

Die Kristallstruktur von W_2FeB_2 (Hochtemperaturform) (Kurze Mitteilung)

Von

H. Jedlicka, H. Nowotny und P. Benesovsky

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

(Eingegangen am 29. Februar 1968)

Bei Komplexboriden vom Typ $T_2 T^II B_2$ * wurden bisher zwei verschiedene Kristallstrukturen beobachtet, der geordnete U_3Si_2 -Typ sowie der W_2CoB_2 -Typ. Die erstgenannte Struktur tritt bei Mo_2FeB_2 auf¹, die zweite z. B. bei W_2CoB_2 oder W_2FeB_2 ² in Legierungen, die nach Reaktion bei rd. 1000° C homogenisiert waren. Beiden Strukturtypen ist die trigonal prismatische Baugruppe $[T_6B]$ gemeinsam*.

Es zeigt sich nun, daß in Lichtbogenerschmolzenen Fe—W—B-Legierungen bei einem Ansatz mit 20—25 At% W, 30 At% Fe und 45—50 At% B auch der geordnete U_3Si_2 -Typ existiert, wie Tab. 1 unmitttelbar beweist. Als Gitterparameter errechnet man für einen Ansatz, der die Phase in überwiegender Menge enthielt:

$$a = 5,690 \text{ \AA}$$

$$c = 3,162 \text{ \AA} \text{ und } c/a = 0,556.$$

Das Volumen ist mit $102,4 \text{ \AA}^3$ praktisch gleich groß wie jenes der Tieftemperaturform von W_2FeB_2 ($102,8 \text{ \AA}^3$), so daß für beide Phasen dieselbe Zusammensetzung zugrunde gelegt werden kann. Damit im Einklang stehen auch die beobachteten Intensitäten, die mit dem Parametern: $x_W = 0,183$, $x_B = 0,394$, gut wiedergegeben werden. Bei anderen heterogenen Proben findet man etwas größere Gitterparameter; danach besitzt die Hochtemperaturform von W_2FeB_2 einen merklichen homogenen Bereich.

* T = Übergangsmetall.

¹ W. Rieger, H. Nowotny und F. Benesovsky, Mh. Chem. **95**, 1502 (1964).

² W. Rieger, H. Nowotny und F. Benesovsky, Mh. Chem. **97**, 378 (1966).

Bisher gelang es nicht, durch Abschrecken von aufgeschmolzenen Proben die analoge Form bei den verwandten Dreistoffen: (Mo, W)—(Co, Ni)—B zu finden.

Tabelle 1. Auswertung einer Pulveraufnahme von W_2FeB_2 (Hochtemperatur-Form); Cr-K α -Strahlung

(hkl)	$10^3 \cdot \sin^2 \theta_{\text{beob.}}$	$10^3 \cdot \sin^2 \theta_{\text{ber.}}$	Int. _{beob.}	Int. _{ber.}
110	—	81,1	n. b.	0,2
001	132,2	131,3	m	61,9
200	162,0	162,1	m ⁻	46,7
210	202,3	202,7	st	93,8
111	213,6	212,3	s ⁻	15,7
201	292,5	293,4	st ⁻	78,1
220	326,4	324,3	s ⁻	29,5
211	334,6	333,9	st	83,9
310	405,3	405,4	s ⁻	17,6
221	—	455,5	n. b.	4,1
002	528,8	525,1	s ⁻	{ 16,0
320		527,0		{ 2,3
311	—	536,6	n. b.	0,8
112	—	606,1	n. b.	0,0
400	—	648,6	n. b.	0,0
321	—	658,2	n. b.	4,5
202	689,8	687,2	m ⁻	{ 14,6
410		689,1		{ 40,0
212		727,7		{ 48,0
330	727,9	729,6	m	{ 14,0
401	782,1	779,8	ss	5,0
420	811,5	810,7	ss	2,3
411	819,7	820,8	sst	100,0
222	851,9	849,3	s ⁻	20,0
331	859,3	860,9	st ⁻	73,3
312	931,1	930,4	m	63,8
421	—	942,0	n. b.	1,7

n. b. = nicht beobachtet.