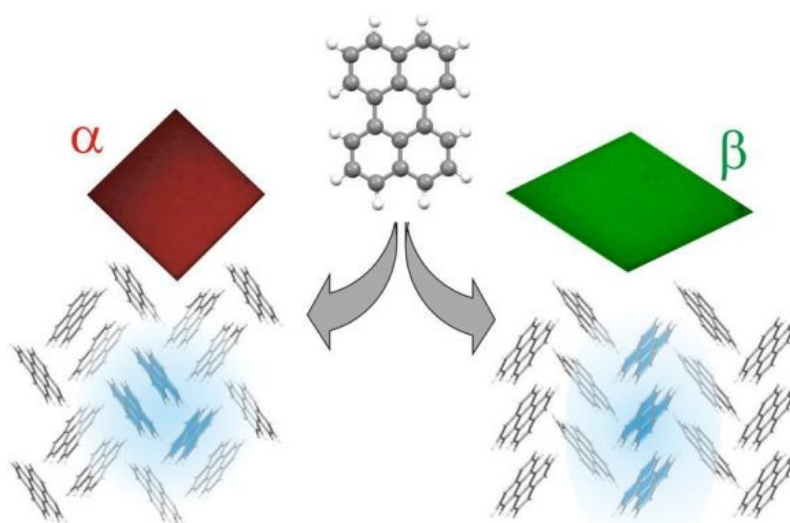


Wie die molekulare Packung die Lichtabsorption in Organischen Halbleitern beeinflusst

02.01.2018, 13:00 | Wissenschaft, Forschung, Bildung

Pressemitteilung von: *Justus-Liebig-Universität Gießen*

Presseagentur: *Justus-Liebig-Universität Gießen*



Je nach Packung der Moleküle bildet Perylen verschiedene Kristallstrukturen, die unterschiedliche optische Eigenschaften wie beispielsweise ihre Leuchterscheinung zeigen. (Gregor Witte)

Physiker der Universitäten Gießen und Marburg untersuchen im Rahmen einer interdisziplinären Zusammenarbeit delokalisierte elektronische Anregungen in molekularen Festkörpern – Publikation

Molekulare Halbleiter gelten als innovative Lösungen für optoelektronische Bauelemente und haben sich auf dem Markt längst durchgesetzt. Als organische Leuchtdioden (OLEDs) werden sie in high-end Displays eingesetzt, sind aber auch in der Photovoltaik nicht mehr wegzudenken. Hier gelten ihre einfache Verarbeitbarkeit und die große Absorption in dünnen Filmen als herausragende Eigenschaften; ihre Wirkungsgrade bleiben jedoch hinter etablierten siliziumbasierten Solarzellen zurück. Die Ursachen werden in der Fachliteratur kontrovers diskutiert, was auf die komplexen physikalischen Eigenschaften zurückzuführen ist. Dank einer erfolgreichen internationalen und interdisziplinären Kooperation sind Gießener und Marburger Wissenschaftlerteams jetzt auf der richtigen Spur, damit in Zukunft sowohl die Materialauswahl als auch die Funktionsweise von organischen Solarzellen verbessert werden kann.

Die einzelnen molekularen Bausteine der molekularen Halbleiter sind untereinander nur schwach gebunden, ähnlich wie beim Wachs in einer Kerze. Zudem können Festkörper desselben Moleküls mitunter verschiedene Kristallstrukturen, sogenannte Polymorphismen, annehmen. Diese unterscheiden sich unter Umständen stark in ihren optischen und elektronischen Eigenschaften, treten jedoch häufig als nanokristalline Gemische auf. Die Beschreibung der elektronischen Festkörpereigenschaften stellt daher noch immer eine große Herausforderung dar; man behilft sich häufig mit einer molekularen Beschreibung. An diesem Punkt setzen die gemeinsamen Forschungsarbeiten von Gießener und Marburger Physikern in Kooperation mit Kolleginnen und Kollegen aus den USA und Israel an. Die Forscherinnen und Forscher konnten zeigen, dass es in kristallinen molekularen Festkörpern starke Effekte gibt – und zwar durch räumlich ausgedehnte, über mehrere Moleküle delokalisierte Anregungen, die einer vollkommenen quantenmechanischen Beschreibung mit festkörpertheoretischen Methoden bedürfen. Die Ergebnisse ihrer Arbeiten wurden jetzt in den

Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS) unter dem Titel Low-lying excited states in crystalline perylene: Experiment and theory publiziert.

Das Team um Prof. Dr. Sangam Chatterjee, I. Physikalisches Institut der Justus-Liebig-Universität Gießen (JLU), konnte die optischen Eigenschaften der fundamentalen Anregungen detailliert untersuchen und eine Referenz für die theoretisch arbeitenden Teams aus Übersee vorgeben. Dies wurde erst durch die gezielte Herstellung hoch-geordneter Perylen-Einkristalle der beiden kristallinen Modifikationen in der Arbeitsgruppe „Molekulare Festkörper“ von Prof. Dr. Gregor Witte am Fachbereich Physik der Philipps-Universität Marburg (UMR) überhaupt möglich. Dem Marburger Team war es gelungen, molekular glatte Kristallplättchen mit Dicken von weniger als 0.2 µm herzustellen, die deshalb noch halbtransparent sind. Präziseste Berechnungen an der Universität Berkeley und dem Lawrence-Berkeley Laboratory wurden in Kooperation mit den Forscherinnen und Forschern aus Israel und Boston entwickelt, um die benötigte Genauigkeit zu erzielen. Letztlich ist es in gemeinsamer Anstrengung gelungen, anhand einer detaillierten Analyse einerseits die optischen Signaturen den Festkörpereigenschaften zuzuordnen und andererseits die Validität der theoretischen Beschreibung sicherzustellen.

Es stellte sich heraus, dass für hochgeordnete Strukturen eine signifikante Delokalisierung der Anregungen zu beobachten ist, so dass eine Beschreibung auf molekularer Ebene – also für die einzelnen Baugruppen der Einkristalle – unzureichend ist. Ein Experiment-Theorie-Vergleich zeigte weiterhin, dass Molekülkristalle einer der beiden Modifikationen trotz ihrer geringen Dicke in einem bestimmten Spektralbereich als perfekter Spiegel fungieren und das Licht reflektieren. Dank dieser Kombination aus Experiment und Theorie konnte ein besseres Verständnis der Licht-Materie-Wechselwirkung in organischen Halbleitern erreicht werden. Die gewonnenen Erkenntnisse sollen in Zukunft dazu genutzt werden, die Materialauswahl und Funktionsweise von organischen Solarzellen zu verbessern.

Die beteiligten Arbeitsgruppen aus Gießen und Marburg sind Mitglieder des Sonderforschungsbereichs "Structure and Dynamics of Internal Interfaces" (SFB 1083), der die Struktur und Dynamik innerer Grenzflächen erforscht. Weiterhin kooperieren Gießener und Marburger Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler regelmäßig im Rahmen des Campus-Schwerpunkts „Materialforschung“ des Forschungscampus Mittelhessen, der gemeinsamen Einrichtung der Justus-Liebig-Universität Gießen, der Philipps-Universität Marburg und der Technischen Hochschule Mittelhessen zur Stärkung der regionalen Verbundbildung insbesondere in der Forschung und der Nachwuchsförderung.

Publikation:

Tonatiuh Rangel, Andre Rinn, Sahar Sharifzadeh, Felipe H. da Jornada, André Pick, Steven G. Louieb, Gregor Witte, Leeor Kronik, Jeffrey B. Neaton, and Sangam Chatterjee: Low-lying excited states in crystalline perylene: Experiment and theory, Proc Natl Acad Sci USA, veröffentlicht am 25.12.2017
DOI: 10.1073/pnas. 1711126115

Weitere Informationen:

Der Forschungscampus Mittelhessen ist eine hochschulübergreifende Einrichtung nach §47 des Hessischen Hochschulgesetzes der Justus-Liebig-Universität Gießen, der Philipps-Universität Marburg und der Technischen Hochschule Mittelhessen zur Stärkung der regionalen Verbundbildung in der Forschung, Nachwuchsförderung und Forschungsinfrastruktur.

Link zum Campus-Schwerpunkt „Materialforschung“: www.fcmh.de/mat

Ansprechpartner:

Prof. Sangam Chatterjee, Ph.D.
I. Physikalisches Institut, Justus-Liebig-Universität Gießen
Heinrich-Buff-Ring 16, 35392 Gießen
Telefon 0641 99-33100
E-Mail: sangam.chatterjee@physik.uni-giessen.de

Prof. Dr. Gregor Witte
AG Molekulare Festkörper, Fachbereich Physik, Philipps-Universität Marburg
Renthof 7, 35032 Marburg

Telefon 06421 28-21384

E-Mail: gregor.witte@physik.uni-marburg.de

Medienkontakte:

Justus-Liebig-Universität Gießen

Pressestelle

Ludwigstr. 23

35390 Gießen

T: 0641 99-12041

E: pressestelle@uni-giessen.de

I: www.uni-giessen.de

Philipps-Universität Marburg

Pressestelle

Biegenstr. 10

35037 Marburg

T: 06421 28-26216

E: pressestelle@uni-marburg.de

I: www.uni-marburg.de

Forschungscampus Mittelhessen

Geschäftsstelle

Senckenbergstraße 3

35390 Gießen

T: 0641 99-16480/-81

E: eva-maria.aulich@fcmh.de

I: www.fcmh.de

Weitere Informationen:

- <http://www.pnas.org/content/early/2017/12/20/1711126115.abstract>

- <http://www.fcmh.de/mat>

Quelle: idw

Portrait

-

News-ID: 987313 • Views: 788 (Stand: 30.07.2026)

Link zur Pressemitteilung:

<https://www.openpr.de/news/987313/Wie-die-molekulare-Packung-die-Lichtabsorption-in-Organischen-Halbleitern-be.html>