



TECHNISCHE UNIVERSITÄT
CHEMNITZ

Kontakt:

Prof. Angela Thraenhardt
Theoretische Physik – Simulation neuer Materialien
Raum: P307
Email: angela.thraenhardt@physik.tu-chemnitz.de

Themenvorschlag:

Simulation von Ladungsträgerbewegung durch Bulk-Heterojunctions in organischen Solarzellen

Zielgruppe: Physik, CS

Morphologie-Eigenschaften und elektrische Felder haben einen starken Einfluss auf die Ladungsträgerbewegung und somit auf die Effizienz organischer Solarzellen. Zu deren Beschreibung soll auf Basis der Mastergleichung ein Transportmodell entwickelt und implementiert werden. Mithilfe von Monte-Carlo-Simulationen soll die Ladungsträgerbeweglichkeit in Abhängigkeit der Morphologie sowie der elektrischen Felder untersucht werden.

Aufgaben:

- Entwicklung und Implementierung eines Transportmodells für Ladungsträgerbewegung
- Untersuchung der Ladungsträgerbewegung (und evtl. anderer Größen, für die experimenteller Zugang möglich ist) in Abhängigkeit diverser Parameter

Modellgrundlage:

- Mastergleichung \rightarrow Drift unter Einfluss eines Elektrischen Feldes \rightarrow Ladungsträgerbewegung

Zu implementierendes Programm:

- Modellierung der Morphologie
 - Einkristall mit Unordnung
 - Polykristall (Ansatz: Dirichlet-Zerlegung des Raumes)
 - Perkolations / Bulk-Heterojunction (Dirichlet-Zerlegung mit Zuordnung der Zellen)
 - Bulk-Heterojunctions-Modell
- Monte-Carlo-Simulation durch die jeweilige Morphologie