

Nachdem in früheren Veröffentlichungen das experimentell sehr gut untersuchte ferromagnetische, kubisch flächenzentrierte (fcc) Nickel mit der Multiband-Gutzwiller-Methode unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung untersucht worden ist, und dabei eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt worden ist, wurde im Rahmen dieser Dissertation die Multiband-Gutzwiller-Methode unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung auf ferromagnetisches, kubisch raumzentriertes (bcc) Nickel angewendet.

Da bcc Nickel bisher experimentell noch nicht ausreichend untersucht worden ist, sind einige der erhaltenen Resultate Voraussagen, die experimentell verifiziert werden können. Dies gilt für Details der Bandstruktur, die sich von der ebenfalls berechneten Bandstruktur in Dichtefunktionaltheorie unterscheiden, für die Topologie des Fermikörpers, der durch den Einfluss der Spin-Bahn-Kopplung verändert wird, und den orbitalen Anteil des magnetischen Momentes, der durch die Spin-Bahn-Kopplung induziert wird.

Schlagworte:

Multiband-Hubbard-Modell; Multiband-Gutzwiller; Dichtefunktionaltheorie; Korrelierte Elektronen; Übergangsmetalle; bcc Nickel; Ferromagnetismus; Spin-Bahn-Kopplung; Fermikörper; Bandstruktur; Energiebänder; Orbitales Moment; magnetische Anisotropie