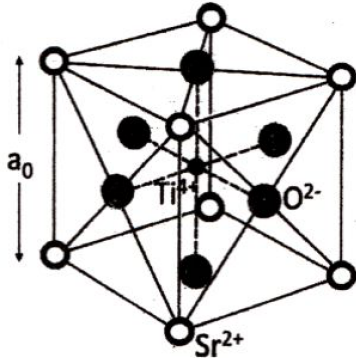


### Kubische Perowskit-Kristalle

Strontiumtitanat ( $SrTiO_3$ ) kristallisiert in der kubischen Perowskit-Kristallstruktur (s. Abbildung).



Die Positionen der Ionen in der kubischen Elementarzelle sind:  
 $Sr^{2+}$  im Eckpunkt  $(0,0,0)$ ;  
 $Ti^{4+}$  im Kubuszentrum  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ;  
 $O^{2-}$  in den Flächemitten  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ ,  $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ,  $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ .

Die Ionen lassen sich als Kugeln beschreiben, die sich in der Einheitszelle gerade berühren. Die Ionenradien betragen  $r(Sr^{2+}) = 0,1440\text{ nm}$ ,  $r(O^{2-}) = 0,1411\text{ nm}$ ,  $r(Ti^{4+}) = 0,0605\text{ nm}$ .

- Zeigen Sie, dass die Gitterkonstante den Wert  $a_0 = 0,4032\text{ nm}$  hat. Bestimmen Sie die Massendichte  $\rho$  und den Braggwinkel  $\Theta$  des  $(001)$ -Reflexes der Cu  $K_\alpha$ -Linie ( $\lambda = 0,154\text{ nm}$ )! (3 Punkte)
- Begründen Sie qualitativ, (i) warum die Anordnung der Basionen in der Elementarzelle ("Struktur") zur Schwächung des  $(001)$ -Reflexes führt, und (ii) warum dieser Reflex trotzdem nicht vollkommen ausgelöscht wird! (2 Punkte)
- Geben Sie für das  $Ti^{4+}$ -Ion im Zentrum der kubischen Einheitszelle die Anzahl der nächsten Nachbarionen (NN), zweitnächsten Nachbarionen (2NN) und drittnächsten Nachbarionen (3NN) im Kristall an. Benennen Sie die jeweilige Atomsorte, sowie ihren Abstand zum  $Ti^{4+}$ -Ion! (3 Punkte)
- Betrachten Sie nun das Potential im Zentrum des Kubus. Zeigen Sie, dass die Beiträge der nächsten und drittnächsten Nachbarn sich gerade kompensieren! (4 Punkte)
- Es kann sich im  $SrTiO_3$  eine spontane Verschiebung der  $(Ti^{4+})$ - und  $(Sr^{2+})$ -Untergitter in  $(001)$ -Richtung relativ zum  $(O^{2-})$ -Untergitter ergeben. Diese führt zu einer spontanen Polarisation in dieser Richtung (Ferro-Elektrizität). Quantitativ ist die Polarisation  $P$  als Dipolmoment / Volumen definiert. Bestimmen Sie den Abstand  $\delta$  der Verschiebung, der zu einer Polarisation  $P = 0,3\text{ C/m}^2$  führt! (4 Punkte)
- Auch manche magnetischen Verbindungen haben die kubische Perowskit-Struktur, z.B.  $LaMnO_3$ . Beachten Sie, dass in dieser Verbindung die beiden Kationen dreiwertig sind. Erläutern Sie die Elektronenkonfiguration  $Ar(3d)^4$  von  $Mn^{3+}$  und begründen Sie, dass dessen Spinquantenzahl  $S = 2$  beträgt!

Nimmt man für den g-Faktor den Wert  $g = 2$  an, so erzeugt der Spin  $s = \hbar/2$  eines einzelnen Elektrons ein magnetisches Moment  $m_0 = \mu_B = 9,274 \cdot 10^{-24}\text{ Am}^2$  (=Bohrsches Magneton). Bestimmen Sie unter dieser Voraussetzung das maximale B-Feld (Einheit: Tesla), das im  $LaMnO_3$  aufgrund der ausgerichteten Mn-Spins entstehen kann! Die Gitterkonstante von  $LaMnO_3$  beträgt  $a_0 = 0,40\text{ nm}$ . (4 Punkte)