

Neue Perowskitcarbide

Von

H. Haschke, H. Nowotny und F. Benesovsky

Aus dem Institut für physikalische Chemie der Universität Wien
und der Metallwerk Plansee AG., Reutte, Tirol

Mit 2 Abbildungen

(Eingegangen am 6. Oktober 1966)

Seltene Erdmetalle bilden mit Metametallen und Kohlenstoff verhältnismäßig stabile ternäre Phasen der ungefähren Zusammensetzung $(SE)_3MC_x$, die mit Perowskitstruktur kristallisieren¹. Die Menge an Kohlenstoff ist indessen nicht in allen Fällen genau bekannt, doch wird von *Rosen* und *Sprang*² für einige Al-haltige Perowskitcarbide gezeigt, daß die $[T_6X]$ -Oktaeder entweder teilweise oder ganz aufgefüllt sein können. Für den Nachweis der geordneten metallischen Wirtzelle eignet sich bei den *SE*-Perowskiten besonders gut Aluminium, da infolge des hier merklichen Unterschiedes im Streuvermögen die Linien mit gemischten Indizes deutlich hervortreten.

Es wurden deshalb folgende Carbide nach der schon früher beschriebenen Methode¹ hergestellt und röntgenographiert (Tab. 1).

Tabelle 1. $(SE)_3AlC$ -Verbindungen

Phase	Gitterparameter, (Å)	Herstellungsbedingungen	Bemerkung
Tb ₃ AlC	4,87 ₆	800° C, 70 Stdn. + 700° C, 50 Stdn.	homogen
Er ₃ AlC	4,79 ₂	800° C, 70 Stdn. + 700° C, 50 Stdn.	homogen
Tm ₃ AlC	4,77 ₆	800° C, 70 Stdn. + 700° C, 50 Stdn.	nicht homogen

¹ H. Haschke, H. Nowotny und F. Benesovsky, Mh. Chem. **97**, 716, 1045, 1469 (1966); W. Jeitschko, H. Nowotny und F. Benesovsky, Mh. Chem. **95**, 1040 (1964).

² S. Rosen und P. G. Sprang, 13th Amer. Confer. Applic. of X-ray Analysis, Denver (Colo.) 1965.

Eine vollständige Auswertung der Pulveraufnahme von Er_3AlC (Abb. 1) geht aus Tab. 2 hervor. Die beobachteten und berechneten Intensitäten stimmen sehr gut überein, so daß die Cu_3Au -Wirtstruktur

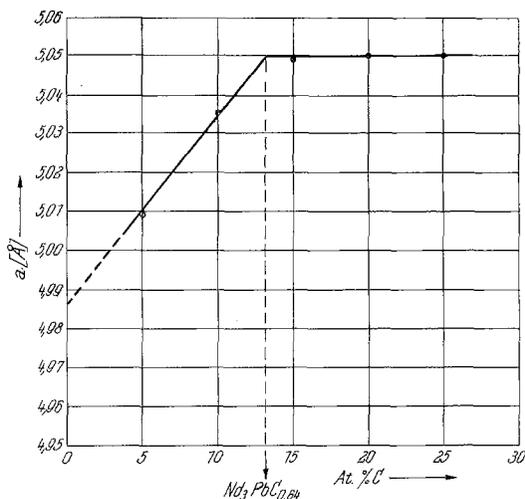


Abb. 1. Gitterparameter der Perowskitcarbidgephase Nd_3PbC_x als Funktion des C-Gehaltes (x)

damit bestätigt ist; das Streuvermögen des Kohlenstoffs macht sich praktisch nicht bemerkbar. Im Falle von Terbium besteht auch die C-freie Tb_3Al -Phase mit Cu_3Au -Struktur ($a = 4,79_4 \text{ \AA}$).

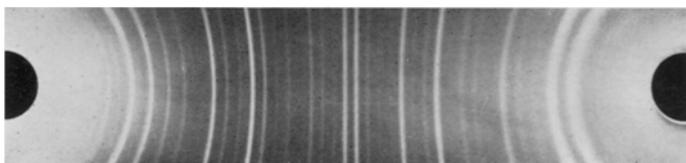


Abb. 2.

Der Einbau des Kohlenstoffatoms in das Wirtgitter wurde im System: $\text{Nd}-\text{In}-\text{C}^1$ sowie neuerdings in $\text{Nd}-\text{Pb}-\text{C}$ geprüft. Während im ersten Fall eine allmähliche Auffüllung der binären Phase Nd_3In bis zu $\text{Nd}_3\text{InC}_{0,7}$ erfolgt, tritt bei $\text{Nd}-\text{Pb}-\text{C}$ (800°C) ein abgeschlossener Homogenitätsbereich der Perowskitphase von $\text{Nd}_3\text{PbC}_{0,2}$ bis $\text{Nd}_3\text{PbC}_{0,6}$ auf. Der Verlauf des Gitterparameters ist aus Abb. 2 ersichtlich. Es sei noch bemerkt, daß $\text{Nd}_3\text{InC}_{0,7}$ sowie $\text{Nd}_3\text{PbC}_{0,2-0,6}$ mit Nd_3C und Nd im Gleichgewicht stehen (800°C).

Tabelle 2. Auswertung einer Pulveraufnahme von Er_3AlC (Cu-K α -Strahlung)

(hkl)	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$, beob.	$10^3 \cdot \sin^2 \theta$, ber.	Int., beob.	Int., ber.
(100)	26,9	25,9	m	25,2
(110)	52,1	51,8	m —	22,2
(111)	78,8	77,6	sst	100,0
(200)	104,2	103,5	st	51,7
(210)	131,5	129,4	s +	13,4
(211)	155,7	155,3	s	10,9
(220)	208,6	207,0	st	37,3
(300) (221)	233,3	232,9	s	6,2
(310)	259,0	258,8	ss	3,2
(311)	285,3	284,7	sst —	43,0
(222)	312,0	310,6	m	11,5
(320)	336,5	336,4	ss	2,6
(321)	364,8	362,3	s —	3,5
(400)	415,1	414,1	s +	5,6
(410) (322)	441,0	440,0	s —	3,4
(411) (330)	466,2	465,8	sss	1,9
(331)	492,5	491,7	m +	18,2
(420)	518,2	517,6	m +	17,8
(421)	544,0	543,5	ss	2,9
(332)	570,0	569,4	sss	1,1
(422)	622,0	621,1	m +	17,1
(500) (430)	646,6	647,0	ss	1,7
(431) (510)	672,4	672,3	ss	3,1
(511) (333)	698,4	698,8	st	19,9
(520) (432)	750,0	750,5	ss	4,3
(521)	775,2	776,4	ss	2,4
(440)	827,8	828,2	m —	10,7
(522) (441)	853,2	854,0	ss	3,7
(530) (433)	879,1	879,9	ss	3,7
(531)	904,9	905,8	st	54,6
(600) (442)	929,7	931,7	st	52,4
(610)	956,7	957,6	sss	3,5
(611) (532)	982,5	983,4	s +	13,5