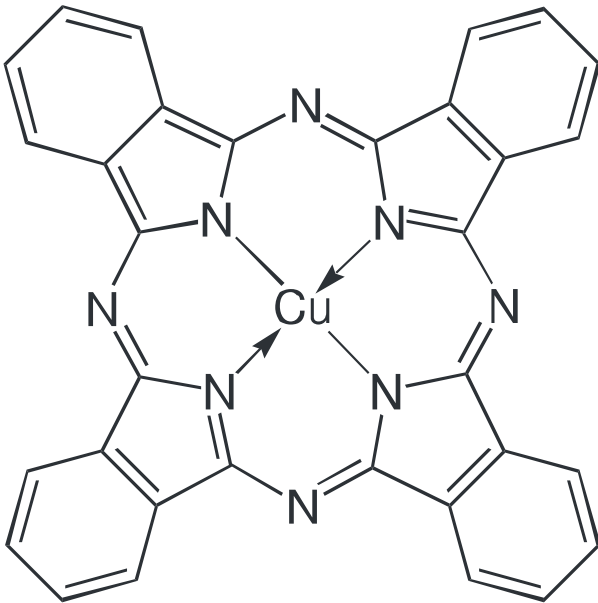


MASTERARBEIT IN PHYSIK

"Ladungsträgertransport in organische Halbleitermaterialien für die Optoelektronik – Untersuchungen mit Dichtefunktionaltheorie"



Organische Halbleiter spielen in der heutigen Welt eine immer größere Rolle. Nicht nur werden sie als OLEDs in Raum-, Flächen-, oder Bildschirmhintergrundbeleuchtung eingesetzt, auch in der Photovoltaik haben sie ein großes Potenzial. Um ultraflache, flexible Displays herzustellen, braucht man nicht nur eine organische Schicht zur Lichtemission, sondern auch eine organische Steuerschicht. Diese besteht aus sogenannten "OTFTs", organischen Dünnschichttransistoren. Sowohl für die Anwendung in der organischen Photovoltaik als auch in OTFTs werden organische Materialien mit einer hohen Ladungsträgerbeweglichkeit benötigt.

Während in den letzten Jahren mit hohem Einsatz versucht worden ist durch Verbesserungen im Bereich der Produktionsparameter, durch Synthese neuartiger Materialien oder durch den Einsatz von sogenannten Adhäsionsvermittlern die Ladungsträgerbeweglichkeit extrinsisch zu verbessern ist

immer noch unklar, durch welche Mechanismen die Ladungsträgerbeweglichkeit in organischen Halbleitern intrinsisch limitiert ist. Dieser hochinteressanten Frage wollen wir an unserem Institut auf den Grund gehen. Während eine zweite, möglichst parallel bearbeitete Masterarbeit sich mit den experimentellen Aspekten befassen wird, soll die hier ausgeschriebene Masterarbeit sich der Frage mit Hilfe von theoretischen Rechnungen nähern. Hierzu werden mit der Hilfe sogenannter Dichtefunktionaltheorie (DFT) Rechnungen am Hochleistungsrechencluster der RWTH durchgeführt. Im Fokus liegen dabei insbesondere die molekularen Energieniveaus der organischen Halbleiter und der Überlapp dieser mit den Energieniveaus nächster Nachbarmoleküle.

In der hier ausgeschriebenen Masterarbeit bekommt der Kandidat die Möglichkeit an der Forschung an einem aktuellen und industrierelevanten Thema mitzuarbeiten. Die Mitarbeit umfasst:

- Die Einarbeitung in die vielseitig einsetzbare Methode DFT
- Rechnungen am Hochleistungsrechencluster der RWTH
- Enger Kontakt mit anderen Gruppe an unserem Institut und der Hochschule, die sich auch mit DFT beschäftigen
- Kontaktaufnahme mit anderen internationalen Gruppen
- die Möglichkeit der Mitarbeit an Veröffentlichungen

Um die Masterarbeit erfolgreich bearbeiten zu können, werden vom Kandidaten erwartet:

- hohes Engagement und Bereitschaft zum selbstständigen Arbeiten und Forschen
- hohes Interesse an und Talent zur Bearbeitung von theoretischen Fragestellungen
- Programmierkenntnisse von Vorteil
- sehr gute Englischkenntnisse
- aktive Teilnahme an Gruppenmeetings und Institutsseminaren

Bewerbungen sind zu richten an:

Christian Effertz

effertz@physik.rwth-aachen.de