

**Thema 1: Theoretische Atomsondertomographie**

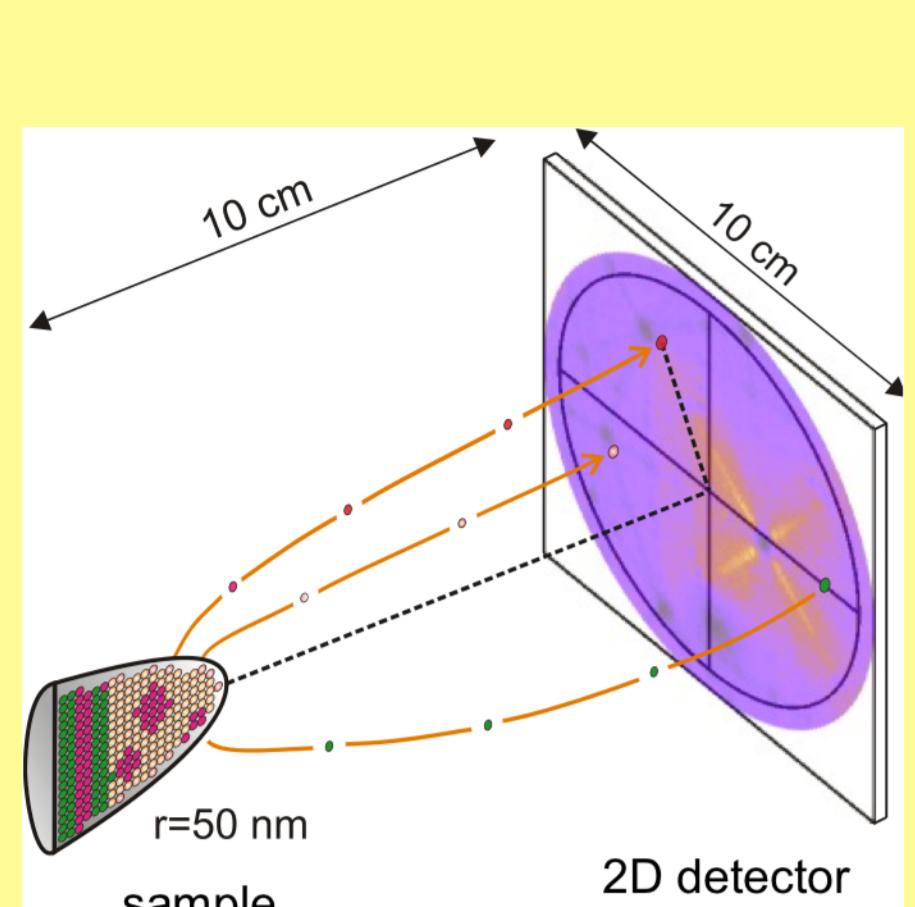


Fig. 1: Prinzip der Atomsonden-Tomographie [Prof. Dr. G. Schmitz, Institut für Materialphysik]

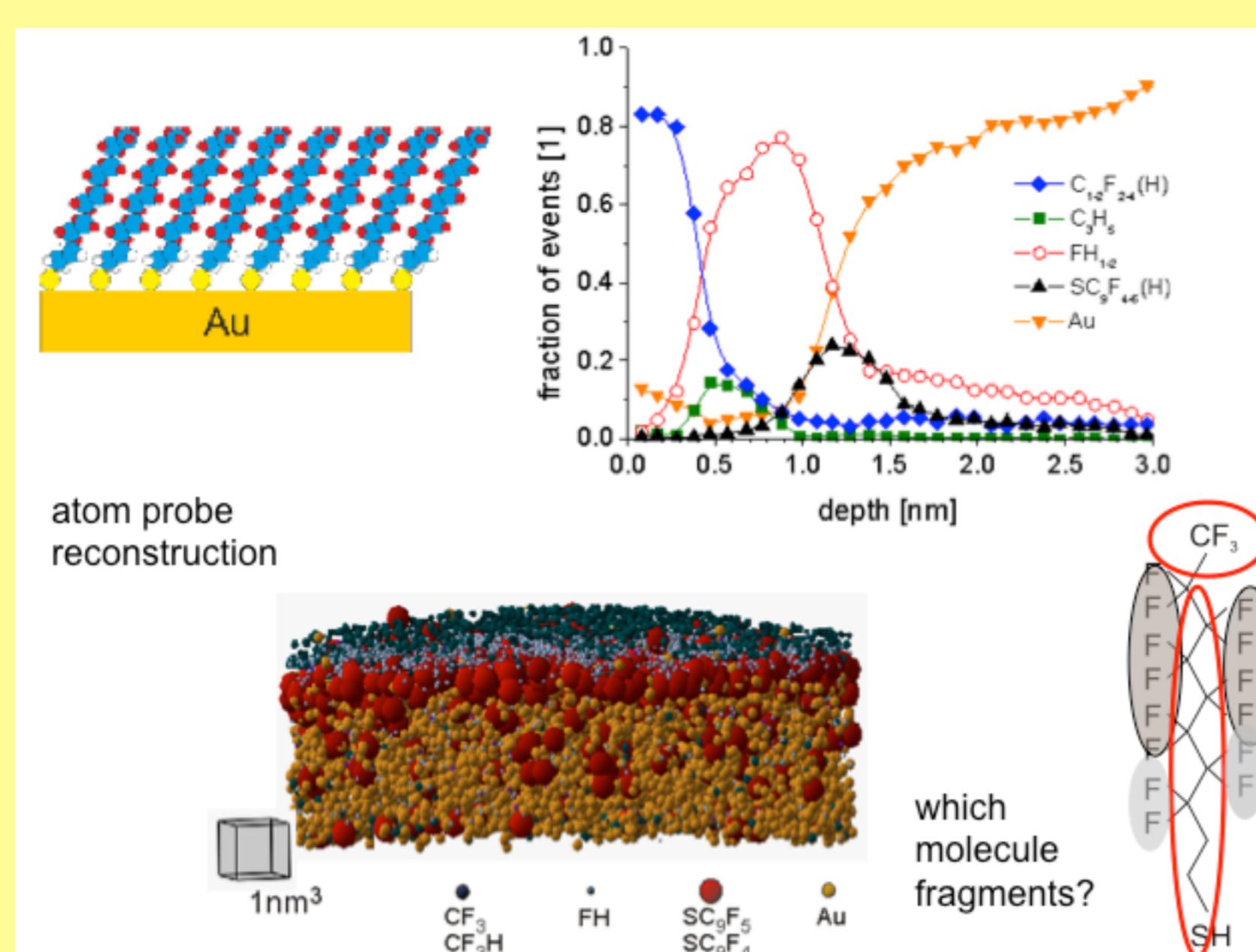


Fig. 2: Untersuchung von self-assembled monolayers [Prof. Schmitz, Stuttgart (ehem. WWU Materialphysik)]

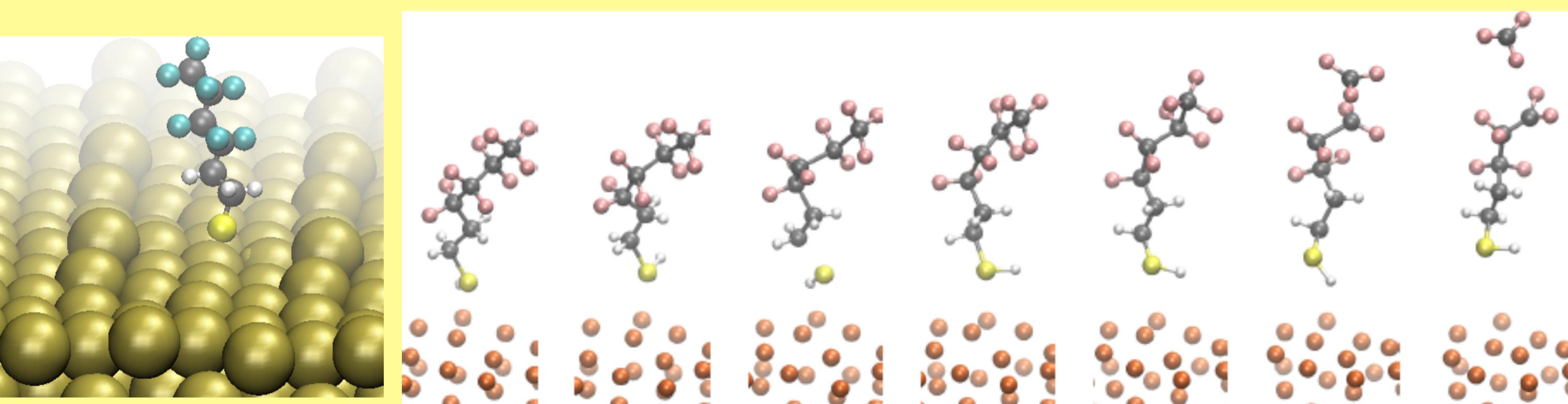


Fig. 3: Schnappschüsse aus einer ab initio Molekulardynamik-Simulation von  $\text{SH-C}_2\text{H}_4\text{-C}_4\text{F}_9$  auf einer Au(111)-Oberfläche

**MOLEKÜLARDYNAMIK  
-SIMULATIONEN**

**AB INITIO  
ELEKTRONENSTRUKTUR  
-RECHNUNGEN**

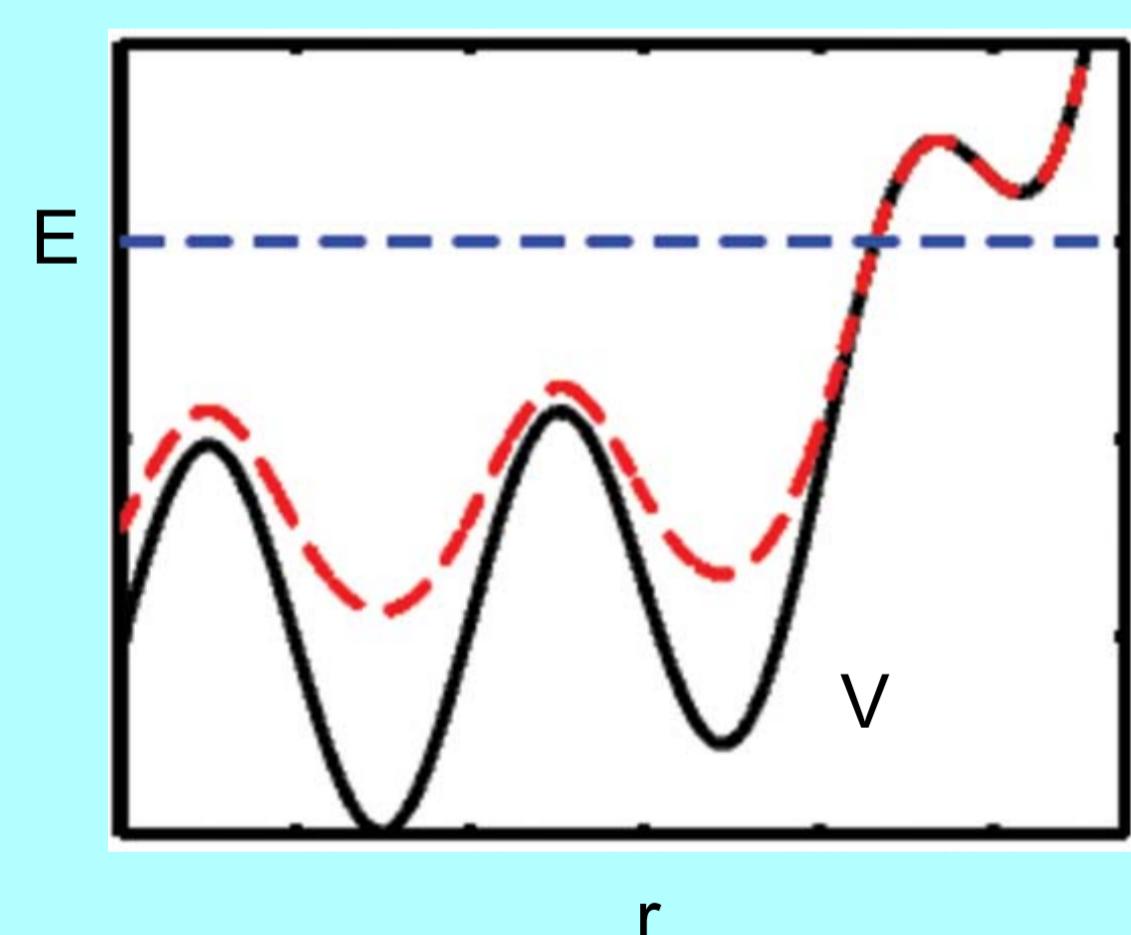


Fig. 8: Schematische Potentialflächen: Original (schwarz) und modifiziert (rot).

$$V^*(\mathbf{r}) = \begin{cases} V(\mathbf{r}), & V(\mathbf{r}) \geq E, \\ V(\mathbf{r}) + \Delta V(\mathbf{r}), & V(\mathbf{r}) < E \end{cases}$$

$$\Delta V(\mathbf{r}) = \frac{(E - V(\mathbf{r}))^2}{\alpha + (E - V(\mathbf{r}))}$$

Beschleunigung:

$$\Delta t_i^* = \Delta t e^{\beta \Delta V[\mathbf{r}(t_i)]}$$

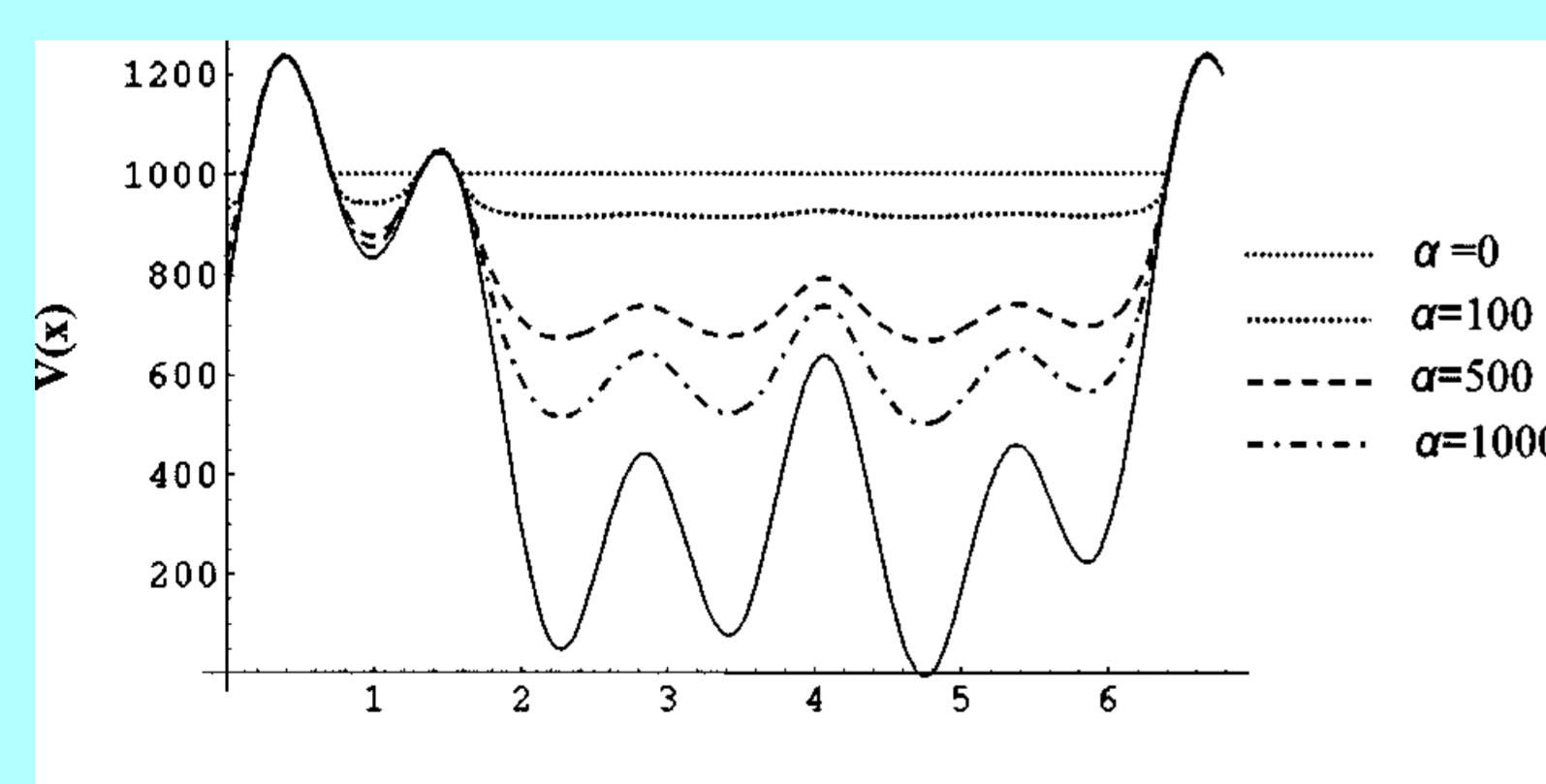


Fig. 9: Einfluß des Beschleunigungsparameters  $\alpha$  auf die modifizierte Potentialfläche

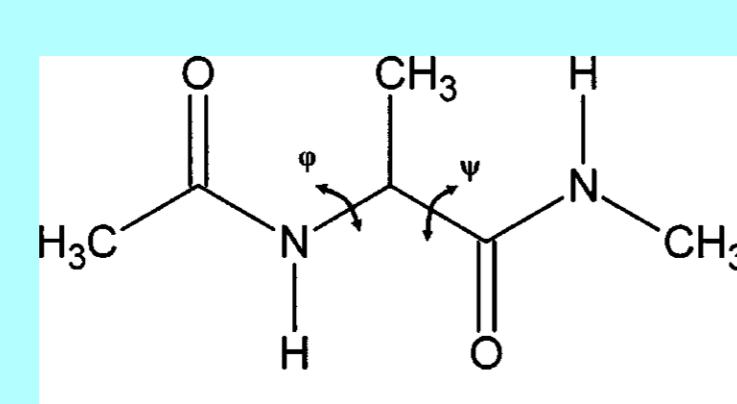
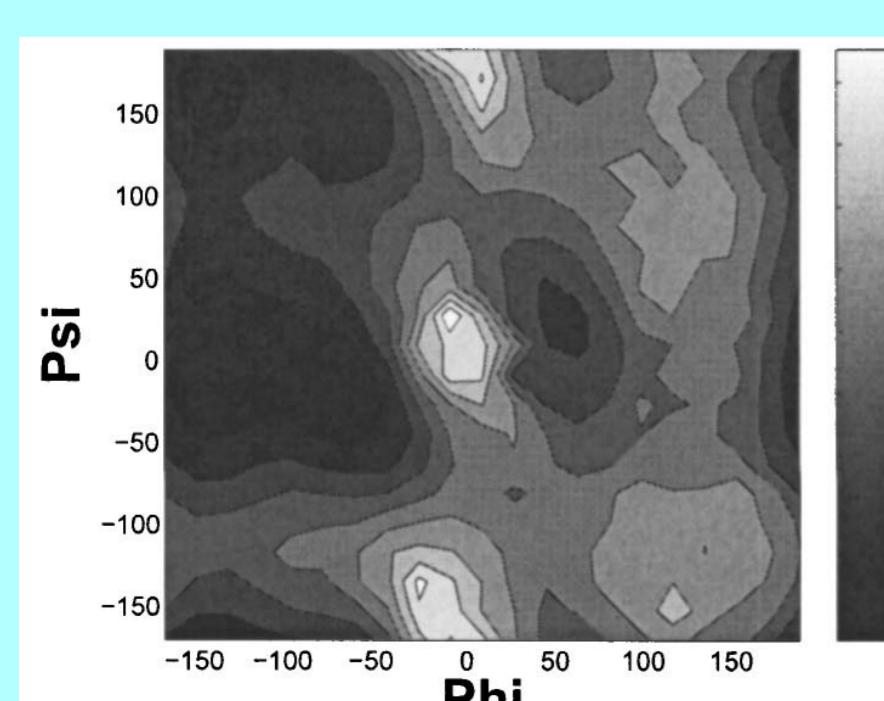


Fig. 10: Freie Energiefläche eines Dipeptids aus einer beschleunigten Simulation

**Thema 2: Entwicklung organischer Solarzellen**

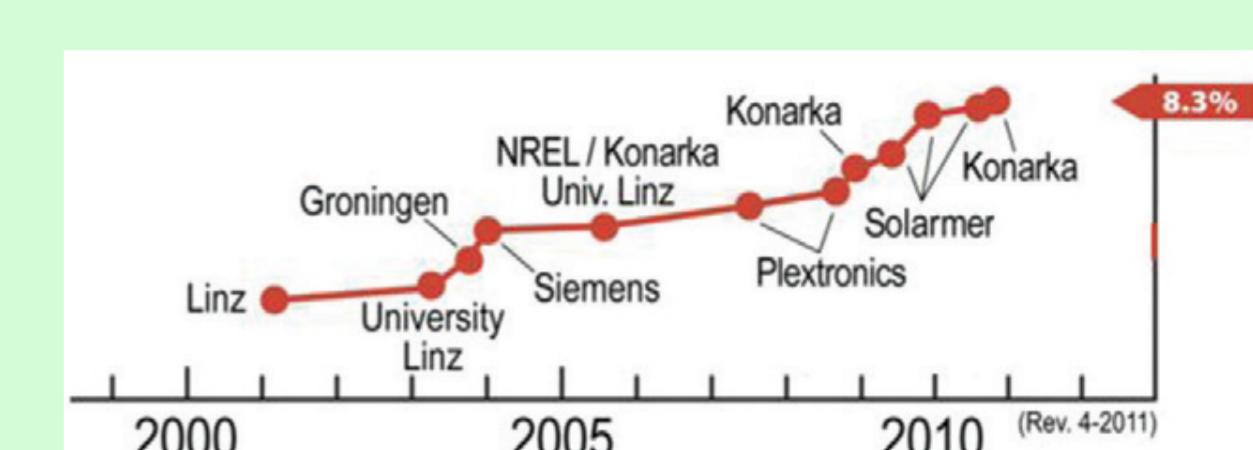
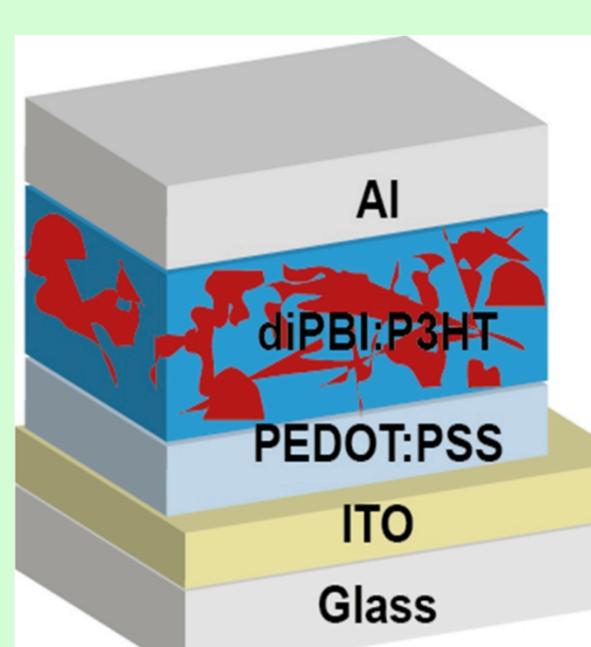


Fig. 4: Schematischer Aufbau einer organischen Solarzelle (links), Foto einer organischen Solarzelle (Mitte), Entwicklung der Effizienz org. Solarzellen (rechts).

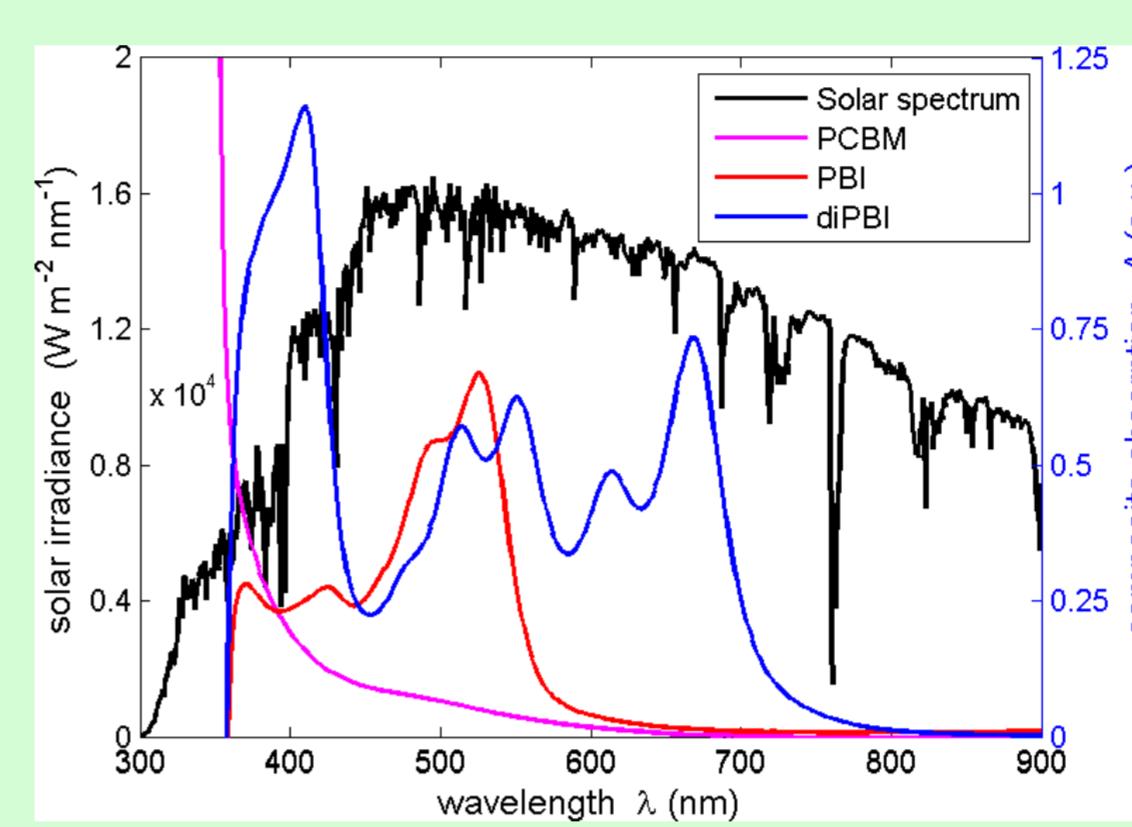


Fig. 5: Absorptionsspektren verschiedener organischer Moleküle im Vergleich zum Sonnenspektrum. [Prof. Dr. C. Denz, Angewandte Physik]

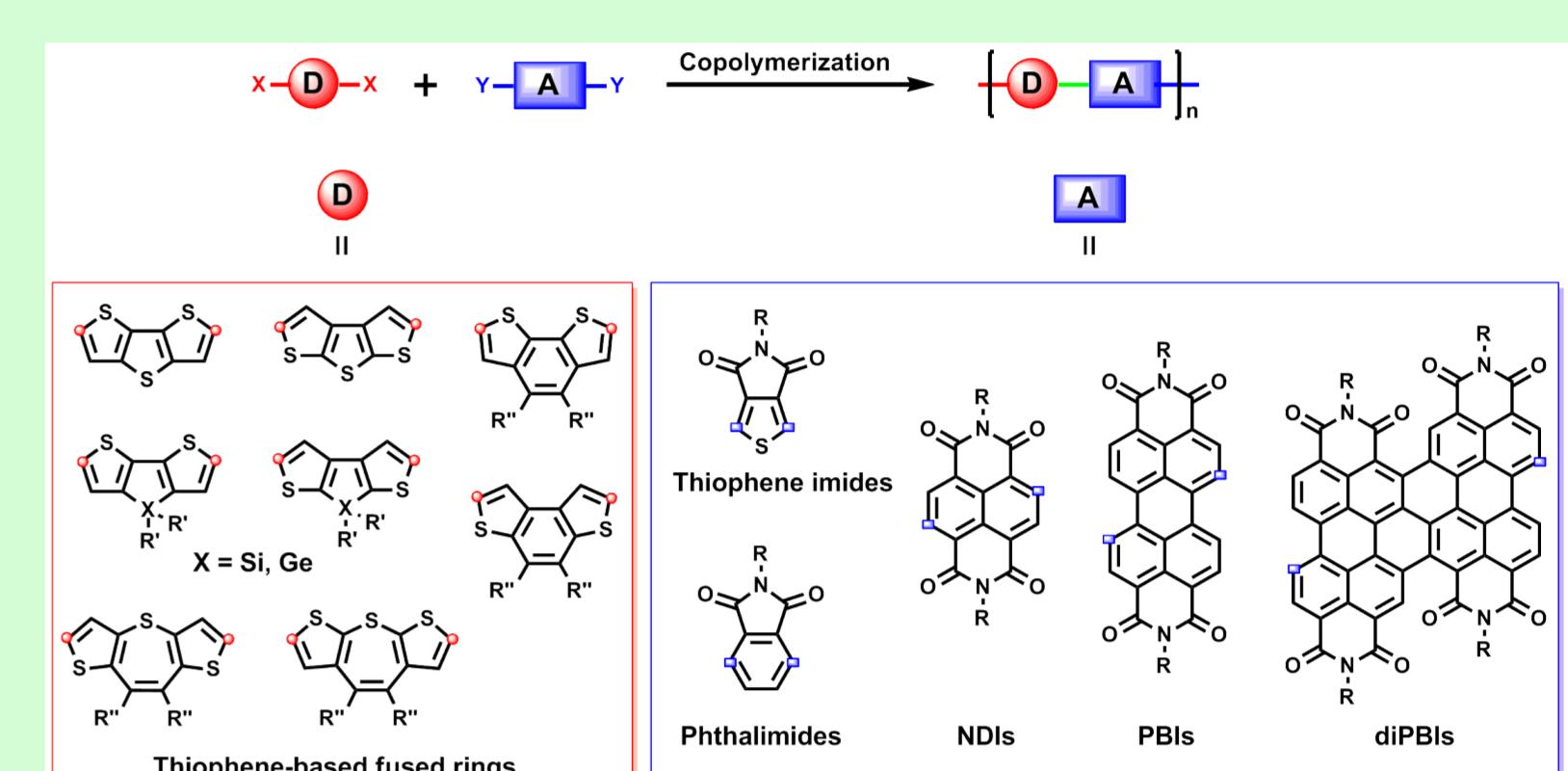


Fig. 6: Mögliche Bausteine von organischen Solarzellen.

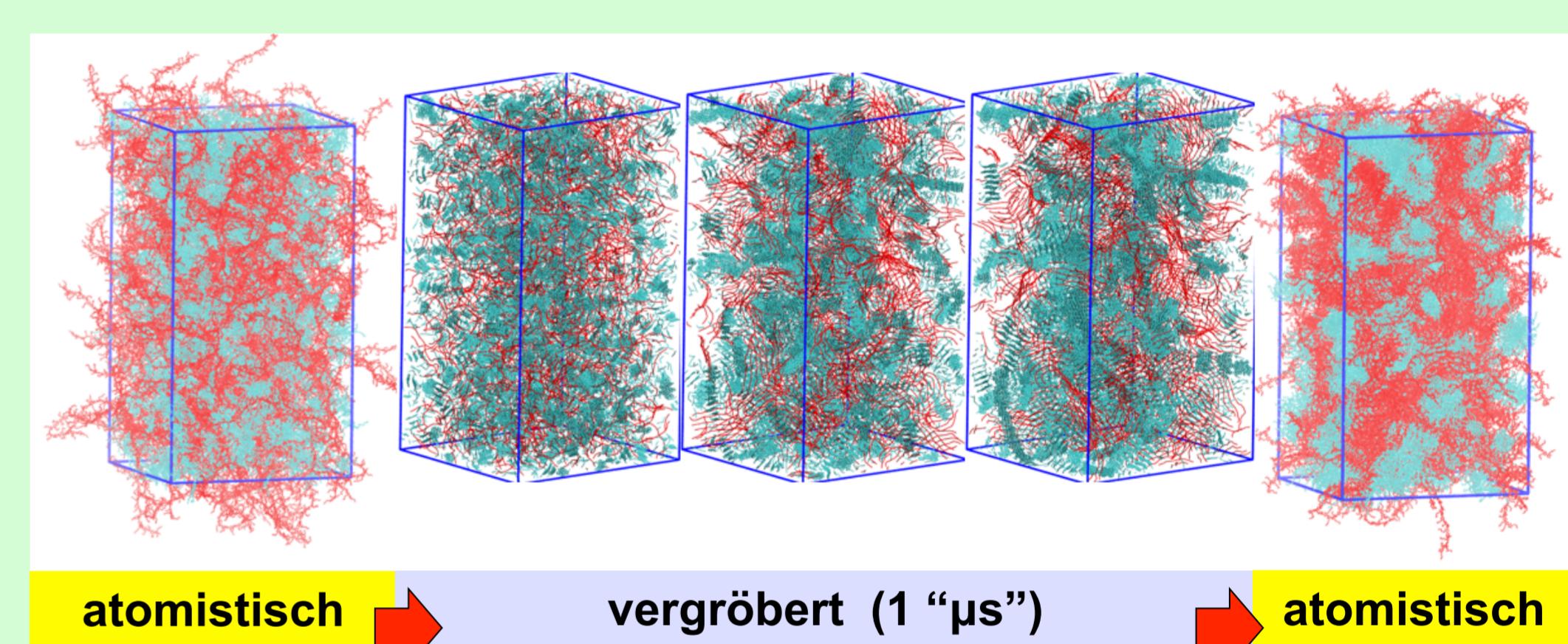


Fig. 7: Multiskalensimulation der Struktur einer organischen Solarzelle

**Thema 3: Beschleunigte Molekulardynamik-Simulationen**

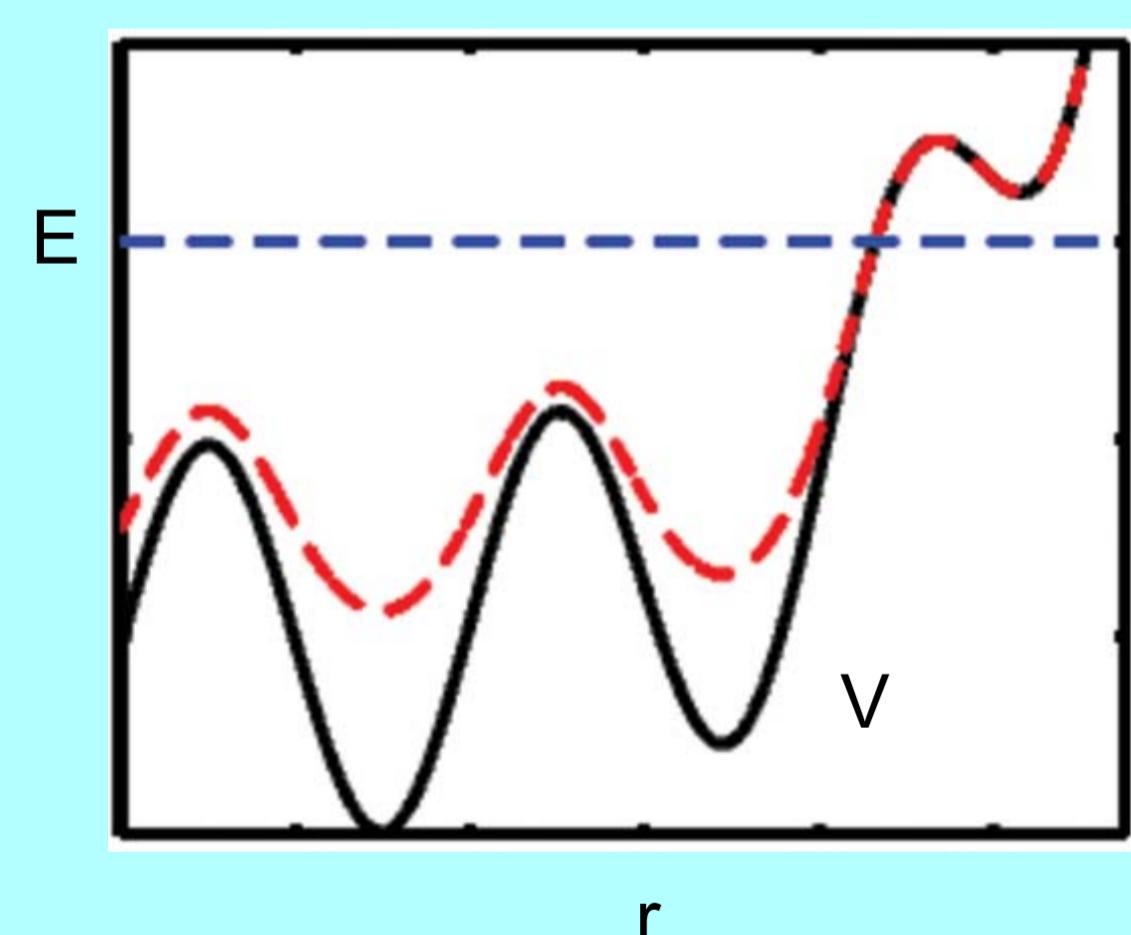


Fig. 8: Schematische Potentialflächen: Original (schwarz) und modifiziert (rot).

$$V^*(\mathbf{r}) = \begin{cases} V(\mathbf{r}), & V(\mathbf{r}) \geq E, \\ V(\mathbf{r}) + \Delta V(\mathbf{r}), & V(\mathbf{r}) < E \end{cases}$$

$$\Delta V(\mathbf{r}) = \frac{(E - V(\mathbf{r}))^2}{\alpha + (E - V(\mathbf{r}))}$$

Beschleunigung:

$$\Delta t_i^* = \Delta t e^{\beta \Delta V[\mathbf{r}(t_i)]}$$

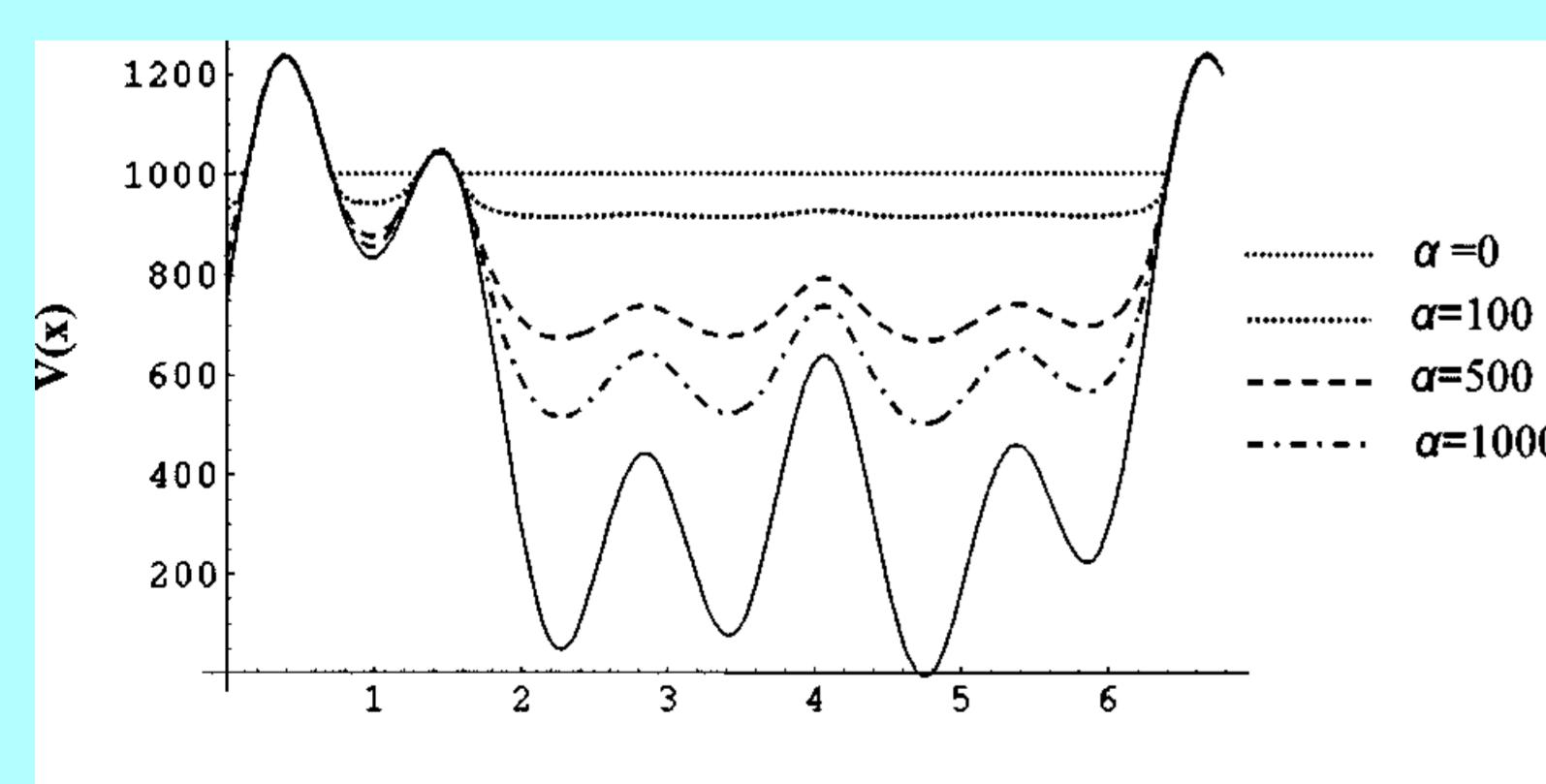


Fig. 9: Einfluß des Beschleunigungsparameters  $\alpha$  auf die modifizierte Potentialfläche

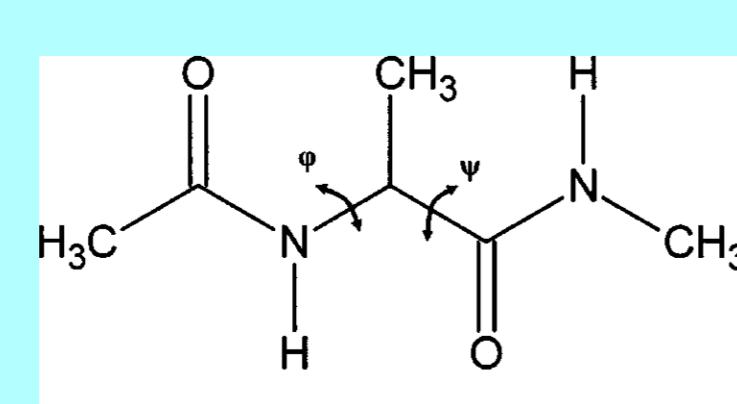
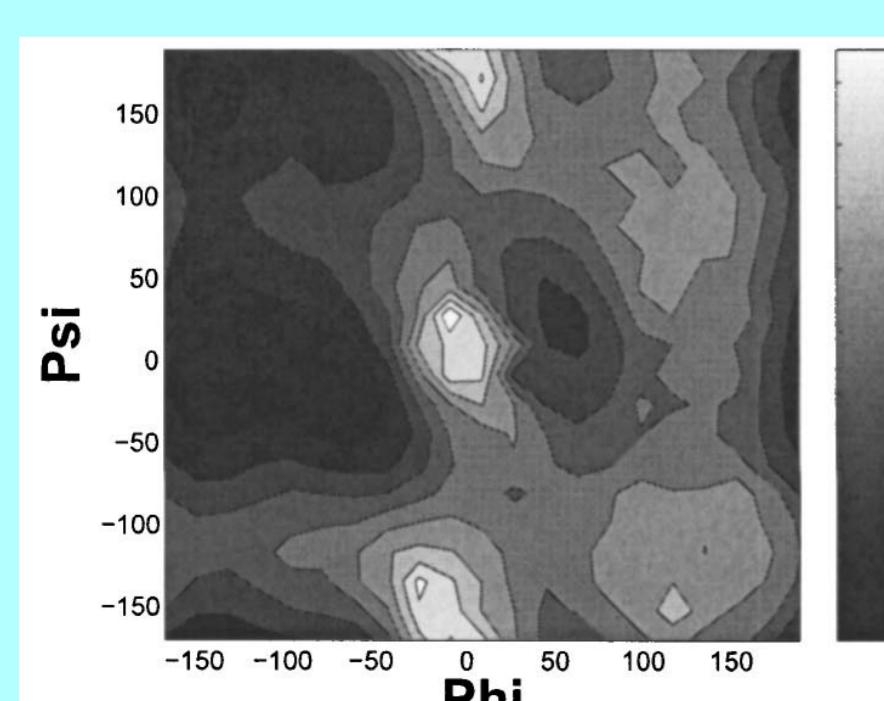


Fig. 10: Freie Energiefläche eines Dipeptids aus einer beschleunigten Simulation

**Thema 4: Lichtsteuerbare Materialien**

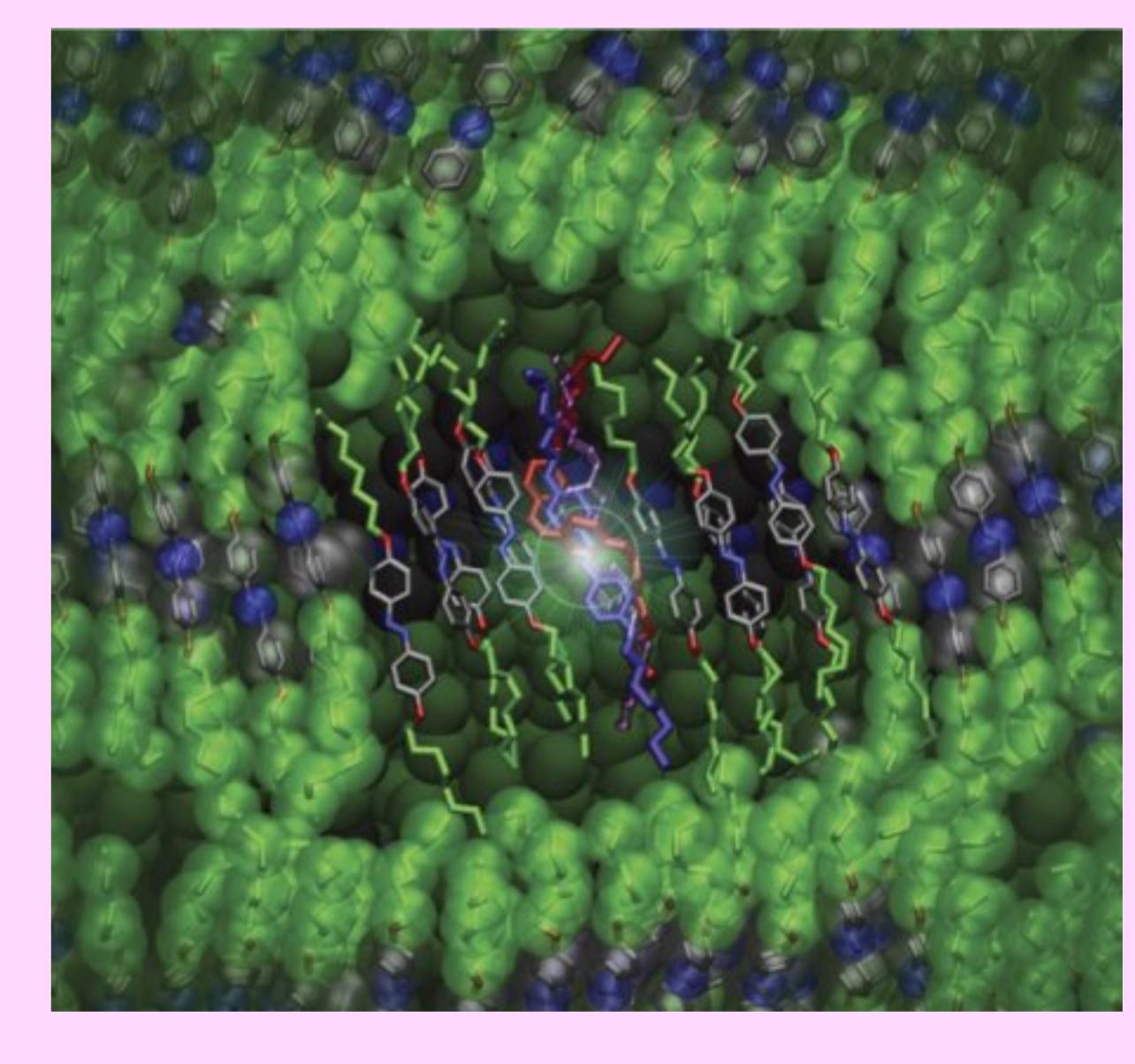


Fig. 11: Cis und trans Isomere von Azobenzol. Durch Lichteinstrahlung kann Arbeit verrichtet werden.

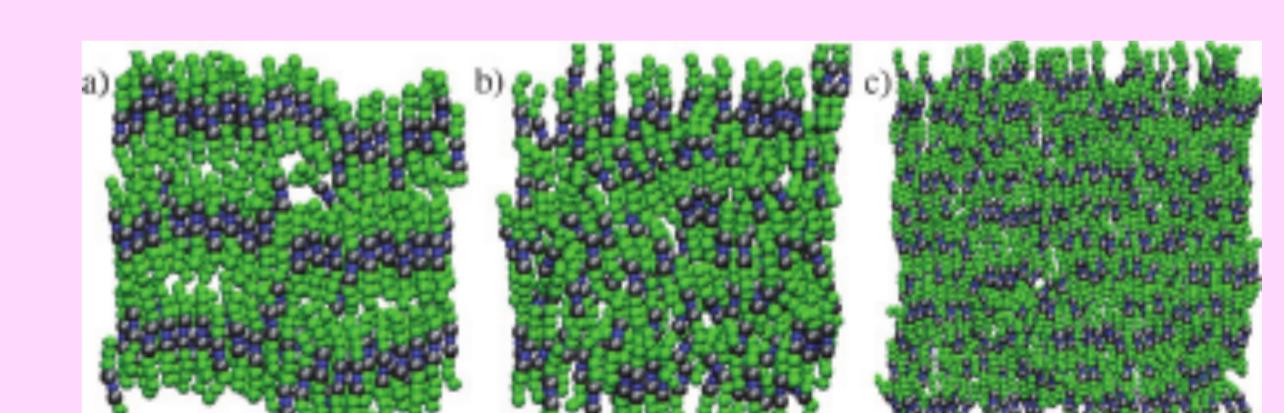


Fig. 12: Simulation lichtinduzierter Phasenübergänge in einem Azobenzol-Flüssigkristall

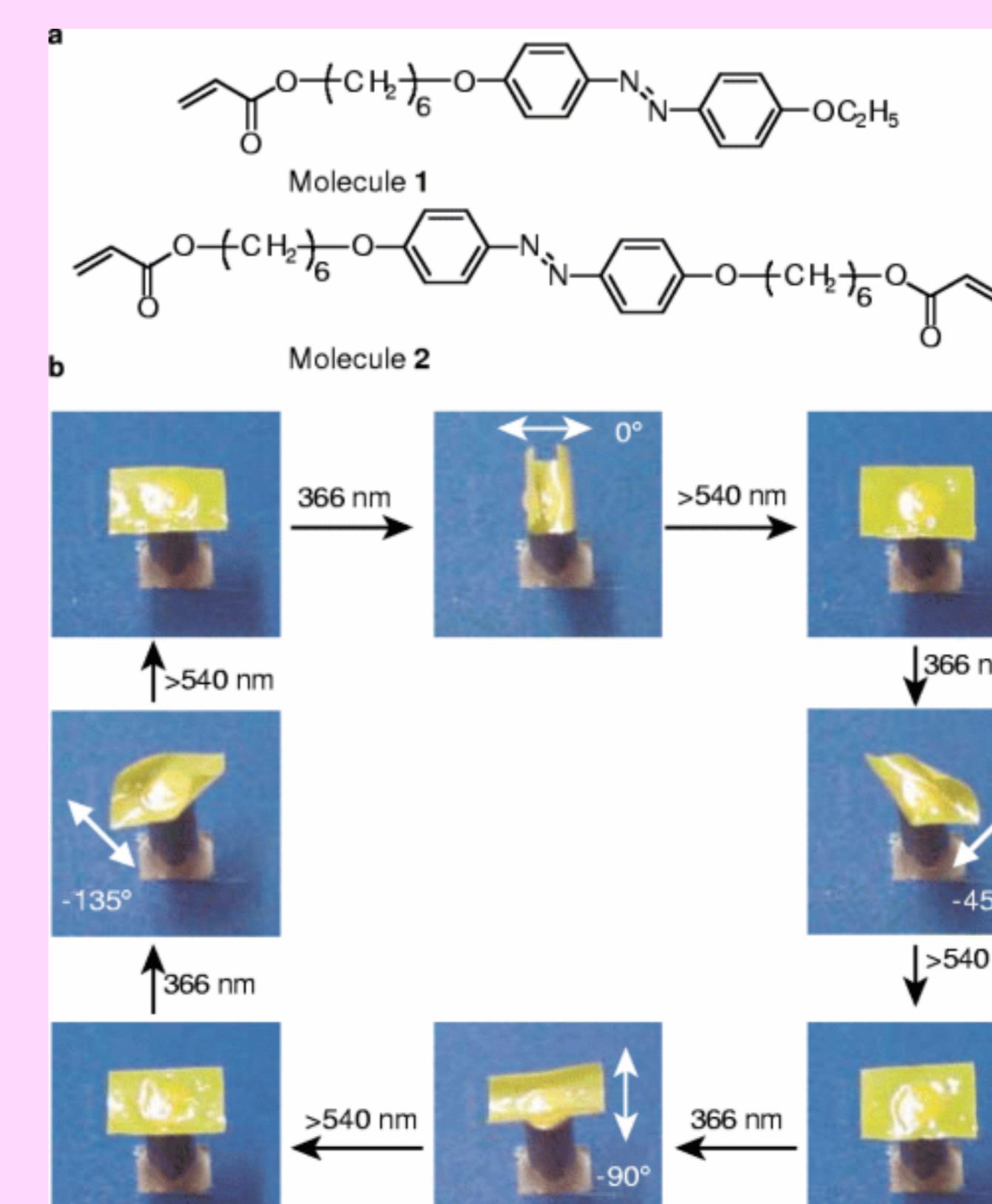


Fig. 13: Makroskopische lichtinduzierte Veränderungen in einem Azo-Material.

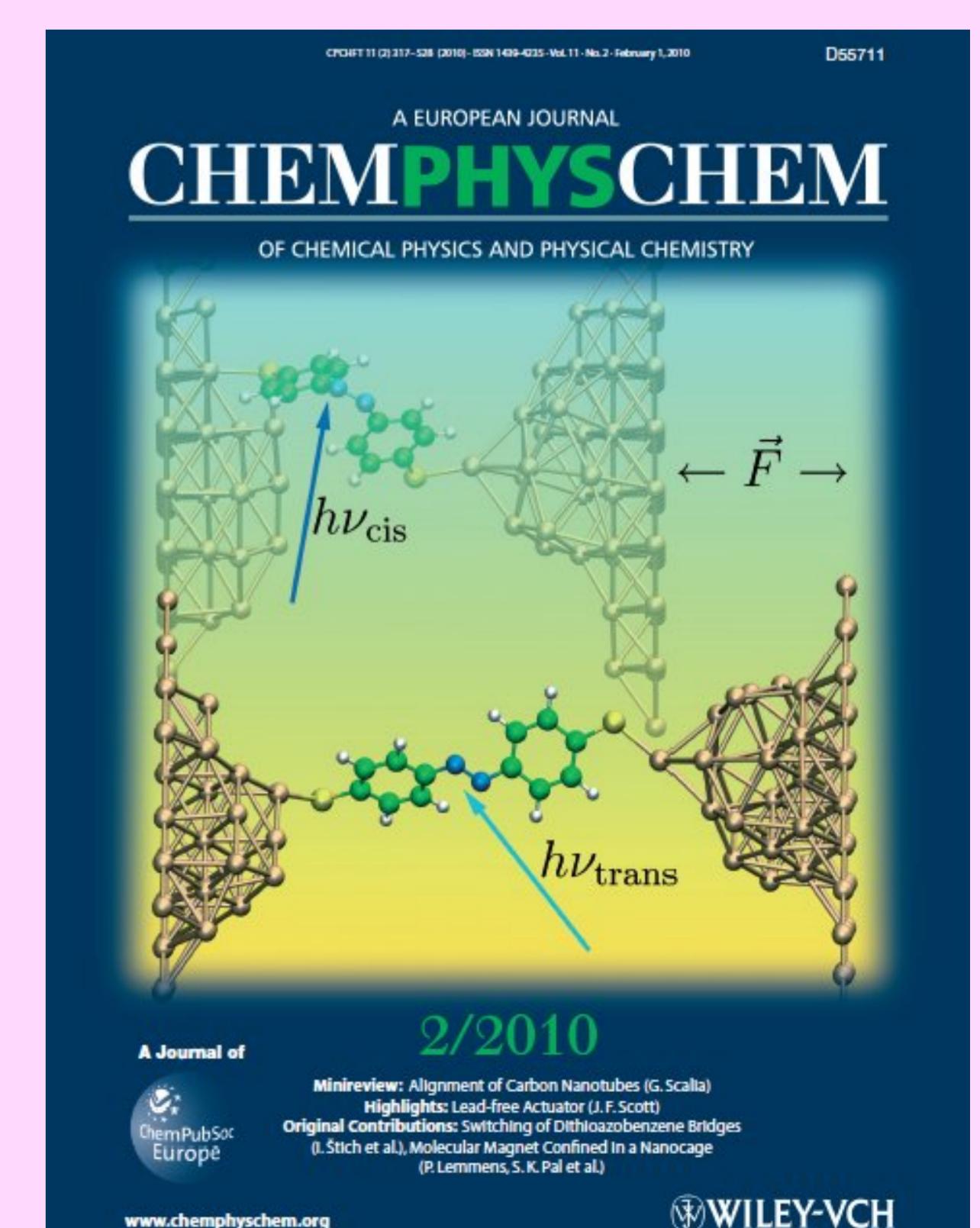


Fig. 14: Optomechanisches Schalten von Azobenzol in einem molekularen Bruchkontakt