

## Die Kristallstruktur des Komplexnitrides $\text{Mo}(\text{Ta},\text{Mo})_2\text{N}_2$

Kurze Mitteilung

Peter Ettmayer\* und Alfred Vendl

Institut für chemische Technologie anorganischer Stoffe,  
Technische Universität Wien, A-1060 Wien, Österreich

(Eingegangen 7. November 1979. Angenommen 10. Januar 1980)

### *The Crystal Structure of the Complex Nitride $\text{Mo}(\text{Ta},\text{Mo})_2\text{N}_2$ (Short Communication)*

In the ternary system Ta/Mo/N a complex nitride of formula  $\text{Mo}(\text{Ta},\text{Mo})_2\text{N}_2$  was observed at a nitrogen pressure of 360 bar and a temperature of 1,600 °C. The crystal structure was determined from X-ray powder diagrams. The tetragonal unit cell, space group  $I4/mmm-D_{4h}^{17}$ , lattice parameters  $a = 0.3051 \text{ nm}$ ,  $c = 1.2530 \text{ nm}$  contains ten atoms with an arrangement of the metal atoms corresponding to the  $\text{MoSi}_2$ -Type structure.

(Keywords: Crystal structure; Molybdenum nitrides; Nitrides; Tantalum nitrides)

Beim Studium der ternären Systeme Ta/Mo/N wurde das Komplexnitrid  $\text{Mo}(\text{Ta},\text{Mo})_2\text{N}_2$  bei einem Stickstoffdruck von 360 bar und einer Temperatur von 1600 °C erhalten. Die Kristallstruktur wurde aus Pulverdiagrammen ermittelt. Sie gehört zum aufgefüllten  $\text{MoSi}_2$ -Strukturtyp. Im Aufbau ist eine große Ähnlichkeit mit den vor kurzem beschriebenen Komplexnitriden  $\text{NbMoN}_{1-x}$  ( $x \leq 0,1$ ) und  $\text{TaMoN}$  (Lit.<sup>1,2</sup>) sowie  $\text{NbCrN}$  und  $\text{Ta}_{1-x}\text{Cr}_{1+x}\text{N}$  (Lit.<sup>3,4</sup>) festzustellen.

Diese Verbindungen gehören zum aufgefüllten  $\theta$ -CuTi-Typ, zu dem auch das Komplexnitrid  $\text{CaGa}_3\text{N}_4$  (Lit.<sup>5,6</sup>) zählt. Charakteristisch ist sowohl für  $\text{Mo}(\text{Ta},\text{Mo})_2\text{N}_2$  als auch für die als Z-Phasen bezeichneten und auf die Struktur des  $\theta$ -CuTi zurückgehenden Komplexnitride ein schichtartiger Aufbau.

Im Falle des  $\text{Mo}(\text{Ta},\text{Mo})_2\text{N}_2$ , das etwa einer Formel  $\text{Mo}(\text{Ta}_{0,75}\text{Mo}_{0,25})_2\text{N}_2$  entspricht, wechseln einander Schichten aus vierseitigen (Ta,Mo)-Pyramiden (die Atompositionen  $4e$  sind zu

Tabelle 1. *Beugungsdiagramm von Mo(Ta,Mo)<sub>2</sub>N<sub>2</sub>; Raumgruppe I4/mmm-D<sub>4h</sub><sup>17</sup>  
CuK $\alpha$ -Strahlung*

(hkl)	sin <sup>2</sup> $\theta$ · 1000 ber.	sin <sup>2</sup> $\theta$ · 1000 beob.	Intensität ber.	Intensität beob.
002	15,14	—	,2	—
004	60,56	60,56	119,9	14
101	67,62	67,68	75,5	7
103	97,90	78,00	1000,0	100
110	127,67	127,72	489,5	52
006	136,25	136,50	145,4	16
112	142,81	—	,0	—
105	158,45	158,40	72,5	7
114	188,23	188,60	93,2	9
008	242,22	242,45	23,5	2
107	249,29	249,33	76,8	9
200	255,34	255,35	160,3	17
116	263,92	264,10	197,7	21
202	270,48	—	,0	—
204	315,89	315,95	40,1	2
211	322,96	322,90	17,4	1
213	353,24	353,50	277,6	28
118	369,89	370,20	47,4	9
109	370,40		43,9	
0010	378,48	378,45	11,1	1
206	391,59	391,65	102,9	12
215	413,79	413,83	28,8	2
208	497,56	497,55	31,5	3
217	504,63	505,20	54,9	9
1110	506,14		30,4	
220	510,68	510,72	55,5	6
1011	521,79	522,03	68,9	6
222	525,81	—	,0	—
0012	545,00	—	2,7	—
224	571,23	571,20	18,6	2
301	578,30	—	4,4	—
303	608,57	608,65	74,1	8
219	625,74	626,30	50,1	6
2010	633,81	634,04	26,5	3
310	638,34	638,63	96,9	10
226	646,93	647,12	62,5	6
312	653,48	—	,0	—
305	669,13	669,12	9,3	1
1112	672,67	672,95	10,0	1
314	698,90	690,15	36,5	3
1013	703,46	703,71	16,0	2
0014	741,81	741,92	20,0	2
228	752,90	752,95	28,7	3
307	759,96	760,12	26,2	3
316	774,60	774,80	138,7	14

Tabelle 1 (Fortsetzung)

$(hkl)$	$\sin^2\theta \cdot 1000$ ber.	$\sin^2\theta \cdot 1000$ beob.	Intensität ber.	Intensität beob.
2111	777,13	778,34	136,3	14
2012	800,34	800,45	11,5	1
321	833,63	833,72	11,2	1
323	863,91	863,98	205,6	20
1114	869,48	869,52	107,9	12
318	880,57	881,10	79,7	12
309	881,08		37,3	
2210	889,15		41,6	
1015	915,40	—	,1	—
325	924,47	924,53	34,8	4
2113	958,80	958,95	81,9	8
0016	968,90	—	4,0	—
2014	997,15	997,26	746,6	76

Tabelle 2. Interatomare Abstände

Atom	Nachbaratome	Abstand (nm)
Mo	4(Ta,Mo)*	0,2837
	4 Mo	0,3051
	2 N	0,2230
(Ta,Mo)	4 Mo	0,2837
	4(Ta,Mo)*	0,3051
	4(Ta,Mo)*	0,3364
	4 N	0,2192
	1 N	0,2193

\* Die Atompositionen  $4e$  sind zu 25% mit Mo-Atomen und zu 75% mit Ta-Atomen besetzt.

25% mit Mo-Atomen und zu 75% mit Ta-Atomen besetzt) mit ebenen Netzwerken quadratisch angeordneter Mo-Atome ab.

Da die Festlegung der genauen Positionen der Stickstoffatome auf Grund des zu geringen Beitrages zur Beugungsintensität durch Intensitätsvergleich zwischen Rechnung und Beobachtung röntgenographisch (ohne Differenz-Fourier) nicht exakt möglich ist, wurden die Stickstoffatome auf die sich ergebenden Lücken im Metallgitter verteilt.

Dabei ergibt sich, wie schon öfter beobachtet und beschrieben

wurde<sup>7,8</sup>, daß jedes Stickstoffatom von 5 Metallatomen in Form einer vierseitigen Pyramide umgeben ist.

In Tab.1 ist die Auswertung des Pulverdiagramms von  $\text{Mo}(\text{Ta},\text{Mo})_2\text{N}_2$  wiedergegeben. Es zeigt gute Übereinstimmung zwischen gerechneten und beobachteten Werten der Intensitäten.

Durch die folgend angegebene Verteilung der Atome auf die Punktlagen der Raumgruppe  $I4/mmm$  konnte optimale Übereinstimmung zwischen Intensitätsrechnung und Beobachtung erzielt werden.

2 Mo	in (a)	0, 0, 0
		$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
1 Mo + 3 Ta in (e)		0, 0, $z_1$
		0, 0, $-z_1$
		$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + z_1$
		$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - z_1$
4 N		in (e)
		0, 0, $z_2$
		0, 0, $-z_2$
		$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + z_2$
		$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - z_2$

mit  $z_1 = 0,353$ ,  $z_2 = 0,178$ .

Tab. 2 gibt die Atomabstände zu den jeweils nächsten Nachbarn an.

### Literatur

- <sup>1</sup> A. Vendl, Mh. Chem. **110**, 103 (1979).
- <sup>2</sup> A. Vendl, Mh. Chem. **109**, 1001 (1978).
- <sup>3</sup> P. Ettmayer, Mh. Chem. **102**, 858 (1971).
- <sup>4</sup> D. H. Jack und F. H. Jack, J. of the Iron and Steel Institute **210**, 790 (1972).
- <sup>5</sup> J. Guyader, P. Verdier und J. Lang, Revue de Chimie minérale **13**, 408 (1976).
- <sup>6</sup> P. Verdier, P. L'Haridon, M. Maunaye und R. Marchand, Acta Cryst. **B30**, 226 (1974).
- <sup>7</sup> A. Vendl, Planseeber. f. Pulvermetallurgie **26**, 233 (1978).
- <sup>8</sup> P. Ettmayer und A. Vendl, J. of Less-Common Met., im Druck.