



Alexander Rohr (Autor)

# **Herstellung und Untersuchung von nasschemisch prozessierten Hybrid-OLEDs mit neuartigem TADF- Cu(I)-Emitterkomplex**

Alexander Rohr

**Herstellung und Untersuchung  
von nasschemisch prozessierten  
Hybrid-OLEDs mit neuartigem  
TADF-Cu(I)-Emitterkomplex**



Cuvillier Verlag Göttingen  
Internationaler wissenschaftlicher Fachverlag

<https://cuvillier.de/de/shop/publications/8061>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentzsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,  
Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: [info@cuvillier.de](mailto:info@cuvillier.de), Website: <https://cuvillier.de>

# 1 Einleitung

## 1.1 Anwendungen für OLEDs

Die OLED-Forschung (engl. **O**rganic **L**ight **E**mitting **D**iode), als Teilgebiet der organischen Elektronik, hat seit der Entdeckung der effizienten Elektrolumineszenz an organischen Molekülen 1987 durch Tang und Van Slyke große Fortschritte gemacht [1–3]. Dabei haben sich verschiedene Anwendungsfelder etabliert, in denen die OLED-Technik zum Einsatz kommt [4,5].

Im Bereich der Displaytechnik sind OLED-Bildschirme mit selbstleuchtenden Pixeln entstanden. In der Regel weisen diese Bildschirme sehr hohe Kontrastwerte auf, da für die Schwarzdarstellung die Pixel komplett ausgeschaltet werden können [6,7]. Darüber hinaus erhält man gleichzeitig eine sehr homogene Ausleuchtung des Bildschirms und eine blickwinkelunabhängige Darstellung.

Da OLEDs auf dünne, flexible Substrate aufgebracht werden können, entstehen außerdem ganz neue Designmöglichkeiten [8–10]. Gekrümmte, dünne Bildschirme finden bereits Anwendung, beispielsweise um störende Lichtreflexe zu minimieren oder brillenloses 3D-Fernsehen zu ermöglichen [11]. Bei Produktvorführungen wurden von verschiedenen Herstellern bereits rollbare Displays vorgestellt [12]. In Abb. 1.1 ist beispielhaft ein solches Display dargestellt.

OLEDs versprechen in der Beleuchtungstechnik einen niedrigen Energieverbrauch [13]. Weiterhin sind OLEDs Flächenstrahler, so dass die leuchtenden Flächen das Licht homogen aussenden. Durch eine hohe Auswahl an Materialien und der Möglichkeit einer einfachen Materialdotierung ist eine Anpassung des Emissionsspektrums während der Entwicklung gegeben, so dass für den Verbraucher angenehme Lichtspektren erzeugt werden können [14,15].

Die Möglichkeit zur Nutzung von flexiblen Substraten und die bei Bedarf hohe Transparenz der OLEDs vergrößert außerdem das Designspektrum der Lampen und Beleuchtungselemente [16,17]. Hier gibt es bereits viele Konzepte: Von der leuchtenden Folie für Fensterscheiben, über Heads-up-Displays in optischen Anwendungen (Mikroskope, Periskope), bis hin zu Rück- und Bremsleuchten bei Autos, die perfekt der Karosserieform angepasst sind, gibt es bereits viele Designstudien [18,19].

Allein im Jahr 2016 investierten LG und Samsung Milliardenbeträge in neue Standorte zur OLED-Fabrikation [20,21]. Dadurch werden höhere Stückzahlen von OLED-Produkten in



**Abbildung 1.1:** Prototyp eines rollbaren 18-Zoll-OLED-Displays, vorgestellt von LG auf der CES2016 [12].

den Markt gebracht, was bewirken könnte, dass die OLED-Technologie für den Verbraucher günstiger wird. Eine stärkere Verbreitung der OLED-Technik wird aktuell vor allem durch die hohen Produktionskosten verhindert. Nach Einschätzung der Fa. Merck KGaA wird der Preis für OLED-Fernseher auch auf Dauer stets höher sein als bei LCD-Fernsehern [22]. Über die üblichen Faktoren hinaus, die bei der Markteinführung neuer Technologien eine Rolle spielen, sind viele der notwendigen organischen Materialien zudem außerordentlich teuer. Damit die OLED in der Beleuchtungstechnik gegen die LED konkurrieren kann, muss die Weißlichteffizienz größer als  $100 \text{ lm/W}$  betragen, gleichzeitig darf der Preis nicht höher als  $1 \text{ ct/lm}$  sein [23].

Ein weiteres Problem stellt die Degradation der OLEDs im elektrischen Betrieb dar [24–26]. Dabei kommt es während des Leuchtvorgangs zu einer chemischen Umwandlung der organischen Moleküle, was zu einer Verschlechterung der optischen und elektrischen Moleküleigenschaften führen kann. Dies kann bis zum kompletten Ausfall der Moleküle und letztendlich der OLED führen [27]. Für die bereits im Massenmarkt erhältlichen OLED-Materialien sind elektrische Lebensdauern von mehreren 10.000 Stunden zwar verfügbar, aber gerade für neu entwickelte Materialien sind chemische Optimierungen oft noch notwendig [28].

## 1.2 Cu(I)-Komplexe als neuartige Emittermaterialien in OLEDs

Ein Ansatz zur Verringerung der Preise für OLED-Produkte ist der Austausch bestehender, teurer Materialien durch günstigere Materialien mit den gleichen oder sogar besseren Eigenschaften [29]. Ein weiterer Ansatz ist es, die bislang für marktfähige Produkte verwendete

Vakuumprozessierung der Materialien im OLED-Fertigungsprozess durch nasschemische Prozessierung zu ersetzen [30,31]. Dadurch sind Kosten- und Zeiteinsparungen in der Herstellung möglich. Vor allem aber können größere Substrate einfacher nasschemisch beschichtet werden [32]. Es wurden bereits funktionsfähige, vollständig nasschemisch prozessierte OLEDs vorgestellt [33,34].

In dieser Arbeit wird der Cu(I)-Komplex TUB4 der Fa. Cynora als grün emittierendes Emittermaterial in OLED-Bauteilen eingesetzt und untersucht. Im Vergleich etwa mit dem Emittermaterial Ir(ppy)<sub>3</sub> ist die reine Materialbeschaffung bei TUB4 deutlich günstiger. Da Kupfer statt Iridium als zentrales Metallatom im Emitterkomplex eingesetzt wird, ist dessen Verfügbarkeit gegenüber Iridium deutlich besser [29]. TUB4 wird außerdem nach Herstellerangaben nasschemisch prozessiert, wodurch beide angesprochenen Ansätze zur Produktionskostenreduktion vereinheitlicht werden.

Neben Cu(I)-Komplexen werden auch andere Metall-Komplexe, beispielsweise Ag(I)- und Au(I)-Komplexe, erforscht [35–37]. Cu(I)-Komplexe konnten schon in verschiedenen Veröffentlichungen erfolgreich in OLED-Bauteilen eingesetzt werden [38,39].

Ziel dieser Arbeit ist es, das TUB4 auf seine Eigenschaften hin zu untersuchen. Es soll dabei geklärt werden, ob es als Emittermaterial in OLEDs effizient einsetzbar ist und welche Eigenschaften diese TUB4-OLEDs aufweisen.

Dabei hängen die Eigenschaften von OLEDs allerdings von vielen Faktoren ab. Es ist daher schwierig zu ermitteln, welche davon durch das Emittermaterial TUB4 bestimmt werden. Deshalb werden zunächst die grundlegenden Eigenschaften des TUB4 isoliert untersucht, um Wechselwirkungen mit anderen Materialien auszuschließen. Dabei werden Unterschiede zwischen dem TUB4 und typischen TADF-Emittern beobachtet.

Da in der Regel bei Emittermaterialien sogenanntes Selbstquenching auftritt, werden in den Emitterschichten der OLEDs häufig Hostmaterialien eingesetzt um dies zu verhindern [40]. Daher wird das TUB4 im Anschluss in verschiedene Hostmaterialien dotiert. Die entstehenden Host:TUB4-Systeme werden dann ebenfalls separat charakterisiert und untersucht. Dabei kommen optische und elektrische Messmethoden zum Einsatz.

Abschließend werden OLEDs mit Host:TUB4-Systemen als Emitterschicht hergestellt und charakterisiert. Das Ziel ist es zu ermitteln, ob die in den Einzel- und Mischsystemen beobachteten TUB4-Eigenschaften sich in den OLED-Ergebnissen wiederfinden und welchen Einfluss sie auf die OLED-Performance haben. Es soll weiterhin geprüft werden, welche photometrischen Effizienzen und elektrischen Bauteillebensdauern mit TUB4 als Emittermaterial erreicht werden können.

Da TUB4 nur nasschemisch prozessiert werden kann, zeichnen sich die in dieser Arbeit hergestellten Hybrid-OLEDs dadurch aus, dass alle Schichten von der Löcherinjektionsschicht bis einschließlich der Emitterschicht nasschemisch prozessiert sind. Die darauffolgenden Schichten bis einschließlich der Elektroninjektionsschicht werden anschließend evaporiert aufgebracht.

### 1.3 Aufbau und Gliederung der Arbeit

In Kapitel 2 werden zunächst die wichtigsten theoretischen Grundlagen besprochen.

Kapitel 3 beschreibt die technologischen Gegebenheiten. Es werden die Schritte beschrieben, um die in dieser Arbeit verwendeten organischen Bauteile herzustellen. Zudem werden die verwendeten Untersuchungsmethoden sowie die dafür benötigten Geräte und Messaufbauten vorgestellt.

In Kapitel 4 wird der TUB4-Emitter vorgestellt und untersucht. Ziele dieser Untersuchung sind u.a. das Emissionsverhalten und der Einfluss von Selbstquenching auf das TUB4. Außerdem werden die Hostmaterialien vorgestellt, die bei den Untersuchungen eingesetzt werden.

In Kapitel 5 wird der TUB4-Emitter in Host:TUB4-Systeme eingebracht. An diesen Einschicht-Systemen werden zunächst Absorptions- und Emissionsuntersuchungen bei unterschiedlichen Hostmaterialien und Dotierkonzentrationen durchgeführt. Danach finden Untersuchungen zu den Wechselwirkungen zwischen den Hosts und TUB4 statt. Dabei werden Fragen zum Energieübertrag zwischen den Materialien beantwortet.

In Kapitel 6 werden die Host:TUB4-Systeme als Emitterschicht in eine OLED-Konfiguration gebracht. Das Kapitel widmet sich der Evaluierung eines für TUB4 passenden OLED-Stapels und untersucht, ob das TUB4 durch angrenzende Schichten im OLED-Bauteil gequench wird.

In Kapitel 7 werden dann die Bauteilergebnisse von OLEDs mit Host:TUB4-Schichten als Emitterschicht vorgestellt. Dabei werden verschiedene Variationen bezüglich der Hostmaterialien, der TUB4-Dotierkonzentration, der Emitterschichtdicke, der ETL-Materialien und der HTL durchgeführt. Die entsprechenden Ergebnisse bezüglich photometrischer Effizienz, elektrischer  $t_{50}$ -Lebensdauer und Emissionsspektren der TUB4-OLEDs werden dann vorgestellt und diskutiert.

In Kapitel 8 findet sich eine Diskussion über die Ergebnisse der gesamten Arbeit.

## 2 Theorie

In diesem Kapitel werden die Grundlagen beschrieben, die für das Verständnis der nachfolgenden Kapitel notwendig sind. Dabei gibt dieses Kapitel nur einen kleinen Einblick in die grundlegende OLED-Thematik.

Alle in dieser Arbeit verwendeten Materialien gehören zur Gruppe der organischen Materialien [41]. Um die Prozesse in OLEDs zu verstehen, müssen zunächst die grundlegenden Eigenschaften organischer Materialien bekannt sein. Diese werden im ersten Abschnitt vorgestellt.

Für den OLED-Betrieb ist ein spezielles Emittiermaterial wichtig. Es muss die Eigenschaft besitzen, beim Relaxieren aus einem angeregten Zustand in ein tieferes Energieniveau seine Energie als Photonen abzugeben. Dadurch wird das Licht in den OLEDs erzeugt. Im zweiten Abschnitt dieses Kapitels wird daher beschrieben, wie organische Materialien angeregt werden und welche Arten der Energierelaxation stattfinden können.

Im dritten Abschnitt werden die stattfindenden Wechselwirkungen in Host-Emitter-Systemen beleuchtet. Diese haben einen großen Einfluss auf den elektrischen OLED-Betrieb und nehmen auch in dieser Arbeit einen großen Teil der Untersuchungen ein.

Da in organischen Materialien keine freien, intrinsischen Ladungsträger vorhanden sind, müssen diese für den elektrischen OLED-Betrieb von außen eingebracht werden. Dies geschieht über einen Ladungsträgertransport innerhalb der OLED, der im vierten Abschnitt dieses Kapitels beschrieben wird.

Im fünften Abschnitt dieses Kapitels wird dann die grundsätzliche Funktionsweise von OLEDs beschrieben.

Während des elektrischen Betriebs kann es außerdem zur Degradation der OLED kommen. Dieses Phänomen wird im sechsten Abschnitt dieses Kapitels beleuchtet.

### 2.1 Beschreibung organischer Moleküle

Die meisten aus Kohlenstoffverbindungen bestehenden Moleküle werden als organische Materialien bezeichnet [41]. Grundsätzlich unterteilt man dabei organische Materialien in zwei

Klassen, konjugierte Polymere und niedermolekulare Verbindungen [42]. Letztere werden auch als kleine Moleküle bezeichnet.

Die organischen Halbleitermoleküle beider Klassen setzen sich aus Kohlenstoffverbindungen mit konjugierten Doppelbindungen zusammen. Dies soll anhand des Kohlenstoffatoms näher beschrieben werden und legt die Grundkenntnisse zum Verständnis des Ladungstransports in organischen Schichten. Die Ausführungen bis zum nächsten Abschnitt sind entnommen aus [43–45].

Das Kohlenstoffatom hat das Elementsymbol C und die Ordnungszahl 6. Das bedeutet, dass es im ungeladenen Zustand aus sechs Protonen und sechs Elektronen besteht. Von den sechs Elektronen befinden sich zwei auf dem inneren 1s-Orbital. Zusätzlich besitzt das Kohlenstoffatom vier Valenzelektronen: Davon befinden sich zwei auf dem 2s-Orbital, ein weiteres auf dem  $2p_x$ - und ein weiteres auf dem  $2p_y$ -Orbital. Diese vier Elektronen stehen für Bindungen zu anderen Atomen zur Verfügung.

Aufgrund der unterschiedlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Valenzelektronen, die sich in den Orbitalformen widerspiegeln, müssten diese unterschiedliche Bindungen eingehen, beispielsweise bei den C-H-Bindungen des Methans ( $\text{CH}_4$ ). Untersuchungen haben allerdings gezeigt, dass diese ununterscheidbar sind. Das liegt an der sogenannten  $sp^3$ -Hybridisierung, die bei vier Bindungspartnern Anwendung findet. Hybridisierung bezeichnet den Modellierungsvorgang aus der Linearkombination der Wellenfunktionen der Atomorbitale in ein Hybridorbital. Bei zwei Bindungspartnern wird von einer  $sp$ -, bei drei Bindungspartnern von einer  $sp^2$ -Hybridisierung gesprochen.

Im Methan findet demnach eine  $sp^3$ -Hybridisierung zwischen dem Kohlenstoffatom und den vier Wasserstoffatomen statt. Das kugelförmige 2s-Orbital ist nach dem Pauli-Prinzip doppelt besetzt und wird mit den beiden einfach besetzten, hantelförmigen 2p-Orbitalen ( $2p_x$  und  $2p_y$ ) kombiniert. Es kommt zu einer tetraedischen Ausrichtung im Raum und gleichartigen Verbindungen mit den 1s-Elektronen der Wasserstoffatome. Dies wird als nichtkonjugierte Hybridisierung bezeichnet, da alle Bindungen gleich sind.

In konjugierten Molekülen und Polymeren hybridisiert das Kohlenstoffatom zu drei  $sp^2$ -Orbitalen und einem  $p_z$ -Orbital, beispielsweise in Ethylen. Die drei  $sp^2$ -Orbitale liegen dabei in einer Ebene und stehen in einem Bindungswinkel von  $120^\circ$  zueinander. Nach der Hundtschen Regel sind sie dabei einfach mit Elektronen des gleichen Spins besetzt. Sie bilden stark lokalisierte  $\sigma$ -Bindungen aus. Das  $p_z$ -Orbital formt eine schwache  $\pi$ -Bindung, in der die Elektronen delokalisiert sind und es nur einen schwachen Überlapp mit dem  $\pi$ -Orbital des Bindungspartners gibt. Die Kombination aus  $\sigma$ - und  $\pi$ -Bindung wird als Doppelbindung bezeichnet.

In den organischen Molekülen bildet sich demnach ein System aus Doppelbindungen aus, welche jeweils durch Einfachbindungen voneinander getrennt sind. In einem solchen System kommt es zum Überlapp der  $\pi$ -Orbitale mehrerer Doppelbindungen zu einem ausgedehnten  $\pi$ -Elektronensystem. Dieses wird als Molekülorbital bezeichnet, die Elektronen können sich hier quasi frei bewegen.

Die Anzahl der entstehenden  $\pi$ -Molekülorbitale hängt proportional von der Anzahl der einzelnen Atomorbitale des Moleküls ab. Je mehr Atomorbitale zur Verfügung stehen, desto mehr  $\pi$ -Molekülorbitale entstehen. Diese werden in bindend ( $\pi$ -Zustand) und anti-bindend ( $\pi^*$ -Zustand) unterteilt.

Die Besetzung der Molekülorbitale erfolgt wie in den Atomorbitalen nach dem Pauli-Prinzip, wobei die bindenden  $\pi$ -Orbitale die geringsten Energien haben. Das höchste, besetzte Orbital bezeichnet man als HOMO (engl. **H**ighest **O**ccupied **M**olecular **O**rbital). Das niedrigste unbesetzte Orbital wird als LUMO (**L**owest **U**noccupied **M**olecular **O**rbital) bezeichnet. Die optische Bandlücke des organischen Materials wird durch diese beiden Grenzorbitale gekennzeichnet, die einen starken Einfluss auf die elektrischen und optischen Materialeigenschaften ausüben.

## 2.2 Energieanregung und -relaxation einzelner Moleküle

Dieser Abschnitt behandelt zunächst die Anregung von organischen Molekülen, beschreibt danach den angeregten Zustand als Exziton und geht anschließend auf die Formen der Molekülrelaxation ein.

### 2.2.1 Molekülanregung und exzitonische Zustände

Die Anregung eines organischen Moleküls kann entweder optisch oder elektrisch stattfinden. Zunächst wird der optische Fall betrachtet.

#### Optische Anregung

Während der Bestrahlung eines organischen Moleküls mit Photonen passender Energie kommt es zu einem Absorptionsverhalten des Moleküls [44]. Die passende Energie ergibt sich molekülabhängig direkt aus dem Abstand der Grenzorbitale und deren vibronischen Zuständen. Bei dem Absorptionsprozess werden die gebundenen  $\pi$ -Elektronen zu anti-bundenen  $\pi^*$ -Elektronen angeregt. Anders als etwa beim Kohlenstoff ist es in organischen Heteroatomen auch möglich, dass sich nichtbindende n-Orbitale ausbilden, die bei Anregung zu  $\sigma^*$ - oder  $\pi^*$ -Zuständen angeregt werden [46].



Die Ausführungen bis zum nächsten Abschnitt sind entnommen aus [44, 47, 48]. Nach dem Anregungsprozess haben sich die Molekülorbitale anders angeordnet. Vor dem Prozess befindet sich das Molekül im sogenannten Grundzustand, nach dem Prozess befindet es sich im angeregten Zustand. Ob der Anregungsprozess wahrscheinlich ist hängt davon ab, ob bestimmte quantenmechanische Regeln erfüllt sind. Die Übergangswahrscheinlichkeit hängt dabei von den Eigenschaften der Elektronenzustände wie Multiplizität, Symmetrie, Parität und Energie ab.

Multiplizität ist in der Quantenmechanik die Anzahl der linear unabhängigen Zustände, die in bezug zu einer ausgewählten Observable einen bestimmten Eigenwert gemeinsam haben. Diese Zustände stellen damit entartete Eigenzustände dieser Observablen dar. Die hier gewählte Observable ist der Gesamtspin  $S$  der Elektronen, daher wird von Spinnmultiplizität gesprochen. Ein System mit einem Gesamtspin  $S$  hat dann die Spinnmultiplizität  $M = 2S + 1$ . Da der Elektronspin eines einzelnen Elektrons  $s = \pm \frac{1}{2}$  betragen kann, ergibt sich im Ein-elektronensystem eine Multiplizität von  $M = 2 \cdot \pm \frac{1}{2} + 1 = 2$ , es liegt dann im sogenannten Dublett-Zustand vor.

Bei Mehrelektronen-Systemen muss der angesprochene Gesamtspin  $S$  des gesamten Elektronensystems berechnet werden. Für ein Atom mit  $i$  Elektronen ergibt sich:

$$S = \left| \sum_i s_i \right| \quad (2.1)$$

Nach dem Pauli-Prinzip müssen zwei Elektronen desselben Zustands gegensätzliche Spins besitzen, womit die Spinzahlen zusammen 0 ergeben und die Multiplizität 1 (Singulett) beträgt. In manchen Fällen allerdings haben die Elektronen im Grundzustand und im angeregten Zustand die gleiche Spinrichtung, so dass die Spinzahlen zusammen 1 ergeben und die Multiplizität 3 (Triplet) ergibt. Optische Anregung von einem Singulett- in einen Tripletzustand ist aufgrund der Spinerhaltung sehr unwahrscheinlich, d.h. ein optischer Übergang kann nur zwischen Zuständen gleicher Multiplizität stattfinden.

Das bedeutet konkret, dass eine optische Anregung aus dem Grundzustand nur in ein angeregtes Singulettniveau stattfinden kann. Dabei entsteht ein Elektron-Loch-Paar, da das angeregte Elektron im Grundniveau natürlich nach der Anregung fehlt. Dieses Elektron-Loch-Paar wird als Exziton bezeichnet [49, 50]. Im Fall der optischen Anregung ist das immer ein Singulett-Exziton. Es ist elektrisch neutral und hat einen ganzzahligen Spin.

Es ist aber zu beachten, dass man das Triplettniveau trotzdem durch optische Anregung der Moleküle besetzen kann. Dabei wird zunächst das Molekül in den erlaubten angeregten Singulett-Zustand angeregt. Durch sogenanntes Inter-System-Crossing (ISC) kommt es danach

zu einem Energietransfer vom angeregten Singulettniveau in eines der Triplettneaus, wenn das organische Material für diesen Prozess eine hohe Wahrscheinlichkeit aufweist.

### Elektrische Anregung

Bei der elektrischen Anregung eines Moleküls kommt es zu einem Aufeinandertreffen eines Elektrons und eines Lochs auf dem Molekül selbst. Diesen Zustand wird wie bereits beschrieben als Exziton bezeichnet. Die nötigen Ladungsträger müssen von außen eingebracht werden. Dies geschieht durch Ladungstransport im Schichtstapel der OLED und wird in Kapitel 2.4 beschrieben.

Während bei der optischen Anregung nur Singulett-Exzitonen entstehen, kommt es im Fall der elektrischen Anregung aufgrund der Spin-Statistik der beteiligten Ladungsträger zu 25 % Singulett-Exzitonen und 75 % Triplett-Exzitonen. Die Singulett-Zustände zeichnen sich durch antiparallelen Spin der Elektronen zueinander aus, während die Triplettzustände sich durch parallele Spins der beteiligten Elektronen auszeichnen [51].

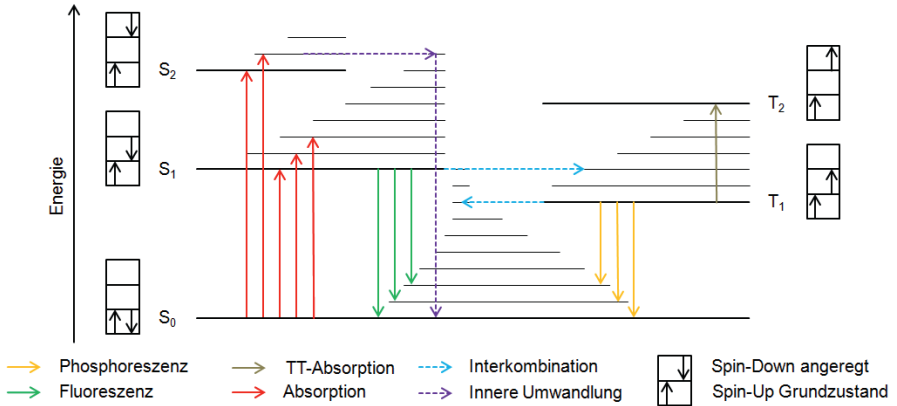
Abhängig von der Entfernung zwischen Elektron und Loch unterscheidet man drei Typen von Exzitonen [52]. Zunächst gibt es das Wannier-Mott-Exziton mit einem Bindungsradius von bis zu 100 Å. Da dieser Exzitonotyp aber nur anorganischen Halbleitern zuzuordnen ist und aufgrund der starken Lokalisation der Ladungsträger in organischen Materialien nicht entsteht, wird an dieser Stelle auf diesen Typ nicht weiter eingegangen.

Weiterhin gibt es das Frenkel-Exziton. Der Exzitonradius ist hier nur etwa 5 Å groß. Elektron und Loch sind hier auf einem Molekül lokalisiert. Es kommt zu einem Überlapp der Ladungswolken, welcher die Größe der Wechselwirkung beschreibt. Da die Wechselwirkung damit auf Coulomb-Wechselwirkungen beruht, sind die Anziehungskräfte vergleichsweise stark und Exziton-Bindungsenergien von 1 eV sind damit für organische Materialien typisch.

Zuletzt gibt es noch die sogenannten Charge-Transfer-Komplexe, auch kurz CT-Komplexe bezeichnet. Der Ladungsträgerabstand liegt im Bereich direkt benachbarter Atome oder Moleküle, also nochmal dichter als die Frenkel-Exzitonen [53]. Während bei optischer Anregung in erster Linie Frenkel-Exzitonen entstehen, entstehen bei Ionisierung über elektrische Anregung meistens CT-Komplexe, die aber an anderer Stelle auf einem Molekül lokalisiert sind und dann wiederum ein Frenkel-Exziton bilden.

#### 2.2.2 Molekülrelaxation

Nachdem das Exziton erzeugt wurde, zerfällt es anschließend aufgrund der Coulomb-Kräfte und es findet ein Rekombinationsprozess statt, bei dem die Exzitonenbindungsenergie  $E_{ex}$  freigesetzt wird. Für diese gilt:



**Abbildung 2.1:** Das Jablonski-Diagramm zeigt die Energieübergänge in organischen Materialien, Darstellung nach [55, 56]. Durchgezogene Pfeile beschreiben strahlende Prozesse, gestrichelte Pfeile beschreiben nicht-strahlende Prozesse.

$$E_{ex} = E_t - E_{opt} \quad (2.2)$$

Dabei ist  $E_t$  die Energie der Transportbandlücke und  $E_{opt}$  die Energie der optischen Bandlücke [54].

In Abb. 2.1 ist das sogenannte Jablonski-Diagramm dargestellt, welches die Energieübergänge in organischen Materialien veranschaulicht [55, 56]. Die Pfeile in der Abbildung symbolisieren die zwei Spinrichtungen der Elektronen, Spin-Up und Spin-Down. Es ist gut zu erkennen, dass sich die Singulett- und Triplett-niveaus durch die im vorherigen Abschnitt beschriebenen Spinrichtungen der Elektronen ergeben.  $S_0$  bezeichnet im Diagramm den Grundzustand. Die Zustände  $S_x$  sind die angeregten Singulett-Zustände, die  $T_x$ -Zustände sind die entsprechenden Triplets mit  $x > 0$ .

Jedes Hauptniveau teilt sich dabei noch in sogenannte vibronische Zustände auf. Bei einer optischen oder elektrischen Anregung werden diese Niveaus ebenfalls besetzt. Aufgrund der Umordnung der Elektronenverteilung des Moleküls bei einer Anregung, kommt es zu einer Aufweitung der Bindung der Atome, was in einer größeren Bindungslänge resultiert.