groß, dagegen bei 4 b-Metametalen klein ist. Die Phasen mit 3 b-Metametalen liegen dazwischen. Z. B. ist die Reihenfolge für $Ti_2\{Cd, In, Sn\}C$: $c/a = 4,65_3$; $4,49_0$; $4,27_8$. Die gegenüber der dichten Metallpackung kleineren c/a ($c/3 a$)-Werte rühren in der Hauptsache davon her, daß Metalloidatome nur in den Doppelschichten der Übergangsmetalle eingebaut werden. Einheitlich scheint auch die Abhängigkeit von der Natur des Metalloidatoms zu sein, indem alle Nitride ein größeres c/a -Verhältnis aufweisen als die analogen Carbide. Auffallend ist ferner, daß das Nitrid eine kleinere Zelle besitzt als das entsprechende Carbid, eine Erscheinung, die auch bei den Monocarbiden und Mononitriden zu beobachten ist. In diesem Falle wird als Erklärung die stärkere Defektstruktur bei Oxid gegenüber Nitrid und auch bei Nitrid gegenüber Carbid angegeben³.

Dem US-Government danken wir für Unterstützung.

³ H. Nowotny, Radex-Rundschau, Heft 2, 41 (1953).