

# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>1 Mikroskopische Beschreibung gemischtvalenter Manganoxide</b>	<b>9</b>
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
<b>2 Einfluß des Gitters auf Spin- und Orbital-Korrelationen</b>	<b>35</b>
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
<b>3 Zwei-Phasen-Modelle für den Metall-Isolator-Übergang</b>	<b>49</b>
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
<b>4</b>	<b>Unordnung und Lokalisierung</b>	<b>67</b>
4.1	Quanten-Perkolation . . . . .	67
4.2	Unordnung im klassischen Doppelaustausch-Modell . . . . .	71
4.3	Optische Leitfähigkeiten . . . . .	72
4.4	Diskussion . . . . .	74
	<b>Zusammenfassung</b>	<b>77</b>
<b>A</b>	<b>Kopplungskoeffizienten der kubischen Gruppe <math>O</math></b>	<b>81</b>
<b>B</b>	<b>Doppelaustausch zwischen zwei Gitterplätzen</b>	<b>85</b>
<b>C</b>	<b>Optimierung phononischer Basiszustände mit Dichtematrix-Verfahren</b>	<b>89</b>
C.1	Grundlagen von Dichtematrix-Methoden . . . . .	89
C.2	Optimale phononische Basiszustände . . . . .	90
C.3	Konvergenzverhalten . . . . .	93
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>101</b>