

Im Leibniz-Institut für Photonische Technologien e.V. besteht in der Arbeitsgruppe Halbleiter-Nanostrukturen der Forschungsabteilung Funktionale Grenzflächen die Möglichkeit der Anfertigung einer

Masterarbeit

zur Simulation supramolekularer Strukturen

Das Leibniz-IPHT ist eine außeruniversitäre Forschungseinrichtung mit enger Anbindung an die Friedrich-Schiller-Universität Jena und Mitglied der Leibniz-Gemeinschaft.

In funktionalen organischen Schichten, bspw. für Sensoren, Solarzellen oder LEDs, werden deren Eigenschaften, wie Diffusion kleiner Analytmoleküle, Absorptionsspektren und Ladungsträgermobilitäten, entscheidend von der supramolekularen Struktur bestimmt. Die Ausprägung verschiedener supramolekularer Strukturen kann, den Anforderungen der anvisierten Anwendung entsprechend, durch Einstellung molekularer und Prozess-Parameter gesteuert werden. Am Leibniz-IPHT werden Methoden entwickelt, verschiedenste solcher supramolekularer Strukturen systematisch in Computermodellen aus einzelnen Molekülen aufzubauen und deren oben genannte Eigenschaften quantenchemisch zu simulieren.

Das Ziel der Masterarbeit ist supramolekulare Strukturen systematisch aufzubauen und deren thermodynamische, UV-vis spektroskopische und elektrochemische Eigenschaften zu simulieren. Es sollen dabei Systeme im Fokus stehen, die verschiedenen supramolekulare Strukturen ausprägen können, die sich in einer der oben genannten Eigenschaften unterscheiden, sodass eine leichte Evaluierung der Strukturen durch Vergleich mit experimentellen Daten durchführen lässt. Die entsprechenden niedermolekularen Farbstoffmoleküle werden unserem Portfolio an Materialien für die Photovoltaik und Sensorik entnommen. Die Arbeit findet in Kooperation mit dem Quantenchemie-Startup SciClus GmbH & Co. KG statt.

Aufgabenbereich:

- Einarbeitung in verschiedene Standard-Quantenchemieprogramme
- Einarbeitung in Programme zum Aufbau supramolekularer Strukturen
- Aufbau supramolekularer Strukturen
- Simulation der Eigenschaften supramolekularer Strukturen
- Vergleich mit experimentellen Daten

Voraussetzungen:

- Bachelorabschluss in einem naturwissenschaftlichen oder technischen Studiengang
- Übung im Umgang mit dem Kommandozeileninterpreter BASH

Interessenten wenden sich bitte an Dr. Martin Presselt (martin.presselt@leibniz-ipht.de) oder Prof. Dr. Benjamin Dietzek (benjamin.dietzek@uni-jena.de)