

Komplexer metallischer Magnetismus stark korrelierter Übergangsmetalloxide

In diesem Projekt soll das mitunter komplexe magnetische Verhalten von Übergangsmetalloxiden, insbesondere von ausgewählten Mangan- und Rutheniumoxiden, untersucht werden. 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 äußerer Kontrollparameter (Magnetfeld, Druck, etc.). Neben Dichtefunktionalmethoden kommen dabei darauf aufbauende, explizite Vielteilchentechniken (Quanten-Monte-Carlo-Verfahren, Slave-Boson-Methode) im Rahmen der LDA+DMFT-Methode zum Einsatz. Nachdem wir bereits erfolgreich mit Cluster-Verfahren und k -abhängigen Vier-Punkt-Vertex-Darstellungen die Physik realistischer Materialien untersucht haben, werden wir diese Systeme nun unter dem Gesichtspunkt weiterer magnetischer Kopplungen und dynamischer Eigenschaften betrachten.