

Organische Halbleiter verstehen: von der Quantenwelt zu makroskopischen Bauelementen

Understanding Organic Semiconductors: From the Quantum-Level to Macroscopic Devices

Karin Zojer, Egbert Zojer



Karin Zojer beschäftigt sich mit der Simulation des Ladungstransports in organischen Bauelementen mit dem Ziel, das Wechselspiel zwischen der Bauelementarchitektur und den Eigenschaften der organischen Halbleitermaterialien bzw. ihrer Grenzflächen zu verstehen. Ihre Arbeit baut auf dem Know-how auf, das sie in Zusammenarbeit mit mehreren Studierenden in der Arbeitsgruppe von Ferdinand Schürer am Institut für Theoretische Physik und Computational Physics in den vergangenen Jahren generiert hat.

Karin Zojer focuses on the simulation of charge transport in organic electronic devices to elucidate the interplay between device architecture and the properties of the organic semiconducting material with an emphasis on understanding the role of interfaces. The work builds on the know-how generated with several students while working in the group of Ferdinand Schürer at the Institute of Theoretical and Computational Physics.

Bildschirme auf Basis organischer Halbleiter sind mittlerweile Teil des Massenmarktes und die durch sie erzielbaren Umsätze werden für 2017 auf 17 Milliarden US-Dollar geschätzt.¹ Auch innovative Elektronikkonzerne erkennen dieses Potenzial. Dies zeigt beispielsweise die Übernahme von NOVALED (einer Spin-off-Firma der TU Dresden und wie wir Teil des gerade gestarteten THINFACE-Projekts) durch die Samsung Group und ihre Tochterunternehmen. Bevor es zu einem kommerziellen Einsatz organischer Halbleiter in anderen Bereichen wie elektronischen Schaltungen und Solarzellen kommt, müssen aber noch einige technologische Hürden genommen werden.

Um dies zu erreichen, ist ein tiefgehendes Verständnis der physikalischen Eigenschaften dieser Materialien unerlässlich. Dieses lässt sich aber nur durch eine Kombination experimenteller Untersuchungen mit Multiskalensimulationen erreichen (vgl. Abb. 1; in Analogie zur Entwicklung theoretischer Modelle von „komplexen chemischen Systemen“, wofür im Jahr 2013 der Chemie-nobelpreis vergeben wurde). Tatsächlich folgen heutzutage Simulationen von Materialeigenschaften typischerweise einem Multiskalenansatz, der von der Quantenmechanik bis zu mesoskopischen Modellen reicht. Das Ziel unserer Forschungsaktivitäten ist es, einen entscheidenden Schritt weiterzugehen und eine nahtlose Integration von Material- mit Bauelementsimulationen zu schaffen. Dies soll durch die Kombination einer Bottom-up- mit einer Top-down-Strategie erreicht werden (Abb. 1).

Wissenschaftlicher Zugang

Erstere fußt auf der Erfahrung der Arbeitsgruppe von Egbert Zojer (vgl. Abb. 2a und b), welche sich

Organic semiconductors (OSC) play an increasingly important role in the semiconductor world. OSC-based displays in particular have entered the market, and their revenues are expected to exceed 17 billion US dollars by 2017.¹ Such predictions are taken seriously by innovative electronics companies, as exemplified by the recent 260-million-euro take-over of TU Dresden spinoff NOVALED (one of our partners in the THINFACE project) by Samsung and its subsidiaries. Market expectations are also high for OSC-based solid-state lighting applications, while the full potential for electronic circuits and organic solar-cells has still to be realized.

This requires deep insight into the fundamental physical processes occurring in such devices, and this can only be achieved by a combination of experimental studies and multi-scale simulations (see Fig. 1; analogous to the situation in “complex chemical systems”, where the development of the necessary modeling approaches was rewarded with the 2013 Nobel Prize in Chemistry). Indeed, nowadays, the commonly applied strategy to simulate materials properties starts from the quantum level and (cf. Fig. 1) proceeds to the mesoscopic scale via several intermediate steps. The long-term goal of our research is to go beyond that by seamlessly integrating materials simulations with device modeling, combining a bottom-up and a top-down strategy (cf. Fig. 1).

The scientific approach

The bottom-up approach builds on the experience in the E. Zojer group (cf. Fig. 2a and b) with the quantum-mechanical description of OSCs,² which in the past years has focused on fundamental properties of interfaces relevant for organic devices. To account for the crucial role of disor-

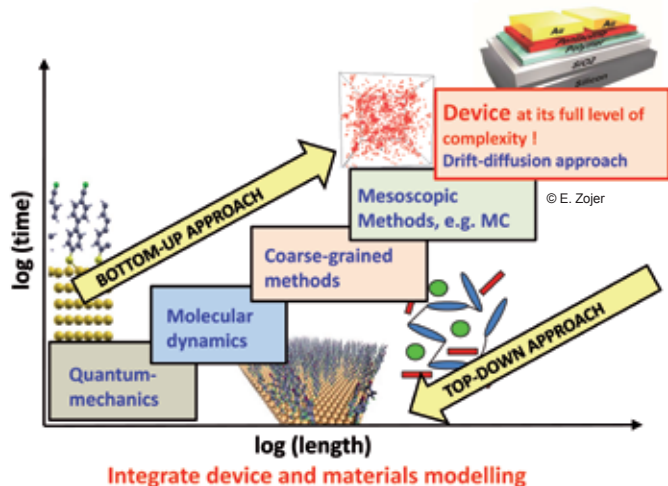


Abb. 1/ Fig. 1

in den letzten Jahren auf die quantenmechanische Simulation organischer Halbleiter spezialisiert hat.² Der Fokus lag dabei in den vergangenen Jahren auf der Beschreibung von für Bauelemente relevanten Grenzflächen. Um Unordnungseffekte modellieren zu können, werden diese Berechnungen mit Moleküldynamiksimulationen kombiniert. In Zukunft sollen auch makroskopische Ansätze einbezogen werden. Ziel dieser Aktivitäten ist es, mithilfe dieser „Computerexperimente“ fundamentale Materialeigenschaften zu verstehen, um so neuartige Materialien designen zu können. Dabei sind sowohl die neuesten methodischen Entwicklungen unserer Kooperationspartnerinnen und -partner als auch die langjährige Erfahrung mit verschiedensten experimentellen Techniken von großem Nutzen. Die Top-down-Strategie startet von einem makroskopischen Drift-Diffusionsansatz, wie er von Karin Zojer, Ferdinand Schürer und den mit ihnen arbeitenden Studierenden in den vergangenen Jahren erfolgreich implementiert wurde. Damit gelang es beispielsweise, die Rolle von Phasenseparation in organischen Solarzellen und von Grenzflächen in organischen Transistoren (vgl. Abb. 2c) besser zu verstehen. Diese Studien werden einerseits im Rahmen eines Elise-Richter-Stipendiums, das Karin Zojer vom FWF zuerkannt wurde, fortgeführt, andererseits beginnen erste Arbeiten zur direkten, selbstkonsistenten Kombination der Drift-Diffusionssimulationen mit Monte-Carlo-Techniken zur mikroskopischen Beschreibung des Ladungsträgertransports (vgl. Abb. 1).

Erfolgreiche Kooperationen

Um dieses Ziel zu erreichen, ist Zusammenarbeit auf verschiedenen Ebenen unerlässlich: Zentral sind dabei unsere aus exzellenten Studierenden bestehenden Arbeitsgruppen (Abb. 3). Daneben ist unsere Forschung eng mit weiteren Aktivitäten am

der in these systems, the applied “toolbox” has recently been extended to molecular dynamics simulations; in the future, more macroscopic techniques will also be included. The main aim in these studies is either to explain unexpected experimental observations or to predict materials with novel properties. The focus is on materials design aspects, building on the latest methodological developments in partner groups and on the extensive experience with various experimental techniques.

The top-down strategy starts from macroscopic drift-diffusion based calculations that have been performed during the past years by Karin Zojer, Ferdinand Schürer, and the students working with them. The simulations helped understanding the role of phase separation in hybrid solar cells, the mechanisms of charge-carrier injection into organic transistors (cf. Fig. 2c), and the processes underlying device-tuning approaches through interface modifications. These efforts will be continued, for example, in the framework of an Elise Richter grant awarded to Karin Zojer by the FWF. Current efforts also aim at the seamless combination of Monte Carlo type techniques aiming at a microscopic, statistical description of charge-transport into the drift-diffusion simulations (cf. Fig. 1).

Successful collaborations

For achieving these goals, a team-effort is absolutely crucial and has to occur on different levels. Within our research groups, we can build on a team of highly skilled and motivated students (see Fig. 3); on a “Graz University of Technology level”, our work is closely linked to research activities at the Institutes of Solid State Physics and the Institute of Chemical Technology of Materials and is strongly supported by the Scientific Computing Department of the Graz University of Technology IT Services. Furthermore, we are well embedded in the Styrian research area

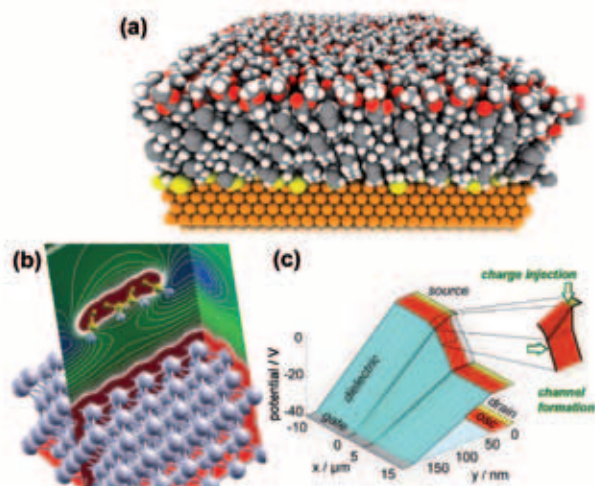


Abb. 2/ Fig. 2

Abb. 1: Schematische Darstellung der Bottom-up- und Top-down-Strategie, um eine tatsächliche Multiskalenbeschreibung organischer Bauelemente zu ermöglichen.

Fig. 1: Schematic representation of the bottom-up and top-down approaches to achieve a true multi-scale theoretical description of actual organic devices.

Abb. 2: a) Mithilfe einer Molekulardynamiksimulation bestimmte Unordnung in einer esterhaltigen selbstassemblierten Monolage aus Alkylthiolen.

b) Quantenmechanisch berechnete elektrostatische Energie an einer metall-organischen Grenzfläche.

c) Elektrostatisches Potenzial im Querschnitt eines organischen Dünnschichttransistors als Ergebnis einer Drift-Diffusionssimulation.

Fig. 2: a) Disorder in an ester-containing aliphatic self-assembled monolayer calculated by classical molecular dynamics.

b) Electrostatic potential energy distribution at a metal-organic interface determined by quantum-mechanical calculations.

c) Electrostatic potential in the cross-section of an organic thin-film transistor, as obtained by drift-diffusion based simulations.

Abb. 3: Arbeitsgruppe von Egbert

Zojer (v. l. n. r.): Veronika Obersteiner, David A. Egger, Elisabeth Verwüster, Egbert Zojer, Elisabeth Wruß, Gernot Kraberger, Iris Hehn, Bernhard Kretz.

Fig. 3: Group of Egbert Zojer (from left to right): Veronika Obersteiner, David A. Egger, Elisabeth Verwüster, Egbert Zojer, Elisabeth Wruß, Gernot Kraberger, Iris Hehn, Bernhard Kretz.



Egbert Zojer und seine Arbeitsgruppe am Institut für Festkörperphysik beschäftigen sich mit der atomistischen Simulation organischer Halbleiter. Ziel ist dabei die Etablierung zuverlässiger Zusammenhänge zwischen der chemischen bzw. morphologischen Struktur der Materialien und ihren elektronischen Eigenschaften, um Möglichkeiten zur Entwicklung neuartiger „Materialsysteme“ aufzuzeigen.

Egbert Zojer and his group at the Institute of Solid State Physics focus on the atomistic simulation of organic semiconductors. Their goal is to establish a firm understanding of the relation between the chemical and morphological structure of organic semiconductors and their electronic properties in order to portray strategies for the development of novel materials systems.



Abb. 3/ Fig. 3

© K. Zojer

Institut für Festkörperphysik und am Institut für Chemische Technologie von Materialien vernetzt und wir profitieren sehr von der Unterstützung der Abteilung für Scientific Computing des Zentralen Informatikdiensts der TU Graz. Durch enge Kooperationen mit Joanneum Research und Kontakten mit dem NanoTecCenter Weiz, der Uni Graz und der Montanuniversität Leoben ist unsere Arbeit gut in den steirischen Forschungsraum eingebettet. Natürlich spielen auch internationale Kooperationen eine große Rolle. Unsere Zusammenarbeit mit Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftern des Georgia Institute of Technology, der Chinesischen Akademie der Wissenschaften, der Université de Mons und der Humboldt-Universität zu Berlin hat bereits Tradition. Aktuell spielen für uns die Kooperationen mit der Universität Heidelberg, dem Fritz-Haber-Institut, der Universität Chiba, der Universität Bologna, der Comenius-Universität Bratislava und dem Weizmann Institute of Science die Hauptrolle. Weitere gemeinsame Aktivitäten werden sich aus dem gerade begonnenen Marie-Curie-Projekt THINFACE ergeben, das aus dem PCAM (Physics and Chemistry of Advanced Materials)-Netzwerk³ hervorgegangen ist. Diesem ist die TU Graz auf Betreiben von Dekan Wolfgang Ernst im Jahr 2011 beigetreten. Es umfasst 14 europäische Universitäten und verleiht „mobilen“ Studierenden ein „Europäisches Doktorat“. ■

with close ties to Joanneum Research, the NanoTecCenter Weiz, and the Universities of Graz and Leoben. Naturally also, international collaborations play a crucial role. These involve(d) the Georgia Institute of Technology, the Chinese Academy of Sciences, the Université de Mons, the Humboldt Universität zu Berlin, and more recently especially the Universität Heidelberg, the Fritz-Haber Institute, Chiba University, the University of Bologna, Comenius University Bratislava, and the Weizmann Institute of Science. Additional joint activities are currently being established especially through the recently started Marie Curie Project THINFACE, an initiative that started within the PCAM (Physics and Chemistry of Advanced Materials) network³ that Graz University of Technology joined in 2011 due to an initiative of dean Wolfgang Ernst. PCAM joins 14 European universities and awards a “European Doctorate” to students actively pursuing research also in partner universities. ■

Literatur/References:

¹ www.statista.com/statistics/267097/revenue-forecast-for-the-global-oled-tv-market-until-2015/

² <http://www.if.tugraz.at/web.php?10>

³ www.pcam-doctorate.eu/