

Theoretische Beschreibung der Photoemission von organischen Molekülfilmen

Projektnummer: P23190-N16

Ultradünne Schichten aus organischen Molekülen bilden die Grundlage für zukünftige Halbleitertechnologien. Die mechanische Flexibilität organischer Moleküle erlaubt völlig neue Einsatzmöglichkeiten. Biegsame Bildschirme werden ebenso möglich wie kostengünstige Solarzellen. Doch vor dem alltagstauglichen Einsatz organischer Halbleiter gilt es die Wechselwirkungen zwischen organischem Material und anorganischen Trägersubstanzen besser zu verstehen. Diese werden wesentlich von bestimmten Elektronenzuständen des Moleküls definiert, nämlich dem obersten besetzten, und untersten unbesetzten Molekülorbital. Methoden, die Elektronenverteilung in diesen Orbitalen bestimmen können, tragen somit zu einem Verständnis der Wirkungsweise von organischen Halbleitern bei und helfen mit deren Effizienz zu steigern. Dieser Antrag untersucht die Photoemission von organischen Molekülfilmen mittels theoretischer ab-initio Methoden. Für gewöhnlich wird die winkelaufgelöste Photoemissions-spektroskopie (ARPES) dazu verwendet, um die Bandstruktur von Festkörpern experimentell zu ermitteln. In kürzlich erschienenen Arbeiten wurde jedoch gezeigt, dass diese Methode auch dazu dienen kann, die räumliche Elektronenverteilung in diskreten Molekülzuständen zu bestimmen. Dies wird durch einen Zusammenhang zwischen der gemessenen Winkelverteilung der emittierten Elektronen und der Fourier-Transformierten des betrachteten Molekülorbitals ermöglicht [1, 2]. Diese ersten Ergebnisse stellten die Machbarkeit dieser Messmethode unter Beweis, jedoch wurden einige vereinfachende Annahmen in der theoretischen Beschreibung getroffen. Der vorliegende Antrag zielt nun auf eine Verbesserung der theoretischen Beschreibung des Photoemissionsprozesses von organischen Filmen ab, um eine quantitative Interpretation von ARPES Daten zu ermöglichen. Die erwarteten Ergebnisse sind nicht nur wichtig für ein grundsätzliches Verständnis der Photoemission von organischen Molekülen, sondern auch eine Voraussetzung für die Interpretation von experimentellen Daten. Dies erscheint besonders wichtig in Hinblick auf jüngste Entwicklungen in der Instrumentierung von ARPES Messgeräten. Diese Daten, in Verbindung mit Untersuchungen mit dem Rastertunnel-mikroskop, werden dazu beitragen, einzelne Molekülorbitale sichtbar zu machen. Dies wiederum rückt die Erzeugung von organischen Halbleitergrenzschichten mit definierten Eigenschaften einen Schritt näher.

[1] P. Puschnig et al. "Reconstruction of Molecular Orbital Densities from Photoemission Data", *Science* 326, 702-706 (2009).

[2] J. Ziroff et al., "Hybridization of Organic Molecular Orbitals with Substrate States at Interfaces: PTCDA on Silver", *Phys. Rev. Lett.* 104, 233004 (2010).