

## **Sr<sub>2</sub>Ru<sub>7</sub>B<sub>8</sub>, ein Strontium-Rutheniumborid mit einer neuen, vom AlB<sub>2</sub>-Typ abgeleiteten Kanalstruktur**

WALTER JUNG\* und FRANK DIESENBACHER

Köln, Institut für Anorganische Chemie der Universität

*Frau Professor Marianne Baudler zum 70. Geburtstag am 27. April 1991 gewidmet*

**Inhaltsübersicht.** Das Strontium-Rutheniumborid Sr<sub>2</sub>Ru<sub>7</sub>B<sub>8</sub> wurde aus den Elementen bei 1100°C dargestellt (Ta-Tiegel, verschweißte Stahllampulle, Überschuß an Sr). Es kristallisiert tetragonal in der Raumgruppe P4<sub>2</sub>/m mit  $a = 644,4(1)$  pm,  $c = 1015,6(1)$  pm und  $Z = 2$ . Die Struktur wurde mit Röntgen-Einkristallmethoden bestimmt (Vierkreisdiffraktometer-Intensitäten, MoK $\alpha$ ,  $R = 0,034$ ,  $R_w = 0,028$ , 1059 symmetrieunabhängige Reflexe mit  $I > 2\sigma_I$ , 37 variable Parameter). Sr<sub>2</sub>Ru<sub>7</sub>B<sub>8</sub> bildet eine neue, durch Substitutions- und Verschiebungsoperationen aus dem AlB<sub>2</sub>-Typ ableitbare Kanalstruktur aus. Die Kanäle, in denen sich Zick-Zack-Ketten aus Strontiumatomen befinden, verlaufen schichtweise abwechselnd in [100]- und in [010]-Richtung. Die Boratome bilden Paare und ebene, verzweigte B<sub>6</sub>-Gruppen. Der spezifische elektrische Widerstand liegt zwischen  $\varrho = 2,4$  m $\Omega \cdot$  cm (290 K) und  $\varrho = 0,8$  m $\Omega \cdot$  cm (4,2 K) (gepreßte und gesinterte Stäbchen, 4-Punkt-Gleichstrommethode).

### **Sr<sub>2</sub>Ru<sub>7</sub>B<sub>8</sub>, a Strontium Ruthenium Boride with a New Channel Structure Derived from the AlB<sub>2</sub>-Type**

**Abstract.** The strontium ruthenium boride Sr<sub>2</sub>Ru<sub>7</sub>B<sub>8</sub> was prepared by reaction of the elements at 1100°C (tantalum crucible sealed in a steel tube, excess of Sr). It crystallizes tetragonally in the space group P4<sub>2</sub>/m with the lattice constants  $a = 644.4(1)$  pm,  $c = 1015.6(1)$  pm and  $Z = 2$ . The structure was determined by means of X-ray single crystal methods (four-circle diffractometer, MoK $\alpha$ ,  $R = 0.034$ ,  $R_w = 0.028$ , 1059 symmetrically independent reflections with  $I > 2\sigma_I$ , 37 variable parameters). Sr<sub>2</sub>Ru<sub>7</sub>B<sub>8</sub> forms a new channel structure derivable from the AlB<sub>2</sub> type by substitutions and shifting operations. The channels contain zig-zag chains of strontium atoms. They are running in the [100] and in the [010] directions in alternating layers. The boron atoms are arranged in pairs and in plane, branched B<sub>6</sub> groups. The electrical resistivity is in the range from  $\varrho = 2.4$  m $\Omega \cdot$  cm (290 K) to  $\varrho = 0.8$  m $\Omega \cdot$  cm (4.2 K) (pressed and sintered rods, 4-probe DC method).

**Key words:** Strontium Ruthenium Boride; Crystal Structure; Electrical Resistivity.

## **1. Einleitung**

Über Erdalkali-Rutheniumboride ist bisher wenig bekannt; lediglich die beiden Magnesiumverbindungen Mg<sub>2</sub>Ru<sub>5</sub>B<sub>4</sub> und Mg<sub>5</sub>Ru<sub>13</sub>B<sub>11</sub> konnten vor einiger Zeit dargestellt und strukturell aufgeklärt werden [1]. Ihre Strukturen enthalten Kanäle mit fünfeckigem Querschnitt, in denen sich lineare Ketten von Magnesium-

atomen befinden. Kanalstrukturen findet man bei Erdalkali-Übergangsmetallboriden häufig, jedoch treten zumeist Kanäle mit sechseckigem Querschnitt auf. Das gilt vor allem für Verbindungen mit den schwereren Erdalkalimetallen wie  $\text{Ba}_2\text{Ni}_9\text{B}_6$  [2],  $\text{CaRh}_3\text{B}_2$ ,  $\text{Sr}_{2/3}\text{Rh}_3\text{B}_2$ ,  $\text{Ba}_{2/3}\text{Rh}_3\text{B}_2$  [3] und  $\text{EA}_{2/3}\text{Pt}_3\text{B}_2$  mit  $\text{EA} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$  [4]. Die Untersuchungen im Dreistoffsystem  $\text{Sr}-\text{Ru}-\text{B}$  haben nun zu  $\text{Sr}_2\text{Ru}_7\text{B}_8$ , einem weiteren ternären Borid mit einer Kanalstruktur geführt.

## 2. Darstellung und Analysen

$\text{Sr}_2\text{Ru}_7\text{B}_8$  entsteht in röntgenreiner Form, wenn ein Elementgemenge im Molverhältnis  $\text{Sr}:\text{Ru}:\text{B} = 2:1:1,2$  in einem unter Argon in eine Stahllampulle eingeschweißten Tantal-Tiegel sechs Tage auf  $1100^\circ\text{C}$  erhitzt wird. Überschüssiges Strontium wird anschließend mit Methanol aus dem Präparat herausgelöst; der Borüberschuß kompensiert Verluste, die durch Reaktion mit dem Tiegelmaterial auftreten. Die Verbindung fällt als hellgraues, mikrokristallines Pulver an. Zur Strukturbestimmung mit Röntgenmethoden geeignete Einkristalle konnten nur bei der Umsetzung der Elemente in einer Lithiumschmelze erhalten werden ( $\text{Li}:\text{Sr}:\text{Ru}:\text{B}$  im Molverhältnis  $50:2,3:7:8$ ,  $1100^\circ\text{C}$ , 4 Tage, verschweißte Tantalampulle).

Zur Überprüfung der Zusammensetzung wurden der Strontium- und der Borgehalt bestimmt; auf eine Rutheniumbestimmung wurde verzichtet. Die Methode zur Bestimmung des Bors haben wir bereits an anderer Stelle beschrieben [5]. Zur Strontiumbestimmung wurde die Substanz in einem Gemisch aus Perchlorsäure und konz. Salpetersäure (Volumenverh. 10:1) unter Erwärmen gelöst und das Ruthenium durch zweimaliges Eindampfen mit Perchlorsäure vollständig als Ruthenium-

Tabelle 1 Kristallographische Daten von  $\text{Sr}_2\text{Ru}_7\text{B}_8$

Kristallsystem	tetragonal
Raumgruppe	$\text{P4}_2/\text{m}$ (Nr. 84)
Gitterkonstanten (Guinier-Werte)	$a = 644,4(1) \text{ pm}$ $c = 1015,6(1) \text{ pm}$
Dichte pyknometrisch	7,45
Dichte röntgenogr. $[\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}]$	7,633
Formeleinheiten pro EZ	2
Kristallabmessungen	$150 \times 60 \times 60 \text{ } \mu\text{m}^3$
Strahlung	$\text{MoK}\alpha$
Meßbereich	$\theta \leq 40^\circ$
Scan-Weite $(\theta/2\theta, +25\% \text{ Untergrund})$	$1^\circ$
max. Meßzeit pro Reflex	60 sec
Reflexe gemessen	5219
symmetrieunabhängig	1366
mit $I > 2\sigma_I$	1059
$R_I$ (Datensatz)	0,034
$R$ (ohne Refl. mit $I \leq 2\sigma_I$ )	0,034
$R_w$ ( $1/\sigma^2$ )	0,028
Zahl der freien Parameter	37

Tabelle 2 Lageparameter und Temperaturfaktoren (in  $\text{pm}^2$ ) von  $\text{Sr}_2\text{Ru}_7\text{B}_8$  (RG  $\text{P4}_2/\text{m}$ )  
(in Klammern Standardabweichungen in Einheiten der letzten Stelle)

	x	y	z	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
4 Ru(1) 4j	0,7881(1)	0,0941(1)	0,0	29(2)	39(2)	19(2)	0	0	0
2 Ru(2) 2f	0,5	0,5	0,25	19(2)	19	23(3)	0	0	0
8 Ru(3) 8k	0,2945(1)	0,1051(1)	0,2443(1)	29(2)	31(2)	25(1)	0	2(1)	0
4 Sr(1) 4j	0,2318(1)	0,3905(1)	0,0	98(4)	74(3)	68(3)	5(3)	0	0
4 B(1) 4g	0,0	0,0	0,1582(9)	37(35)	34(35)	10(32)	−30(28)	0	0
4 B(2) 4i	0,0	0,5	0,4113(9)	19(31)	24(31)	2(32)	−15(24)	0	0
8 B(3) 8k	0,602(1)	0,2264(9)	0,1693(6)	46(24)	30(25)	55(22)	−2(21)	5(22)	2(20)

Tabelle 3 Atomabstände in  $\text{Sr}_2\text{Ru}_7\text{B}_8$  bis 350 pm (Sr—Sr bis 400 pm, B—B bis 300 pm)

Ru(1)—Ru(1)	1 × 298,8(1)	Sr(1)—Ru(1)	1 × 312,5(1)
—Ru(3)	2 × 284,4(1)		1 × 332,4(1)
	2 × 298,1(1)		1 × 343,7(1)
—Sr(1)	1 × 312,5(1)	—Ru(2)	2 × 315,3(1)
	1 × 332,4(1)	—Ru(3)	2 × 311,5(1)
	2 × 343,7(1)		2 × 339,5(1)
—B(1)	2 × 219,4(6)		2 × 344,0(1)
—B(2)	2 × 215,1(4)	—Sr(1)	1 × 330,1(1)
—B(3)	2 × 226,3(6)		1 × 373,7(1)
		—B(1)	2 × 333,7(4)
Ru(2)—Ru(3)	4 × 286,9(1)	—B(2)	2 × 318,4(3)
—Sr(1)	4 × 315,2(1)	—B(3)	2 × 312,6(7)
—B(3)	4 × 205,2(6)		2 × 319,4(6)
			2 × 335,9(6)
Ru(3)—Ru(1)	1 × 284,4(1)		
	1 × 298,1(1)	B(1)—Ru(1)	2 × 219,4(7)
—Ru(2)	1 × 286,9(1)	—Ru(3)	2 × 219,6(4)
—Ru(3)	2 × 285,2(1)		2 × 224,5(4)
	1 × 297,5(1)	—Sr(1)	2 × 333,7(4)
—Sr(1)	1 × 311,5(1)	—B(1)	1 × 186,5(12)
	1 × 339,5(1)		
	1 × 344,0(1)	B(2)—Ru(1)	2 × 215,1(4)
—B(1)	1 × 219,7(4)	—Ru(3)	2 × 217,0(6)
	1 × 224,5(4)	—Sr(1)	2 × 318,4(3)
—B(2)	1 × 217,0(6)	—B(2)	1 × 180,2(13)
—B(3)	1 × 212,7(7)	—B(3)	2 × 179,7(7)
	1 × 226,2(7)		
	1 × 236,4(7)	B(3)—Ru(1)	1 × 226,3(6)
		—Ru(2)	1 × 205,2(6)
		—Ru(3)	1 × 212,7(7)
			1 × 226,2(7)
			1 × 236,4(7)
		—Sr(1)	1 × 312,6(7)
			1 × 319,4(7)
			1 × 335,9(6)
		—B(2)	1 × 179,7(10)

tetroxid abdestilliert. Im Rückstand konnte das Strontium in ammoniakalischer Lösung durch komplexometrische Titration mit Titriplex III gegen Phthaleinpurpur bestimmt werden [6].

Die Analysen ergaben folgende Werte in Gew.-%: Sr 17,74 (ber. 18,08); B 9,08 (8,92); Ru (aus der Differenz) 73,18 (73,00).

### 3. Röntgenographische Untersuchungen

Präzessionsaufnahmen eines Einkristalls von  $\text{Sr}_2\text{Ru}_7\text{B}_8$  ( $\text{MoK}\alpha$ ,  $h0l$  und  $hk0$  bis  $hk2$ ) ergaben tetragonale Symmetrie, die Laueklasse  $4/m$  und die Auslöschungsbedingung  $00l$  nur vorhanden mit  $l = 2n$ . Dem entspricht das Beugungssymbol  $4/mP4_2$  mit den zugehörigen Raumgruppen  $P4_2$  und  $P4_2/m$ .

Guinieraufnahmen ( $\text{CuK}\alpha_1$ ) ließen sich mit den aus den Einkristallaufnahmen gewonnenen Parametern vollständig indizieren und führten zu den in Tab. 1 angegebenen Gitterkonstanten.

Zur Strukturbestimmung wurden die Reflexintensitäten eines Einkristalls mit einem Vierkreisdiffraktometer (CAD4, Fa. Enraf-Nonius) gemessen. Angaben zu den Meßbedingungen enthält Tab. 1. Die Lösung der Struktur gelang in der Raumgruppe  $P4_2/m$  durch Interpretation der Patterson-Synthese und nachfolgende Differenz-Fourier-Synthesen, sowie Voll-Matrix-Verfeinerungen. Die Rechnungen erfolgten mit den Programmsystemen X-Ray 76 [7] und SHELX 76 [8].

Tab. 1 enthält Angaben über die R-Werte sowie die Zahl der verwendeten Reflexe und der freien Parameter. Lageparameter, Temperaturfaktoren und Atomabstände finden sich in den Tab. 2 und 3.

### 4. Die elektrische Leitfähigkeit

Zur Messung der elektrischen Leitfähigkeit in Abhängigkeit von der Temperatur nach der 4-Punkt-Gleichstrommethode wurde die mikrokristalline Substanz mit einem Druck von 20 kN zu einem Stäbchen mit den Abmessungen  $9 \times 4 \times 1 \text{ mm}^3$  gepreßt und in einer verschweißten Tantalampulle 24 h bei  $900^\circ\text{C}$  gesintert. Die Messung erfolgte bei einer Stromstärke von 10 mA durch langsames Absenken des Stäbchens in eine Kanne mit flüssigem Helium bei gleichzeitiger Registrierung von Temperatur (geeichte Silicium-Diode) und Spannungsabfall über die Probe. Die Auftragung des spezifischen elektrischen Widerstandes gegen die Temperatur in Abb. 1 zeigt, daß metallische Leitfähigkeit vorliegt. Die Werte liegen zwischen  $2,4 \text{ m}\Omega \cdot \text{cm}$  bei 290 K und  $0,8 \text{ m}\Omega \cdot \text{cm}$  bei der Temperatur des flüssigen Heliums.

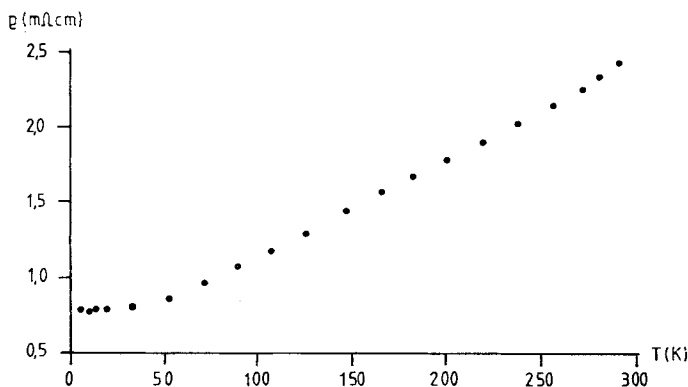


Abb. 1 Spezifischer elektrischer Widerstand von  $\text{Sr}_2\text{Ru}_7\text{B}_8$  zwischen 290 und 4,2 K (gepreßtes und gesintertes Stäbchen, 4-Punkt-Gleichstrommethode)

### 5. Beschreibung und Diskussion der Struktur

$\text{Sr}_2\text{Ru}_7\text{B}_8$  kristallisiert in einer neuen Kanalstruktur. Ruthenium- und Boratome bilden gemeinsam ein Gerüst, das von Kanälen durchzogen ist, die Zick-Zack-Ketten aus Strontiumatomen enthalten. Wie Abb. 2 zeigt, folgen in Richtung der c-Achse identische, in der a/b-Ebene unendlich ausgedehnte Strukturblöcke aufeinander, deren Dicke  $c/2$  beträgt, und die jeweils um  $90^\circ$  um die c-Achse gegeneinander verdreht sind. Die Kanäle verlaufen dadurch schichtweise abwechselnd in  $[100]$  und in  $[010]$ -Richtung. Der Strukturausschnitt der Abb. 2 erstreckt sich in c-Richtung über  $3/2$  Identitätsperioden und umfaßt somit drei dieser Blöcke; sie sind am Rande der Abbildung durch Klammern markiert und werden von  $4^4$ -Netzen aus Rutheniumatomen senkrecht zur c-Achse begrenzt.

Die Strukturblöcke können durch Substitutions- und Verschiebungsoperationen aus dem  $\text{AlB}_2$ -Typ abgeleitet werden, der auch von dem binären Borid  $\text{RuB}_{2-x}$  [9, 10] ausgebildet wird. Abb. 3a zeigt dessen Struktur mit idealisierter Zusammensetzung in einer Projektion längs  $[001]$ . Das Sechsecknetz aus Boratomen (kleine Kreise) liegt zwischen zwei Rutheniumschichten (Doppelkreise).

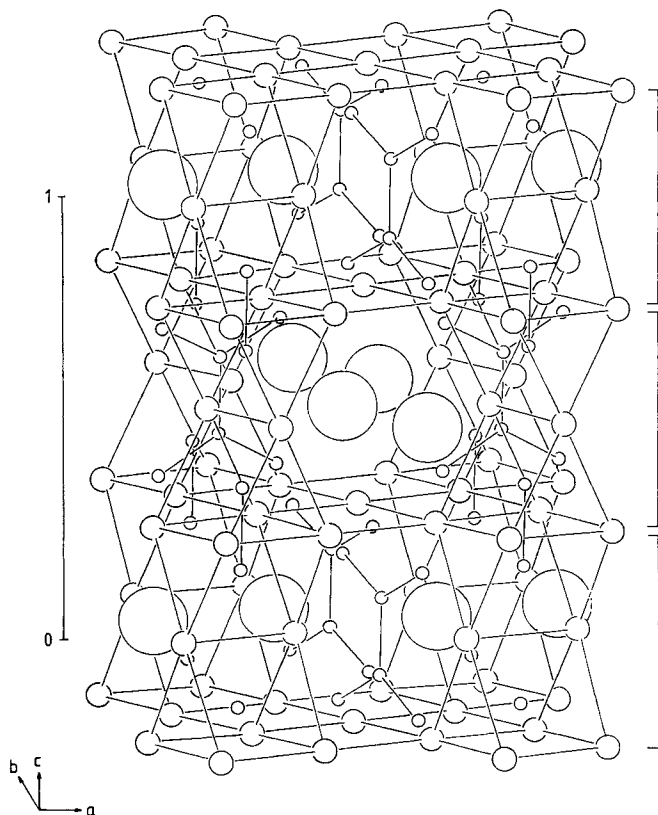


Abb. 2 Die Struktur von  $\text{Sr}_2\text{Ru}_7\text{B}_8$  (große Kreise: Sr, mittlere Kreise: Ru, kleine Kreise: B)

Das Prinzip der Substitution besteht darin, daß jeweils zwei in c-Richtung aufeinanderfolgende Rutheniumatome durch ein Strontiumatom ungefähr in der Mitte zwischen deren Positionen ersetzt werden. Das Strontiumatom liegt damit innerhalb der Bor-Schicht, und das hat zur Folge, daß die umgebenden Bor-Positionen aus Abstandsgründen nicht mehr besetzt werden können.

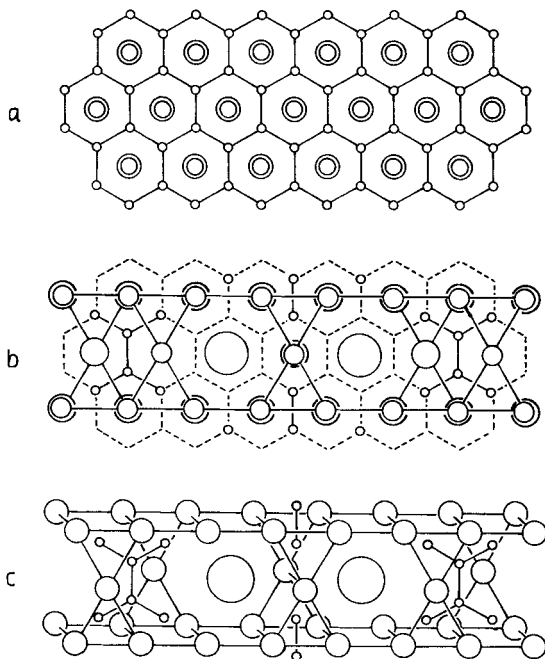


Abb. 3 Ableitung der  $\text{Sr}_2\text{Ru}_7\text{B}_8$ - aus der  $\text{AlB}_2$ -Struktur (kleine Kreise: B, mittlere Kreise: Ru, große Kreise: Sr) a) Projektion der  $\text{RuB}_{2-x}$ -Struktur ( $\text{AlB}_2$ -Typ) in  $[001]$ -Richtung (Doppelkreise: Ru unterhalb und oberhalb des Sechsecknetzes aus Boratomen); b) Projektion eines Ausschnittes aus der Struktur von  $\text{Sr}_2\text{Ru}_7\text{B}_8$  in  $[1\bar{2}0]$ -Richtung (Sr und B annähernd in gleicher Höhe, Ru in Ebenen unterhalb und oberhalb der Sr/B-Ebene); c) perspektivische Ansicht des in b) gezeigten Strukturausschnittes

In Abb. 3b ist ein Ausschnitt aus der  $\text{Sr}_2\text{Ru}_7\text{B}_8$ -Struktur in einer Projektion längs  $[1\bar{2}0]$  zu sehen. Der Verband der Rutheniumatome, die wieder in Ebenen oberhalb und unterhalb der Bor-Schicht liegen, ist hier durch Verbindungslinien hervorgehoben. Gegenüber der  $\text{RuB}_{2-x}$ -Struktur in Abb. 3a sind zwei Rutheniumpaare durch je ein Strontium in der Höhe der Boratome ersetzt, und die den Strontiumatomen benachbarten Borpositionen sind unbesetzt. Dadurch wird das ursprüngliche Sechsecknetz aus Boratomen, das durch gestrichelte Linien angedeutet ist, in  $\text{B}_6$ -Gruppen und Bor-Paare aufgelöst. (Die isoliert erscheinenden Boratome am Rande des Strukturausschnittes gehören zu  $\text{B}_6$ -Gruppen der angrenzenden, um  $90^\circ$  verdrehten Strukturblöcke (s. Abb. 2), und die leeren Borpositionen in diesem Bereich sind auf Strontiumatome in den Nachbarblöcken

zurückzuführen.) Auch einige weitere Rutheniumatome fehlen. An diesen Stellen sieht man statt der Doppelkreise nur einfache Kreise. Hier werden Ruthenium-Paare durch ein Strontiumatom oberhalb bzw. unterhalb des gezeichneten Strukturbereiches substituiert. In Abb. 3c ist der in 3b dargestellte Struktur-ausschnitt perspektivisch gezeichnet.

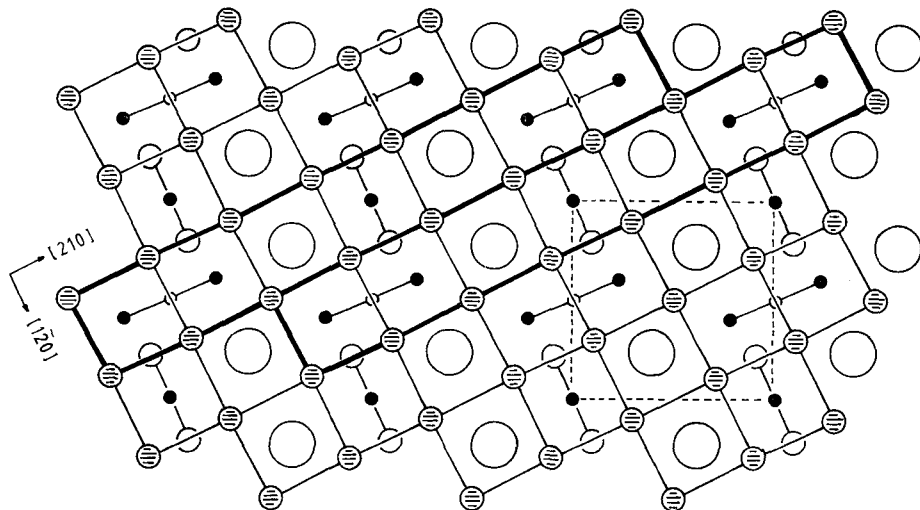


Abb. 4 Projektion der  $\text{Sr}_2\text{Ru}_7\text{B}_8$ -Struktur in  $[001]$ -Richtung zwischen  $z = 0,24$  und  $z = 0,76$ . Der in Abb. 3b und c gezeigte Struktur-ausschnitt ist dick umrandet; gestrichelt eingezeichnet ist der Bereich einer Elementarzelle. Sr in  $z = 1/2$ ; Ru: leere Kreise in  $z = 1/2$ , schraffierte Kreise = zwei Atome übereinander in  $z \approx 1/4$  und  $z \approx 3/4$ ; B: jeweils zwei Atome übereinander, ausgefüllte Kreise in  $z = 0,34$  und  $0,66$ , leere Kreise in  $z = 0,41$  und  $z = 0,59$ .

Den gesamten Block, der entsprechend Abb. 2 durch Drehung und Stapelung die  $\text{Sr}_2\text{Ru}_7\text{B}_8$ -Struktur aufbaut, zeigt Abb. 4 in einer Projektion der Struktur längs  $[001]$  in den Grenzen  $z = 1/4$  bis  $z = 3/4$ . Darin ist die Elementarzelle gestrichelt eingezeichnet, und zwei Bereiche, die dem Ausschnitt der Abb. 3b und c entsprechen, sind mit dicken Linien eingerahmt. Der gesamte Block wird dadurch aufgebaut, daß sich das in einem solchen Bereich enthaltene, vom  $\text{AlB}_2$ -Typ abgeleitete Strukturmotiv in  $[1\bar{2}0]$ -Richtung in einer jeweils um zwei Ru—Ru-Abstände längs  $[210]$  verschobenen Lage wiederholt.

Die Abb. 4 läßt deutlich die parallelen Zick-Zack-Ketten aus Strontiumatomen erkennen, die in diesem Block in  $[010]$ -Richtung verlaufen. Abb. 5 zeigt eine solche Kette in dem von Ruthenium- und Boratomen gebildeten Kanal in perspektivischer Darstellung. Die Sr—Sr-Abstände betragen abwechselnd 330 und 374 pm; die Ketten bestehen also aus Sr-Paaren. Der Abstand innerhalb eines Paares ist wesentlich kürzer als der metallische Abstand für KZ 12 (430 pm) und der metallische Einfachbindungsabstand nach Pauling (383 pm) [11]. Noch etwas kürzere Sr—Sr-Abstände werden in  $\text{Sr}_2\text{Rh}_5\text{B}_4$  (323 pm),  $\text{Sr}_3\text{Rh}_8\text{B}_6$  (313 pm) und

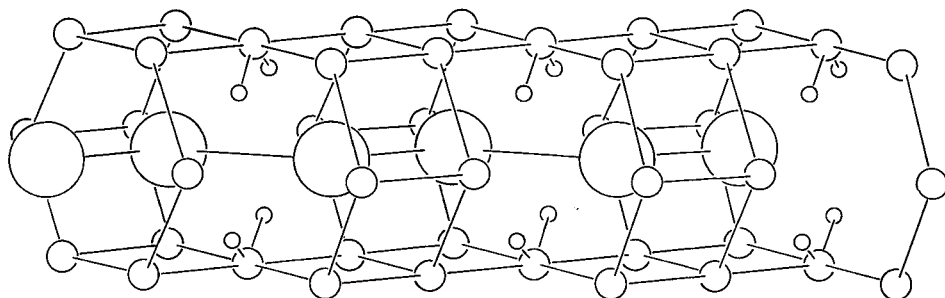


Abb. 5 Zick-Zack-Kette aus Strontiumatomen in einem Kanal aus Ruthenium- und Boratomen.

$\text{Sr}_5\text{Rh}_{14}\text{B}_{10}$  (302 und 307 pm) gefunden [3]. Die Strukturen dieser Verbindungen enthalten Kettenstücke aus 2, 3 bzw. 5 Strontiumatomen. Sie leiten sich vom  $\text{CeCo}_3\text{B}_2$ -Typ ab und können ebenso wie der  $\text{CeCo}_3\text{B}_2$ -Typ selbst nach dem oben beschriebenen Substitutionsprinzip auf die  $\text{AlB}_2$ -Struktur zurückgeführt werden. Die extrem kurzen, weit unter den doppelten Kovalenzradien liegenden Sr—Sr-Abstände deuten darauf hin, daß die Strontiumatome in all diesen Verbindungen in erheblichem Maße ionisiert vorliegen.

Wie Abb. 5 auch zeigt, liegt jedes Strontiumatom in einem unvollständigen hexagonalen Prisma aus 11 Rutheniumatomen (Sr—Ru: 313–344 pm). Eine Ecke des Prismas bleibt frei. Sie wird, allerdings in wesentlich größerem Abstand (374 pm) von einem Strontiumatom des nächsten Paares in der Kette gebildet. Die 2. Koordinationssphäre des Strontiums besteht aus 10 Boratomen, die sich vor den 6 Seitenflächen und, als Teil einer  $\text{B}_6$ -Gruppe, vor der unvollständigen Sechseckfläche des hexagonalen Prismas befinden (Sr—B: 313 bis 336 pm).

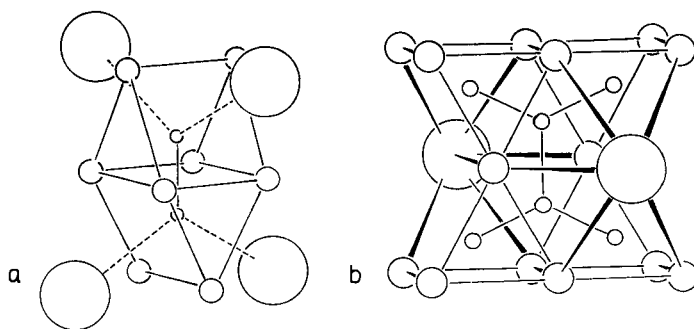


Abb. 6 Koordinationspolyeder um die Boratome. a) Umgebung eines Bor-Paares; b) Umgebung einer  $\text{B}_6$ -Gruppe

Die oben beschriebenen Strukturblöcke sind, wie aus Abb. 2 ersichtlich ist, so gestapelt, daß in c-Richtung verlaufende Säulen trigonaler Prismen aus Rutheniumatomen gebildet werden. Die Prismen sind abwechselnd kanten- und flächenverknüpft und werden von den zu Paaren verbundenen Boratomen ( $\text{B}_1$ )



zentriert (B—B: 187 pm, Ru—B: 219 bis 225 pm). Abb. 6a zeigt die Umgebung eines Bor-Paares. Vor den freien Seitenflächen der Prismen liegen Strontiumatome mit einem Abstand von 334 pm zum Bor, der deutlich größer als die Summe der metallischen Radien (313 pm) ist. Die Umgebung der von den Boratomen B2 und B3 gebildeten, ebenen  $\text{B}_6$ -Gruppe ist in Abb. 6b wiedergegeben. Sie besteht aus sechs stark verzerrten trigonalen Prismen, die über gemeinsame Seitenflächen verknüpft sind. Vier dieser Prismen werden von fünf Rutheniumatomen und einem Strontiumatom gebildet, sie koordinieren die endständigen Boratome der  $\text{B}_6$ -Gruppe (B3, Ru—B: 205 bis 236 pm, Sr—B: 313 pm). Die beiden mittleren Boratome (B2) liegen in Prismen aus vier Ruthenium- und zwei Strontiumatomen (Ru—B: 215 und 217 pm, Sr—B: 318 pm). Die B—B-Abstände betragen einheitlich 180 pm.

$\text{B}_6$ -Gruppen der hier beschriebenen Form sind bereits in anderen ternären Boriden beobachtet worden, z. B. in  $\text{CeCr}_2\text{B}_6$  [12] und in der Verbindung  $\text{NaIr}_3\text{B}_4$  [13], die sich ebenfalls nach dem oben beschriebenen Substitutionsprinzip auf den  $\text{AlB}_2$ -Typ zurückführen läßt.

Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft und dem Fonds der Chemischen Industrie für die Unterstützung dieser Arbeit mit Sachmitteln.

## Literatur

- [1] SCHWEITZER, K.; JUNG, W.: Z. anorg. allg. Chem. **530** (1985) 127.
- [2] JUNG, W.; QUENTMEIER, D.: Z. Kristallogr. **151** (1980) 172.
- [3] JUNG, W.: J. Less-Common Met. **97** (1984) 253.
- [4] SHELTON, R. N.: J. Less-Common Met. **62** (1978) 191.
- [5] SCHMIDT, B.; JUNG, W.: Z. Naturforsch. **33b** (1978) 1430.
- [6] ANDEREGG, G.; FLASCHKA, H.; SALLMANN, R.; SCHWARZENBACH, G.: Helv. Chim. Acta **37** (1953) 113.
- [7] STEWART, J. M.; MACHIN, P. A.; DICKINSON, C. W.; AMMON, H. L.; HECK, H.; FLACK, H.: Report TR-446, University of Maryland, 1976.
- [8] SHELDRICK, G. M.: SHELX-76, Program for Crystal Structure Determination, University of Cambridge 1976.
- [9] KEMPTER, C. P.; FRIES, R. J.: J. Chem. Phys. **34** (1961) 1994.
- [10] ARONSSON, B.: Acta Chem. Scand. **17** (1963) 2036.
- [11] PAULING, L.: Die Natur der Chemischen Bindung, Weinheim: Verlag Chemie, 1973.
- [12] KUZ'MA, YU. B.; STARODUB, P. K.: Inorg. Mater. **9** (1973) 337.
- [13] MIRGEL, R.; JUNG, W.: J. Less-Common Met. **143** (1988) 49.

Bei der Redaktion eingegangen am 13. Juni 1990.

Anschr. d. Verf.: Prof. Dr. W. JUNG, F. DIESSENBACHER, Inst. f. Anorg. Chemie d. Univ.,  
Greinstr. 6, W-5000 Köln 41