

## Thema 1: Theoretische Atomsondentomographie

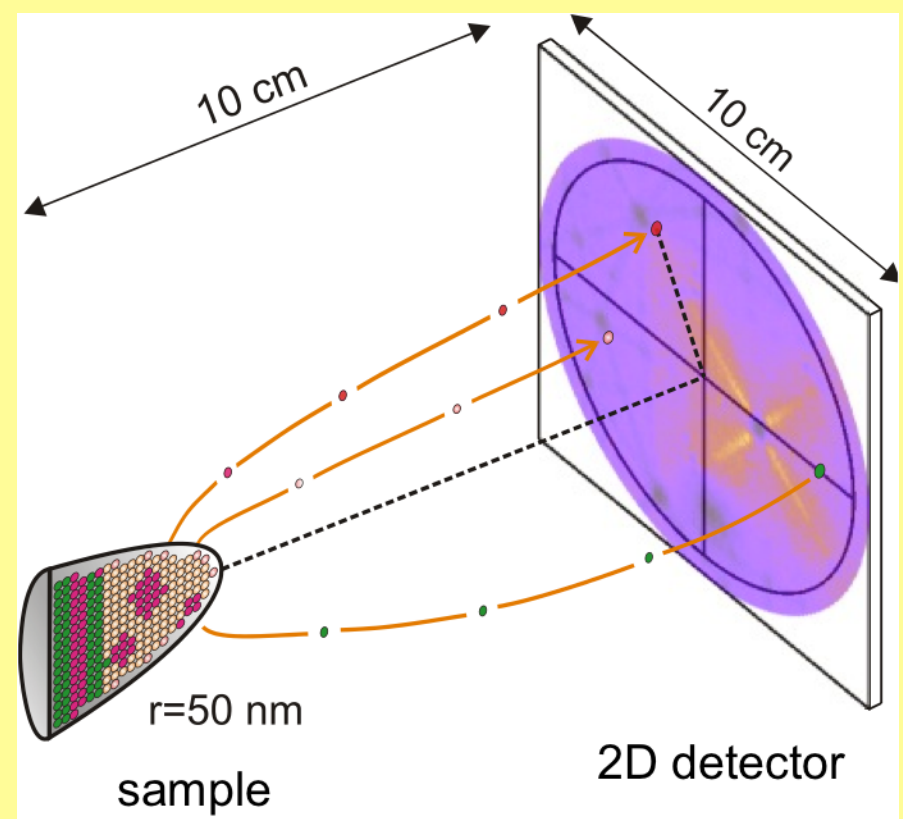


Fig. 1: Prinzip der Atomsonden-Tomographie [Prof. Dr. G. Schmitz, Institut für Materialphysik]

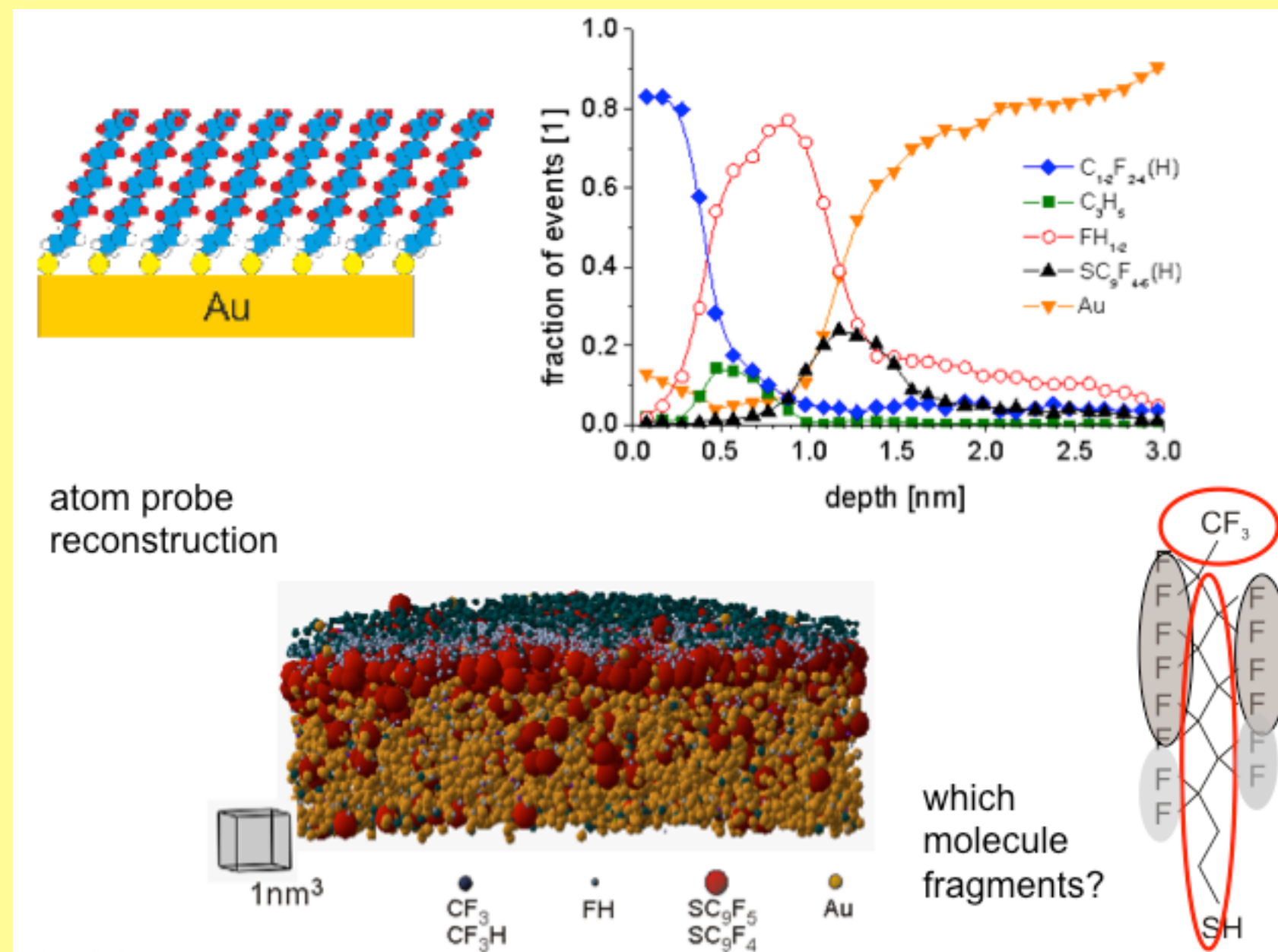


Fig. 2: Untersuchung von self-assembled monolayers [Prof. Schmitz, Stuttgart (ehem. WWU Materialphysik)]

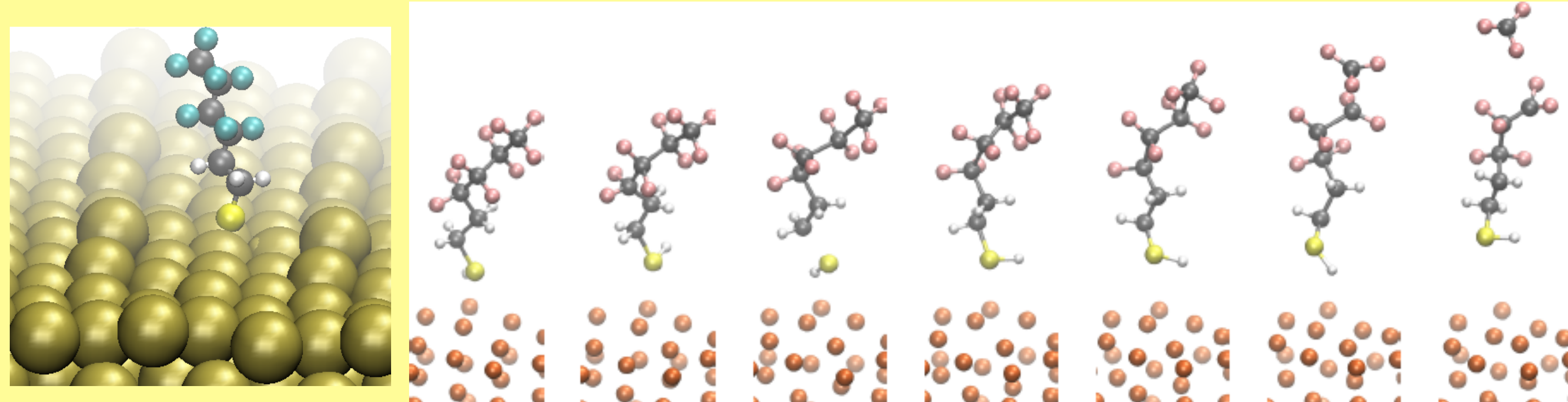


Fig. 3: Schnappschüsse aus einer ab initio Molekulardynamik-Simulation von SH-C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>-C<sub>4</sub>F<sub>9</sub> auf einer Au(111)-Oberfläche

## Thema 2: Entwicklung organischer Solarzellen

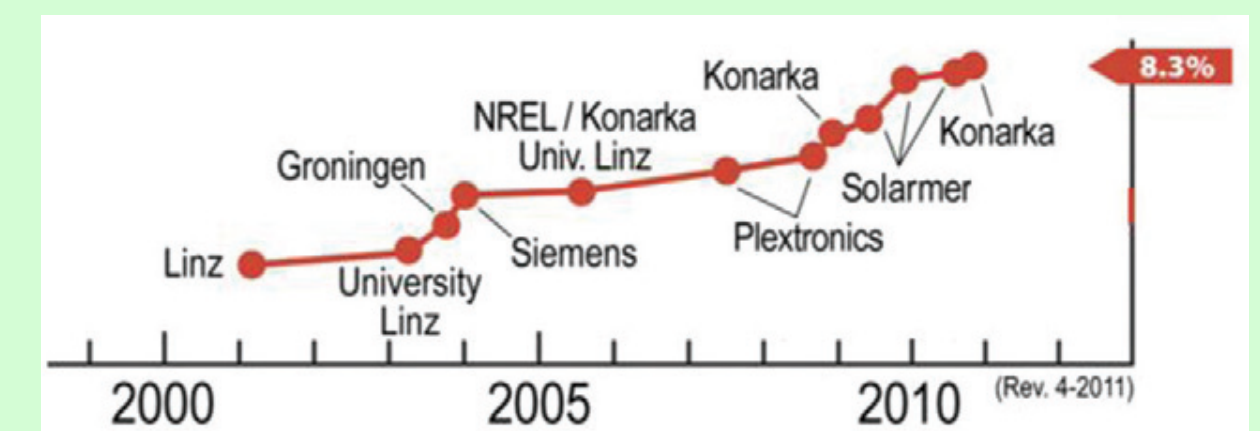
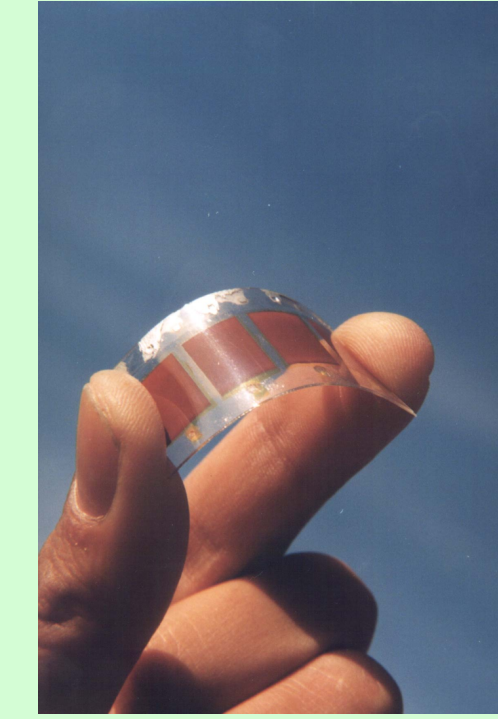
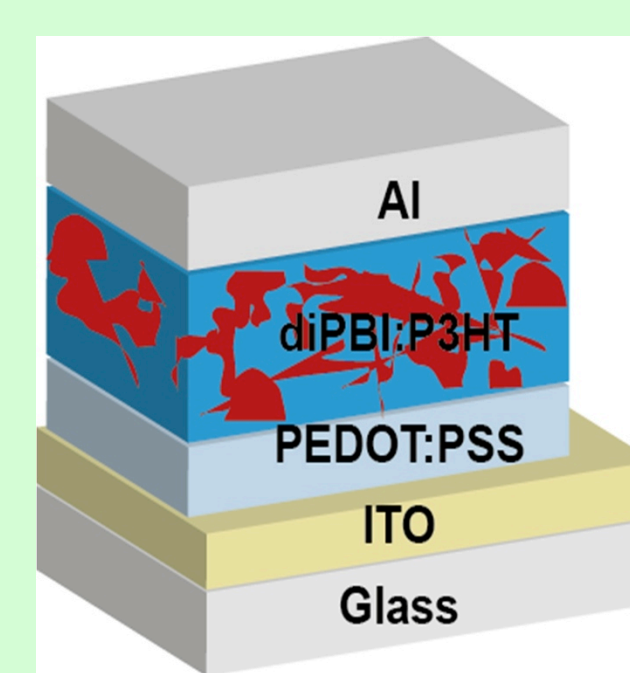


Fig. 4: Schematischer Aufbau einer organischen Solarzelle (links), Foto einer organischen Solarzelle (Mitte), Entwicklung der Effizienz org. Solarzellen (rechts).

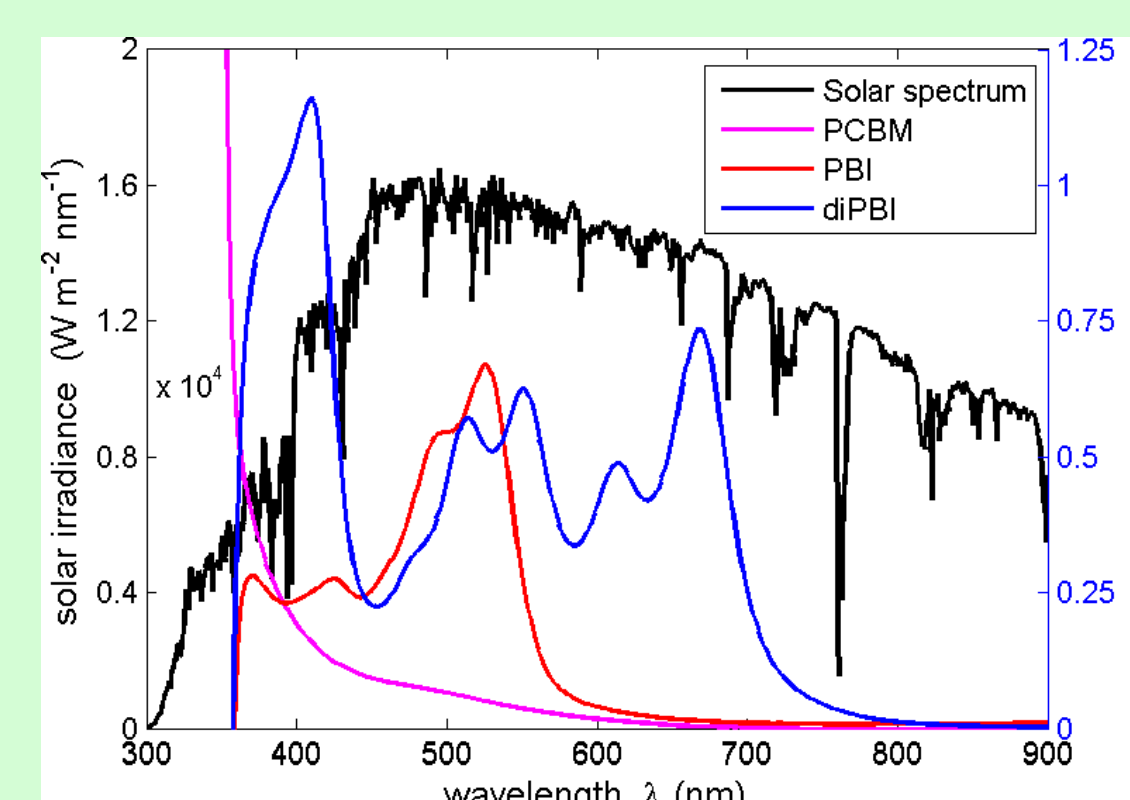


Fig. 5: Absorptionsspektren verschiedener organischer Moleküle im Vergleich zum Sonnenspektrum. [Prof. Dr. C. Denz, Angewandte Physik]

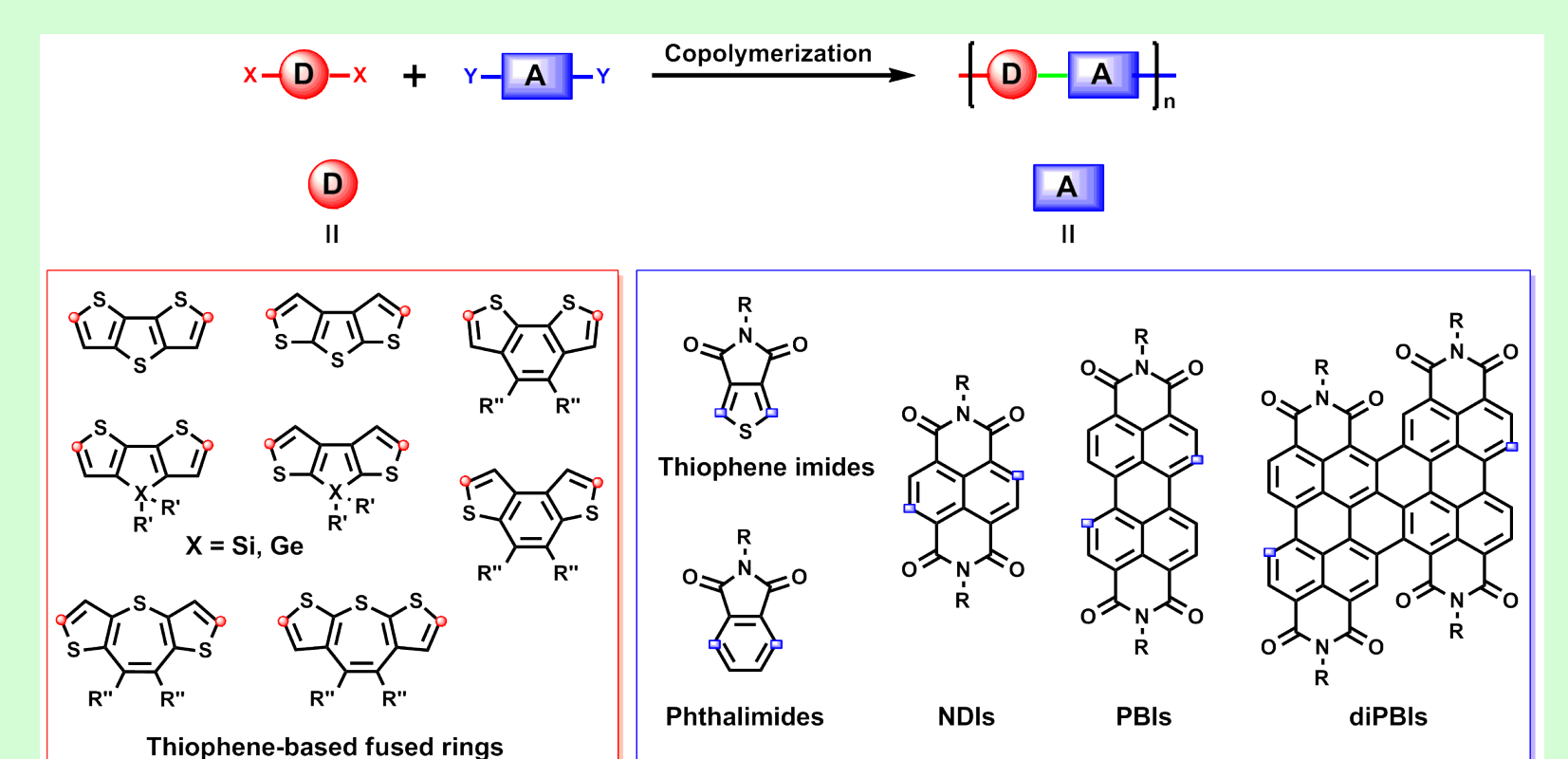


Fig. 6: Mögliche Bausteine von organischen Solarzellen.

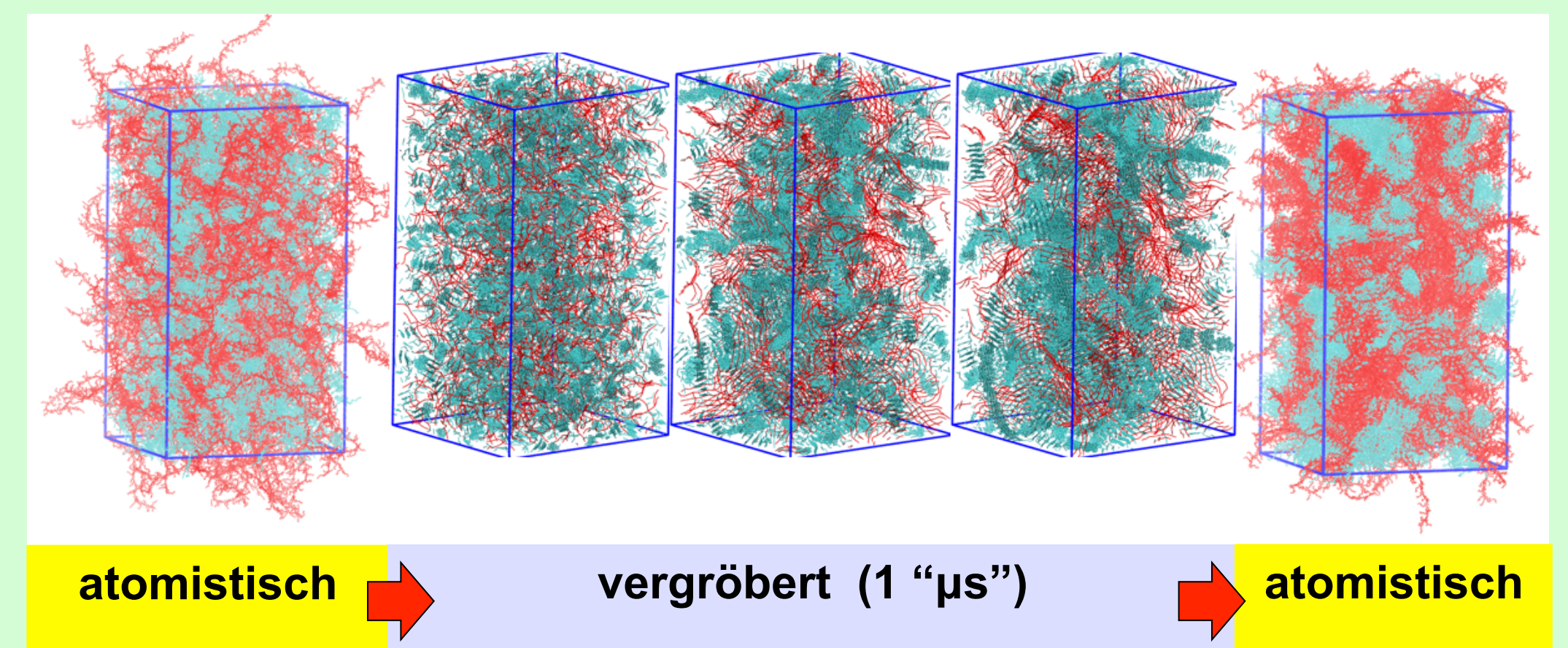


Fig. 7: Multiskalensimulation der Struktur einer organischen Solarzelle

## Thema 3: Beschleunigte Molekulardynamik-Simulationen

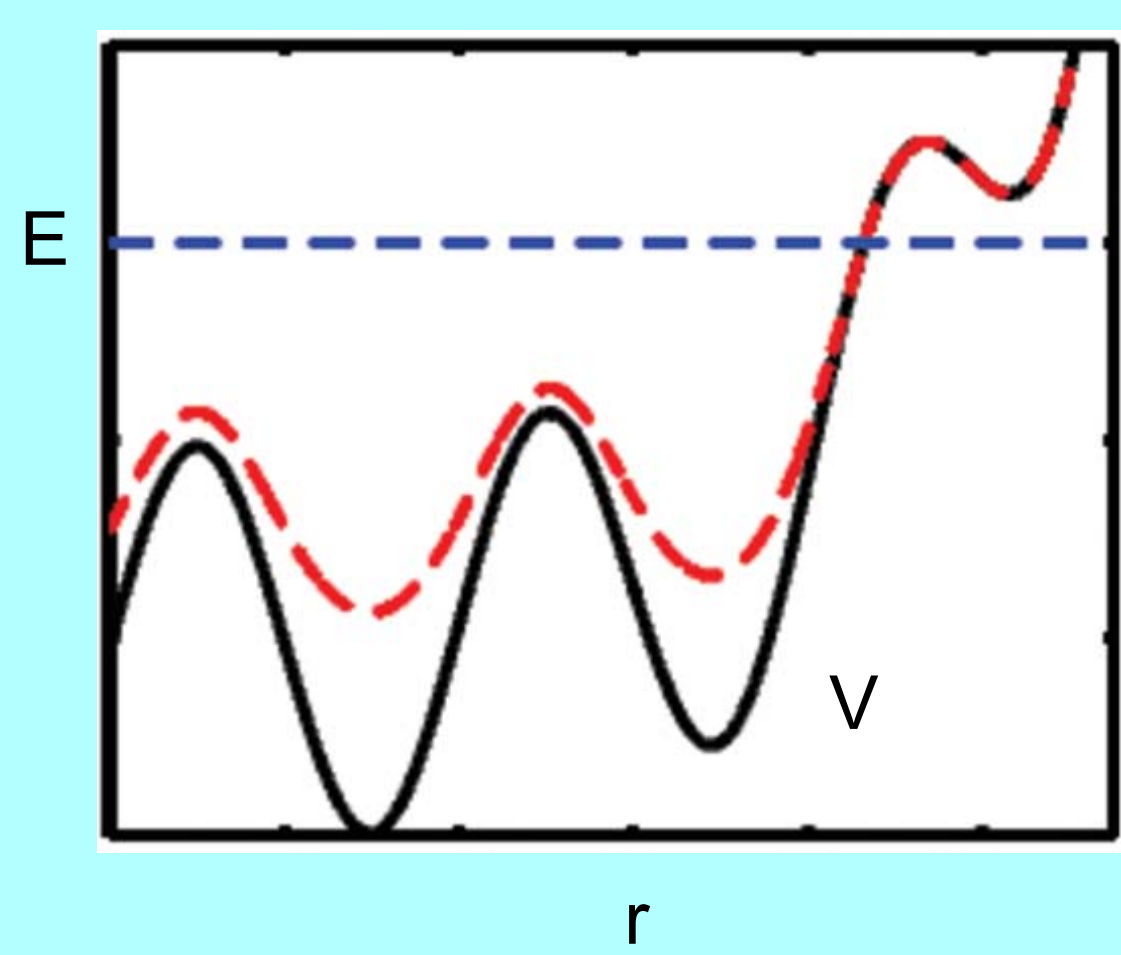


Fig. 8: Schematische Potentialflächen: Original (schwarz) und modifiziert (rot).

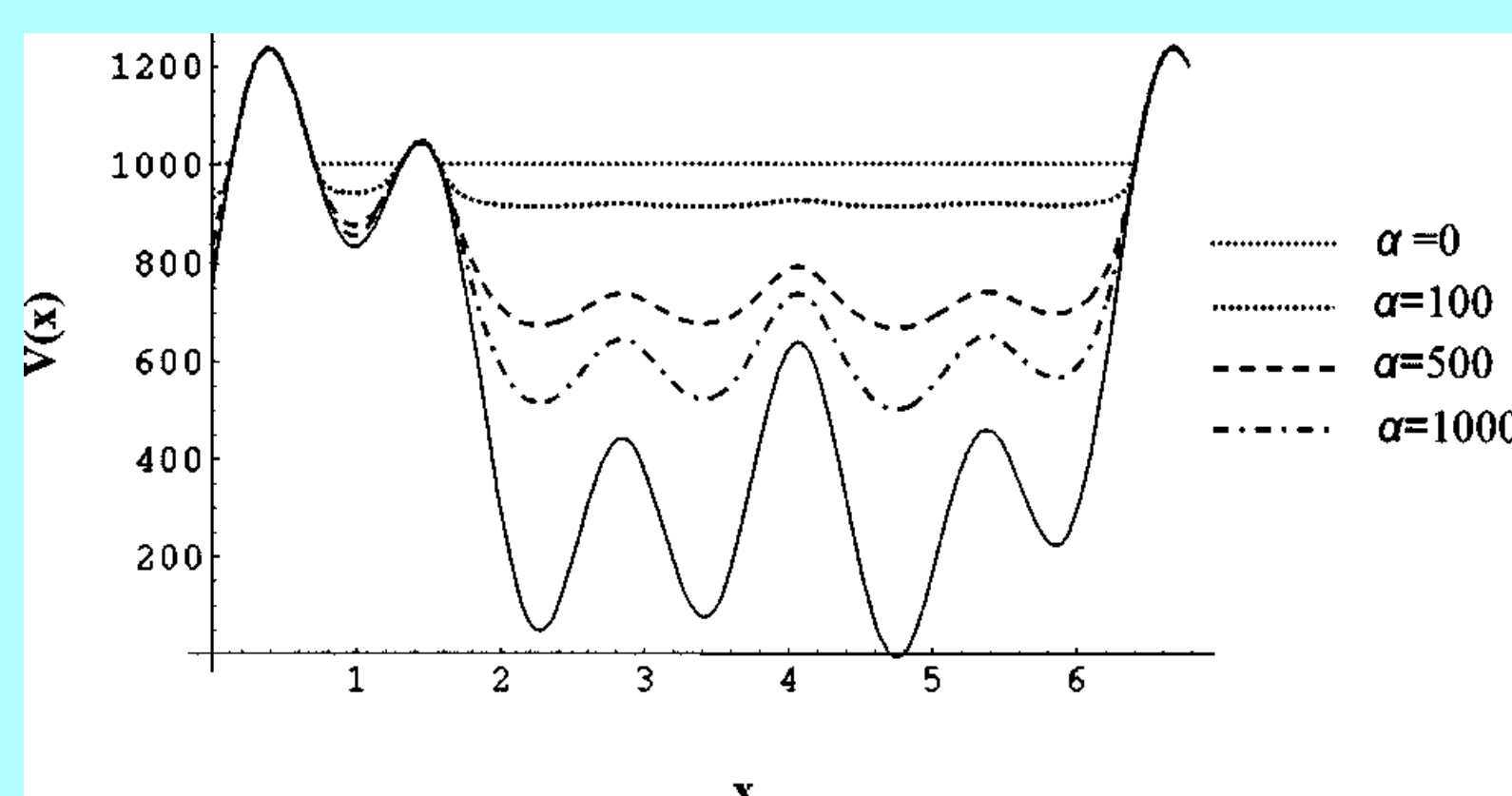


Fig. 9: Einfluß des Beschleunigungsparameters α auf die modifizierte Potentialfläche

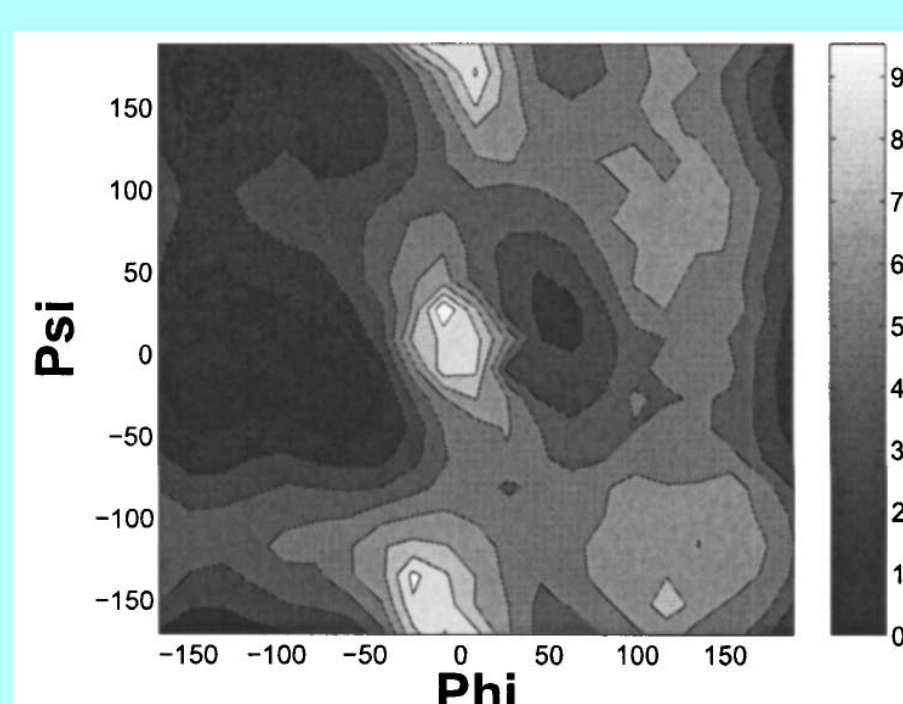
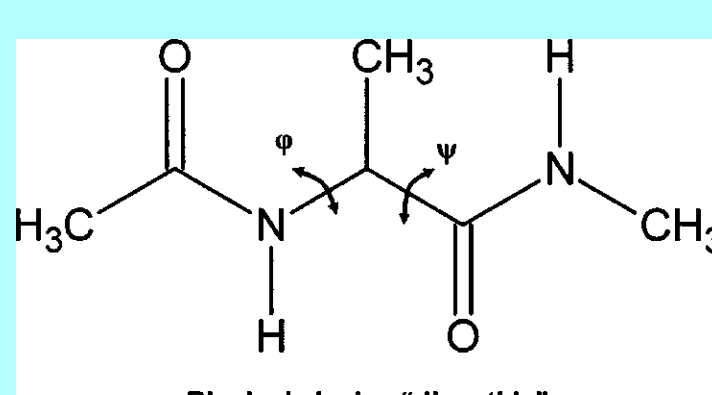


Fig. 10: Freie Energiefläche eines Dipeptids aus einer beschleunigten Simulation



## MOLEKULARDYNAMIK-SIMULATIONEN

## AB INITIO ELEKTRONENSTRUKTUR-RECHNUNGEN

## Thema 4: Lichtsteuerbare Materialien

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

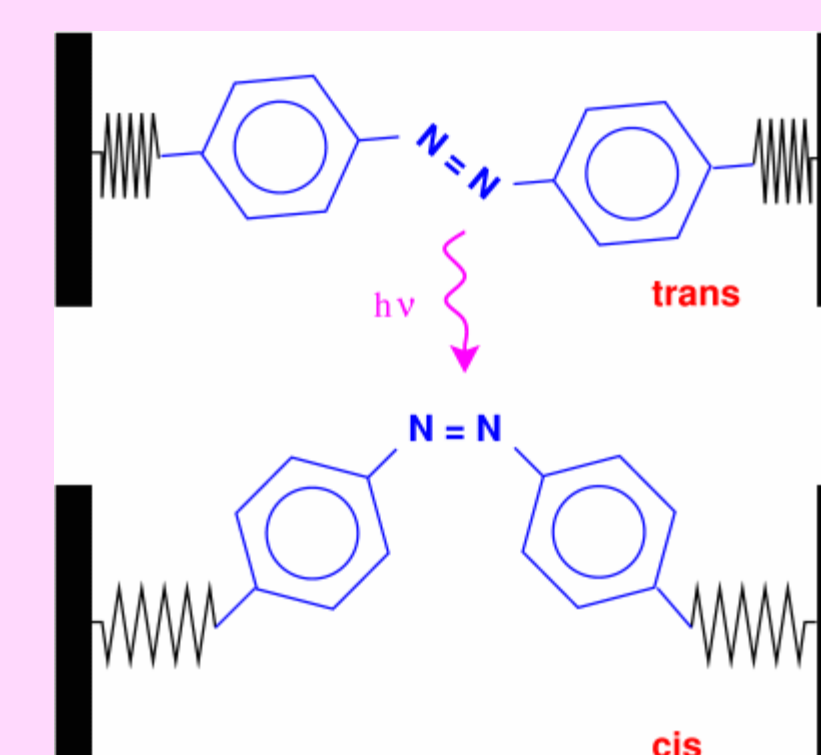


Fig. 12: Simulation lichtinduzierter Phasenübergänge in einem Azobenzol-Flüssigkristall

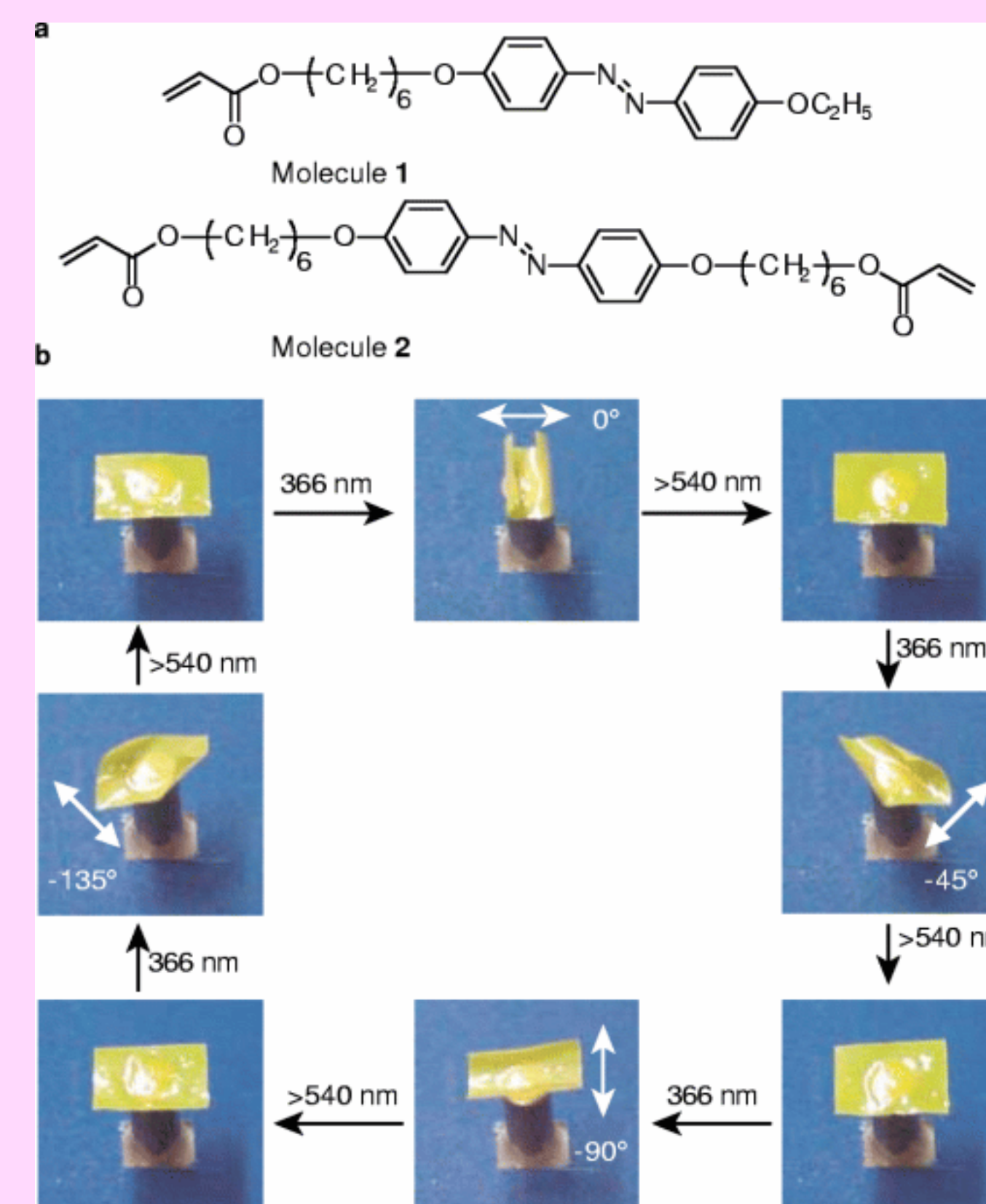


Fig. 13: Makroskopische lichtinduzierte Veränderungen in einem Azo-Material.

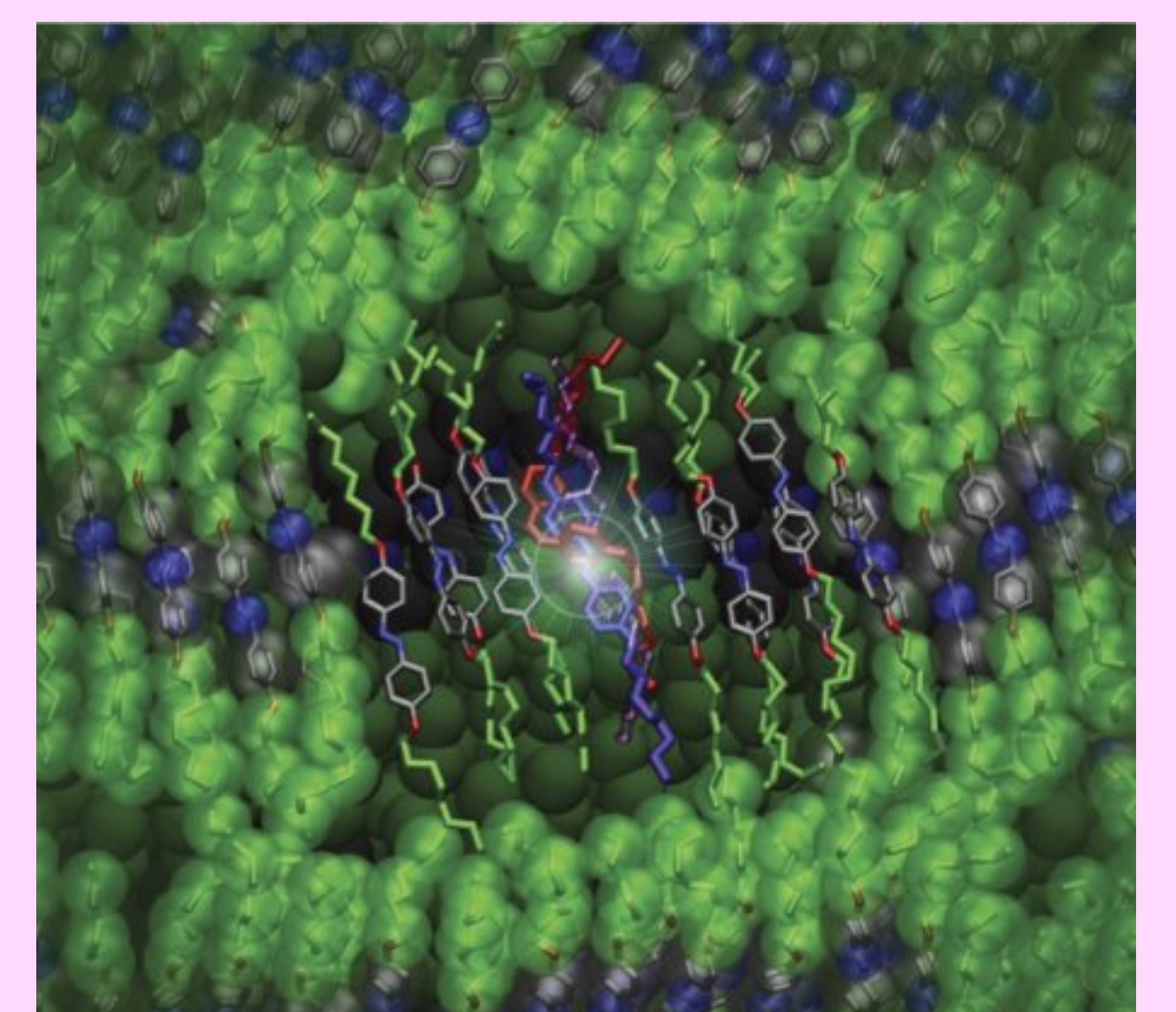


Fig. 14: Optomechanisches Schalten von Azobenzol in einem molekularen Bruchkontakt