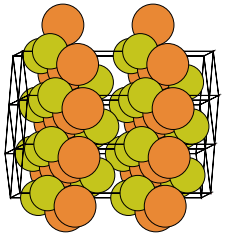
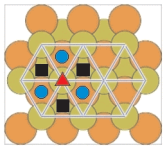
Institut für Theoretische Physik und Astrophysik der CAU Kiel
Abtlg. Theoretische Physik, AG Prof. Schattke: Theoretische Festkörperphysik

Molekulardynamik

Wie bewegt sich ein Lithium-Atom auf der Oberfläche des Schichtkristalls $TiSe_2$?



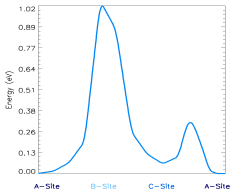
Die Kristallstruktur von $TiSe_2$



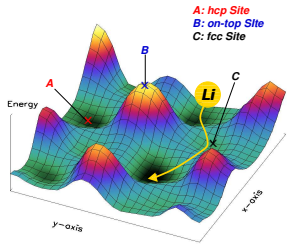
Eine Draufsicht auf die $TiSe_2$ Oberfläche
Eingezeichnet sind die Stellen, an denen sich das Li-Atom bevorzugt aufhalten könnte

Die Gesamtenergie

Diffusionsbarriere für ein Li-Atom auf der $TiSe_2$ Oberfläche



Mögliche Plätze des Lithium-Atoms

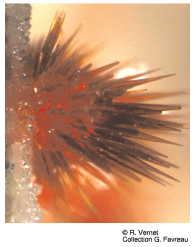


Ergebnisse:

Es gibt zwei mögliche Adsorbtionsplätze
Der energetisch günstigste Diffusionsweg erfolgt über einen Brückenplatz zwischen zwei Se-Atomen an der Oberfläche

Nanoporöse Substanzen

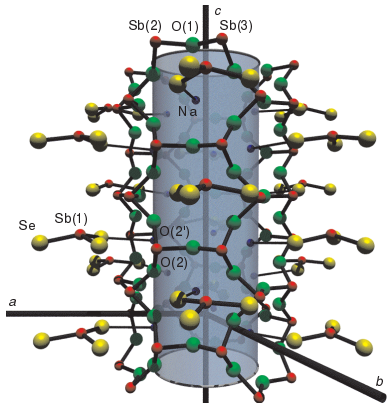
Cetineite Mineral



Neu: Cetineite

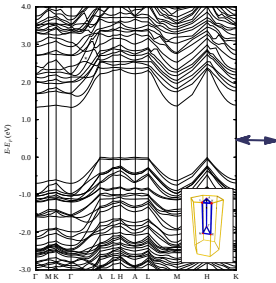
Mögliche Anwendungen:
- Mikroelektronische Sensoren
- Elektrisch kontrollierbare Molekularsiebe + Reinigung von Gasen und Flüssigkeiten + Katalyse
- Photonische Kristalle
- Chemische Herstellung mikroelektronischer Komponenten

Cetineite Na;Se

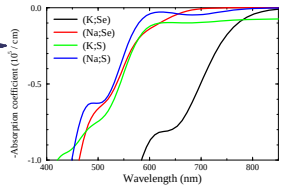


$Na_6[Sb_{12}O_{18}][SbSe_3]_2$

Bestimmung der elektronischen Eigenschaften: Bandstrukturrechnungen

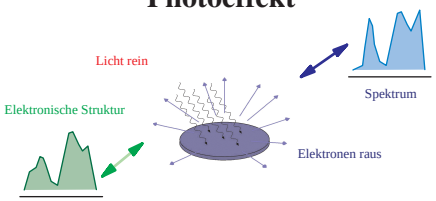


Berechnung der Farbe und Absorption

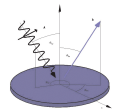


Photoemission

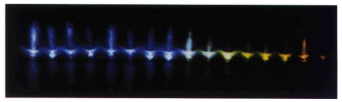
Photoeffekt



Winkelaufgelöste Photoemission



Blaue Leuchtdioden und Galliumnitrid

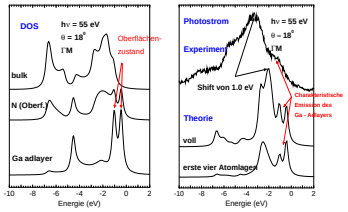


Bestimmung der geometrischen und elektronischen Eigenschaften der GaN Oberfläche durch den Vergleich gemessener Spektren mit gerechneten Photoströmen

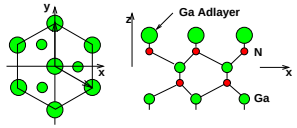
In den letzten Jahren haben Halbleiterlaser und Leuchtdioden in die Beleuchtungstechnik Einzug gehalten. Als rote Bremslichter oder in Ampelanlagen bieten sie den Vorteil einer hohen Leuchtkraft bei gleichzeitig niedrigem Energieverbrauch. Außerdem besitzen sie deutlich längere Lebensdauern als herkömmliche Beleuchtungseinrichtungen. Daneben sind Halbleiterlaser auch aus der Telekommunikation und im Hifi und Computerbereich nicht mehr wegdenkbar.

Jedoch war es lange Zeit nicht möglich, auch den blauen Bereich des sichtbaren Lichtes mit Halbleiterlasern und Leuchtdioden zu realisieren. Dieses ist aber unbedingt notwendig, wenn man z.B. durch Farbmischung weißes Licht herstellen möchte, um hiermit die herkömmliche Glühbirne abzulösen. Darüber hinaus erlauben Halbleiterlaser mit einer kürzeren Wellenlänge auch höhere Datendichten auf Speichermedien wie CD's. Der Markt für blaue Laser und Dioden wird insgesamt mit 20 Mrd.$ im Jahr beziffert.

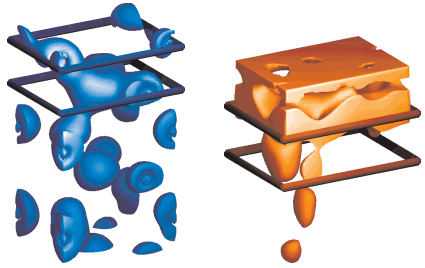
Nichtnormale Emission



Geometrie der GaN(0001) Oberfläche



Anfangs- und Endzustände der Photoemission

Gallium-arsenid

Flächen konstanter Dichte: