

## Kurzfassung

Diese Dissertation beschäftigt sich mit der besetzten und unbesetzten elektronischen Struktur von Lanthanidmaterialien.

Mit oberflächenempfindlicher elektronenangeregter Röntgenemissionsspektroskopie (XES) konnte erstmals, getrennt voneinander, die partielle Oberflächen- und Volumenzustandsdichte für die Metalle Lanthan, Lutetium und Samarium experimentell bestimmt werden. Bei den untersuchten Lanthanidmetallen stimmt die experimentelle Volumenzustandsdichte gut mit den von *Danzenbacher* [Dan98] berechneten Zustandsdichten überein. Im Vergleich von Theorie und Experiment wurde unsere Erwartung bestätigt, daß s-artige  $O_3$ -Emission im Verhältnis von 3:1 gegenüber d-artiger  $O_3$ -Röntgenemission favorisiert wird. Ein Oberflächenzustand - bekannt aus Photoemissionsmessungen [WeK95] - wurde in keinem XE-Spektrum beobachtet. Der  $d_{z^2}$ -artige Oberflächenzustand wird nach einer theoretischen Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit um mehr als eine Größenordnung gegenüber s-artigen Emissionen aus dem Valenzband unterdrückt. Im Fall von Samarium konnten Satellitenemissionen im XE-Spektrum identifiziert werden. Dabei waren Photoemissionsmessungen zur Ermittlung der Bindungsenergie des  $5p^{-1}$ -Zustands sowie eine erstmalige Bestimmung der  $5p$ -Replica-Verschiebung notwendig. Als Voraussetzung für die Bestimmung der Zustandsdichte von Samarium wurde ein Modell zur Erzeugung von IPE-Untergrundstrahlung in XE entwickelt. Diese IPE-Emission wird durch Auger-Elektronen verursacht, die bei strahlungslosen Relaxationsprozessen der  $5p$ -Rumpfniveaulöcher entstehen. Die Abwesenheit der  $O_2$ -Röntgenemission in allen drei Lanthanidmetallen konnte mit intensiven Auger-Zerfällen des  $5p_{1/2}$ -Loches erklärt werden. Insgesamt wurden mit der vorliegenden Arbeit die Grundlagen für weitere oberflächenempfindliche XE-Messungen geschaffen, z.B. an den 3d-Übergangsmetallen.

Im zweiten Teil dieser Arbeit wurde die besetzte und unbesetzte elektronische Struktur der Lanthan-Chalkogenide LaS, LaSe und LaTe erstmals experimentell bestimmt. Photoemissionsspektren zeigen gute Übereinstimmung mit der Theorie [SMP92]. Insbesondere konnte dabei die Verschiebung des  $5p^{-1}$ -Zustands in LaS und LaSe gegenüber Lanthanmetall ermittelt werden. Durch Messungen der  $O_3$ -Röntgenemission an LaS, LaSe und LaTe konnte der Transfer der s-artigen Valenzbandelektronen vom Lanthanatom zum Chalkogenatom experimentell nachgewiesen werden. Die Bindungsenergie des  $4f^1$ -Zustands am Lanthanatom der Lanthan-Chalkogenide wurde bestimmt; sie zeigt sehr gute Übereinstimmung mit in einem thermochemischen Modell [JoM87] berechneten Werten. Die Oberflächen-Rumpfniveau-Verschiebung der Lanthan-Chalkogenide ist etwa 25 % kleiner als bei Lanthanmetall. Außerdem wird ein theoretisches Modell beschrieben, das größere Bindungsenergie-Verschiebungen der Rumpfniveaus in der Photoemission und kleinere Verschiebungen in der inversen Photoemission beim Übergang von Lanthanmetall zur Lanthan-Chalkogenid-Verbindung erklärt. Durch die  $4f^1$ -IPE-Ergebnisse dieser Arbeit konnte eine korrekte Zuordnung von Übergängen in kontrovers diskutierten MOKE-Messungen [PSH97,SWH99] vorgenommen werden.