

Jahn-Teller-Effekt in der V_2O_3 -Struktur

Diplomarbeit

von Wei-Dong Yang

Lehrstuhl für Theoretische Physik II
Universität Augsburg

April 1996

Erstgutachter: Priv.-Doz. Dr. Karl-Heinz Höck

Zweitgutachter: Prof. Dr. Ulrich Eckern

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Struktur von V_2O_3	4
2.1	Hochtemperatur-Phase	4
2.2	Tiefemperatur-Phase	6
2.3	Darstellung der Verschiebung der Sauerstoff-Atome	7
3	Die lokale Verzerrung	11
3.1	Allgemeines	11
3.1.1	Die atomaren d-Orbitale der Übergangsmetalle	11
3.1.2	Oktaedrischen Verzerrung in der Umgebung der d-Orbitale	11
3.1.3	Der Jahn-Teller-Effekt	14
3.1.4	Abweichung von oktaedrischen Verzerrung in der V_2O_3 - Struktur	14
3.2	Der lokale Jahn-Teller-Effekt	16
3.3	Der kooperative Jahn-Teller-Effekt	18
4	Das Modell für zwei Gitterplätze	22
4.1	Das Modell	22
4.2	Das Elektronen-System	23
4.3	Das gekoppelte System	29
4.3.1	Der Hamiltonian	29
4.3.2	Effektiver Hamiltonian	32
4.3.3	Diagonalisierung	36
4.4	Das Bild des Modells	38
5	Zusammenfassung	43
6	Anhang	44
7	Literaturverzeichnis	53