

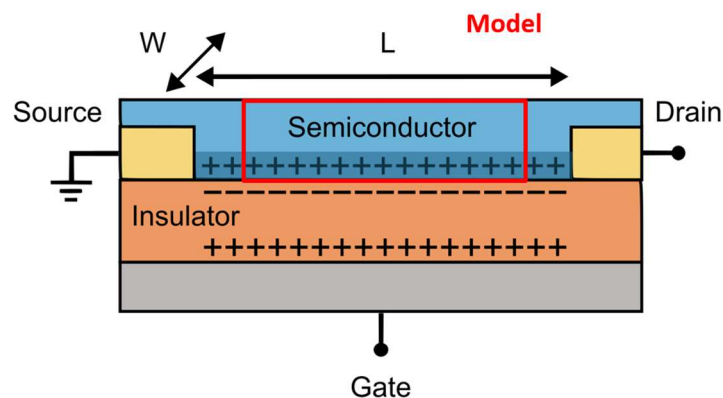
KMC-Simulationen von OFETs mit senkrecht zueinander ausgerichteten Polymerketten-Schichten

Warum OFETs?

Organische Feld-Effekt-Transistoren (OFETs) werden in Displays und in der Bioelektronik eingesetzt. Obwohl sie gut funktionieren, ist kaum verstanden, wie dieses Bauteil bei hohen Source-Drain Spannungen eigentlich funktioniert. Um OFETs weiterzuentwickeln – auch im Hinblick auf bioelektronische Anwendungen wie „elektronische Haut“ und „Biosensor“ – müssen wir erst einmal die Funktionsweise des OFET mikroskopisch verstehen.

Wie funktioniert ein OFET?

Der OFET besteht aus den Schichten Substrat, Gate-Elektrode, Isolator, Halbleiter, Source+Drain Elektrode. Wird an der Gate-Elektrode eine Spannung angelegt, dann bildet sich eine gut leitende Ladungsschicht im Halbleiter. Wenn man dann zwischen Source und Drain Elektrode ein Feld anlegt, können Ladungen von Source zu Drain fließen. Der Stromfluss wird durch die Gatespannung geregelt.



Bestehendes Setup

Es gibt bereits ein Modell, das den Ladungsfluss mit periodischen Randbedingungen im Halbleiter mithilfe Kinetischer Monte-Carlo-Simulation (KMC) simuliert. Für die Modellierung des Halbleiters kann dabei eingestellt werden, ob man sehr kleine Halbleitermoleküle betrachtet, die als Punkte (*single sites*) betrachtet werden, oder ob man längere Polymerketten haben möchte (*chains*). Bei diesen lässt sich die Länge und ein Offset von benachbarten Ketten festlegen.

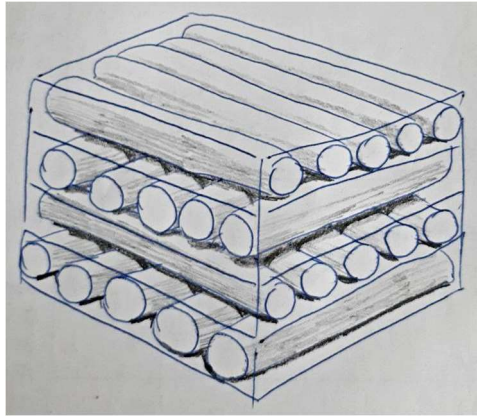


Draufsicht auf eine Polymer-Schicht im Halbleiter

Der Einfluss des Versatzes und der Kettenlänge wurde von Tobias Meier, dem Entwickler des Codes, in seiner Dissertation untersucht. Bisher waren die Polymerketten in jeder Schicht immer parallel ausgerichtet.

Ziel

Die Frage, die hier untersucht werden soll, ist wie sich die Mobilität (eine Größe, die misst, wie schnell ein Ladungsträger durch den OFET reist) verändert, wenn die Polymerschichten nicht mehr parallel, sondern um 90° gegeneinander verdreht sind. (Wie in der Abbildung unten)



Aufgaben

- **Einarbeitung:**
 - Daten bei Verschiedenen Kettenlängen als Test reproduzieren
 - **Programmieren:**
 - Ergänzen des bereits bestehenden Python-Codes um die Möglichkeit, Schichten zu verdrehen (parallele Polymerketten sind schon implementiert)
 - **Simulationen:**
 - bei verschiedenen Kettenlängen & Vergleich Ergebnissen mit parallelen Schichten
 - Vergleich mit Tobias Daten, evtl. experimentellen Daten aus der Literatur
- optional:
- verschiedene Schichtdicken (z.B. immer $n=1, 2, 3 \dots$ Schichten parallel alternierend)
 - Simulation von *sandwich-type devices* (ohne Gate-Elektrode und bei kleineren Ladungsträger-Konzentrationen)
 - verschiedene Kettenlängen in verschieden orientierten Schichten
 - *Falls man eine gute Idee hat, wie man das umsetzen kann*, könnte auch der effektive Winkel zwischen den Schichten variiert werden. (z.B. durch Veränderung der Abstände zwischen sites und Veränderung der Kettenlängen)

Das Ziel ist also, generell zu verstehen, wie die Orientierung der Polymere im Halbleiter den Stromfluss im OFET beeinflusst.