

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
I	Theorie zur Berechnung elektronischer Strukturen	7
2	Die Dichtefunktionaltheorie	9
2.1	Die Grundzüge der Dichtefunktionaltheorie	9
2.2	Spinpolarisierung in der DFT	12
2.3	Die Lokale Dichtenäherung	15
2.4	Die Generalisierte Gradientennäherung	17
3	Das NCFP ASW Verfahren	21
3.1	Der Hamiltonoperator	22
3.1.1	Der nichtrelativistische Hamiltonoperator	22
3.1.2	Die skalarrelativistische Näherung	23
3.1.3	Die Spin-Bahn Kopplung	24
3.1.4	Die orbitale Polarisierung	25
3.1.5	Die volle Potentialmatrix	25
3.1.6	Der vollrelativistische Hamiltonoperator	26
3.2	Die ASW Basisfunktionen	27
3.3	Die Säkularmatrix	32
3.4	Die Dichtematrix	36
3.5	Die Potentialmatrix	40
3.5.1	Das Hartree Potential	40
3.5.2	Das Austausch-Korrelations Potential	46
3.6	Die Gesamtenergie	48
3.7	Der Selbstkonsistenzzyklus	54
4	Symmetrien in Festkörpern	57
4.1	Symmetrieoperationen in Festkörpern	58
4.2	Wirkung der Symmetrieoperationen	61
4.3	Symmetrien des Hamiltonoperators	66
4.4	Symmetrien von Spinspiralen	69

II	Anwendungen des NCFP ASW Verfahrens	73
5	δ-Plutonium	75
5.1	Symmetrien des Systems und Details der Rechnungen	76
5.2	Magnetische Struktur	78
5.3	Achse der leichten Magnetisierung	83
5.4	Intraatomare Magnetisierung	84
5.5	Dichte und Potentialmatrix	86
5.6	Zusammenfassung und Diskussion	89
6	Eisen	91
6.1	Symmetrien und Details der Rechnungen	93
6.2	Magnetische Phasen in kubischem Eisen	95
6.3	Spinspiralen in γ -Eisen	97
6.3.1	Intraatomare Magnetisierung in Spinspiralen	101
6.3.2	Der Spiralzustand bei $\mathbf{q} = (0.15, 0, 1)$	104
6.4	Hexagonales Eisen	106
6.5	Zusammenfassung der Ergebnisse	108
7	Uran Pniktide	109
7.1	Symmetrien der Systeme	112
7.2	Details der Rechnungen	116
7.3	Magnetische Momente	117
7.4	Magnetokristalline Anisotropie	119
7.5	Der nichtkollineare Grundzustand	123
7.6	Zusammenfassung	125
8	Uran Monopniktide	127
8.1	Symmetrien der Multi- κ Strukturen	129
8.2	Die magnetischen Multi- κ Zustände	131
8.3	Fermiflächen in USb	134
8.4	Diskussion der Ergebnisse in UX	136
9	Zusammenfassung und Ausblick	137
A	Die Austausch-Korrelations Potentialmatrix	141
B	Der Gesamtenergieterm	143
C	E_{xc} für nichtkollineare Systeme	145
D	Gradient in Kugelkoordinaten	149
E	Die Transformationsmatrix	153

INHALTSVERZEICHNIS

III

F Integral über die Hilfsladungsdichte

155

G Lösung des Integrals aus (3.94)

157

Literaturverzeichnis

159