

Aufgabe 1: Diindenoperylen (DIP) Solarzelle

Aus dem Molekül Diindenoperylen (siehe unten) als p-Halbleiter und C₆₀ Molekülen als n-Halbleiter lässt sich eine Solarzelle mit mehreren Prozent Wirkungsgrad bauen. Sehen Sie sich dazu das Paper http://www.soft-matter.uni-tuebingen.de/publications/Wagner_afm10.pdf an.

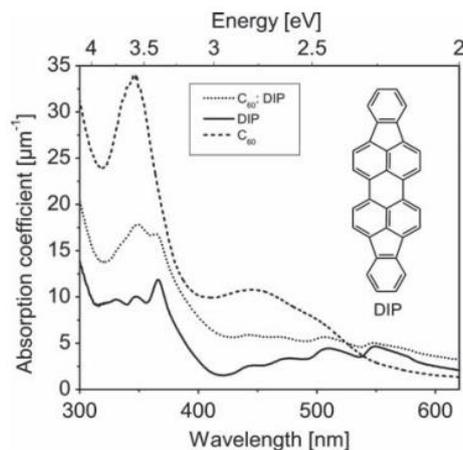


Figure 1. Absorption spectra of neat films of DIP and C₆₀ and a coevaporated C₆₀:DIP film (mixing ratio 1:1 by weight). The spectra are calculated from transmission measurements on transparent substrates. The inset shows the molecular structure of DIP.

- Beschreiben sie in Stichpunkten, wie die DIP-C60 Solarzelle funktioniert.
- Nennen Sie einige Eigenschaften, die ein Molekül haben sollte um für organische Photovoltaik gut geeignet zu sein.
- Sollten in einer planaren Solarzelle bei senkrechten Lichteinfall die DIP Moleküle senkrecht stehend oder flach liegend angeordnet sein um den Wirkungsgrad zu optimieren? Zur Beantwortung ist mit dem online Rechner <http://www.chem.ucalgary.ca/SHMO/> die HOMO und LUMO Wellenfunktion auszurechnen. Im zweiten Schritt sollte dann die Orientierung des Übergangsdipolmoments bestimmt werden und daraus auf die Molekülorientierung geschlossen werden.

Aufgabe 2

Zeigen Sie, dass sich mithilfe des Produktansatzes

$$\begin{aligned} \Psi_k(\{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{R}_j\}) \\ = \chi_k(\{\mathbf{R}_j\}) \cdot \Psi_k^0(\{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{R}_j\}) \end{aligned}$$

Aus der Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} (\Delta_A(\mathbf{R}_A) + \Delta_B(\mathbf{R}_B)) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_e(\mathbf{r}) + E_{\text{pot}}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \right] \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}_i) = E \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}_i)$$

Die beiden separierten Gleichungen ergeben:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{e}(\mathbf{r})} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_A} + \frac{1}{r_B} - \frac{1}{R} \right) \right] \cdot \psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B, R) = E(R) \psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B, R),$$

und

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2M_A} \Delta_A + \frac{\hbar^2}{2M_B} \Delta_B \right) + E_{\text{pot}}(\{\mathbf{R}_j\}, k) \right] \chi_k(\{\mathbf{R}_j\}) = E \chi_k(\{\mathbf{R}_j\})$$