Anhang A

Begriffsdefinitionen

Im Folgenden werden einige in dieser Arbeit verwendeten Begriffe genauer definiert. Sie können manchmal eine andere Bedeutung als beim üblichen, physikalischen Gebrauch haben.

zur Intensitätsverteilung

Die mit Röntgenstreuung beobachteten Intensitäten werden begrifflich unterteilt aufgrund ihres *Ursprungs im Probenmaterial*. Es wird unterschieden zwischen **Bragg-Reflex des Substrats**, **Bragg-Reflex des (Manganit-)Filmes** und Intensitäten des **reziproken Gitterstabes** des Substrats und des Films. Insbesondere ist beim zweiten die gesamte Intensitätsverteilung gemeint, die aufgrund der Streuung am Film verursacht wird. Bei Letzterem wird die Intensität des reziproken Gitterstabes häufig dem Substrat zugeordnet, weil es meistens den größten Anteil dazu liefert, aber genauso kommen weitere Beiträge durch Streuung am Film, sowie Interferenzen zwischen Film und Substrat hinzu.

Des Weiteren werden die Intensitätsverteilungen begrifflich unterschieden aufgrund der *Symmetrie* von Film bzw. Substrat. Es werden dabei die Begriffe verwendet, wie **kubischer Bragg-Reflex**, **Überstrukturreflex** oder **orthorhombischer bzw. monokliner Überstrukturreflex**. Unter *kubische Bragg-Reflexe* werden Intensitätsverteilungen verstanden, welche ebenfalls vorhanden wären, hätte der Film (das Substrat) eine kubische $Pm\bar{3}m$-Symmetrie. In pseudo-kubischer Notation sind das alle Reflexe (H',K',L') mit ganzzahligen Indizes (H', K', L' ϵZ). Alle weiteren Intensitätsverteilungen, welche aufgrund der niedrigeren Symmetrie des Films (Substrates) zusätzlich gefunden werden, sind als *Überstrukturreflex* bezeichnet. In pseudo-kubischer Notation haben sie mindestens **einen** halbzahligen Index H', K' oder L'. Da in der gesamten Arbeit nur zwischen den Raumgruppen Pbnm (orthorhombisch), P2_1/m (monoklin), R$\bar{3}$c (rhomboedrisch) und $F\bar{1}$ (triklin) unterschieden wird, werden Überstrukturreflexe, welche ausschließlich bei orthorhombischer bzw. monokliner Symmetrie, nicht aber bei rhomboedrischer bzw. trikliner Symmetrie gefunden werden, als *orthorhombischer bzw. monokliner Überstrukturreflex* bezeichnet. Zusätzlich gibt es weitere Intensitätsmaxima, welcher obigen Strukturen nicht zugeordnet werden können. Es handelt sich meistens um **Orbital-Polaron-Ordnungsreflexe**, welche aufgrund von geringfügigen Gitterverzerrungen von geordneten Orbital-Polaronen im Film entstehen.

Die Intensitätsverteilung der Bragg-Reflexe des Films (außer den Orbital-Polaron-Ordnungsreflexen) hat mehrere Maxima, welche aufgrund dessen *strukturellen Eigenschaften* entstehen. Es werden dabei die Begriffe **Zentralpeak**, **Satellitenpeak (n-ter Ordnung)** (bzw. **Modulationspeak**), **Zwillingspeak** bzw. **Bragg-Reflex der Zwillingsdomäne (-individuums)** verwendet. Die beiden letzten Begriffe beschreiben exakt dasselbe: es sind Bragg-Reflexe aufgrund des Gitters von individuellen (nicht-kohärent zueinander betrachteten) Domänen der Zwillingsindividuen. Aufgrund der lateral geringen (und manchmal auch stark variierenden) Domänengröße sind die Zwillingspeaks relativ breit. Wegen der zum kubischen Substrat verkippten Netzebenen stehen sie in einem festen Winkel zu entsprechenden Substrat-Reflexen. Der Zentralpeak und die Satellitenpeaks sind Maxima, welche aufgrund periodischer Strukturmodulationen mit großen Periodenlängen entstehen — in diesem Fall wegen einer periodischen Anordnung von Zwillingsdomänen. Die Abstände im reziproken Raum zwischen benachbarten Zentral-/Satellitenpeaks sind — im Unterschied zu den Zwillingspeaks — bei allen Bragg-Reflexe des Films gleich groß und stellen ein periodisches Überstrukturgitter dar. Als Zentralpeak (Satellitenpeak 0. Ordnung) wird dasjenige Intensitätsmaximum bezeichnet, welches auf dem reziproken Gitterstab des Substrates liegt. Weil an dieser Position von verschiedenen Domänen Intensitätsbeiträge kommen können, findet man manchmal ein Maximum, obwohl ansonsten keine Anzeichen für ein Überstrukturgitter zu finden sind. Die restlichen Maxima werden entsprechend ihres Abstandes zum Zentralpeak als Satellitenpeaks n-ter Ordnung bezeichnet. Ihre Halbwertsbreite nimmt aufgrund der kurzreichweitigen Ordnung der Modulation näherungsweise quadratisch mit n zu.

zur Orientierung von Richtungen und Ebenen

Zur Bezeichnung von Richtungen im Real- und im reziproken Raum — letzteres entspricht Ebenen im Realraum — werden die Begriffe **out-of-plane** und **in-plane** verwendet. Richtungen im Realraum parallel zur Oberfläche (= Substratgrenzfläche) werden als *in-plane Richtung*, senkrecht zu ihr als *out-of-plane Richtung* bezeichnet. Entsprechendes gilt für den reziproken Raum: Richtungen im reziproken Raum (bzw. Bragg-Reflexe) werden als *in-plane* bezeichnet, wenn sie senkrecht zur Oberflächennormalen liegen. Verläuft die Richtung im reziproken Raum (bzw. Bragg-Reflex) in Richtung der Oberflächennormalen, so spricht man von *out-of-plane* Richtung (bzw. Reflex). Haben Bragg-Reflexe sowohl nichtverschwindende in-plane als auch out-of-plane Komponenten, so werden sie als **gemischte Reflexe** bezeichnet.

zum Wachstum

Zum Wachstum der Manganit-Filme werden verschiedene Begriffe zu ihrer Struktur bezüglich der Substrat-Referenz verwendet: Unter dem Begriff **epitaktisch** wird ein bezüglich der Substratreferenz definiert orientiertes Wachstum verstanden, ohne dass man im Detail die Filmstruktur kennt. Dagegen versteht man unter **pseudomorphes** Wachstum, dass die in-plane Gitterkonstanten vom Film und Substrat identisch sind.

zur Leitfähigkeit

Bei der Diskussion zur *Leitfähigkeitsmessung* werden die Begriffe **metallische Leitfähigkeit** und **isolierende Leitfähigkeit** (bzw. **Metall**, **Isolator**) oder **Metall-Isolator-Übergang**) verwendet. Damit ist das Temperaturverhalten des spezifischen Widerstandes der Manganiten, nicht die Größe des Widerstandes oder gar Bindungsverhätnisse, gemeint, welche entweder, entsprechend den Metallen, einen negativen Differentialkoeffizienten $\mathrm{d}\rho/\mathrm{dT}<0$ (in der paramagnetischen, antiferromagnetischen oder orbital-polarongeordneten Phase) oder, entsprechend Isolatoren oder Halbleitern, einen positiven Koeffizienten $\mathrm{d}\rho/\mathrm{dT}>0$ (in der ferromagnetischen Phase) haben können.

zum Festkörper

In Unterscheidung eines Festkörpers entsprechend ihrer *Größe* zwischen nahezu 2D-Materialien und 3D-Materialien werden in dieser Arbeit die Begriffe **Film** und **Volumenkristall** genannt. Letzteres entspricht dem englischen Begriff **bulk**.

Entsprechend ihrer *kristallinen Beschaffenheit* werden die Begriffe **Einkristall** und **Polykristall** bzw. **Pulver** verwendet. Die Begriffe werden fast ausschließlich für 3D-Materialien benutzt.

Entsprechend ihrer *Funktion* als Referenz-Matrix werden die $SrTiO_3$-Kristalle als **Substrate** bezeichnet, auf welchen die Manganit-Filme gewachsen werden.

zu den Zwillingen

Zur Beschreibung der verschiedenartigen Domänen wird der Begriff Zwilling verwendet (siehe Kapitel 5.1). Zur Unterscheidung der verschiedenen Bedeutungen für Zwilling werden folgende Begriffe eingeführt: **Zwillingsindividuum**, **Zwillingsindividuenpaar(e)** und **Domäne eines Zwillingsindividuen(paars)**.

Unter ersterem werden alle Domänen mit gleicher Einheitszelle und gleicher Einheitszellenorientierung verstanden, während unter *Zwillingsindividuenpaar* gemeint ist, zwei Zwillingsindividuen, welche eine gemeinsame, niederindizierte Ebene (Zwillingsebene) und zwei linear unabhängige, gemeinsame Achsen in der Zwillingsebene. Unter *verschiedene Zwillingsindividuenpaare* sind Zwillingsindividuenpaare, welche aus dem ersten mittels Symmetrieoperationen (Spiegelung/Drehung) an der höhersymmetrischen Referenz (Substrat) entstehen. Die resultierenden Einheitszellen unterscheiden sich von den ausgehenden und haben in der Regel keine gemeinsame, niederindizierte Ebene, sowie zwei linear unabhängige Achsen in der Ebene (d.h. Zwillingsebene), sondern können nur eine gemeinsame Achse haben.

Während mit *Zwillingsindividuum* oder *-individuenpaar* alle äquivalenten Domänen gemeint sind, wird für eine spezielle Domäne der Begriff *Domäne eines Zwillingsindividuums (oder eines Zwillingsindividuenpaars)* verwendet.

Zwillingsindividuen können aneinander *kohärent* anschließen, falls sie eine gemeinsame Zwillingsebene (+ zwei gemeinsame Achsen in der Ebene) haben.

Anhang B

Abkürzungen

1D	eindimensional
2D	zweidimensional
3D	dreidimensional
a.u.	arbitrary units
CMR	collosal magnetoresistance
CTR	crystal truncation rod
ED	electron diffraction
ESRF	European Synchrotron Radiation Facility (*Grenoble, Frankreich*)
EZ	Einheitszelle(n)
FC	field cooled
HASYLAB	Hamburger Synchrotronlabor (*DESY, Hamburg*)
HERDA	high-resolution elastic recoil detection analysis
JT	Jahn-Teller
LCAO	linear combination of atomic orbitals
MBE	molecular beam epitaxy
MIT	metal-insulator transition
NMR	nuclear magnetic resonance
NSLS	National Synchrotron Light Source (*Brookhaven, USA*)
MR	magnetoresistance
OR	orthorhombicity
PID	proportional-integral-differential (*Modus zur Temperaturregelung*)
pc	pseudo-cubic
PLD	pulsed laser deposition
r.l.u.	reciprocal lattice units (*reziproke Gittereinheiten*)
SQUID	superconducting quantum interference device
TEM	transmission electron microscopy
ZFC	zero field cooled

Anhang C

Baumpfaddiagramme

Zur Herleitung der Korrelationsfunktion für Verzwillingung von orthorhombischen/monoklinen Systemen, welche man in Volumenkristallen vorfindet, werden zwei Arten von Domänen angenommen, welche den beiden Zwillingsindividuen entsprechen: Die (pseudo-kubischen) Einheitszellen[1] sind zum kubischen Referenzsystem verzerrt, so dass die pseudo-kubische x-Achse auch eine Komponente in der y-Richtung hat. Die beiden Zwillingsindividuen unterscheiden sich nur im Vorzeichen der y-Komponente ihrer pseudo-kubischen x-Achse von der Einheitszelle. Sie werden im nachfolgenden Text entsprechend als aufsteigender (↑) und absteigender (↓) Domänentyp bezeichnet.

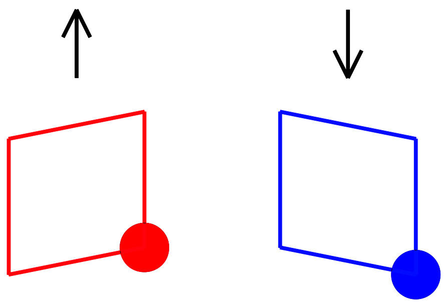


Abbildung C.1: Die pseudo-kubische Einheitszellen der beiden Zwillingsindividuen.

Da die y-Kompenenten der pseudo-kubischen x-Achse beider Domänentypen dem Betrag nach gleich groß sind, werden diskrete *Auslenkungspositionen* n eingeführt. Wenn man der linearen Kette (x-Richtung) aus pseudo-kubischen Einheitszellen entlang folgt, so gilt, dass die nachfolgende Zelle $m+1$, je nach Domänentyp, einen um eine Auslenkungsposition höheren oder niedrigeren Wert als die Ausgangszelle m hat.

[1]Von den pseudo-kubischen Einheitszellen wird jeweils nur eine pseudo-kubische Achse betrachtet, da die beiden anderen Achsen parallel zu den kubischen Koordinaten verlaufen und somit für die nachfolgenden Überlegungen uninteressant sind.

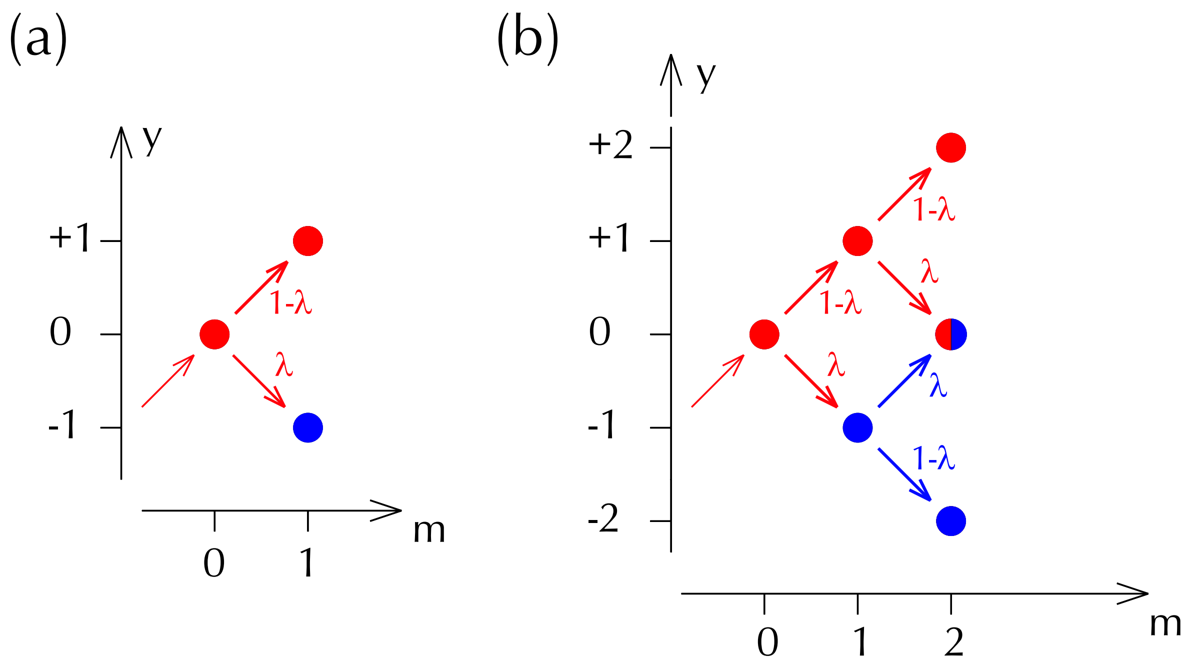


Abbildung C.2: Baumpfaddiagramme zur Bestimmung der Auslenkungskorrelationen des (a) nächsten und (b) übernächsten Nachbarn bei ursprünglich aufsteigender Domäne

Im Modell des Kapitels 5.3.2 wird angenommen, dass die nachfolgende Einheitszelle mit einer konstanten Wahrscheinkeit λ dem anderen Domänentyp angehört. Ohne Einschränkung der Allgemeingültigkeit kann in diesem Fall als Ausgangspunkt für alle kommenden Überlegungen die Auslenkungsposition $n = 0$ und der Ort $m = 0$ angenommen werden. Vor der Ausgangszelle wird ein aufsteigender Domänentyp angenommen.[2] Das Baumpfaddiagramm gibt dann an, mit welcher Wahrscheinlichkeit sich im Abstand von m Zellen eine Einheitszelle um n Auslenkungspositionen höher oder tiefer befindet. Im Fall des nächsten Nachbarn (m=1) ist die Lösung offensichtlich: Bei obigen Ausgangsbedingungen ist mit einer Wahrscheinlichkeit $1 - \lambda$ die nächste Zelle um eine Auslenkungsposition höher und mit einer Wahrscheinlichkeit λ um eine Auslenkungsposition tiefer (siehe Abbildung C.2a). Um die möglichen Änderungen der Auslenkungspositionen der übernächsten Nachbarzelle zu bestimmen, muss man im Baumpfaddiagramm die weiteren Verzweigungen der Endpositionen des Baumpfaddiagramms für den nächsten Nachbarn betrachten (siehe Abbildung (C.2b)). Ausgehend von der Auslenkungsposition +1 für $m = 1$ kann mit einer Wahrscheinlichkeit von $1 - \lambda$ die Auslenkungsposition +2 erreicht werden, so dass von der Ausgangsposition aus gesehen die Wahrscheinlichkeit $(1-\lambda)^2$ ist. Analog kann man die Wahrscheinlichkeit für die Auslenkungsposition -2 errechnen. Zu beachten ist dabei, dass der Domänentyp sich hier bereits zur Domäne $\downarrow$ geändert hat, so dass die Domäne von $m = 1$ zu $m = 2$ beibehalten wird. Daraus folgt eine Wahrscheinlichkeit (von der Ausgangsposition aus gesehen) von $\lambda(1 - \lambda)$. Die Auslenkungsposition 0 kann auf zwei Wegen erreicht werden: Der eine Weg ist der, dass der Domänentyp sich zweimal ändert, und der andere der, dass die aufsteigen-

[2]Für den absteigenden Domänentyp bekommt man um die n-Achse gespiegelte Resultate.

de Domäne anfangs beibehalten wird und danach zur absteigenden Domäne ändert, so dass man eine Gesamtwahrscheinlichkeit von $\lambda^2+\lambda(1-\lambda)=\lambda$ erhält. Wenn man das Baumpfaddiagramm zu immer entfernteren Nachbarn weiter verfolgt, so sind wegen der Verzweigungen immer mehr Wege möglich, eine bestimmte Auslenkungsposition zu erreichen. In den folgenden fünf Gleichungen (m=1,2,3,4,5) wird die Wahrscheinlichkeit errechnet, dass man beim m-ten Nachbarn eine Auslenkungsposition n erreicht. Die Auslenkungsposition wird durch die Zahl vor dem Doppelpunkt gekennzeichnet, die Wahrscheinlichkeit steht rechts vom Doppelpunkt und ist nach der Häufigkeit des Wechsels des Domänentyps sortiert.

$$\begin{array}{lll} \mathbf{+1}: & 1-\lambda & \\ \mathbf{-1}: & & \lambda \end{array} \tag{C.1}$$

$$\begin{array}{llll} \mathbf{+2}: & (1-\lambda)^2 & & \\ \mathbf{0}: & & \lambda(1-\lambda) & +\lambda^2 \\ \mathbf{-2}: & & \lambda(1-\lambda) & \end{array} \tag{C.2}$$

$$\begin{array}{lllll} \mathbf{+3}: & (1-\lambda)^3 & & & \\ \mathbf{+1}: & & \lambda(1-\lambda)^2 & +2\,\lambda^2(1-\lambda) & \\ \mathbf{-1}: & & \lambda(1-\lambda)^2 & +\lambda^2(1-\lambda) & +\lambda^3 \\ \mathbf{-3}: & & \lambda(1-\lambda)^2 & & \end{array} \tag{C.3}$$

$$\begin{array}{llllll} \mathbf{+4}: & (1-\lambda)^4 & & & & \\ \mathbf{+2}: & & \lambda(1-\lambda)^3 & +3\,\lambda^2(1-\lambda)^2 & & \\ \mathbf{0}: & & \lambda(1-\lambda)^3 & +2\,\lambda^2(1-\lambda)^2 & +2\,\lambda^3(1-\lambda) & +\lambda^4 \\ \mathbf{-2}: & & \lambda(1-\lambda)^3 & +\lambda^2(1-\lambda)^2 & +2\,\lambda^3(1-\lambda) & \\ \mathbf{-4}: & & \lambda(1-\lambda)^3 & & & \end{array} \tag{C.4}$$

$$\begin{array}{lllllll} \mathbf{+5}: & (1-\lambda)^5 & & & & & \\ \mathbf{+3}: & & \lambda(1-\lambda)^4 & +4\,\lambda^2(1-\lambda)^3 & & & \\ \mathbf{+1}: & & \lambda(1-\lambda)^4 & +3\,\lambda^2(1-\lambda)^3 & +3\,\lambda^3(1-\lambda)^2 & +3\,\lambda^4(1-\lambda) & \\ \mathbf{-1}: & & \lambda(1-\lambda)^4 & +2\,\lambda^2(1-\lambda)^3 & +4\,\lambda^3(1-\lambda)^2 & +2\,\lambda^4(1-\lambda) & +\lambda^5 \\ \mathbf{-3}: & & \lambda(1-\lambda)^4 & +\lambda^2(1-\lambda)^3 & +3\,\lambda^3(1-\lambda)^2 & & \\ \mathbf{-5}: & & \lambda(1-\lambda)^4 & & & & \end{array} \tag{C.5}$$

Es ist offensichtlich, dass das Hauptproblem zur Berechnung der Korrelationsfunktion die Bestimmung einer allgemeinen Formel für die Vorfaktoren vor den Potenzen $(1-\lambda)^o\lambda^{m-o}$ ist. Daher wurde im folgenden für $m=1,\ldots,9$ nur die Vorfaktoren ohne die Potenzen tabelliert, wobei nur Werte ungleich Null berücksichtigt wurden.

1	
	1

1		
	1	1
	1	

1			
	1	2	
	1	1	1
	1		

1				
	1	3		
	1	2	2	1
	1	1	2	
	1			

1					
	1	4			
	1	3	3	3	
	1	2	4	2	1
	1	1	3		
	1				

1						
	1	5				
	1	4	4	6		
	1	3	6	6	3	1
	1	2	6	3	3	
	1	1	4			
	1					

1							
	1	6					
	1	5	5	10			
	1	4	8	12	6	4	
	1	3	9	9	9	3	1
	1	2	8	4	6		
	1	1	5				
	1						

1								
	1	7						
	1	6	6	15				
	1	5	10	20	10	10		
	1	4	12	18	18	12	4	1
	1	3	12	12	18	6	4	
	1	2	10	5	10			
	1	1	6					
	1							

1									
	1	8							
	1	7	7	21					
	1	6	12	30	15	20			
	1	5	15	30	30	30	10	5	
	1	4	16	24	36	24	16	4	1
	1	3	15	15	30	10	10		
	1	2	12	6	15				
	1	1	7						
	1								

Man findet auf dem ersten Blick einige Gemeinsamkeiten der Tabellen (mit unterschiedlichem Abstand m):

Es gibt insgesamt m+1 Zeilen und m+1 Spalten, wobei nur in einem Bereich eines Keils die Werte ungleich Null sind. In der ersten Spalte ist nur die erste Zeile (Zeile q=0 mit dem

Wert Eins) ungleich Null.[3] In der zweiten Spalte sind die Werte von Zeile q=1 bis Zeile q=m immer eins. In der dritten Spalte kann man die Werte ab Zeile q=1 in der Formel $m - q$ zusammenfassen. Des Weiteren haben ab der 2. Spalte ($o = 1$) m-o+1 Zeilen Vorfaktoren ungleich Null.

Eine Systematik zur Bestimmung des Vorfaktors findet man, wenn man die gleichen Zeilen- und Spaltenpositionen bei unterschiedlichem Abstand m betrachtet.

$$\begin{array}{cccccccccccc}
q\backslash o & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & \cdots \\
0 & \cdot & & & & & & & & & \\
1 & & \square & \cdot & & & & & & & \\
2 & & \cdot & \cdot & \square & \cdot & & & & & \\
3 & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \square & \cdot & & & \\
4 & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \square & \cdot & \\
\vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{array} \tag{C.6}$$

Schreibt man aus jeder Tabelle die Werte horizontal nebeneinander, deren Position durch ein Kästchen in Abbildung (C.6) skizziert sind, so kann man anhand der entstandenen Tabelle (siehe Tabelle C, unten) deren Werte durch Binome allgemein schreiben.

u=1 m	q=1 o=1	q=2 o=3	q=3 o=5	q=4 o=7	q=5 o=9
1	1				
2	1				
3	1	1			
4	1	2			
5	1	3	1		
6	1	4	3		
7	1	5	6	1	
8	1	6	10	4	
9	1	7	15	10	1

In diesem Fall erhält man die Formel:

$$\binom{\mathrm{m-q}}{\mathrm{m-q-(q-1)}} \tag{C.7}$$

Dabei ist der Binom nur definiert, wenn beide Zahlen nicht negativ und die untere Zahl nicht größer als die obere Zahl ist. Sind diese Bedingungen nicht erfüllt, so steht stattdessen der Wert Null.

[3] Die Spalten werden im folgenden mit der Variablen o belegt und starten in der ersten Spalte mit dem Wert $o = 0$. Die Zeilen werden mit der Variablen $q = \frac{m-n}{2}$ beschrieben und starten ebenfalls in der ersten Zeile mit dem Wert $q = 0$. Die Tabellen, die aus den Baumpfaddiagrammen entstanden sind, werden entsprechend dem Abstand des betrachteten Einheitszellenpaar mit der Variablen m beschrieben.

Das oben genannte Beispiel wurde mit dem Index u=1 beziffert. In entsprechender Weise kann man weitere Reihen zu Tabellen zusammenfassen. In Tabelle (C.8) werden die Positionen für andere Reihen gezeigt, die mit anderen Indizes u beziffert werden.

$$\begin{array}{cccccccccccc} q\backslash o & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & \cdots \\ 0 & 0 & & & & & & & & & \\ 1 & & 1 & 0 & & & & & & & \\ 2 & & 3 & 2 & 1 & 0 & & & & & \\ 3 & & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 & 0 & & & \\ 4 & & 7 & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 & 0 & \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array} \tag{C.8}$$

Für weitere Indizes u sehen die Tabellen folgendermaßen aus:

u=0 m	q=0 o=0	q=1 o=2	q=2 o=4	q=3 o=6	q=4 o=8
1	1				
2	1	1			
3	1	2			
4	1	3	1		
5	1	4	3		
6	1	5	6	1	
7	1	6	10	4	
8	1	7	15	10	1
9	1	8	21	20	5

u=2 m	q=2 o=2	q=3 o=4	q=4 o=6	q=5 o=8
1				
2				
3	1			
4	2			
5	3	2		
6	4	6		
7	5	12	3	
8	6	20	12	
9	7	30	30	4

u=3 m	q=2 o=1	q=3 o=3	q=4 o=5	q=5 o=7
1				
2	1			
3	1			
4	1	2		
5	1	4		
6	1	6	3	
7	1	8	9	
8	1	10	18	4
9	1	12	30	16

u=4 m	q=3 o=2	q=4 o=4	q=5 o=6
1			
2			
3			
4	1		
5	2		
6	3	3	
7	4	9	
8	5	18	6
9	6	30	24

u=5 m	q=3 o=1	q=4 o=3	q=5 o=5	q=6 o=7
1				
2				
3	1			
4	1			
5	1	3		
6	1	6		
7	1	9	6	
8	1	12	18	
9	1	15	36	10

u=6 m	q=4 o=2	q=5 o=4	q=6 o=6
1			
2			
3			
4			
5	1		
6	2		
7	3	4	
8	4	12	
9	5	24	10

u=7 m	q=4 o=1	q=5 o=3	q=6 o=5
1			
2			
3			
4	1		
5	1		
6	1	4	
7	1	8	
8	1	12	10
9	1	16	30

Diese Tabellen können, ähnlich wie für $u = 1$, zu einem Binom zusammengefasst werden, jedoch ist für $u > 1$ ein zusätzlicher Faktor nötig, der ebenfalls als Binom geschrieben werden kann. In der Tabelle (C.9) sind die Formeln für die Vorfaktoren für verschiedene u - Werte dargestellt:

$$\begin{array}{ll} u = 0 & \binom{m-q}{m-q-q}\binom{q}{0} \\ u = 1 & \binom{m-q}{m-q-(q-1)}\binom{q-1}{0} \\ u = 2 & \binom{m-q}{m-q-(q-1)}\binom{q-1}{1} \\ u = 3 & \binom{m-q}{m-q-(q-2)}\binom{q-1}{1} \\ u = 4 & \binom{m-q}{m-q-(q-2)}\binom{q-1}{2} \\ u = 5 & \binom{m-q}{m-q-(q-3)}\binom{q-1}{2} \\ u = 6 & \binom{m-q}{m-q-(q-3)}\binom{q-1}{3} \\ u = 7 & \binom{m-q}{m-q-(q-4)}\binom{q-1}{3} \end{array} \tag{C.9}$$

Man kann (abgesehen von q = o = 0) daraus für allgemeine u-Werte den Vorfaktor bestimmen.[4]

$$\binom{m-q}{m-q-(q-[(u+1)/2]}\binom{q-1}{[u/2]} \tag{C.10}$$

Nun ist aber u keine unabhängige Variable, sondern wurde nur als Hilfsmittel eingesetzt, um die Vorfaktoren in Formeln zusammenfassen zu können. Aus den Kopfzeilen der oben gezeigten Tabellen für die diversen u-Werte lässt sich der Zusammenhang zwischen u und den Spalten- und Zeilenindizes zu u = 2q − o angeben.

Damit erhält man die in Gleichung 5.76 verwendete Formel für die Vorfaktoren:

$$\binom{m-q}{m-q-[o/2]}\binom{q-1}{q-[(o+1)/2]} \tag{C.11}$$

Die ganze Herleitung wurde für den Fall berechnet, falls anfänglich eine aufsteigende Domäne verhanden war. Mit gleicher Wahrscheinlichkeit ist auch anfangs eine absteigende Domäne möglich. Die Formeln und Argumente sind für diesen Fall ebenso wie für $m < 0$ identisch, so dass sich die Korrelationsfunktion folgendermaßen errechnet:

$$\begin{aligned} \langle F_0 F_m \rangle &= (1-\lambda)^{|m|} \cos\left(2\pi\, Q_y\, slope\, |m|\right) \\ &+ \sum_{q=0}^{|m|} \frac{1}{2}\left(e^{i2\pi Q_y\, slope\, (|m|-2q)} + e^{-i2\pi Q_y\, slope\, (|m|-2q)}\right) \cdot \\ &\left(\sum_{o=0}^{|m|} \binom{|m|-q}{|m|-q-[\frac{o}{2}]}\binom{q-1}{q-[\frac{o+1}{2}]}(1-\lambda)^{|m|-o}\lambda^o\right) \end{aligned} \tag{C.12}$$

Dabei wird nur über die Terme summiert, bei denen beide Binomialkoeffizienten definiert sind, ansonsten ist der Wert Null einzutragen.

$\mathrm{Q_y}$ ist die y-Komponente des Streuvektors in reziproken Gittereinheiten und *slope* ist der Tangens des Winkels zwischen der pseudo-kubischen x-Achse der Einheitszelle und der x-Achse des kubischen Koordinatensystems (Zwillingswinkel Φ).

[4]Nur in diesem Kapitel bedeuten die eckige Klammern [ ] (in den Formeln), dass die nächst-niedrige ganze Zahl ihres Arguments zu verwenden ist.

Anhang D

Raumgruppen von Perowskitstrukturen

In diesem Abschnitt sind nach Glazer alle Raumgruppen von Perowskitstrukturen aufgeführt, welche alleine ohne Verzerrung aber mit Verkippung der Sauerstoff-Oktaeder möglich sind. Die Werte sind aus der Veröffentlichung von Woodward [55] entnommen. Neben den von Glazer [15, 54] eingeführten Symbolen des Verkippungstyps sind auch Raumgruppe, Gitterzentrierung, Größe der Einheitszelle sowie Zellparameter aufgeführt. Die Einheitszellgröße wurde hier so gewählt, dass die Länge der Zelle in Richtung der pseudo-kubischen Achsen der Oktaeder durch die periodische Wiederkehr eines bestimmten, verkippten Oktaeders definiert ist. Jedoch entspricht dies nicht immer der kleinst-möglichen Einheitszelle für diese Raumgruppe.

Nummer des Verkippungstyps	Symbol	Raumgruppe	Gitter-zentrierung	Einheitszellengröße	relative pseudo-kubische Subzellparameter
3-fache Verkippung					
(1)	$a^+b^+c^+$	Immm (Nr. 71)	I	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} \neq b_{pc} \neq c_{pc}$
(2)	$a^+b^+b^+$	Immm (Nr. 71)	I	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} \neq b_{pc} = c_{pc}$
(3)	$a^+a^+a^+$	Im$\bar{3}$ (Nr. 204)	I	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} = b_{pc} = c_{pc}$
(4)	$a^+b^+c^-$	Pmmn (Nr. 59-2)	P	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} \neq b_{pc} \neq c_{pc}$
(5)	$a^+a^+c^-$	P4$_2$/nmc (Nr. 137-2)	P	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} = b_{pc} \neq c_{pc}$
(6)	$a^+b^+b^-$	Pmmn (Nr. 59-2)	P	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} \neq b_{pc} = c_{pc}$
(7)	$a^+a^+a^-$	P4$_2$/nmc (Nr. 137-2)	P	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} = b_{pc} = c_{pc}$
(8)	$a^+b^-c^-$	P2$_1$/m (Nr. 11-1)	A	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} \neq b_{pc} \neq c_{pc}, \alpha \neq 90$
(9)	$a^+a^-c^-$	P2$_1$/m (Nr. 11-1)	A	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} = b_{pc} \neq c_{pc}, \alpha \neq 90$
(10)	$a^+b^-b^-$	Pbnm (Nr. 62)	A	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$ (*)	$a_{pc} \neq b_{pc} = c_{pc}, \alpha \neq 90$
(11)	$a^+a^-a^-$	Pbnm (Nr. 62)	A	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$ (*)	$a_{pc} = b_{pc} = c_{pc}, \alpha \neq 90$
(12)	$a^-b^-c^-$	F$\bar{1}$ (Nr. 2)	F	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} \neq b_{pc} \neq c_{pc}, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90$
(13)	$a^-b^-b^-$	I2/a (Nr. 15)	F	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$ (*)	$a_{pc} \neq b_{pc} = c_{pc}, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90$
(14)	$a^-a^-a^-$	R$\bar{3}$c (Nr. 167)	F	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} = b_{pc} = c_{pc}, \alpha = \beta = \gamma \neq 90$
2-fache Verkippung					
(15)	$a^0b^+c^+$	Immm (Nr. 71)	I	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} < b_{pc} \neq c_{pc}$
(16)	$a^0b^+b^+$	I4/mmm (Nr. 139)	I	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} < b_{pc} = c_{pc}$
(17)	$a^0b^+c^-$	Pmmn (Nr. 59-2)	B	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} < b_{pc} \neq c_{pc}$
(18)	$a^0b^+b^-$	Pmmn (Nr. 59-2)	B	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} < b_{pc} = c_{pc}$
(19)	$a^0b^-c^-$	I2/m (Nr. 12-3)	F	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} < b_{pc} \neq c_{pc}, \alpha \neq 90$
(20)	$a^0b^-b^-$	Imma (Nr. 74)	F	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$ (*)	$a_{pc} < b_{pc} = c_{pc}, \alpha \neq 90$
1-fache Verkippung					
(21)	$a^0a^0c^+$	P4/mbm (Nr. 127)	C	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times c_{pc}$	$a_{pc} = b_{pc} < c_{pc}$
(22)	$a^0a^0c^-$	I4/mcm (Nr. 140)	I	$2a_{pc} \times 2b_{pc} \times 2c_{pc}$	$a_{pc} = b_{pc} < c_{pc}$
keine Verkippung					
(23)	$a^0a^0a^0$	Pm$\bar{3}$m (Nr. 221)	P	$a_{pc} \times b_{pc} \times c_{pc}$	$a_{pc} = b_{pc} = c_{pc}$

(*) Die Raumgruppensymbole entsprechen den Achsen, die nach einer Koordinatentransformation von $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1/2 & -1/2 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}$ aus den in „Einheitszellengröße“ angegebene Achsen entstehen.

D.1 Atompositionen im Raumgitter

In einer ausführlicheren Übersicht werden für die in der vorigen Tabelle aufgeführten Raumgruppen die expliziten Atompositionen der Perowskitstruktur, sowie deren Auswirkungen auf die Röntgenstreu-Reflexe skizziert.

Im Detail werden für jede dieser Raumgruppen deren im *International Tables* [94] verwendeten Nummer, ihre Symmetrie, sowie die Kantenlänge und Winkel der Einheitszelle angegeben. Im Falles eines 90^o - Winkels wird die Winkelangabe weggelassen, kann aber durch die Symmetrie erschlossen werden.

Die Koordinaten für die Atompositionen sind in Bruchteilen der Einheitszell-Dimension in Richtung der vorgegebenen Achsen gegeben. Zusätzlich werden noch Strukturfaktor und Auswahlregeln der Raumgruppen in den obig angegebenen Koordinaten gezeigt.

Schließlich werden die erlaubten Bragg-Reflexe im pseudo-kubischen Koordinatensystem skizziert, aufgeschlüsselt nach Mangan-, Lanthan/Strontium- und Sauerstoff-Beiträgen. Bei einigen der Raumgruppen werden zusätzlich die erlaubten Bragg-Reflexe aller möglichen Domänen skizziert, welche man durch Drehung um die drei pseudo-kubischen Achsen erhält.

$Pm\bar{3}m$ **(Nr. 221) - kubisch**

$$a = b = c = a_{pc}$$

			x	**y**	**z**	**x**	**y**	**z**	**x**	**y**	**z**
Mn	(1a)	m $\bar{3}$ m	0	0	0						
La/Sr	(1b)	m $\bar{3}$ m	1/2	1/2	1/2						
O	(3d)	4/m m . m	1/2	0	0	0	1/2	0	0	0	1/2

$$\begin{aligned} F = \quad & f(Mn) \\ + \quad & f(La/Sr) \quad e^{i\pi(H+K+L)} \\ + \quad & f(O) \quad \left(e^{i\pi H} + e^{i\pi K} + e^{i\pi L}\right) \end{aligned}$$

Auswahlregeln: keine

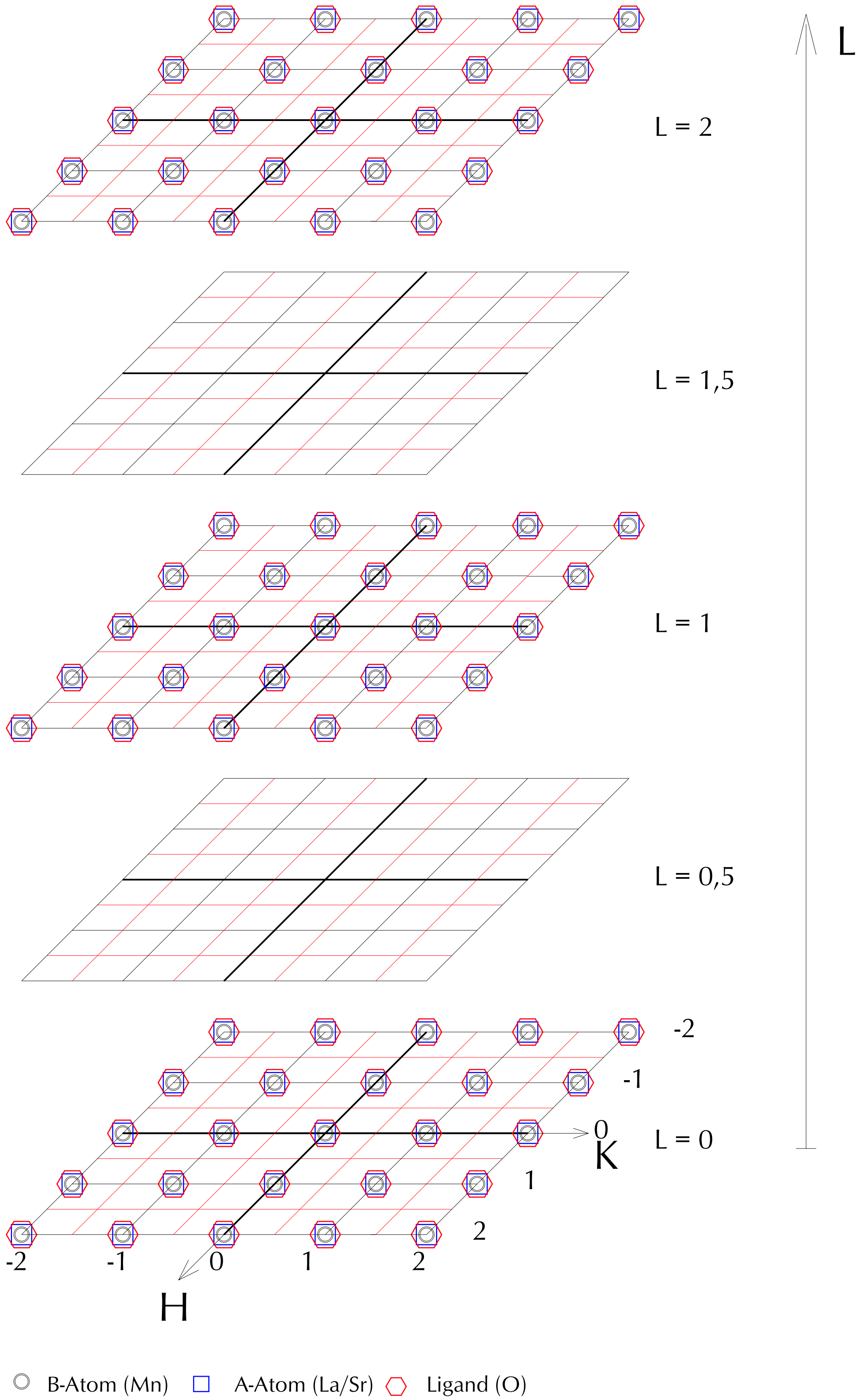


Abbildung D.1: Bragg-Reflexe der Pm$\bar{3}$m-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)

$Im\bar{3}$ (Nr. 204) - kubisch

$$a \;=\; b \;=\; c \;=\; 2\;a_{pc}$$

			x	y	z	x	y	z
Mn	(8c)	. $\bar{3}$.	1/4	1/4	1/4	3/4	3/4	1/4
			3/4	1/4	3/4	1/4	3/4	3/4
			3/4	3/4	3/4	1/4	1/4	3/4
			1/4	3/4	1/4	3/4	1/4	1/4
La/Sr	(2a)	m $\bar{3}$.	0	0	0	1/2	1/2	1/2
	(6b)	mmm . .	1/2	0	0	0	1/2	0
			0	0	1/2	0	1/2	1/2
			1/2	0	1/2	1/2	1/2	0
O	(24g)	m . .	0	1/4+y	1/4+z	0	3/4-y	1/4+z
			0	1/4+y	3/4-z	0	3/4-y	3/4-z
			1/4+z	0	1/4+y	1/4+z	0	3/4-y
			3/4-z	0	1/4+y	3/4-z	0	3/4-y
			1/4+y	1/4+z	0	3/4-y	1/4+z	0
			1/4+y	3/4-z	0	3/4-y	3/4-z	0
			1/2	3/4+y	3/4+z	1/2	1/4-y	3/4+z
			1/2	3/4+y	1/4-z	1/2	1/4-y	1/4-z
			3/4+z	1/2	3/4+y	3/4+z	1/2	1/4-y
			1/4-z	1/2	3/4+y	1/4-z	1/2	1/4-y
			3/4+y	3/4+z	1/2	1/4-y	3/4+z	1/2
			3/4+y	1/4-z	1/2	1/4-y	1/4-z	1/2

$$\begin{aligned} F \;=\; & \left(1+e^{i\pi(H+K+L)}\right) * \\ & \Big[\; f(Mn) \quad e^{i\frac{\pi}{2}\,(H+K+L)} \left(1+e^{i\pi(H+K)}+e^{i\pi(K+L)}+e^{i\pi(H+L)}\right) \\ & \quad +f(La/Sr) \quad \left(1+e^{i\pi(H+K)}+e^{i\pi(K+L)}+e^{i\pi(H+L)}\right) \\ & \quad +2\,f(O) \quad \Big(\cos\left\{\frac{\pi}{2}(K+L)+2\pi(yK+zL)\right\} \\ & \qquad +\cos\left\{\frac{\pi}{2}(K-L)+2\pi(yK-zL)\right\} \\ & \qquad +\cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+L)+2\pi(zH+yL)\right\} \\ & \qquad +\cos\left\{\frac{\pi}{2}(-H+L)+2\pi(-zH+yL)\right\} \\ & \qquad +\cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+K)+2\pi(yH+zK)\right\} \\ & \qquad +\cos\left\{\frac{\pi}{2}(H-K)+2\pi(yH-zK)\right\}\Big)\Big] \end{aligned}$$

Auswahlregeln: HKL H+K+L=2n

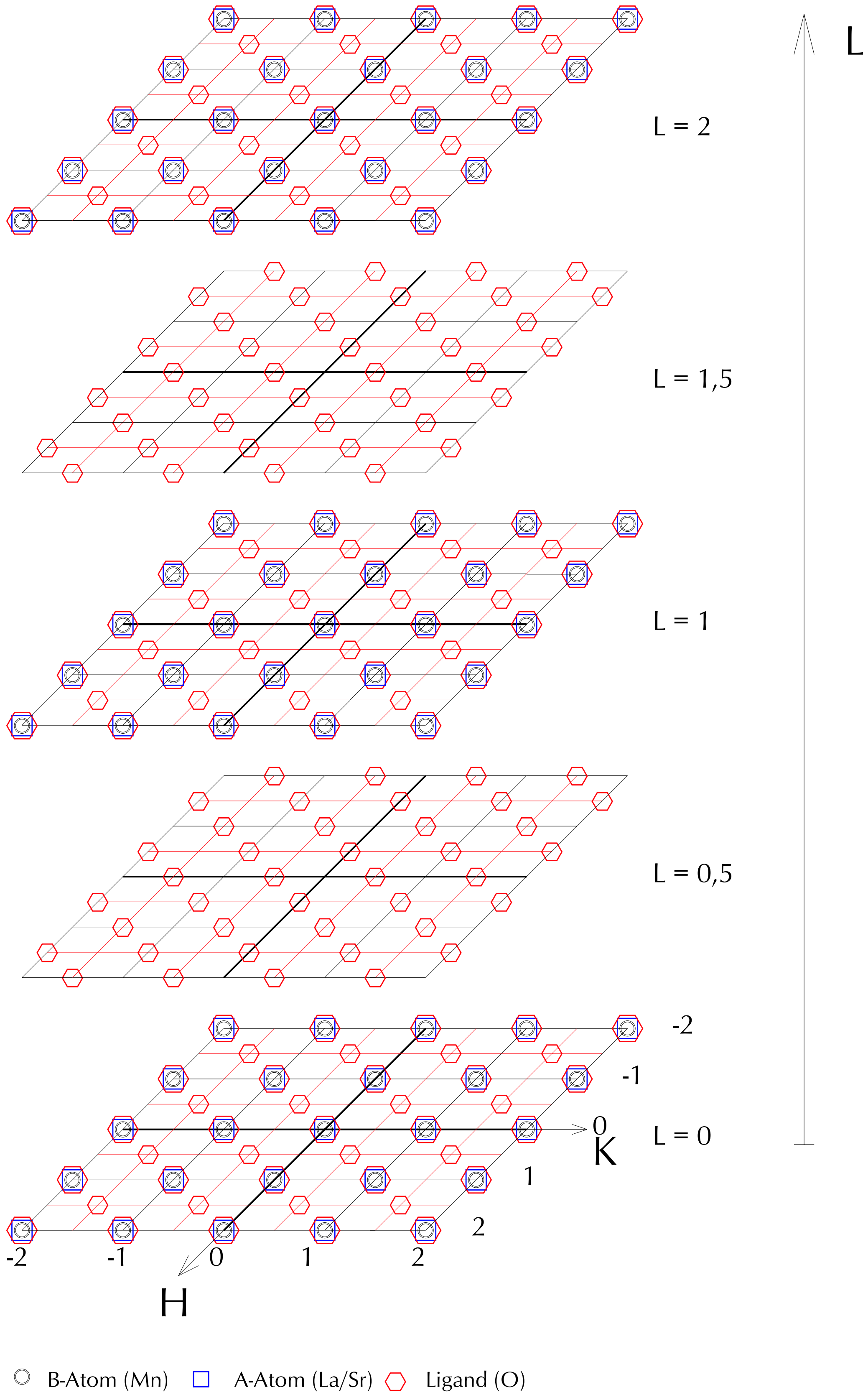


Abbildung D.2: Bragg-Reflexe der Im$\bar{3}$-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)

$R\bar{3}c$ (Nr. 167-1) - rhomboedrisch

hexagonale Koordinaten

$$a = b \simeq \sqrt{2}\, a_{pc} \qquad c \simeq 2\sqrt{3}\, a_{pc} \qquad \gamma = 120^\circ$$

			x	y	z	x	y	z
Mn	(6b)	$\bar{3}$.	0	0	0	0	0	1/2
			2/3	1/3	1/3	2/3	1/3	5/6
			1/3	2/3	2/3	1/3	2/3	1/6
La/Sr	(6a)	3 2	0	0	1/4	0	0	3/4
			2/3	1/3	7/12	2/3	1/3	1/12
			1/3	2/3	11/12	1/3	2/3	5/12
O	(18e)	. 2	1/2+x	0	1/4	0	1/2+x	1/4
			1/2-x	1/2-x	1/4	1/2-x	0	3/4
			0	1/2-x	3/4	1/2+x	1/2+x	3/4
			1/6+x	1/3	7/12	2/3	5/6+x	7/12
			1/6-x	5/6-x	7/12	1/6-x	1/3	1/12
			2/3	5/6-x	1/12	1/6+x	5/6+x	1/12
			5/6+x	2/3	11/12	1/3	1/6+x	11/12
			5/6-x	1/6-x	11/12	5/6-x	2/3	5/12
			2/3	1/6-x	5/12	5/6+x	1/6+x	5/12

$$\begin{aligned} F \;=\; & \left(1 + e^{i\frac{2\pi}{3}(2H+K+L)} + e^{i\frac{2\pi}{3}(H+2K+2L)}\right) * \\ & \Bigg[\quad 2\, f(Mn) \quad e^{i\frac{\pi}{2}L} \cos\frac{\pi}{2}L \\ & \quad + 2\, f(La/Sr) \quad e^{i\pi L} \cos\frac{\pi}{2}L \\ & \quad + 2\, f(O) \quad \left(\cos\left\{\frac{\pi}{2}L + \pi H + 2\pi x H\right\} + \cos\left\{\frac{\pi}{2}L + \pi K + 2\pi x K\right\} \right. \\ & \qquad \left. + \cos\left\{\frac{\pi}{2}L + \pi(H+K) - 2\pi x(H+K)\right\}\right) \Bigg] \end{aligned}$$

Auswahlregeln:
- HKL -H+K+L=3n
- H$\bar{\text{H}}$L -2H+L=3n, L=2n
- H0L -H+L=3n, L=2n
- 0KL K+L=3n, L=2n

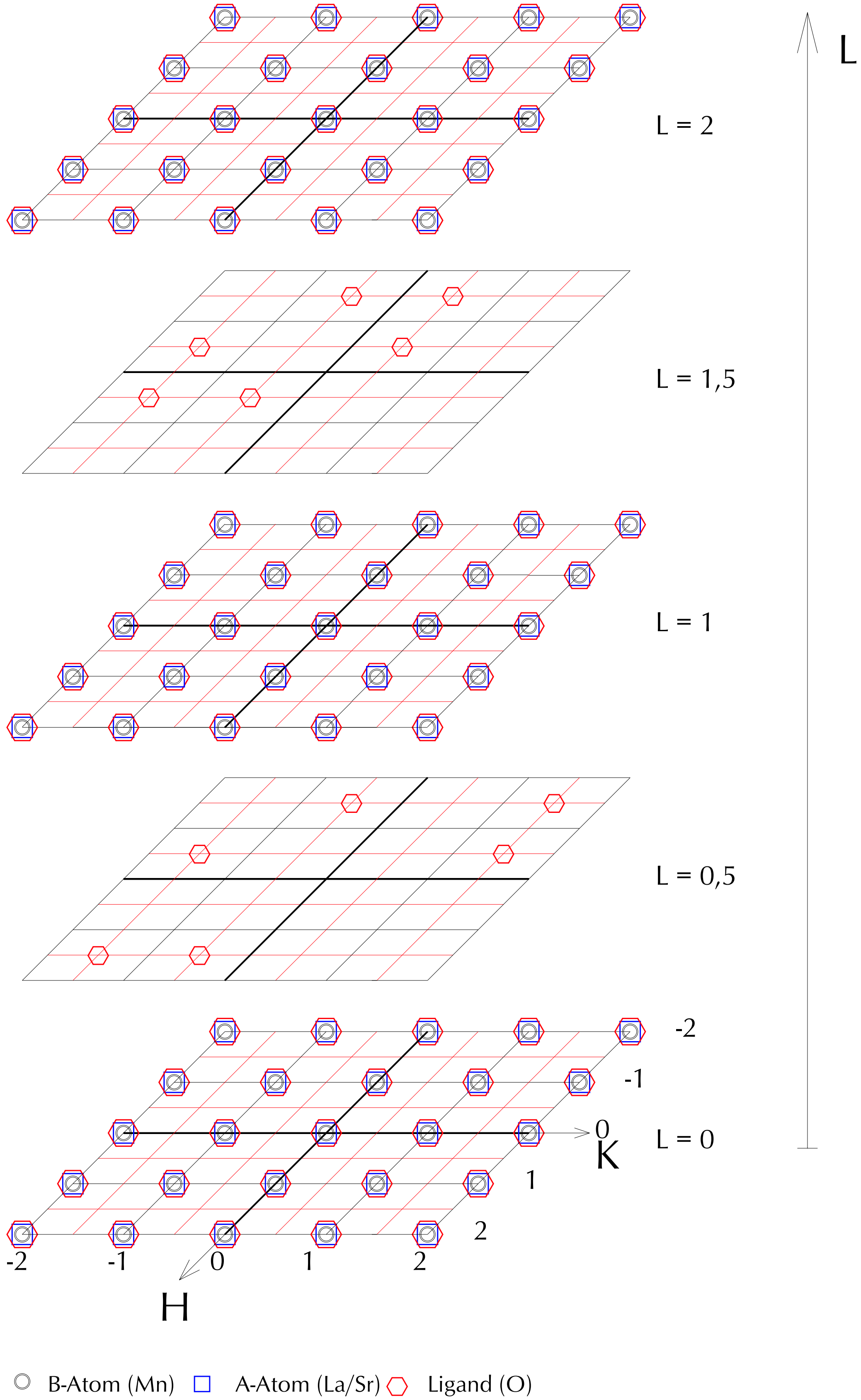
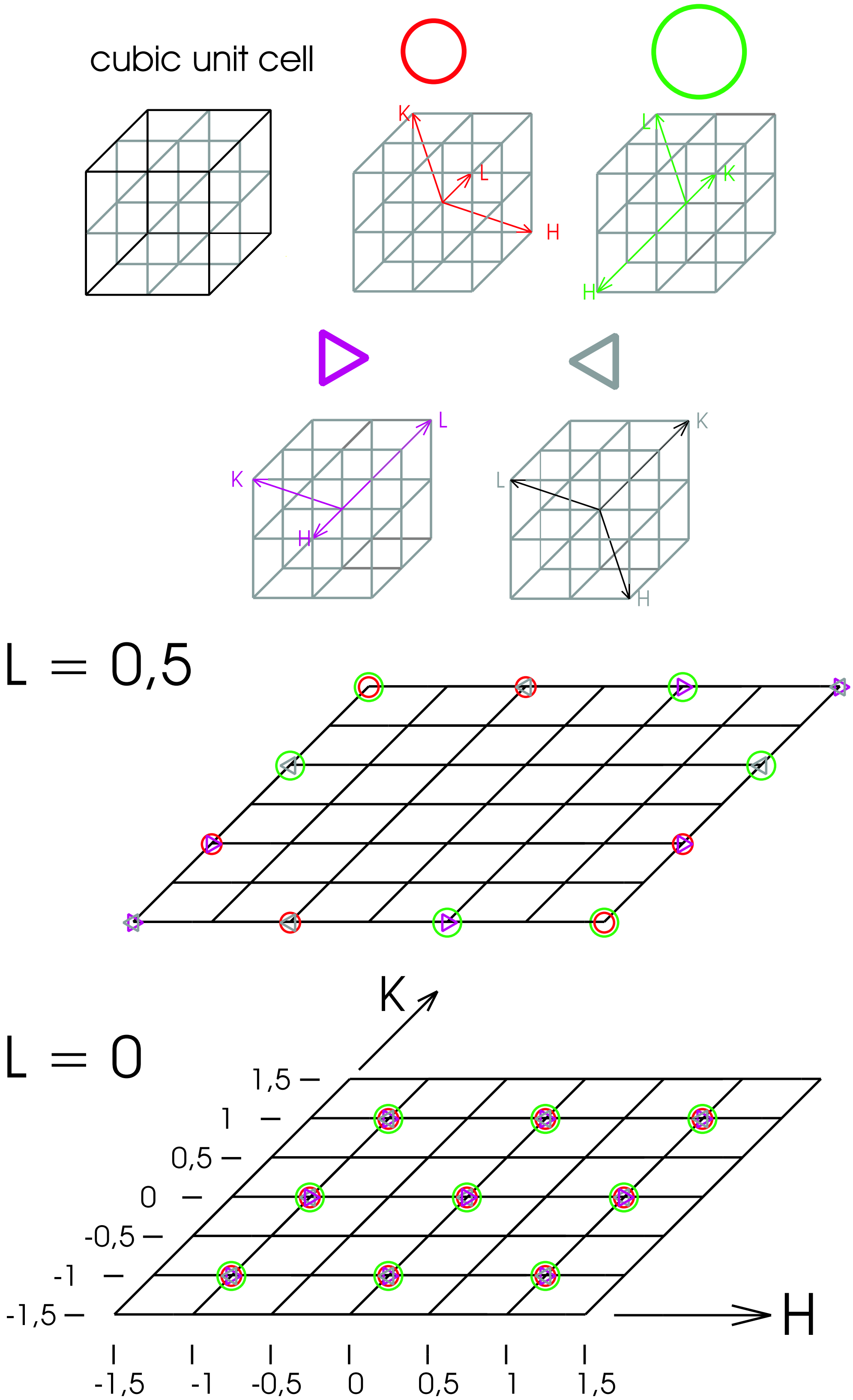


Abbildung D.3: Bragg-Reflexe der R$\bar{3}$c-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)


cubic unit cell
K
L
H
L
K
H
L
K
H
K
L
H
L = 0,5
L = 0
K
H
1,5
1
0,5
0
-0,5
-1
-1,5
-1,5
-1
-0,5
0
0,5
1
1,5

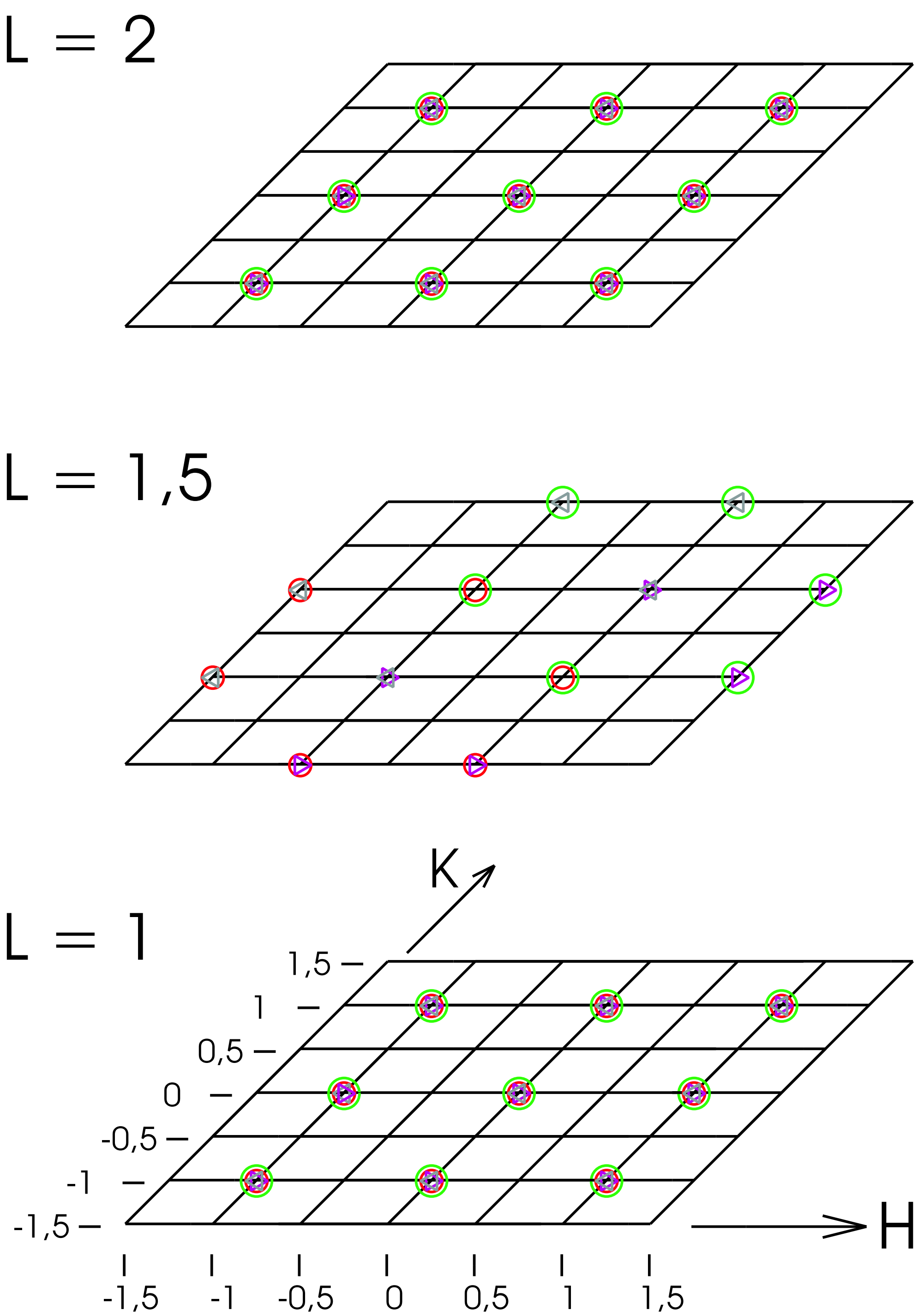


Abbildung D.4: Bragg-Reflexe der R$\bar{3}$c-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten) von allen denkbaren Domänen. Die Zellachsen (reziproker Raum) stammen von der rhomboedrischen Darstellung der R$\bar{3}$c-Raumgruppe

$I4/mcm$ (Nr. 140) - tetragonal

$$a \simeq \sqrt{2}\, a_{pc} \qquad b \simeq \sqrt{2}\, a_{pc} \qquad c \simeq 2\, a_{pc}$$

			x	**y**	**z**	**x**	**y**	**z**
Mn	(4c)	4/m . .	0	0	0	0	0	1/2
			1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	0
La/Sr	(4b)	$\bar{4}$ 2 m	0	1/2	1/4	1/2	0	1/4
			1/2	0	3/4	0	1/2	3/4
O	(4a)	4 2 2	0	0	1/4	0	0	3/4
			1/2	1/2	3/4	1/2	1/2	1/4
	(8h)	m . 2m	1/4+x	3/4+x	0	3/4-x	1/4-x	0
			1/4-x	1/4+x	0	3/4+x	3/4-x	0
			3/4+x	1/4+x	1/2	1/4-x	3/4-x	1/2
			3/4-x	3/4+x	1/2	1/4+x	1/4-x	1/2

$$\begin{aligned} F \;=\; & \left(1+e^{i\pi(H+K+L)}\right) * \\ & \Big[\; f(Mn) \quad \left(1+e^{i\pi L}\right) \\ & + f(La/Sr) \quad e^{i\pi\frac{L}{2}} \left(e^{i\pi H}+e^{i\pi K}\right) \\ & + 2\, f(O) \quad \Big(\cos\left\{\frac{\pi}{2}L\right\} \\ & \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(H-K)+2\pi x(H+K)\right\} \\ & \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+K)+2\pi x(-H+K)\right\}\Big) \Big] \end{aligned}$$

<u>Auswahlregeln:</u> HKL H+K+L=2n

H0L H,L=2n

0KL K,L=2n

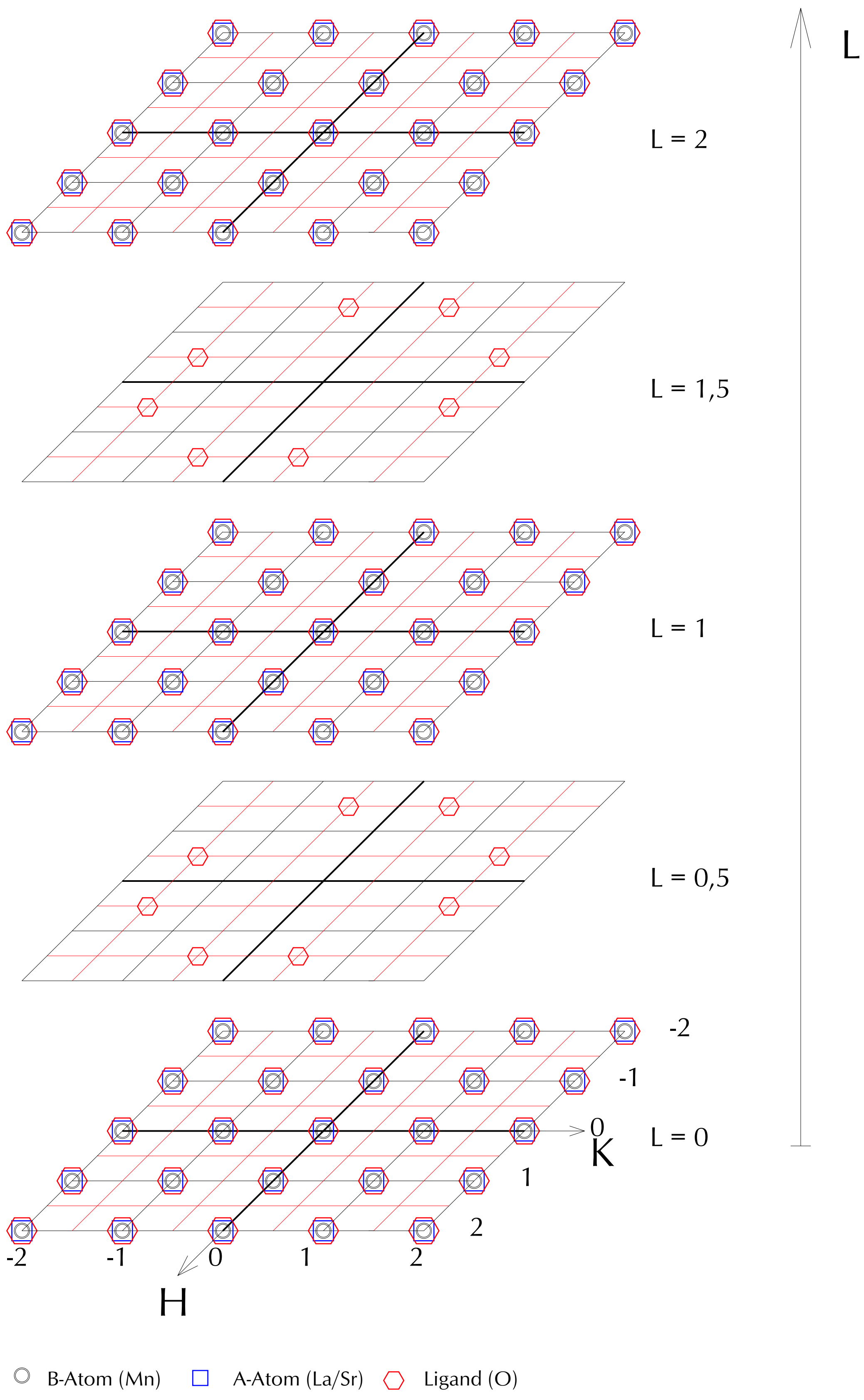
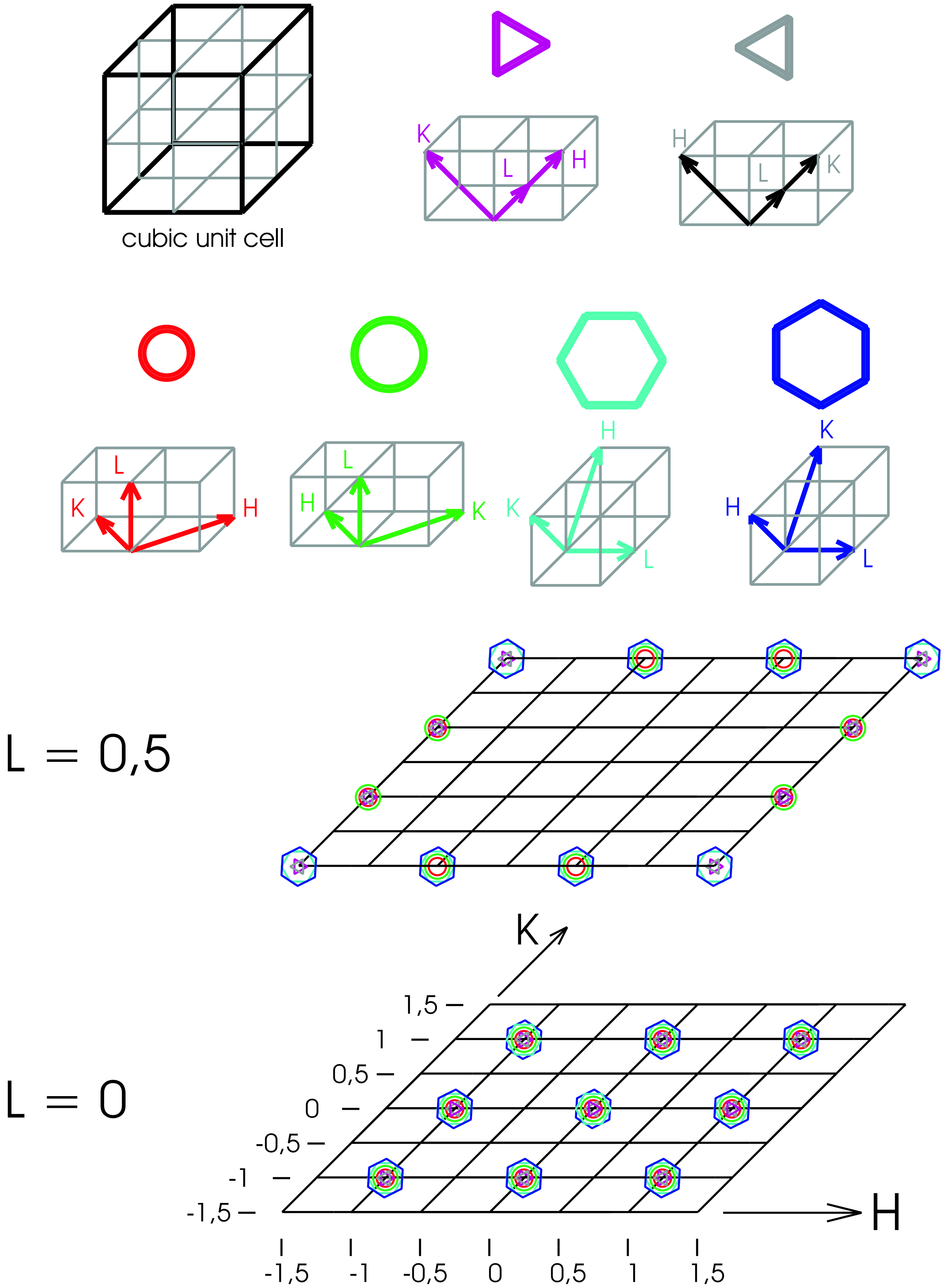


Abbildung D.5: Bragg-Reflexe der I4/mcm-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)


cubic unit cell
K
L
H
H
L
K
L
K
H
L
H
K
H
K
L
K
H
L
L = 0,5
K
1,5
1
0,5
0
-0,5
-1
-1,5
L = 0
H
-1,5
-1
-0,5
0
0,5
1
1,5

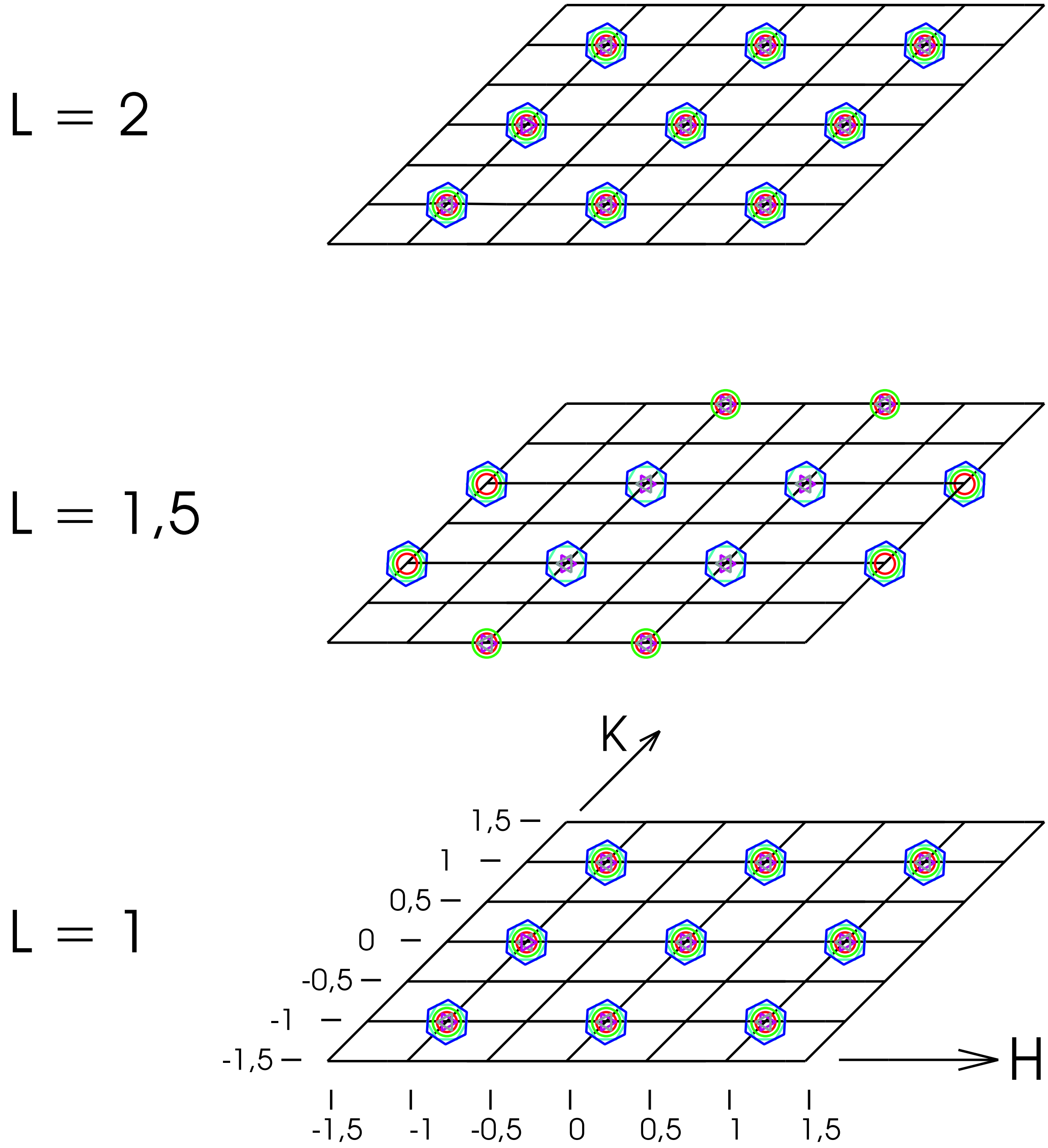


Abbildung D.6: Bragg-Reflexe der I4/mcm-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten) von allen denkbaren Domänen

$I4/mmm$ **(Nr. 139) - tetragonal**

$$a \simeq 2\,a_{pc} \qquad b \simeq 2\,a_{pc} \qquad c \simeq 2\,a_{pc}$$

			x	**y**	**z**	**x**	**y**	**z**
Mn	(8f)	. . 2/m	1/4	1/4	1/4	3/4	3/4	1/4
			3/4	1/4	1/4	1/4	3/4	1/4
			3/4	3/4	3/4	1/4	1/4	3/4
			1/4	3/4	3/4	3/4	1/4	3/4
La/Sr	(2a)	4/m m m	0	0	0	1/2	1/2	1/2
	(2b)	4/m m m	0	0	1/2	1/2	1/2	0
	(4c)	m m m .	1/2	0	0	0	1/2	0
			0	1/2	1/2	1/2	0	1/2
O	(8h)	m . 2m	1/4+x	1/4+x	0	3/4-x	3/4-x	0
			1/4+x	3/4-x	0	3/4-x	1/4+x	0
			3/4+x	3/4+x	1/2	1/4-x	1/4-x	1/2
			3/4+x	1/4-x	1/2	1/4-x	3/4+x	1/2
	(16n)	. m .	0	1/4+y	1/4+z	0	3/4-y	1/4+z
			3/4-y	0	1/4+z	1/4+y	0	1/4+z
			0	1/4+y	3/4-z	0	3/4-y	3/4-z
			3/4-y	0	3/4-z	1/4+y	0	3/4-z
			1/2	3/4+y	3/4+z	1/2	1/4-y	3/4+z
			1/4-y	1/2	3/4+z	3/4+y	1/2	3/4+z
			1/2	3/4+y	1/4-z	1/2	1/4-y	1/4-z
			1/4-y	1/2	1/4-z	3/4+y	1/2	1/4-z

$$\begin{aligned}
F \;=\; & \left(1+e^{i\pi(H+K+L)}\right) * \\
& \Big[\quad f(Mn) \qquad e^{i\frac{\pi}{2}(H+K+L)}\left(1+e^{i\pi H}\right)\left(1+e^{i\pi K}\right) \\
& \quad + f(La/Sr) \quad \left(1+e^{i\pi H}\right)\left(1+e^{i\pi K}\right) \\
& \quad + 2\,f(O) \quad \Big(\cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+K)+2\pi x(H+K)\right\}+\cos\left\{\frac{\pi}{2}(H-K)+2\pi x(H-K)\right\} \\
& \qquad +\cos\left\{\frac{\pi}{2}(K+L)+2\pi(yK+zL)\right\}+\cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+L)+2\pi(yH+zL)\right\} \\
& \qquad +\cos\left\{\frac{\pi}{2}(K-L)+2\pi(yK-zL)\right\}+\cos\left\{\frac{\pi}{2}(H-L)+2\pi(yH-zL)\right\}\Big)\Big]
\end{aligned}$$

<u>Auswahlregeln:</u> HKL H+K+L=2n

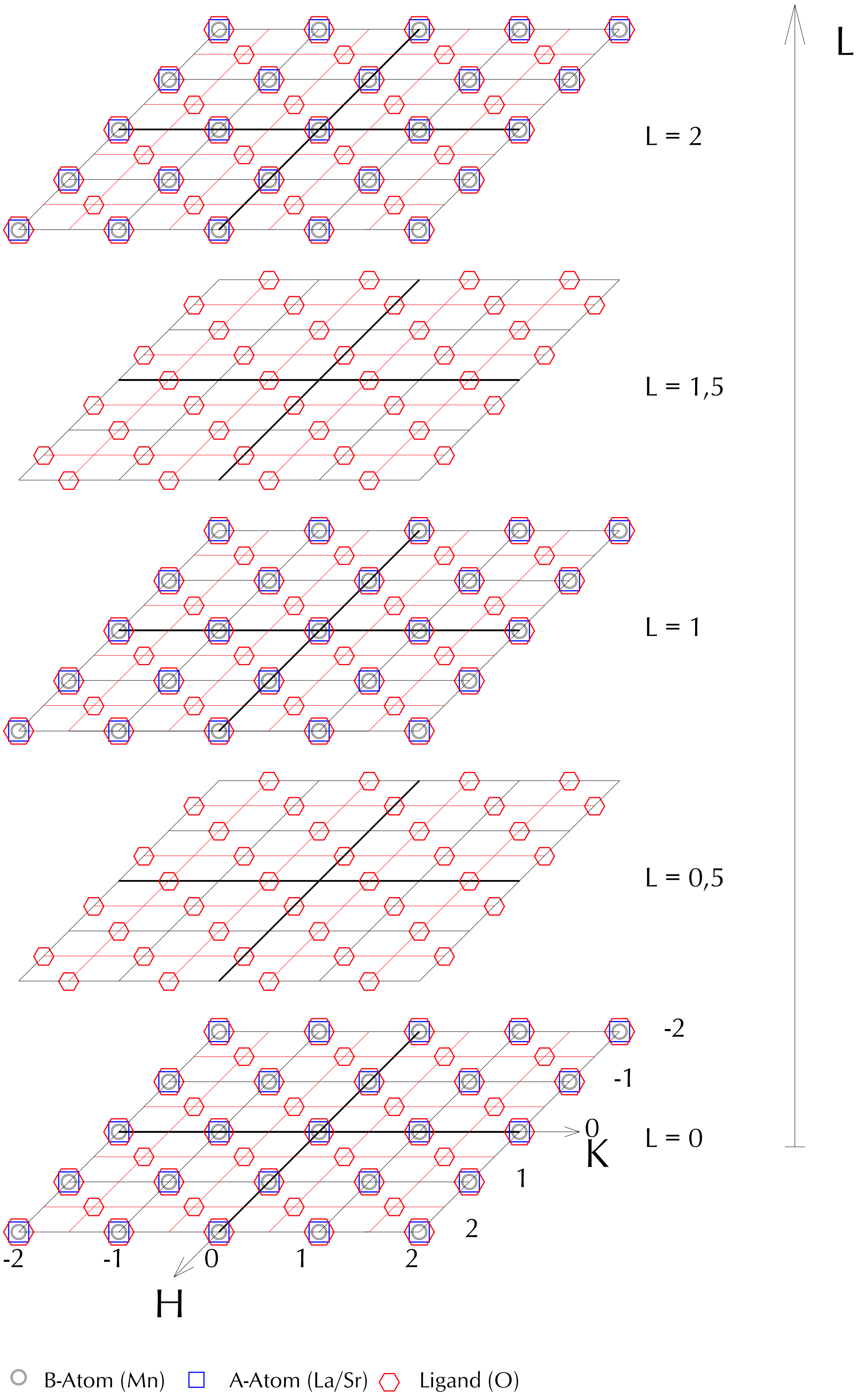


Abbildung D.7: Bragg-Reflexe der I4/mmm-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)

$P4_2/nmc$ (Nr. 137-2) - tetragonal

$a \simeq 2\,a_{pc} \qquad b \simeq 2\,a_{pc} \qquad c \simeq 2\,a_{pc}$

			x	y	z	x	y	z
Mn	(8e)	$\bar{1}$	0	0	0	1/2	1/2	0
			1/2	0	1/2	0	1/2	1/2
			0	1/2	0	1/2	0	0
			1/2	1/2	1/2	0	0	1/2
La/Sr	(2a)	$\bar{4}$ m 2	3/4	1/4	3/4	1/4	3/4	1/4
	(2b)	$\bar{4}$ m 2	3/4	1/4	1/4	1/4	3/4	3/4
	(4d)	2m m .	1/4	1/4	1/4+z	1/4	1/4	3/4+z
			3/4	3/4	3/4-z	3/4	3/4	1/4-z
O	(8g)	. m .	1/4	a	b	1/4	1/2-a	b
			3/4	1/2+a	-b	3/4	-a	-b
			1/2-a	1/4	1/2+b	a	1/4	1/2+b
			1/2+a	3/4	1/2-b	-a	3/4	1/2-b
	(8g)	. m .	1/4	1/2+c	1/2+d	1/4	-c	1/2+d
			3/4	c	1/2-d	3/4	1/2-c	1/2-d
			-c	1/4	d	1/2+c	1/4	d
			c	3/4	-d	1/2-c	3/4	-d
	(8f)	. . 2	1/2+f	1/2-f	1/4	-f	f	1/4
			f	1/2+f	3/4	1/2-f	-f	3/4
			1/2-f	1/2+f	3/4	f	-f	3/4
			-f	1/2-f	1/4	1/2+f	f	1/4

$$
\begin{aligned}
F = \quad & f(Mn) \quad \left(1+e^{i\pi H}\right)\left(1+e^{i\pi K}\right)\left(1+e^{i\pi L}\right) \\
& + 2\,f(La/Sr) \quad \Big(\cos\Big\{\frac{\pi}{2}(H-K+L)\Big\} + \cos\Big\{\frac{\pi}{2}(-H+K+L)\Big\} \\
& \quad + \cos\Big\{\frac{\pi}{2}(H+K+L)+2\pi zL\Big\} + \cos\Big\{\frac{\pi}{2}(H+K-L)+2\pi zL\Big\}\Big) \\
& + 2\,f(O) \quad \Big(\cos\Big\{\frac{\pi}{2}H+2\pi(aK+bL)\Big\} + \cos\Big\{\frac{\pi}{2}H+\pi K+2\pi(-aK+bL)\Big\} \\
& \quad + \cos\Big\{\frac{\pi}{2}K+\pi(H+L)+2\pi(-aH+bL)\Big\} + \cos\Big\{\frac{\pi}{2}K+\pi L+2\pi(aH+bL)\Big\} \\
& \quad + \cos\Big\{\frac{\pi}{2}H+\pi(K+L)+2\pi(cK+dL)\Big\} + \cos\Big\{\frac{\pi}{2}H+\pi L+2\pi(-cK+dL)\Big\} \\
& \quad + \cos\Big\{\frac{\pi}{2}K+2\pi(-cH+dL)\Big\} + \cos\Big\{\frac{\pi}{2}K+\pi H+2\pi(cH+dL)\Big\} \\
& \quad + \cos\Big\{\frac{\pi}{2}L+\pi(H+K)+2\pi f(H-K)\Big\} + \cos\Big\{\frac{\pi}{2}L+2\pi f(-H+K)\Big\} \\
& \quad + \cos\Big\{\frac{\pi}{2}L+\pi K-2\pi f(H+K)\Big\} + \cos\Big\{\frac{\pi}{2}L+\pi H+2\pi f(H+K)\Big\}\Big)
\end{aligned}
$$

Auswahlregeln: HK0 H+K=2n

HHL L=2n

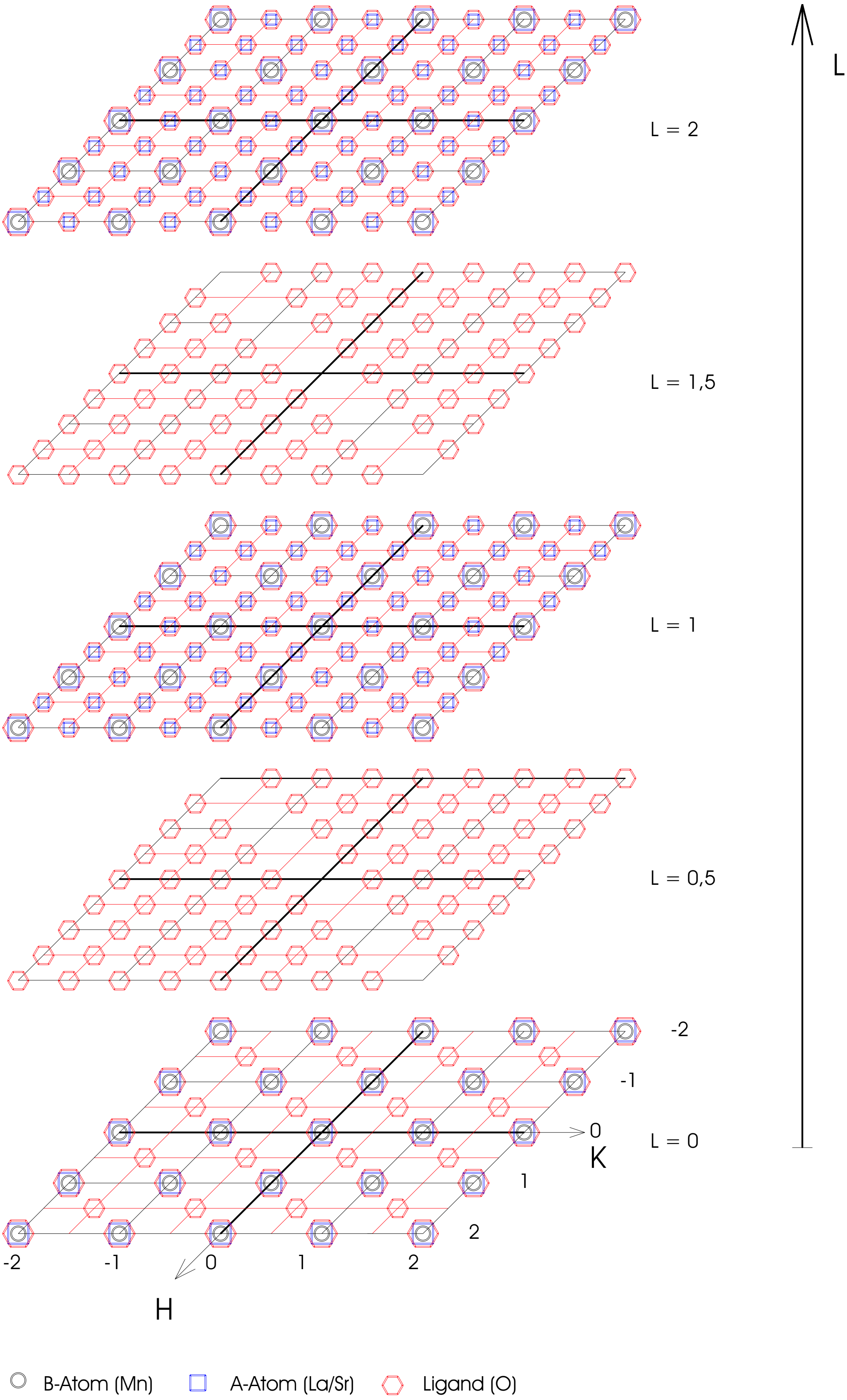


Abbildung D.8: Bragg-Reflexe der $P4_2/nmc$-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)

$P4/mbm$ (Nr. 127) - tetragonal

$$a \simeq \sqrt{2}\, a_{pc} \qquad b \simeq \sqrt{2}\, a_{pc} \qquad c \simeq a_{pc}$$

			x	y	z	x	y	z
Mn	(2a)	4/m . .	0	0	0	1/2	1/2	0
La/Sr	(2c)	m .m m	0	1/2	1/2	1/2	0	1/2
O	(2b)	4/m . .	0	0	1/2	1/2	1/2	1/2
	(4g)	m . 2m	1/4+x	3/4+x	0	3/4-x	1/4-x	0
			1/4-x	1/4+x	0	3/4+x	3/4-x	0

$$\begin{aligned} F \;=\; & f(Mn) \left(1 + e^{i\pi(H+K)}\right) \\ & + f(La/Sr)\; e^{i\pi(H+L)} \left(1 + e^{i\pi(H+K)}\right) \\ & + f(O) \left(e^{i\pi L}\left(1 + e^{i\pi(H+K)}\right) + 2\cos\left\{\frac{\pi}{2}(H-K) + 2\pi x(H+K)\right\} \right. \\ & \left. + 2\cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+K) + 2\pi x(-H+K)\right\} \right) \end{aligned}$$

Auswahlregeln: 0KL K=2n

H0L H=2n

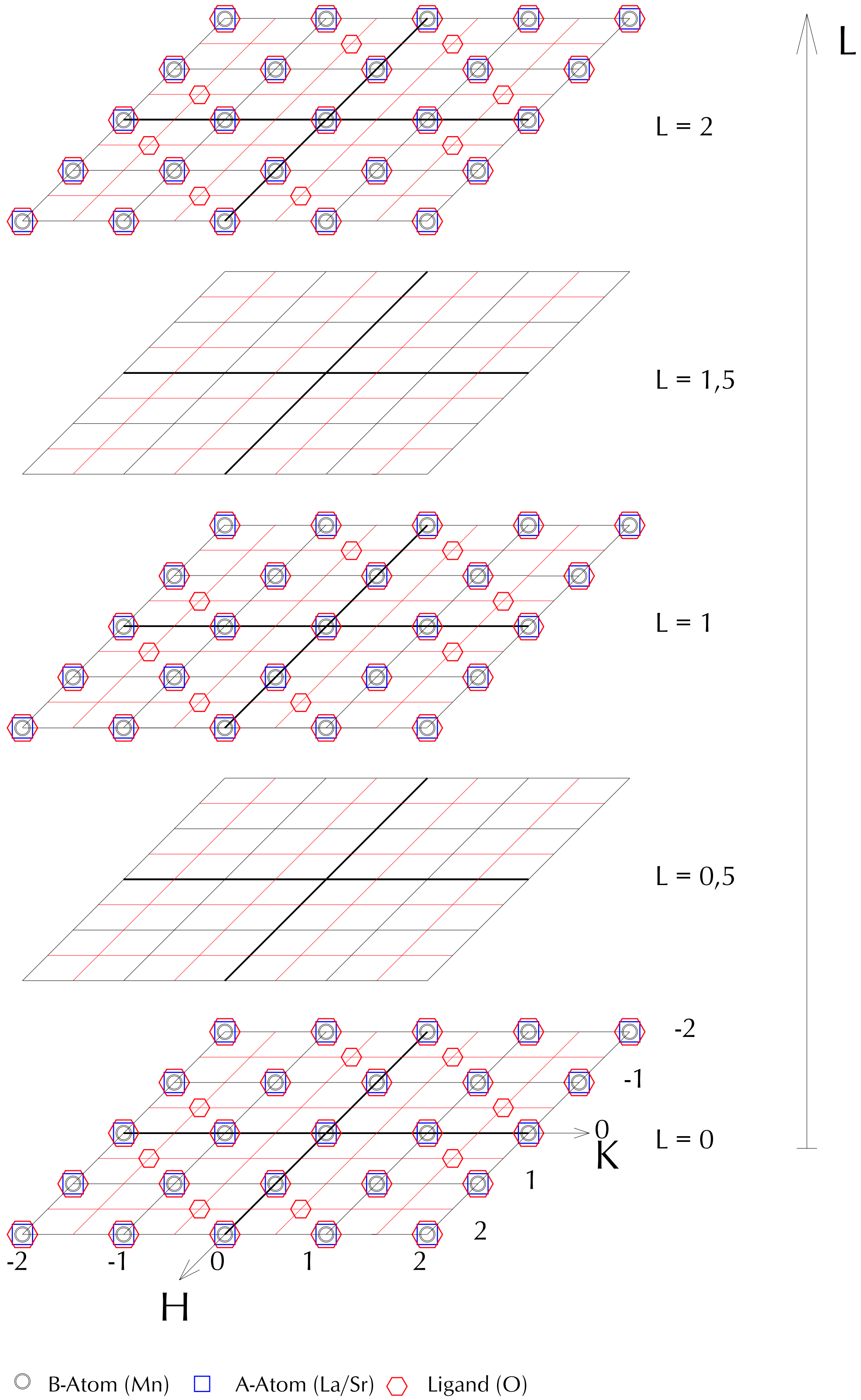


Abbildung D.9: Bragg-Reflexe der P4/mbm-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)

Imcm (Nr. 74) - orthorhombisch

$$a \simeq \sqrt{2}\, a_{pc} \qquad b \simeq \sqrt{2}\, a_{pc} \qquad c \simeq 2\, a_{pc}$$

			x	**y**	**z**	**x**	**y**	**z**
Mn	(4c)	. 2/m .	1/4	1/4	1/4	1/4	1/4	3/4
			3/4	3/4	3/4	3/4	3/4	1/4
La/Sr	(4e)	m m 2	1/4	3/4+z	0	3/4	1/4-z	0
			3/4	1/4+z	1/2	1/4	3/4-z	1/2
O	(4e)	m m 2	1/4	1/4+a	0	3/4	3/4-a	0
			3/4	3/4+a	1/2	1/4	1/4-a	1/2
	(8f)	2 . .	0	0	1/4+b	1/2	0	3/4-b
			0	0	3/4-b	1/2	0	1/4+b
			1/2	1/2	3/4+b	0	1/2	1/4-b
			1/2	1/2	1/4-b	0	1/2	3/4+b

$$\begin{aligned} F \;=\; & \left(1 + e^{i\pi(H+K+L)}\right) * \\ & \Big[\; f(Mn) \qquad e^{i\frac{\pi}{2}(H+K+L)} \left(1 + e^{i\pi L}\right) \\ & \quad + 2\, f(La/Sr) \quad \cos\left\{\frac{\pi}{2}(H-K) + 2\pi z K\right\} \\ & \quad + 2\, f(O) \qquad \left(\cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+K) + 2\pi a K\right\} + \left(1 + e^{i\pi H}\right) \cos\left\{\frac{\pi}{2}L + 2\pi b L\right\}\right) \Big] \end{aligned}$$

<u>Auswahlregeln:</u> HKL H+K+L=2n

H0L H,L=2n

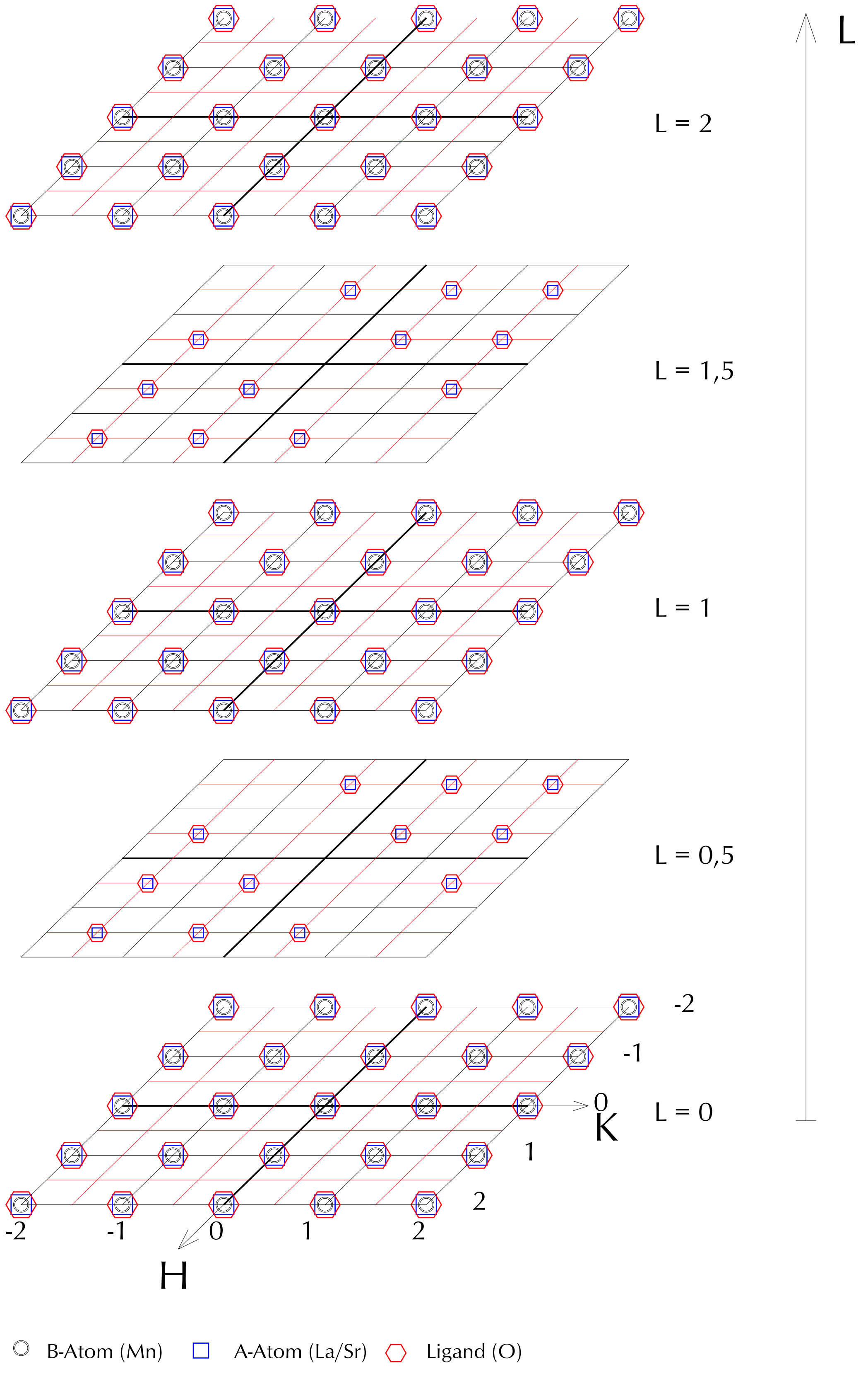


Abbildung D.10: Bragg-Reflexe der Imcm-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)

Immm (Nr. 71) - orthorhombisch

$a \simeq 2\,a_{pc} \qquad b \simeq 2\,a_{pc} \qquad c \simeq 2\,a_{pc}$

			x	y	z	x	y	z
Mn	(2a)	m m m	1/4	1/4	1/4	3/4	3/4	3/4
Mn	(2b)	m m m	3/4	3/4	1/4	1/4	1/4	3/4
Mn	(2c)	m m m	3/4	1/4	3/4	1/4	3/4	1/4
Mn	(2d)	m m m	1/4	3/4	3/4	3/4	1/4	1/4
La/Sr	(8k)	$\bar{1}$	0	0	0	0	1/2	1/2
			1/2	1/2	0	1/2	0	1/2
			1/2	1/2	1/2	1/2	0	0
			0	0	1/2	0	1/2	0
O	(8l)	m . .	0	1/4+y	1/4+z	0	3/4-y	3/4-z
			0	3/4-y	1/4+z	0	1/4+y	3/4-z
			1/2	3/4+y	3/4+z	1/2	1/4-y	1/4-z
			1/2	1/4-y	3/4+z	1/2	3/4+y	1/4-z
	(8m)	. m .	1/4+a	0	1/4+b	3/4-a	0	3/4-b
			3/4-a	0	1/4+b	1/4+a	0	3/4-b
			3/4+a	1/2	3/4+b	1/4-a	1/2	1/4-b
			1/4-a	1/2	3/4+b	3/4+a	1/2	1/4-b
	(8n)	. . m	1/4+f	1/4+g	0	3/4-f	3/4-g	0
			3/4-f	1/4+g	0	1/4+f	3/4-g	0
			3/4+f	3/4+g	1/2	1/4-f	1/4-g	1/2
			1/4-f	3/4+g	1/2	3/4+f	1/4-g	1/2

$$
\begin{aligned}
F \;=\; & \left(1+e^{i\pi(H+K+L)}\right) * \\
& \Bigg[\quad f(Mn) \qquad e^{i\frac{\pi}{2}(H+K+L)} \left(1+e^{i\pi(H+K)}+e^{i\pi(H+L)}+e^{i\pi(K+L)}\right) \\
& \quad + f(La/Sr) \quad \left(1+e^{i\pi(H+K)}+e^{i\pi(H+L)}+e^{i\pi(K+L)}\right) \\
& \quad + 2\,f(O) \quad \Bigg(\cos\left\{\frac{\pi}{2}(K+L)+2\pi(yK+zL)\right\} \\
& \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(K-L)+2\pi(yK-zL)\right\} \\
& \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+L)+2\pi(aH+bL)\right\} \\
& \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(H-L)+2\pi(aH-bL)\right\} \\
& \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+K)+2\pi(fH+gK)\right\} \\
& \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(H-K)+2\pi(fH-gK)\right\}\Bigg)\Bigg]
\end{aligned}
$$

Auswahlregeln: HKL H+K+L=2n

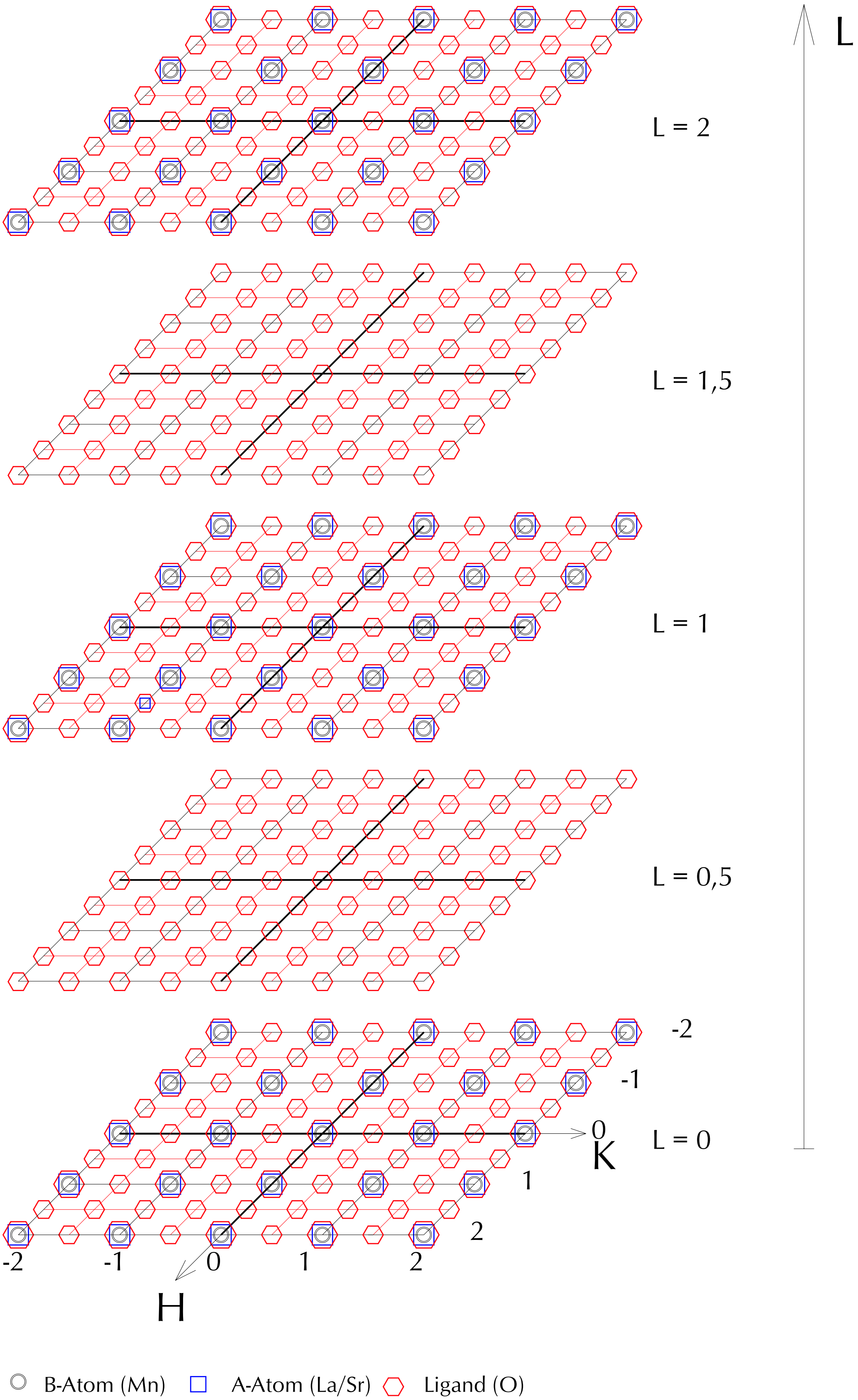


Abbildung D.11: Bragg-Reflexe der Immm-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)

$Cmcm$ (Nr. 63) - orthorhombisch

$$a \simeq 2\,a_{pc} \qquad b \simeq 2\,a_{pc} \qquad c \simeq 2\,a_{pc}$$

			x	**y**	**z**	**x**	**y**	**z**
Mn	(8d)	$\bar{1}$	1/4	1/4	0	3/4	3/4	1/2
			3/4	1/4	1/2	1/4	3/4	0
			3/4	3/4	0	1/4	1/4	1/2
			1/4	3/4	1/2	3/4	1/4	0
La/Sr	(4c)	m 2m	0	y	1/4	0	-y	3/4
			1/2	1/2+y	1/4	1/2	1/2-y	3/4
	(4c)	m 2m	0	1/2+z	1/4	0	1/2-z	3/4
			1/2	z	1/4	1/2	-z	3/4
O	(8e)	2 . .	1/4+a	0	0	3/4-a	0	1/2
			3/4-a	0	0	1/4+a	0	1/2
			3/4+a	1/2	0	1/4-a	1/2	1/2
			1/4-a	1/2	0	3/4+a	1/2	1/2
	(8f)	m . .	0	1/4+b	c	0	3/4-b	1/2+c
			0	1/4+b	1/2-c	0	3/4-b	-c
			1/2	3/4+b	c	1/2	1/4-b	1/2+c
			1/2	3/4+b	1/2-c	1/2	1/4-b	-c
	(8g)	. . m	1/4+d	1/4+e	1/4	3/4-d	3/4-e	3/4
			3/4-d	1/4+e	1/4	1/4+d	3/4-e	3/4
			3/4+d	3/4+e	1/4	1/4-d	1/4-e	3/4
			1/4-d	3/4+e	1/4	3/4+d	1/4-e	3/4

$$\begin{aligned} F \;=\; & \left(1+e^{i\pi(H+K)}\right) * \\ & \Bigg[\; f(Mn) \quad e^{i\frac{\pi}{2}(H+K)} \left(1+e^{i\pi K}\right)\left(1+e^{i\pi(H+L)}\right) \\ & \quad + 2\,f(La/Sr) \left(\cos\left\{\frac{\pi}{2}L+2\pi yK\right\}+\cos\left\{\frac{\pi}{2}L+\pi K+2\pi zK\right\}\right) \\ & \quad + 2\,f(O) \quad \Bigg(\left(1+e^{i\pi L}\right)\cos\left\{\frac{\pi}{2}H+2\pi aH\right\}+\cos\left\{\frac{\pi}{2}K+2\pi(bK+cL)\right\} \\ & \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}K+\pi L+2\pi(bK-cL)\right\} \\ & \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+K+L)+2\pi(dH+eK)\right\} \\ & \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(-H+K+L)+2\pi(-dH+eK)\right\}\Bigg)\Bigg] \end{aligned}$$

Auswahlregeln: HKL H+K=2n

H0L H,L=2n

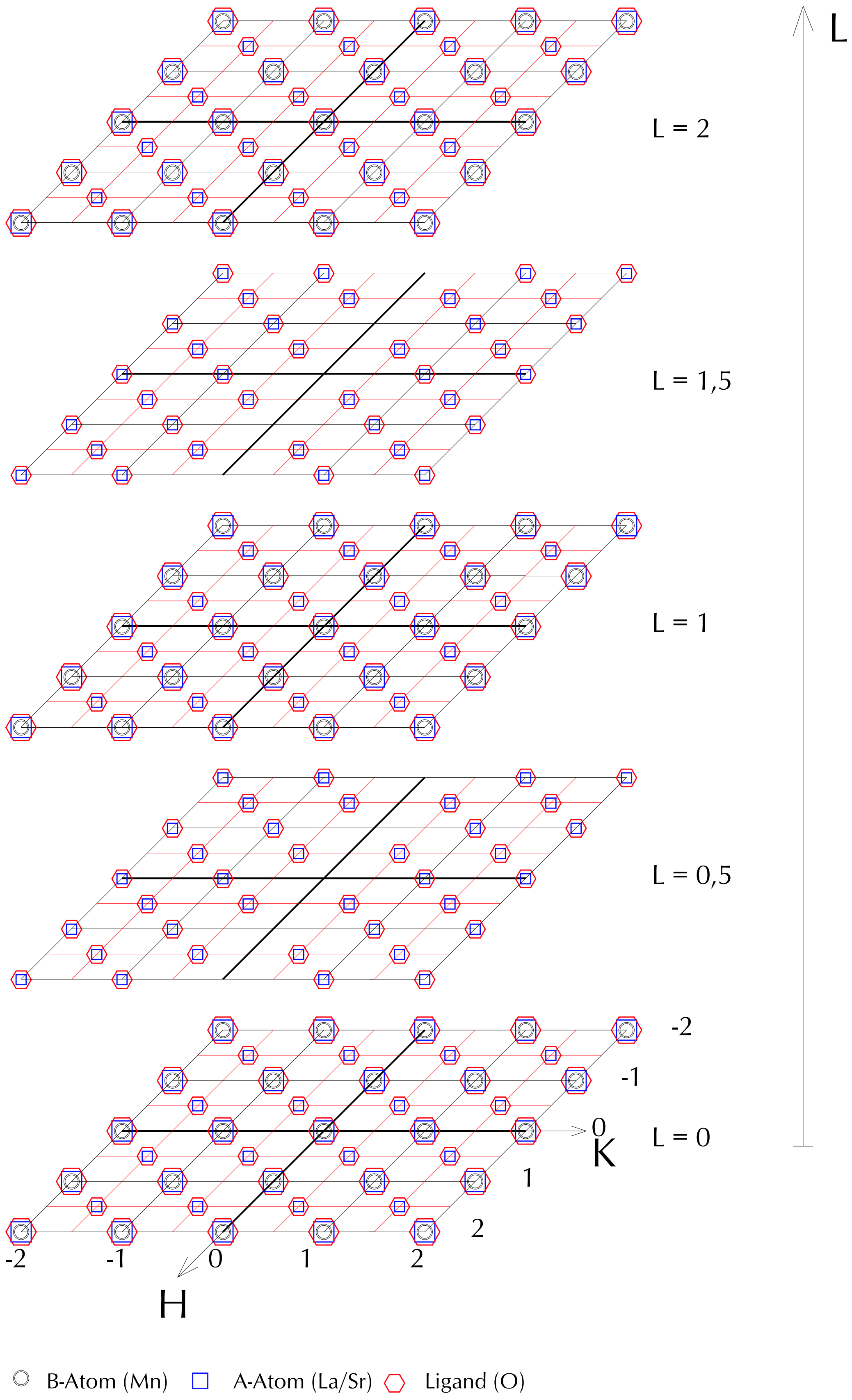
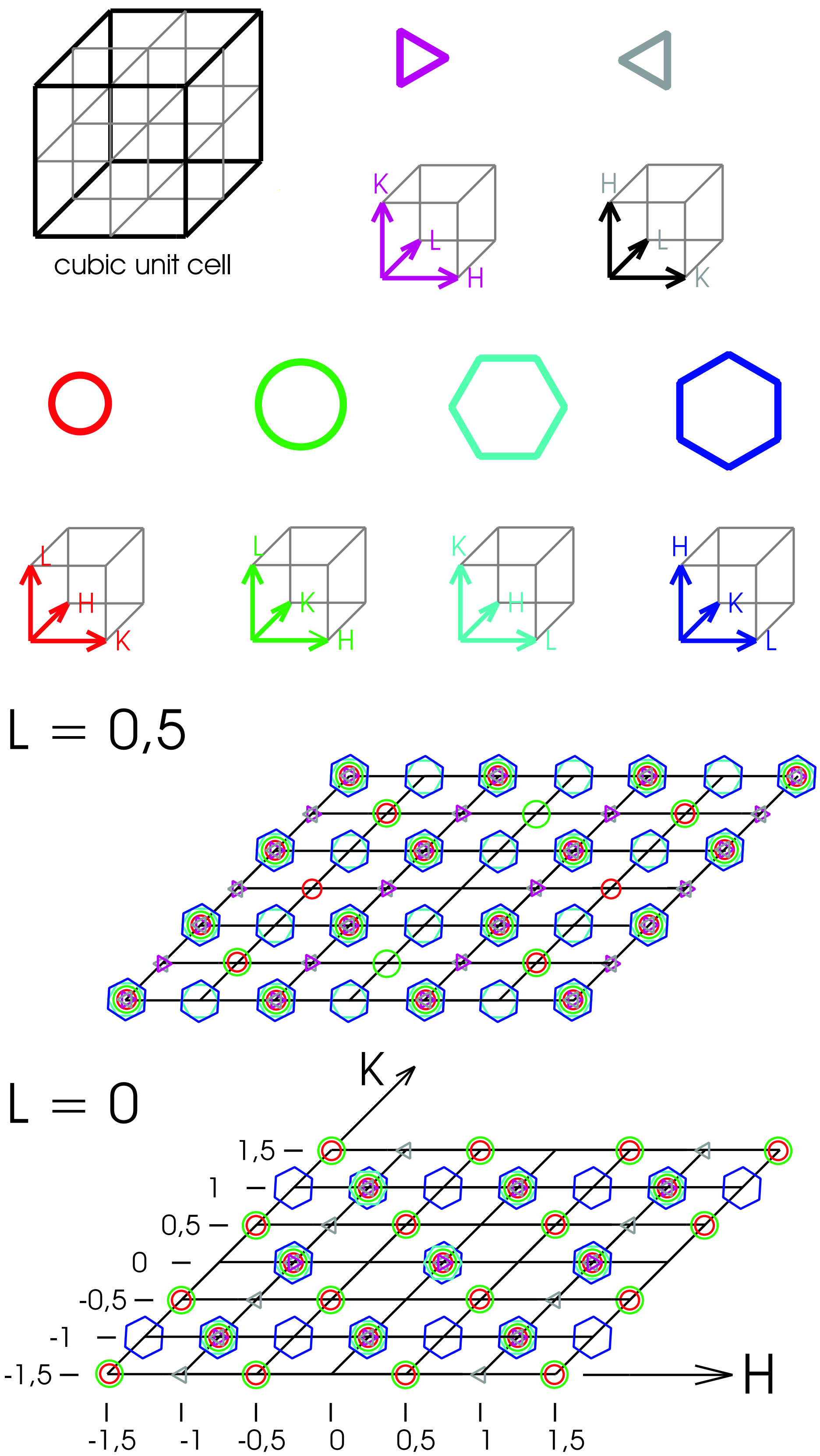


Abbildung D.12: Bragg-Reflexe der Cmcm-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)


cubic unit cell
K
L
H
H
L
K
L
H
K
L
K
H
K
H
L
H
K
L
L = 0,5
L = 0
K
1,5
1
0,5
0
-0,5
-1
-1,5
H
-1,5
-1
-0,5
0
0,5
1
1,5

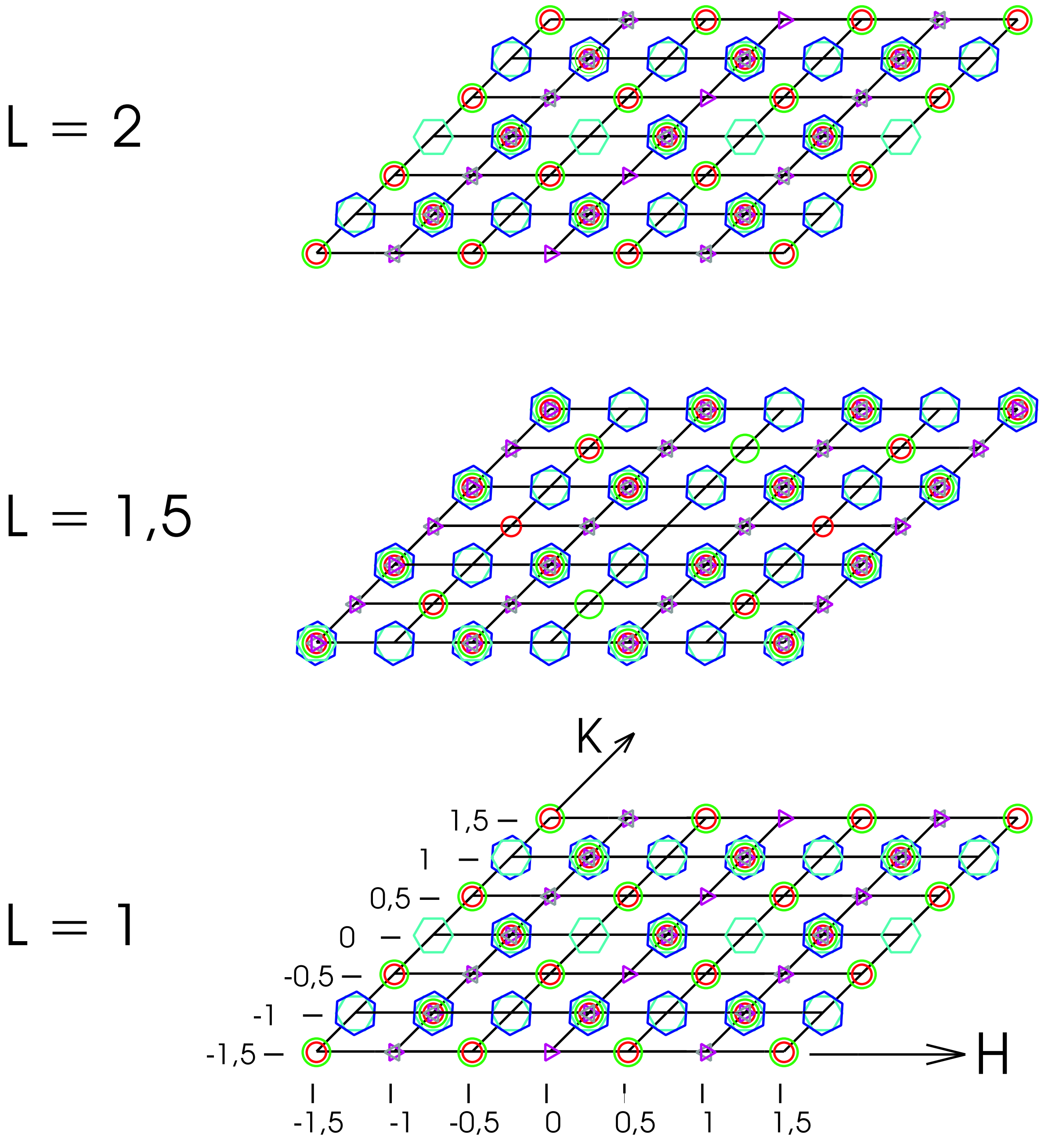


Abbildung D.13: Bragg-Reflexe der Cmcm-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten) von allen denkbaren Domänen

Pbnm **(Nr. 62) - orthorhombisch**

$$a \simeq \sqrt{2}\, a_{pc} \qquad b \simeq \sqrt{2}\, a_{pc} \qquad c \simeq 2\, a_{pc}$$

			x	**y**	**z**	**x**	**y**	**z**
Mn	(4b)	$\bar{1}$	1/2	0	0	0	1/2	0
			1/2	0	1/2	0	1/2	1/2
La/Sr	(4c)	. m .	z	x	1/4	1/2+z	1/2-x	3/4
			-z	-x	3/4	1/2-z	1/2+x	1/4
O	(4c)	. m .	1/2+a	b	1/4	a	1/2-b	3/4
			1/2-a	-b	3/4	-a	1/2+b	1/4
	(8d)	1	1/4+f	1/4+g	h	3/4+f	1/4-g	-h
			3/4-f	3/4-g	1/2+h	1/4-f	3/4+g	1/2-h
			3/4-f	3/4-g	-h	1/4-f	3/4+g	h
			1/4+f	1/4+g	1/2-h	3/4+f	1/4-g	1/2+h

$$\begin{aligned}
F = \quad & f(Mn) \quad \left(1 + e^{i\pi L}\right)\left(e^{i\pi H} + e^{i\pi K}\right) \\
+ \quad & 2\, f(La/Sr) \quad \left(\cos\left\{\frac{\pi}{2} L + 2\pi(zH + xK)\right\}\right. \\
& \qquad \left. + \cos\left\{\pi\,(H+K) + \frac{\pi}{2} L + 2\pi(-zH + xK)\right\}\right) \\
+ \quad & 2\, f(O) \quad \left(\cos\left\{\frac{\pi}{2} L + \pi H + 2\pi(aH + bK)\right\}\right. \\
& \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2} L + \pi K + 2\pi(-aH + bK)\right\} \\
& \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+K) + 2\pi(fH + gK + hL)\right\} \\
& \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(3H+K) + 2\pi(fH - gK - hL)\right\} \\
& \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+K) + \pi L + 2\pi(fH + gK - hL)\right\} \\
& \qquad \left. + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(3H+K) + \pi L + 2\pi(fH - gK + hL)\right\}\right)
\end{aligned}$$

Auswahlregeln: H0L H+L=2n
0KL K=2n

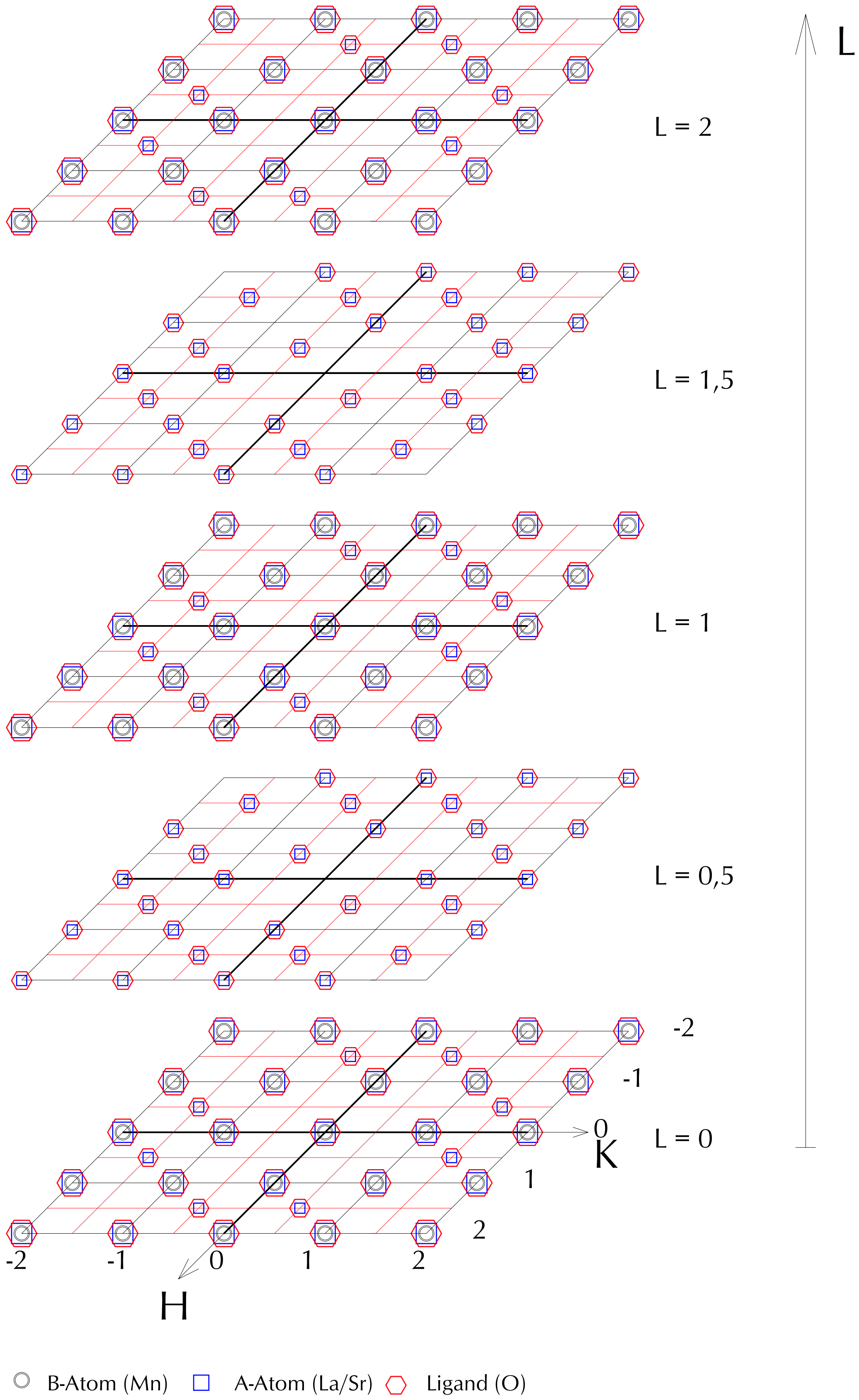
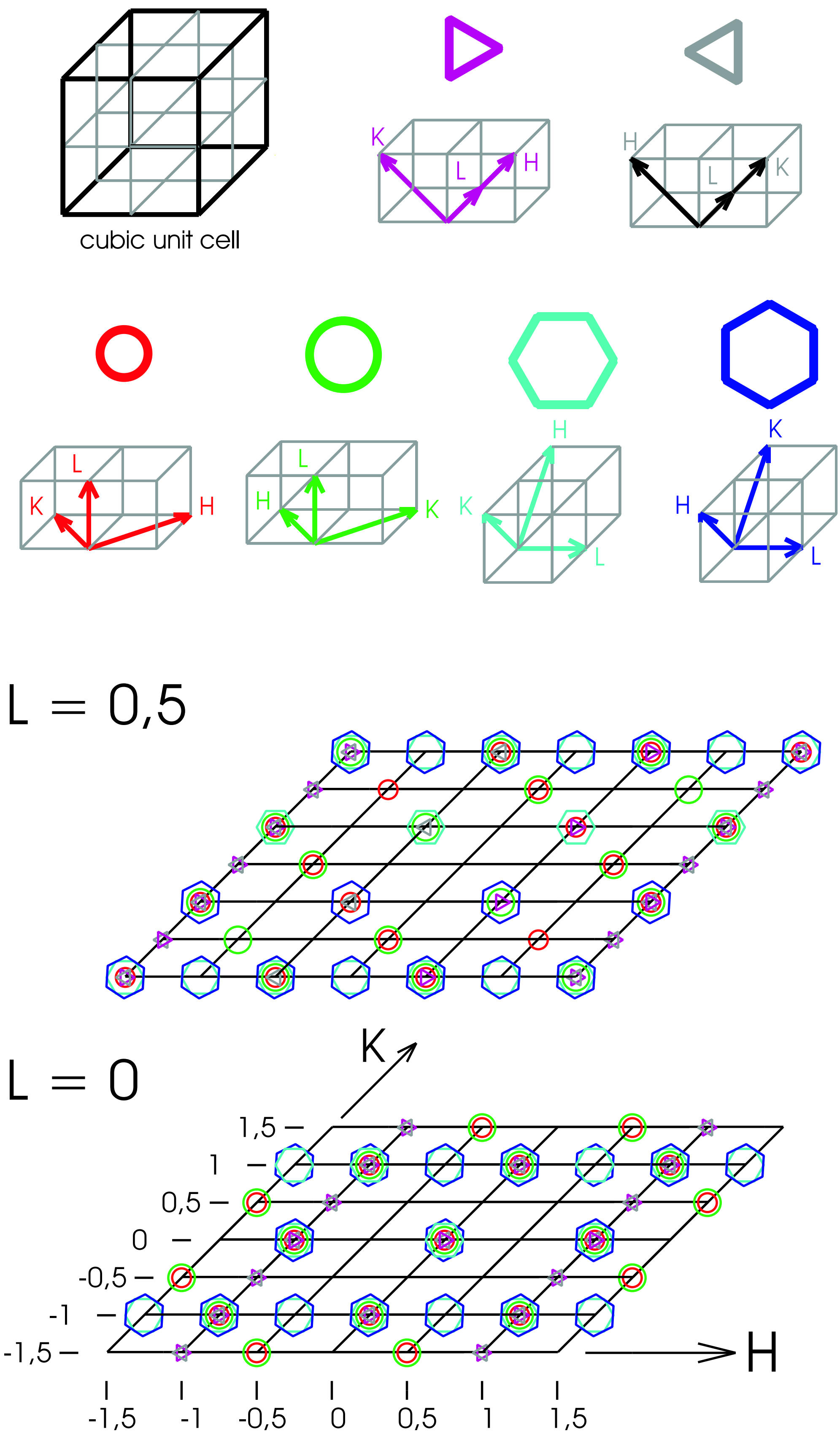


Abbildung D.14: Bragg-Reflexe der Pbnm-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)


cubic unit cell
K
L
H
H
L
K
L
K
H
L
H
K
H
K
L
K
H
L
L = 0,5
L = 0
K
1,5
1
0,5
0
-0,5
-1
-1,5
H
-1,5
-1
-0,5
0
0,5
1
1,5

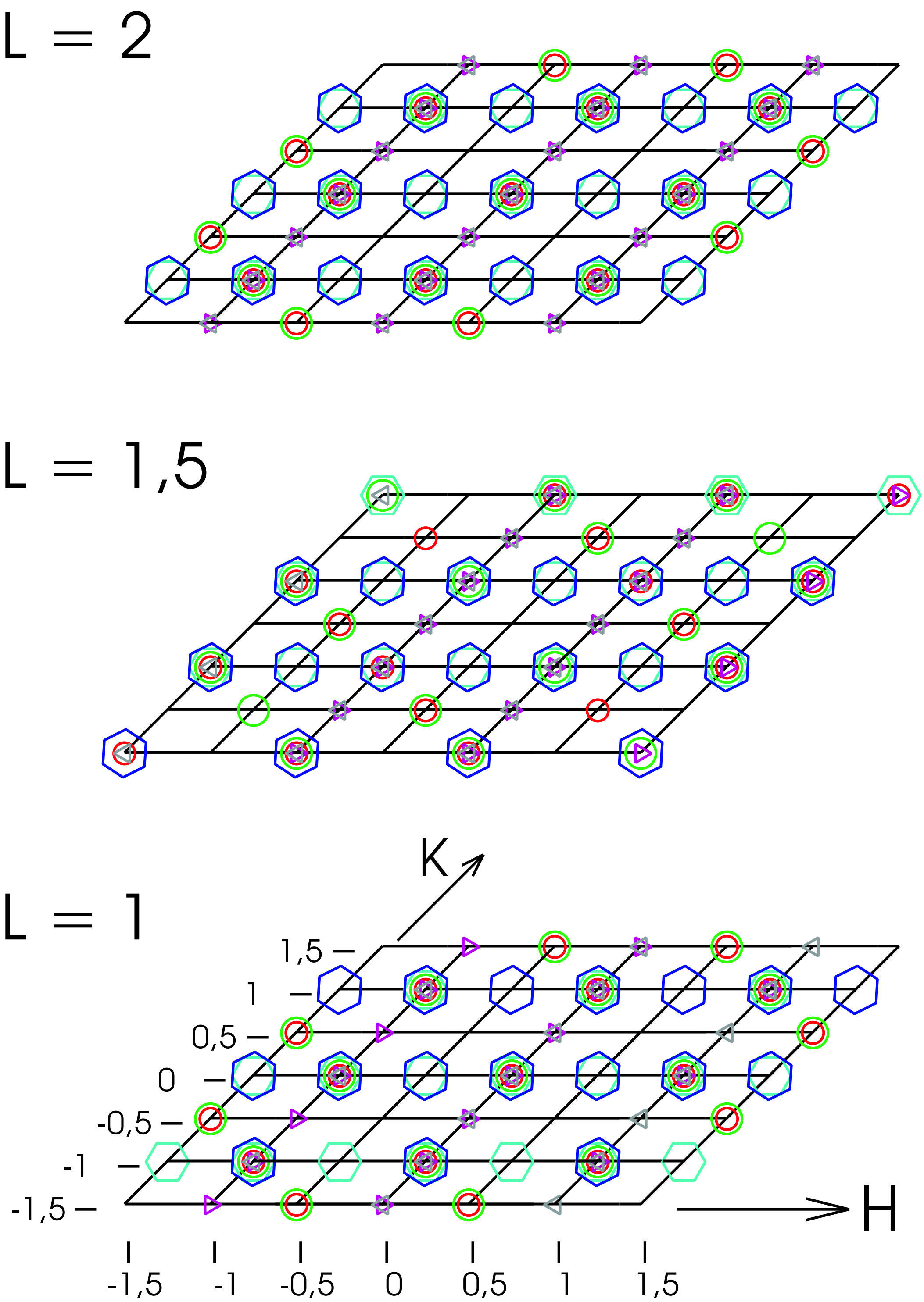


Abbildung D.15: Bragg-Reflexe der Pbnm-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten) von allen denkbaren Domänen

$Pmmn$ (Nr. 59-2) - orthorhombisch

$a \simeq 2\,a_{pc} \qquad b \simeq 2\,a_{pc} \qquad c \simeq 2\,a_{pc}$

			x	y	z	x	y	z
Mn	(4c)	$\bar{1}$	0	0	0	1/2	1/2	0
			0	1/2	0	1/2	0	0
	(4d)	$\bar{1}$	0	0	1/2	1/2	1/2	1/2
			0	1/2	1/2	1/2	0	1/2
La/Sr	(2a)	m m 2	1/4	1/4	1/4+w	3/4	3/4	3/4-w
	(2a)	m m 2	1/4	1/4	3/4+x	3/4	3/4	1/4-x
	(2b)	m m 2	1/4	3/4	1/4+y	3/4	1/4	3/4-y
	(2b)	m m 2	1/4	3/4	3/4+z	3/4	1/4	1/4-z
O	(4e)	m . .	1/4	a	b	1/4	1/2-a	b
			3/4	1/2+a	-b	3/4	-a	-b
	(4e)	m . .	1/4	c	1/2+d	1/4	1/2-c	1/2+d
			3/4	1/2+c	1/2-d	3/4	-c	1/2-d
	(4f)	. m .	e	1/4	f	1/2-e	1/4	f
			-e	3/4	-f	1/2+e	3/4	-f
	(4f)	. m .	g	1/4	1/2+h	1/2-g	1/4	1/2+h
			-g	3/4	1/2-h	1/2+g	3/4	1/2-h
	(8g)	1	k	l	1/4+m	1/2-k	1/2-l	1/4+m
			-k	1/2+l	3/4-m	1/2+k	-l	3/4-m
			-k	-l	3/4-m	1/2+k	1/2+l	3/4-m
			k	1/2-l	1/4+m	1/2-k	l	1/4+m

$$
\begin{aligned}
F = \quad & f(Mn) \quad \left(1+e^{i\pi L}\right)\left(1+e^{i\pi K}\right)\left(1+e^{i\pi H}\right) \\
+ \quad & 2\,f(La/Sr) \quad \Bigg(\cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+K+L)+2\pi wL\right\}+\cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+K-L)+2\pi xL\right\} \\
& \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(H-K+L)+2\pi yL\right\}+\cos\left\{\frac{\pi}{2}(H-K-L)+2\pi zL\right\}\Bigg) \\
+ \quad & 2\,f(O) \quad \Bigg(\cos\left\{\frac{\pi}{2}H+2\pi(aK+bL)\right\}+\cos\left\{\frac{\pi}{2}H+\pi K+2\pi(-aK+bL)\right\} \\
& \qquad +\cos\left\{\frac{\pi}{2}H+\pi L+2\pi(cK+dL)\right\}+\cos\left\{\frac{\pi}{2}H+\pi(K+L)+2\pi(-cK+dL)\right\} \\
& \qquad +\cos\left\{\frac{\pi}{2}K+2\pi(eH+fL)\right\}+\cos\left\{\frac{\pi}{2}K+\pi H+2\pi(-eH+fL)\right\} \\
& \qquad +\cos\left\{\frac{\pi}{2}K+\pi L+2\pi(gH+hL)\right\}+\cos\left\{\frac{\pi}{2}K+\pi(H+L)+2\pi(-gH+hL)\right\} \\
& \qquad +\cos\left\{\frac{\pi}{2}L+2\pi(kH+lK+mL)\right\}+\cos\left\{\frac{\pi}{2}L+\pi(H+K)+2\pi(-kH-lK+mL)\right\} \\
& \qquad +\cos\left\{\frac{\pi}{2}L+\pi K+2\pi(kH-lK+mL)\right\}+\cos\left\{\frac{\pi}{2}L+\pi H+2\pi(-kH+lK+mL)\right\}\Bigg)
\end{aligned}
$$

Auswahlregeln: HK0 H+K=2n

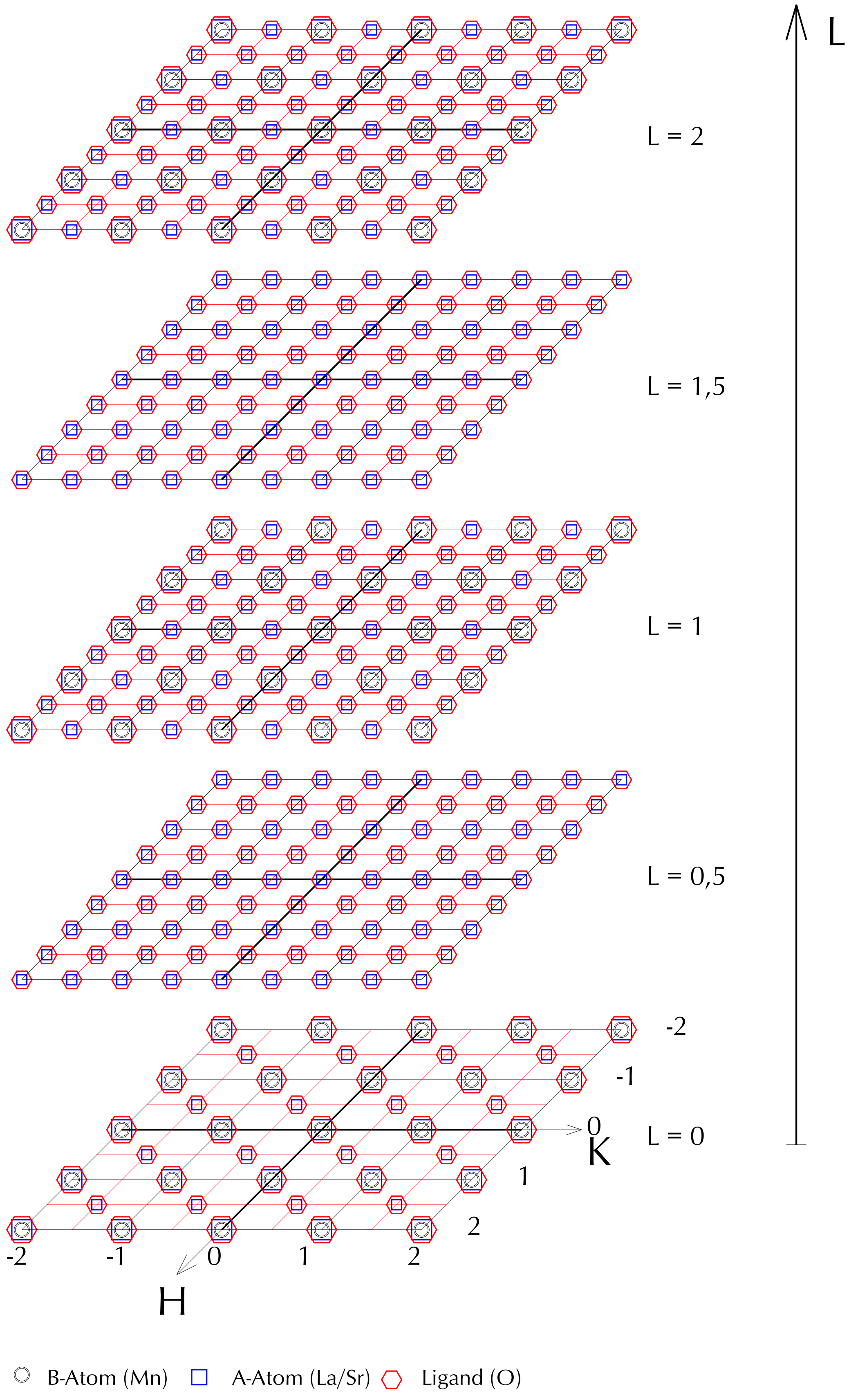


Abbildung D.16: Bragg-Reflexe der Pmmn-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)

$I2/c$ (Nr. 15-3) - monoklin

$$a \simeq 2\, a_{pc} \qquad b \simeq \sqrt{2}\, a_{pc} \qquad c \simeq \sqrt{2}\, a_{pc} \qquad \alpha \neq 90^\circ$$

			x	**y**	**z**	**x**	**y**	**z**
Mn	(4b)	$\bar{1}$	0	0	1/2	1/2	0	1/2
			1/2	1/2	0	0	1/2	0
La/Sr	(4e)	2	1/4	y	0	3/4	-y	0
			3/4	1/2+y	1/2	1/4	1/2-y	1/2
O	(4e)	2	1/4	1/2+z	0	3/4	1/2-z	0
			3/4	z	1/2	1/4	-z	1/2
	(8f)	1	a	1/4+b	1/4+c	1/2-a	1/4+b	3/4-c
			-a	3/4-b	3/4-c	1/2+a	3/4-b	1/4+c
			1/2+a	3/4+b	3/4+c	-a	3/4+b	1/4-c
			1/2-a	1/4-b	1/4-c	a	1/4-b	3/4+c

$$
\begin{aligned}
F \;=\; & \left(1 + e^{i\pi(H+K+L)}\right) * \\
& \Bigg[\quad f(Mn) \qquad e^{i\pi L} \left(1 + e^{i\pi H}\right) \\
& + 2\, f(La/Sr) \quad \cos\left\{\frac{\pi}{2}H + 2\pi y K\right\} \\
& + 2 f(O)\} \qquad \left(\cos\left\{\frac{\pi}{2}H + \pi K + 2\pi z K\right\} + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(K+L) + 2\pi(aH + bK + cL)\right\} \right. \\
& \qquad\qquad \left. + \;\cos\left\{\frac{\pi}{2}(K-L) + \pi H + 2\pi(-aH + bK - cL)\right\}\right) \Bigg]
\end{aligned}
$$

Auswahlregeln: HKL H+K+L=2n

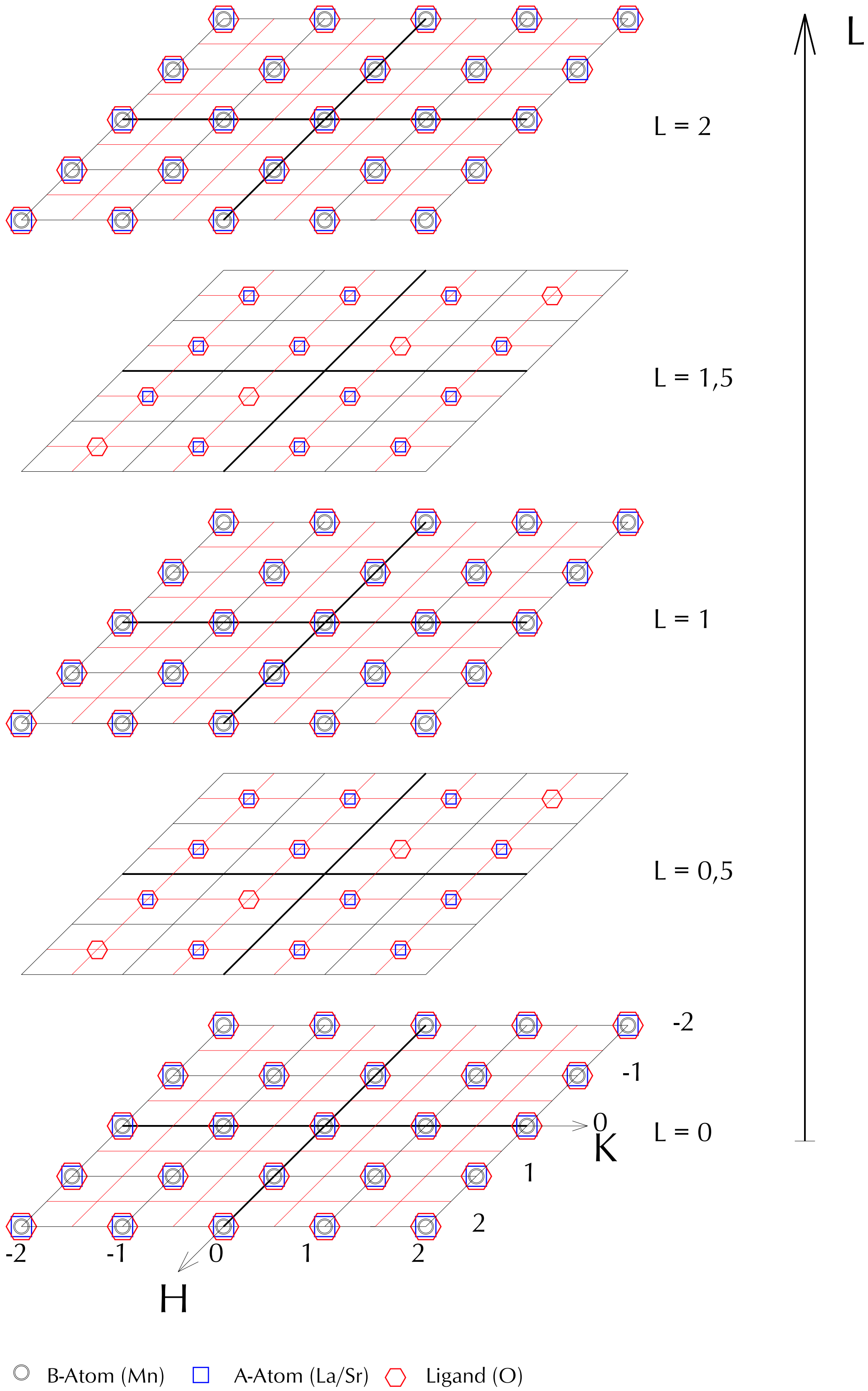
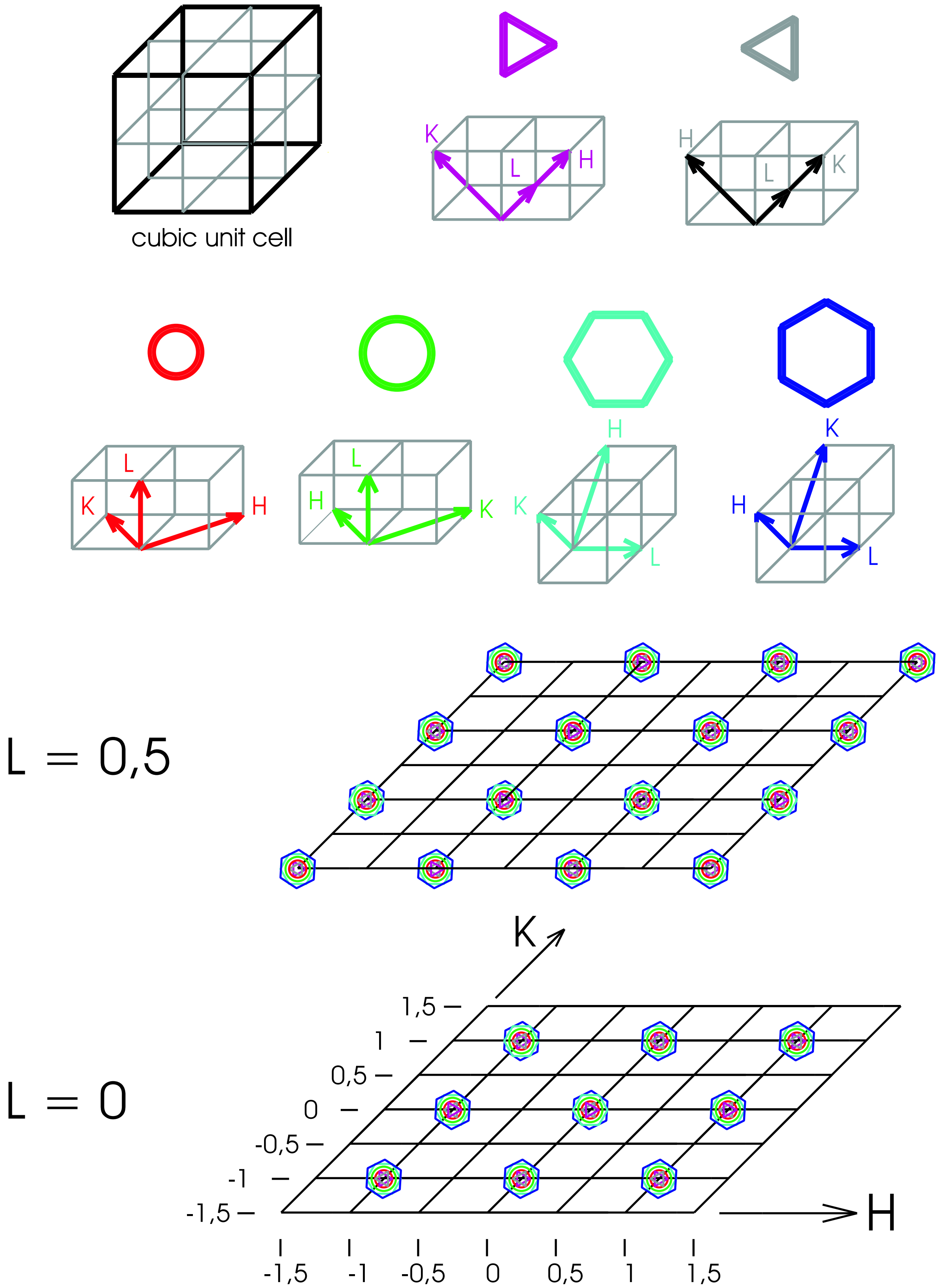


Abbildung D.17: Bragg-Reflexe der I2/a-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)


cubic unit cell
K
L
H
H
L
K
L
K
H
L
H
K
H
K
L
K
H
L
L = 0,5
L = 0
K
H
1,5
1
0,5
0
-0,5
-1
-1,5
-1,5
-1
-0,5
0
0,5
1
1,5

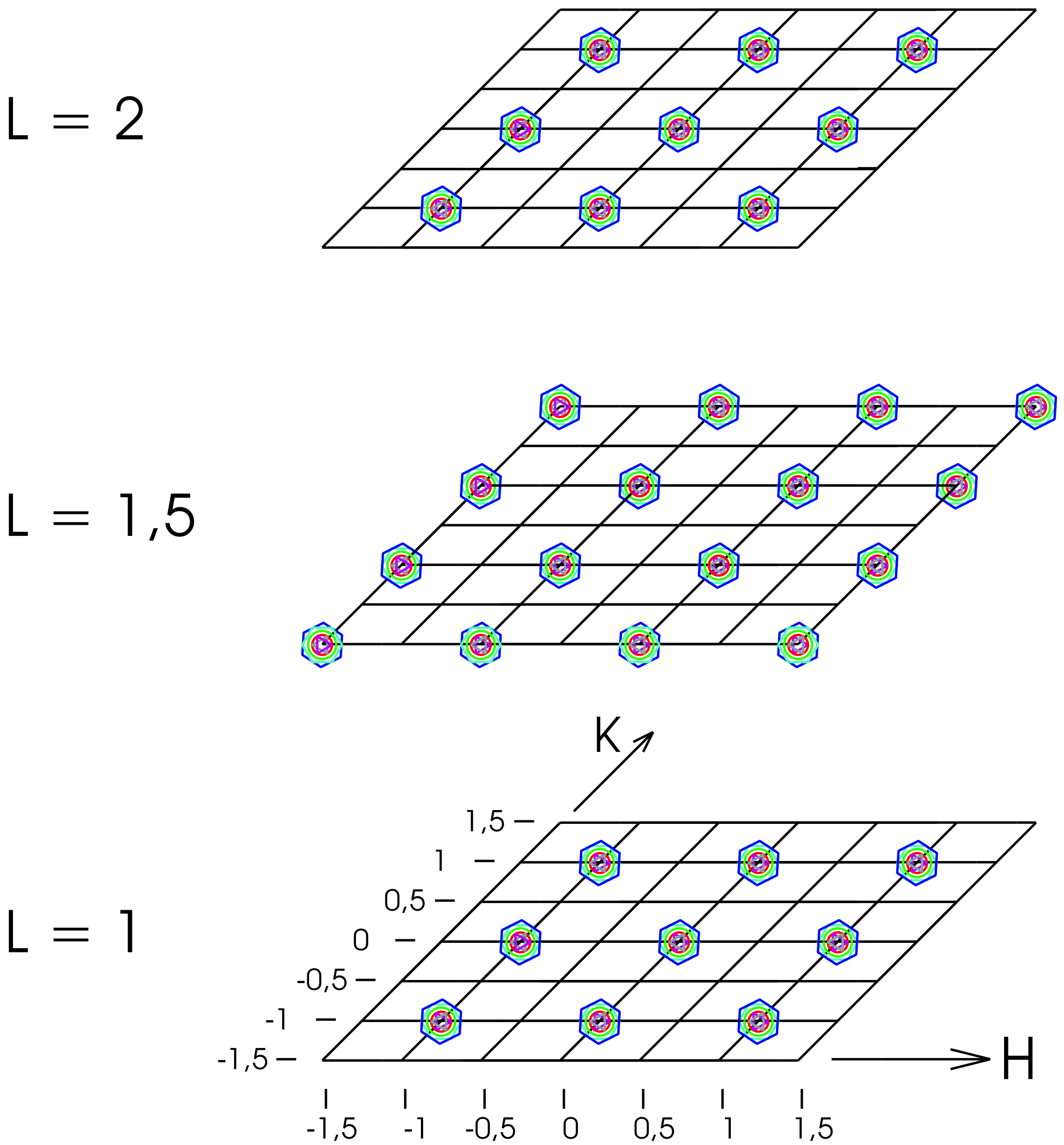


Abbildung D.18: Bragg-Reflexe der I2/a-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten) von allen denkbaren Domänen

$I2/m$ (Nr. 12-3) - monoklin

$$a \simeq \sqrt{2}\, a_{pc} \qquad b \simeq \sqrt{2}\, a_{pc} \qquad c \simeq 2\, a_{pc} \qquad \gamma \neq 90^\circ$$

			x	**y**	**z**	**x**	**y**	**z**
Mn	(4e)	$\bar{1}$	1/4	1/4	1/4	3/4	3/4	1/4
			3/4	3/4	3/4	1/4	1/4	3/4
La/Sr	(4i)	m	3/4+z	1/4+x	0	1/4-z	3/4-x	0
			1/4+z	3/4+x	1/2	3/4-z	1/4-x	1/2
O	(4i)	m	1/4+a	1/4+b	0	3/4-a	3/4-b	0
			3/4+a	3/4+b	1/2	1/4-a	1/4-b	1/2
	(4g)	2	0	0	1/4+c	0	0	3/4-c
			1/2	1/2	3/4+c	1/2	1/2	1/4-c
	(4h)	2	0	1/2	1/4+d	0	1/2	3/4-d
			1/2	0	3/4+d	1/2	0	1/4-d

$$\begin{aligned}
F \quad = \quad & \left(1 + e^{i\pi(H+K+L)}\right) * \\
& \Big[\quad f(Mn) \qquad e^{i\frac{\pi}{2}(H+K+L)} \left(1 + e^{i\pi(H+K)}\right) \\
& \quad + 2\, f(La/Sr) \qquad \cos\left\{\frac{\pi}{2}(-H+K) + 2\pi(zH + xK)\right\} \\
& \quad + 2\, f(O) \qquad \Big(\cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+K) + 2\pi(aH + bK)\right\} \\
& \qquad\qquad\qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}L + 2\pi cL\right\} \\
& \qquad\qquad\qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}L + \pi K + 2\pi dL\right\}\Big) \Big]
\end{aligned}$$

Auswahlregeln: HKL H+K+L=2n

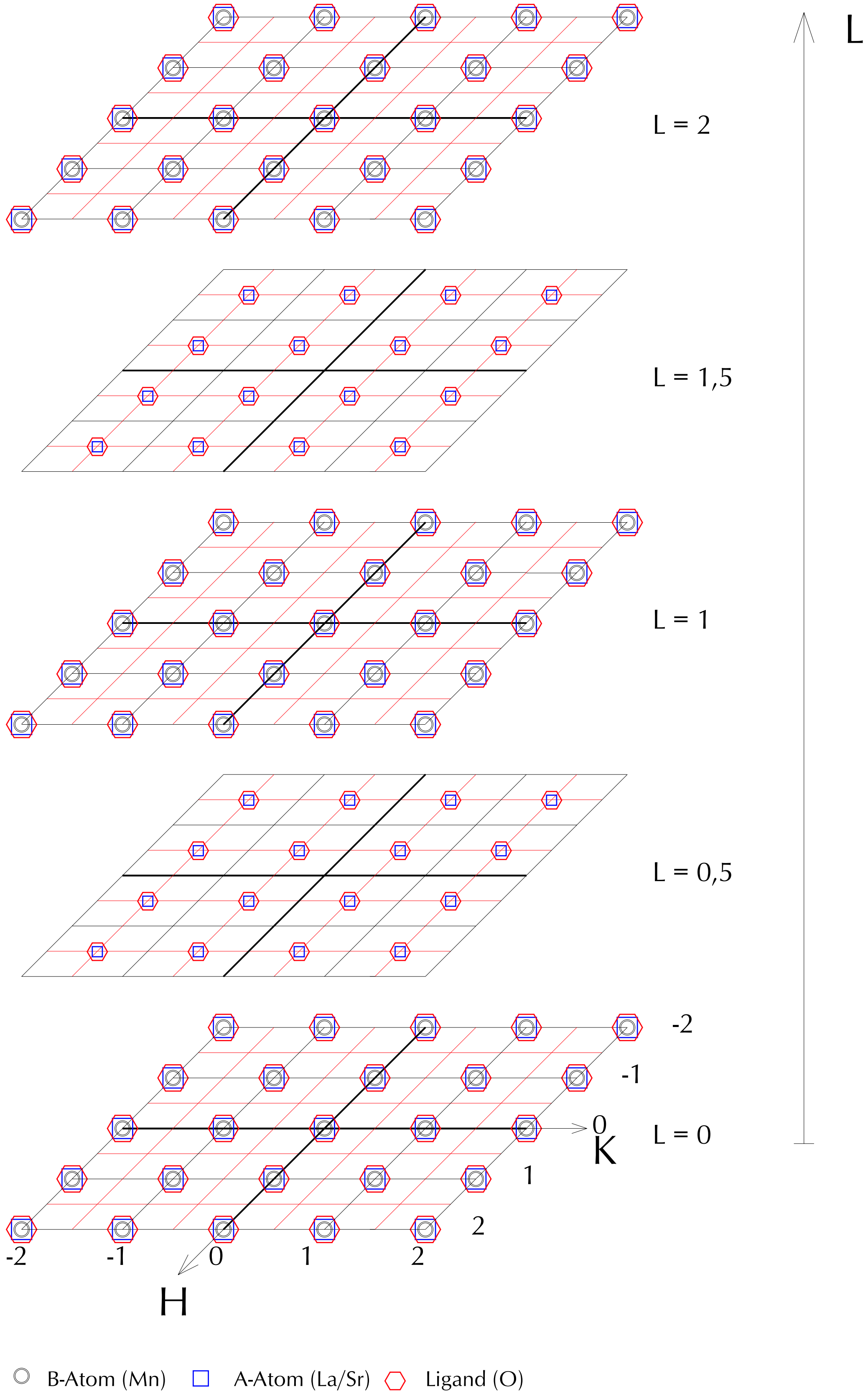
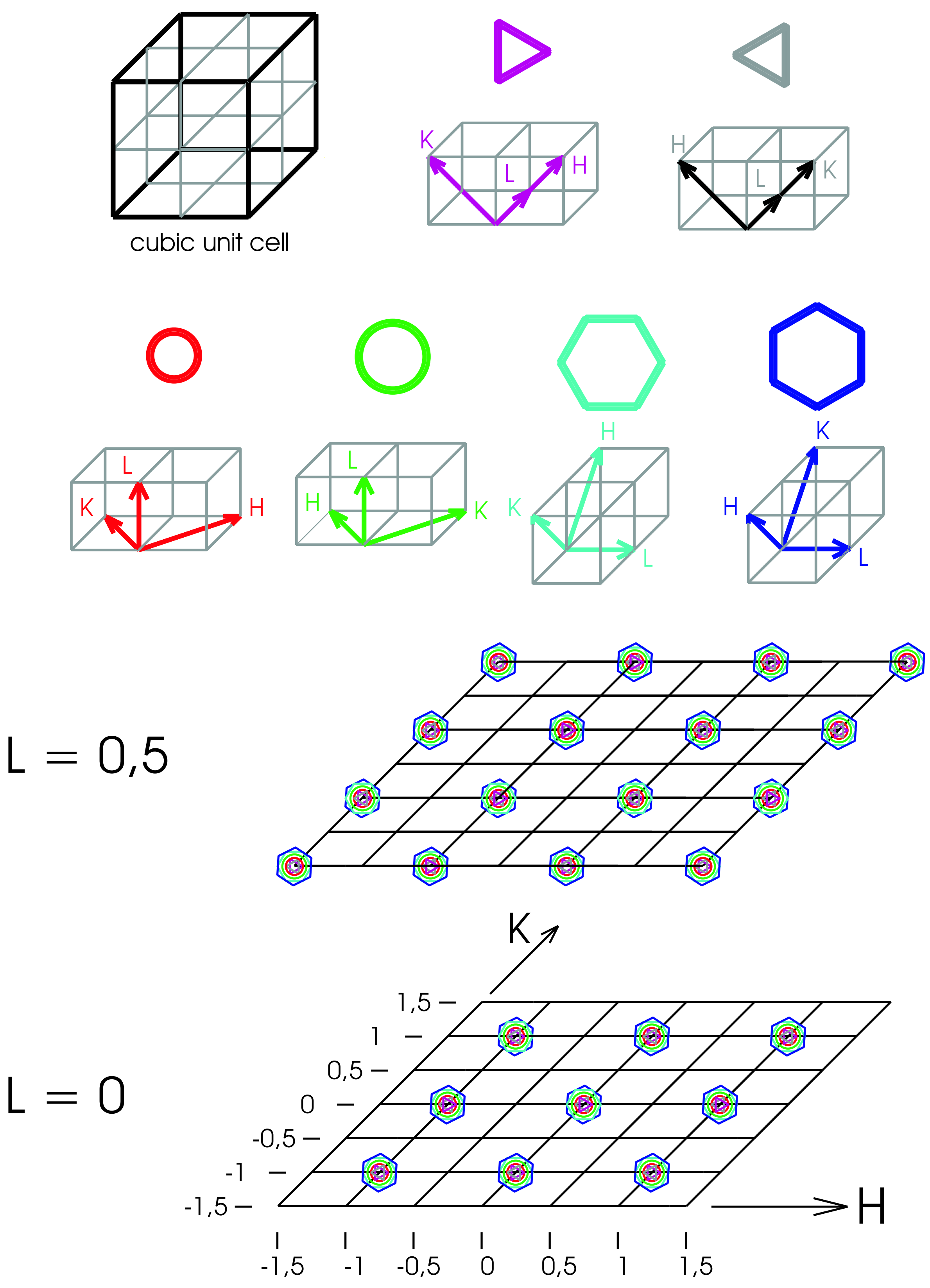


Abbildung D.19: Bragg-Reflexe der I2/m-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)


cubic unit cell
K
L
H
H
L
K
L
K
H
L
H
K
H
K
L
K
H
L
L = 0,5
L = 0
K
H
1,5
1
0,5
0
-0,5
-1
-1,5
-1,5
-1
-0,5
0
0,5
1
1,5

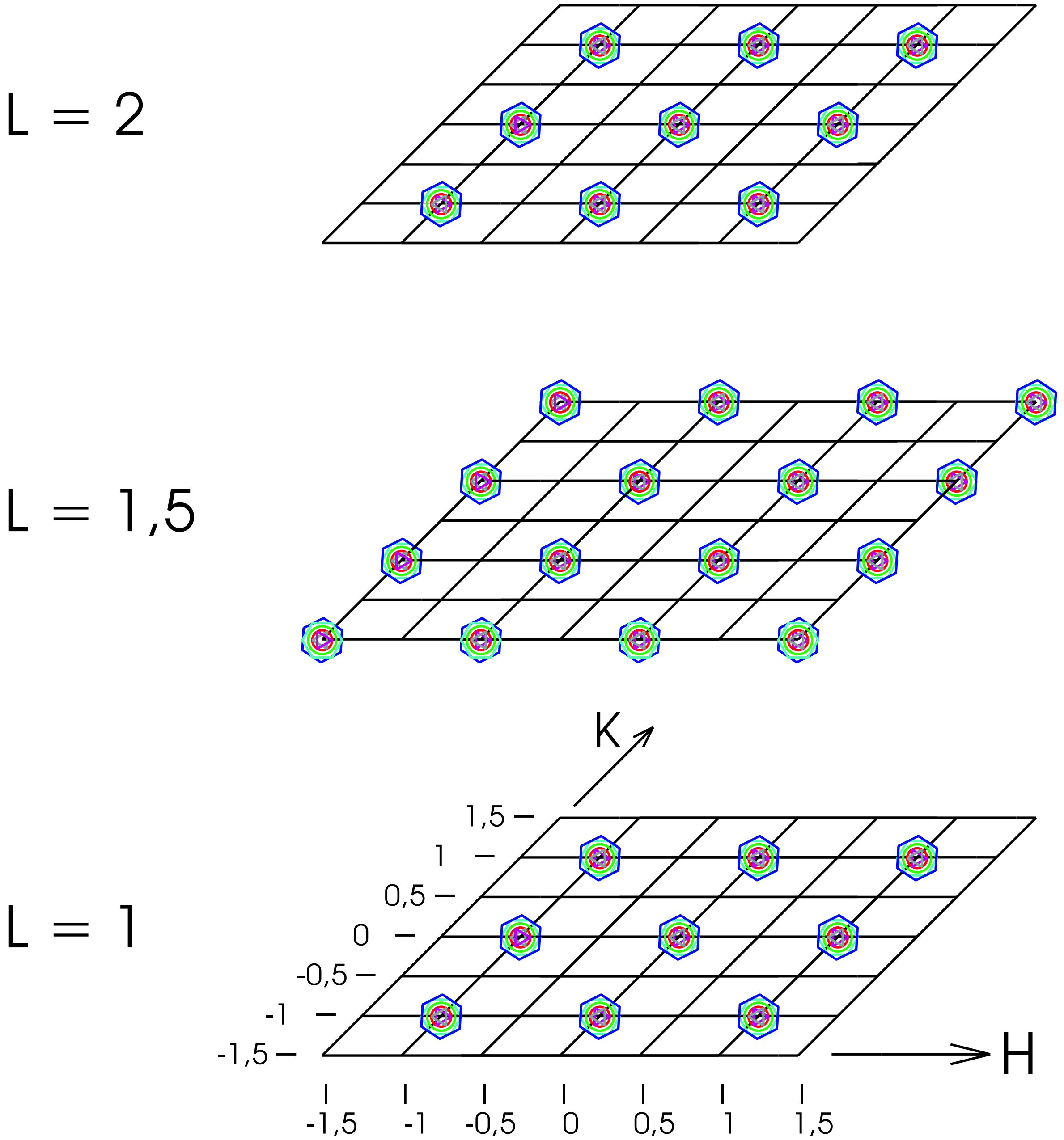


Abbildung D.20: Bragg-Reflexe der I2/m-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten) von allen denkbaren Domänen

$P2_1/m$ **(Nr. 11-1) - monoklin**

$$a \simeq \sqrt{2}\, a_{pc} \qquad b \simeq \sqrt{2}\, a_{pc} \qquad c \simeq 2\, a_{pc} \qquad \gamma \neq 90^\circ$$

			x	**y**	**z**	**x**	**y**	**z**
Mn	(2b)	$\bar{1}$	0	1/2	0	0	1/2	1/2
	(2c)	$\bar{1}$	1/2	0	0	1/2	0	1/2
La/Sr	(2e)	m	z	x	1/4	-z	-x	3/4
	(2e)	m	1/2+a	1/2+b	1/4	1/2-a	1/2-b	3/4
O	(2e)	m	c	1/2+d	1/4	-c	1/2-d	3/4
	(2e)	m	1/2+e	f	1/4	1/2-e	-f	3/4
	(4f)	1	1/4+g	1/4+h	i	3/4-g	3/4-h	1/2+i
			3/4-g	3/4-h	-i	1/4+g	1/4+h	1/2-i
	(4f)	1	3/4+j	1/4+k	l	1/4-j	3/4-k	1/2+l
			1/4-j	3/4-k	-l	3/4+j	1/4+k	1/2-l

$$\begin{aligned}
F = \quad & f(Mn) && \left(1+e^{i\pi L}\right)\left(e^{i\pi H}+e^{i\pi K}\right) \\
+\, 2\, & f(La/Sr) && \left(\cos\left\{\frac{\pi}{2}L + 2\pi(zH+xK)\right\} + \cos\left\{\frac{\pi}{2}L + \pi(H+K) + 2\pi(aH+bK)\right\}\right) \\
+\, 2\, & f(O) && \left(\cos\left\{\frac{\pi}{2}L + \pi K + 2\pi(cH+dK)\right\} + \cos\left\{\frac{\pi}{2}L + \pi H + 2\pi(eH+fK)\right\}\right. \\
& && + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+K) + 2\pi(gH+hK+iL)\right\} \\
& && + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+K) + \pi L + 2\pi(gH+hK-iL)\right\} \\
& && + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(-H+K) + 2\pi(jH+kK+lL)\right\} \\
& && \left. + \cos\left\{\frac{\pi}{2}(-H+K) + \pi L + 2\pi(jH+kK-lL)\right\}\right)
\end{aligned}$$

Auswahlregeln: 00L L=2n

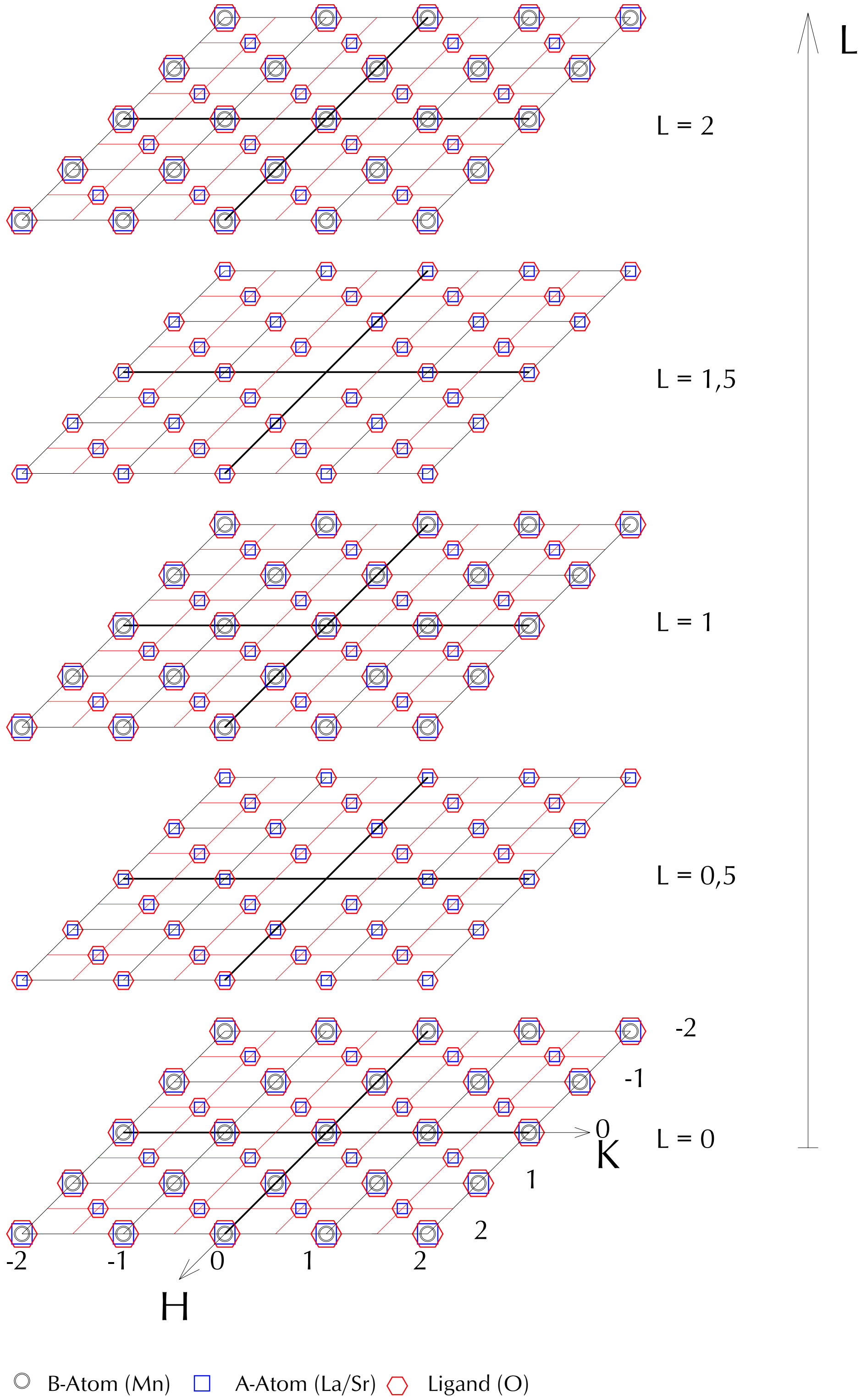
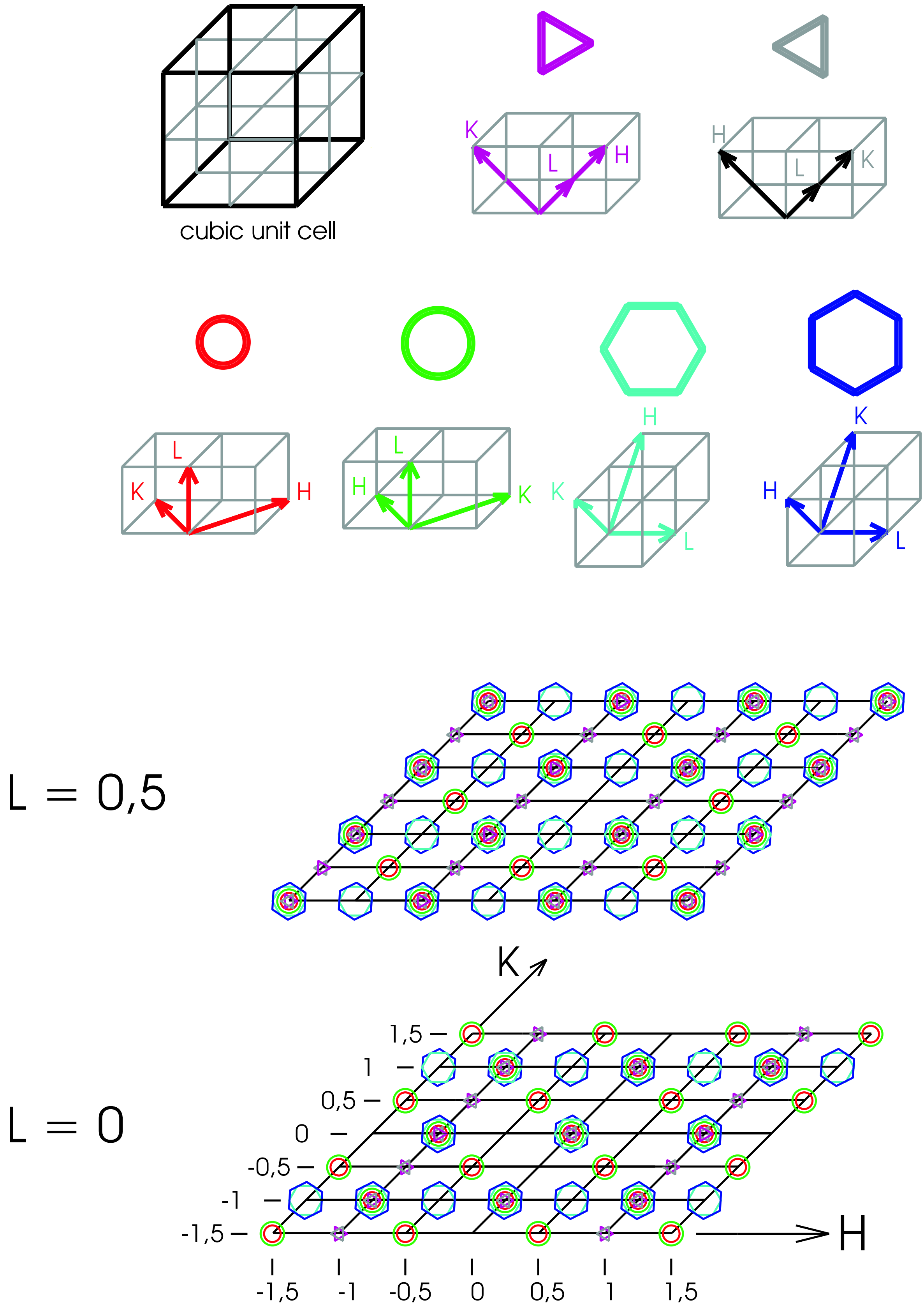


Abbildung D.21: Bragg-Reflexe der $P2_1/m$-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)


cubic unit cell
K
L
H
L = 0,5
L = 0
1,5
1
0,5
0
-0,5
-1
-1,5
-1,5
-1
-0,5
0
0,5
1
1,5

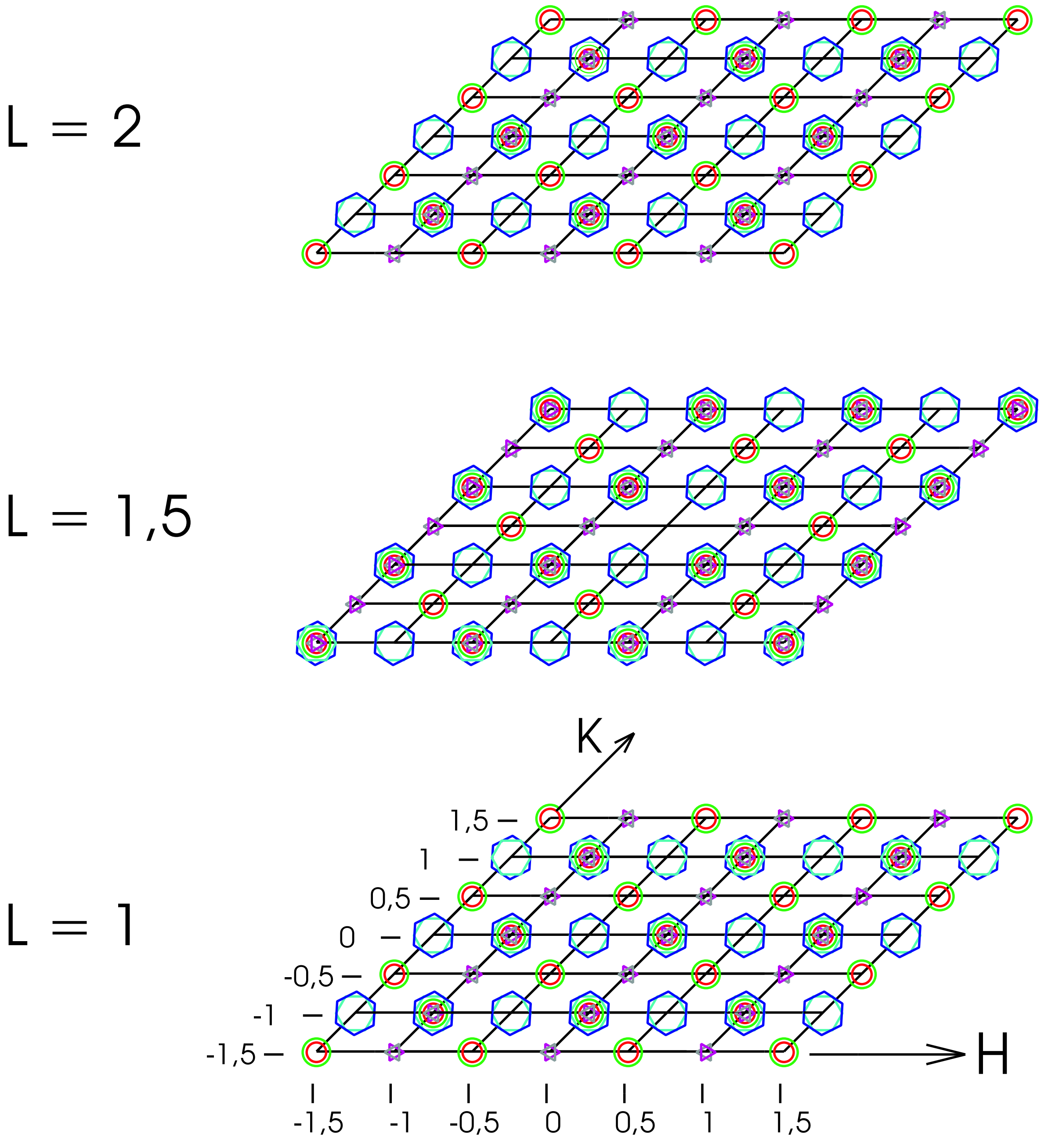


Abbildung D.22: Bragg-Reflexe der $P2_1/m$-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten) von allen denkbaren Domänen

$F\bar{1}$ (Nr. 2) - triklin

$a \simeq 2\, a_{pc} \qquad b \simeq 2\, a_{pc} \qquad c \simeq 2\, a_{pc} \qquad \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$

Mn	(4a)	F$\bar{1}$	0	0	0	1/2	1/2	0
			0	1/2	1/2	1/2	0	1/2
	(4b)	F$\bar{1}$	0	0	1/2	1/2	1/2	1/2
			0	1/2	0	1/2	0	0
La/Sr	(8i)	F1	1/4+x	1/4+y	1/4+z	3/4-x	3/4-y	3/4-z
			3/4+x	3/4+y	1/4+z	1/4-x	1/4-y	3/4-z
			1/4+x	3/4+y	3/4+z	3/4-x	1/4-y	1/4-z
			3/4+x	1/4+y	3/4+z	1/4-x	3/4-y	1/4-z
O	(8i)	F1	1/4+a	b	c	3/4-a	-b	-c
			3/4+a	1/2+b	c	1/4-a	1/2-b	-c
			1/4+a	1/2+b	1/2+c	3/4-a	1/2-b	1/2-c
			3/4+a	b	1/2+c	1/4-a	-b	1/2-c
O	(8i)	F1	d	1/4+e	f	-d	3/4-e	-f
			1/2+d	3/4+e	f	1/2-d	1/4-e	-f
			d	3/4+e	1/2+f	-d	1/4-e	1/2-f
			1/2+d	1/4+e	1/2+f	1/2-d	3/4-e	1/2-f
O	(8i)	F1	g	h	1/4+i	-g	-h	3/4-i
			1/2+g	1/2+h	1/4+i	1/2-g	1/2-h	3/4-i
			g	1/2+h	3/4+i	-g	1/2-h	1/4-i
			1/2+g	h	3/4+i	1/2-g	-h	1/4-i

$$
\begin{aligned}
F \;=\; & \left(1 + e^{i\pi(H+K)} + e^{i\pi(H+L)} + e^{i\pi(K+L)}\right) * \\
& \Bigg[\; f(Mn) \qquad \left(1 + e^{i\pi L}\right) \\
& + 2\, f(La/Sr) \quad \cos\left\{\frac{\pi}{2}(H+K+L) + 2\pi(xH+yK+zL)\right\} \\
& + 2\, f(O) \qquad \Bigg(\cos\left\{\frac{\pi}{2}H + 2\pi(aH+bK+cL)\right\} \\
& \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}K + 2\pi(dH+eK+fL)\right\} \\
& \qquad + \cos\left\{\frac{\pi}{2}L + 2\pi(gH+hK+iL)\right\}\Bigg)\Bigg]
\end{aligned}
$$

Auswahlregeln: HKL H,K,L=2n oder H,K,L=2n+1

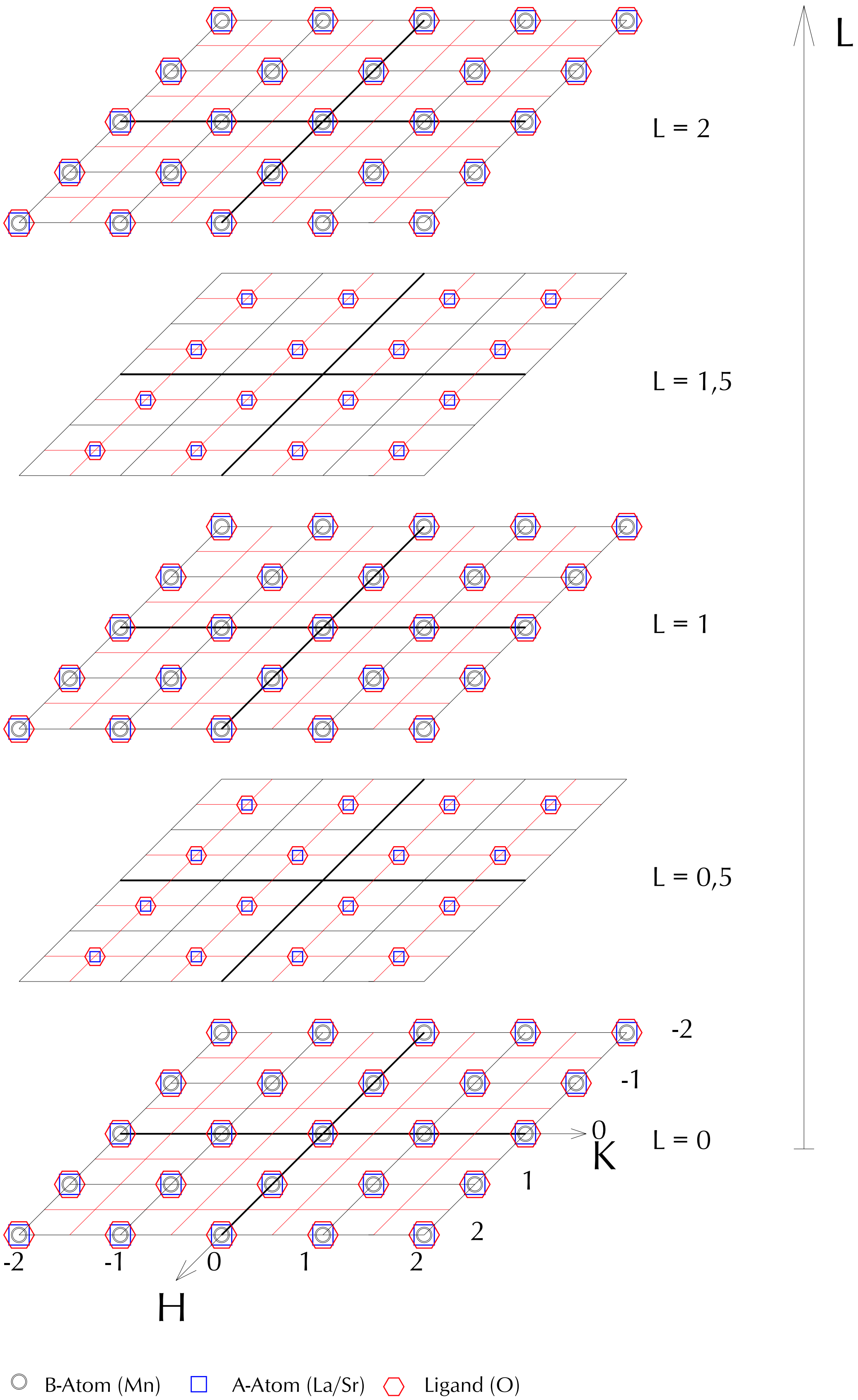
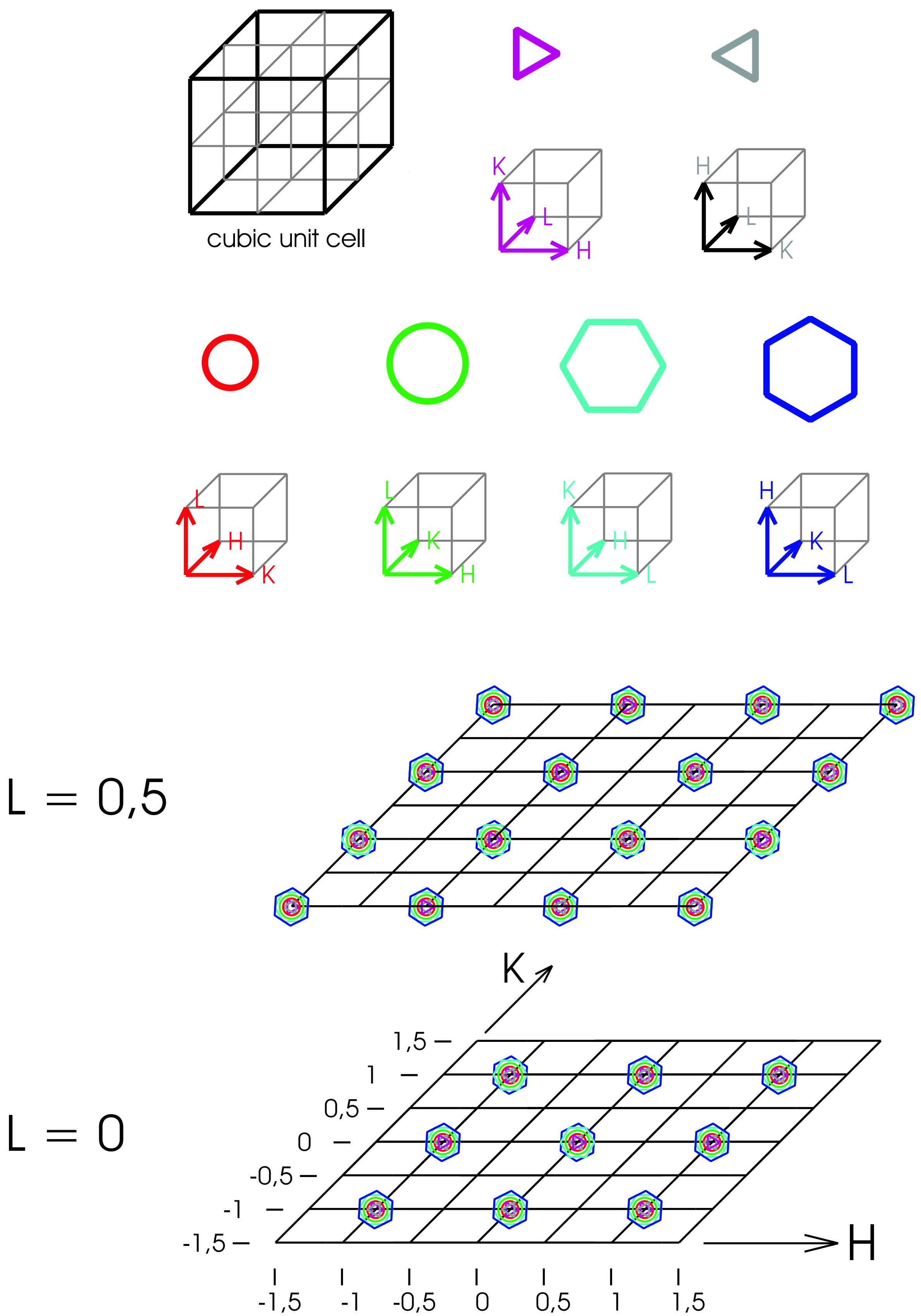


Abbildung D.23: Bragg-Reflexe der F$\bar{1}$-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten)


cubic unit cell
K
L
H
H
L
K
L
H
K
L
K
H
K
H
L
H
K
L
L = 0,5
K
1,5
1
0,5
0
-0,5
-1
-1,5
L = 0
H
-1,5
-1
-0,5
0
0,5
1
1,5

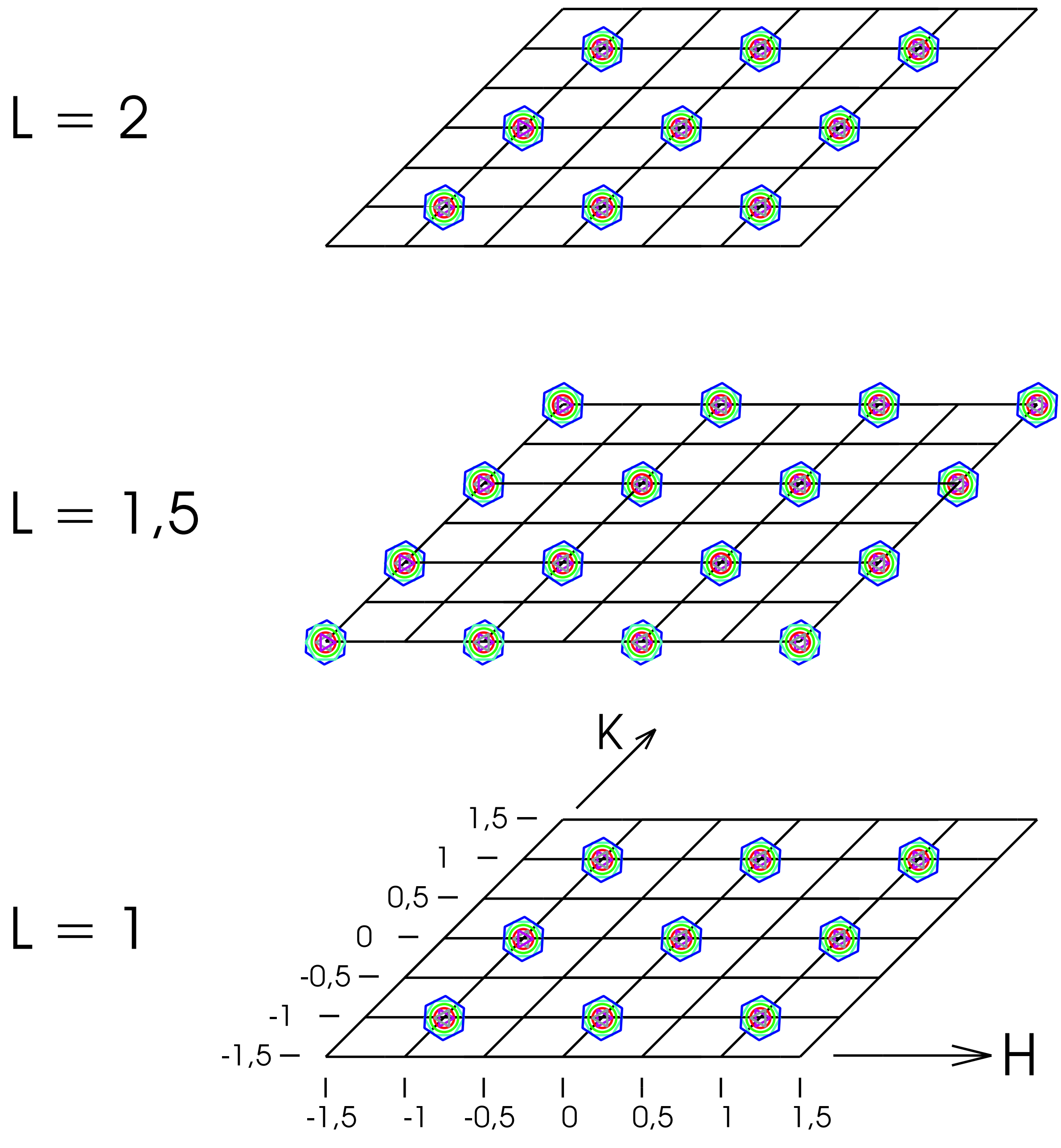


Abbildung D.24: Bragg-Reflexe der F$\bar{1}$-Raumgruppe (in pseudo-kubischen Koordinaten) von allen denkbaren Domänen

Anhang E

Überstrukturreflexe des 25nm Films LSM_F6 bei Raumtemperatur

Die folgenden Abbildungen zeigen die Positionen der bei Raumtemperatur gemessenen Peakmaxima der Überstrukturreflexe (vom Typ (Halb,Halb,Halb)) des Films LSM_F6 (25nm). Abbildung E.1 zeigt die untersuchten Überstrukturreflexe, die folgenden Abbildungen beschreiben die Positionen der gefundenen Peaks bei den entsprechenden Überstrukturreflexen. Die Abbildungen zeigen die Projektionen der gefundenen Peaks auf der H-K-, H-L- und der K-L-Ebene des benannten Überstrukturreflexes. Die Positionen wurden während der Messung mittels Zentrierung der Peaks bestimmt (d.h., es ist kein Fit). Daher können durch dieses Verfahren die Positionen schwacher Peaks nicht ganz korrekt bestimmt sein bzw. einige Maxima übersehen worden sein, falls sie in Flanken von stärkeren Peaks gefallen sind. Desweiteren können auch Peaks übersehen worden sein, falls sie im reziproken Raum zu weit von den anderen Maxima liegen.

Die (H,K,L)-Werte sind die unverarbeiteten Original-Daten von der Messung (X22A, November 2001), und beziehen sich auf einem angenommenen, tetragonalen Einheitszelle des Films (a=b=3.905Å, c=3.865Å). Aufgrund der nicht ganz präzise bestimmten Drehwinkel für die beiden Stützvektoren bzw. aufgrund der etwas von der Annahme abweichenden Struktur ist die Matrix zum Auffinden weiterer Bragg-Reflexe nicht vollständig korrekt, so dass die angegebenen reziproken Gitterpositionen von den tatsächlichen Werten leicht abweichen. Dieser Fehler wurde bei *diesen* Daten nicht nachträglich korrigiert. Jedoch kann man grob die tatsächliche Position abschätzen:

In Analogie zu den „kubischen“ Bragg-Reflexen liegt der zentrale Filmpeak bei genau halbzahligen H- und K-Werten. Für die L-Werte der K- (H-) Satellitenpeaks gilt auch für die Überstrukturreflexe die Formel $L = L' \cdot 1.01 \pm H' \cdot 0.007$ bzw. $L = L' \cdot 1.01 \pm K' \cdot 0.007$. Allerdings fand man bei manchen Reflexen nicht alle 4 Möglichkeiten, so dass bei einigen Überstrukturreflexe über die tatsächlichen L-Werte geraten werden muss.

Zusätzlich zu den Zentral- und Satellitenpeaks des Films findet man noch weitere, zum Teil intensive Peaks, deren Ursprung nicht geklärt werden konnte, welche aber eventuell durch ein intensives Studium aller gezeigten Peakpositions-Mappen gelöst werden könnte.

Nach dem Überblick der gemessenen Überstrukturreflexe in Abbildung E.1 werden die Positionen der gefundenen Peaks von den Überstrukturreflexe (H',K',L') in der Ebene L'=2.5 dargestellt (Abbildung E.2 und E.3). Danach werden die Peakmaxima von Überstrukturreflexe bei Variation von L' (mit K'=1.5 und H'=-1.5 bzw. H'=-0.5) (siehe Abbildung E.4), sowie diejenigen bei einer Variation von H' (mit K'=1.5 und L'=2.5) (siehe Abbildung E.5) bzw. diejenigen bei einer Variation von K' (mit H'=-1.5 und L'=2.5) (siehe Abbildung E.6) gezeigt. Abschließend wurde ein Satz „äquivalenter“ Reflexe verglichen, d.h. Reflexe mit gleichem $|\vec{Q}|$-Vektor, welche sich durch Drehen um die L-Achse oder durch Spiegeln entlang (H=0)- oder (K=0)-Ebene ineinander überführen lassen. Gewählt wurde als Ausgangsreflex (H',K',L')=(-0.5,1.5,2.5).

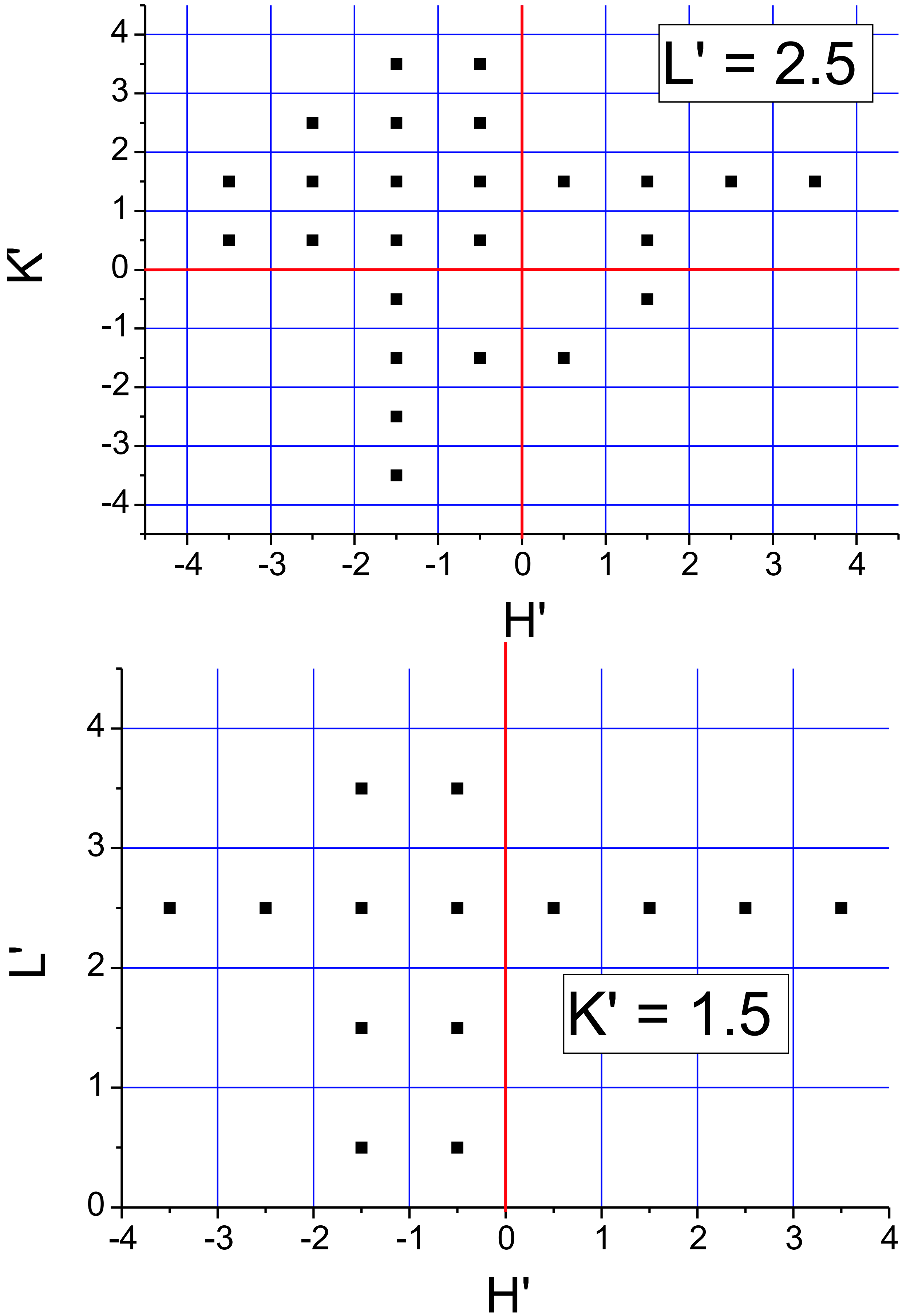


Abbildung E.1: Überblick über die gemessenen Überstrukturreflexe des 25nm Films LSM_F6

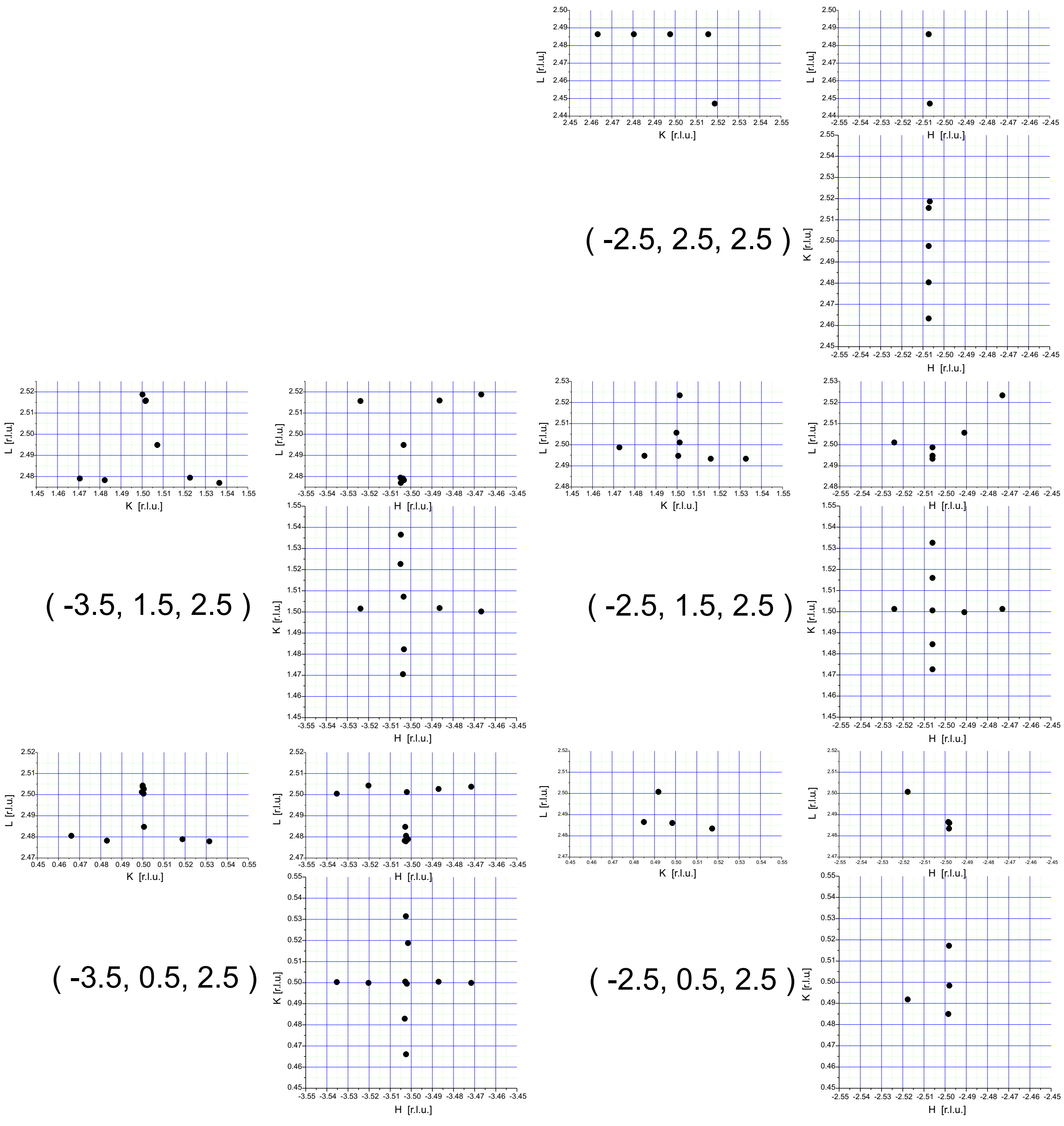


Abbildung E.2: Gefundene Peaks der Überstrukturreflexe eines Quadranten von der Ebene L'=2.5 (Teil 1)

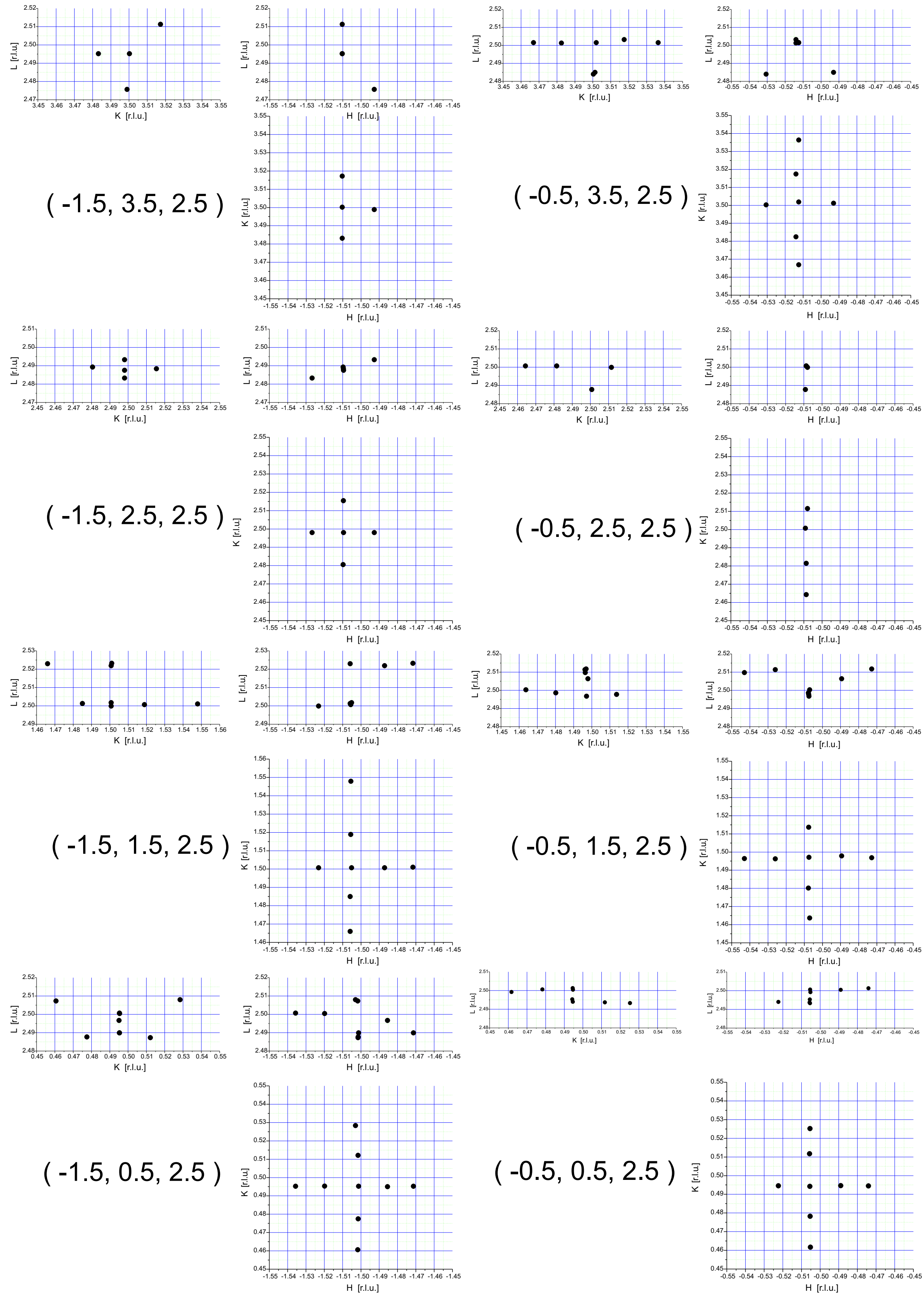


Abbildung E.3: Gefundene Peaks der Überstrukturreflexe eines Quadranten von der Ebene L'=2.5 (Teil 2)

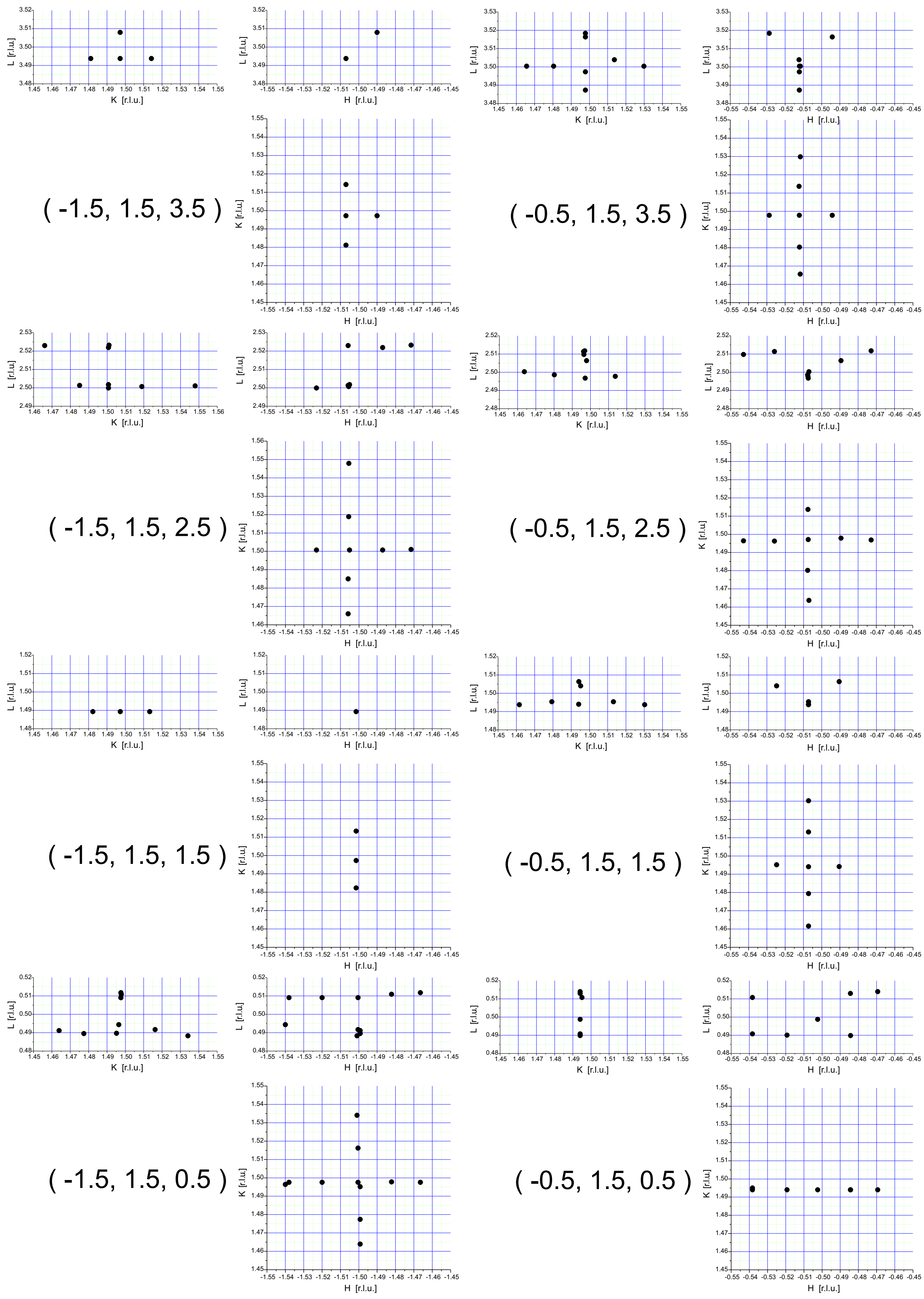


Abbildung E.4: Gefundene Peaks der Überstrukturreflexe mit verschiedenen L'-, aber gleichen H'- und K'-Werten.

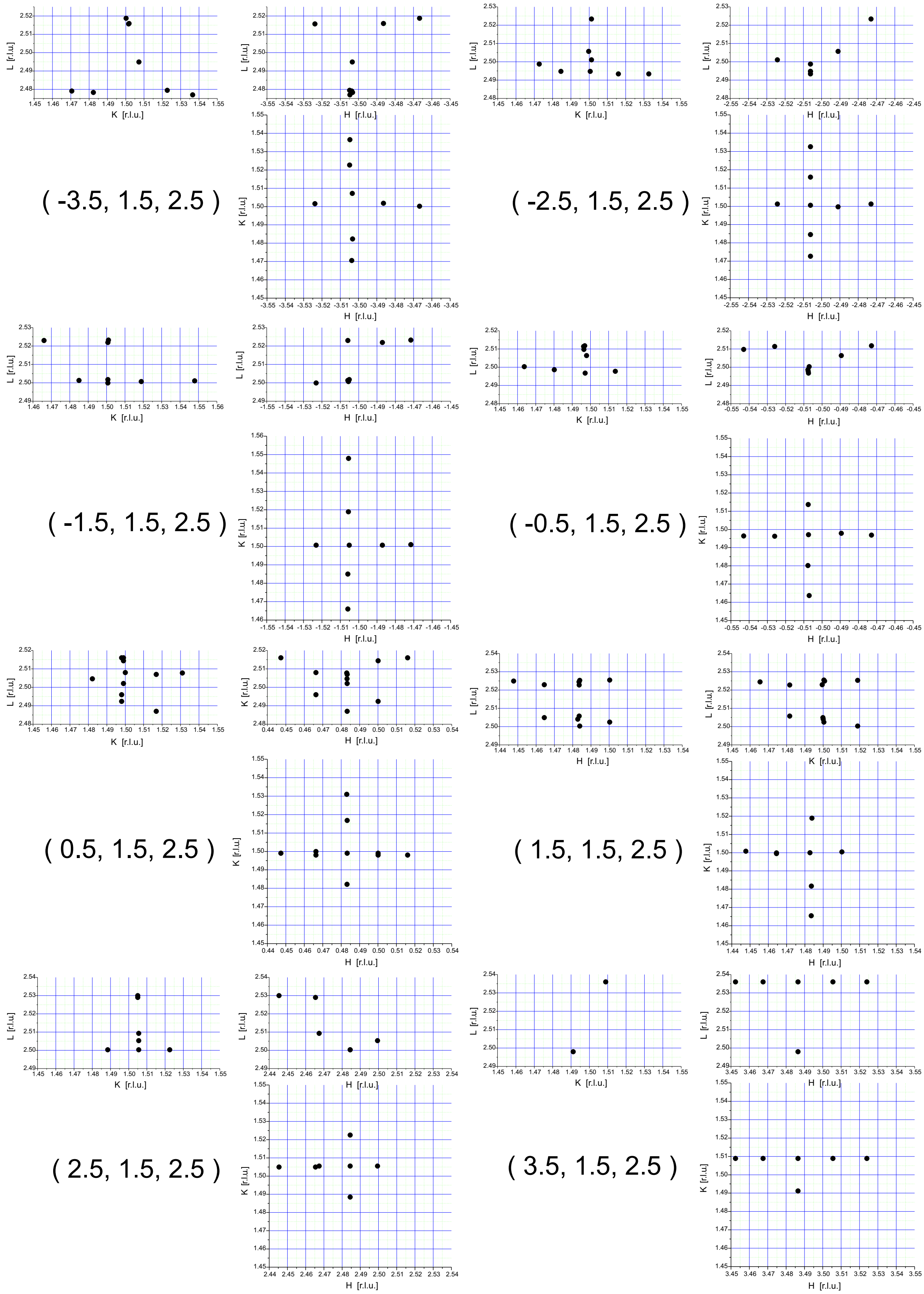


Abbildung E.5: Gefundene Peaks der Überstrukturreflexe mit verschiedenen H'-, aber gleichen K'- und L'-Werten.

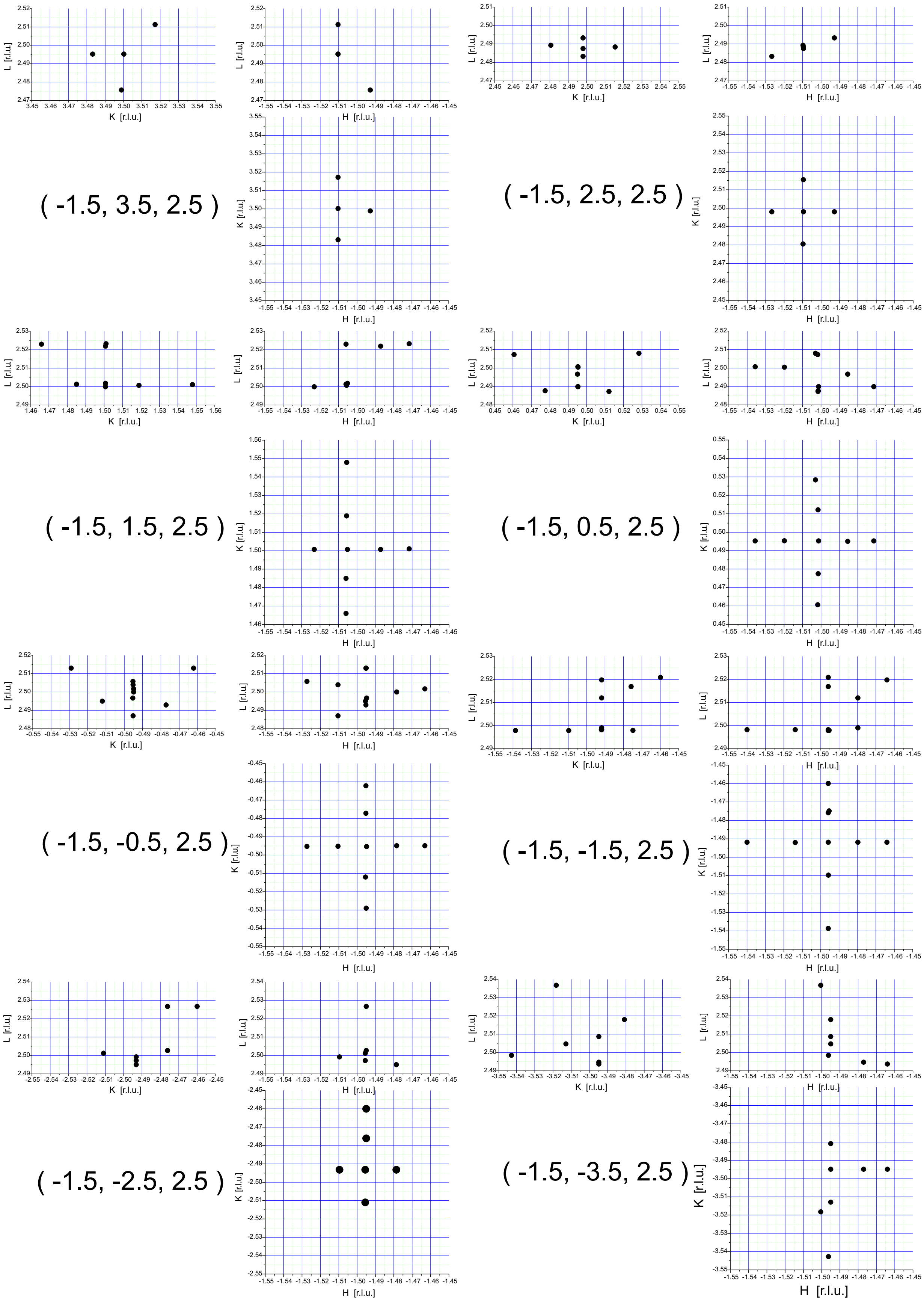


Abbildung E.6: Gefundene Peaks der Überstrukturreflexe mit verschiedenen K'-, aber gleichen H'- und L'-Werten.

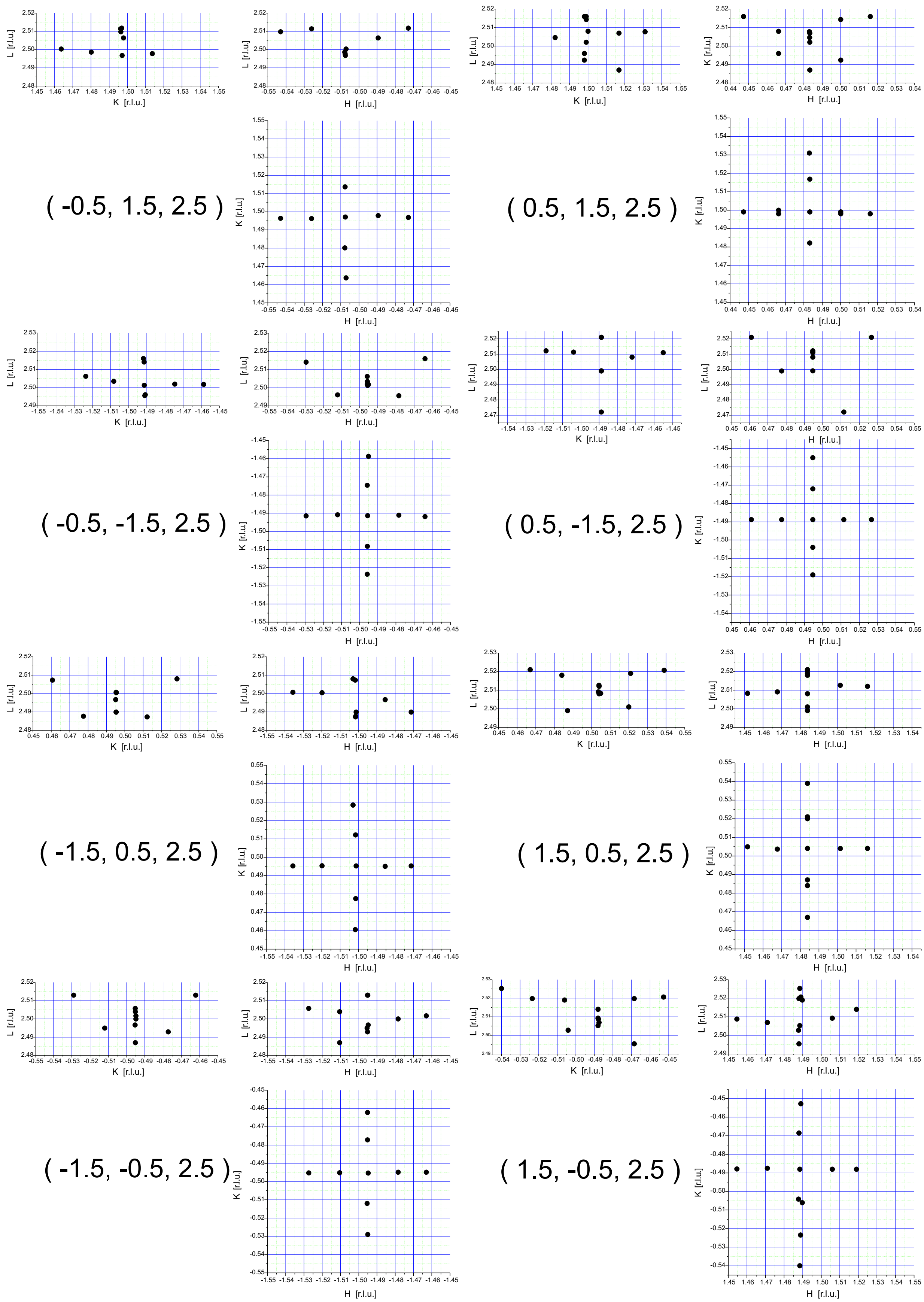


Abbildung E.7: Gefundene Peaks von einer Reihe „äquivalenter“ Überstrukturreflexe.

Anhang F

Filmübersicht

Eine Zusammenstellung aller untersuchten Proben wird in Tabelle F.1 gegeben, da in den verschiedenen Veröffentlichungen unterschiedliche, zum Teile falsche Bezeichnungen für die gleichen Proben zu finden sind. Für alle Proben sind in Tabelle F.1 die in der jeweiligen Veröffentlichung bzw. Arbeit angegebenen Namen, Zusammensetzungen und Dicken aufgelistet, sofern entsprechende Proben verwendet wurden.

Filmname	Zusammensetzung	nominelle Dicke [nm]	Dicke (XRD) [nm]	Razavi et al. Zusammensetzung	Dicke [nm]	Lebedev et al. Zusammensetzung	Dicke [nm]	Vigliante et. al. Zusammensetzung	Dicke [nm]	Wang et. al. Zusammensetzung	Dicke [nm]
LSM_F18	$La_{0.90}Sr_{0.10}MnO_3$	330	?	$La_{0.90}Sr_{0.10}MnO_3$	195	-	-	$La_{0.90}Sr_{0.10}MnO_3$	330	-	-
LSM_F19	$La_{0.90}Sr_{0.10}MnO_3$	40	23	$La_{0.90}Sr_{0.10}MnO_3$	26	-	-	-	-	-	-
LSM_F3	$La_{0.88}Sr_{0.10}MnO_3$	250	?	$La_{0.88}Sr_{0.10}MnO_3$	240	$La_{0.90}Sr_{0.10}MnO_3$	220	-	-	$La_{0.88}Sr_{0.10}MnO_3$	250
LSM_F4	$La_{0.88}Sr_{0.10}MnO_3$	75	87	-	-	-	-	$La_{0.90}Sr_{0.10}MnO_3$	75	$La_{0.88}Sr_{0.10}MnO_3$	75
LSM_F5	$La_{0.88}Sr_{0.10}MnO_3$	50	54	-	-	$La_{0.90}Sr_{0.10}MnO_3$	50	$La_{0.90}Sr_{0.10}MnO_3$	50	$La_{0.88}Sr_{0.10}MnO_3$	50
LSM_F6	$La_{0.88}Sr_{0.10}MnO_3$	25	26	-	-	-	-	$La_{0.90}Sr_{0.10}MnO_3$	25	$La_{0.88}Sr_{0.10}MnO_3$	25
LSM_F7	$La_{0.88}Sr_{0.10}MnO_3$	10	12	$La_{0.88}Sr_{0.10}MnO_3$	10	$La_{0.90}Sr_{0.10}MnO_3$	9	$La_{0.90}Sr_{0.10}MnO_3$	10	$La_{0.88}Sr_{0.10}MnO_3$	10
C4_LSM1	$La_{7/8}Sr_{1/8}MnO_3$	360	?	-	-	-	-	-	-	-	-
C4_LSM2	$La_{7/8}Sr_{1/8}MnO_3$	150	128	-	-	-	-	-	-	-	-
C4_LSM3	$La_{7/8}Sr_{1/8}MnO_3$	100	98	-	-	-	-	-	-	-	-
C4_LSM4	$La_{7/8}Sr_{1/8}MnO_3$	100	110	-	-	-	-	-	-	-	-
C4_LSM5	$La_{7/8}Sr_{1/8}MnO_3$	50	49	-	-	-	-	-	-	-	-
C4_LSM6	$La_{7/8}Sr_{1/8}MnO_3$	10	16	-	-	-	-	-	-	-	-
?		?	-	$La_{0.88}Sr_{0.10}MnO_3$	62	-	-	-	-	-	-
?		?	-	-	-	$La_{0.90}Sr_{0.10}MnO_3$	100	-	-	-	-

Tabelle F.1: Überblick über die bei den Veröffentlichungen unterschiedlich angegebenen Zusammensetzungen und Dicken der untersuchten Manganitfilme.

Abbildungsverzeichnis

Tabellenverzeichnis

Literaturverzeichnis

[1] C. W. Searle and S. T. Wang, Canadian Journal of Physics **47**, 2023 (1969).

[2] C. Zener, *Interaction between the d-Shells in the Transition Metals. II. Ferromagnetic Compounds of Manganese with Perovskite Structure*, Physical Review **82**, 403–405 (1951).

[3] K. Kubo and O. Ohata, *A Quantum-Theory of Double-Exchange. I*, J. Phys. Soc. Jpn **33**, 21–32 (1972).

[4] P. W. Anderson and H. Hasegawa, *Considerations on Double Exchange*, Physical Review **100**, 675–681 (1955).

[5] P.-G. de Gennes, *Effects of Double Exchange in Magnetic Crystals*, Physical Review **118**, 141–154 (1960).

[6] Y. Tokura, A. Urushibara, Y. Moritomo, T. Arima, A. Asamitsu, G. Kido, and N. Furukawa, *Giant Magnetotransport Phenomena in Filling-Controlled Kondo Lattice System:* $La_{1-x}Sr_xMnO_3$, Journal of the Physical Society of Japan **63**, 3931–3935 (1994).

[7] A. Asamitsu, Y. Moritomo, Y. Tomioka, T. Arima, and Y. Tokura, *A structural phase transition induced by an external magnetic field*, Nature **373**,(2) 407–409 (1995).

[8] A. J. Millis, P. B. Littlewood, and B. I. Shraiman, *Double exchange alone does not explain the resistivity of* $\mathrm{La_{1-x}Sr_xMnO_3}$, Physical Review Letters **74**,(25) 5144–5147 (1995).

[9] A. J. Millis, T. Darling, and A. Migliori, *Quantifying strain dependence in „colossal“magnetoresistance manganites*, Journal of Applied Physics **83**,(3) 1588–1591 (1998).

[10] F. S. Razavi, G. Gross, H.-U. Habermeier, O. I. Lebedev, S. Amelinckx, G. van Tendeloo, and A. Vigliante, *Epitaxial strain induced metal insulator transition in* $\mathrm{La_{0.9}Sr_{0.1}MnO_3}$ *and* $\mathrm{La_{0.88}Sr_{0.1}MnO_3}$ *thin films*, Applied Physics Letters **76**,(2) 155–157 (2000).

[11] J. Geck, P. Wochner, D. Bruns, B. Büchner, U. Gebhardt, S. Kiele, P. Reutler, and A. Revcolevschi, *Rearrangement of the orbital-ordered state at the metal-insulator transition of* $La_{7/8}Sr_{1/8}MnO_3$, Physical Review B **69**,(10) 104413 (2004).

[12] P. Kameli, H. Salamati, G.V. Sudhakar Rao, and F.S. Razavi, *The effect of La deficienc on structure and magnetic properties of* $La_{0.9-x}Sr_{0.1}MnO_3$, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **283**, 305–309 (2004).

[13] A. Urushibara, Y. Moritomo, T. Arima, A. Asamitsu, G. Kido, and Y. Tokura, *Insulator-metal transition and giant magnetoresistance in* $\mathrm{La_{1-x}Sr_xMnO_3}$, Physical Review B **51**,(20) 14103–14109 (1995).

[14] A. Heidemann and H. Wettengel, *Die Messung der Gitterparameteränderung von* $SrTiO_3$, Zeitschrift für Physik **258**, 429–438 (1973).

[15] A. M. Glazer, *Simple ways of determining perovskite structures*, Acta Crystallographica A **31**, 756–762 (1975).

[16] M. Dechamps, A. M. de Leon Guevara, L. Pinsard, and A. Revcolevschi, *Twinned microstructure of* $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ *solid solutions*, Philosophical Magazin A **80**,(1) 119–127 (2000).

[17] S. Pflanz and W. Moritz, *The Domain Matrix Method: a New Calculation Scheme for Diffraction Profiles*, Acta Crystallographica A **48**, 716 (1992).

[18] J. Geck, P. Wochner, S. Kiele, R. Klingeler, P. Reutler, A. Revcolevschi, and B. Büchner, *Orbital Polaron Lattice Formation in Lightly Doped* $La_{1-x}Sr_xMnO_3$, Physical Review Letters **95**, 236401 (2005).

[19] *Leitfähigkeitsmessungen von F. Razavi,* persönliche Mitteilung durch H.-U. Habermeier (2003).

[20] Z.-H. Wang, H. Kronmüller, O. I. Lebedev, G. M. Gross, F. S. Razavi, H.-U. Habermeier, and B. G. Shen, *Phase transition and magnetic anisotropy of* $\mathrm{(La,Sr)MnO_3}$ *thin films*, Physical Review B **65**,(5) 054411 (2002).

[21] A. Abrikosov, *Fundamentals of the theory of metals*, North-Holland, Amsterdam (1988).

[22] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Possible High-TC Superconductivity in the Ba-La-Cu-O System*, Zeitschrift für Physik B - Condensed Matter **64**, 189–193 (1986).

[23] O. I. Lebedev, G. van Tendeloo, S. Amelinckx, F. Razavi, and H.-U. Habermeier, *Periodic microtwinning as a possible mechanism for the accommodation of the epitaxial film-substrate mismatch in the* $\mathrm{La_{1-x}Sr_xMnO_3/SrTiO_3}$ *system*, Philosophical Magazine A **81**,(4) 797–824 (2001).

[24] A. Vigliante, U. Gebhardt, A. Rühm, P. Wochner, F. S. Razavi, and H.-U. Habermeier, *Coupling between lattice distortions and magnetism in* $\mathrm{La_{0.9}Sr_{0.1}MnO_3}$ *thin films*, Europhysics Letter **54**,(5) 619–625 (2001).

[25] Y. Tokura, *Orbital Physics in Transition-Metal Oxides*, Science **288**, 462–467 (2000).

[26] K. I. Kugel and D. I. Khomskii, *The Jahn-Teller effect and magnetism: transition metal compounds*, Sov. Phys. Usp. **25**,(4) 231–254 (1982).

[27] J. Geck, *Spins, Charges and Orbitals in Perovskite Manganites: Resonant and Hard X-Ray Scattering Studies*, PhD thesis RWTH Aachen (2004).

[28] M. Benfatto, Y. Joli, and R. Natoli, *Critical Reexamination of the Experimental Evidence of Orbital Ordering in* $LaMnO_3$ *and* $La_{0.5}Sr_{1.5}MnO_4$, Physical Review Letters **83**, 636–639 (1999).

[29] Y. Murakami, J. P. Hill, D. Gibbs, M. Blume, I. Koyama, M. Tanaka, H. Kawata, T. Arima, Y. Tokura, K. Hirota, and Y. Endoh, *Resonant x-ray scattering from orbital ordering in* $\mathrm{LaMnO_3}$, Physical Review Letters **81**,(3) 582–585 (1998).

[30] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, *Metal-insulator transitions*, Reviews of Modern Physics **70**,(4) 1039–1263 (1998).

[31] N. F. Mott, *Metal-insulator Transitions*, Taylor and Francis London/Philadelphia (1990).

[32] P. W. Anderson, *New Approach to the Theory of Superexchange Interactions*, Physical Review **115**, 2–13 (1959).

[33] J. Hubbard, *Electron Correlations in Narrow Energy Bands*, Proc. R. Soc. London Ser. A **276**, 238–257 (1963).

[34] J. Kanamori, *Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals*, Progress in Theoretical Physics **30**, 275–289 (1963).

[35] J. Zaanen, G. A. Sawatzky, and J. W. Allan, *Band gaps and electronic structure of transition-metal compounds*, Physical Review Letters **55**, 418–421 (1985).

[36] V. J. Emery, *Theory of high-*T_c *superconductivity in oxides*, Physical Review Letters **58**, 2794–2797 (1987).

[37] C. M. Varma, S. Schmitt-Rink, and E. Abrahams, *Charge transfer excitations and superconductivity in „ionic“ metals*, Solid State Communication **62**, 681–685 (1987).

[38] H. A. Kramers, *L'interactions Entre les Atomes Magnetogenes dans un Cristal Paramagnetique*, Physica (Amsterdam) **1**, 182–192 (1934).

[39] P. W. Anderson, Solid State Physics **14**, 99 (1963).

[40] J. J. Goodenough, *Theory of the Role of Covalence in the Perovskite-Type Manganites* $[La, M(II)]\,MnO_3$, Physical Review **100**, 564–573 (1955).

[41] A. J. Millis, *Colossal magnetoresistive oxides (Y. Tokura): 2. Theory of CMR Manganites*, Gordon and Breach Science Publishers, Amsterdam (2000).

[42] E. Müller-Hartmann and E. Dagotto, *Electronic Hamiltonian for transition-metal oxide compounds*, Physical Review B **54**, R6819–R6822 (1996).

[43] L. Sheng, D. Y. Xing, D. N. Sheng, and C. S. Ting, *Theory of Colossal MagnetoResistance in* $R_{1-x}A_xMnO_3$, Physical Review Letters **79**, 1710–1713 (1997).

[44] I. O. Troyanchuk, D. A. Efimov, D. D. Khalyavin, N. V. Pushkarev, and R. Shimchak, *Magnetic ordering and magnetoresistive effect in* $La_{1-x}Sr_x(Mn_{1-y}Me_y)O_3$ *perovskites (Me = Nb, Mg)*, Physics of the Solid State **42**,(1) 84–88 (2000).

[45] I. O. Troyanchuk, O. S. Mantytskaya, A. N. Chobot, and H. Szymaczak, *Transition from antiferromagnetic to ferromagnetic state of systems* $LaMnO_{3+\lambda}$ *and* $La_{1-x}Sr_x(Mn_{1-\frac{x}{2}}Nb_{\frac{x}{2}})O_3$, Journal of Experimental and Theoretical Physics **95**,(2) 300–307 (2002).

[46] H. Kawano, R. Kajimoto, M. Kobuta, and H. Yoshizawa, *Ferromagnitism-induced reentrant structural transition and phase diagram of the lightly doped insulator* $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ *(*$x \leq 0.17$*)*, Physical Review B **53**,(22) R14709–R14712 (1996).

[47] G. Allodi, R. de Renzi, F. Licci, and M. W. Pieper, *Electronic phase separation in lanthanum manganites: Evidence from* ^{55}*Mn NMR*, Physical Review B **56**, 6036–6046 (1997).

[48] Y. Tokura, *Colossal Magnetoresistive Oxides:*, Gordon and Breach Science Publisher: Advances in Condensed Matter Science (2000).

[49] H. Moudden, *private Mitteilung (1999)*.

[50] L. Pinsard, J. Rodriguez-Carcajal, and A. Revcolevschi, *Structural phase diagram of* $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ *for low Sr doping*, Journal of Alloys and Compounds **262–263**, 152–156 (1997).

[51] J. Rodriguez-Carvajal, M. Hennion, F. Moussa, A. H. Moudden, L. Pinsard, and A. Revcolevschi, *Neutron-diffraction study of the Jahn-Teller transition in stoichiometric* $LaMnO_3$, Physical Review B **57**, R3189–R3192 (1998).

[52] D. E. Cox, T. Iglesias, E. Moshopoulou, K. Hirota, K. Takahashi, and Y. Endoh, *Vertical boundary at x = 0.11 in the structural phase diagram of the* $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ *system (*$0.08 \leq x \leq 0.125$*)*, Physical Review B **64**,(2) 024431 (2001).

[53] A. Asamitsu, Y. Moritomo, R. Kumai, Y. Tomioka, and Y. Tokura, *Magnetostructural phase transitions in* $La_{1-x}Sr_xMn_3$ *with controlled carrier density*, Physical Review B **54**, 1716–1723 (1996).

[54] A. M. Glazer, *The classification of tilted octahedra perovskites*, Acta crystallographica B **28**, 3384–3392 (1972).

[55] P. M. Woodward, *Octahedral tilting in perovskites. I. Geometrical considerations*, Acta Crystallographica B **53**, 32–43 (1997).

[56] P. M. Woodward, *Octahedral tilting in perovskites. II. Structure stabilizing forces*, Acta Crystallographica B **53**, 44–66 (1997).

[57] V. M. Goldschmidt, Naturwissenschaften **14**, 477–485 (1926).

[58] C. A. Randall, A. S. Bhalla, T. R. Shrout, and L. E. Cross, Journal of Material Research **5**, 829–834 (1990).

[59] R. D. Shannon, *Revised Effective Ionic Radii and Systematic Studies of the Interatomic Distances in Halides and Chalcogenides*, Acta Crystallographica A **32**, 751–756 (1976).

[60] A. P. Ramirez, *Colossal magnetoresistance*, Journal of Physics: Condensed Matter **9**, 8171–8199 (1997).

[61] T. Hahn, *International Tables for Crystallography: Volume A Space-Group Symmetry*, Kluwer Academic Publishers (1995).

[62] A. Okazaki and M. Kawaminami, *Lattice constant of strontium titanate at low temperatures*, Material Research Bulletin **8**, 545–550 (1973).

[63] H.-B. Neumann, *Untersuchung des Phasenüberganges von kubischer zu tetragonaler Raumsymmetrie in* $SrTiO_3$ *mit Hilfe hochenergetischer Synchrotronstrahlung*, PhD thesis DESY, HASYLAB Hamburg (19944).

[64] G. Carbone, *Structural and magnetic studies of strained thin films of* $La_{2/3}Ca_{1/3}MnO_3$, PhD thesis , Max-Planck-Institut für Metallforschung, Universität Stuttgart (2004).

[65] S. Pflanz, *Ein- und zweidimensionale Fehlordnung an Oberflächen: Analyse von O/Cu(110), Mn/Ni(100), H/W(100), Ag(110) und Pt(110)-(1x2)/(1x3)/CO(1x1) aus Reflexprofilen*, PhD thesis Ludwig-Maximilians-Universität München (1994).

[66] *Brockhaus Physik*, VEB F. A. Brockhaus Verlag Leipzig (1989).

[67] G. Friedel, *Lecons de Cristallographie*, Paris: Berger-Levrault (1926).

[68] R. W. Cahn, *Twinned crystals*, Advances in Physics **3**,(12) 363–445 (1954).

[69] R. W. Cahn, Acta Metallurgica **1**, 176 (1953).

[70] M. Dechamps, D. Favrot-Colson, and A. Rosova, *Twins and domain structure of YBa-CuO*, Key Engineering Materials **101–102**, 217–236 (1995).

[71] R. P. Scaringe and R. Comes, *Physical Methods of Chemistry,* Sec. Edition, ed. Bryant, W. Rossiter and J. F. Hamilton, Vol.V: Determination of structural features of crystalline and amorphous solids, Wiley (1990).

[72] R. W. James, *The Optical Principles of the Diffraction of X-Rays*, Ox Bow Press, Woodbridge Conneticut (1947).

[73] M. Korekawa, *Theorie der Satellitenreflexe*, Habilitationsschrift, Ludwig-Maximilians-Universität München (1967).

[74] A. Guinier, *X-Ray Diffraction in Crystals, imperfect crystals and amorphous bodies*, Dover Publications, Inc., New York (1994).

[75] H. Jagodzinski, Acta Crystallographica **2**, 201 (1949).

[76] H. Jagodzinski, Acta Crystallographica **2**, 208 (1949).

[77] H. Jagodzinski, Acta Crystallographica **2**, 298 (1949).

[78] S. Fähler and H.-U. Krebs, *Calculations and experiment of material removal and kinetic energy during pulsed laser ablation*, Applied Surface Science **96–98**, 61–65 (1996).

[79] S. Fähler, S. Kahl, M. Weisheit, K. Sturm, and H.-U. Krebs, *The interface of laser deposited Cu/Ag multilayers: evidence of the 'subsurface growth method' during pulsed laser deposition*, Applied Surface Science **154–155**, 419–423 (2000).

[80] *Pulsed Laser Deposition*, www.deas.harvard.edu/matsci/research/mjarsch1.htm (1998).

[81] *Metal-Physics - Pulsed Laser Deposition*, www.ifw-dresden.de/imw/22/pld22.htm (2002).

[82] J. Als-Nielson and D. McMorrow, *Elements of Modern X-Ray Physics*, Wiley, New York (2001).

[83] *Synchrotronstrahlung zur Erforschung kondensierter Materie*, 23. IFF-Ferienkurs (1992).

[84] A. Thompson, D. Attwood, E. Gullikson, M. Howells, K. Kim, J. Kirz, J. Kortright, I. Lindau, P. Pianetta, A. Robinson, J. Scofield, J. Underwood, D. Vaughan, G. Williams, and H. Winick, *X-ray data booklet*, Lawrence Berkeley National Laboratory, CA (2001).

[85] M. Tinkham and R. E. Krieger, *Introduction to Superconductivity*, Pubnet (1980).

[86] W. R. Busing and H. A. Levy, *Angle calculation for 3- and 4- circle x-ray and neutron diffractometers*, Acta Crystallographica **22**, 457–464 (1967).

[87] M. Lohmeier and E. Vlieg, *Angle calculations for a six-circle surface X-ray diffractometer*, Journal of Applied Crystallography **26**, 706–716 (1993).

[88] H.-U. Habermeier, *Persönliche Mitteilung*, (2003).

[89] Certified Scientific Software, *SPEC X-ray Diffraction Software: USER MANUAL and TUTORIALS* volume version 2.7, PO Box 390640, Cambridge, Massachusetts 02139, USA (1999).

[90] *Model MPMS - Magnetic Property Measurement System: Reference Manual*, Quantum Design Inc., San Diego, CA (1990).

[91] M. McElfresh, *Fundamentals of Magnetism and Magnetic Measurements Featuring Quantum Design's Magnetic Property Measurement System*, Quantum Design Inc., San Diego, CA (1994).

[92] K. Al Usta, H. Dosch, and J. Peisl, *Observation of neutron truncation rod scattering*, Zeitschrift für Physik B **79**, 409–414 (1990).

[93] C. Ern, *Wachstum, Struktur und ordnungsverhalten dünner CuAu-Legierungsfilme - Eine röntgenographische Untersuchung*, PhD thesis , Max-Planck-Institut für Metallforschung, Universität Stuttgart (2001).

[94] T. Hahn, *International tables for crystallography: Vol A Space-group symmetry*, Kluwer Academic Publishers Dordrecht, Boston, London (1995).

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei den zahlreichen Personen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben! Sie alle einzeln aufzulisten würde den Rahmen sprengen, ich danke aber insbesondere

• Herrn Prof. Dr. Helmut Dosch für die Möglichkeit, diese interessante und vielseitige Aufgabenstellung in seiner Abteilung in einem internationalen Umfeld und unter exzellenten Bedingungen zu bearbeiten.
• Herrn Prof. Dr. Bernhard Keimer für die freundliche Übernahme des Mitberichts.
• meinen beiden Betreuern Herrn Dr. Peter Wochner und Frau Dr. Assunta Vigliante für die Einführung in die Welt der Röntgenstreuung, die Unterstützung und Ratschläge bei den Experimenten sowie den zahllosen Erklärungen über Manganite.
• Herrn Dr. Jochen Geck, Herrn Dr. Nikolai Kasper, Frau Dr. Gerardina Carbone, Herrn Dipl-Phys. Konstantinos Hatzikyriakidis und Herrn Dr. Markus Hücker für die tatkräftige Hilfe bei den Experimenten am Synchrotron.
• Herrn Dipl.-Phys. Uwe Grüner für die Hilfe bei den SQUID-Messungen.
• Herrn Dr. H.-U. Habermeier und Herrn Prof. Dr. F. Razavi für das Bereitstellen der Proben sowie der Bilder zu den Leitfähigkeitsmessungen.
• Herrn Dr. Oleg Lebedev und Herrn Dr. Zi-Hong Wang für das Bereitstellen der TEM-Bildern und den Magnetisierungskurven.
• Herrn Dr. Alejandro Diaz-Ortiz für das Korrekturlesen meiner englischen Zusammenfassung.
• für die Unterstützung an den Messplätzen der verschiedenen Synchrotron-Strahlungsquellen insbesondere Herrn Dr. John Hill (NSLS, X22A und X22C) sowie Herrn Dr. Oliver Seeck (HASYLAB, W1).
• den Mitarbeitern und Kollegen aus der Arbeitsgruppe Dosch für die freundliche und angenehme Arbeitsatmosphäre und freundschaftliche Aktivitäten außerhalb des Arbeitsalltags.
• meinen Eltern Heinrich und Elisabeth Gebhardt für das Korrekturlesen des Manuskripts und für die Unterstützung in allen Phasen des Studiums und der Promotion.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name	Ulrich Manfred Gebhardt
Geburtsdatum	12. Oktober 1971
Geburtsort	in Heilbronn am Neckar

Schulische Ausbildung

1978–1982	Grundschule Oedheim
1982–1988	Mörike-Progymnasium in Neuenstadt am Kocher
1988–1991	Albert-Schweitzer-Gymnasium in Neckarsulm
Juni 1991	Abitur

Studium

1991–1994	Studium der Physik an der Universität Stuttgart
1994–1995	Studium der Physik am Georgia Institute of Technology in Atlanta, U.S.A.
September 1995	Master of Science in Physics
1995–1998	Studium der Physik an der Universität Stuttgart
7/1997-7/1998	Diplomarbeit am Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart, bei Prof. Dr. H.-D. Carstanjen zum Thema *Ionenstreuung mit Monolagen-Tiefenauflösung*
Juli 1998	Diplom in Physik
seit 4/1999	Anfertigung der vorliegenden Dissertation am Max-Planck-Insititut für Metallforschung, Stuttgart, Abteilung Prof. Dr. H. Dosch