

Kooperativer Jahn–Teller Effekt
Orbitale Ordnung und Phasenübergänge

Dissertation
zur Erlangung der Doktorwürde
am Fachbereich Physik
der Freien Universität Berlin

vorgelegt von
Ching-Tarng Liang
aus Sanchung
Taiwan

Berlin 2004

Tag der Disputation: 7. Dez. 2004

1. Gutachter: Prof. Dr. K.-D. Schotte

2. Gutachter: Prof. Dr. K. Hermann

Institut für Theoretische Physik
der Freien Universität Berlin
Arnimallee 14, 14195 Berlin

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
	Literatur	6
2	Der Jahn–Teller–Effekt in Festkörpern	7
2.1	Einleitung	7
2.2	Kollektive Koordinaten	9
2.3	Jahn–Teller–Theorem	11
2.4	Elektronischer e_g Zustand in einem oktaederischen Komplex	14
2.5	Jahn–Teller–Effekt der Triplettzustände in Oktaederumgebung	16
	Literatur	19
3	Lokale Dichte–Näherung LDA	20
3.1	Dichte–Funktional	20
3.2	LDA+ U	23
3.3	Selbstwechselwirkungskorrektur SIC	24
3.4	Andere Dichtefunktionale	26
	Literatur	27
4	Bandstrukturprogramme	29
4.1	Vorbemerkungen	29
4.2	APW– und LAPW– Verfahren	30
4.2.1	LAPW (Linearized Augmented Plane Wave)	31
4.2.2	APW+lo (APW + local orbitals)	32
4.3	LCAO – Linear Combination of Atomic Orbitals	33
	Literatur	34
5	Perovskite	36
5.1	Einleitung	36
5.2	Struktur und Magnetismus von CaRuO_3 und SrRuO_3	38
5.3	Die Struktur von LaTiO_3 und YTiO_3	42
5.4	Die Struktur von KCuF_3	46
5.5	Die Struktur von KCrF_3 , RbCuF_3 und NaCuF_3	49
5.6	Die Struktur von K_2CuF_4	52
5.7	Die Struktur von Rb_2CuF_4 und Cs_2CuF_4	57

5.8 Die Struktur von La_2CuO_4	59
Literatur	61
6 Resultate der Berechnungen	67
6.1 Berechnung der kubischen Struktur des Perowskites	67
6.2 Bandstrukturechnungen für SrRuO_3	69
6.3 Berechnung des YTiO_3 und LaTiO_3 mit APW+lo	77
6.4 Berechnung des KCuF_3 mit APW+lo [WIEN2k]	93
6.5 Berechnung des KCrF_3 mit APW+lo [WIEN2k]	114
6.6 Berechnung des RbCuF_3 mit APW+lo [WIEN2k]	119
6.7 Berechnung des NaCuF_3 mit APW+lo [WIEN2k]	123
6.8 Berechnung des K_2CuF_4 von Eyert und Höck	128
6.8.1 Eigene LSDA-Rechnung zum K_2CuF_4	128
6.8.2 K_2CuF_4 mit LDA+ U	134
6.8.3 Druckabhängigkeit der Struktur und des Magnetismus von K_2CuF_4	144
6.9 Berechnung des Rb_2CuF_4 mit APW+lo [WIEN2k]	150
6.10 Berechnung des Cs_2CuF_4 mit APW+lo [WIEN2k]	154
6.11 Berechnung des La_2CuO_4 mit APW+lo [WIEN2k]	159
Literatur	165
7 Zusammenfassung	169
Anhang	171
1 Unrechnung der Orbitaldichte	171
2 Reale Struktur der Perowskite – GdFeO_3	172
2.a Nur eine Rotation für SrRuO_3	172
2.b Die Raumgruppe Imma und die Perowskite	176
3 Antiferromagnetismus in Perowskiten	179
Danksagung	182
Lebenslauf	183