

Die Kristallstruktur des $\text{Ta}_6\text{Cu}_8\text{Be}_{15}$ und verwandter Phasen

(Kurze Mitteilung)

Von

E. Ganglberger, H. Nowotny und F. Benesovsky

Aus dem Institut für Physikalische Chemie der Universität Wien und der
Metallwerk Plansee A.G. Reutte/Tirol

(Eingegangen am 28. April 1965)

In Fortsetzung der Arbeiten an Dreistoffen von Übergangsmetallen und *B*- bzw. Metametallen wurden die Kombinationen (Ti,Zr,Nb,Ta)—Cu—Be röntgenographisch untersucht. Insbesondere war das System: Ta—Cu—Be im Anschluß an Ta—Cu—Al wegen der Möglichkeit der Herstellung von Tränklegerungen¹ Gegenstand einer eingehenden Prüfung.

Herstellung der Proben: Kalt gepreßte Pulvermischungen wurden bei 1000—1200° C einige Std. unter gegetertem Argon geblüht (Reaktion und Homogenisierung).

Der Dreistoff: Ta—Cu—Be. Über die neue Phase Ta_2Be im System: Ta—Be wurde bereits früher berichtet²; die Phasen TaBe_2 , TaBe_3 und TaBe_{12} konnten bestätigt werden. Dagegen ließen sich Ta_3Be_2 sowie $\text{Ta}_2\text{Be}_{17}$ nicht in reiner Form fassen. Im Zweistoff: Cu—Be bildet sich die *Laves*-Phase CuBe_2 relativ leicht. Das System: Ta—Cu ist, wie kürzlich erneut bewiesen³, durch eine Mischungslücke gekennzeichnet. Trotzdem treten im Dreistoff wieder ternäre Phasen auf, von welchen eine (mit komplexem Röntgenmuster) im Gebiete zwischen 10—20 At% Ta und 40—60 At% Cu auftritt, während die zweite ternäre Phase ziemlich genau bei 15 At% Ta und 30 At% Cu zu liegen kommt.

Die Phase $\text{Ta}_6\text{Cu}_8\text{Be}_{15}$. Die letztgenannte ternäre Verbindung weist auf Grund der Pulveraufnahme — Intensitätsabfolge und Gitterparameter — auf Isotypie mit der $\text{Th}_6\text{Mn}_{23}$ -Struktur hin. Ternäre Phasen dieser Art

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

² E. Ganglberger, E. Laube und H. Nowotny, Mh. Chem. **96**, 242 (1965).

³ H. Oesterreicher, H. Nowotny und R. Kieffer, Mh. Chem. **96**, 351 (1965).

sind bereits bekannt, wenn auch die Zusammensetzung wie z. B. bei Mg₆Cu₁₆Si₇ augenscheinlich verschieden ist. Eine Reihe solcher Phasen, *G*-Phasen genannt, wurden von *F. X. Spiegel*, *D. Bardos* und *P. A. Beck*⁴

Tabelle 1. Auswertung einer Pulveraufnahme von Ta₆Cu₈Be₁₅, CrK α -Strahlung

(<i>hkl</i>)	10 ³ sin ² $\vartheta_{\text{gem.}}$	10 ³ sin ² $\vartheta_{\text{ber.}}$	<i>I</i> _{beob.}	<i>I</i> _{ber.}
(111)	34,5	33,9	+s	5,4
(200)	46,1	45,2	m	14,0
(220)	90,4	90,5	—s	2,3
(311)	124,9	124,4	—s	1,0
(222)	136,7	135,7	m—st	17,1
(400)	181,3	181,0	s	1,1
(331)	214,6	214,9	st	20,0
(420)	226,2	226,2	sss	0,9
(422)	271,5	271,4	m	8,2
(511)	306,2	305,4	ssst	16,9
(333)				5,9
(440)	362,2	361,9	st	11,3
(531)	—	395,8	—	—
(600)	406,3	407,1	m	4,0
(442)				0,5
(620)	452,9	452,4	ss	1,0
(533)	—	486,3	—	—
(622)	498,3	497,6	ss	1,1
(444)	—	542,9	—	0,5
(711)	576,5	576,8	m	0,3
(551)				5,5
(640)	588,5	588,1	m	4,1
(642)	—	633,4	—	—
(731)	667,7	667,3	m	1,5
(553)				3,5
(800)	723,9	723,8	—m	2,5
(733)	757,5	757,7	st	12,9
(820)	767,2	767,4	s	1,0
(644)				1,1
(822)	814,7	814,3	sst	13,8
(660)				5,3
(751)	848,6	848,2	st	6,8
(555)				9,0
(662)	—	859,6	—	0,4
(840)	905,5	904,8	s—m	2,9
(911)	938,2	938,7	m	0,2
(753)				7,3
(842)	948,4	947,9	sst	18,0

⁴ *F. X. Spiegel*, *D. Bardos* und *P. A. Beck*, Trans. Met. Soc. AIME **227**, 575 (1963).

bei Systemen T^I (Übergangsmetall) — T^{II} — (Si,Ge) aufgefunden; sie entsprechen dem gleichen Formeltyp $T_6^I T_{16}^{II}(\text{Si,Ge})_7$, sind also ähnlich wie die Mg—Cu—Si-Phase zusammengesetzt. Aus Tab. 1 geht eine Auswertung der Ta—Cu—Be-Phase hervor, die sich von diesen Verbindungen in der Besetzung dadurch unterscheidet, daß die Be-Atome nicht nur die Si- oder Ge-Plätze, sondern auch die Metallpositionen von T^{II} teilweise besetzen. Dies ist jedoch für das Verhalten von Beryllium charakteristisch, das in manchen Berylliden gleichzeitig Metallpositionen mit einnimmt, wie z. B. bei $(\text{Cu}_{0,8}\text{Be}_{0,2})\text{Be}_2$ oder $(\text{Fe}_{0,5}\text{Be}_{0,5})\text{Be}_2$. Eine Intensitätsberechnung für Ta₆Cu₈Be₁₅ (s. Tab. 1) beweist die Aufteilung gemäß Ta₆Cu₈Be₍₁₊₆₊₈₎, das heißt, daß wegen $Z = 4$ alle Positionen des Th₆Mn₂₃-Typs, also 6e), 32f), 4b), 24d) und 32f) besetzt werden. Als Parameter wurden: $x_{\text{Ta}} = 0,193$, $x_{\text{Cu}} = 0,375$ und $x_{\text{Be}} = 0,17$ benützt. In der Dodekaeder-Ebene (110) findet man eine merklich dichte Packung, in der lediglich Lücken in $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \sim \frac{1}{4}$ usw. auffallen. Die Größe dieser Lücken könnte für kleine Nichtmetallatome ausreichend sein.

Tabelle 2. *G*-Phasen mit Be, Si und Ge sowie Gitterkonstanten

Ta ₆ Cu ₈ Be ₁₅	10,77 ₅ Å	Hf—Fe—Si	11,49 ₀ Å
Ta—Cu—Be (Be-reicher)	10,72 ₅ Å	Hf—Co—Si	11,37 ₈ Å
Nb ₆ Cu ₈ Be ₁₅	10,83 ₃ Å	Hf—Co—Ge	11,56 ₂ Å
Ti ₆ Cu ₈ Be ₁₅	10,78 ₄ Å	Hf—Ni—Ge	11,56 ₁ Å
Zr ₆ Cu ₈ Be ₁₅	11,18 ₅ Å	Ta—Ni—Ge	11,44 ₄ Å

Zu Ta₆Cu₈Be₁₅ analoge Phasen konnten in der Folge auch bei: Nb—Cu—Be, Ti—Cu—Be und Zr—Cu—Be aufgefunden werden, siehe Tab. 2. Daneben konnten die von Beck vermuteten *G*-Phasen tatsächlich beobachtet und strukturell charakterisiert werden. Zu diesem Zwecke wurden solche *G*-Phasen unmittelbar für eine Zusammensetzung $T_6^I T_{16}^{II}(\text{Si,Ge})_7$ synthetisiert. Die Gitterparameter gehen ebenfalls aus Tab. 2 hervor.