

Der Dreistoff Yttrium—Bor—Kohlenstoff

Von

J. Bauer und H. Nowotny

Aus dem Institut für physikalische Chemie der Universität Wien

Mit 4 Abbildungen

(Eingegangen am 8. März 1971)

The Ternary System Yttrium—Boron—Carbon

The ternary system yttrium—boron—carbon has been investigated by means of X-rays. The crystal structure of the phases $Y_{15}C_{19}$ (δ -phase), YB_2C_2 , YB_2C , and YBC has been derived.

Der Dreistoff Y—B—C wird an Hand von abgeschreckten Schmelzproben röntgenographisch untersucht. Folgende Phasen wurden hinsichtlich ihrer Kristallstruktur charakterisiert: $Y_{15}C_{19}$ (δ -Phase), YB_2C_2 , YB_2C und YBC.

Borcarbide von Übergangsmetallen sind mehrfach in der Literatur beschrieben, z. B. ScB_2C_2 ¹, GdB_2C_2 ², UBC ³, Mo_2BC ⁴; in einigen Fällen wurde auch die Aufteilung der Phasenfelder in solchen Systemen ermittelt. Vom kristallchemischen Standpunkt ist einerseits die Metall—Nichtmetallbindung und andererseits die Bor—Kohlenstoffbindung in diesen ternären Phasen von erheblichem Interesse. Mo_2BC weist außerdem einen beachtlich hohen Schmelzpunkt auf. Während bei UBC und Mo_2BC bekannte Strukturelemente wie z. B. B—B-Ketten auftreten, liegen bei ScB_2C_2 Bor—Kohlenstoffnetze vor, die aus 5- und 7-Ecken aufgebaut sind¹. Es wurde gefunden, daß nicht näher definierte Lanthanid-Boride⁵ der Formel LnB_x (Ln = Lanthanid-Element, $x = 3—4$) tatsächlich Borcarbide sind^{2, 6}, was auch für ein Y-Borid (Borcarbide) gilt. Aus diesem Grunde wurde der Dreistoff Y—B—C näher untersucht.

¹ G. S. Smith, Q. Johnson und P. C. Nordine, *Acta Cryst.* **19**, 668 (1965).

² P. K. Smith und P. W. Gilles, *J. inorg. nucl. Chem.* **29**, 375 (1967).

³ L. Toth, H. Nowotny, F. Benesovsky und E. Rudy, *Mh. Chem.* **92**, 794 (1961).

⁴ W. Jeitschko, H. Nowotny und F. Benesovsky, *Mh. Chem.* **94**, 565 (1963).

⁵ B. Post, D. Moskowitz und F. W. Glaser, *J. Amer. Chem. Soc.* **78**, 1800 (1956).

⁶ I. Binder, *J. Amer. Ceram. Soc.* **43**, 287 (1960).

Herstellung der Proben und Ergebnisse

Pulvermischungen der Ausgangskomponenten (Yttrium mit 99,9%, Korngröße 350 μ , Koch-Light Lab. Ltd., Colnbrook, England; Bor mit 99,8%, H. Starck, Berlin; Ruß, reinst, Degussa, Frankfurt/M.) wurden in einer Menge von 0,3 g kalt verpreßt. Die Preßlinge wurden sodann im Lichtbogen unter gegetertem Argon aufgeschmolzen. Dabei traten keinerlei Konzentrationsverschiebungen gegenüber der Einwaage (oder Verunreinigungen)

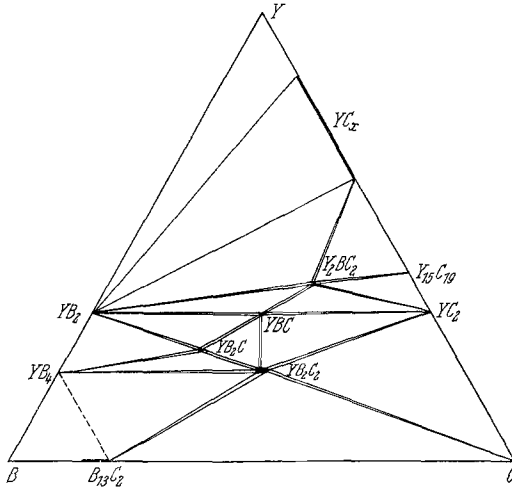


Abb. 1. Phasendiagramm im System Y—B—C (abgeschreckt); die Phase YB_{66} [Stephanie M. Richards, J. S. Kasper, Acta Cryst. **B 25**, 237 (1969)] sowie die Phasen YB_6 und YB_{12} sind nicht berücksichtigt

auf. Die erhaltenen, metallisch glänzenden Reguli sind insbesondere auf der kohlenstoffreichen Seite stark hygroskopisch, weshalb alle Proben unter *n*-Hexan aufbewahrt und manipuliert wurden. Für Pulveraufnahmen der hygroskopischen Borcarbide kamen *Markröhrchen* in Verwendung.

Rund 200 Proben wurden ohne nachträgliche Glühung im abgeschreckten Zustand röntgenographisch untersucht. Obwohl die Abschreckbedingungen nicht näher bekannt sind, ergab sich in allen Teilgebieten ein genügender Gleichgewichtszustand, der eine konsistente Aufteilung der Phasenfelder gestattet (Abb. 1). Man kann schließen, daß die aufgefundenen und relativ gut charakterisierten Phasen YB_2C_2 , YB_2C , YBC , $YB_{0,5}C$ kongruent schmelzen.

$Y_{15}C_{19}$. Pulverdiagramme von Proben im Gebiet von 40 At% Y und 60 At% C lassen in Gegenwart geringer Mengen Bor (5—10 At%) eine Phase erkennen, die offenbar einem wenig stabilen Y-Carbid entspricht.

Es hat sich nun ergeben, daß das Röntgenogramm mit jenem der δ -Phase von Carlson und Paulson⁷ übereinstimmt, sofern man die dort mit registrierten Y_2O_3 -Linien fortläßt. Demnach handelt es sich bei obigen Proben um das Yttriumcarbid bei etwa 54—58 At% C; in Zweistoffproben Y—C ließ sich

⁷ O. N. Carlson und W. M. Paulson, Trans. AIME **242**, 846 (1968).

Tabelle 1. Auswertung einer Pulveraufnahme von $Y_{15}C_{19}$
(CuK α -Strahlung)

(hkl)	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ gem.	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ ber.	$I_{\text{gesch.}}$	$I_{\text{ber.}}$
(002)	—	9.4	—	2
(101)	—	11.8	—	3
(102)	—	18.8	—	0.2
(110)	—	23.5	—	1
(112)	—	25.9	—	3
(103)	—	37.6	—	0.3
(004)	—	40.0	—	2.2
(200)	—	47.0	—	0.4
(201)	—	49.4	—	0.2
(104)	—	56.4	—	0.3
(202)	—	58.8	—	0.5
(210)	—	67.9	—	5
(211)	—	75.3	—	0.2
(114)	56.1	84.7	ss	4
(212)	—	87.0	—	31
(203)	—	94.1	—	4
(105)	67.9	96.4	sst	2
(213)	—	103.5	—	100
(204)	—	105.8	—	3
(220)	—	112.9	—	0.1
(006)	84.5	115.2	—	35
(214)	—	122.3	—	47
(222)	—	124.6	—	0.4
(301)	—	130.8	—	0.1
(106)	94.5	143.4	—	6
(302)	—	—	—	0.1
(310)	—	—	—	45
(311)	96.5	—	sst, breit	60
(205)	—	—	—	1
(312)	—	—	—	0.4
(116)	—	—	—	1.0
(303)	—	—	—	0.3
(215)	—	—	—	0.8
(224)	114.7	—	—	2
(313)	—	—	sss	12
(206)	—	—	—	0
(304)	—	—	—	0
(320)	—	—	—	1
(107)	—	—	—	4
(321)	—	—	—	0.1
(314)	—	—	—	0.8
(322)	130.8	—	ssss	0.1
(216)	—	—	—	6
(305)	—	—	—	1
(323)	—	—	—	0.1

Fortsetzung (Tabelle 1)

(hkl)	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ gem.	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ ber.	$I_{\text{gesch.}}$	$I_{\text{ber.}}$
(008)	—	150.5	—	1
(400)				0.5
(401)				0
(207)	152.7	152.9	ssss	0
(315)				5
(108)	—	159.9	—	3
(402)				0.5
(410)				0.1
(324)				0.8
(226)				0.3
(411)	—	162.3	—	0.5
(217)				3
(412)				0.1
(118)	—	169.3	—	2
(330)				0.1
(306)				2
(403)	—	171.7	—	0.6
(316)				20
(332)				0.2
(413)	—	181.0	—	0.2
(325)				2
(208)	189.4	188.1	m	1
(404)				0
(420)		190.5		21
(421)				14
(414)		0.4		
(422)	—	197.5	—	0.1
(218)	—	199.9	—	1
(109)				0
(307)				0.7
(334)	—	202.2	—	1
(326)				0.8
(317)	208.9	209.3	s	18
(405)				0.3
(423)				1
(415)	—	218.7	—	1
(228)				1
(424)				0.5
(209)	228.1	228.1	—	2
(0010)				0.4
(308)				1
(406)	—	235.2	—	0.6
(430)				0.6
(501)	238.0	237.5	ss	0
(431)				0
(219)				7
(327)				6

Fortsetzung (Tabelle 1)

(hkl)	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ gem.	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ ber.	$I_{\text{gesch.}}$	$I_{\text{ber.}}$
(1010)				0
(502)				0
(510)				0
(318)	—	244.6	—	0.4
(416)				0.1
(432)				4
(511)				0.1
(425)	—	246.9	—	2
(512)				0.1
(1110)		254.0		3
(336)	256.1		m	0.2
(503)		256.3		2.4
(433)				11
(407)	—	265.7	—	0
(513)				0.8
(2010)				1
(504)				0
(520)				0.6
(328)	273.0	272.8	s	0
(426)				14
(434)				10
(309)				0.1
(417)	276.1	275.1	ssss	6
(521)				0.1
(514)				0.5
(522)	282.4	282.2	ssss	0.1
(2110)				6
(319)	—	284.5	—	1
(1011)				0.6
(505)				0.6
(523)	—	293.9	—	0.1
(435)				0.1
(408)				0.3
(440)	—	301.0	—	0.3
(515)				0.3
(427)	303.0	303.3	ssss	6
(418)				0
(2210)				2
(442)	—	310.4	—	0
(524)				0.6
(329)	—	312.8	—	0.3
(3010)				0
(506)				0
(530)	—	319.8	—	0
(338)				0.5
(436)				1

Weitere Daten siehe Dissertation *J. Bauer*, Univ. Wien 1971.

Tabelle 2. Auswertung einer Pulveraufnahme von YB₂C₂

<i>(hkl)</i>	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ gem.	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ ber.	<i>I</i> _{gesch.}	<i>I</i> _{ber.}
(100)	41.1	41.2	mst ⁺	76
(002)	46.9	46.8	s	13
(101)	—	53.0	—	1
(110)	82.6	82.5	m	31
(102)	88.4	88.1	ssst	100
(112)	129.6	129.3	mst	55
(103)	—	146.6	—	0.1
(200)	165.4	164.9	ms	16
(201)	—	176.7	—	0.1
(004)	188.1	187.4	s	11
(210)	206.1	206.2	m	28
(202)	211.8	211.8	ms	18
(211)	—	217.9	—	0.1
(104)	229.1	228.6	s	14
(212)	253.0	253.0	ms	20
(114)	269.9	269.8	s	10
(203)	—	270.4	—	0.1
(213)	—	311.6	—	0.1
(220)	330.6	329.9	sss	3
(105)	—	334.0	—	0.1
(204)	352.1	352.3	ss	9
(300)	370.6	371.2	sss	2
(222)	377.3	376.8	s	11
(301)	—	382.9	—	0.1
(214)	394.3	393.6	ms	19
(310)	413.2	412.4	ss	7
(302)	418.3	418.0	s-ss	10
(006)	421.8	421.5	sss	0.7
(311)	—	424.1	—	0.1
(205)	—	457.7	—	0.1
(312)	459.9	459.2	s-ss	10
(106)	463.4	462.8	ss	7
(303)	—	476.6	—	0.1
(215)	—	498.9	—	0.1
(116)	503.5	504.0	ss	6
(224)	517.4	517.3	sss	3
(313)	—	517.8	—	0.1
(320)	536.6	536.1	sss	5
(321)	—	547.9	—	0.1
(304)	559.2	558.5	sss	2
(322)	583.4	583.0	ss	8
(306)	586.8	586.5	sss	4
(314)	600.5	599.8	s-ss	10
(107)	—	615.0	—	0.1
(216)	627.7	627.8	ss	6
(323)	—	641.5	—	0.1
(400)	659.5	659.9	sss	3

Fortsetzung (Tabelle 2)

(hkl)	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ gem.	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ ber.	$I_{\text{gesch.}}$	$I_{\text{ber.}}$
(305)	—	663.9	—	0.1
(401)	—	761.6	—	0.1
(410)	701.8	701.1	sss	4
(315)	—	705.2	—	0.1
(402)	706.6	706.7	sss	3
(411)	—	712.8	—	0.1
(324)	723.9	723.5	ss	9
(207)	—	738.7	—	0.1
(330)	742.4	742.3	sss	3
(412)	750.0	747.9	s	8
(008)		749.4		2
(226)		751.5		7
(403)	—	765.3	—	0.1
(217)	—	778.0	—	0.1
(332)	791.1	789.2	s	3
(108)		790.7		4
(306)		792.8		8
(413)	—	806.5	—	0.1
(420)	825.4	824.8	sss	4
(325)	—	828.9	—	0.1
(118)	832.0	931.9	sss	4
(316)	834.6	834.0	ss	9
(421)	—	836.5	—	0.2
(404)	847.2	847.2	ss	8
(422)	871.7	871.7	s	14
(414)	888.5	888.5	s	13
(208)	914.4	914.4	ss	8
(334)	927.9	929.7	s	12
(423)	—	930.2	—	0.3
(307)	—	944.9	—	0.1
(405)	—	952.6	—	0.1
(218)	955.6	955.6	m	28
(326)	957.7	957.7	ms	20

diese Phase nicht so rein erfassen, wie das z. B. in der Probe 40 At% Y, 55 At% C und 5 At% B der Fall war. In der Folge zeigte sich auch, daß eine starke Ähnlichkeit dieses Carbids (δ -Phase) mit der kürzlich strukturell aufgeklärten Phase $\text{Sc}_{15}\text{C}_{19}$ im analogen System Sc—C⁸ besteht. Eine Formel $\text{Y}_{15}\text{C}_{19}$ ist auch mit den Angaben von *Carlson* und *Paulson* sowie mit obigen Befunden am Y—B—C-Dreistoff in Einklang. Die Auswertung einer Pulveraufnahme (Tab. 1) führt wieder auf eine pseudokubische, tetragonale Elementarzelle mit:

$$a = 7.94 \text{ \AA},$$

$$c = 15.88 \text{ \AA}, \quad c/a = 2.00.$$

⁸ H. Jedlicka, H. Nowotny und F. Benesovsky, Mh. Chem. **102**, 389 (1971).

Unter Zugrundelegung der gleichen Atomparameter wie bei $\text{Sc}_{15}\text{C}_{19}$ findet man eine gute Wiedergabe der beobachteten Intensitäten.

YB_2C_2 . Pulveraufnahmen dieser Phase konnten mit einer tetragonalen Zelle gemäß:

$$a = 3.79_6 \text{ \AA}, \\ c = 7.12_4 \text{ \AA}, c/a = 1.876$$

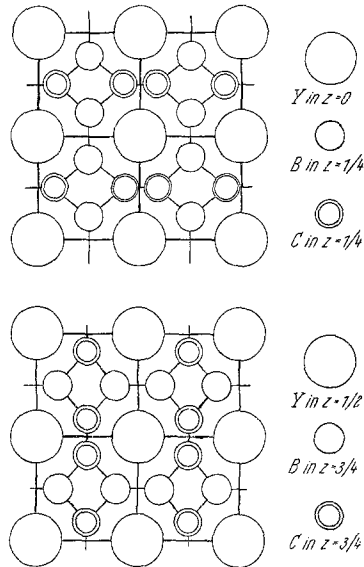


Abb. 2. Die Kristallstruktur der Phase YB_2C_2

indiziert werden. Man erkennt aus Tab. 2 unmittelbar, daß eine Zelle mit $c/2$ ebenfalls möglich ist. Damit sind die Positionen der schweren Y-Atome in 000; und 001/2; festgelegt. Für die Nichtmetallatome kommen in D_{2d}^2 (P42c) die Punktlagen 4 i) und 4 h) in Frage, da eine statistische Verteilung von Bor und Kohlenstoff — [halbe Zelle mit D_{4h}^1 : Y in 1 a) und 2 B + 2 C in 4 o] — zunächst auszuschließen ist. Diese Anordnung, 2 Y in 2 e), 4 B in 4 i), $x = 0.232$ und 4 C in 4 h), $x = 0.168$ ergibt einen ebenen B—C-Verband, der durch 4- und 8eckige Ringe gekennzeichnet ist (Abb. 2). Es liegt die Annahme nahe, daß die von *Smith* und *Gilles*² beschriebenen LnB_2C_2 -Verbindungen zu YB_2C_2 isotyp sind, zumal bereits von diesen Autoren bemerkt wurde, daß die dort angegebenen tetragonalen Elementarzellen zu verdoppeln seien. Außerdem besteht kein Zweifel über die von *Binder*⁶ hergestellte Verbindung „ YB_2C “ mit $a = 3.78$ und $c = 3.55$ ($1/2 \times 7.10$) Å, welcher demnach die Zusammensetzung YB_2C_2 zukommt.

YB_2C . Pulver- sowie DK-Aufnahmen lassen sich ebenfalls mit einer tetragonalen Zelle, gemäß: $a = 6.76_9 \text{ \AA}$, $c = 3.71_5 \text{ \AA}$, auswerten. Die kurze c -Achse weist (wie bei YB_2C_2 die kurze a -Achse) wiederum auf eine einfache Anordnung der Y-Atome hin (Y—Y-Abstand = 3.7 Å). Mit 4 Y-Atomen in 4 g) ($x = 0.313$) der Raumgruppe D_{4h}^5 P4/m3m) gelingt auch eine

Tabelle 3. Auswertung einer Pulveraufnahme der Phase YB₂C

<i>(hkl)</i>	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ gem.	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ ber.	<i>I</i> _{gesch.}	<i>I</i> _{ber.}
(110)	26.1	25.9	diffus	3
(002)	42.5	43.0	m	37
(200)	51.4	51.9	m	50
(210)	64.4	64.9	m	69
(112)	68.7	68.9	sss	7
(202)	94.5	94.9	sst	72
(220)	103.9	103.8	sss	10
(212)	107.1	107.8	sst	100
(310)	129.6	129.7	sss	7
(222)	146.4	146.7	s	18
(320)	169.3	168.6	sss	4
(004)	172.0	{171.9	m	{18
(312)	—	{172.7		{14
(114)	—	197.8	—	1
(400)	—	207.5	—	0
(322)	211.8	211.6	sss	4
(410)	220.4	220.5	m	33
(204)	233.3	223.8	ss	12
(330)	233.6	233.5	ss	13
(214)	236.5	236.7	s	20
(420)	—	259.4	—	0.1
(412)	262.2	263.5	m	32
(224)	275.3	{275.6	s	{4
(332)	—	{276.4		{12
(314)	303.0	301.6	sss	4
(422)	—	302.4	—	0.1
(430)	324.1	324.3	sss	1
(510)	—	337.2	—	0.8
(324)	340.5	340.5	sss	2.5
(432)	367.2	367.2	ss	6
(520)	—	376.1	—	0.7
(404)	—	379.3	—	0
(512)	379.0	380.2	ss	5
(006)	—	386.7	—	2
(414)	392.6	392.4	m	25
(334)	405.4	405.3	ss	10
(116)	—	412.6	—	0.2
(440)	—	415.0	—	0
(522)	419.2	419.1	ssss	2
(424)	—	431.3	—	0.1
(206)	439.9	{438.6	s	{6
(530)	—	{441.0		{7
(216)	452.0	451.5	ss	10
(442)	—	458.0	—	0
(600)	466.9	466.9	sss	2
(610)	481.7	479.9	sss	3
(532)	484.3	483.9	ss	13

Fortsetzung (Tabelle 3)

(hkl)	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ gem.	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ ber.	$I_{\text{gesch.}}$	$I_{\text{ber.}}$
(226)	491.3	490.5	sss	3
(434)	—	496.1	—	1
(514)	—	509.1	—	1
(602)	510.5	509.9	sss	4
(316)	—	{ 516.4	—	{ 3
(620)	517.4	{ 518.8	sss	{ 2
(612)	522.7	522.9	sss ⁺	8
(540)	—	531.8	—	1
(524)	—	548.0	—	0.6
(326)	—	555.3	—	1
(622)	562.7	561.8	sss	4
(542)	—	574.7	—	3
(630)	—	583.6	—	0.5
(444)	—	586.9	—	0.1
(406)	—	594.2	—	0
(416)	—	{ 607.2	—	{ 10
(534)	609.9	{ 612.8	s, breit	{ 10
(336)	620.2	620.2	sss	4
(632)	—	626.6	—	1
(604)	—	638.8	—	4
(426)	—	646.1	—	0.1
(710)	—	648.5	—	0.3
(550)	—	{ 648.5	—	{ 3
(614)	649.5	{ 651.8	sss, breit	{ 5
(640)	—	674.4	—	0
(720)	—	{ 687.4	—	{ 4
(008)	—	{ 687.5	—	{ 3
(624)	689.7	{ 690.7	s, breit	{ 3
(712)	—	{ 691.5	—	{ 0.1
(552)	—	691.5	—	4
(544)	—	703.6	—	2
(436)	711.3	711.0	sss	3
(118)	—	713.4	—	0.2
(642)	—	717.4	—	0.1
(516)	723.9	723.9	sss	3
(722)	730.1	730.4	sss	5
(208)	739.3	739.4	sss	3
(730)	—	{ 752.3	—	{ 0.7
(218)	753.0	{ 752.3	sss	{ 5.4
(634)	—	{ 755.5	—	{ 1
(526)	—	762.8	—	2
(650)	—	{ 791.2	—	{ 0.4
(228)	793.2	{ 791.2	sss, breit	{ 2
(732)	—	{ 795.2	—	{ 2
(446)	—	801.7	—	0
(318)	—	817.2	—	2

Fortsetzung (Tabelle 3)

(hkl)	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ gem.	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ ber.	$I_{\text{gesch.}}$	$I_{\text{ber.}}$
(714)		{820.4		{ 0.8
(554)	820.1	{820.4	sss	{ 7
(536)	828.0	827.7	ss	13
(800)	830.7	830.1	sss	5
(652)	—	834.1	—	2
(810)		{843.0		{ 0
(740)	843.5	{843.0	ss	{ 9
(644)	—	846.3	—	0.1
(606)		{853.6		{ 5
(328)	854.8	{856.1	sss	{ 2
(724)	859.7	859.3	ss	11
(616)	866.9	866.6	ss	10
(802)	872.7	873.0	sss	9
(820)	881.9	882.0	sss	5
(812)		{886.0		{ 0
(742)	886.4	{886.0	ss	{ 17
(408)	—	895.0	—	0.1
(626)	905.5	905.5	sss	6
(418)	907.6	908.0	m	25
(546)	918.4	918.5	sss	4
(338)	921.2	920.9	ss	12
(734)	—	924.1	—	2
(822)	924.9	924.9	s	13
(660)	—	933.8	—	2
(830)	—	946.8	—	0.1
(428)	—	946.9	—	0.2
(750)	—	959.8	—	1
(654)	—	963.0	—	2
(636)	—	970.4	—	3
(662)	—	976.8	—	4
(832)	—	989.8	—	0.7

befriedigende Wiedergabe der Intensitäten. Die Besetzung der 8 j)- und 4 h)-Lagen mit Bor- bzw. Kohlenstoffatomen führt jedoch zu nicht akzeptablen Abständen. Es wurde daher die *c*-Achse verdoppelt und folgende Zelle:

$$a = 6.769 \text{ \AA}, \\ c = 7.430 \text{ \AA}; c/a = 1.096$$

zugrunde gelegt. In der nunmehr in Frage kommenden Raumgruppe D_{4h}^{13} ($P4_2/mbc$) entspricht die Y-Position auf 8 g) mit $x = 0.313$ wieder der oben erwähnten Lage. Die übrigen Atomlagen sind:

$$8 B_I \text{ in } 8 h), x = 0.095; y = 0.595, \\ 8 B_{II} \text{ in } 8 h), x = 0.140; y = 0.035, \\ 8 C \text{ in } 8 h), x = 0.456; y = 0.322.$$

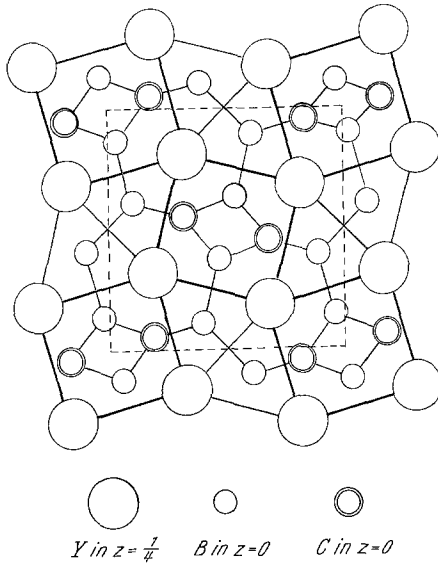


Abb. 3a

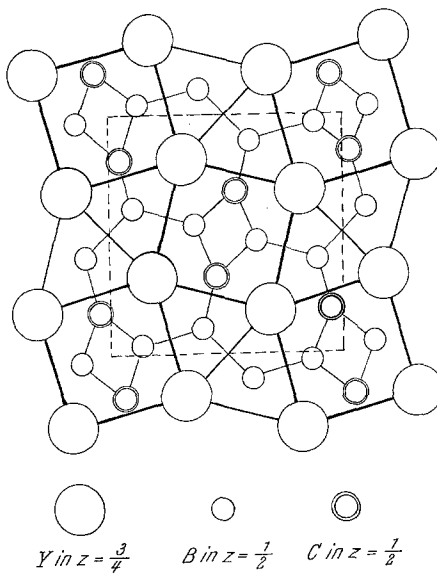


Abb. 3b

Abb. 3. Die Kristallstruktur der Phase YB_2C

Tabelle 4. Auswertung einer Pulveraufnahme der Phase YBC

(hkl)	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ gem.	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ ber.	$I_{\text{gesch.}}$	$I_{\text{ber.}}$
(020)	12.8	12.7	sss	15
(001)	45.0	45.2	m ⁺	67
(040)	51.0	50.7	sst	100
(110)	54.9	54.9	s	48
(021)	58.1	57.8	sss	2
(130)	80.2	80.3	m	58
(041)	96.0	95.9	st	70
(111)	100.1	100.1	sst	93
(060)	114.1	114.1	sss	3
(131)	125.3	125.5	sst	90
(150)	130.8	131.0	sss	9
(061)	159.0	159.3	sss	8
(151)	178.0	{176.2	m	{13
(002)	—	{180.6		
(022)	—	193.3	—	1
(080)	203.3	202.9	sss	8
(170)	207.5	{207.1	m	{28
(200)	—	{207.1		
(220)	—	219.8	—	0.5
(042)	231.2	231.3	s	20
(112)	235.0	235.6	ss	12
(081)	248.5	248.0	ss	15
(171)	252.2	{252.2	m	{23
(201)	—	{252.3		
(240)	259.1	{257.8	m	{17
(132)	—	{260.9		
(221)	—	264.9	—	0.4
(062)	—	294.7	—	1
(241)	303.0	303.0	s ⁺	23
(190)	—	308.5	—	0.1
(152)	311.1	311.6	ssss	5
(0100)	—	317.0	—	1
(260)	—	321.2	—	1
(191)	—	353.7	—	2
(0101)	363.9	{362.1	sss	{5
(261)	—	{366.4		
(082)	384.1	383.5	ssss	6
(172)	387.5	{387.7	m	{20
(202)	—	{387.7		
(222)	—	400.4	—	0.4
(003)	408.0	{406.4	sss	{3
(280)	—	{409.9		
(023)	—	419.1	—	0.1
(1110)	436.4	{435.3	ss, breit	{8
(242)	—	{438.4		
(281)	455.5	{455.1	ss	{11
(0120)	—	{456.4		

Fortsetzung (Tabelle 4)

(hkl)	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ gem.	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ ber.	$I_{\text{gesch.}}$	$I_{\text{ber.}}$
(043)	461.6	{457.1	sss	{ 6
(113)	—	{461.4	—	{ 7
(310)	—	469.1	—	2
(1111)	480.8	480.4	ss ⁻	11
(133)	486.0	486.7	ss ⁻	10
(192)	—	489.1	—	0.1
(330)	494.8	494.5	ssss	4
(0102)	—	497.6	—	1
(0121)	—	501.6	—	—
(262)	501.7	{501.8	ssss	{ 3
(311)	514.0	514.2	sss	{ 1
(063)	—	520.5	—	7
(2100)	—	524.0	—	1
(153)	—	537.4	—	1
(331)	540.1	{539.6	sss	{ 2
(350)	—	545.2	—	{ 9
(2101)	569.6	569.2	sss	1
(1130)	—	587.4	—	6
(351)	—	590.3	—	0
(282)	590.3	{590.6	sss	{ 2
(083)	—	609.3	—	{ 7
(173)	—	613.5	—	{ 4
(173)	613.3	{613.5	sss	{ 7
(203)	—	613.5	—	{ 4
(1112)	—	615.9	—	{ 12
(0140)	619.3	{621.2	s, breit	{ 2
(370)	—	621.2	—	{ 6 [*]
(223)	—	626.2	—	0.1
(1131)	—	632.6	—	0
(0122)	637.8	637.0	ssss	3
(312)	649.5	649.8	ssss	3
(2120)	—	663.5	—	{ 3
(242)	—	664.2	—	{ 9
(0141)	664.4	{666.4	s	{ 3
(371)	—	666.4	—	{ 7
(332)	674.3	675.1	sss	6
(2102)	—	704.7	—	2
(2121)	708.1	708.7	sss	5
(193)	—	714.9	—	1
(004)	—	722.5	—	{ 4
(390)	—	722.7	—	{ 0.1
(0103)	723.9	{723.4	ss, breit	{ 3
(352)	—	725.8	—	{ 2
(263)	—	727.6	—	{ 2
(024)	—	735.2	—	0.1
(1150)	—	764.9	—	{ 5
(391)	766.4	{ 767.8	sss	{ 1

Fortsetzung (Tabelle 4)

(hkl)	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ gem.	$\sin^2 \Theta \cdot 10^3$ ber.	$I_{\text{gesch.}}$	$I_{\text{ber.}}$
(1132)		768.0		0.1
(044)	776.0	773.2	sss, breit	5
(114)		777.5		4
(0142)		801.8		4
(372)	802.3	801.8	s, breit	13
(134)		802.8		7
(1151)	810.6	810.1	sss	11
(0160)	—	811.4	—	0.4
(283)	816.0	816.4	sss	10
(2140)		828.3		4
(400)	828.0	828.4	sss	4
(064)	—	836.6	—	0.6
(420)	—	841.0	—	0.2
(1113)		841.7		11
(2122)	842.9	844.1	ss, breit	6
(3110)	849.8	849.5	sss	8
(154)	—	853.5	—	3
(0161)	—	856.5	—	2
(0123)	—	862.8	—	3
(2141)		873.5		8
(401)	873.9	873.5	s	5
(313)		875.5		8
(440)	—	879.1	—	7
(421)	—	886.2	—	0.1
(3111)	895.1	894.6	sss	13
(333)	901.1	900.9	sss	13
(392)	—	903.3	—	0.2
(441)		924.2		16
(084)	924.4	925.4	ss	6
(174)		929.6		22
(204)	929.5	929.6	m	13
(2103)		930.5		11
(224)	—	942.3	—	0.6
(460)	—	942.5	—	1
(1152)	945.5	945.5	s	21
(353)	—	951.6	—	5
(1170)	—	967.8	—	0.4
(244)	980.1	980.3	diffus	35
(461)	—	987.6	—	10
(0162)	—	992.0	—	4

Mit diesem Parametern erhält man, wie Tab. 3 erkennen läßt, sehr gute Übereinstimmung zwischen Beobachtung und Berechnung. Da die Überstrukturlinien (hkl) mit $l = \text{ungerade}$ in Einklang mit den sehr kleinen, berechneten Intensitätswerten, nicht beobachtet werden, sind jene in Tab. 3 fortgelassen. Die Struktur ist eng mit der von YB_4 verwandt, was sich deutlich im Pulverdiagramm zeigt. Der Zusammenhang ist topochemisch zu ver-

stehen, indem man zwei Boratome der Oktaedergruppe in $\pm 00z$ aus der Struktur von YB_4 eliminiert und 2 Boratome durch 2 C-Atome ersetzt. Aus Abb. 3 geht auch unmittelbar der Aufbau von YB_2C aus den Elementen der Diboridstruktur YB_2 und der YB_2C_2 -Struktur hervor, deren Summe $2 YB_2C$ ergibt.

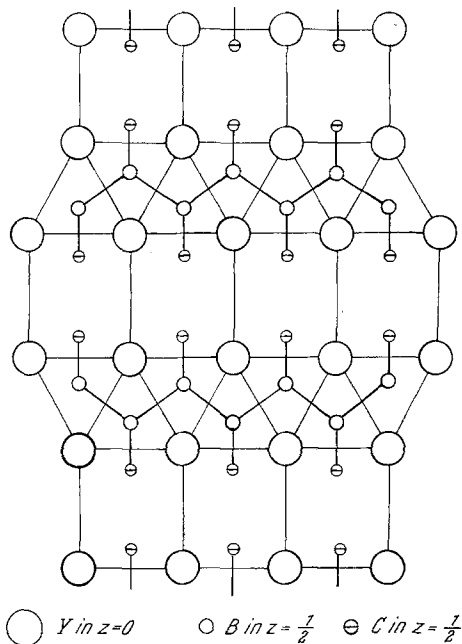


Abb. 4. Die Kristallstruktur der Phase YBC

YBC. Diese Phase konnte mit Hilfe von Pulver- und Einkristallaufnahmen kristallchemisch erfaßt werden. Es ergibt sich eine orthorhombische Elementarzelle mit den Parametern (aus Diffraktometeraufnahmen):

$$\begin{aligned}
 a &= 3,38_8 \text{ \AA}, \\
 b &= 13,69_3 \text{ \AA}, \\
 c &= 3,62_7 \text{ \AA}.
 \end{aligned}$$

Die Auslöschungen (hkl), nur mit $h+k=2n$ vorhanden, führen auf die Raumgruppe D_{2h}^{19} (Cmmm). Auch hier weisen die beiden kurzen Achsen (a und c) auf die Radiensumme von Yttrium hin. Damit läßt sich bereits das Teilgitter von Yttrium festlegen, was mit einer Patterson-Synthese im Einklang steht. Mit den Parametern

$$\begin{aligned}
 4 \text{ Y in } 4 \text{ i) } & \quad y = 0,135_5, \\
 4 \text{ B in } 4 \text{ j) } & \quad y = 0,711, \\
 4 \text{ C in } 4 \text{ j) } & \quad y = 0,591_5.
 \end{aligned}$$

Tabelle 5. Interatomare Abstände in Yttriumborcarbiden und verwandten Verbindungen (in Å)

	YB ₂ C ₂	YB ₂ C	YBC	YB ₄	YC ₂
Y—Y	3.68*	3.60*	3.71*	3.71*	3.71*
Y—B	2.75	2.73	2.70*	2.85	—
Y—C	2.68	2.55	2.55	—	2.56
B—B	1.76	1.75	1.98	1.76	—
C—C	1.28	—	—	—	1.28
B—C	1.62	1.64	1.65	—	—

* Mittel.

lassen sich die Intensitäten in guter Weise wiedergeben (Tab. 4). Die Kristallstruktur von YBC ist aus Abb. 4 zu ersehen. Die Bor—Bor-Zickzack-Ketten mit Kohlenstoff-Verzweigungen bilden ein Bauelement, das dem von UBC analog ist. Die Anordnung steht auch mit der beobachteten leichten Spaltbarkeit senkrecht zur *b*-Achse in Übereinstimmung.

YB_{0,5}C. Da noch keine Strukturaufklärung dieser Phase existiert, ist auch die Zusammensetzung weniger gut gesichert. Dieses Borcarbid findet sich in ziemlich homogener Form in einem Ansatz gemäß 40 : 20 : 40 At%. Das Röntgenogramm weist eine Ähnlichkeit mit Y₁₅C₁₉ (YC_{1,27}) auf. Möglicherweise leitet sich die Struktur von YB_{0,5}C aus jener von Y₁₅C₁₉ her, indem die C₂-Paare durch ein Boratom ersetzt werden. Damit würde auch das Verhältnis von Yttrium zu Bor + Kohlenstoff im Einklang stehen.

Die interatomaren Abstände der Borcarbide sind in Tab. 5 zusammengefaßt. Soweit die Abstände nicht von vornherein für die Strukturvorschläge zugrunde gelegt wurden, sind alle übrigen mit der Erwartung im Einklang.