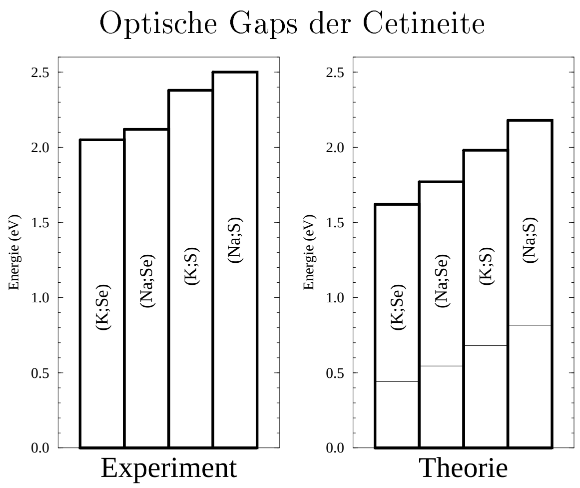
Cetineite: Elektronische und optische Eigenschaften einer neuen Familie nanoporöser Materialien

F. Starrost[1], E. E. Krasovskii[1], W. Schattke[1], X. Wang[2], F. Liebau[2], J. Jockel[3] und U. Simon[3]

[1] Institut für Theoretische Physik und Astrophysik, Universität Kiel, Leibnizstr. 15, 24118 Kiel
[2] Mineralogisch-Petrographisches Institut und Museum, Universität Kiel, Olshausenstr. 40-60, 24118 Kiel
[3] Institut für Anorganische Chemie-FB 8, Universität-GH Essen, Schützenbahn 70, 45127 Essen

Die elektronische Struktur von Kristallen der Cetineit-Familie wird erstmalig *ab initio* berechnet. Cetineite sind nanoporöse Chalkogenoantimonate, $A_6[\mathrm{Sb}_{12}\mathrm{O}_{18}]$ $[\mathrm{Sb}X_3]_2[D_x(\mathrm{H_2O,OH,O})_6]$, X = S, Se, D = Na, Sb, die strukturell den Zeolithen ähnlich sind [1]. Während es sich bei diesen i. allg. um Isolatoren handelt, sind die Cetineite Halbleiter. Die Rechnungen basieren auf der LAPW-Methode, wobei *empty spheres* zur Berücksichtigung von Ladungsdichteminima in Hohlräumen eingesetzt werden.

Aus der nach Atomen und Orbitalen aufgelösten Zustandsdichte ergeben sich Schlüsse auf die Bindungsverhältnisse in den Kristallen. Eine Betrachtung der orbitalen Zusammensetzung von Zuständen, die energetisch das Gap einrahmen, sowie die elektronische Struktur fiktiver Kristalle, die nur aus Untereinheiten der Basis aufgebaut sind, geben Hinweise auf die Ursache der Photoleitfähigkeit und die Mechanismen dieser Leitfähigkeit. Die Berechnung der dielektrischen Funktion liefert einen direkten Zugang zu der Reaktion der Elektronen des Kristalls auf einfallendes Licht. Gemessene und berechnete Abhängigkeit des optischen Gaps von der chemischen Zusammensetzung der Cetineite (A;X) stimmen gut überein.



[1] Liebau, F. und Wang, X.: Z. Kristallogr. Suppl. 13 (1998).