Dies ist der Titel der Abschlussarbeit der sich auch über mehrere Zeilen erstrecken kann

Abschlussarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades
Master of Science (M.Sc.)

an der

Hochschule für Technik und Wirtschaft Berlin
Fachbereich Wirtschaftswissenschaften II
Studiengang Angewandte Informatik

1. Prüfer: Max Mustermann
2. Prüfer: Max Mustermann

Eingereicht von: Max Mustermann
Matrikelnummer: s0000000
Datum der Abgabe: 25.04.2017

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

In dieser Hausarbeit sollen die Grundlagen einer Simulation der Dynamik in neuartigen Perowskit-Solarzellen gelegt werden. Diese Art der Dünnschicht Solarzellen erreicht hohe Wirkungsgerade von über 20% und ist somit für die Forschung von großer Interesse[Pro].

2 Finite Differenzen der stationären Gleichung

Im folgendem Kapitel soll die stationäre Verteilung der Ladungsträger bei kontinuierlicher Bestrahlung modelliert werden. Dadurch kann die zeitliche Abhängigkeit vernachlässige werden ($\frac{\partial u}{\partial t} = 0$)

Die allgemeine DGL ist gegeben durch:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - (k1 + k2 \cdot N_D) \cdot u - k2u^2 + s(t, z) \tag{2.1}$$

Mit $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$ folgt die stationäre Gleichung:

$$D \cdot \frac{du}{dt} - (k_1 + k_2 N_D) \cdot u - k_2 \cdot u^2 = -s(z), \quad 0 < z < d \tag{2.2}$$

mit den Randbedingungen:

$$D \cdot \frac{\partial u}{\partial z}(0) = S_L u(0), \quad D \frac{\partial u}{\partial z}(d) = -S_R u(d) \tag{2.3}$$

2.1 Lineare stationäre Gleichung

Im folgenden Kapitel soll nur der in u lineare Anteil der stationären, zeitunabhängigen Gleichung (Eq. 2.2) ohne den quadratischen Term $-k_2 u^2$ behandelt werden[Pro].

$$D\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - kz = -s(z), \qquad 0 < z < d, \tag{2.4}$$

2.2 Nicht Lineare stationäre Gleichung

Nichtlineare DGL:

$$D\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - (k_1 + k_2 N_D)u - k_2 u^2 = -s(z) \tag{2.5}$$

Diskretisierung der DGL:

$$D\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} - k \cdot u_i - k_2 \cdot u_i^2 = z_i \tag{2.6}$$

Mit den Randbedingung:

$$D \cdot \frac{\partial u}{\partial z}(0) = S_L u(0), \quad D\frac{\partial u}{\partial z}(d) = -S_R u(d) \tag{2.7}$$

Und den Approximationen der ersten Ableitung der Randbedingungen:

$$u'(0) \approx \frac{u_1 - u_{-1}}{2h} \quad u'(d) \approx \frac{u_{N+1} - u_{N-1}}{2h} \tag{2.8}$$

Damit folgt für die Randbedingung:

$$D \cdot \frac{u_1 - u_{-1}}{2h} = S_L u_0, \quad D\frac{u_{N+1} - u_{N-1}}{2h} = -S_R u_N \tag{2.9}$$

umgestellt nach u_{-1}

$$u_{-1} = -\frac{S_L 2h}{D} \cdot u_0 + u_1 \tag{2.10}$$

umgestellt nach u_{N+1}

$$u_{N+1} = -\frac{S_R 2h}{D} \cdot u_N + u_{N-1} \tag{2.11}$$

Damit folgt für die Funktion $F(u) = b$:

$$
\begin{aligned}
F_0 = &\quad \frac{D}{h^2}u_1 - \frac{2D+kh^2}{h^2}u_0 + \frac{D}{h^2}\cdot\left(-\frac{S_L 2h}{D}\cdot u_0 + u_1\right) - k_2 u_0^2 \\
&\vdots \\
F_i &= \frac{D}{h^2}u_{i+1} - \frac{2D+kh^2}{h^2}u_i + \frac{D}{h^2}\cdot u_{i-1} - k_2 u_i^2 \\
&\vdots \\
F_N &= \frac{D}{h^2}\left(-\frac{S_R 2h}{D}\cdot u_N + u_{N-1}\right) - \frac{2D+kh^2}{h^2}u_N + \frac{D}{h^2}u_{N-1} - k_2 u_N^2
\end{aligned}
$$

Vereinfacht zu :

$$
\begin{aligned}
F_0 = &\quad 2\cdot\frac{D}{h^2}u_1 - \left(\frac{S_L 2h + 2D + kh^2}{h^2}\right)u_0 - k_2 u_0^2 \\
&\vdots \\
F_i &= \frac{D}{h^2}u_{i+1} - \frac{2D+kh^2}{h^2}u_i + \frac{D}{h^2}\cdot u_{i-1} - k_2 u_i^2 \\
&\vdots \\
F_N &= -\frac{2D+kh^2+S_R 2h}{h^2}u_N + 2\frac{D}{h^2}u_{N-1} - k_2 u_N^2
\end{aligned}
$$

3 Implizite Einschrittverfahren

In diesem Kapitel werden Methoden zur Lösung von sogenannten steifen Anfangswertproblemen behandelt. Dazu soll Folgendes Chemisches Problem anhand einer DGL untersucht werden.

Die zu untersuchenden Reaktionsgleichungen sind:

$$A \to B, \quad B + B \to C + B, \quad B + C \to A + C \tag{3.1}$$

Die Dynamik der Konzentrationen der Komponenten werden durch folgende Anfangswertprobleme beschrieben:

$$\begin{aligned}
A : y_1' &= & -0.04 \cdot y_1 + 10^4 \cdot y_2 y_3 & & \\
B : y_2' &= & 0.04 \cdot y_1 - 10^4 \cdot y_2 y_3 & & -3 \cdot 10^7 y_2^2 \\
C : y_3' &= & & & 3 \cdot 10^7 y_2^2
\end{aligned}$$

mit den Anfangswerten

3.1 Entwicklung

3.2 Anwendung

Abbildungsverzeichnis

Literatur

[Pro] Prof. Dr. Andreas Zeiser. *Angewandte Mathematik: Projekt Zeitaufgelöste Photolumineszenz*. Moodle.