

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Der $Ti_3Co_5B_2$ -Strukturtyp . . . . .	2
1.2	Boride mit perowskitähnlicher Struktur . . . . .	6
1.2.1	Der $Ti_2Rh_6B$ -Strukturtyp . . . . .	8
1.3	Motivation und Zielsetzung . . . . .	11
1.3.1	Untersuchungen am $Ti_3Co_5B_2$ -Strukturtyp . . . . .	11
1.3.2	Untersuchungen am $Ti_2Rh_6B$ -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 $Ti_3Co_5B_2$ -Strukturtyp 21

## 3 Ternäre Phasen im $Ti_3Co_5B_2$ -Typ 23

3.1 Die Phasen $Nb_3Ru_5B_2$ und $Ta_3Ru_5B_2$ . . . . .	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 $A_{3-x}Ru_{5+x}B_2$ mit $A = Zr, Hf$ . . . . .	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 $Ti_3Co_5B_2$ -Typs . .	47
3.3.1 Validierung der Methodik . . . . .	48
3.3.2 Die Phase $Hf_3Ir_5B_2$ . . . . .	52
3.3.3 Vorhersage von Boriden des $Ti_3Co_5B_2$ -Typs . . . . .	55

## 4 Quaternäre Phasen im $Ti_3Co_5B_2$ -Typ 61

4.1 Die quaternären Substitutionsvarianten der Phase $Nb_3Ru_5B_2$ . . . .	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 $Ti_{3-x}Ru_{5-y}In_yB_{2+x}$ -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 $Ti_3Co_5B_2$ -Typ 101

5.1 Die quinäre $Sc_2FeRu_{5-x}Ir_xB_2$ -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 $Ti_2Rh_6B$ -Strukturtyps 123**

6.1	Theoretische Vorüberlegungen . . . . .	125
6.2	Die $Zr_2Ir_{6-x}Pd_xB$ -Reihe . . . . .	127
6.2.1	Phasenanalyse . . . . .	127
6.2.2	Einkristallstrukturanalyse . . . . .	129
6.2.3	Strukturbeschreibung und Diskussion . . . . .	130
6.3	Die Phase $Zr_2Ir_4Ni_2B$ und ihr magnetisches Verhalten . . . . .	131
6.4	$Sc_2Ir_6B$ und die $Sc_2Ir_{6-x}Pd_xB$ -Reihe . . . . .	134
6.5	Die $Sc_2Ir_{6-x}Ni_xB$ -Reihe . . . . .	138
6.6	Einflüsse auf die Bildung des $Ti_2Rh_6B$ -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 $Nb_3Ru_5B_2$ . . . . .	174
E.2	Einkristallstrukturanalyse von $Ta_3Ru_5B_2$ . . . . .	176
E.3	Einkristallstrukturanalyse von $Zr_{2.86(5)}Ru_{5.14(5)}B_2$ . . . . .	178
E.4	Einkristallstrukturanalyse von $Hf_{2.83(2)}Ru_{5.17(2)}B_2$ . . . . .	180

E.5	Emkristallstrukturanalyse von $\text{Hf}_3\text{Ir}_5\text{B}_2$	182
E.6	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_2\text{Sc}_{100(3)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	184
E.7	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_{147(2)}\text{Sc}_{153(2)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	186
E.8	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_2\text{Ti}_{099(4)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	188
E.9	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_{196(7)}\text{V}_{104(7)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	190
E.10	Emkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_2\text{C}_{1059(2)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	192
E.11	Emkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_2\text{Mn}_{053(3)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	194
E.12	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_2\text{Fe}_{083(3)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	196
E.13	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_2\text{Co}_{057(4)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	198
E.14	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Nb}_2\text{Ni}_{051(3)}\text{Ru}_5\text{B}_2$	200
E.15	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Ti}_3\text{Ru}_2\text{Ir}_2\text{B}_2$	202
E.16	Emkristallstrukturanalyse von $\text{Ti}_2\text{Ru}_2\text{Ir}_2\text{B}_3$	204
E.17	Emkristallstrukturanalyse von $\text{Ti}_2\text{Ru}_3\text{Ir}_{16(2)}\text{B}_{237(4)}$	206
E.18	Emkristallstrukturanalyse von $\text{Ti}_2\text{Ru}_2\text{Ir}_2\text{B}_{273(6)}$	208
E.19	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Sc}_2\text{FeRu}_{405(8)}\text{Ir}_{095(8)}\text{B}_2$	210
E.20	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Sc}_2\text{FeRu}_3\text{Ir}_{18(1)}\text{B}_2$	212
E.21	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Sc}_2\text{FeRu}_2\text{Ir}_2\text{B}_2$	214
E.22	Emkristallstrukturanalyse von $\text{Sc}_2\text{FeRu}_{12(1)}\text{Ir}_{38(1)}\text{B}_2$	216
E.23	Emkristallstrukturanalyse von $\text{Zr}_2\text{Ir}_4\text{Pd}_{19(3)}\text{B}$	218
E.24	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Zr}_2\text{Ir}_4\text{Ni}_{189(7)}\text{B}$	220
E.25	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Sc}_2\text{Ir}_4\text{Pd}_{17(6)}\text{B}$	222
E.26	Einkristallstrukturanalyse von $\text{Sc}_2\text{Ir}_2\text{Pd}_{39(3)}\text{B}$	224