

Die Kristallstrukturen von U_2Fe_3Si und $TaNiAl$

(Kurze Mitteilung)

Von

J. B. Kusma und H. Nowotny

Aus dem Institut für Physikalische Chemie der Universität Wien

(Eingegangen am 17. Februar 1964)

Die Systeme U—Fe—Si und Ta—Ni—Al wurden auf dem Schnitt bei 33 At% U bzw. Ta röntgenographisch untersucht. Die Legierungen wurden durch Kaltpressen und Reaktion in Wasserstoffatmosphäre bei 1200—1400°C hergestellt; die Homogenisierungsglühung erfolgte bei 1000°C (48 Stdn. für Ta—Ni—Al) und 800°C (200 Stdn. für U—Fe—Si) in abgeschlossenen Quarzampullen.

Pulveraufnahmen der Legierungen U_2Fe_3Si und $TaNiAl$ lassen sich hexagonal indizieren. Auf den Debyeogrammen dieser Verbindungen fehlen jeweils die Linien für $(00l)$ und (hhl) mit $l \neq 2n$, was auf Vorliegen der Raumgruppe $P6_3/mmc-D_{6h}^1$ hinweist (s. Tab. 1 und 2). Auf den Aufnahmen finden sich einige sehr schwache Linien, welche vermutlich von Oxiden (Uran) oder Nitriden (Tantal) herrühren. Die Auswertung ergibt die nachstehenden Gitterparameter (in Å):

$$U_2Fe_3Si: a = 5,14_5, c = 7,71_7, c/a = 1,50_0$$

$$TaNiAl: a = 4,96_9, c = 7,98_5, c/a = 1,60_7$$

Damit wird Zugehörigkeit zum $MgZn_2$ -Typ nahegelegt.

Um dies zu bestätigen, sind die Intensitäten für folgende Punktlagen berechnet worden. Im Falle von U_2Fe_3Si : U in 4f ($z = 1/16$), Fe, Si in 6h ($x = 5/6$) und in 2a. Gegenüber dem stark streuenden Uranatom läßt sich eine statistische Verteilung von Fe und Si über beide Lagen nicht von der geordneten unterscheiden. Für $TaNiAl$ wurde eine statistische Verteilung von Ni- und Al-Atomen über die Positionen 2a und 6h angenommen. Die beobachteten und berechneten Intensitäten stimmen

Tabelle 1. Auswertung einer *Debye—Scherrer*-Aufnahme von U_2Fe_3Si . CrK α -Strahlung

<i>(hkl)</i>	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ beobachtet	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ berechnet	Intensität geschätzt	Intensität berechnet
(10 $\bar{1}$ 0)	66,9	66,1	5	12,9
(10 $\bar{1}$ 1)	89,4	88,2	5	18,0
(0002)				
(10 $\bar{1}$ 2)	153,9	154,3	3	10,7
(11 $\bar{2}$ 0)	198,4	198,4	20	47,7
(20 $\bar{2}$ 0)	265,2	264,6	50	68,4
(10 $\bar{1}$ 3)				
(11 $\bar{2}$ 2)	287,1	286,6	50	66,0
(20 $\bar{2}$ 1)				
(20 $\bar{2}$ 2)	—	303,2	—	0,4
(0004)	353,0	352,7	3	1,7
(10 $\bar{1}$ 4)	—	418,9	—	1,3
(20 $\bar{2}$ 3)	463,4	463,0	10	19,0
(21 $\bar{3}$ 0)				
(21 $\bar{3}$ 1)	484,3	485,0	10	5,4
(21 $\bar{3}$ 2)	550,5	551,2	5	3,6
(11 $\bar{2}$ 4)				
(30 $\bar{3}$ 0)	595,4	595,3	15	25,4
(30 $\bar{3}$ 1)	617,6	617,1	15	25,7
(20 $\bar{2}$ 4)				
(10 $\bar{1}$ 5)	661,1	661,3	70	72,5
(21 $\bar{3}$ 3)	684,1	683,6	30	48,8
(30 $\bar{3}$ 2)	793,9	793,8	90	90,5
(22 $\bar{4}$ 0)				
(30 $\bar{3}$ 3)	816,0	815,6	100	100,0
(0006)	859,7	859,7	20	29,0
(21 $\bar{3}$ 4)				
(20 $\bar{2}$ 5)	881,9	881,6	60	42,4
(31 $\bar{4}$ 0)				
(10 $\bar{1}$ 6)	947,1	948,0	30	34,6
(31 $\bar{4}$ 1)				
(22 $\bar{4}$ 2)		882,1		
(31 $\bar{4}$ 2)				
(30 $\bar{3}$ 4)				

gut überein, was Isotypie der Verbindungen U_2Fe_3Si und $TaNiAl$ mit $MgZn_2$ beweist.

Die Ergebnisse zeigen, daß das System U—Fe—Si den anderen Systemen von zwei Übergangsmetallen mit Silicium ähnlich ist, in denen sich Phasen mit $MgZn_2$ -Typ bilden; z. B. Mn—Co(Ni)—Si^{1, 2},

¹ E. I. Gladischevsky, P. I. Kripjakevitch und J. B. Kusma, Dopovidi Akad. Nauk URSS Nr. 1, 67 (1956).

² E. E. Tscherkaschin, E. I. Gladischevsky, P. I. Kripjakevitch und J. B. Kusma, J. Neorg. Chim. 3, 650 (1958).

Tabelle 2. Auswertung einer *Debye—Scherrer*-Aufnahme von $TaNiAl$. $CrK\alpha$ -Strahlung

(hkl)	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ beobachtet	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ berechnet	Intensität geschätzt	Intensität berechnet
(10 $\bar{1}$ 0)	71,4	70,9	5	8,0
(0002)	82,6	82,3	3	5,3
(10 $\bar{1}$ 1)	91,9	91,5	5	6,7
(10 $\bar{1}$ 2)	152,7	153,2	5	7,5
(11 $\bar{2}$ 0)	213,2	212,7	30	31,6
(10 $\bar{1}$ 3)	256,1	256,1	40	39,8
(20 $\bar{2}$ 0)	284,0	283,6	5	7,45
(11 $\bar{2}$ 2)	295,0	295,0	40	42,0
(20 $\bar{2}$ 1)	303,8	304,1	10	18,8
(0004)	—	329,3	—	1,8
(20 $\bar{2}$ 2)	—	365,9	—	0,1
(10 $\bar{1}$ 4)	—	400,2	—	1,2
(20 $\bar{2}$ 3)	468,6	468,8	10	8,6
(21 $\bar{3}$ 0)	495,6	496,2	3	3,6
(21 $\bar{3}$ 1)	517,4	516,8	5	3,6
(11 $\bar{2}$ 4)	—	541,8	—	0
(21 $\bar{3}$ 2)	—	578,5	—	2,3
(10 $\bar{1}$ 5)	585,1	585,4	15	18,3
(20 $\bar{2}$ 4)	—	613,1	—	0,1
(30 $\bar{3}$ 0)	637,8	638,0	20	20,8
(21 $\bar{3}$ 3)	680,8	681,6	80	74,5
(30 $\bar{3}$ 2)	720,8	720,5	50	45,8
(0006)	—	741,2	—	7,4
(20 $\bar{2}$ 5)	798,1	798,1	80	78,0
(10 $\bar{1}$ 6)	—	811,9	—	11,7
(21 $\bar{3}$ 4)	—	825,7	—	3,6
(22 $\bar{4}$ 0)	851,1	850,7	100	100
(22 $\bar{4}$ 1)	—	871,5	—	0
(31 $\bar{4}$ 0)	921,2	921,4	15	19,2
(22 $\bar{4}$ 2)	933,1	933,1	40	48,5

V—Co(Ni)—Si³, Mo(W)—Co(Ni)—Si^{4, 5} und andere. Der Zusatz von Silicium erhöht im allgemeinen die Gesamt-Elektronenkonzentration, was bei *Laves*-Phasen den Wechsel von $MgCu_2$ -Typ zum $MgZn_2$ -Typ hervorruft, wie er auch in den Systemen $Mg—Cu—Al$ ⁶, $Mg—Cu—Ga$ ³, $Mg—Cu—Si$ ⁷, $Mg—Cu—Ge$ ³ und anderen stattfindet.

³ E. I. Gladischevsky, P. I. Kripjakevitsch, M. J. Tesljuk, O. S. Saretschnjuk und J. B. Kusma, Kristallografija [russ.] **6**, 268 (1961).

⁴ E. I. Gladischevsky und J. B. Kusma, J. Strukt. Chim. [russ.] **1**, 66 (1960).

⁵ D. I. Bardes, K. P. Gupta und P. A. Beck, Trans. AIME **221**, 1087 (1961).

⁶ F. Laves und H. J. Wallbaum, Z. anorg. allgem. Chem. **250**, 110 (1942).

⁷ H. Witte, Z. angew. Mineral. **1**, 255 (1939).