



Hochschule für Technik
und Wirtschaft Berlin

University of Applied Sciences

Projekt Zeitaufgelöste Photolumineszenz: Angewandte Mathematik (M1)

Name: Aaron Zielstorff
Mtr.Nr.: 567183

Fachbereich: FB1
Studiengang: M. Elektrotechnik
Fachsemester: 1. FS
Fach: M1 Angewandte Mathematik
Dozent: Prof. Dr. A. Zeiser
Abgabe am: 20. März 2022

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Finite Differenzen der stationären Gleichung	6
2.1	Lineare stationäre Gleichung	6
2.1.1	Vorgehen aus [4, Abschnitt 8.8] angewendet auf Gleichung 6 . . .	7
3	Implizite Einschrittverfahren	8
4	Zeitaufgelöste Simulation	9
	Literaturverzeichnis	10

Abbildungsverzeichnis

1	Skizze des Aufbaus der Probe	5
---	--	---

Tabellenverzeichnis

1	Verwendete Parameter	5
---	--------------------------------	---

1 Einleitung

Perowskit-Solarzellen sind der neue Stern am Himmel der Photovoltaik. Innerhalb von wenigen Jahren sind diese neuartigen Materialien zu konkurrenzfähigen Dünnschicht-Solarzellen mit weit über 20% Wirkungsgrad erwachsen. Daraus begründen sich die enorme Popularität und auch die vielen Hoffnungen an diese Halbleiter-Materialklasse. Dennoch gibt es noch zahlreiche Probleme und ungeklärte Fragestellungen, die die Forschung adressieren kann. Andreas Bartelt und seine Gruppe untersuchen an der HTW Berlin diese Materialien mithilfe von zeitaufgelösten Photolumineszenz-Spektren (TRPL, *time resolved photo-luminescence*): das Material wird mithilfe eines Lasers angeregt und die aus der Anregung entstehende Aussendung von Licht in Abhängigkeit von der Zeit gemessen.

Um aus den experimentellen Daten Rückschlüsse auf Lebensdauern und Hinweise auf effizienzlimitierende Prozesse in den neuen Materialien zu ziehen, ist eine Simulation der Dynamiken im Halbleiter notwendig. In dieser Hausarbeit sollen Sie die Grundlagen einer solchen Simulation entwickeln.

Der Halbleiter der Dicke d zwischen zwei Materialien wird gleichmäßig in der Fläche bestrahlt und erzeugt so eine Ladungsträgerdichte u im Halbleiter (siehe Abbildung 1). Die Abhängigkeit von u in der Ebene senkrecht zur Dicke kann in guter Näherung vernachlässigt werden, so dass die Ladungsträgerdichte eine Funktion der Zeit t und der Tiefe z ist. Die Elektronendynamik im Halbleiter nach der Bestrahlung wird durch eine Diffusionsgleichung modelliert [3]. Die Ladungsträgerdichte $u(t, z)$ im Halbleiter genügt der parabolischen Differenzialgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - (k_1 + k_2 N_D)u - k_2 u^2 + s(t, z), \quad t \geq t_0, 0 < z < d \quad (1)$$

mit der Anfangsbedingung

$$u(t_0, z) = 0, \quad 0 \leq z \leq d \quad (2)$$

und den Randbedingungen

$$D \frac{\partial u}{\partial z}(t, 0) = S_L u(t, 0), \quad D \frac{\partial u}{\partial z}(t, d) = -S_R u(t, d), \quad t \geq t_0 \quad (3)$$

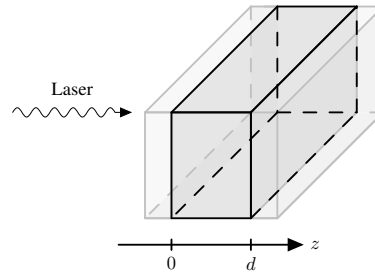


Abb. 1: Skizze des Aufbaus der Probe. Der Halbleiter aus Peroskit liegt zwischen zwei Materialien und wird in der Ebene senkrecht zu z als unendlich ausgedehnt angenommen. Die Bestrahlung mit Laserlicht erfolgt gleichmäßig aus der Richtung $z < 0$.

Hier ist $s(t, z)$ die Ladungsträgerdichte, die durch die Bestrahlung pro Zeiteinheit erzeugt wird, D die Diffusionskonstante, N_D die Dotierungsdichte, k_1 bzw. k_2 die Rekombinationskonstanten (Shockley Read Hall Rekombination, bzw. direkte Rekombination) und α die Absorptionskonstante. Die Konstanten S_L ($z = 0$) bzw. S_R ($z = d$) bestimmen die Rekombinationsraten an den jeweiligen Grenzschichten.

In dieser Arbeit sollen folgende Parameter verwendet werden

Parameter	d	D	K_1	k_2	N_D	S_L	S_R	α
Einheit	$[\mu m]$	$\left[\frac{cm^2}{s}\right]$	$\left[\frac{1}{s}\right]$	$\left[\frac{cm^3}{s}\right]$	$\left[\frac{1}{cm^3}\right]$	$\left[\frac{cm}{s}\right]$	$\left[\frac{cm}{s}\right]$	$\left[\frac{1}{cm}\right]$
Wert	0.3	0.003	10^6	10^{-8}	10^{15}	10	10^5	10^5

Tab. 1: Verwendete Parameter

Achtung: Verwenden Sie in der Simulation durchgehend μm und μs als Einheit!

Die Simulation von Gleichung 1 wird schrittweise entwickelt. In Abschnitt 2 wird zunächst die Zeitabhängigkeit vernachlässigt und eine Diskretisierung im Raum der stationären Gleichung mittels finiter Differenzen entwickelt. Der folgende Abschnitt 3 untersucht eine Klasse von numerischen Verfahren zur Lösung von Anfangswertproblemen, die besonders gut für den vorliegenden Fall geeignet sind. Im letzten Abschnitt 4 werden beide Ansätze mithilfe der Linienmethode kombiniert und eine numerische Lösung der Ausgangsgleichung berechnet.

2 Finite Differenzen der stationären Gleichung

In diesem Teil der Arbeit soll die stationäre Verteilung der Ladungsträger, d. h. für den Fall $\partial u / \partial t = 0$, bei kontinuierlicher Bestrahlung modelliert werden. In diesem Fall ist die Gleichung durch

$$D \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - (k_1 + k_2 N_D) u - k_2 u^2 = -s(z), \quad 0 < z < d \quad (4)$$

mit Randbedingungen

$$D \frac{\partial u}{\partial z}(0) = S_L u(0), \quad D \frac{\partial u}{\partial z}(d) = -S_R u(d) \quad (5)$$

gegeben. Hier ist $s(z)$ die Ladungsträgerdichte, die pro Zeiteinheit durch die externe Quelle erzeugt wird.

Die Gleichung soll näherungsweise mithilfe der Finite Differenzen Methode gelöst werden [4] (benötigte Abschnitte werden auf Moodle bereitgestellt). Dazu wird das Gebiet $z \in [0, d]$ in M gleich große Intervalle der Länge h aufgeteilt und die Knotenpunkte mit $0 = z_0 < z_1 < \dots < z_N = d$ bezeichnet. Die genäherte Ladungsdichte an den Stellen z_i wird mit u_i bezeichnet, d. h. es soll

$$u_i \approx u(z_i), \quad i = 0, 1, \dots, N$$

gelten. Für diese Werte wird ein Gleichungssystem hergeleitet und anschließend numerisch gelöst. Zwischenzeitlich werden Hilfsknoten an den Stellen $z_{-1} = -h$ und $z_{N+1} = d + h$ mit Werten u_{-1} und u_{N+1} verwendet, die jedoch später durch die Randbedingungen eliminiert werden.

2.1 Lineare stationäre Gleichung

Im ersten Schritt soll nur der in u lineare Anteil der Gleichung 4 ohne den quadratischen Term $-k_2 u^2$ untersucht werden:

$$D \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - k u = -s(z), \quad 0 < z < d \quad (6)$$

mit $k = k_1 + k_2 N_D$. Die Randbedingungen sind weiterhin durch Gleichung 5 gegeben.

Die Behandlung der stationären Gleichung erfolgt ähnlich zu der in [4, Abschnitt 8.8] beschriebenen Methode. Jedoch werden die Randbedingungen unterschiedlich behandelt. Folgende Aufgaben wurden bearbeitet.

2.1.1 Vorgehen aus [4, Abschnitt 8.8] angewendet auf Gleichung 6

3 Implizite Einschrittverfahren

4 Zeitaufgelöste Simulation

Literaturverzeichnis

- [1] HTW-Logo auf dem Deckblatt
https://de.wikipedia.org/wiki/Datei:Logo_HTW_Berlin.svg
Stand: 17.08.2018 um 14:49 Uhr
- [2] HTW-Logo in der Kopfzeile
<http://tonkollektiv-htw.de/>
Stand: 17.08.2018 um 14:53 Uhr
- [3] Baloch, Ahmer A. B. et al: „Analysis of Photocarrier Dynamics at Interfaces in Pervoskite Solar Cells by Time-Resolved Photoluminescence“, The Journal of Physical Chemistry C, Seiten 26805 - 26815 (2018).
- [4] Atkinson, Kendall E. und Han, Weimin: „Elementary Numerical Analysis“, J. Wiley & Sons, Hoboken, NJ (2004).