

Ti₃AlC, ein Perowskit-Carbid*

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)

Ti₃AlC wird aus Ti-Hydrid, Aluminium und Kohlenstoff durch Heißpressen hergestellt. Diese Phase ist mit den Perowskit-Carbiden isotyp. Der Gitterparameter wird zu: $a = 4,15_6 \text{ \AA}$ bestimmt.

Im Verlauf von Untersuchungen über H-Phasen¹ wurde der Dreistoff: Ti—Al—C im Ti-reichen Gebiet eingehend studiert. Neben der bereits früher beschriebenen H-Phase (Ti₂AlC)² soll nach Literaturangaben³ noch eine weitere ternäre Kristallart — unbekannter Zusammensetzung — existieren. Wegen der engen strukturechemischen Verwandtschaft zwischen der H-Phase und dem Perowskit-Carbid ist die Frage, ob beide Kristallarten nebeneinander auftreten können, von erheblichem Interesse. Nach *H. Stadelmaier*⁴ wurden Perowskit-Carbide bisher nur mit Übergangsmetallen der 7 a- und 8 a-Gruppe aufgefunden. Kombinationen im Dreistoff: Ti—Al—C sind im übrigen auch in anderer Hinsicht von Bedeutung (z. B. Angriff von Al-Schmelzen auf TiC-Elektroden oder Verhalten von Al-haltigen Titanlegierungen in Gegenwart von Graphit).

Herstellung der Proben

Es wurden Pulver-Ansätze im Bereich zwischen 60 und 85 At% Ti (als Hydrid eingesetzt), 10 und 25 At% Al, Rest Kohlenstoff heißgepreßt. Die Preßlinge wurden wie üblich an der Außenseite abgeschliffen und nach Einschließen in Quarzröhrchen rd. 500 Stdn. bei 750° C gegläht.

* Herrn Professor Dr. *Franz Halla* zum 80. Geburtstag.

¹ *W. Jeitschko, H. Nowotny und F. Benesovsky*, Mh. Chem. **94**, 120 (1963).

² *W. Jeitschko, H. Nowotny und F. Benesovsky*, Mh. Chem. **94**, 672 (1963).

³ *R. J. van Thyne und H. D. Kessler*, J. Met. **6**, 193 (1954).

⁴ *H. Stadelmaier*, Z. Metallkde. **52**, 758 (1961).

Pulveraufnahmen dieser so behandelten Proben ergaben im Gebiet der ungefähren Zusammensetzung Ti_3AlC eindeutig die Existenz einer kubischen Phase mit dem Gitterparameter:

$$a = 4,15_6 \text{ \AA.}$$

Wie aus Tab. 1 ersichtlich, beweist eine Intensitätsrechnung unmittelbar das Bestehen eines Perowskit-Carbides. Dieser Befund ist bemerk-

Tabelle 1. Auswertung einer Pulver-Aufnahme von Ti_3AlC (Perowskit-Typ); $CuK\alpha$ -Strahlung

(hkl)	$10^3 \cdot \sin^2 \vartheta$ beobachtet	$10^3 \cdot \sin^2 \vartheta$ berechnet	Intensität beobachtet	Intensität berechnet
(100)	34,5	34,4	m	44
(110)	—	68,8	—	1,4
(111)	103,9	103,2	ssst	325
(200)	137,9	136,6	sst ⁺	200
(210)	172,8	172,0	ss	13
(211)	—	206,4	—	0,7
(220)	276,2	275,2	st ⁺	120
(300) \}	310,3	309,6	sss	5
(221) \}				
(310)	—	344,0	—	0,3
(311)	379,0	378,4	st	105
(222)	413,2	412,8	m	41
(320)	—	447,2	—	2,1
(321)	—	481,6	—	0,4
(400)	550,7	550,4	s	20
(410) \}	—	584,8	—	3,8
(322) \}				
(411) \}	—	619,2	—	0,22
(330) \}				
(331)	654,0	653,6	m ⁺	58
(420)	688,2	688,0	mst	72
(421)	—	722,4	—	3,6
(332)	—	756,8	—	0,26
(422)	825,7	825,6	mst	89
(500) \}	—	860,0	—	3,2
(430) \}				
(431) \}	—	894,5	—	1,3
(510) \}				
(333) \}	928,9	928,9	sst	150
(511) \}				

kenswert, weil damit die Existenz weiterer Perowskit-Carbide mit Übergangsmetallen der 4 a-, 5 a- und 6 a-Gruppe möglich erscheint. Für die Idealzusammensetzung berechnet sich die Dichte zu: $\rho_{R\delta} = 4,22 \text{ g/cm}^3$. Wenn man jeweils das Trägergitter allein betrachtet, so entwickeln sich die Phasen $TiAl$, Ti_3AlC und TiC_{1-x} stufenweise, indem, von den 4 Basis-

atomen bei TiAl ausgehend, ein Ersatz von einem Metametalatom durch Titan zu dem Wirtgitter von Ti₃AlC führt und bei Substitution des zweiten Al-Atoms durch Ti das Wirtgitter von TiC entsteht.

Tatsächlich liegt der oben angeführte Parameter von Ti₃AlC ziemlich genau zwischen jenem von TiAl (Mittelwert der tetragonalen Achsen: $a \sim 4,02$) und dem von TiC_{0,28} ($a = 4,28 \text{ \AA}$). In ähnlichem Zusammenhang stehen wegen der wenig verschiedenen Radien von Ti einerseits und Al andererseits die hexagonal dicht gepackten Phasen bzw. Wirtgitter: α -Ti-Mk, Ti₂₋₃Al und die H-Phase, Ti₂AlC. Ein merklicher Kohlenstoff-Unterschub dürfte bei Ti₃AlC nicht vorliegen.

Die kürzesten interatomaren Abstände in Ti₃AlC sind: Ti—Al(Ti) = 2,94 und Ti—C = 2,08 Å. Auch hier kann man ähnlich wie bei den H-Phasen eine Verkürzung gegenüber dem analogen Abstand im Monocarbide feststellen.

Dem US-Government danken wir für die Unterstützung.