

Phasen mit Diamant-Unterstruktur in ternären Beryllium-Legierungen

Von

H. H. Stadelmaier und G. Hofer

Aus dem Department of Engineering Research
der North Carolina State University, Raleigh (N. C.), USA

(Eingegangen am 18. Oktober 1966)

In den Systemen Be—Cu—Mg, Be—Cu—Al, Be—Cu—Si, Be—Cu—Zn, Be—Cu—Ge, Be—Cu—In wurden ternäre *Laves*-phasen mit dem kubischen Cu_2Mg -Strukturtyp gefunden. Der Dreistoff Be—Co—Si zeigt eine ternäre Phase mit C1- oder B32-Typ.

In the systems Be—Cu—Mg, Be—Cu—Al, Be—Cu—Si, Be—Cu—Zn, Be—Cu—Ge, Be—Cu—In ternary *Laves* phases with the cubic Cu_2Mg structure are found. The ternary system Be—Co—Si shows a ternary phase with the C1 or B32 type.

Bei der Durchsicht einer Reihe von Röntgenaufnahmen von Beryllium-Legierungen der Zusammensetzung $\text{Be}_2\text{M}^{\text{I}}\text{M}^{\text{II}}$ fiel eine Anzahl von Diagrammen durch ausgeprägte Interferenzen der Diamantstruktur auf. Neben den bekannten Randphasen kommen für ternäre Phasen hauptsächlich der C15-Typ und der C1-Typ in Frage. Aus C1 geht ferner durch Besetzung einer zusätzlichen Punktlage der B32-Typ hervor. Letzterer wird nahegelegt durch die Mitteilung, daß metastabiles AlLi_2Mg im B32-Typ kristallisiert¹. Das geringe Streuvermögen der Berylliumatome erschwert eine Entscheidung über ihre Gitteranordnung. Das Röntgendiagramm wird also weitgehend durch das Diamant- bzw. Wurtzitgitter der schweren Atome bestimmt. Der *Lavestyp* C15 ist kenntlich an den Interferenzen 222, 622 . . . , die im B32-Typ fehlen. Die Überstrukturlinien 200, 222, 420 werden im C1-Typ und im geordneten *Lavestyp* mit Wurtzituntergitter (C15_b) beobachtet.

¹ R. S. Busk, D. L. Leman und J. J. Casey, J. Metals 2, 945 (1950).

Die untersuchten Legierungen wurden in evakuierten Ampullen aus Quarzglas geschmolzen und im Gußzustand röntgenographiert. Die Ergebnisse sind in den Tab. 1—5 zusammengestellt. Tab. 1 zeigt eine Über-

Tabelle 1. Untersuchte Legierungen

Legierungs- zusammen- setzung	Gitterkon- stante (Å) d. kub. Phase	Deutung	Überstruktur- linien
Be ₂ FeGe	5,657	Ge + Be ₂ Fe	
Be ₂ CoSi	5,24	BeCoSi (C1) oder Be ₂ CoSi (B32)	keine
Be ₂ CoGe	5,657	Ge + binär Be—Co	
Be ₂ NiSi	5,43	Si + binär Be—Ni	
Be ₂ NiGe	5,657	Ge + binär Be—Ni	
Be ₂ CuMg	6,004	Be ₄ CuMg (C15) + Cu ₂ Mg	222
Be ₂ CuAl	6,232	Be ₂ (Cu, Al) (C15 _b) + Al ₂ Cu	200, 222, 420
Be ₂ CuSi	6,05	Be ₂ (Cu, Si) (C15) + Si + tern. Ph.	222
Be ₁₅ Cu ₈ Zn ₆	6,031	Be ₂ (Cu, Zn) (C15) + CuZn + Cu ₅ Zn ₈	222
Be ₂ CuGe	6,018	Be ₂ (Cu, Ge) (C15) + Cu ₃ Ge + Ge	222
BeCu ₂ Ge			
Be ₂ CuIn	6,028	Be ₄ CuIn (C15) + binär Cu—In	222
Si	5,431	A4	
Ge	5,658	A4	
Be ₃ Cu	5,987	C15	222

Tabelle 2. Ge (A4-Typ) in Be₂FeGe. $R = 0,065$ (Kfz. Koordinaten +)
8 Ge auf $a 0,0,0; 1/4, 1/4, 1/4$

(<i>hkl</i>)	<i>F</i> beob.	<i>F</i> ber.
111	177	155
220	193	190
311	127	127
400	157	163
331	112	110
422	137	144
333	102	98
511	102	98
440	108	129
531	73	88

sicht über die untersuchten Proben. Bei den Eisenmetall-Legierungen sieht man schon aus den Gitterkonstanten, daß die kubischen Röntgendiagramme nicht neu sind, sondern dem elementaren Silicium oder Germanium zuzuschreiben sind. Nur Be—Co—Si hat im untersuchten Bereich eine ternäre Phase mit Diamantunterstruktur, und zwar ohne Überstrukturlinien. In einer der möglichen Atomanordnungen für C1 können die Überstrukturlinien von Berylliumatomen herrühren und äußerst

Tabelle 3. Be_3Cu (C15-Typ). $R = 0,161$ (Kfz. Koord. +) 6 Cu + 2 Be auf a 0, 0, 0; $1/4, 1/4, 1/4$ statist. verteilt; 16 Be auf d $5/8, 5/8, 5/8; 5/8, 7/8, 7/8; 7/8, 5/8, 7/8; 7/8, 7/8, 5/8$

(hkl)	$ F $ beob.	$ F $ ber.
111	75	88
200	0	0
220	107	130
311	95	86
222	32	28
400	102	83
331	59	61
420	0	0
422	93	98
333	86	68
511	70	55
440	95	112
531	50	62

Tabelle 4. Be—Cu—Mg

(hkl)	Be_3CuMg (C15). $R = 0,126$ (Kfz. Koord. +) 4 Cu + 4 Mg auf a statist. verteilt.; 16 Be auf d		Be_3CuMg (B32). $R = 0,202$ (Kfz. Koord. +) 4 Cu + 4 Mg auf a 0, 0, 0; $1/4, 1/4, 1/4$ statist. verteilt.; 8 Be auf b $1/2, 1/2, 1/2; 3/4, 3/4, 3/4$	
	$ F $ beob.	$ F $ ber.	$ F $ beob.	$ F $ ber.
111	68	77	80	111
200	0	0	0	0
220	100	118	119	133
311	83	79	98	87
222	13	28	15	0
400	66	73	75	112
331	54	54	64	72
420	(11)*	0	(13)*	0
422	87	88	104	100
333	75	62	74	68
511	58	48	74	68
440	106	102	126	91
531	65	55	77	61

* Koinzidenz mit 333,511 von Cu_2Mg

schwach sein. Daher wollen wir zwischen C1 und B32 nicht unterscheiden. Einen Vergleich der beobachteten und berechneten Strukturformfaktoren für Germanium in Be_2FeGe zeigt Tab. 2. Die gute Übereinstimmung wird durch den niedrigen Wert des Zuverlässigkeitsindex $R = \frac{\sum |F_{\text{beob}}|}{\sum |F_{\text{ber}}|}$ bestätigt. Da die übrigen Phasen mit der Lavesphase Be_2Cu (mit Berylliumüberschuß²) verwandt sind, ist diese Phase

² L. Misch, Z. physik. Chem. B 29, 42 (1935).

bei der Zusammensetzung Be_3Cu untersucht worden (Tab. 3). Die ternäre Phase in Be—Cu—Mg wird in Tab. 4 als Be_4CuMg (ternärer C15-Typ) ge-
deutet, wobei Cu und Mg auf dem Diamantgitter statistisch verteilt sind.
Die Tabelle zeigt ferner, daß die Beschreibung mit der NaTl-Struktur
(B32) nicht wesentlich von der richtigen abweicht. Bei den koinzidierenden
Interferenzen 333, 511 wurden die beobachteten $|F|$ grundsätzlich nach
 $M F_{\text{ber}}^2$ aufgespalten ($M = \text{Multiplizität}$). Einen ähnlichen Vergleich der

Tabelle 5. Be—Cu—In

(hkl)	Be_4CuIn (C15). $R = 0,100$ 4 Cu + 4 Mg auf a statist. verteilt.; 16 Be auf d		Be_4CuIn (B32). $R = 0,125$ 4 Cu + 4 Mg auf a statist. verteilt.; 8 Be auf b	
	$ F $ beob.	$ F $ ber.	$ F $ beob.	$ F $ ber.
111	173	170	178	174
200	0	0	0	0
220	238	230	238	244
311	187	156	187	142
222	48	28	48	0
400	187	172	187	208
331	108	123	108	122
420	0	0	0	0
422	164	178	164	184
333	131	122	121	110
511	118	109	121	110
440	179	186	179	171
531	87	113	87	102

Strukturfaktoren zeigt Tab. 5 für Be—Cu—In . Die Phase in Be—Al—Cu
zeigt alle Überstrukturlinien, muß daher vom C15_b-Typ sein. Bei
 Be—Cu—Zn und Be—Cu—Ge läßt sich wegen des geringen Unterschiedes
im Streuvermögen der schweren Atome nicht sicher zwischen C15 und
C15_b unterscheiden. Be—Cu—Si hat den C15-Typ; die Interferenzen der
dritten Phase lassen sich keiner der bekannten Randphasen zuordnen. Wo
die Anteile der schweren Atome nicht angegeben sind, wie in $\text{Be}_2(\text{Cu, Ge})$,
vermuten wir, daß sie dadurch eingeschränkt sind, daß die Valenzelek-
tronenkonzentration die von Laves und Witte³ für diesen Typ gefundene
obere Grenze von 2,0 nicht überschreitet.

³ F. Laves und H. Witte, Metallwirtsch. 15, 840 (1936).