

Leobener Wissenschaftler erhält Sonderforschungspreis für Simulation und Modellierung

Priv.-Doz. Dr. Peter Puschnig erhielt gestern den Sonderforschungspreis für Simulation und Modellierung des Landes Steiermark. Seine Arbeit wurde in der renommierten Zeitschrift „Science“ unter dem Titel „Reconstruction of Molecular Orbital Densities from Photoemission Data“ (P. Puschnig et al., Science 326, 702-706 (2009)) veröffentlicht.

Biegsame Bildschirme

Ultradünne Schichten aus organischen Molekülen bilden die Grundlage für zukünftige Halbleitertechnologien mit neuartigen Einsatzmöglichkeiten. Die herausragenden Eigenschaften organischer Halbleiter, wie ihre mechanische Flexibilität oder ihr elektro-optisches Verhalten, machen biegsame Bildschirme ebenso wie ultradünne und kostengünstige Solarzellen möglich. Doch vor dem alltagstauglichen Einsatz organischer Halbleiter gilt es, die Wechselwirkungen zwischen organischem Material und anorganischen Trägersubstanzen besser zu verstehen.

Es ist erstmals gelungen, die Elektronenverteilung in einzelnen Molekülen mit Hilfe des sogenannten photoelektrischen Effekts zu vermessen. Diese in „Science“ veröffentlichte Methode bietet damit eine wichtige Grundlage für die Verbesserung organischer Halbleiterelemente. Entscheidend für den Erfolg des neuen Ansatzes war die mathematische Transformation der Messdaten. Erst diese erlaubte die Interpretation der Elektronenverteilung und damit Rückschlüsse auf die Eigenschaften organischer Halbleiterelemente an der Grenzfläche zu metallischen Kontakten – ein Schlüssel, um die Funktionsweise organischer Halbleiterbauelemente zu verbessern und deren Effizienz zu steigern.

Methodik

Die Eigenschaften eines organischen Moleküls werden ganz wesentlich von bestimmten Elektronenzuständen definiert, dem obersten besetzten und dem untersten unbesetzten Molekülorbital. Kann die Verteilung der Elektronen in diesen Zuständen bestimmt werden, dann kann auch die Funktionsweise von organischen Halbleiterbauelementen verbessert und deren Effizienz gesteigert werden. Bisher fehlte es jedoch an leistungsstarken Methoden, um eben diese Elektronenverteilung zu messen. Mithilfe des photoelektrischen Effekts wurden nun durch Bestrahlung mit ultravioletter Licht einzelne Elektronen aus organischen Molekülen „herausgeschlagen“. Die Richtung und Geschwindigkeit der so frei gesetzten Elektronen wurden anschließend mit hochsensiblen Detektoren gemessen und lieferten die grundlegenden Daten zur Berechnung der Elektronenverteilung im Molekül. Dabei wurde eine monomolekulare Lage des Moleküls Hexaphenyl untersucht, also eine Schicht, die in einer Dicke von nur einem Molekül auf eine Kupferoberfläche aufgebracht worden war. Die eigentlichen Messungen wurden vom Grazer Teil des Teams an der Berliner Synchrotronstrahlungsquelle BESSY (Berliner Elektronen-Speicherring Gesellschaft für Synchrotronstrahlung) durchgeführt.

Auswertung

Die Auswertung und Interpretation der so gewonnenen Daten wurden am Lehrstuhl für Atomistic Modelling and Design of Materials der Montanuniversität Leoben durchgeführt. Dabei zeigte sich eine ganz charakteristische Verteilung der emittierten Elektronen. Für die Interpretation dieser Verteilung wurde der Prozess der Photoemission simuliert, das heißt, der Übergang von einem im Molekül gebundenen Elektronenzustand zu einem freien Elektronenzustand durch Anregung mit Photonen. Dazu wurden zunächst die Molekülzustände mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie quantenmechanisch berechnet. Die mathematische Formulierung der Übergangswahrscheinlichkeit des Photoemissionsprozesses lieferte das Ergebnis, dass die beobachtete Verteilung der Elektronen im Detektor durch eine mathematische Transformation mit der ursprünglichen Verteilung im Molekül verknüpft ist. Durch den Vergleich mit Simulationsergebnissen wurde es möglich, aus den Messdaten die Verteilung der Elektronen in einzelnen Molekülen zu rekonstruieren.

Der Wert der neuen Methode liegt insbesondere darin, dass nun das Verhalten von Elektronen in Grenzflächen zwischen organischen Halbleitern und Metallen genau gemessen werden kann. Damit wurde ein grundlegender Beitrag für die zukünftige Nutzung organischer Halbleiter geleistet.

Weitere Informationen

Priv.-Doz. Dr. Peter Puschnig

Lehrstuhl für Atomistic Modelling and Design of Materials – Montanuniversität Leoben

Tel.: 03842/402-4403

E-Mail: peter.puschnig@unileoben.ac.at

Bildtext: Priv.Do. Dr. Peter Puschnig erhielt den Sonderpreis für Simulation und Modellierung des Landes Steiermark.