



BMBF - Förderschwerpunkt

Erforschung der kondensierten Materie

Großgeräte der physikalischen
Grundlagenforschung

Elektronenstruktur von Grenz- und Multischichten aus organischen Molekülen und Metallen

Zuwendungsempfänger:	Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung e.V.
Projektleitung:	Fink, J.(B)
Förderkennzeichen:	05 SF8BD1/1
Förderzeitraum:	01.04.98 - 31.03.01
Zuwendung:	110.950 €[217.000 DM]
E-Mail:	fink@ifw-dresden.de
Projekträger:	DESY-HS

Genutzte Großgeräte:

BESSY - BESSY

Angaben zum Projekt:

Veröffentlichungen:	11
Konferenzbeiträge:	7
Diplomarbeiten:	0
Dissertationen:	1
Habilitationen:	0
Patente:	0

Schlussbericht - Kurzfassung

- Gemeinsam mit der BESSY GmbH und einem Konsortium bestehend aus dem IFW Dresden und zwei weiteren Verbundmitgliedern (Prof. Freund, FHI und Prof. Umbach, Uni Würzburg) wurde der Aufbau eines kompletten, hochauflösenden Weichröntgenstrahlrohres (PM6) bei BESSY II betrieben. Obwohl aufgrund von Lieferproblemen der Umzug der gesamten Anlage (PM6+Spektrometersystem) an den Undulator U49 bei BESSY II erst mit Verspätung begonnen werden konnte, wurde dennoch der gesamte Meßplatz für höchst aufgelöste Rumpfniveauspektroskopie bzw. Photoelektronenbeugung und Spektromikroskopie vom Konsortium im Berichtszeitraum dem Nutzerbetrieb zur Verfügung gestellt.
- Es wurden Grenzschichten aus organischen Materialien (CuPC, TPD, Alq₃) und anorganischen Substraten (ITO, Au), die für organische Bauelemente von Relevanz sind, durchgeführt. Für vergleichende Messungen wurden einkristalline Substrate (Au(110), Au(100), GeS(001)) verwendet. Am Beispiel CuPC wurde die Adsorptionsgeometrie von dünnen Schichten auf Einkristallen und auf technisch relevanten Substraten mittels XAS-Messungen am BESSY II analysiert. Es wurde eine sehr hohe Ordnung – auch auf technischen Substraten – nachgewiesen, die Adsorptionsgeometrie jedoch unterscheidet sich völlig. Das hat unter anderem Konsequenzen für den Ladungsträgertransport in diesen Schichten, da dieser stark anisotrop sein kann. Weiterhin wurden die elektronischen Grenzflächeneigenschaften für verschiedene technisch relevante Modellsysteme bestimmt. Dabei wurden für alle organisch/anorganischen Grenzflächen Dipole gefunden, die zum Teil größer als 1 eV sein können (CuPC/Au). Ein Vorhandensein von Bandverbiegungen in der organischen Schicht kann nicht vollständig ausgeschlossen werden. An einigen Grenzflächen (TPD/ITO) treten starke Wechselwirkungen auf.
- Die elektronische Struktur organischer Halbleiter (Alq₃) und weiterer konjugierter Kohlenstoffverbindungen (Fullerene, Nanotubes) wurde untersucht. Für das Verständnis des Mechanismus des Elektronentransports (oder der Injektion der Ladungsträger) wurden die Verbindungen mit Alkalimetallen dotiert, da eine ionische Wechselwirkung und damit ein Elektronentransfer zum Molekül erwartet werden kann. Es wurden beispielsweise Informationen zur Lokalisierung der injizierten Elektronen im Molekül (für Alq₃ am N- und C-Atom) und zur Größe des Transportgaps erhalten. Letzteres ist aufgrund von exzitonischen Effekten durch meist verwendete optische Messungen nicht zugänglich.

Schlussbericht

Zuwendungsempfänger: IFW Dresden

Projektleitung: J. Fink

Elektronenstruktur von Grenz- und Multischichten aus organischen Molekülen und Metallen

Aufgabenstellung

Das Vorhaben gliederte sich in einen instrumentellen und einen wissenschaftlichen Bereich. Zum einen sollte zusammen mit Verbundpartnern (Prof. Umbach, Prof. Freund) ein state-of-the-art Strahlrohr inklusive Meßplatz für Spektroskopie und Mikroskopie mit höchster Auflösung am Undulator U49 bei BESSY II aufgebaut werden.

Ziel des wissenschaftlichen Teils war es, die Struktur und die Elektronenstruktur von Grenzschichten zwischen konjugierten Kohlenstoffschichten (Polymere, Oligomere, Fullerene) und Metallen mittels Röntgenabsorptionsspektroskopie und Photoemissionsspektroskopie unter der Ausnutzung von Synchrotronstrahlung zu untersuchen. Ein weiteres Ziel bestand darin, Multischichten aus diesen Materialien herzustellen und deren Elektronenstruktur zu vermessen.

Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

Das Teilprojekt ist in ein größeres Forschungsvorhaben am IFW Dresden zur Erforschung der Elektronenstruktur von konjugierten Kohlenstoffsystemen eingebettet. Es bestehen daher ein reger Erfahrungsaustausch und intensive Diskussionen zwischen verschiedenen Arbeitsgruppen im IFW Dresden. Die Gesamtaktivitäten auf diesem Gebiet wurden über dieses Projekt hinaus durch die EU (TMR-Stipendien und ein in Dresden koordiniertes TMR-Forschungsnetzwerk "FULPROP") gefördert.

Planung und Ablauf

Bei der Fertigstellung des Meßplatzes am BESSY II traten Probleme mit Lieferanten auf, wodurch sich die mögliche Nutzung dieses Meßplatzes für höchst aufgelöste Rumpfniveauspektroskopie bzw. Photoelektronenbeugung und Spektromikroskopie verzögerte.

Diese Tatsache hatte auch Einfluß auf die möglichen Untersuchungen im Rahmen dieses Projektes. So war es bis Anfang 2000 nicht möglich, die volumenempfindliche Fluoreszenzausbeutemethode (XAS) für die Untersuchung der Grenzflächeneigenschaften von Multischichten zu nutzen. Deshalb wurden zunächst Untersuchungen zur Wechselwirkung von organischen Materialien mit Kalium im Zeitplan vorgezogen und ultradünne organische Schichten auf Metallen und Halbleitern mittels oberflächenempfindlicher Methoden untersucht. Zudem zeigten die weltweiten Forschungen der letzten Jahre ein besonderes Interesse zur elektronischen Struktur von organisch/anorganischen Grenzflächen (siehe „Fortschritt bei anderen Stellen“). Die Vielzahl dieser Aktivitäten ist vor allem durch

die möglich gewordene Herstellung von Bauelementen (wie beispielsweise Leuchtdioden oder Transistoren) auf Basis organischer Materialien begründet. Auch deshalb konzentrierten sich unsere Forschungsanstrengungen zunehmend auf ultradünne organische Schichten. Dabei wurden Systeme gewählt, die technisch besonders relevant sind. Die Bestimmung der elektronischen Grenzflächeneigenschaften erfolgte sowohl mittels Labormethoden (XPS, UPS, Elektronen-Energieverlustspektroskopie in Reflexion und Transmission, STM) , als auch mittels polarisationsabhängiger XAS-Untersuchungen am BESSY II.

Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

Der PM6-Monochromator am BESSY wurde in der ersten Förderperiode in Betrieb genommen und der gesamte Meßplatz wurde vom Konsortium Umbach-Freund-Fink im Berichtszeitraum dem Nutzerbetrieb zur Verfügung gestellt.

Seit vielen Jahren wird die Elektronenstruktur von leitenden Polymeren, Ladungstransfersalzen, interkaliertem Graphit und dotierten Fullerenen untersucht. Allen diesen Systemen ist gemeinsam, daß ein Ladungstransfer zwischen Gegenionen und konjugierten Kohlenstoffverbindungen stattfindet und dadurch ein Salz (ähnlich wie NaCl) entsteht. Die ersten Ergebnisse des Antragstellers an Metall/C₆₀ Multischichten innerhalb des Verbundes weisen darauf hin, daß in diesem Fall mit Edelmetallen (hier Au) und Aluminium als Metall kein ionischer Ladungstransfer stattfindet sondern an den Grenzschichten eine kovalente Wechselwirkung vorliegt. Diese Ergebnisse werden durch Oberflächenuntersuchungen an fullerenbedeckten Metalloberflächen bestätigt. Untersuchungen von derartigen Modellmolekülen stellen eine erste Stufe zum Verständnis der elektronischen Eigenschaften an den Grenzflächen dar. Deshalb wurden die im ersten Bewilligungszeitraum begonnenen Photoemissionsuntersuchungen an Fullerenen fortgesetzt und auf Kohlenstoffnanoröhren (SWNT) ausgedehnt. Weiterführend wurden Untersuchungen mit anderen Substraten bzw. konjugierten Kohlenstoffsystemen vom Antragsteller im Berichtszeitraum durchgeführt, wobei der Schwerpunkt in technisch relevanten Systemen bestand.

Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Die instrumentellen Arbeiten in diesem Teilprojekt wurden in enger Zusammenarbeit mit der BESSY GmbH und den Verbundpartnern Prof. Umbach und Prof. Freund durchgeführt. Im Bereich der Elektronenstruktur der Multischichten bestehen enge Kontakte zu Arbeitsgruppen im Rahmen des obengenannten TMR-Forschungsnetzwerks FULPROP (Dr. Rudolf, LISE, Namur, B; Dr. Brühwiler, Uppsala, S), die sich mit der Wechselwirkung zwischen ultradünnen Schichten aus konjugierten Kohlenstoffmolekülen auf Metalloberflächen beschäftigen.

Erzielte Ergebnisse

Gemeinsam mit der BESSY GmbH und einem Konsortium bestehend aus dem IFW Dresden und zwei weiteren Verbundmitgliedern (Prof. Freund, FHI und Prof. Umbach, Uni Würzburg) wurde der Aufbau eines kompletten, hochauflösenden Weichröntgenstrahlrohres (PM6) bei BESSY II betrieben. Der Aufbau des PM6 Monochromators bei BESSY I wurde bereits in der ersten Förderperiode erfolgreich abgeschlossen. Der Umzug der gesamten Anlage (PM6+Spektrometersystem) an den Undulator U49 bei BESSY II konnte erst mit Verspätung begonnen werden, da die erforderlichen optischen Komponenten nicht rechtzeitig oder fehlerhaft geliefert

wurden. Dadurch verzögerte sich die mögliche Nutzung dieses Meßplatzes für höchst aufgelöste Rumpfniveauspektroskopie bzw. Photoelektronenbeugung und Spektromikroskopie um insgesamt mehr als ein Jahr. Der gesamte Meßplatz konnte jedoch vom Konsortium Umbach-Freund-Fink im Berichtszeitraum dem Nutzerbetrieb zur Verfügung gestellt werden.

Im wissenschaftlichen Teil dieses Projektes wurde die Struktur und die Elektronenstruktur von Grenzschichten zwischen konjugierten Kohlenstoffschichten (Polymere, Oligomere, Fullerene) und Metallen untersucht. Dabei wurden zunächst Arbeiten auf dem Gebiet der Fullerene und Kohlenstoffnanoröhren durchgeführt. In der letzten Zeit konzentrierten sich die Arbeiten auf technisch relevante Grenzflächen organischer Halbleiter. Als Untersuchungsmethoden wurden vor allem die Photoemissionsspektroskopie (PES), die Röntgenabsorptionsspektroskopie (XAS) sowie die Elektronenenergieverlustspektroskopie (EELS) angewandt. Ein Teil der Untersuchungen wurde an der Synchrotronstrahlungsquelle BESSY II durchgeführt. Die Ergebnisse wurden in 11 Publikationen zusammengefaßt, einige Ergebnisse werden nachfolgend detailliert dargestellt.

1. Technisch relevante Grenzflächen organischer Halbleiter

1.1. Elektronische Struktur an Grenzflächen

Die Untersuchungen wurden unter anderem an dem Modellsystem für organische Leuchtdioden ITO/TPD/Alq₃ durchgeführt. Für vergleichende Betrachtungen wurde der anorganische Halbleiter GeS(001) als Substrat eingesetzt. Die Grenzflächen zwischen organischen Materialien und GeS stellen zugleich ein Modellsystem für Physisorption dar. An der ITO/TPD- Grenzfläche wurden starke Wechselwirkungen zwischen Substrat und TPD beobachtet. In Abb. 1 sind die C 1s und N 1s Rumpfniveauspektren für eine Schicht im (Sub-)Monolagenbereich (0.8 nm) und eine dickere Schicht dargestellt. Während bei Schichtdicken von mehr als 4.5 nm im wesentlichen nur eine N-Komponente und die zwei erwarteten C-Komponenten (C-C

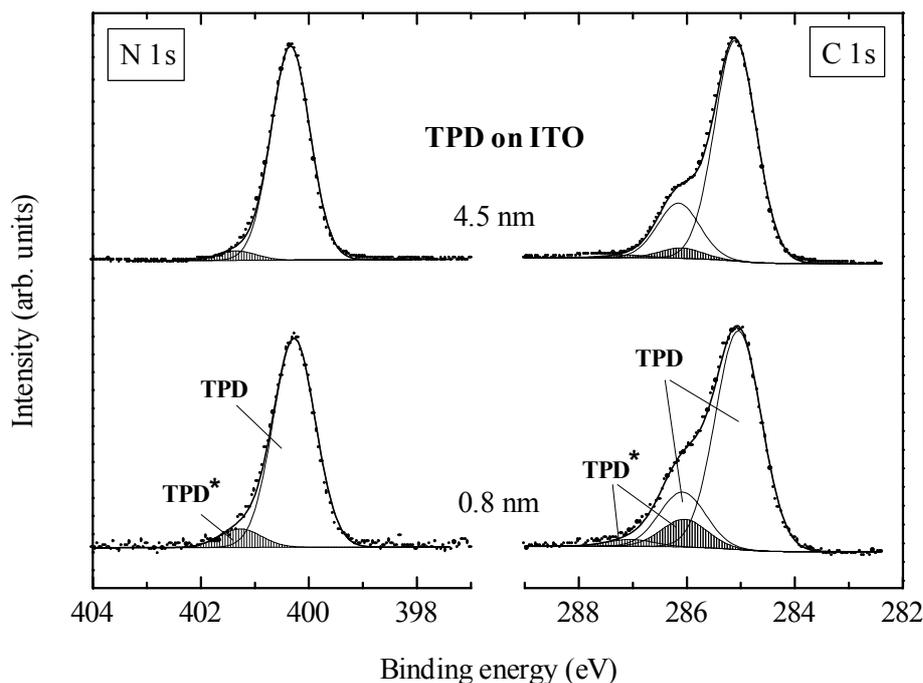


Abb. 1 Vergleich von C 1s und N 1s Rumpfniveauspektren für 0.8 nm und 4.5 nm TPD auf ITO: Die zusätzlichen Komponenten für ultradünne Schichten zeigen die starke Wechselwirkung an der Grenzfläche.

und C-N) erkennbar sind, treten bei dünneren Schichten zusätzliche Peaks auf. Diese werden als partielle Oxidation des TPD an der Grenzfläche interpretiert.

Weiterhin treten energetische Verschiebungen aller Rumpfniveaus und der Valenzbandstrukturen um 0.2 bis 0.3 eV in Abhängigkeit von der Schichtdicke auf. Die Verschiebungen im Monolagenbereich ($< 2\text{nm}$) werden der Herausbildung des Grenzflächendipols zugeordnet, während Verschiebungen bei größeren Schichtdicken auch durch Bandverbiegungen in dem organischen Film verursacht werden können.

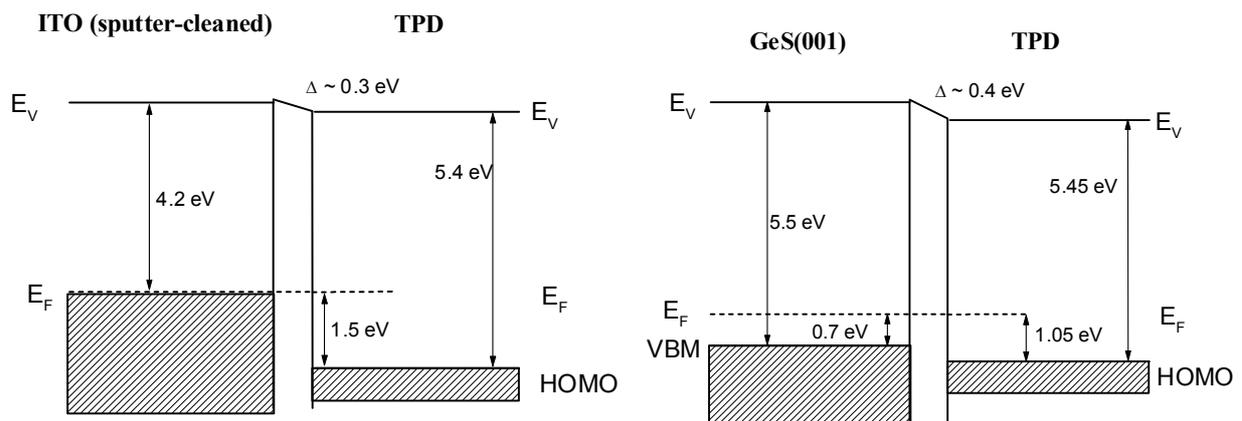


Abb. 2 Elektronische Struktur an der ITO/TPD (links) und GeS(001)/TPD Grenzfläche. Für beide Systeme wurde die Herausbildung einer Grenzflächendipolbarriere beobachtet.

Sowohl für ITO/TPD als auch für GeS(001)/TPD beobachten wir mittels UPS Verschiebungen des Vakuumniveaus (Abb. 2), welche die Bildung einer Grenzflächendipolbarriere nachweisen. Das zeigt deutlich, daß die organische Moleküle mit den anorganischen Substraten wechselwirken können, auch auf der unpolaren GeS(001)-Oberfläche. Für TPD auf GeS(001) wurde jedoch keine starke Wechselwirkung (partielle Oxidation) gefunden.

Der Abstand des HOMO (TPD) von der Fermienergie entspricht in einer OLED der Lochinjektionsbarriere. Wir haben für TPD auf gesputtertem ITO einen Wert von 1.5 eV bestimmt (Abb. 7), welcher wesentlich höher ist als häufig in der Literatur zitiert. Das zeigt, daß es für jedes System und jede Präparationsmethode notwendig ist, die elektronischen Grenzflächeneigenschaften exakt zu bestimmen. Eine häufig praktizierte Abschätzung auf Grundlage von bekannten Volumeneigenschaften – insbesondere unter Annahme einer Vakuumniveauesrichtung – kann zu größeren Fehlern führen.

Weiterführende Untersuchungen wurden an dem System CuPC/Au durchgeführt, wo der Grenzflächendipol sogar 1.1 eV beträgt.

1.2. Orientierung der Moleküle in Abhängigkeit vom Substrat

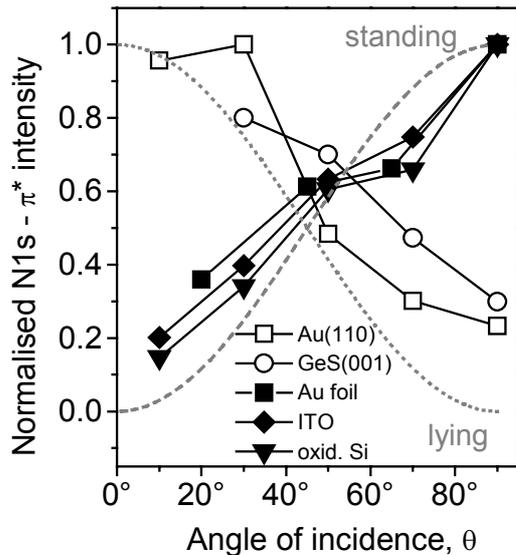


Abb. 3 Polarisationsabhängige XAS (BESSY) an CuPC auf technisch relevanten Substraten und Einkristallen: der unterschiedliche Verlauf der Intensitäten der N1s- π^* Übergänge in den beiden Fällen zeigt die unterschiedliche Orientierung der Moleküle.

Die Qualität der organischen Filme beeinflusst entscheidend die Beweglichkeit der Ladungsträger. An organischen Einkristallen konnte sogar der Quanten-Hall-Effekt beobachtet werden. Weiterhin ist für organische Moleküle bekannt, daß die elektrischen Eigenschaften stark anisotrop sein können, d.h. Elektronen- oder Löcherleitung erfolgt in bestimmten Vorzugsrichtungen des organischen Einkristalls.

Wir haben das Wachstum eines anisotropen organischen Modellmoleküls für epitaktische Schichten (Kupfer-Phthalocyanin, CuPC) auf Einkristallen und auf technisch relevanten Substraten (Indium-Zinn Oxid (ITO), oxidiertes Silizium und polykristallines Gold) verglichen. Dazu wurden winkelabhängige Röntgenabsorptionsmessungen an der Synchrotronstrahlungsquelle BESSY II durchgeführt. Diese Methode eignet sich besonders für die Untersuchung von hochgeordneten, aber möglicherweise nicht einkristallinen Filmen. Je nach Winkel werden bei diesem Molekül hauptsächlich π^* oder σ^* Übergänge angeregt (Abb. 3) – somit sind Aussagen zur Orientierung zugänglich.

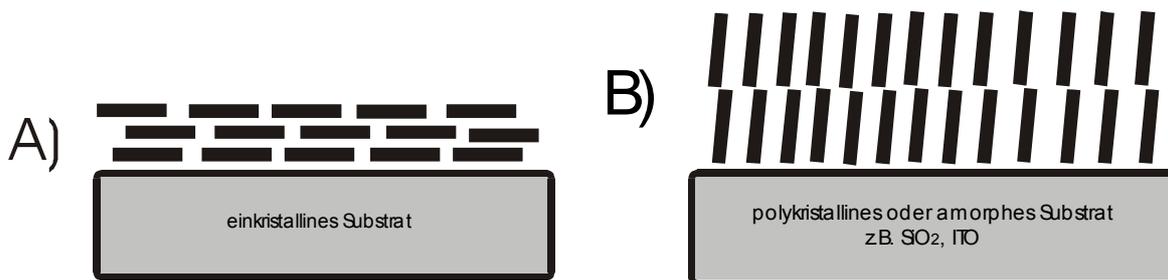


Abb. 4 Schematische Darstellung der Orientierung von CuPC auf Einkristallen und auf technisch relevanten Substraten.

Es wurde festgestellt, daß sich unter bestimmten Umständen auch auf polykristallinen oder amorphen Substraten hochgeordnete, anisotrope Filme ausbilden. Im Gegensatz zum Wachstum auf Einkristallen sind die Moleküle jedoch nicht parallel (a) sondern senkrecht (b) zur Substratoberfläche orientiert (Abb. 4). Die Ursache dafür wird hauptsächlich in der Rauigkeit der Substrate gesehen. Aufgrund der Anisotropie der elektrischen Eigenschaften ist es jedoch notwendig, die

Orientierung der Moleküle genau zu kennen, bzw. gegebenenfalls sogar zu beeinflussen. Zudem können die elektronischen Grenzflächeneigenschaften, insbesondere bei reaktiveren Substraten stark von der Orientierung abhängen. Die Möglichkeit der Präparation von hochgeordneten organischen Schichten auf technisch relevanten Substraten spricht auch für eine zukünftige Technologie, die auch auf aufgedampften Schichten beruhen kann.

2. Elektronische Struktur organischer Halbleiter

Die Untersuchungen wurden unter anderem an Alq₃ durchgeführt, da dieses Material häufig für die Herstellung von Leuchtdioden auf Basis organischer Materialien benutzt wird. Es stellt somit eine Modellverbindung für die Elektronentransportschicht bzw. Emissionsschicht dar. Für das Verständnis des Mechanismus des Elektronentransports (oder der Injektion der Ladungsträger) erschien uns die Untersuchung der Dotierung mit Alkalimetallen besonders sinnvoll, da eine ionische Wechselwirkung und damit ein Elektronentransfer vom K zum Alq₃ erwartet werden kann.

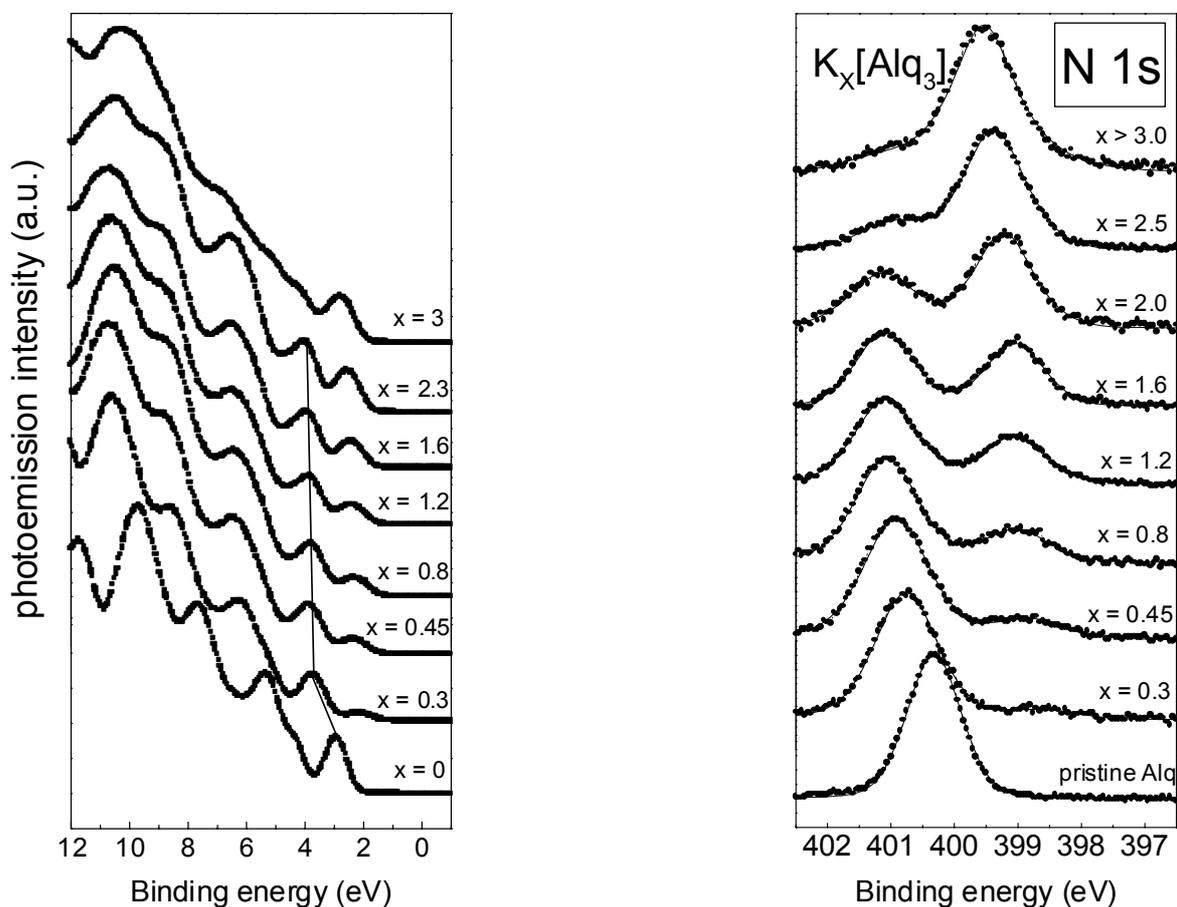


Abb. 5 (links) UP-Valenzbandspektren von Alq₃ auf Au für unterschiedliche K-Konzentrationen.

Abb. 6 (rechts) zugehörige N 1s - Rumpfniveauspektren

Die Untersuchungen zeigen deutlich einen Elektronentransfer vom K zum Alq₃. Dabei kann man die Herausbildung eines neuen Zustandes im „Gap“ des organischen Materials beobachten (Abb. 5). Dabei handelt es sich um das aufgefüllte, ehemalige

LUMO. Der Abstand des *besetzten* LUMO zum *besetzten* HOMO (~ 1.55 eV) ist eine wichtige Größe für das Verständnis der Ladungsträgerinjektion. Durch die n-Dotierung verschieben sich – ähnlich wie bei anorganischen Halbleitern – alle Peaks zu höheren Bindungsenergien. Mit Zunahme der Dotierkonzentration beobachten wir die Entwicklung einer neuen Struktur im Stickstoff-Signal (Abb. 6). Die Verschiebung des zusätzlichen Peaks zu geringeren Bindungsenergien sowie die Skalierung mit der K-Konzentration ließ uns zunächst vermuten, daß das zusätzliche Elektron am Stickstoff lokalisiert ist. Eine genaue Beobachtung der chemischen Verschiebungen aller Rumpfniveaus führen jedoch zu der Schlußfolgerung, daß das Elektron auch eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Kohlenstoff hat (Abb. 7). Während der Abstand von Valenzbandstrukturen, N 1s und O 1s zum Vakuumniveau (bestimmt mittels UPS) konstant ist (d.h. das Ionisationspotential ist konstant), wurden signifikante Unterschiede für C 1s beobachtet. Diese Ergebnisse werden durch theoretische Rechnungen zur Lokalisierung des LUMO von A. Curioni et al.¹ für undotiertes Alq₃ bestätigt.

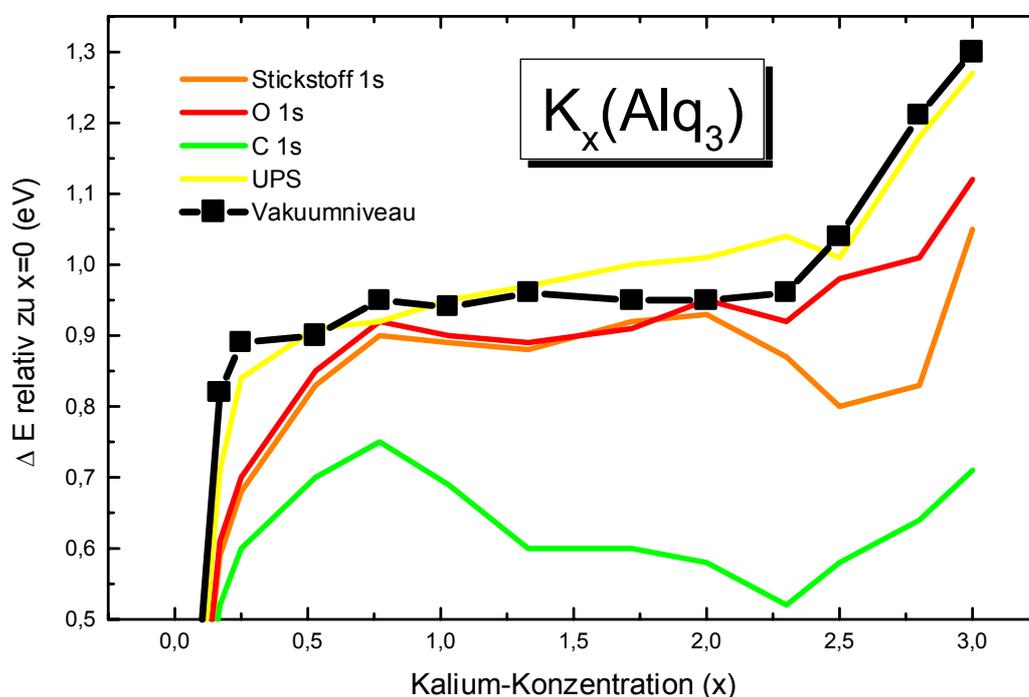


Abb. 7 relative Verschiebungen von ausgewählten Rumpfniveaus und Valenzbandstrukturen infolge der Dotierung mit Kalium

3. Elektronische Struktur und Grenzflächeneigenschaften von Fullerenen

Im Anschluß an unsere Untersuchungen zur Natur des Ladungstransfers an C₆₀/Metall- Multischichten² wurde die Wechselwirkung von *endohedralen* Fullerenen und Kohlestoffnanoröhren mit Metallen untersucht. Als Beispiel soll hier die Wechselwirkung von Gd@C₈₂ mit K gezeigt werden. Im Gegensatz zu den reinen Fullerenen erwartet man bei endohedralen Fullerenen modifizierte elektronische und

¹ A. Curioni, M. Boero, W. Andreoni, Chem. Phys. Lett. **294**, 263 (1998)

² T. Pichler, T. Boeske, M.S. Golden, M. Knupfer, M. Sing, J. Fink, Ch. Jung, C. Hellwig, W. Frentrup, in: Electronic properties of novel materials, AIP Conference Proceedings, 442, 265-268 (1998).

strukturelle Eigenschaften, die durch das eingebaute Metall hervorgerufen werden. Die Zusammenarbeit innerhalb des IFW Dresden sowie auf internationaler Ebene (Prof. Shinohara, Nagoya University, Japan) ermöglichte uns den Zugang zu seltenen Vertretern dieser Substanzklasse. Eine Präparation von Multischichten aus diesen Materialien wird jedoch aufgrund der geringen Ausbeute (bedingt durch den Herstellungsprozeß) in nächster Zukunft noch nicht möglich sein.

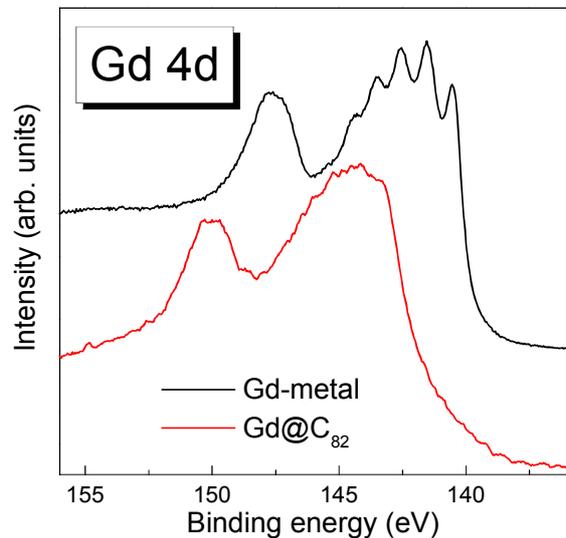
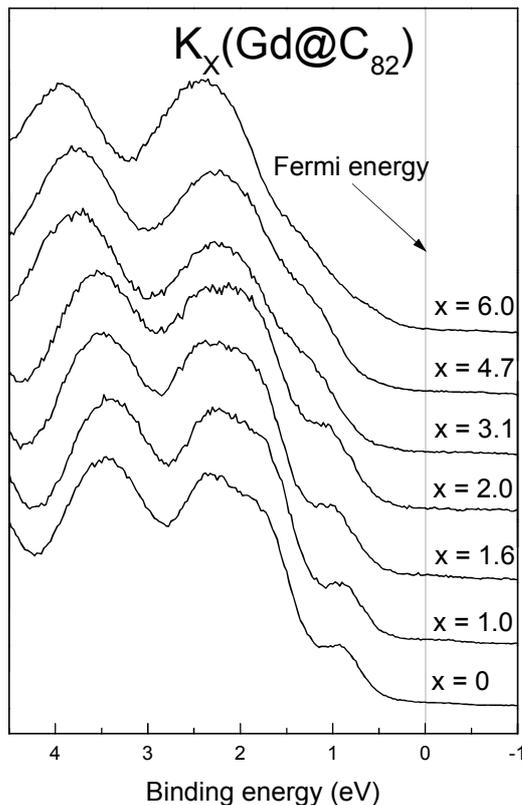


Abb. 8 (links) UP-Spektren von reinem und K-dotiertem $Gd@C_{82}$
Abb. 9 (oben) Der Vergleich der Gd 4d Spektren von Gd und $Gd@C_{82}$ zeigt die 3-Wertigkeit des Gd in $Gd@C_{82}$.

Das UP-Spektrum von undotiertem $Gd@C_{82}$ (Abb. 8), zeigt einen onset des HOMO bei einer Bindungsenergie (BE) von 0.4 eV. Dieser Wert ist signifikant niedriger als bei halbleitenden Fullerenen mit einer bekannten „closed shell configuration“, wie beispielsweise C_{82} (1.2 eV) oder $Tm@C_{82}$ (0.9 eV, zwei Elektronen werden an den Käfig abgegeben). Der Peak mit der niedrigsten BE im UP-Spektrum bei ~0.9 eV wird als „singly occupied molecular orbital“ (SOMO) interpretiert, der Peak bei 1.7 eV entspricht einem Molekülorbital, welches mit zwei Elektronen des eingeschlossenen Metalls aufgefüllt ist. Somit kann man auf eine „open shell configuration“ und – bei Vernachlässigung von geringfügigen kovalenten Bindungsanteilen – auf einen Transfer von drei Elektronen vom Gd zum Kohlenstoffkäfig schließen. Durch die Intercalation mit Kalium werden die unbesetzten Molekülorbitale aufgefüllt (ionische Wechselwirkung). Die maximale K-Konzentration ist 6 Atome pro Fulleren-Molekül. Die chemische Verschiebung aller Gd-Rumpfniveaus in undotiertem $Gd@C_{82}$ zu 2.7 eV höherer BE (relativ zu Gd Metall) sowie die Multiplettstruktur von Gd 4f (nicht dargestellt) und Gd 4d (Abb. 9) sind typisch für eine $4f^7$ Konfiguration. Damit können wir nachweisen, daß Gd in $Gd@C_{82}$ dreiwertig ist. Weiterführende Untersuchungen an ultradünnen Fulleren-Schichten wurden beispielsweise am System C59N/HOPG durchgeführt (siehe Literatur).

Voraussichtlicher Nutzen / Verwertbarkeit der Ergebnisse

Die in diesem Vorhaben durchgeführten Untersuchungen haben Grundlagencharakter und dienen dazu, ein besseres Verständnis der elektronischen Struktur in Grenzschichten zwischen organischen Materialien und Metallen zu erhalten. Dies ist ein erster Schritt zum Verständnis der Wechselwirkung zwischen den Schichten und zur gezielten Einstellung physikalischer Eigenschaften, die in organische Bauelemente wie z.B. Leuchtdioden von Bedeutung sind.

Darstellung des während der Durchführung des Vorhabens dem Anwendungsempfänger bekanntgewordenen Fortschritts auf diesem Gebiet bei anderen Stellen

Organische Halbleiter auf der Basis von konjugierten Kohlenstoffverbindungen erfuhren im Berichtszeitraum eine zunehmende Akzeptanz als Funktionswerkstoffe des 21. Jahrhunderts. Erste Anwendungen werden vor allem auf dem Gebiet der Leuchtdioden oder Solarzellen beobachtet [1,2], während bei organischen Feldeffekttransistoren [3-6] stark zunehmende Forschungsanstrengungen zu beobachten sind. Zahlreiche internationale Konzerne präsentieren gegenwärtig erste Produkte oder stehen unmittelbar vor der Markteinführung.

Bei der weltweit intensiven Forschung auf diesem Gebiet traten völlig neue Fragestellungen auf zu deren Klärung wir im Rahmen dieses Projektes (durch die Untersuchung ultradünner Schichten) einen Beitrag geleistet haben, wie: Was passiert an den Grenzflächen zwischen den Elektroden und der aktiven Schicht? Beispielsweise kann das Aufdampfen von Metallschichten zu einer effektiven Dotierung des organischen Materials führen. Gibt es, ähnlich wie bei Schottky-Kontakten auf anorganischen Halbleitern, einen Ladungstransfer und einen Grenzflächendipol oder gar eine Reaktion an der Grenzfläche? Bilden sich Grenzflächenzustände bzw. Störstellen, die zu einem Pinning des Fermi-niveaus führen? Insbesondere ist eine kontroverse Diskussion über das Vorhandensein und die Größe von Bandverbiegungen in der organischen Schicht entstanden. Zudem zeichnet sich ab, daß die Qualität und die Orientierung der organischen Filme entscheidend die erreichbaren Bauelementeigenschaften beeinflusst.

Die erste Stufe zu einem Verständnis der elektronischen Eigenschaften an den Grenzflächen stellen Untersuchungen von Modellmolekülen dar. Deshalb wurden die im ersten Bewilligungszeitraum begonnenen Photoemissionsuntersuchungen an Fullerenen fortgesetzt und auf Kohlenstoffnanoröhren (SWNT) ausgedehnt.

-
- [1] R. H. Friend, R. W. Gymer, A.B. Holmes, J. H. Burroughes, R. N. Marks, C. Taliani, D.D.C. Bradley, D. A. Dos Santos, J. L. Brédas, M. Lögdlund, W. R. Salaneck, *Nature* **397** (1999) 121
 - [2] J.H. Schön, Ch. Kloc, E. Bucher, B. Batlogg, *Nature* **403** (2000) 408
 - [3] A. Dodabalapur, E. Katz, L. Torsi, R. C. Haddon, *Science* **269** (1995) 1560
 - [4] J. H. Schön, S. Berg, Ch. Kloc, B. Batlogg, *Science* **287** (2000) 1022
 - [5] B. Crone, A. Dodabalapur, Y.-Y. Lin, R. W. Filas, Z. Bao, A. LaDuca, R. Sarpeshkar, H. E. Katz, W. Li, *Nature*, **403** (2000) 521
 - [6] H.E. Katz, A.J. Lovinger, J. Johnson, Ch. Kloc, T. Siegrist, W. Li, Y.-Y. Lin, A. Dodabalapur, *Nature* **404** (2000) 478

Schlussbericht – Liste der Veröffentlichungen

- H. Peisert, T. Schwieger, M. Knupfer, M. S. Golden, J. Fink
Interface properties of Alq₃/TPD on sputter-cleaned ITO
Synth. Metals **121** (2001) 1435
- T. Schwieger, H. Peisert, M. Knupfer, M. S. Golden, J. Fink
Electronic structure of K-intercalated Alq₃ studied by photoemission spectroscopy
Phys. Rev. B **63** (2001) 165104
- M. Knupfer, H. Peisert, T. Schwieger
Band gap and correlation effects in the organic semiconductor Alq₃
Phys. Rev. B (in print)
- H. Peisert, T. Schwieger, J. M. Auerhammer, M. Knupfer, M. S. Golden, J. Fink, P. R. Bressler, M. Mast
Order on disorder: copper phthalocyanine thin films on technical substrates
J. Appl. Phys. **90** (2001) 466
- H. Peisert, T. Schwieger, J.M. Auerhammer, M. Knupfer, M.S. Golden, J. Fink, P.R. Bressler, M. Mast
Highly ordered films of copper phthalocyanine on technical substrates, in: Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft fuer Synchrotronstrahlung BESSY, Annual Report 2000, (2001) 247
- J.M. Auerhammer, T. Kim, M. Knupfer, M.S. Golden, J. Fink, N. Tagmatarchis, K. Prassides,
Vibrational and electronic excitations of (C₅₉N)₂
Solid State Communications 117 (2001) 697
- C. Silien, I. Marenne, J. Auerhammer, N. Tagmatarchis, K. Prassides, P.A. Thiry, P. Rudolf,
Adsorption of fullerene and azafullerene on Cu(111) studied by electron energy loss spectroscopy,
Surface Science 482-485 (2001) 1
- T. Pichler, Z. Hu, T. Schwieger, H. Peisert, S. Legner, M. Knupfer, M. S. Golden, P. Kuran, P. Georgi, L. Dunsch, J. Fink, L. Kjeldgaard, P. Brühwiler, Ch. Jung, R. Follath, H. Kato, H. Shinohara
The electronic structure of rare earth metallofullerenes from high energy spectroscopy
in 'Recent Advances in the Chemistry and Physics of Fullerenes and Related Materials', Eds.; K. M. Kadish and R. S. Ruoff, Electrochemical Society. Pennington, NJ, 2000, in press.
- H. Peisert, T. Schwieger, M. Knupfer, M.S. Golden, J. Fink
Interface properties of organic/indium-tin oxide and organic/GeS(001) studied using photoemission spectroscopy
J. Appl. Phys. **88** (2000) 1535

- X. Liu, H. Peisert, R. Friedlein, M. Knupfer, M. S. Golden, J. Fink, O. Jost, A. A. Gorbunov, W. Pompe, T. Pichler
The spectroscopic investigation of the optical and electronic properties of SWCNT
XIV. International Winterschool/Euroconference, Kirchberg/Österreich, 4.-11.3.00, in:
"Electronic Properties of Novel Materials - Molecular Nanostructures", H. Kuzmany,
J. Fink, M. Mehring, S. Roth (ed.), AIP Conference Proceedings 544 (2000) 288
- T. Schwieger, H. Peisert, M. Knupfer, M. S. Golden, J. Fink, T. Pichler, H. Kato, H. Shinohara
Photoemission spectroscopy of Gd@C82
XIV. International Winterschool/Euroconference, Kirchberg/Österreich, 4.-11.3.00, in:
"Electronic Properties of Novel Materials - Molecular Nanostructures", H. Kuzmany,
J. Fink, M. Mehring, S. Roth (ed.), AIP Conference Proceedings, **544** (2000) 142