

Zusammenfassung

Rainer Lübbers:

"Magnetism and Lattice Dynamics under High Pressure Studied by Nuclear Resonant Scattering of Synchrotron Radiation."

Das Thema dieser Arbeit sind zwei neue Methoden der kernresonanten Streuung von Synchrotronstrahlung zur Untersuchung von Magnetismus und Gitterdynamik unter hohem Druck. Zu diesem Zweck wurde eine neue Generation von Diamantstempelzellen entwickelt, abgestimmt auf die besonderen Eigenschaften der (i) Kernvorwärtsstreuung (engl. nuclear forward scattering, NFS), als Analogon zur Mössbauerspektroskopie und der (ii) inelastischen Kernstreuung (engl. nuclear inelastic scattering, NIS), einer neuen Methode zur Bestimmung der Phononenzustandsdichte in Festkörpern.

(i) Die NFS-Experimente wurden an magnetischen Laves-Phasen der Zusammensetzung RFe_2 ($R = Y, Gd, Sc$) bis zu Drücken von 1 Mbar (= 100 GPa) durchgeführt. Dieser Druckbereich erlaubt die Untersuchung des Eisenmagnetismus in diesen Modellsubstanzen mit einer großen Variation der interatomaren Fe-Fe Abstände. Die unterschiedliche Variation von Austauschwechselwirkung und Fe Bandmoment spiegelt sich wieder in einer systematischen Veränderung des magnetischen Ordnungstyps von ferromagnetischem Verhalten mit stark lokalisierten Fe-Momenten über Antiferromagnetismus mit itineranten Eisenmomenten bis zu einem unmagnetischen Zustand. Diese Abhängigkeit wird auch in reinem Eisen (γ -Fe) bei Variation des Gitterparameters beobachtet. Aus vergleichenden Messungen an $ScFe_2$ schließen wir, dass der antiferromagnetische Zustand nur nach einem strukturellen Phasenübergang von der kubischen C15 in die hexagonale C14 Struktur stattfindet.

Weiterhin wird gezeigt, dass im Druckexperiment die Vielfalt der magnetischen Zustände in der Substanzklasse RFe_2 mit unmagnetischem R in einer einzigen Modellsubstanz, YFe_2 , realisiert wird. Ein Vergleich mit $GdFe_2$, mit großem Gd 4f Moment, weist auf einen starken Anstieg der Wechselwirkung zwischen Fe und Gd Untergitter hin, was zu einer Stabilisierung des Eisenmoments bei hohem Druck führt.

(ii) Der zweite Teil der Arbeit beschreibt die erste Anwendung von NIS für die Untersuchung von Phononen in Eisen unter hohem Druck. Mit einer neuentwickelten Hochdrucktechnik, die auf einer Be-Dichtung für ausreichende Transmission von niederenergetischer Fe $K_{\alpha,\beta}$ Strahlung basiert, konnte erstmals die Phononenzustandsdichte in der ϵ -Phase von Eisen experimentell bestimmt werden. Da ϵ -Fe der Hauptbestandteil des inneren Erdkerns ist, haben die Ergebnisse geophysikalische Relevanz. Die NIS-Untersuchung liefert Werte für die Schallgeschwindigkeiten unter Druck sowie den Beitrag der Gitterschwingungen zu verschiedenen thermodynamischen Größen wie z.B. der Helmholtzenergie, der spezifischen Wärme und der Entropie. Die Ergebnisse sind wichtig für Tests theoretischer ab initio Berechnungen, die die Physik des Erdkerns beschreiben.