

Prom. Nr. 2791

Paramagnetische Resonanz von  $\text{Fe}^{3+}$   
in  $\text{SrTiO}_3$  Einkristallen

---

Von der

EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN  
HOCHSCHULE IN ZÜRICH

zur Erlangung  
der Würde eines Doktors der  
Naturwissenschaften  
genehmigte

PROMOTIONSARBEIT

vorgelegt von

KARL ALEXANDER MÜLLER

dipl. Phys. ETH

von Chur und Schaffhausen

Referent: Prof. Dr. G. Busch

Korreferent: Prof. Dr. F. Tank

Basel

Buchdruckerei Birkhäuser AG.

1958

# Paramagnetische Resonanz von $\text{Fe}^{3+}$ in $\text{SrTiO}_3$ Einkristallen

von K. Alexander Müller

*Summary.* The paramagnetic resonance spectrum of  $\text{Fe}^{3+}$  has been investigated in single crystals of  $\text{SrTiO}_3$  at 3,2 cm wavelength. The concentration of the ions was about  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . The measurements were made at room temperature and at  $80^\circ \text{ K}$  in function of the orientation of the constant magnetic field to the crystal axes. The variation of the fine structure can be explained using the following spin-Hamiltonian

$$\mathfrak{H} = g\beta SH + \frac{a}{6} \left\{ S_x^4 + S_y^4 + S_z^4 - \frac{1}{5} S(S+1)(3S^2 + 3S - 1) \right\} \\ + D \left\{ S_z^2 - \frac{1}{3}(S^2 + S) \right\}$$

At room temperature, where the  $\text{SrTiO}_3$  is cubic the splitting at zero magnetic field  $|3a|$  is  $(5,95 \pm 0,30) \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$ ,  $D = 0$  and  $g = 2,004 \pm 0,001$ . It follows from the magnitude of  $|3a|$  that the  $\text{Fe}^{3+}$  is situated at  $\text{Ti}^{4+}$  lattice points. We ascribe the small deviation of the line positions from the theoretical values to partial covalent bonding of the Fe with the neighbouring O atoms.

At liquid nitrogen temperature, where the  $\text{SrTiO}_3$  is tetragonal  $|3a|$  is 1,11 times greater and  $|D| = (7,7 \pm 0,3) \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ . At this temperature the lines

$$\pm 5/2 \leftrightarrow \pm 3/2 \text{ and } \pm 3/2 \leftrightarrow \pm 1/2$$

split if the magnetic field is along the [100] direction and not if it is along the [111] direction. This shows, that the  $\text{SrTiO}_3$  single crystal consists of tetragonal domains below the phase change which begins at  $100^\circ \text{ K}$ . A short description of the resonancespectrometer employed is given.

## I. Einleitung

Die Mehrheit der mit paramagnetischer Resonanz im festen Körper untersuchten Kristalle bilden diejenigen Salze, welche Kristallwasser enthalten<sup>1)</sup>. Bei diesen, zum Beispiel den Alaunen, ist meistens das positive paramagnetische Ion oktaedrisch von Wassermolekülen umgeben. Die Symmetrie dieser Anordnung ist jedoch nicht exakt kubisch. Neuerdings ist das Interesse auch auf solche Kristalle, bei welchen das paramagnetische Ion oktaedrisch von Sauerstoff oder Halogenionen umgeben ist<sup>2) 3)</sup>, zum Beispiel  $\text{Mn}^{++}$  in  $\text{MgO}$ ,  $\text{Eu}^{++}$  in  $\text{CaF}_2$ . Die Symmetrie