

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Der $\text{Ti}_3\text{Co}_5\text{B}_2$ -Strukturtyp . . . . .	2
1.2	Boride mit perowskitähnlicher Struktur . . . . .	6
1.2.1	Der $\text{Ti}_2\text{Rh}_6\text{B}$ -Strukturtyp . . . . .	8
1.3	Motivation und Zielsetzung . . . . .	11
1.3.1	Untersuchungen am $\text{Ti}_3\text{Co}_5\text{B}_2$ -Strukturtyp . . . . .	11
1.3.2	Untersuchungen am $\text{Ti}_2\text{Rh}_6\text{B}$ -Strukturtyp . . . . .	12
<b>2</b>	<b>Arbeitsmethoden und Analytik</b>	<b>13</b>
2.1	Preparative Methoden . . . . .	13
2.1.1	Allgemeine Versuchsvorschrift . . . . .	13
2.1.2	Der Lichtbogenofen . . . . .	14
2.2	Analytische Methoden . . . . .	15
2.2.1	Pulverdiffraktometrie . . . . .	15
2.2.2	Einkristalldiffraktometrie . . . . .	16
2.2.3	Energie- und Wellenlangendispersive Röntgenspektroskopie . . . . .	17
2.2.4	SQUID-Magnetometrie . . . . .	18
2.3	Quantenchemische Methoden . . . . .	18
2.3.1	VASP . . . . .	18
2.3.2	LMTO . . . . .	18
2.3.3	PHONOPY . . . . .	19
2.3.4	Hilfsprogramme . . . . .	20

# **I Boride im $\text{Ti}_3\text{Co}_5\text{B}_2$ -Strukturtyp** **21**

## **3 Ternäre Phasen im $\text{Ti}_3\text{Co}_5\text{B}_2$ -Typ** **23**

3.1 Die Phasen $\text{Nb}_3\text{Ru}_5\text{B}_2$ und $\text{Ta}_3\text{Ru}_5\text{B}_2$ . . . . .	25
3.1.1 Phasenanalyse . . . . .	25
3.1.2 Einkristallstrukturanalyse . . . . .	26
3.1.3 Strukturbeschreibung . . . . .	28
3.1.4 Theoretische Untersuchung . . . . .	29
3.2 Die Phasen $\text{A}_{3-x}\text{Ru}_{5+x}\text{B}_2$ mit $\text{A} = \text{Zr}, \text{Hf}$ . . . . .	37
3.2.1 Phasenanalyse . . . . .	37
3.2.2 Einkristallstrukturanalyse . . . . .	38
3.2.3 Strukturbeschreibung . . . . .	39
3.2.4 Theoretische Untersuchung . . . . .	40
3.3 Phononen-Untersuchungen an ternären Phasen des $\text{Ti}_3\text{Co}_5\text{B}_2$ -Typs . .	47
3.3.1 Validierung der Methodik . . . . .	48
3.3.2 Die Phase $\text{Hf}_3\text{Ir}_5\text{B}_2$ . . . . .	52
3.3.3 Vorhersage von Boriden des $\text{Ti}_3\text{Co}_5\text{B}_2$ -Typs . . . . .	55

## **4 Quaternäre Phasen im $\text{Ti}_3\text{Co}_5\text{B}_2$ -Typ** **61**

4.1 Die quaternären Substitutionsvarianten der Phase $\text{Nb}_3\text{Ru}_5\text{B}_2$ . . .	63
4.1.1 Theoretische Vorüberlegungen . . . . .	63
4.1.2 Phasenanalyse . . . . .	63
4.1.3 Einkristallstrukturanalyse . . . . .	66
4.1.4 Strukturbeschreibung und Diskussion . . . . .	69
4.1.5 Elektronische Einflüsse auf die Phasenzusammensetzung . . . .	74
4.2 Die $\text{Ti}_{13-x}\text{Ru}_{5-y}\text{Ir}_y\text{B}_{2+x}$ -Reihe . . . . .	79
4.2.1 Phasenanalyse . . . . .	79
4.2.2 Einkristallstrukturanalyse . . . . .	81
4.2.3 Strukturbeschreibung und Diskussion . . . . .	83
4.2.4 Theoretische Untersuchung . . . . .	88

## **5 Quinäre Phasen im $\text{Ti}_3\text{Co}_5\text{B}_2$ -Typ** **101**

5.1 Die quinäre $\text{Sc}_2\text{FeRu}_{5-x}\text{Ir}_x\text{B}_2$ -Reihe . . . . .	103
5.1.1 Phasenanalyse und Metallographische Untersuchung . . . . .	103

5.1.2	Einkristallstrukturanalyse und Strukturbeschreibung . . . . .	106
5.1.3	Magnetische Untersuchung . . . . .	109

## **II Boride im Perowskit-Typ 121**

### **6 Ternäre und quaternäre Phasen des $\text{Ti}_2\text{Rh}_6\text{B}$ -Strukturtyps 123**

6.1	Theoretische Vorüberlegungen . . . . .	125
6.2	Die $\text{Zr}_{1-x}\text{Ir}_x\text{Pd}_x\text{B}$ -Reihe . . . . .	127
6.2.1	Phasenanalyse . . . . .	127
6.2.2	Einkristallstrukturanalyse . . . . .	129
6.2.3	Strukturbeschreibung und Diskussion . . . . .	130
6.3	Die Phase $\text{Zr}_2\text{Ir}_4\text{Ni}_2\text{B}$ und ihr magnetisches Verhalten . . . . .	131
6.4	$\text{Sc}_2\text{Ir}_6\text{B}$ und die $\text{Sc}_2\text{Ir}_{6-x}\text{Pd}_x\text{B}$ -Reihe . . . . .	134
6.5	Die $\text{Sc}_2\text{Ir}_{6-x}\text{Ni}_x\text{B}$ -Reihe . . . . .	138
6.6	Einflüsse auf die Bildung des $\text{Ti}_2\text{Rh}_6\text{B}$ -Strukturtyps . . . . .	141

### **7 Zusammenfassung und Ausblick 145**

## **Anhang 149**

### **A Literaturverzeichnis 151**

### **B Verwendete Chemikalien 159**

### **C Verwendete Computerprogramme 161**

### **D Daten der Rietveldverfeinerungen 163**

### **E Daten der Einkristallstrukturanalysen 173**

E.1	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_3\text{Ru}_5\text{B}_2$ . . . . .	174
E.2	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Ta}_3\text{Ru}_5\text{B}_2$ . . . . .	176
E.3	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Zr}_{2.86(5)}\text{Ru}_{5.14(5)}\text{B}_2$ . . . . .	178
E.4	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Hf}_{2.83(2)}\text{Ru}_{5.17(2)}\text{B}_2$ . . . . .	180

E.5	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Hf}_3\text{Ir}_5\text{B}_2$	182
E.6	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_{2\ 00(3)}\text{Sc}_{1\ 00(3)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	184
E.7	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_{1\ 47(2)}\text{Sc}_{1\ 53(2)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	186
E.8	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_{2\ 01(4)}\text{Ti}_{0\ 99(4)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	188
E.9	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_{1\ 96(7)}\text{V}_{1\ 04(7)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	190
E.10	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_{2\ 41(2)}\text{Cl}_{0\ 59(2)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	192
E.11	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_{2\ 47(3)}\text{Mn}_{0\ 53(3)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	194
E.12	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_{2\ 17(3)}\text{Fe}_{0\ 83(3)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	196
E.13	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_{2\ 43(4)}\text{Co}_{0\ 57(4)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	198
E.14	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_{2\ 49(3)}\text{Ni}_{0\ 51(3)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	200
E.15	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Ti}_3\text{Ru}_{2\ 9(2)}\text{Ir}_{2\ 1(2)}\text{B}_2$	202
E.16	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Ti}_2\text{Ru}_{2\ 8(2)}\text{Ir}_{2\ 2(2)}\text{B}_3$	204
E.17	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Ti}_{2\ 63(4)}\text{Ru}_{3\ 4(2)}\text{Ir}_{1\ 6(2)}\text{B}_{2\ 37(4)}$	206
E.18	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Ti}_{2\ 27(6)}\text{Ru}_{2\ 5(2)}\text{Ir}_{2\ 5(2)}\text{B}_{2\ 73(6)}$	208
E.19	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Sc}_2\text{FeRu}_{4\ 05(8)}\text{Ir}_{0\ 95(8)}\text{B}_2$	210
E.20	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Sc}_2\text{FeRu}_{3\ 2(1)}\text{Ir}_{1\ 8(1)}\text{B}_2$	212
E.21	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Sc}_2\text{FeRu}_{2\ 04(7)}\text{Ir}_{2\ 96(7)}\text{B}_2$	214
E.22	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Sc}_2\text{FeRu}_{1\ 2(1)}\text{Ir}_{3\ 8(1)}\text{B}_2$	216
E.23	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Zr}_2\text{Ir}_{4\ 1(3)}\text{Pd}_{1\ 9(3)}\text{B}$	218
E.24	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Zr}_2\text{Ir}_{4\ 11(7)}\text{Ni}_{1\ 89(7)}\text{B}$	220
E.25	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Sc}_2\text{Ir}_{4\ 3(6)}\text{Pd}_{1\ 7(6)}\text{B}$	222
E.26	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Sc}_2\text{Ir}_{2\ 1(3)}\text{Pd}_{3\ 9(3)}\text{B}$	224