

Zur Benennung von Verbindungen im Si-Al-O-N-System**

Die Übersetzung basiert auf der „Terminology for Compounds in the Si-Al-O-N System“ der Commission on High Temperature Materials and Solid State Chemistry der Inorganic Chemistry Division der International Union of Pure and Applied Chemistry, veröffentlicht in *Pure Appl.*

Chem. **1999**, *71*, 1765–1769. Das Original wurde von R. Metselaar, Technische Universiteit Eindhoven (Niederlande) und D. S. Yan, Academia Sinica, Shanghai (China) für die Veröffentlichung vorbereitet.

In diese Richtlinien sind Anregungen und Kommentare folgender Personen eingeflossen: I. W. M. Brown, I.-Wei Chen, Y.-B. Cheng, A. Hendry, H. T. Hintzen, Michael J. Hoffmann, Ken Jack, S.-J. L. Kang, Hasan Mandal, R. Marchand, M. Mitomo, D. Niesz, M. Sopicka-Lizer, Derek P. Thompson, T.-Y. Tien und J. Zheng.

Der Commission on High Temperature Materials and Solid State Chemistry gehörten während der Vorbereitung des Berichts (1995–1999) folgende Personen an: Titularmitglieder: Prof. K. E. Spear (Vorsitzender 1998–1999), Prof. D. Kolar (Sekretär 1996–1999), Prof. H. P. Boehm (1994–1999), Prof. J. O. Carlsson (1996–1999), Prof. C. B. J. Chatillon (1998–1999), Prof. J. Livage (1996–1999), Prof. G. F. Voronin (1998–1999), Prof. J. Corish (Vorsitzender 1991–1995), Dr. G. M. Rosenblatt (Vorsitzender 1996–1997, Sekretär 1991–1995), Prof. L. N. Gorokhov (1987–1995), Prof. M. H. Lewis (1994–1997), Prof. D.-S. Yan (1987–1995), Prof. J. F. Baumard (1985–1993); assoziierte Mitglieder: Prof. G. Balducci (1994–1999), Prof. A. V. Chadwick (1998–1999), Prof. R. Kniep (1998–1999), Prof. K. Koumoto (1994–1999), Prof. M. Leskela (1998–1999), Prof. M. H. Lewis (1998–1999), Prof. C. M. Lieber (1998–1999), Prof. K. E. Spear (1994–1997), Prof. H. Verweij (1996–1999), Prof. G. F. Voronin (1989–1997), Prof. B. Lux (1996–1999), Prof. J.-F. Baumard (1994–1997), Prof. J. G. Edwards (1987–1995), Prof. M. Kizilyalli (1994–1997), Dr. M. Thackeray (1991–1995), Prof. R. J. D. Tilley (1994–1997); Ländervertreter: Prof. N. E. Walso de Reca (Argentinien, 1994–1999), Prof. J. D. Drowart (Belgien, 1994–1999), Prof. M. Jafelicca, Jr. (Brasilien, 1998–1999), Prof. J. Gopalakrishnan (Indien, 1998–1999), Prof. J. H. Choy (Korea, 1996–1999), Dr. F. Hanic (Slowakei, 1994–1999), Dr. D. de Waal (Südafrika, 1996–1999), Dr. L. Tichy (Tschechische Republik, 1996–1997), Dr. P. Echequit (Frankreich, 1996–1997), Dr. C. K. Mathews (Indien, 1994–1997), Prof. O. L. Alves (Brasilien, 1991–1995), Prof. G. DeMaria (Italien, 1982–1995), Prof. F. M. Costa (Portugal, 1991–1995), Prof. M. Nygren (Schweden, 1994–1995).

Obmann und Übersetzer: Ralf Riedel*

Zusammenfassung

In diesem Dokument wird eine Nomenklatur für Oxidnitride von Aluminium und Silicium vorgeschlagen. In Arbeiten über Keramiken werden diese Verbindungen im Allgemeinen Oxynitride genannt. Gemäß den IUPAC-Regeln (siehe Lit. [1]) ist dies nicht erlaubt; der systematische Name sollte Oxidnitrid oder Oxonitrid lauten.

Einleitung

Nitride und Oxidnitride, die Silicium und Aluminium enthalten, werden aufgrund ihrer interessanten Anwendungen, die insbesondere auf ihre (thermo)mechanischen Eigenschaften zurückzuführen sind, in der Chemie und den Materialwissenschaften intensiv untersucht. In den zahlreichen Ver-

Die *Angewandte Chemie* veröffentlicht Übersetzungen von Recommendations und Technical Reports der IUPAC, um die chemische Fachsprache im Deutschen zu fördern. Sauber definierte Begriffe und klare Nomenklaturregeln bilden die Basis für eine Verständigung zwischen den Wissenschaftlern einer Disziplin und sind für den Austausch zwischen Wissenschafts- und Fachsprache sowie Allgemeinsprache essentiell. Alle Übersetzungen werden von einem ausgewiesenen Experten (dem „Obmann“) geprüft, korrigiert und autorisiert. Die letzte Übersetzung erschien in Heft 11/2002, die nächste (Erweiterung und Revision des von-Baeyer-Systems zur Benennung polycyclischer Verbindungen) ist für Heft 17/2002 vorgesehen. Empfehlungen von Themen und Obleuten sind willkommen.

[*] Prof. Dr. R. Riedel

Institut für Materialwissenschaft
Technische Universität Darmstadt
Petersenstraße 23, 64287 Darmstadt (Deutschland)
Fax: (+49) 6151-16-6346
E-mail: riedel@tu-darmstadt.de

[**] Copyright© der englischen Fassung: International Union of Pure and Applied Chemistry, 1999. – Wir danken der IUPAC für die Genehmigung zum Druck einer deutschen Fassung dieser Recommendation.

öffentlichen über diese Werkstoffe wird eine Vielzahl von Abkürzungen zu deren Kennzeichnung verwendet. Diese beziehen sich zum Teil auf die Verarbeitungstechnik und zum Teil auf die Zusammensetzung. In den Materialwissenschaften im Allgemeinen und in der Keramikwissenschaft im Besonderen ist man bemüht, Einvernehmen über die Verwendung solcher Akronyme zu erzielen. Im Interesse der Wahrung der Einheitlichkeit in der chemischen Terminologie wird hier dazu ein Vorschlag unterbreitet.

Abkürzungen

In der Literatur findet man zahlreiche Abkürzungen zur Bezeichnung von Phasen im Si-Al-O-N-System. Beispiele hierfür sind B, D, E, H, J, JEM, K, M, M', O, Q, U und X. Da heutzutage die chemische Zusammensetzung und die Kristallstruktur für die meisten dieser Verbindungen bekannt sind, wird von der Verwendung solcher nicht selbst erklärender Kürzel abgeraten. Schließlich steht eine allgemeine Nomenklatur für Festkörper zur Verfügung (siehe Lit. [1]). Wenn doch Abkürzungen verwendet werden, sollten sie im Beitrag definiert werden, und sie sollten im Titel sowie in der Kurzfassung vermieden werden.

Strichzeichen

Ein Strichzeichen in Kombination mit einer Abkürzung, wie α' -Sialon oder O'-Sialon, wird oft verwendet, um eine Phase mit a) derselben Struktur wie die Ausgangsphase, aber b) verschiedener Zusammensetzung und c) keiner Bildung von Mischkristallen^[*] mit der Ausgangsphase zu kennzeichnen. Wie oben erwähnt, sollte die Verwendung von Kürzeln möglichst vermieden werden, und das Gleiche gilt auch für die Kombination mit einem Strichzeichen. Die Verwendung des Strichzeichens kann allerdings in Phasendiagrammen hilfreich sein. Ein Beispiel hierfür ist das Symbol α' , um das Phasengebiet von α -Sialon in einem Phasendiagramm mit der ursprünglichen α -Si₃N₄-Phase zu kennzeichnen. Jedoch ist die Verwendung des Strichzeichens in Fällen, in denen eine lückenlose Mischkristallreihe mit der Ausgangsphase gebildet wird, nur verwirrend.

Konzentrationseinheiten

Konzentrationen in Verbindungen mit der allgemeinen Formel Si_aAl_bO_cN_d, den Sialonen, werden manchmal in Äquivalentprozenten Ladung angegeben. So erhält man die Äquivalentprozentzahl von Si gemäß $100 \times 4a/(4a + 3b)$ und die von N gemäß $100 \times 3d/(2c + 3d)$. Eine verwandte Bezeichnung ist β_y , wobei y die Äquivalentprozentzahl von Al ist. Zum Beispiel enthält Si₂Al₄O₄N₄, das sich aus der allgemeinen Formel Si_{6-x}Al_xO_xN_{8-x} für x=4 ergibt, 60 Äquiv.-% Al und wird demgemäß als β_{60} bezeichnet. Diese

[*] Eine alternative Bezeichnung für Mischkristall ist feste Lösung.

Schreibweise ist nicht selbst erklärend und wird daher nicht empfohlen.

Begriffe zur Kennzeichnung von Phasen im Si-Al-O-N-System

Alon:

Oberbegriff für Verbindungen oder Mischkristalle im Al-O-N-System. Die Schreibung mit Großbuchstaben, ALON, wird nicht empfohlen, da sie eine bestimmte chemische Zusammensetzung impliziert.

γ -Alon:

Ein Mischkristall im Al₂O₃-AlN-System in der Nähe der Zusammensetzung AlN·3Al₂O₃ mit einer Struktur vom Spinell-Typ.

Alon-Polymorphe:

Eine Reihe polymorpher Verbindungen^[2] im Alon-System mit der Zusammensetzung M_mX_{m+1}, M = Al, X = N, O. Bisher wurden solche Verbindungen für m = 6–10 beschrieben. Sie bilden Schichtstrukturen mit den Ramsdell-Symbolen 12H, 21R, 16H, 27R bzw. 20H.

Sialon:

Oberbegriff für Verbindungen oder Mischkristalle im M-Si-Al-O-N-System, wobei M für ein Metall steht. Die Schreibung mit Großbuchstaben, SiALON, wird nicht empfohlen, da sie eine bestimmte chemische Zusammensetzung impliziert.

α -Sialon:

Ein Mischkristall der Zusammensetzung M_{m/v}Si_{12-(m+n)}Al_{m+n}O_nN_{16-n} und der Struktur von α -Si₃N₄; M ist dabei ein Element mit der Valenz v, beispielsweise Li, Ca, Y und viele der Seltenerdmetalle, m und n variieren in Abhängigkeit vom Element M und von der Temperatur. Manchmal werden die Symbole α und α' verwendet, um α -Si₃N₄ bzw. α -Sialon zu kennzeichnen. Der Hauptgrund dafür ist, dass α -Sialon die gleiche Struktur hat wie α -Si₃N₄, jedoch keine lückenlose Mischkristallreihe mit letzterem bildet. Während die Verwendung von α' -Sialon anstelle von α -Sialon im Phasendiagramm von Vorteil sein kann, wird in Texten davon abgeraten, es sei denn, man möchte diesen Unterschied herausstellen.

β -Sialon:

Ein Mischkristall der Zusammensetzung Si_{6-x}Al_xO_xN_{8-x} und der Struktur von β -Si₃N₄, wobei x in Abhängigkeit von der Temperatur zwischen 0 und ca. 4.2 variiert. Die Verwendung von β' -Sialon anstelle von β -Sialon wird nicht empfohlen.

Sialon-Polymorphe:

Eine Reihe polymorpher Verbindungen^[2] im Sialon-System mit der Zusammensetzung M_mX_{m+1}, M = Al, Si, X = N, O. Bisher wurden solche Verbindungen für m = 4–7, 9, 11 beschrieben. Sie bilden Schichtstrukturen mit den Ramsdell-Symbolen 8H, 15R, 12H, 21R, 27R bzw. 2H^δ. Die näherungs-

weisen Zusammensetzungen der Hauptpolymorphe sind $\text{SiAl}_4\text{O}_2\text{N}_4$ (15R), $\text{SiAl}_5\text{O}_2\text{N}_5$ (12H), $\text{SiAl}_6\text{O}_2\text{N}_6$ (21R), $\text{SiAl}_8\text{O}_2\text{N}_8$ (27R). Anmerkung: Die Elemente Be, Mg, Sc und möglicherweise andere können in diese Strukturen eingebaut sein, vorausgesetzt, der Ladungsausgleich ist gegeben und das M:X-Verhältnis bleibt erhalten.

$\alpha\text{-Si}_3\text{N}_4$:

Kristalline Form von Siliciumnitrid mit der Raumgruppe $P31c$.

$\beta\text{-Si}_3\text{N}_4$:

Kristalline Form von Siliciumnitrid mit der Raumgruppe $P6_3/m$ oder $P6_3$.

SN:

Abkürzung für Siliciumnitrid, Si_3N_4 . Dieser Ausdruck sollte niemals als Abkürzung für die Verbindung als solche verwendet werden. Im Zusammenhang mit Verarbeitungsschemata wird er jedoch häufig genutzt. Ein Beispiel ist RBSN, was für reaktionsgebundenes Siliciumnitrid steht. Diese Bezeichnungen werden hier nicht berücksichtigt, werden jedoch in anderen Komitees, die sich mit Standardisierungen befassen, behandelt.

SNO:

Abkürzung für Siliciumoxidnitrid, Si_2ON_2 . Die Verwendung dieses Kürzels wird nicht empfohlen. Alternative Bezeichnungen der Verbindung sind O-Phase (siehe unten) und O-Sialon.

Ein-Buchstaben-Abkürzungen

Die folgende – nicht vollständige – alphabetische Liste enthält in der Literatur gefundene Ein-Buchstaben-Abkürzungen zur Kennzeichnung von Phasen im Si-Al-O-N-System. Wie bereits erwähnt, sollten diese nicht selbst erklärenden Schreibweisen möglichst vermieden werden.

B-Phase	$\text{Y}_2\text{SiAlO}_5\text{N}$
D-Phase	$\text{YSi}_2\text{AlO}_4\text{N}_2$
E-Phase	$\text{YSi}_3\text{O}_6\text{N}$; eine Verbindung mit der $\beta\text{-Y}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ -Struktur.
H-Phase	Ein Mischkristall abgeleitet von $\text{Ln}_5\text{Si}_3\text{O}_{12}\text{N}_1$ mit einer Struktur vom Apatit-Typ und $\text{Ln} = \text{Y}$ oder ein Lanthanoidion. Die Verbindung $\text{Ln}_5\text{Si}_3\text{O}_{12}\text{N}_1$ wird in einigen Veröffentlichungen auch N-Apatit genannt, wovon jedoch abgeraten wird.
J-Phase	Ein Mischkristall der Zusammensetzung $\text{Ln}_4\text{Si}_{2-x}\text{Al}_x\text{O}_{7+x}\text{N}_{2-x}$ mit x zwischen 0 und 2, $\text{Ln} = \text{Y}$ oder ein Lanthanoidion und einer Struktur vom Cuspidin-Typ.
J'-Phase	$\text{Si}_3\text{Al}_3\text{O}_{3+1.5x}\text{N}_{5-x}$; ein Ausdruck, der in älteren Arbeiten verwendet wurde und nichts mit der J-Phase zu tun hat.

JEM-Phase	Ein Mischkristall der Zusammensetzung $\text{LnSi}_{6-x}\text{Al}_{1+x}\text{N}_{10-x}\text{O}_x$ mit $x \approx 1$ und $\text{Ln} = \text{Y}$ oder ein Lanthanoidion, isomorph zu LaSi_3N_5 .
K-Phase	Ein Mischkristall abgeleitet von $\text{Ln}_3\text{Si}_3\text{O}_6\text{N}_3$ mit einer Struktur vom Wollastonit-Typ und $\text{Ln} = \text{Y}$ oder ein Lanthanoidion.
M-Phase	Früher für die Verbindung $\text{Ln}_2\text{Si}_3\text{O}_3\text{N}_4$ mit einer Struktur vom Melilit-Typ und $\text{Ln} = \text{Y}$ oder ein Lanthanoidion verwendeter Begriff (manchmal auch N-Melilit genannt). Heutzutage steht M-Phase für Mischkristalle der Zusammensetzung $\text{Ln}_2\text{Si}_{3-x}\text{Al}_x\text{O}_{3+x}\text{N}_{4-x}$ mit x zwischen 0 und 1. Einige Autoren sprechen von der M'-Phase, um diese Mischkristalle zu bezeichnen. Von der Verwendung des Strichzeichens wird abgeraten.
O-Phase	Ein Mischkristall der Zusammensetzung $\text{Si}_{2-x}\text{Al}_x\text{O}_{1+x}\text{N}_{2-x}$, wobei x zwischen 0 und ca. 0.3 variiert. Einige Autoren verwenden den Begriff für die Verbindung mit $x=0$ (Silicium-oxidenitrid, Si_2ON_2) und bezeichnen den Mischkristall als O'-Phase. Von der Verwendung des Strichzeichens wird abgeraten. In älteren Arbeiten wurde diese Phase auch X-Phase genannt. Da es sich um eine sehr markante Phase in vielen Sialon-Zusammensetzungen handelt, halten es viele Autoren für praktisch, den Namen O-Phase beizubehalten.
Q-Phase	Das Sialon-Polymorph 12H ($m=6$, siehe oben).
U-Phase	Der Mischkristall $\text{Ln}_3\text{Si}_{3-x}\text{Al}_{3+x}\text{O}_{12+x}\text{N}_{2-x}$ mit x zwischen 0 und 1 und mit einer Struktur vom $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ -Typ.
W-Phase	$\text{Ln}_4\text{Si}_9\text{Al}_5\text{O}_{30}\text{N}$ mit $\text{Ln} = \text{Y}$ oder ein Lanthanoidion.
Y-Phase	Das Sialon-Polymorph 15R ($m=5$, siehe oben).
X-Phase	Eine Verbindung im Si-Al-O-N-System mit engem Löslichkeitsbereich. Die beschriebenen annähernden Zusammensetzungen konzentrieren sich um die Stöchiometrie $\text{Si}_{10}\text{Al}_{15}\text{O}_{32}\text{N}_7$. Da der Strukturtyp unbekannt ist und Unsicherheit über die Zusammensetzung besteht, ist die Verwendung des Ausdrucks X-Phase gegenwärtig akzeptabel.
Z-Phase	$\text{Y}_3\text{Si}_2\text{ON}_5$
ε -Phase	$\text{SiAl}_7\text{O}_2\text{N}_7$
η -Phase	$\text{SiAl}_3\text{O}_2\text{N}_3$
θ -Phase	$\text{Si}_3\text{Al}_{12}\text{O}_9\text{N}_{10}$
ζ -Phase	$\text{Si}_3\text{Al}_7\text{O}_3\text{N}_9$

[1] *Nomenclature of Inorganic Chemistry* (Hrsg.: G. J. Leigh), Blackwell Scientific Publishers, Oxford, Großbritannien, 1990.

[2] Bericht der International Mineralogical Association und der International Union of Crystallography Joint Committee on Nomenclature: *Acta Crystallogr. Sect. A* **1977**, 33, 681.