

## Struktureigenschaften von Gallaten und Aluminaten aufgeklärt

Werkstoffe haben seit jeher Schlüsselfunktionen in modernen Technologien. Daher kommt der Erforschung und Herstellung neuer leistungsfähigerer aber auch der Verbesserung bekannter Materialien für innovative Anwendungen eine besondere Bedeutung zu. Die mit seltenen Erden dotierten Gallate und Aluminat des Perowskit-Typs  $ABO_3$  ( $A = \text{Nd, Pr, Sm, Gd, Y, Ho, Er}$ ;  $B = \text{Al, Ga}$ ) zeigen solch herausragende Qualitäten z.B. als Substratmaterialien für Hochtemperatur-Supraleiterfilme. Als Manganate werden sie für „Giant“-Magnetowiderstände, beispielsweise in modernen magnetischen Sensoren zur Orientierung von Raumsonden im Weltraum, zur Magnetfeldmessung der Erde oder in Alarminrichtungen eingesetzt. Gallate und Aluminat gelten ebenfalls als viel versprechende Laserkristalle und optische Speichermedien. Darüber hinaus wurden attraktive Transporteigenschaften festgestellt; Strontium- und Magnesium-dotierte sowie reine  $\text{NdGaO}_3$ -Kristalle zeigen eine hohe Sauerstoffionenleitfähigkeit und sind

somit potenzielle Festkörperelektrolyte.



**v.l.n.r.:** Die ukrainischen Kollegen **L. Vasylechko, D. Savytskii, M. Vakiv, U. Bismayer (stehend) und A. Matkovskii** bei ihrem Besuch an der Universität Hamburg

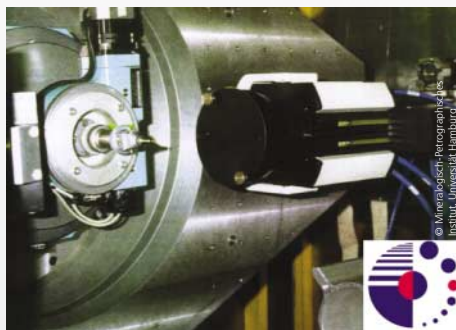
Bei zahlreichen dieser Phänomene sind die lokalen Mechanismen aufgrund mangelnder Strukturdaten der Kristalle weitgehend ungeklärt. Auch die Formation homogener polarisierter Regionen (Domänen) innerhalb der Gallate und Aluminat sowie die ihrer nur wenige Atome breiten Domänenwände ist bisher unbekannt. Domänenwände treten in allen kristallinen Festkörpern auf, die ferroische Phasenumwandlungen durchlaufen. Durch Druck oder Temperatur ändert sich die Symmetrie der Kristalle und ihrer Domänenwände. Durch diese Änderung können sie mechanisch verschiedene Orientierungszustände einnehmen, die energetisch jedoch alle gleich sind. Daher könnten Domänenwände in Zukunft technologisch interessanter sein als die Leiterbahnen auf Halbleiterbauelementen.

Die Studien der Forscher des Mineralogisch-Petrographischen Instituts der Universität Hamburg und des *Semiconductor Electronic Departments* der Universität L'viv konzentrierten sich daher zum einen auf die Strukturaufklärung der reinen Gallate und Aluminate sowie dotierter Mischkristalle der Verbindung  $\text{La}_{1-x}\text{RE}_x\text{GaO}_3$  und  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Ga}_{1-2x}\text{Mg}_x\text{O}_3$ . Zum Anderen waren Details der ferroelastischen Domänenkonfigurationen Untersuchungsgegenstand.

Während die ukrainischen Partner über ausgezeichnete Kenntnisse in Kristallzüchtungsmethoden und Dotierungseffekten verfügen, kann der deutsche Partner umfangreiche Erfahrungen in der effizienten Nutzung von Synchrotronstrahlung und modernster Methoden zur Strukturaufklärung und bei der Charakterisierung ferroischer Phasenumwandlungen vorweisen.

Ein Meilenstein der Strukturaufklärung war das Verständnis einer ungewöhnlichen isosymmetrischen Transformation des zentrosymmetrischen  $\text{NdGaO}_3$ . Bei einer Temperatur nahe 200 K rotieren die Schwingungsellipsoide der Neodym- und Gallium-Kationen im Kristall nur um ca. 90 Grad, ihre die Symmetrie ändert sich jedoch nicht. Die physikalischen Eigenschaften der Verbindung zeigen aber geringe Änderungen des dielektrischen Verhaltens. Durch Strukturaufklärungen im System  $\text{REGaO}_3 - \text{LaGaO}_3$  gelang es, eine vollständige Konvergenz der Gitterkonstanten  $a$  und  $b$  herbeizuführen und domänenarme Kristalle mit optimalen Substrateigenschaften und einer verbesserten Kristallabscheidung zu synthetisieren.

Die Röntgendaten für die Strukturaufklärung wurden am Synchrotron in Hamburg *DESY/HASYLAB* gewonnen. Die Studien belegen, dass für die Kristallabscheidung flüssiger Phasen Mischkristalle mit den Komponenten  $\text{La}_{1-x}\text{Nd}_x\text{GaO}_3$  gut geeignete Substratmaterialien sind.



**Kappa-Diffraktometer mit einem CCD-Detektor.**  
**Mithilfe dieses hoch empfindlichen zweidimensionalen Lichtdetektors, der als „charge coupled device“ Lichtenergie in elektrische Ladungen umwandelt, die dann im Computer als zweidimensionales Bild gespeichert werden, gelang es, die Kristallstruktur der Mischkristalle mittels schwacher Röntgenstrahlen am Synchrotron DESY/HASYLAB zu bestimmen.**