



Prof. Dr. Stephan Kümmel und sein Mitarbeiter Dipl.-Phys. Andreas Karolewski, Lehrstuhl für Theoretische Physik IV, im Rechenzentrum der Universität Bayreuth.

## Wegweisend für leistungsstarke Solarzellen: Hochpräzise Berechnungen molekularer Licht- absorptionen

Unter dem Stichwort „Light Harvesting“ („Lichternte“) hat sich weltweit eine Forschungsrichtung etabliert, die Physik, Chemie und Materialwissenschaften miteinander verbindet. Sie zielt auf innovative Systeme der Stromerzeugung, die nach dem Vorbild der pflanzlichen Photosynthese Lichtenergie in chemische Energie umwandeln. In diesem Zusammenhang interessiert sich die Forschung für neue kostengünstige Materialien, welche die Effizienz von Solarzellen erheblich steigern können. Hierfür hat jetzt ein Forschungsteam der Universität Bayreuth, in Kooperation mit dem Fritz-Haber-Zentrum an der Hebräischen Universität Jerusalem, wegweisende Berechnungen vorgelegt.

## **Die Herausforderung: Funktionsmaterialien mit möglichst breiter Lichtabsorption**

Materialien, die einen viel größeren Anteil des einfallenden Sonnenlichts aufnehmen können als die in der Photovoltaik bisher üblichen Baustoffe, sind ein wichtiger Beitrag zu leistungstärkeren Solarzellen. Nun setzt sich das Sonnenlicht aber aus Lichtstrahlen unterschiedlicher Wellenlängen zusammen. Diese werden bei einer Lichtbeugung, z.B. in einem Regenbogen, als farbige Abschnitte eines Spektrums sichtbar. Die angestrebten Materialien sollen folglich in der Lage sein, das Sonnenlicht möglichst lückenlos aufzunehmen, d.h. Lichtenergie aus möglichst vielen Abschnitten des Spektrums zu absorbieren.

An der gezielten Erforschung solcher Materialien arbeitet ein Bayreuther Forschungsteam um Professor Mukundan Thelakkat (Polymerwissenschaft), der das EU-Forschungsprojekt LARGECELLS leitet. Hier geht es insbesondere darum, polymere Funktionsmaterialien für organische Photovoltaikzellen zu entwickeln; d.h. für neuartige Solarzellen, die sich mit einem viel geringeren Energie- und Kostenaufwand herstellen lassen als rein anorganische Photovoltaikzellen aus Silizium.

In aktuellen Forschungsarbeiten verdichteten sich die Indizien, dass eine bestimmte Gruppe von Molekülen zu einer ungewöhnlich breiten Lichtabsorption fähig sein könnte. Der zentrale Baustein dieser Moleküle ist Naphthalin-Diimid (NDI); an zwei Stellen des NDI sind Thiophenringe angehängt. Jeder Thiophenring besteht aus vier Kohlenstoff- und Wasserstoffatomen sowie einem Schwefelatom. Die Moleküle, die das Interesse der

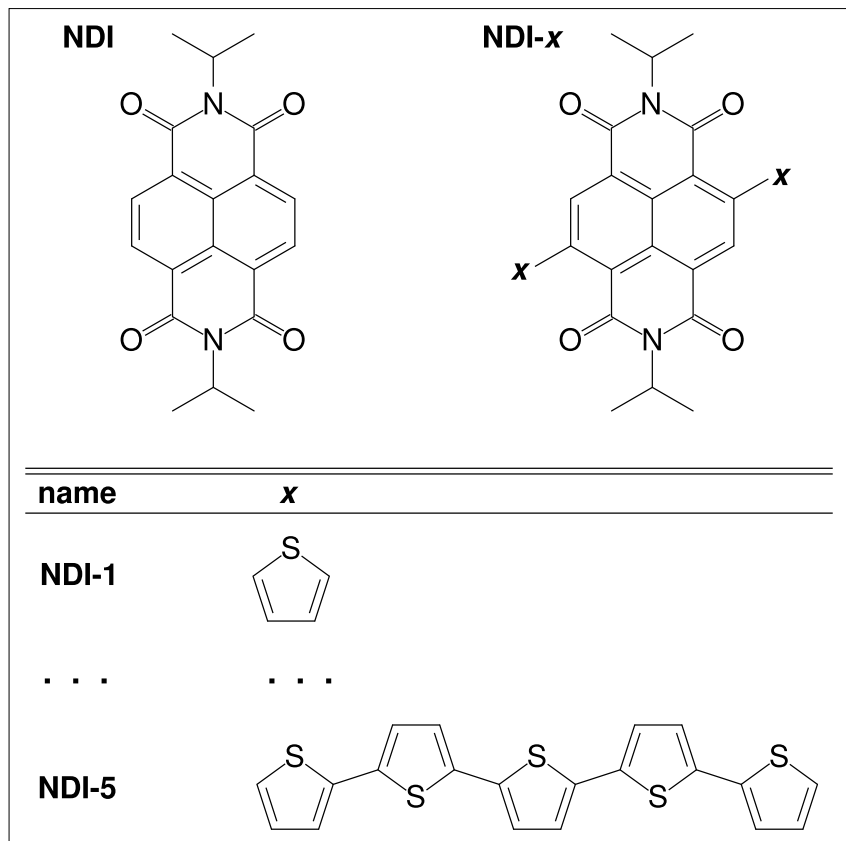
### **Hintergrund-Info zur molekularen Lichtabsorption**

Materialien zu entwickeln, die zu einer möglichst lückenlosen Absorption des Sonnenlichts fähig sind, ist alles andere als trivial. Dies zeigt ein Blick auf die physikalischen Zusammenhänge: Aus prinzipiellen Gründen nimmt ein einzelnes Molekül immer nur spezielle Anteile des Sonnenlichts auf, nämlich Licht mit bestimmten Wellenlängen.

Genau genommen sind es die Elektronen des Moleküls, die Licht absorbieren. Dies geschieht dadurch, dass Elektronen durch einen Lichtstrahl in einen höheren Erregungszustand versetzt werden und so die im Licht enthaltene Energie aufnehmen. Physikalisch ausgedrückt: Elektronen absorbieren ein Photon, d.h. ein Lichtquantum, das durch die Wellenlänge des Lichtstrahls und die daraus resultierende Lichtenergie definiert ist. Welches Lichtquantum auf diese Weise aufgenommen wird, richtet sich nach dem spezifischen Energiezustand, in dem sich die Elektronen befinden.

Welche speziellen Anteile des Sonnenlichts von einem einzelnen Molekül absorbiert werden, hängt folglich von den Energiezuständen seiner Elektronen ab. Diese Zustände wiederum sind nicht zuletzt durch die Bestandteile und die Struktur des Moleküls bedingt.

*Deshalb gilt prinzipiell:* Ein Material, das zu einer breiten Absorption des Sonnenlichts fähig ist, kann nicht nur aus einer einzigen chemischen Verbindung bestehen. Infrage kommt allein eine Mischung unterschiedlicher Verbindungen, die sich bei der Lichtabsorption ergänzen.



### Struktur der modifizierten NDI-Moleküle

Obere Grafik, rechts:

„x“ steht für die Seitenarme, die sich aus Thiophenringen zusammensetzen und an den NDI-Kern angehängt werden.

Untere Grafik:

Bei NDI-1 besteht ein Seitenarm nur aus einem Thiophenring; bei NDI-5 aus 5 verketteten Ringen.

Bayreuther Forscher geweckt haben, unterscheiden sich allein durch die Anzahl der Ringe, die – wie zwei Arme – links und rechts an das NDI angehängt werden: „NDI-1“ heißt ein Molekül, das an jeder Seite jeweils einen Thiophenring hat; bei „NDI-2“ sind es jeweils 2 Ringe; und so fort. Verhält es sich tatsächlich so, dass die verschiedenen NDI-Moleküle Lichtenergie aus jeweils verschiedenen Abschnitten des Spektrums absorbieren? Ist daher eine Mischung von NDI-Molekülen zu einer breiten Absorption des Sonnenlichts fähig?

### Computersimulationen:

#### Ein effizienter Wegweiser zu einer neuen Solarzellen-Generation

Diese Hypothese im Labor zu überprüfen, ist außerordentlich zeitaufwändig. Professor Stephan Kümmel, der an der Universität Bayreuth den Lehrstuhl für Theoretische Physik IV innehat, und sein Mitarbeiter Dipl.-Phys. Andreas Karolewski fanden jedoch einen Ausweg. Es gelang ihnen, die empirischen Laborversuche durch theoretische Berechnungen am Computer zu ersetzen. Mithilfe von Computersimulationen konnten sie nachweisen, dass modifizierte NDI-Moleküle Licht verschiedener Wellenlängen aufnehmen; je nachdem, wie viele Thiophenringe ihnen angehängt sind. Mehr noch: Eine Mischung aus NDI-Molekülen, denen beidseitig bis zu sieben Thiophenringe angehängt sind, kann Lichtenergie aus fast allen Abschnitten des Sonnenlicht-Spektrums absorbieren; bis hin

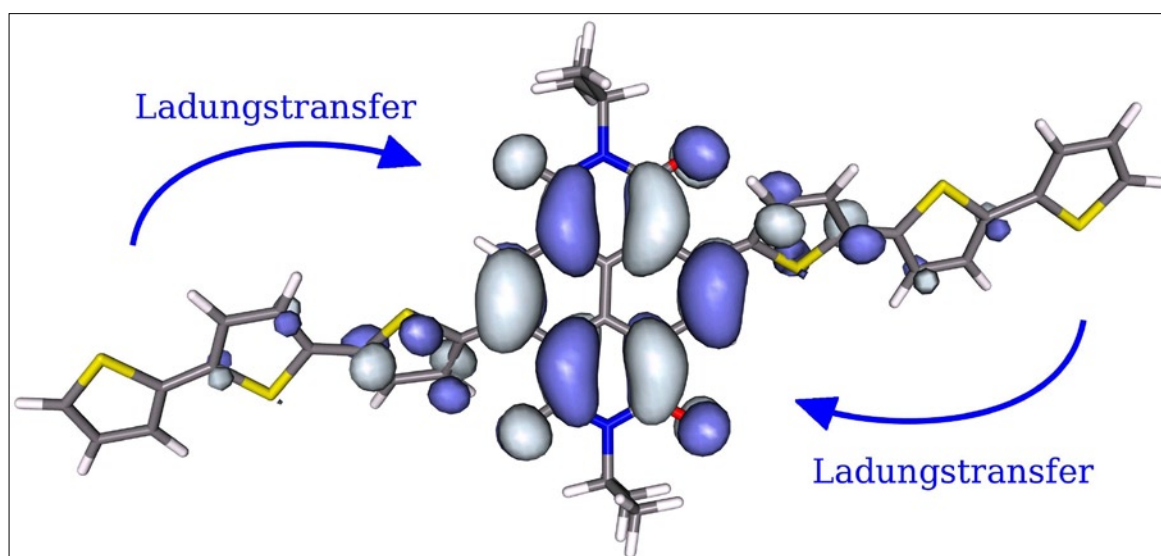
zu den energiearmen langwelligen Lichtstrahlen. Entscheidend ist dabei der Aufbau der NDI-Moleküle: Von den Thiophenringen, die wie zwei Arme an den Außenseiten hängen, wird elektrische Ladung in den NDI-Kern geleitet. Physikalisch gesprochen: Die Thiophenringe fungieren als Donor, der NDI-Kern als Rezeptor.

Erste Laborversuche der Bayreuther Polymerwissenschaftler haben die Berechnungen bestätigt. Damit eröffnet sich eine hochinteressante Perspektive für eine neue Generation von Solarzellen. Denn eine Mischung aus NDI-Molekülen, die sich nur durch die Zahl der Thiophenringe unterscheiden, lässt sich im Industriemaßstab außerordentlich kostengünstig herstellen. Allerdings müssen zuvor weitere Aspekte geklärt werden, z.B. die Frage, wie die in dem neuen Material absorbierten hohen Energiemengen am effizientesten in Solarstrom umgesetzt werden.

### Erfolgreich mit leistungsstarken Partnern

Die Berechnungen der Lichtabsorptionen sind auch das Ergebnis einer erfolgreichen Zusammenarbeit mit kompetenten Partnern. Auf internationaler Ebene leistete die Arbeitsgruppe von Professor Roi Baer am Fritz Haber-Zentrum für Molekulare Dynamik an der Hebräischen Universität Jerusalem wertvolle Unterstützung. Lokal verstärkt das Graduiertenkolleg 1640 „Fotophysik synthetischer und biologischer multichromophorer Systeme“ die Forschungen auf dem Gebiet der organischen Photovoltaik. Es wurde vor kurzem von der Deutschen Forschungsgemeinschaft an der Universität Bayreuth eingerichtet.

Zudem macht es die leistungsstarke Infrastruktur im Rechenzentrum der Universität Bayreuth möglich, komplexe Berechnungen in vergleichsweise kurzer Zeit durchzuführen. „Die Kooperation mit unserem Rechenzentrum, das einen von der DFG geförderten High-Performance-Computing-Cluster beherbergt, ist ausgezeichnet. Sie bedeutet eine ganz



Beispiel eines durch Thiophenringe modifizierten NDI-Moleküls: Von den Thiophenringen, die an den Außenseiten hängen, wird elektrische Ladung in den NDI-Kern geleitet.

wichtige Unterstützung für unsere physikalische Grundlagenforschung“, freut sich Professor Stephan Kümmel.

Sein Mitarbeiter Dipl.-Phys. Andreas Karolewski war 2009 ausgewählt worden, um eigene Forschungsideen bei der Jahrestagung der Nobelpreisträger in Lindau vorzustellen. Derzeit promoviert er in Bayreuth mit einem Stipendium des Graduiertenkollegs 1640 in der BayNAT, der Bayreuther Graduiertenschule für Mathematik und Naturwissenschaften.

### **Veröffentlichung**

A. Karolewski, T. Stein, R. Baer, S. Kümmel,  
Communication: Tailoring the optical gap in light-harvesting molecules,  
in: Journal of Chemical Physics, 134 151101-151104 (2011),  
DOI-Bookmark (Link): 10.1063/1.3581788

### **Ansprechpartner**

Für die Computersimulationen und physikalischen Berechnungen:

Prof. Dr. Stephan Kümmel  
Theoretische Physik IV  
Universität Bayreuth  
D-95440 Bayreuth  
Tel.: +49 (0)921 / 55-3220  
E-Mail: [stephan.kuemmel@uni-bayreuth.de](mailto:stephan.kuemmel@uni-bayreuth.de)

Für das EU-Projekt LARGECELLS:

Prof. Dr. Mukundan Thelakkat  
Angewandte Funktionspolymere  
Universität Bayreuth  
D-95440 Bayreuth  
Tel.: +49 (0)921 / 55-3108  
E-Mail: [mukundan.thelakkat@uni-bayreuth.de](mailto:mukundan.thelakkat@uni-bayreuth.de)

**Text und Redaktion:** Christian Wißler

#### **Abbildungen:**

Foto Seite 1: Christian Wißler; zur Veröffentlichung frei.  
Abbildungen Seite 3 und 4: Prof. Dr. Stephan Kümmel;  
mit Autorennachweis zur Veröffentlichung frei.

#### **Download:**

Abbildungen in hoher Auflösung zum Download:  
[www.uni-bayreuth.de/blick-in-die-forschung/14-2011-Bilder/](http://www.uni-bayreuth.de/blick-in-die-forschung/14-2011-Bilder/)