

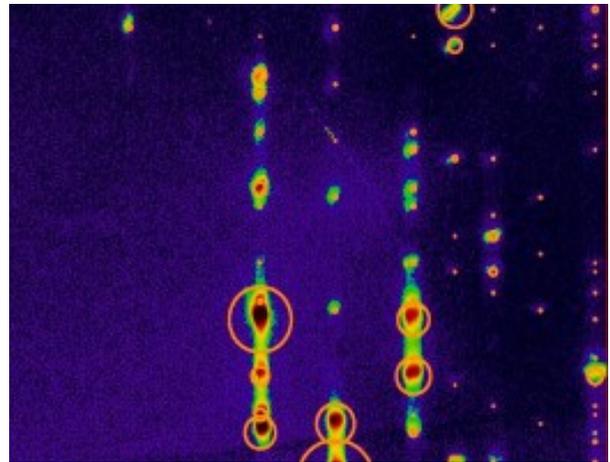
Dotierung von organischen Halbleitern analysiert

Organische Halbleitermaterialien werden heute schon erfolgreich eingesetzt, zum Beispiel für Solarzellen oder Leuchtdioden (OLEDs). Bislang war jedoch nur wenig darüber bekannt, wie „Dotier“-Moleküle strukturell in organische Halbleiter integriert werden. Dies hat nun die gemeinsame Forschergruppe „Molekulare Systeme“ des Helmholtz-Zentrums Berlin und der Humboldt-Universität zu Berlin an BESSY II analysiert. Die Ergebnisse sind überraschend: Die Moleküle verteilen sich nicht notwendigerweise gleichmäßig im Wirtsgitter, wie man es von anorganischen Halbleitern gewohnt ist, sondern bilden sogenannte Ko-Kristallite mit dem Wirtsmaterial.

Unsere moderne Halbleitertechnologie basiert auf Silizium, einem anorganischen Halbleitermaterial, das für den Einsatz in elektronischen Bauelementen mit Fremdatomen dotiert wird. Doch auch organische Festkörper aus konjugierten Molekülen oder Polymeren besitzen halbleitende Eigenschaften, die Anwendungen in der organischen Elektronik ermöglichen. Das enorme Potenzial der organischen Elektronik hat sich in den letzten Jahren am Beispiel von Leuchtdioden (OLEDs) deutlich gezeigt.

Gastmoleküle im Wirtsgitter

So lassen sich zum Beispiel Oligothiophen (4T) und Polythiophen (P3HT), zwei typische organische Halbleiter, mit einer zweiten Molekülsorte, einem starken Elektronenakzeptor (F4TCNQ), „dotieren“ und dadurch gezielt hinsichtlich ihrer Leitfähigkeit beeinflussen. Wie sich allerdings diese Gastmoleküle in das Wirtsgitter der organischen Halbleiter strukturell integrieren, war bislang kaum bekannt. Daher wurde, in Analogie zu anorganischen Halbleitern, bisher stets eine homogene Verteilung vorausgesetzt.



Röntgenstreuung an reinem 4T. Bild: HZB

Hinweise auf Besonderheiten

Ein internationales Team, geleitet von der gemeinsamen Forschergruppe „Molekulare Systeme“ am HZB und der Humboldt-Universität zu Berlin, konnte nun zeigen, dass dies weder für Oligothiophen noch Polythiophen der Fall ist. Die Gruppe um Dr. Ingo Salzmann und Prof. Dr. Norbert Koch, Stellvertretender Sprecher von IRIS Adlershof, hatte zuvor bereits an anderen Systemen experimentell und theoretisch analysiert, wie sich die Dotierung von organischen Halbleitern auf deren elektronische Struktur und damit deren Leitfähigkeit auswirkt. Daraus ergaben sich Hinweise auf Besonderheiten dieser Materialklas-

se, bei denen die Hybridisierung der Molekülorbitale eine Schlüsselrolle spielt.

Verschieden stark dotierte Proben

Deshalb stellten sie nun eine Serie von verschieden stark dotierten organischen Dünnschichten her und untersuchten diese Proben mit Röntgenbeugung an der KMC-2-Beamline, die Dr. Daniel Többens betreut. Dadurch konnten sie die kristalline Struktur in Abhängigkeit von der Stärke der Dotierung präzise bestimmen.

Ko-Kristallite als "Dotanden"

Ihre Ergebnisse zeigten, sowohl für 4T als auch für P3HT, dass sich die Gastmoleküle - in krassem Gegensatz zur Erwartung - keineswegs gleichmäßig in das Wirtsgitter des organischen Halbleiters einbauen. In der reinen kristallinen Wirtsmatrix bildet sich stattdessen eine zweite kristalline Phase aus Wirt/Gast Ko-Kristalliten.

Der „dotierte“ organische Halbleiter besteht damit aus einer Matrix von „Original“-Kristalliten, in die „Misch“-Kristallite eingebettet sind. Diese Misch-Kristallite übernehmen die eigentliche Rolle der „Dotier“-Moleküle.

Verständnis ermöglicht mehr Kontrolle

„Es ist wichtig, die grundlegenden Prozesse bei der Dotierung organischer Halbleiter genauer zu verstehen“, erklärt Salzmann: „Wenn wir solche Materialien erfolgreich in Anwendungen einsetzen möchten, müssen wir ihre elektronischen Eigenschaften genauso präzise kontrollieren können, wie es bei anorganischen Halbleitern heute selbstverständlich ist.“

Conductance of a single flexible molecular wire composed of alternating donor and acceptor units

H. Méndez, G. Heimel, S. Winkler, J. Frisch, A. Opitz, K. Sauer, B. Wegner, M. Oehzelt, C. Röthel, S. Duhm, D. Többens, N. Koch und I. Salzmann
Nature Communications 6 (2015) 8560
DOI: [10.1038/ncomms9560](https://doi.org/10.1038/ncomms9560)