

Die Kristallstruktur von Ta_2Be

Von

E. Gangberger, E. Laube und H. Nowotny

Aus dem Institut für Physikalische Chemie der Universität Wien

(Eingegangen am 13. November 1964)

Die Phase Ta_2Be wird aus den pulverförmigen Komponenten durch Sintern bei $1300^\circ C$ hergestellt; sie kristallisiert im $CuAl_2$ -Typ.

Ta_2Be has been prepared by sintering of the components at $1300^\circ C$. The crystal structure of Ta_2Be has been found to be isotypic with $CuAl_2$.

Beryllide der Übergangsmetalle zeichnen sich gelegentlich durch bemerkenswerte Oxydationsbeständigkeit aus und weisen im Aufbau manche Parallelen mit den entsprechenden Boriden auf. In Fortsetzung früherer Untersuchungen über Beryllide¹ wurde das Paar: Ta—Be geprüft. Ein vollständiges Zustandsdiagramm von Tantal—Beryllium liegt bis jetzt nicht vor, doch werden in der Literatur die Phasen Ta_3Be_2 , $TaBe_2$, $TaBe_3$, Ta_2Be_{17} und $TaBe_{12}$ beschrieben².

Die Herstellung der Proben erfolgte nach Mischen der Pulver: Ta (0,07% Nb, 0,08% C, 0,02% Fe, 0,02% Si, 0,01% O, 0,006% H, 0,008% N) und Be (0,42% O) in den entsprechenden Verhältnissen (5, 10, 15, 20, 27, 33, 40, 45, 50, 60, 67, 75, 85, 89, 92 At% Be) und Kompaktieren zu Preßlingen durch Sintern unter gegetertem Argon bei $1300^\circ C$ (5 Std.). Als Aufnahmebehälter dienten Molybdänschiffchen, die nach dem Sintern keinerlei Angriff zeigten. Es wurde beobachtet, daß bei kurzzeitigem Erhitzen auf $1700^\circ C$ selbst ein Graphittiegel verwendet werden kann, ohne daß merkliche Carbiddbildung eintritt. Die so hergestellten Tantalberyllide haben ein silbrigweißes Aussehen. Eine röntgenographische Untersuchung dieser Proben führte zur Bestätigung der oben angegebenen Phasen, doch

¹ E. Rudy, F. Benesowsky, H. Nowotny und L. E. Toth, Mh. Chem. **92**, 692 (1961); E. Laube und H. Nowotny, Mh. Chem. **93**, 681 (1962).

² A. Zalkin, D. E. Sands, R. G. Bedford und O. H. Kriokrian, Acta Crystallogr. [Copenhagen] **14**, 63 (1961).

wurde auf der Ta-reichen Seite eine weitere Kristallart gefunden, die sehr stabil ist. Diese Phase lag in einem Ansatz mit 40 At% Be fast homogen vor, doch ist dieser Kristallart wegen Be-Verdampfung eine Ta-reichere Zusammensetzung, etwa Ta₂Be, zuzuordnen. Diese Formel wird auch dadurch nahegelegt, daß das Pulverdiagramm der neuen Phase unmittelbar Isotopie mit Ta₂B bzw. Ta₂Si erkennen läßt. In Tab. 1 ist eine Auswertung des Röntgenogramms wiedergegeben. Als Gitterparameter findet man:

$$\begin{aligned} a &= 5,997, \\ c &= 4,892 k X \cdot E. \text{ und} \\ c/a &= 0,816. \end{aligned}$$

Das Achsenverhältnis c/a bedeutet in diesem Fall ausgeprägte pseudo-hexagonale Symmetrie, was gelegentlich bei Vertretern dieses Typs, z. B. bei MnSn₂ und Ta₂Si, zutrifft. Mit einem Parameter von $x = 0,162$ ergibt sich sehr gute Übereinstimmung zwischen berechneten und beobachteten Intensitäten. Die Struktur kann demnach als ein Zwischentyp zwischen CuAl₂ und der MnSn₂-Variante aufgefaßt werden. Die Paarbildung ist mit Ta—Ta = 2,74 Å (Tab. 2) gerade noch erkennbar, doch werden die hexagonalen Waben ($K. Z. = 3$) schon vorbereitet (2 weitere Nachbarn im Abstand von 2,87 Å, Tab. 2). Es sei noch erwähnt, daß das Bauprinzip von Ta₂Be einerseits sowie von Ta₃Be₂ (U₃Si₂-Typ) andererseits ganz eng verwandt ist und von Aronsson³ ausführlich beschrieben wurde.

Zwischen Ta₂Be und Tantal wurde in Proben mit 5, 10, 15 und 20 At% Be keine weitere Phase mehr gefunden. Während Ta₂Be mit Ta₂Si übereinstimmt, fehlt im System: Ta—Be offensichtlich eine Ta-reichere Kristallart, die Ta₄Si entspricht. Diese Phase, welche sich einer genauen Erfassung bisher entzog und nicht mit der Kohlenstoff-stabilisierten Phase Ta_{4,5}Si(C) identisch ist⁴, konnte nunmehr durch Einkristall-Aufnahmen charakterisiert werden. Die Elementarzelle ist tetragonal mit: $a = 10,16$ $c = 5,18 k X \cdot E.$ und $c/a = 0,510$ (aus DK-Aufnahmen). Das Muster zeigt bemerkenswerte Ähnlichkeit mit der σ -Phase einerseits und dem Ni₃P-Typ andererseits, doch ist das Silicid weniger symmetrisch aufgebaut als diese genannten Phasen. Vor kurzem erschien eine Mitteilung von Schubert, Raman und Rossteutscher⁵, wonach diese Kristallart die Zusammensetzung Ta₃Si und die Struktur von Ti₃P besitzen soll. Die Gitterparameter stimmen vollkommen überein.

Dem US-Government danken wir für Unterstützung.

³ B. Aronsson, Ark. Kemi **16**, Nr. 36, 379 (1960).

⁴ A. G. Knapton, Nature [London] **175**, 730 (1955); H. Nowotny, B. Lux und H. Kudielka, Mh. Chem. **87**, 471 (1956).

⁵ K. Schubert, A. Raman und W. Rossteutscher, Naturwissensch. **51**, 506 (1964).

Tabelle 1. Auswertung einer *Debye—Scherrer*-Aufnahme von Ta_2Be . Cu-K α Str

(hkl)	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$, beob.	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$, ber.	Intensität, gesch.	Intensität, ber.
(110)	32,9	32,8	s	11,3
(200)	65,7	65,7	s	13,7
(002)	98,6	98,7	ms	18,9
(211)	107,1	106,8	sst	80,6
(220)	131,4	131,4	ss	1,4
(112)		131,6		4,8
(310)	164,1	164,2	mst	10,8
(202)		164,4		8,4
(222)	—	230,1	—	0,7
(321)	238,1	238,1	sss	0,9
(400)	262,9	262,7	m	3,0
(312)		262,9		8,5
(330)	295,8	295,6	s	6,8
(411)	303,8	303,8	st	12,7
(213)		304,2		15,5
(420)	328,2	328,4	sss	0,9
(402)	361,3	361,4	s	3,7
(332)	394,3	394,3	m	8,8
(004)		394,9		2,2
(510)	427,0	426,9	sss—ss	0,3
(422)		427,1		0,8
(114)	—	427,7	—	0,5
(431)	—	435,2	—	0,1
(323)	—	435,6	—	0,2
(204)	460,7	460,6	ss—sss	1,3
(521)	500,9	500,9	mst	8,6
(413)		501,3		6,0
(440)	525,3	525,4	sss	0,5
(512)		525,6		0,6
(224)	—	526,2	—	0,3
(530)	559,2	558,3	s	1,0
(314)		559,1		3,4
(600)	591,1	591,1	s ⁻	2,7
(442)	624,3	624,2	sss	0,7
(611)	632,8	632,2	sss	0,7
(433)		632,6		0,1
(620)	657,0	656,8	ms	1,1
(532)		657,0		1,6
(404)	—	657,6	—	1,8
(602)	690,5	689,8	m ⁺	5,3
(334)		690,4		5,4
(541)	698,6	697,9	st ⁺	6,1
(523)		698,3		7,7
(215)	—	699,1	—	6,6
(424)	723,1	723,3	sss	0,9
(622)	755,3	755,5	s	2,4

Tabelle 1 (Fortsetzung)

(hkl)	10 ³ · sin ² φ, beob.	10 ³ · sin ² φ, ber.	Intensität, gesch.	Intensität, ber.
(631)	—	763,6	—	0,1
(710)	821,4	821,0	ss—sss	0,8
(550)		821,0		0,2
(514)		821,8		0,5
(613)	—	829,7	—	0,5
(325)	—	830,5	—	0,1
(640)	853,6	853,8	ss	2,3
(006)	888,6	888,5	ss—sss	2,2
(721)	895,6	894,9	sst	8,1
(543)		895,3		9,8
(415)		896,1		8,7
(712)	920,3	919,7	ms	3,0
(552)		919,7		0,4
(444)		920,3		1,6
(116)	953,2	921,3	st ⁺	1,0
(730)		952,4		6,2
(642)		952,6		10,0
(534)	—	953,2	—	4,8
(206)		954,2		3,2
(633)	—	961,0	—	0,1
(604)	986,0	986,0	st	26,5

Tabelle 2. Interatomare Abstände in Å

Atom	Nachbar	K.Z.	Abstand
Be	Be	2	2,45
	Ta	8	2,55
Ta	Be	4	2,55
	Ta	1	2,74
	Ta	2	2,87
	Ta	4	3,12
	Ta	4	3,18