

Elektronische Struktur und Photoemission von hochkorrelierten intermetallischen seltenen Erdverbindungen

Zuwendungsempfänger: Uni Osnabrück

Projektträger: DESY-HS

Förderkennzeichen: 05 605MPA 0

Förderzeitraum: 01.04.1995 - 30.06.1998

Zuwendung: 119.700DM

Genutzte Großgeräte/MeßplätzeDokumentation

Veröffentlichungen: 5

Konferenzbeiträge: 8

Diplomarbeiten:

Dissertationen:

Habilitationen:

Patente:

Zusammenfassung :

Die Photoelektronenspektroskopie in höchster Energie- und Winkelauflösung ist als experimentelle Methode hervorragend geeignet die elektronische Struktur von kristallinen Festkörpern experimentell zu bestimmen. Hierbei sind neue korrelierte Materialien, zu denen beispielsweise intermetallische Seltene Erdverbindungen aber auch Hochtemperatur Supraleiter gezählt werden dürfen aus grundlagenorientierter Sicht, aber auch im Hinblick auf anwendungsbezogene Fragestellungen, die sich im Zusammenhang mit dem Auftreten von Magnetismus und Supraleitung ergeben, von besonderem Interesse. Die Aufgabenstellung in diesem Teilprojekt definiert sich daher in der quantitativen Interpretation von Photoelektronenspektren, die von experimentell arbeitenden Gruppen des Verbundes in höchster Auflösung gemessen werden. Einen geeigneten theoretischen Rahmen hierfür bietet eine neuentwickelte Theorie der korrelierten Photoemission in Kombination mit schon erprobten Full-Potential Techniken, die es gestattet, strukturbedingte Effekte in angemessener Form zu berücksichtigen.

Vorhabenbedingte Voraussetzungen und Kooperationen:

In der Arbeitsgruppe liegen langjährige Erfahrungen in der quantitativen Berechnung von Photoelektronenspektren einkristalliner Festkörper vor. Beispielsweise stand schon vor Projektbeginn eine temperaturabhängige Theorie der Quasiteilchenphotoemission zur Verfügung, die es gestattet, temperaturabhängige Photoemissionsspektren von ferromagnetischen 3d-Metallen zu berechnen. Auch eine spinpolarisierte Einstufentheorie, die ebenfalls in der Arbeitsgruppe entwickelt wurde, konnte schon mit dem Beginn dieses Teilprojektes zum Einsatz kommen. Die Erweiterung der aufgeführten Formalismen auf den Fall eines raumfüllenden Kristallpotentials hat schließlich während des Projektzeitraums die vollständig quantitative Beschreibung struktureller Effekte garantiert. Als äußerst hilfreich hat sich