

# Strukturen von neuen *SE*-Verbindungen, 1. Mitt.

Von

**E. Laube**

Aus dem Institut für Physikalische Chemie der Universität Wien

(Eingegangen am 31. Jänner 1966)

Die Phasen  $\text{GdZn}_{12}$ ,  $\text{TbZn}_{12}$ ,  $\text{DyZn}_{12}$  und  $\text{YbZn}_{11}$  werden aus den metallischen Komponenten hergestellt und kristallchemisch untersucht.  $\text{GdZn}_{12}$ ,  $\text{TbZn}_{12}$  und  $\text{DyZn}_{12}$  kristallisieren im  $\text{ThMn}_{12}$ -Typ,  $\text{YbZn}_{11}$  ist isotyp mit  $\text{BaCd}_{11}$ .

The phases  $\text{GdZn}_{12}$ ,  $\text{TbZn}_{12}$ ,  $\text{DyZn}_{12}$  and  $\text{YbZn}_{11}$  have been prepared from the metallic components and examined by X-rays.  $\text{GdZn}_{12}$ ,  $\text{TbZn}_{12}$  and  $\text{DyZn}_{12}$  are crystallising with the  $\text{ThMn}_{12}$ -type,  $\text{YbZn}_{11}$  is isotypic with  $\text{BaCd}_{11}$ .

## Probenherstellung

Die frischgefeilten *SE*-Metalle wurden je nach Ansatz mit verschiedenen Mengen Zn-Pulver in Quarzampullen unter Vak. eingeschmolzen und bei etwa 400° C, knapp unter dem Schmelzpunkt des Zinks, zur Reaktion gebracht. Anschließend wurden die Proben einige Tage bei etwa 800° C geüht.

## Die Verbindungen *SE*- $\text{Zn}_{12}$

Im Zweistoff Y—Zn ist bereits eine Verbindung vom  $\text{ThMn}_{12}$ -Typ bekannt<sup>1</sup>. Da ein Teil der *SE*-Metalle fast die gleichen Atomradien hat wie das Yttrium, war die Existenz weiterer Vertreter dieses Typs zu erwarten. Tatsächlich konnten in den Zweistoffen (Gd, Tb, Dy)—Zn Verbindungen mit  $\text{ThMn}_{12}$ -Struktur gefunden werden. Die Gitterparameter sind in Tab. 1 zusammengestellt, sie stehen in guter Relation zu den Atomradien. Die Auswertung der *Debye—Scherrer*-Aufnahme einer Legierung, gemäß Ansatz mit 12 At% Gd—Rest Zn, ist aus Tab. 2 ersichtlich. Ein Intensitätenvergleich zeigte die Isotypie der drei Phasen.

<sup>1</sup> J. B. Kusma und E. Laube, Mh. Chem. **96**, 1496 (1965).

Tabelle 1. Gitterparameter von  $\text{GdZn}_{12}$ ,  $\text{TbZn}_{12}$  und  $\text{DyZn}_{12}$   
( $a$  und  $c$  in Å) $\text{GdZn}_{12}$   $a = 8,90_0$ ,  $c = 5,20_5$  und  $c/a = 0,585$  $\text{TbZn}_{12}$   $a = 8,88_4$ ,  $c = 5,20_0$  und  $c/a = 0,585$  $\text{DyZn}_{12}$   $a = 8,88_0$ ,  $c = 5,19_9$  und  $c/a = 0,585$ Tabelle 2. Auswertung der Debye—Scherrer-Aufnahme einer  
Legierung—gemäß Ansatz—mit 12,0 At% Gd—Rest Zn;  
CuK $\alpha$ —Strahlung:  $\text{GdZn}_{12}$ 

( $hkl$ )	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , gem.	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , ber.	Int. gesch.	Int. ber.
(110)	—	15,0	—	3
(101)	29,3	29,4	sss	2
(200)	—	30,0	—	0
(211)	59,8	59,3	ms	21
(220)		59,9		3
(310)	75,1	74,9	ss	10
(002)	87,9	87,6	s	17
(301)	89,4	89,3	m	50
(112)	—	102,5	—	0
(202)	117,5	117,5	mst	72
(321)	119,7	119,3	sst	100
(400)		119,8		54
(330)	134,9	134,8	ss	5
(222)	147,7	147,5	m	33
(411)	149,6	149,2	m —	8
(420)		149,8		15
(312)	162,8	162,5	ss	6
(510)	194,9	194,7	ss	6
(103)	—	204,5	—	0
(402)	207,5	207,4	sss	1
(501)	—	209,1	—	0
(431)	208,9	209,1	ss	5
(332)	222,6	222,4	ss	5
(213)	234,3	234,5	sss	2
(422)	238,8	237,4	s +	9
(521)		239,1		2
(440)		239,7		5
(530)	254,5	254,6	ss +	8
(303)	264,5	264,4	ss +	9
(600)	—	269,6	—	1
(512)	282,4	282,3	ss	6
(323)	294,2	294,4	ms	22
(611)	299,0	299,0	ss +	3
(620)		299,6		6
(413)		324,4		2
diffus (442)	325,7	327,2	ss	1
(541)		329,0		1
(532)		342,2		ss +

Fortsetzung (Tabelle 2)

(hkl)	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , gem.	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , ber.	Int. gesch.	Int. ber.
(004)	350,5	350,3	ss +	9
(602)	358,0	357,2	m +	23
(631)		358,9		19
(114)	—	365,3	—	0
(550)	374,8	374,5	sss	3
(710)	—	374,5	—	0
(204)	—	380,2	—	0
(433)	385,8	384,3	ss	2
(503)		384,3		0
(622)		387,2		2
(701)	—	388,9	—	0
(640)	—	389,5	—	0
(224)	—	410,2	—	0
(523)	—	414,2	—	1
(721)	419,2	418,8	sss	3
(314)	—	425,2	—	1
(730)	—	434,4	—	0
(712)	462,5	462,1	ss—sss	1
(552)		462,1		4
(404)	470,3	470,1	ss	11
(613)	—	474,1	—	1
(642)	478,2	477,0	s	11
(651)		478,8		1
(800)		479,3		6
(334)	—	485,1	—	1
(424)	500,0	500,1	sss	4
(543)	—	504,1	—	0
(741)	—	508,7	—	0
(811)	—	508,7	—	0
(820)	509,6	509,3	sss —	1
(732)	—	522,0	—	0
(633)	534,0	534,1	ss	11
(660)	539,2	539,3	sss	3
(514)	545,3	545,0	sss	2
(750)	—	554,2	—	0
(105)	—	554,8	—	0
(703)	—	564,0	—	0
(802)	—	566,9	—	0
(831)	568,7	568,6	ss	8
(215)	—	584,7	—	0
(444)	590,3	589,9	sss	2
(723)	596,2	594,0	ss—sss	2
(822)		596,9		3
(840)	598,8	599,2	sss	3
(534)	604,8	604,9	sss	4
(910)	614,2	614,2	sss	1
(305)		614,7		2

Fortsetzung (Tabelle 2)

( <i>hkl</i> )	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , gem.	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , ber.	Int. gesch.	Int. ber.
(604)	—	619,9	—	1
(662)	—	626,8	—	0
(901)	—	628,6	—	0
(752)	—	641,8	—	0
(325)	644,5	644,7	ss	8
(624)	649,9	649,9	sss	4
(653)	—	653,9	—	1
(921)	658,6	658,5}	sss	1
(761)		658,5}		3
(930)	674,3	674,1	sss	3
(415)	—	674,6	—	0
(813)	—	683,9	—	0
(743)	—	683,9	—	0
(842)	—	686,7	—	0
(851)	—	688,5	—	0
(912)	701,8	701,7	sss	3
(714)	—	724,8	—	0
(554)	724,7	724,8	sss	3
(770)	734,0	734,0}	sss	1
(435)		734,5}		1
(505)	—	734,5	—	0
(644)	—	739,7	—	0
(833)	743,9	743,8	ss	8
(941)	—	748,4	—	0
(1000)	—	749,0	—	0
(860)	—	749,0	—	0
(932)	762,0	761,6	ss	6
(525)	—	764,5	—	0
(1011)	778,9	778,3}	sss	1
(1020)		778,9}		1
(734)	—	784,7	—	0
(006)	—	788,1	—	1
(950)	793,9	793,9	ss—sss	5
(116)	—	803,1	—	0
(903)	—	803,7	—	0
(206)	818,1	818,1	ss	7
(772)	821,4	821,6	sss	3
(615)	—	824,4	—	1
(804)	829,3	829,6	ss—s	13
(923)	833,3	833,6}	ss—sss	1
(763)		833,6}		4
(862)	836,5	836,5}	m	14
(1002)		836,5}		10
(1031)	—	838,3	—	1
(226)	848,0	848,0	sss	4
(545)	—	854,4	—	0
(824)	859,7	859,6	sss	2

Fortsetzung (Tabelle 2)

$(hkl)$	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , gem.	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , ber.	Int. gesch.	Int. ber.
(316)}	863,3	863,0}	sss	1
(853)}		863,6}		1
(1022)}	866,9	866,5}	ss	5
(871)}		868,2}		3
(1040)	—	868,8	—	0
(952)	881,4	881,5	s—	13
(635)	884,1	884,3	s	15
(664)	889,7	889,5	ss	9
(961)	898,3	898,2	sss	3
(754)	—	904,5	—	0
(406)	—	907,9	—	0
(1110)	—	913,7	—	0
(705)	—	914,3	—	1
(336)	923,1	922,9	sss	2
(943)	—	923,5	—	0
(1101)	928,1	928,1	ss—sss	4
(426)	937,8	937,9	ss—sss	5
(725)	944,3	944,3	ss—sss	5
(844)	949,4	949,4	s	17
(1013)	953,5	953,5	sss	2
(1042)	956,4	956,4	ss—s	12
(1051)}	958,6	958,1}	m	2
(1121)}		958,1}		19
(880)}		958,7}		6
(914)	964,4	964,4	ss	9
(970)	—	973,7	—	0
(1130)	973,7	973,7	sss	3
(516)	982,8	982,8	ss	9

Tabelle 3. Auswertung der *Debye—Scherrer*-Aufnahme einer Legierung — gemäß Ansatz — mit 7,7 At% Yb—Rest Zn;  $\text{CuK}\alpha$ -Strahlung:  $\text{YbZn}_{11}$

$(hkl)$	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , gem.	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , ber.	Int. gesch.	Int. ber.
(101)	—	18,0	—	—
(200)	—	20,9	—	—
(211)	38,8	38,8	ss	5,1
(220)	41,8	41,7	sss	1,8
(002)	—	51,0	—	—
(301)	59,7	59,7	ss	4,6
(112)	61,4	61,4	s	8,1
(202)	71,8	71,8	sss	1,3
(321)	80,7	80,6	m	20,3
(400)	83,5	83,5	ss	4,9
(411)	101,2	101,4	ss—	3,5

Fortsetzung (Tabelle 3)

(hkl)	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , gem.	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , ber.	Int. gesch.	Int. ber.
(312) }	103,9	103,1	sst	46,7
(420) }		104,3		34,8
(103)	119,8	119,9	s	14,8
(402)	134,3	134,4	ss	7,5
(312)	140,9	140,7	ss	5,2
(431) }	143,4	143,2	m +	9,7
(501) }		143,2		11,5
(332)	—	144,9	—	—
(422)	155,2	155,3	s	14,7
(303)	161,6	161,6	sss	0,8
(521) }	164,0	164,0	ss —	0,8
(440) }		164,6		0,7
(323)	182,6	182,5	ss	3,0
(512) }	187,4	186,6	ss	2,3
(600) }		187,8		2,0
(413)	203,3	203,3	ss	4,3
(004)	—	203,8	—	—
(611)	206,1	205,8	ss	2,6
(620)	208,9	208,7	sss	0,7
(204)	224,8	224,7	ss —	2,1
(541) }	227,7	226,6	m	4,2
(532) }		228,3		6,5 diffus
(602)	238,8	238,8	sss	1,3
(503)	—	245,0	—	—
(433) }	245,5	245,0	s —	1,3
(224) }		245,6		5,7
(631)	247,7	247,5	sss	1,1
(314)	256,1	256,0	sss	0,8
(622)	—	259,6	—	—
(523)	266,0	265,9	ss —	1,9
(701)	268,4	268,4	ss	3,4
(640)	271,5	271,3	sss	1,3
(404)	—	287,3	—	—
(721)	289,5	289,2	sss	0,5
(613)	—	307,7	—	—
(424)	307,9	308,2	ss	3,9
(712) }	311,9	311,8	mst	5,8
(552) }		311,8		7,8
(642) }	323,2	322,2	sss	0,7
(105) }		323,7		1,0
(543)	—	328,5	—	—
(651)	330,6	331,0	sss	1,1
(800)	333,9	333,9	ss	2,6
(514)	339,7	339,5	ss	3,0
(215)	344,6	344,6	sss	1,0
(633)	—	349,4	—	—

Fortsetzung (Tabelle 3)

(hkl)	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , gem.	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , ber.	Int. gesch.	Int. ber.
(741)	352,1	351,8	ss	1,3
(811)		351,8		0,6 diffus
(732)		353,5		1,6
(820)	—	354,7	—	—
(305)	365,5	365,5	ss	3,1
(703)	370,6	370,3	sss	1,2
(444)	—	370,8	—	—
(660)	—	375,6	—	—
(534)	381,5	381,2	ss	3,8
(802)	384,9	384,8	sss	1,6
(325)	386,6	386,3	sss	0,7
(723)	391,7	391,2	sss	0,5
(604)		391,6		1,1
(831)	393,5	393,6	ss —	2,0
(822)	—	405,7	—	—
(415)	—	407,2	—	—
(624)	412,3	412,5	s —	4,8
(840)	417,4	417,3	s	7,1
(653)	—	432,9	—	—
(901)	—	435,3	—	—
(752)	—	437,0	—	—
(435)	—	448,9	—	—
(505)	448,6	448,9	sss	0,6
(743)	453,8	453,8	ss —	1,8
(813)	—	453,8	—	—
(921)	—	456,2	—	—
(761)	456,4	456,2	sss	0,6
(006)	—	458,6	—	—
(842)	—	468,3	—	—
(116)	468,6	469,1	sss	1,2
(525)	—	469,8	—	—
(644)	475,6	475,1	ss	1,5 diffus
(851)		477,0		0,8
(912)	—	478,7	—	—
(206)	479,1	479,5	sss	1,4
(833)	495,6	495,5	sss	1,0
(734)	506,1	506,4	ss —	2,0
(316)	510,5	510,8	sss	0,5
(615)	—	511,5	—	—
(941)	519,2	518,8	sss	0,8
(932)	520,9	520,5	m —	4,7
(1000)		521,7		1,7
(860)		521,7		1,0
(545)	532,3	532,4	s —	3,0
(903)	537,5	537,2	ss —	1,9
(804)	—	537,7	—	—

Fortsetzung (Tabelle 3)

(hkl)	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , gem.	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , ber.	Int. gesch.	Int. ber.
(1011)	540,1	539,6	sss	1,0
(406)	541,8	542,1	sss	1,1
(1020)	—	542,5	—	—
(336)	552,3	552,5	ss —	1,8
(635)	—	553,3	—	—
(763)	—	558,1	—	—
(923)	558,4	558,1	ss —	0,5
(824)		558,6		1,1
(772)	562,7	562,2	ss	2,4
(426)	—	563,0	—	—
(1002)	573,0	572,6	ss —	0,8
(862)		572,6		0,8
(705)	—	574,1	—	—
(853)	579,0	579,0	s —	2,6
(664)		579,4		1,5
(1031)	—	581,4	—	—
(754)	—	589,9	—	—
(1022)	—	593,5	—	—
(516)	594,5	594,3	ss	2,1
(725)	—	595,0	—	—
(871)	603,0	602,2	ss —	0,8
(952)		603,9		0,7
(1040)	—	605,1	—	—
(943)	621,0	620,7	sss	0,7
(844)		621,2		0,5
(961)	622,7	623,1	sss	0,6
(107)	—	629,5	—	—
(914)	—	631,6	—	—
(536)	636,1	636,0	sss	1,1
(655)	—	636,7	—	—
(1013)	642,0	641,6	sss	0,7
(1101)	—	644,0	—	—
(606)	—	646,4	—	—
(217)	650,3	650,3	sss	0,7
(1042)	—	656,1	—	—
(745)	—	657,6	—	—
(815)	657,8	657,6	sss	0,9
(1121)	664,4	664,8	sss	0,8
(1051)	—	664,8	—	—
(626)	—	667,3	—	—
(880)	—	667,8	—	—
(307)	—	671,2	—	—
(934)	—	673,4	—	—
(1033)	683,3	683,3	sss	0,5
(1112)	687,3	687,4	ss	1,7
(327)	—	692,1	—	—
(835)	699,4	699,3	sss	0,5



Fortsetzung (Tabelle 3)

(hkl)	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , gem.	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , ber.	Int. gesch.	Int. ber.
(873)	—	704,2	—	—
(1060)	—	709,5	—	—
(417)	—	712,9	—	—
(716)	719,2	719,5	sss	0,6
(556)	—	719,5	—	—
(963)	—	725,0	—	—
(1004)	725,4	725,5	ss	0,8
(864)		725,5		1,3
(1141)	—	727,4	—	—
(1132)	729,3	729,1	m	0,5
(972)		729,1		4,2
(646)		729,9		0,5
(905)	—	741,1	—	—
(1103)	—	745,9	—	—
(1024)	746,3	746,4	s —	2,8
(1200)	—	751,2	—	—
(437)	754,5	754,7	s —	1,1
(507)		754,7		2,0
(954)	756,8	756,8	ss	2,0
(1062)	761,2	760,4	s —	0,5
(736)		761,2		1,6
(925)		761,9		0,6
(765)	—	761,9	—	—
(1123)	767,1	766,8	sss	0,5
(1053)		766,8		0,5
(1211)	—	769,2	—	—
(981)	769,4	769,2	sss	0,6
(1220)	772,3	772,1	ss	2,3
(527)	—	775,5	—	—
(855)	—	782,8	—	—
(1071)	790,3	790,0	sss	1,3
(806)	792,5	792,5	sss	1,3
(1202)	—	802,2	—	—
(1044)	809,2	809,0	sss	1,2
(1231)	—	810,9	—	—
(1152)	813,3	812,6	s	3,0
(826)		813,4		2,1
(008)	—	815,4	—	—
(617)	817,4	817,3	sss	0,5
(1222)	823,4	823,0	ss	1,8
(945)		824,5		0,6
(1143)	—	829,4	—	—
(1161)	832,0	831,8	sss	0,5
(1240)	834,6	834,7	s —	3,3
(208)	837,2	836,2	s —	2,5
(547)		838,1		1,1
(1114)	—	840,3	—	—

Fortsetzung (Tabelle 3)

(hkl)	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ gem.	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , ber.	Int. gesch.	Int. ber.
(756)		844,7		5,1
(1015)	844,8	845,4	s	0,5
(1080)	855,4	855,6	ss	2,9
(228)	—	857,1	—	—
(637)	859,1	859,0	sss	0,7
(318)	—	867,5	—	—
(1213)	—	871,1	—	—
(983)	871,0	871,1	sss	0,6
(884)	—	871,6	—	—
(846)	—	876,0	—	—
(707)	879,6	879,9	sss	0,8
(1134)	—	882,0	—	—
(974)	881,9	882,0	ss —	2,2
(1242)		885,6		1,6
(916)	886,4	886,4	s	3,3
(1035)		887,1		0,9
(1073)	891,8	892,0	sss	0,8
(1301)	—	894,4	—	—
(1251)	894,5	894,4	ss	3,3
(992)	—	896,1	—	—
(408)		898,8		4,1
(727)	899,3	900,8	s —	0,9
(1082)		906,5		2,9
(875)	907,6	908,0	s	4,1
(1233)		912,8		4,7
(1064)	913,0	913,3	m	4,5
(1321)	915,0	915,2	ss —	1,6
(428)	—	919,7	—	—
(936)	928,2	928,2	sss	0,5
(965)	—	928,9	—	—
(1163)	—	933,7	—	—
(1312)		937,8		5,3
(1172)	938,2	937,8	m —	0,8
(1260)		939,0		1,1
(657)	942,3	942,5	sss	0,7
(1105)	949,8	949,7	ss	1,8
(518)	—	951,0	—	—
(1204)	—	955,1	—	—
(1091)	956,8	957,0	ss —	2,2
(747)		963,4		2,8
(817)	964,2	963,4	s —	0,6 diffus
(1154)		965,5		1,3
(776)	—	969,9	—	—
(1125)	—	970,6	—	—
(1055)	970,7	970,6	sss	1,5
(1224)	975,8	975,9	s —	4,6

Fortsetzung (Tabelle 3)

<i>(hkl)</i>	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , gem.	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$ , ber	Int. gesch.	Int. ber.
(1341)}	977,9	977,8}	ss	1,1
(1181)}		977,8}		0,5
(1332)	—	979,6	—	—
(1006)	—	980,3	—	—
(866)	980,3	980,3	sss	0,8
(448)	982,3	982,3	mst	10,3

YbZn<sub>11</sub>

Der ThMn<sub>12</sub>-Typ wird im Zweistoff Yb—Zn nicht ausgebildet, aber es existiert eine Verbindung mit BaCd<sub>11</sub>-Struktur.

Die Gitterkonstanten von YbZn<sub>11</sub> wurden errechnet zu

$$a = 10,66_3 \text{ \AA}, c = 6,82_4 \text{ \AA} \text{ und } c/a = 0,640.$$

Die Auswertung des Debyeogramms einer Legierung mit einem Ansatz von 7,7 At% Yb—Rest Zn ist aus Tab. 3 ersichtlich.

Herrn Prof. Dr. *H. Nowotny*, dem Vorstand des Instituts für Physikalische Chemie, danke ich herzlich für anregende Diskussionen.