

Die Kristallstruktur des Komplexnitrides TaMoN

Kurze Mitteilung

Alfred Vendl

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

(Eingegangen 21. Februar 1978. Angenommen 9. März 1978)

The Crystal Structure of the Complex Nitride TaMoN (Short Communication)

In the course of studies concerning the ternary system Mo/Ta/N the complex nitride TaMoN was isolated. The crystal structure was determined by X-ray (powder diagram. Cu K_{α}): tetragonal unit cell of 6 atoms; space group $P4/nmm-D_{4h}^7$; lattice parameters $a = 3.081 \text{ \AA}$, $c = 7.800 \text{ \AA}$.

Beim Studium des ternären Systems Mo/Ta/N wurde das Komplexnitrid MoTa_xN isoliert und die Kristallstruktur aus Pulverdiagrammen (Cu K_{α} -Strahlung) ermittelt. Sie ist mit dem vor kurzem beschriebenen MoNbN_{1-x} ($x \ll 0.1$)¹ isotyp und gehört somit dem bereits von Eltmayer² und Jack³ beschriebenen Typ von Einlagerungsverbindung an, dem auch die Nitride NbCrN und Ta_{1-x}Cr_{1+x}N zuzuordnen sind. Die Verbindung MoTa_xN enthält 6 Atome in der tetragonalen Elementarzelle, die Raumgruppe ist $P4/nmm-D_{4h}^7$. Die Gitterparameter betragen: $a = 3.081 \text{ \AA}$, $c = 7.800 \text{ \AA}$.

Durch die folgend angegebene Verteilung der Atome auf die Punktlagen der Raumgruppe $P4/nmm$ konnte optimale Übereinstimmung zwischen Intensitätsrechnung und Beobachtung erzielt werden:

$$\begin{aligned} & 2 \text{ Ta in } (c) 0, \frac{1}{2}, z_1 \text{ und } \frac{1}{2}, 0, -z_1 \\ & 2 \text{ Mo in } (c) 0, \frac{1}{2}, z_2 \text{ und } \frac{1}{2}, 0, -z_2 \\ & 2 \text{ N in } (c) 0, \frac{1}{2}, z_3 \text{ und } \frac{1}{2}, 0, -z_3 \end{aligned}$$

mit $z_1 = 0.335$, $z_2 = -0.100$, $z_3 = -0.383$.

Da die Festlegung der Positionen der Stickstoffatome auf Grund des zu geringen Beitrages zur Beugungsintensität durch Intensitätsvergleich zwischen Rechnung und Beobachtung nicht möglich ist, wurden die Stickstoffatome auf die sich ergebenden Lücken im Metallwirtgitter verteilt.

In Tab. 1 ist die Auswertung des Pulverdiagramms von TaMoN wiedergegeben. Es zeigt gute Übereinstimmung zwischen gerechneten und beobachteten Werten der Intensität.

Tab. 2 gibt die Atomabstände zu den jeweils nächsten Nachbarn an. Die Tendenz zur Ausbildung von Strukturelementen des kubischen δ -Ta₃N bzw. der

Tabelle 1. Beugungsdiagramm von TaMoN. Raumgruppe $P4/nmm - D_{4h}^7$ Cu K_{α} -Strahlung

(hkl)	$\sin^2 \theta \cdot 1000$ ber.	$\sin^2 \theta \cdot 1000$ beob.	Intensität ber.	Intensität beob.
001	9.77	9.81	32.9	2
002	39.07	38.83	43.8	5
101	72.37	72.18	211.8	21
003	87.91	87.73	132.7	14
102	101.68	101.68	1000.0	100
110	125.21	125.12	552.0	56
111	134.98	—	5.5	—
103	150.51	150.51	94.1	10
004	156.28	155.95	81.7	9
112	164.28	164.14	26.1	3
113	213.12	212.78	140.0	15
104	218.89	218.60	53.0	6
005	244.19	243.75	32.8	4
200	250.42	250.42	182.2	19
201	260.18	—	1.9	—
114	281.49	281.99	123.6	12
202	289.49	289.17	10.9	1
105	306.80	306.56	77.6	8
211	322.79	323.10	50.1	6
203	338.33	338.04	65.8	7
006	351.64	—	6.2	—
212	352.09	351.81	291.3	30
115	369.40	369.40	67.1	7
213	400.93	400.74	35.5	4
204	406.70	406.82	67.7	7
106	414.24	—	6.9	—
214	469.30	468.60	33.1	4
116	476.85	—	16.6	—
007	478.62	477.75	7.3	2
205	494.61	494.61	44.8	5
220	500.83	500.44	62.6	7
221	510.60	—	0.8	—
222	539.90	—	4.7	—
107	541.22	540.77	88.3	10
215	557.21	557.12	70.1	7
301	573.20	573.47	12.5	1
223	588.74	588.46	33.4	4
206	602.06	—	13.9	—
302	602.51	602.16	77.5	9
117	603.83	604.29	24.0	2
008	625.14	—	0.6	—
310	626.04	625.78	107.1	12
311	635.81	—	1.4	—
303	651.35	651.02	10.8	1
224	657.12	657.12	43.5	4

Tabelle 1 (Fortsetzung)

(hkl)	$\sin^2 \theta \cdot 1000$ ber.	$\sin^2 \theta \cdot 1000$ beob.	Intensität ber.	Intensität beob.
216}	664.66	664.85	9.2}	—
312}	665.11	—	8.7}	2
108	687.74	—	8.5	—
313	713.95	713.68	67.4	8
304	719.72	719.34	13.9	1
207	729.04	729.25	24.6	3
225	745.03}	746.21	40.0}	—
118	750.35}	—	2.4}	5
314	782.32	782.48	97.8	10
009	791.19}	791.49	23.5}	—
217	791.64}	—	185.9}	22
305	807.63	808.04	39.7	4
321	823.62	823.62	30.6	3
226	852.47}	—	19.0}	—
322	852.92}	853.00	205.8}	23
109	853.79}	—	8.9	—
315	870.23	870.23	107.6	12
208	875.55	—	3.4	—
323	901.76	901.88	35.1	4
306	915.08}	916.07	8.1}	—
119	916.40}	—	146.8}	19
218	938.16	938.16	36.5	4
324	970.14	969.85	83.4	10
0010	976.78	—	0.1	—
316	977.68	977.64	100.4	11
227	979.45	979.36	87.0	9

Tabelle 2. Interatomare Abstände

Atom	Nachbaratome	Abstand (Å)
Mo	4 Mo	2,680
	4 Mo	3,081
	4 Ta	2,847
	1 Ta	3,393
	1 N	2,203
Ta	4 Ta	3,081
	4 Ta	3,372
	4 Mo	2,847
	1 Mo	3,393
	4 N	2,210
	1 N	2,203

Mo-Anordnung im Mo-Metall tritt ebenso auf wie bei dem bereits ausführlich beschriebenen NbMoN_{1-x} ($x < 0,1$)¹.

Im Vergleich zwischen TaMoN und NbMoN_{1-x} ($x < 0,1$) fällt auf, daß unter gleichen Herstellungsbedingungen (Temperatur: 1100°C , Druck: 1 bar N_2) nur die Ta-hältige Verbindung die Zusammensetzung TaMoN erreicht, während die analoge Nb-hältige Verbindung erst bei höheren Stickstoffdrücken den der Formel NbMoN entsprechenden N-Gehalt aufweist. Die stöchiometrischen Verhältnisse in Abhängigkeit vom Stickstoffdruck sind derzeit noch Gegenstand eingehender Untersuchungen.

Bei identischen Atompositionen ist die Elementarzelle des Komplexnitrides TaMoN etwas kleiner, der Gitterparameter c ist bei TaMoN und NbMoN_{1-x} praktisch identisch.

Ich danke Herrn Prof. Dr. P. Ettmayer für die Unterstützung dieser Arbeit und die vielen anregenden Diskussionen.

Herrn Prof. Dr. B. Lux danke ich für die Ermöglichung dieser Arbeit.

Literatur

¹ A. Vendl, Mh. Chem., im Druck.

² P. Ettmayer, Mh. Chem. **102**, 858 (1971).

³ D. H. Jack und F. H. Jack, J. of the Iron and Steel Institute **1972**, 790.