

## Über das kubische Tantalmonitrid mit B 1-Struktur

(Kurze Mitteilung)

*The Cubic Tantalum Mononitride with B 1 Structure (Short Communication)*

Von

**R. Kieffer, P. Ettmayer, M. Freudhofmeier und J. Gatterer**

Aus dem Institut für chemische Technologie anorganischer Stoffe  
der Technischen Hochschule, A-1060 Wien

(Eingegangen am 12. November 1970)

Beim Studium des pseudobinären Schnittes: TaN/TaC wurde im Zuge von Untersuchungen im binären System Ta/N ein Tantalmonitrid mit Kochsalzstruktur aufgefunden. Dieses TaN vom B 1-Typ ist eine Hochtemperaturmodifikation des hexagonalen TaN vom B 35-Typ ( $a = 5,18 \text{ \AA}$ ,  $c = 2,90 \text{ \AA}$ ). Die Umwandlungstemperatur liegt bei  $1500 \pm 50^\circ \text{ C}$ . Die Umwandlung geht in der Nähe des Transformationspunktes langsam, bei höheren Temperaturen schnell vor sich und ist reversibel.

In der Literatur finden sich zwar Hinweise, daß unter Diamant-synthesebedingungen ein kubisches TaN existiere, das sich beträchtlich in isotypen Nitriden und Carbiden löst<sup>1</sup>. Bei 34 kbar und  $900^\circ \text{ C}$  wurde jedoch neuerdings<sup>2</sup> ein TaN mit WC-Struktur gefunden.

Das als Ausgangsmaterial dienende TaN war durch zweimalige je 6stdg. Nitridierung von Tantalpulver mit Reinststickstoff bei Temperaturen zwischen  $1150$  und  $1250^\circ \text{ C}$  hergestellt worden. Das Produkt war ein graues Pulver mit 7,18 Gew.% N (theor. 7,19 Gew.%) und 0,15 Gew.% O. Das Beugungsdiagramm ließ nur die Linien des hexagonalen TaN mit B 35-Struktur erkennen.

Beim Heißpressen dieses Tantalnitrids bei etwa  $1600^\circ \text{ C}$  unter  $250 \text{ kp/cm}^2$  wurde bei wiederholten Versuchen nach relativ rascher Abkühlung stets eine Phase mit B 1-Struktur gefunden. Die Umwandlung konnte später auch im Hochtemperatur-Autoklaven<sup>3</sup> unter Stickstoffüberdruck reproduziert werden, nicht jedoch bei Stickstoff-Normal-

<sup>1</sup> R. Kieffer und F. Benesovsky, Hartstoffe, Springer-Verlag, Wien-New York 1965.

<sup>2</sup> G. Brauer, Persönliche Mitteilung.

<sup>3</sup> P. Ettmayer, H. Priemer und R. Kieffer, Metall **23**, 307 (1969); P. Ettmayer und R. Kieffer, Radex-Rundschau **1970**, 191.

druck. Unter Normaldruck beginnt sich TaN bereits ab 1500° C unter Bildung der Subnitridphase Ta<sub>2</sub>N zu zersetzen. Um diese Zersetzung zu verhindern, waren bei 1600° C etwa 4 atü, bei 1800° C bereits 8 atü Stickstoffdruck notwendig.

Kubisches TaN kann durch 80stdg. Tempern bei 1250° C quantitativ in hexagonales TaN rückverwandelt werden, das sich wieder reversibel oberhalb 1500° C unter Stickstoffüberdruck in kubisches TaN überführen läßt. In Tab. 1 sind die wichtigsten Versuchsergebnisse zur Umwandlung von hexagonalem TaN in kubisches zusammengefaßt.

Tabelle 1. Versuchsergebnisse zur Umwandlung von hexag. TaN in kub. TaN

Nr.	Versuchsbedingungen				Phasen	Ergebnisse Gitterparameter der kub. Phase, in Å
	Temp., °C	Druck, at	Zeit, Stdn.	Analyse At% N		
1	1500	2	4	—	TaN B 35 Ta <sub>2</sub> N B 1	$a = 4,355$
2	1600	5	18	44,68	TaN B 35 Ta <sub>2</sub> N B 1	$a = 4,354$
3	1600	35	1	—	TaN B 35 Ta <sub>2</sub> N B 1	$a = 4,357$
4	1700	5	6	42,0	TaN B 1	$a = 4,348$
5	1800	6	1	40,0	TaN B 1	$a = 4,344$
6	1800	35	1		TaN B 1	$a = 4,344$

Wie aus Tab. 1 zu entnehmen ist, besitzt die kubische TaN-Phase anscheinend einen mit steigender Temperatur zunehmenden Homogenitätsbereich. Kubisches TaN zeichnet sich ferner durch eine hohe Härte von etwa 2300 kp/mm<sup>2</sup> aus und ist damit vielleicht das härteste Nitrid der Übergangsmetalle; es ist jedenfalls wesentlich härter als hexagonales TaN, das nur eine Härte von HV 1100—1300 kp/mm<sup>2</sup> (50 g Belastung) besitzt. Kubisches TaN unterscheidet sich weiterhin von hexagonalem, grauem Tantalnitrid durch seine leichte Gelbfärbung; letztere Eigenschaft macht kubisches TaN auch metallographisch vom hexagonalen unterscheidbar. In mit Nickelbinder gesinterten TaN-Verbundwerkstoffen sind wegen der notwendigen hohen Sintertemperatur meist beide Tantalnitrid-Phasen zugegen.

Es ist anzunehmen, daß das kubische TaN im Gegensatz zum hexagonalen TaN mit isotypen Carbiden und Nitriden voll mischbar ist, wenn für entsprechend hohe Temperaturen und Stickstoffdrucke gesorgt wird.

In der Tat ergibt eine Extrapolation der bisher gemessenen Gitterparameter in pseudobinären Systemen mit TaN als einer der Komponenten Werte für die Gitterparameter des kubischen TaN, die in guter Übereinstimmung mit den von uns ermittelten Werten stehen (s. Tab. 2).

Tabelle 2. Extrapolierte Werte für die Gitterkonstante von kubischem TaN ( $a = 4,35 \text{ \AA}$ )

System	Gitterkonstante, $\text{\AA}$
TiC/TaN	4,37
ZrC/TaN	4,33
HfC/TaN	4,35
TaC/TaN	4,37

Einer Anregung *G. Brauers*<sup>2</sup> folgend wollen wir vorschlagen, in Analogie zu anderen Systemen der Übergangsmetalle mit Kohlenstoff und Stickstoff, das kubische Tantalmonitrid als  $\delta$ -TaN zu bezeichnen.