

Komplexer metallischer Magnetismus stark korrelierter Übergangsmetalloxide

In diesem Projekt soll das mitunter komplexe magnetische Verhalten ausgewählter Mangan- und Rutheniumoxide sein. Das Hauptaugenmerk liegt dabei auf metallischen Verbindungen in der Nähe magnetischer Ordnung. Diese Systeme sind generell starken Korrelationen unterworfen und weisen daher eine subtile Balance zwischen kinetischer Energie und Wechselwirkungsenergie auf. Dies führt wiederum zu ausgeprägten Strukturen in der magnetischen Suszeptibilität und hoher Sensibilität bezüglich äußeren Kontrollparametern (Magnetfeld, Druck, etc.). Unser Anspruch ist eine realistische quantenmechanische Modellierung basierend auf der korrelierten elektronischen Struktur der Manganate/Ruthenate. Neben Dichtefunktionalmethoden werden dabei auch darauf aufbauende explizite Vielteilchentechniken (Quanten-Monte-Carlo-Verfahren, Slave-Boson-Methode) im Rahmen der LDA+DMFT-Methode zum Einsatz kommen. Ziel ist es desweiteren, über die rein lokale Näherung der konventionellen DMFT in der Modellierung hinauszugehen. Zu diesem Zweck sollen sowohl Cluster-Verfahren verwendet als auch k -Abhängigkeiten basierend auf einer allgemeinen Vier-Punkt-Vertex-Darstellung verstärkt eingesetzt werden.