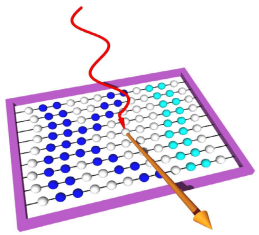
Grenzflächenunordnung

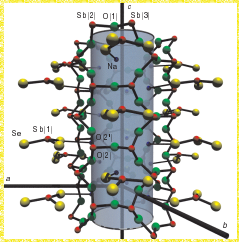
TP4

W. Schattke : Institut für Theoretische Physik und Astrophysik - CAU Kiel

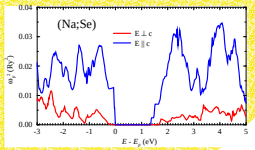


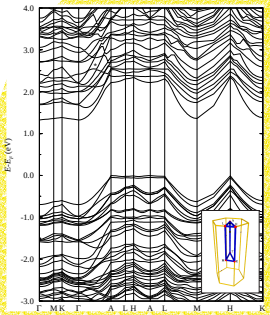
große Einheitszellen

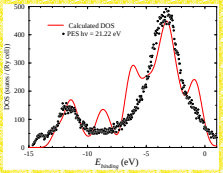
Cetineite Na$_x$Se



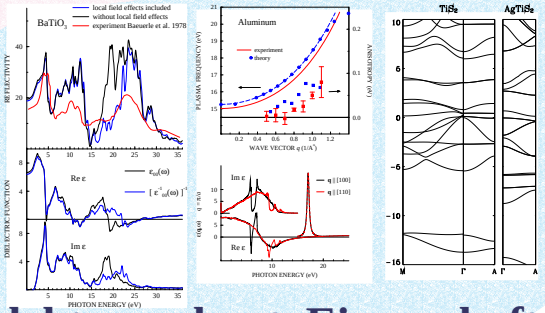
$Na_x[Sb_{12}O_{18}][SbSe_3]_2$



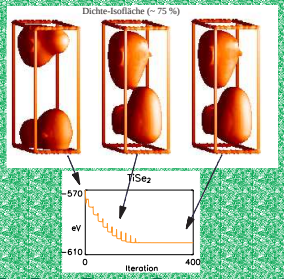




elektr. und opt. Eigenschaften



ab-initio Molekulardynamik



Elektronische Struktur

Optische,elektrische Eigenschaften AG's Bensch,Wepptec

Numerischer Code für Photoemission aus Fehlordnungen

Spektren AG Skibowski

Präparation AG's Bensch,Depmeier,Skibowski

Geometrische Struktur AG's Depmeier,Press,(Hage)

Einzelsysteme

Verfahren für Valenzbänder:

Superzelle mit Pseudopotential EFLAPW LCAO

Inputparameter

Cluster mit Tight-Binding

Fehlordnung (substitutionell, topologisch)

Wellenfkt.algebraisch

Ebene Wellen, Direkter Raum (Multigrid)

Gemittelte Systeme

Coherent Potential (CPA) Concentration Waves (CW) Embedded Cluster (ECM)

Tight-Binding

Interkalation

Wechselwirkungspotentiale

Umordnungsparameter, Phasendiagramm AG Press

Verfahren für Leitungsbänder:

Virtual Crystal (VC) Optisches Potential

Ebene Wellen, Direkter Raum

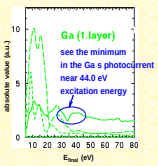
Dynamik,Phasenübergang AG Dichtel

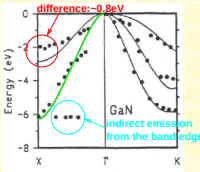
Integration der Matrixelemente Direkter Raum

Gem.Projekt (NSF--DAAD):Standardisierung des Photoemissionscodes für beliebige Photonenenergien (C.Fadley,M.VanHove--WS)

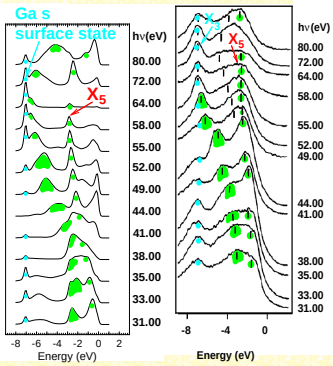
Substanzwahl je nach Aktualität in FG

Photoemission - ARUPS



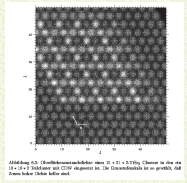


GaN(001)

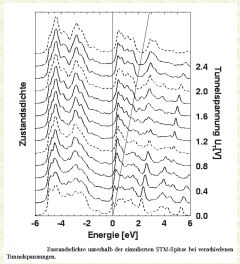


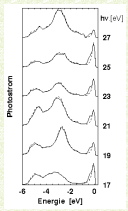
Arbeitsgruppe:

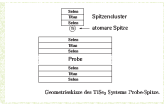
R. Bahnsen
S. Brodersen
A. Kistner
Dr. E. E. Krasovskii
Dr. O. Krasovska
C. Ramirez
E. Rodriguez
D. Schulz
C. Solterbeck
F. Starrost
T. Strasser
O. Tiedje



Cluster







Spezifische Fragen

Welchen Einfluß hat die Nahordnung?
z.B. charakteristische Bindungen bei der Nb-Substitution in $TiSe_2$

Optische Absorption und elektronische Leitfähigkeit?
z.B. chemische Trends bei Substitution und Interkalation? Besonderheiten bei Wachstums-und Reaktionsphasen?

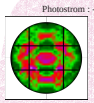
Welche Zustände charakterisieren auftretende Cluster?
z.B. in Oberflächeninseln oder im inneren Reaktionsgemisch?

Welche Reichweite löst Photoemission lateral/vertikal auf?
z.B. ein auf einem Inselbereich quantisierter Zustand ist detektierbar? bilden Impuls-und Energieauflösung die obere Grenze für räumliche Skalen?

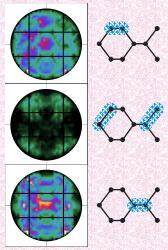
Ist ein ungeordnetes Medium in Spektren spezifisch?
z.B. isolierte Konfigurationen inkohärent gemittelt oder langreichweitige Strukturen? dispersionslose Spektren und Lokalisierung in der Leitfähigkeit?

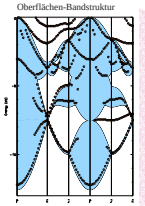
Photoemission - volle Hemisphäre

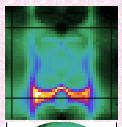
GaAs(110)

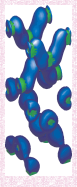


räumliche Herkunft

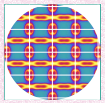


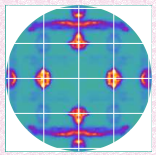






Si(001) 1x1

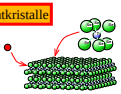




AG Skibowski

Probleme und Ziele

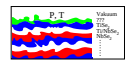
Schichtkristalle



Angelagerte molekulare Aggregate, Interkalierte Eigen- und Fremdatome

Epitaktische Heterostrukturen mit unterschiedlichen Kationen

Dünnfilm- und Misfitschichten



Heterochichten untersch. Symmetrie Fehlgeordnete Heterochichten

Zeit

Bestimmung von Bandstruktur, abgeleiteten Größen und Photoemission für Superzellensysteme

Gemittelte Volumeneigenschaften für substitutionell ungeordnete Kristalle in CPA

Zustandsdichte und Photoemissionsspektren für Einzelcluster

Embedded-Cluster- und Concentration-Wave-Methode für Wechselwirkungspotentiale

Photoemissionsspektren für gemittelte allgemein fehlgeordnete Systeme

Chemische Reaktion, Physikalisches Wachstum und Zweidimensionalität dieser Chalcogenide?