

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	5
1 Mikroskopische Beschreibung gemischtvalenter Manganoxide	9
1.1 Die Kristallstruktur	9
1.2 Die kubische Punktsymmetriegruppe O_h	10
1.3 Die lokale elektronische Struktur	12
1.3.1 Das kubische Kristallfeld	13
1.3.2 Coulomb-Wechselwirkung und Racah-Parameter	14
1.3.3 Der ionische Grundzustand	16
1.4 Mikroskopischer elektronischer Transport	17
1.5 Doppelaustausch	18
1.5.1 Das quantenmechanische Modell auf dem Gitter	18
1.5.2 Molekularfeldnäherungen	22
1.5.3 Der Grenzfall klassischer Spins	23
1.5.4 Numerische Beispiele	24
1.6 Elektronische Wechselwirkungen zweiter Ordnung	26
1.6.1 Die Matrixelemente von H_t	26
1.6.2 Der elektronische Hamilton-Operator	28
1.7 Elektron-Phonon-Wechselwirkung	31
2 Einfluß des Gitters auf Spin- und Orbital-Korrelationen	35
2.1 Modellsystem und Numerik	35
2.2 Undotierte Manganate	36
2.3 Schwache Dotierung	42
2.4 Mittlere Dotierung	45
2.5 Diskussion	47
3 Zwei-Phasen-Modelle für den Metall-Isolator-Übergang	49
3.1 Motivation	49
3.2 Zwei-Phasen-Modell	50
3.2.1 Die delokalisierte Zener-Phase	50
3.2.2 Die lokalisierte polaronische Phase	52
3.2.3 Selbstkonsistenz-Gleichungen	53
3.3 Numerische Ergebnisse	54
3.4 Alternative Modelle koexistierender Phasen	58
3.4.1 Phasen unterschiedlicher Ladung	59

3.4.2 Superparamagnetismus	61
3.5 Diskussion	65
4 Unordnung und Lokalisierung	67
4.1 Quanten-Perkolation	67
4.2 Unordnung im klassischen Doppelaustausch-Modell	71
4.3 Optische Leitfähigkeiten	72
4.4 Diskussion	74
Zusammenfassung	77
A Kopplungskoeffizienten der kubischen Gruppe <i>O</i>	81
B Doppelaustausch zwischen zwei Gitterplätzen	85
C Optimierung phononischer Basiszustände mit Dichtematrix-Verfahren	89
C.1 Grundlagen von Dichtematrix-Methoden	89
C.2 Optimale phononische Basiszustände	90
C.3 Konvergenzverhalten	93
Literaturverzeichnis	101