



TRR 80 Seminar

Am Donnerstag, den 7. Februar um 17:15 Uhr

spricht

Prof. Dr. Ole Krogh Andersen

Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart

über das Thema

LDA Wannier orbitals and Hamiltonians for transition-metal compounds

We demonstrate how Wannier orbitals (e.g. LDA-NMTO) provide insights to the structural aspects of the low-energy physical properties of electronically correlated transitionmetal compounds. As examples we consider: High-temperature superconductors [1], the metal-insulator transition in V₂O₃ [2], and the quasi one-dimensional purple bronze LiMo₆O₁₇ [3].

[1] E. Pavarini, I. Dasgupta, T. Saha-Dasgupta, O. Jepsen, and O. K. Andersen, Phys. Rev. Lett. 87, 047003 (2001); P. R. C. Kent, T. Saha-Dasgupta, O. Jepsen, O. K. Andersen, A. Macridin, T. A. Maier, M. Jarrell, and T. C. Schulthess, Phys. Rev. B 78, 035132 (2008); P. Hansmann, Xiaoping Yang, A. Toschi, G. Khaliullin, O. K. Andersen, and K. Held, Phys. Rev. Lett. 103, 016401 (2009)

[2] A.I. Poteryaev, J.M. Tomczak, S. Biermann, A. Georges, A.I. Lichtenstein, A.N. Rubtsov, T. Saha-Dasgupta, and O.K. Andersen, Phys. Rev. B 76, 085127 (2007).

[3] M. Haverkort, Y. Nohara, J.W. Allen, et al. (to be published).

Gäste sind herzlich willkommen!

Der Vortrag findet im HS 3, Physik-Department, TU München in Garching statt.
Videoübertragung nach Augsburg (Seminarraum 403/Physik-Süd, Universität Augsburg).

Gastgeber: PD Dr. Rossitza Pentcheva (LMU München)

www.trr80.de