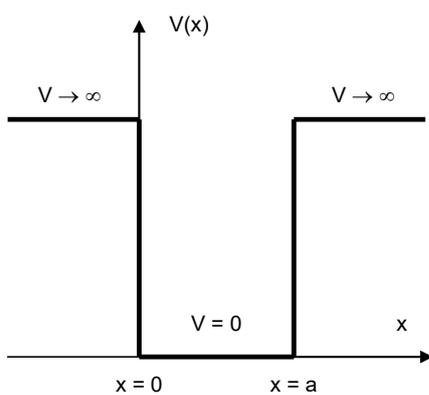


# Organische Transistoren

## 1. Elektronische Eigenschaften konjugierter Kohlenwasserstoffe

- Organische Transistoren sind Feldeffekt-Transistoren, bei denen der Halbleiter als dünne Schicht eines **organischen Festkörpers** ausgebildet ist (*organic thin-film transistor, TFT*). Demzufolge werden die elektrischen Eigenschaften organischer Transistoren durch die elektronischen Eigenschaften des organischen Festkörpers bestimmt.
- Organische Festkörper sind aus Kohlenwasserstoff-Molekülen aufgebaut. Die elektronischen Eigenschaften organischer Festkörper werden demzufolge durch die **elektronischen Eigenschaften der organischen Moleküle** sowie durch die Anordnung der Moleküle innerhalb des Festkörpers und die **Bindungsverhältnisse** zwischen benachbarten Molekülen bestimmt.
- Die Bindungen zwischen den einzelnen Kohlenwasserstoff-Molekülen innerhalb des Festkörpers beruhen auf relativ schwachen **van-der-Waals-Wechselwirkungen**.
- Im Gegensatz dazu beruhen die Bindungen zwischen den einzelnen Atomen innerhalb der Moleküle auf relativ starken **kovalenten Bindungen**.
- Für die Bindungsverhältnisse zwischen den einzelnen Atomen innerhalb der Moleküle sind die **Valenzelektronen** der Atome verantwortlich.
- Das Verhalten der Elektronen wird durch die **Wellenfunktion**  $\psi(x)$  beschrieben. Jede Wellenfunktion ist eine Lösung der **Schrödinger-Gleichung** und beschreibt das Verhalten der Elektronen unter dem Einfluss eines ortsabhängigen Potentials  $V(x)$ :
$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m_0(E - V(x))}{\hbar^2} \psi(x) = 0;$$
$$\left(\hbar = \frac{h}{2\pi}\right).$$
- Auf die Elektronen im Festkörper wirkt das Potential der positiv geladenen **Atomkerne**. Dieses Potential bewirkt die elektrostatische Bindung der Valenzelektronen an den Atomkern. Durch Lösung der Schrödinger-Gleichung für das Coulomb-Potential des Atomkerns können die Wellenfunktionen der Valenzelektronen berechnet werden.
- Die Wellenfunktion eines an den Atomkern gebundenen Valenzelektrons ist eine **stehende Welle**, durch die das **Atomorbital** definiert wird. Form und Ausdehnung der Atomorbitale entsprechen der räumlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen. Diese **Aufenthaltswahrscheinlichkeit** (eigentlich eine Wahrscheinlichkeitsdichte) ist das Betragsquadrat der Wellenfunktion:
$$|\psi(x)|^2 = \psi(x)\psi^*(x).$$
- Streng genommen erstreckt sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Valenzelektronen bis ins Unendliche. Als Atomorbital wird der Raum definiert, in dem sich die Elektronen mit etwa 90 % Wahrscheinlichkeit aufhalten.

- Für jede Wellenfunktion, die eine Lösung der Schrödinger-Gleichung ist, existiert ein **Eigenwert**  $E_n$  der Schrödinger-Gleichung. Die Eigenwerte der Schrödinger-Gleichung sind Energien. Das bedeutet, dass jeder Wellenfunktion eine bestimmte **Energie** zugeordnet ist, und zwar die Energie des Elektrons bzw. des Atomorbitals, das durch diese Wellenfunktion beschrieben wird. Je weiter ein Atomorbital vom Atomkern entfernt ist, umso größer ist die Energie der Elektronen in diesem Atomorbital.
- Die räumliche Ausdehnung des auf die Valenzelektronen wirkenden Potentials des Atomkerns kann näherungsweise durch einen **eindimensionalen, unendlich hohen Potentialkasten** beschrieben werden. Für dieses stark vereinfachte Modell liefert die Schrödinger-Gleichung folgende Lösungen:



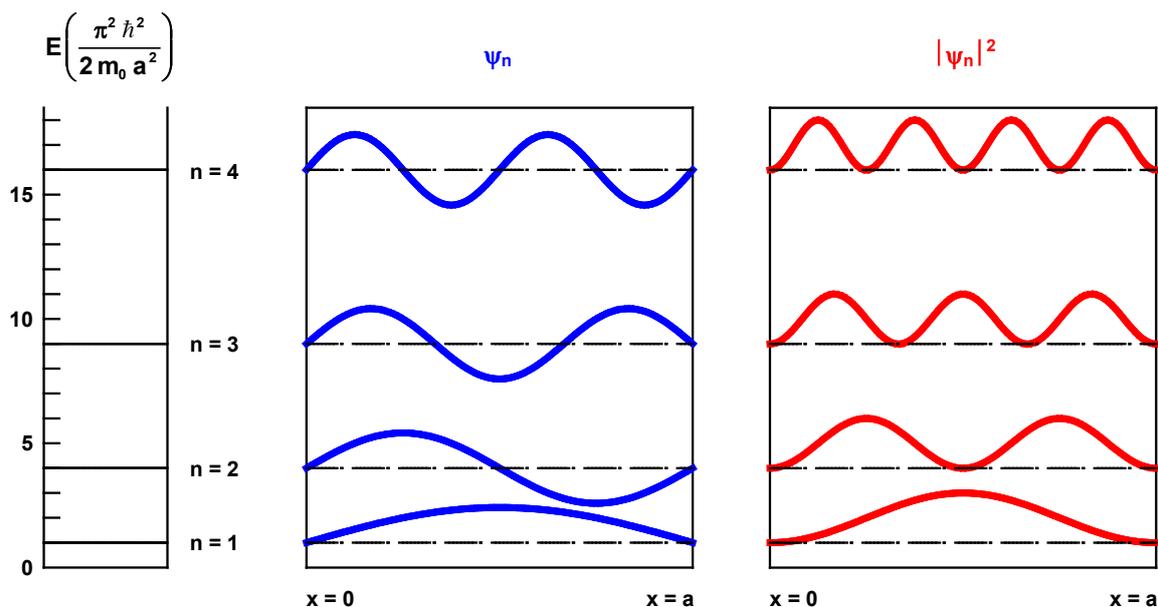
$$\underline{x < 0 \text{ und } x > a:} \quad \psi = 0 \quad |\psi|^2 = 0$$

$$\underline{0 \leq x \leq a:}$$

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

$$|\psi_n|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi x}{a}$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_0 a^2}, \quad n=1, 2, 3, \dots$$



Beispiel:

Für  $a = 5 \text{ \AA}$  ergeben sich die folgenden Eigenenergien:

$$E_1 = 2.4 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 1.5 \text{ eV}$$

$$E_2 = 9.6 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 6.0 \text{ eV}$$

$$E_3 = 2.2 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 13.5 \text{ eV}$$

- Das reale Coulomb-Potential des Atomkerns ist radialsymmetrisch:

$$V(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

- Dementsprechend wird die Schrödinger-Gleichung für das **Kugelkoordinatensystem** formuliert:

$$\nabla^2\psi(r, \theta, \varphi) + \frac{2m_0(E - V(r))}{\hbar^2}\psi(r, \theta, \varphi) = 0$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{2m_0(E - V(r))}{\hbar^2} \psi = 0$$

- Durch Lösung der Schrödinger-Gleichung im Kugelkoordinatensystem ergeben sich die folgenden Eigenenergien  $E_n$  sowie die Beziehungen zwischen der **Hauptquantenzahl**  $n$ , der **Nebenquantenzahl**  $\ell$  (Drehimpulsquantenzahl) und der **Magnetquantenzahl**  $m$ :

$$E_n = \frac{-m_0 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$$

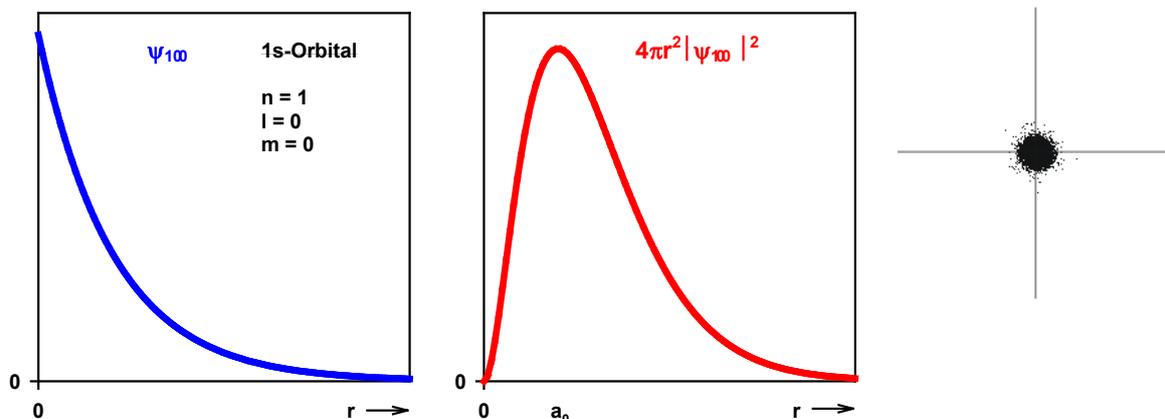
- Für  $n = 1$  liefert die Schrödinger-Gleichung genau eine Lösung, nämlich das **1s-Orbital** ( $n = 1, \ell = 0, m = 0$ ). Die Wellenfunktion für das 1s-Orbital lautet:

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

mit dem Bohr-Radius

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_0 e^2} = 0.053 \text{ nm}$$

- Das **1s-Orbital** ist radialsymmetrisch. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist im Abstand  $a_0$  vom Atomkern am größten:

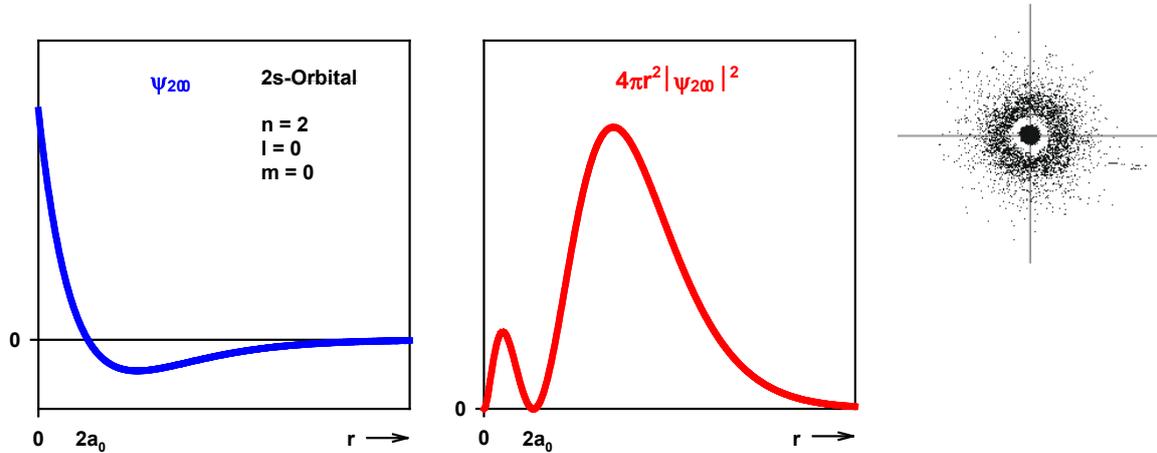


- Für  $n = 2$  gibt es insgesamt vier Lösungen, nämlich das 2s-Orbital ( $n = 2, \ell = 0, m = 0$ ) und die drei 2p-Orbitale ( $n = 2, \ell = 1, m = -1, 0, +1$ ).

- Für das **2s-Orbital** ( $n = 2, \ell = 0, m = 0$ ) ergibt sich die folgende Wellenfunktion:

$$\Psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \left( 2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

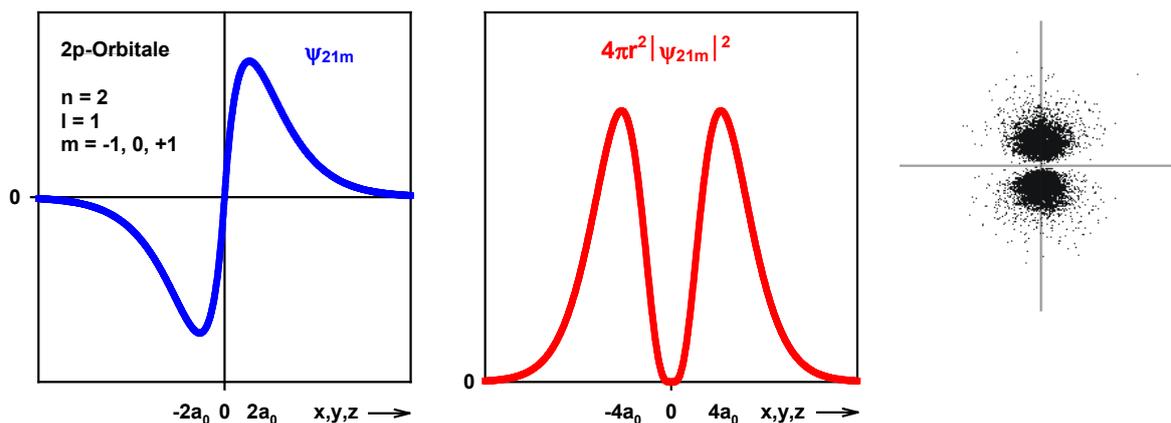
- Das **2s-Orbital** ist wie das 1s-Orbital radialsymmetrisch, hat im Gegensatz zum 1s-Orbital allerdings einen **Knoten** bei  $r = 2 \cdot a_0$ :



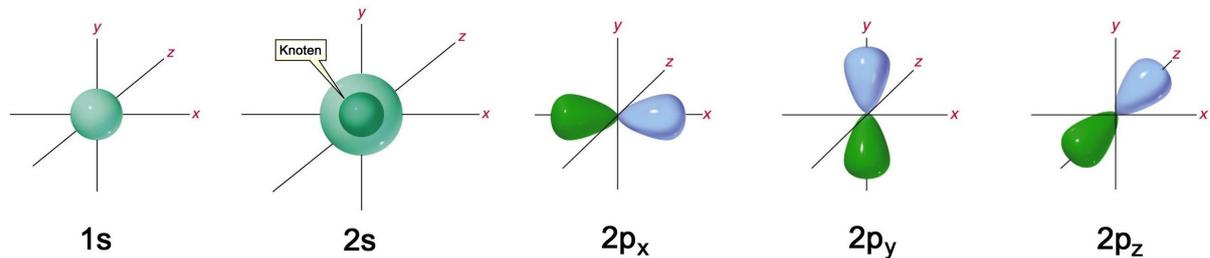
- Die drei **2p-Orbitale** unterscheiden sich in der Magnetquantenzahl  $m$ , die für  $n = 2$  und  $\ell = 1$  die Werte  $m = -1, m = 0$  und  $m = 1$  annehmen kann und so die räumliche Ausrichtung der 2p-Orbitale vorgibt:

2p <sub>x</sub> -Orbital	2p <sub>y</sub> -Orbital	2p <sub>z</sub> -Orbital
$\Psi_{21(-1)} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{x}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\Psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{y}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\Psi_{211} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{z}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$

- Die **2p-Orbitale** sind hantelförmig und haben im Ursprung ( $x = 0, y = 0$  bzw.  $z = 0$ ) einen **Knoten** mit Phasenwechsel:



- Jedes Atomorbital hat also eine charakteristische Form, die sich aus dem Betragsquadrat der Wellenfunktion ergibt. Ist die Wellenfunktion durch **Knoten** (Phasenwechsel) gekennzeichnet, so finden sich diese Knoten auch in den Atomorbitalen wieder. An den Knoten ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen gleich Null. Die Phasen der Wellenfunktion können durch unterschiedliche Farben dargestellt werden:

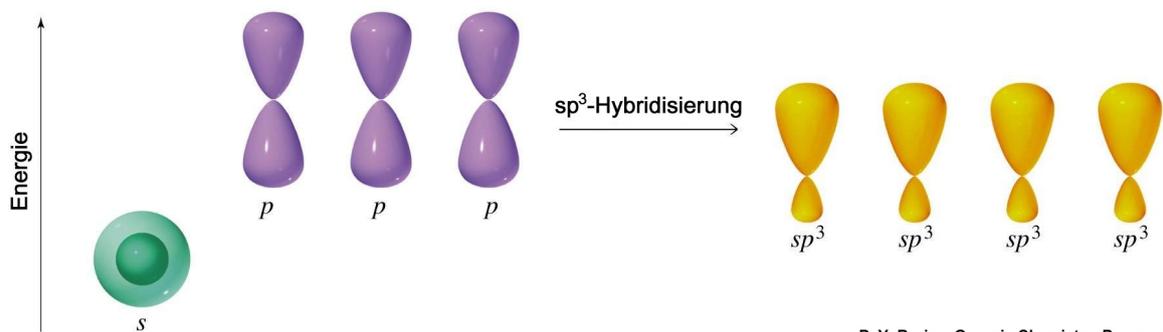


P. Y. Bruice, Organic Chemistry, Pearson

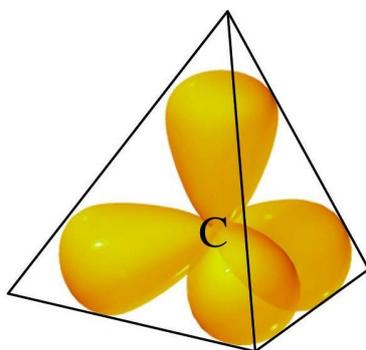
- Die Besetzung der Orbitale im Grundzustand ist durch das **Aufbauprinzip** (Elektronen besetzen Orbitale mit möglichst niedriger Energie), das **Pauli-Prinzip** (jedes Orbital ist mit maximal zwei Elektronen mit entgegengesetztem Spin besetzt) und die **Hundsche Regel** (der Gesamtspin nimmt den maximal möglichen Wert an; bei Vorhandensein entarteter Orbitale – also von Orbitalen mit gleicher Energie – werden demnach zunächst alle leeren Orbitale mit je einem Elektron mit gleichem Spin besetzt) festgelegt.
- Die sechs Elektronen des Kohlenstoff-Atoms sind im Grundzustand auf die Atomorbitale  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_y$  und  $2p_z$  verteilt. Die Konfiguration im Grundzustand lautet  $1s^2 2s^2 2p^2$ .
- Begründung:** Das  $1s$ -Orbital ist das Orbital mit der niedrigsten Energie und ist deshalb mit zwei Elektronen mit entgegengesetztem Spin besetzt (Aufbau-Prinzip und Pauli-Prinzip). Die Energie des  $2s$ -Orbitals ist auf Grund der Spin-Bahn-Kopplung etwas geringer als die Energie der  $2p$ -Orbitale, deshalb ist auch das  $2s$ -Orbital mit zwei Elektronen mit entgegengesetztem Spin besetzt (Aufbau-Prinzip und Pauli-Prinzip). Die Orbitale  $2p_x$ ,  $2p_y$  und  $2p_z$  haben die gleiche Energie (sind entartet), deshalb sind zwei dieser Orbitale mit jeweils einem Elektron mit gleichem Spin besetzt (Zweite Hundsche Regel).
- Besetzung der Atomorbitale** der Elemente 1 bis 11 im Grundzustand:

		1s	2s	2p <sub>x</sub>	2p <sub>y</sub>	2p <sub>z</sub>	3s	n	l	m	s
1	H	↑						1	0	0	-½
2	He	↑↓						1	0	0	+½
3	Li	↑↓	↑					2	0	0	-½
4	Be	↑↓	↑↓					2	0	0	+½
5	B	↑↓	↑↓	↑				2	1	-1	-½
6	C	↑↓	↑↓	↑	↑			2	1	0	-½
7	N	↑↓	↑↓	↑	↑	↑		2	1	+1	-½
8	O	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑		2	1	-1	+½
9	F	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑		2	1	0	+½
10	Ne	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓		2	1	+1	+½
11	Na	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	3	0	0	-½

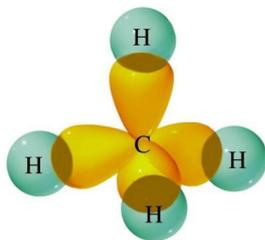
- Die kovalenten Bindungen zwischen den einzelnen Atomen innerhalb eines Moleküls entstehen in Folge der Überlappung von Atomorbitalen benachbarter Atome und der Zusammenlegung der sich überlappenden Atomorbitale zu **Molekülorbitalen**.
- Die Bindungsverhältnisse des Kohlenstoffs werden vorzugsweise mittels des Konzepts der **Orbitalhybridisierung** beschrieben. Dabei wird zwischen der  $sp^3$ -Hybridisierung, der  $sp^2$ -Hybridisierung und der  $sp$ -Hybridisierung unterschieden.
- Für die  **$sp^3$ -Hybridisierung** wird angenommen, dass das doppelt besetzte  $2s$ -Orbital mit den drei  $2p$ -Orbitalen (von denen zwei einfach und eines unbesetzt sind) zu vier entarteten  $sp^3$ -Hybridorbitalen kombiniert.
- Der Charakter der  $sp^3$ -Hybridorbitale entspricht zu 25% dem des  $2s$ -Orbitals und zu 75% dem der  $2p$ -Orbitale. Die Energie der  $sp^3$ -Hybridorbitale ist größer als die Energie des  $2s$ -Orbitals und kleiner als die Energie der  $2p$ -Orbitale. Die Form der  $sp^3$ -Hybridorbitale ergibt sich aus der Kombination der Form des  $2s$ -Orbitals und der Form der  $2p$ -Orbitale:



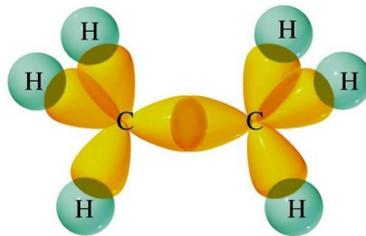
- Die vier  $sp^3$ -Hybridorbitale richten sich tetraedrisch im Raum aus und sind mit je einem Elektron besetzt:



- Die  $sp^3$ -Hybridisierung veranschaulicht die Bindungsverhältnisse des Kohlenstoffs in **gesättigten Kohlenwasserstoffen** (z.B. Methan, Ethan). Überlappen sich z.B. ein  $sp^3$ -Hybridorbital eines C-Atoms und ein  $1s$ -Orbital eines benachbarten H-Atoms (oder je ein  $sp^3$ -Hybridorbital zweier benachbarter C-Atome), so verschmelzen die zwei sich überlappenden Atomorbitale zu zwei  $\sigma$ -Molekülorbitalen.  $\sigma$ -Orbitale sind lokalisierte (d. h. auf den Bereich zwischen den beiden beteiligten Atomen und deren unmittelbare Umgebung begrenzte) Molekülorbitale. Die  $\sigma$ -Molekülorbitale liegen in der Ebene der an der Bindung beteiligten Atome. Alle Einzelbindungen in (sowohl gesättigten als auch ungesättigten) Kohlenwasserstoffen sind  $\sigma$ -Bindungen:



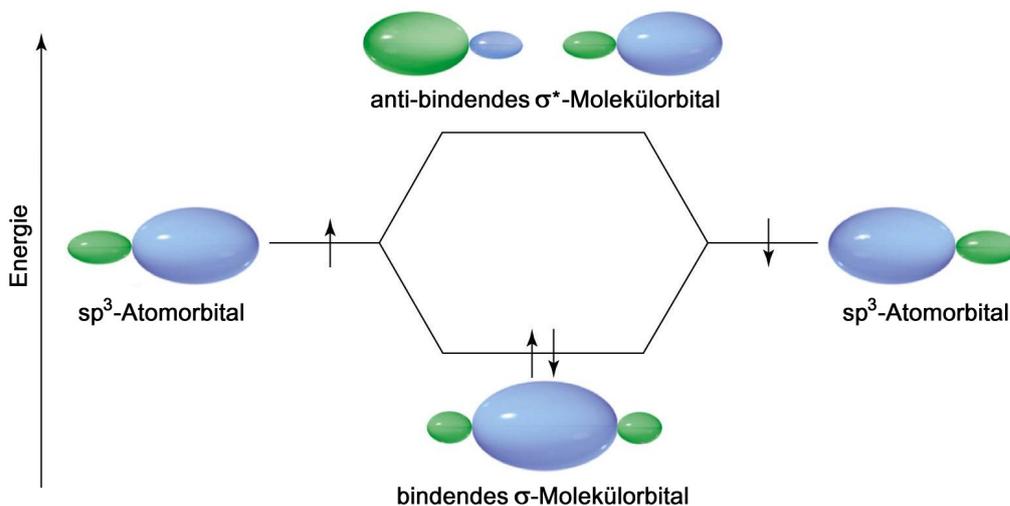
Methan



Ethan

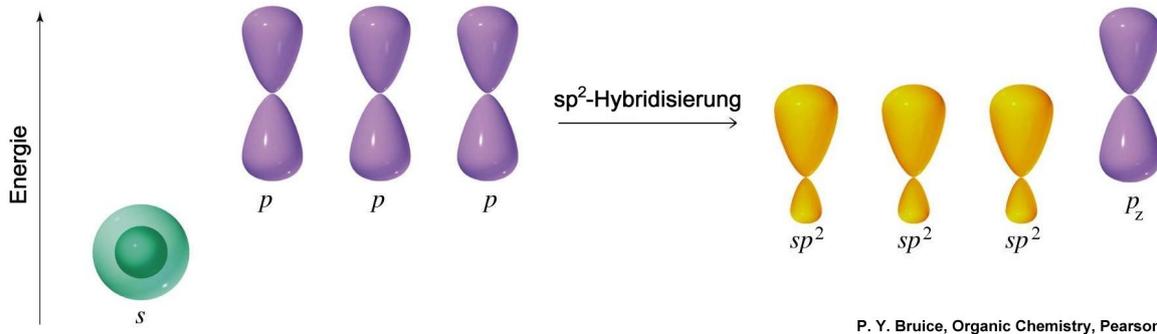
P. Y. Bruice, Organic Chemistry, Pearson

- Die Anzahl der gebildeten Molekülorbitale ist stets gleich der Anzahl der verschmelzenden Atomorbitale, d. h. **bei der Überlappung zweier Atomorbitale entstehen zwei Molekülorbitale**. Die beiden entstandenen Molekülorbitale unterscheiden sich in Form und Energie. Die konstruktive Interferenz gleichphasiger Wellenfunktionen führt zur Bildung des bindenden  $\sigma$ -Orbitals, dessen Energie kleiner ist als die Energie der beteiligten Atomorbitale. Dagegen führt die destruktive Interferenz gegenphasiger Wellenfunktionen zur Bildung des anti-bindenden (lockernden)  $\sigma^*$ -Orbitals, dessen Energie größer ist als die Energie der Atomorbitale. Im Grundzustand besetzen die beiden Elektronen das energetisch günstigere, bindende  $\sigma$ -Orbital; das energetisch ungünstigere, anti-bindende  $\sigma^*$ -Orbital bleibt im Grundzustand unbesetzt:

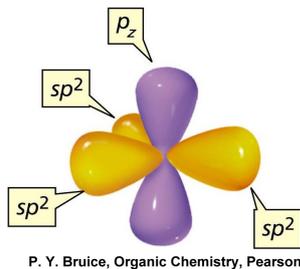


P. Y. Bruice, Organic Chemistry, Pearson

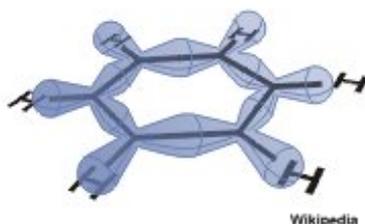
- Für die **sp<sup>2</sup>-Hybridisierung** wird angenommen, dass das doppelt besetzte 2s-Orbital mit dem 2p<sub>x</sub>-Orbital und dem 2p<sub>y</sub>-Orbital zu drei gleichen sp<sup>2</sup>-Hybridorbitalen kombiniert.
- Der Charakter der sp<sup>2</sup>-Hybridorbitale entspricht zu 33% dem des 2s-Orbitals und zu 67% dem der 2p-Orbitale. Die Energie der sp<sup>2</sup>-Hybridorbitale ist größer als die Energie des 2s-Orbitals und kleiner als die Energie der 2p-Orbitale. Die Form der sp<sup>2</sup>-Hybridorbitale ergibt sich aus der Kombination der Form des 2s-Orbitals und der Form der 2p-Orbitale:



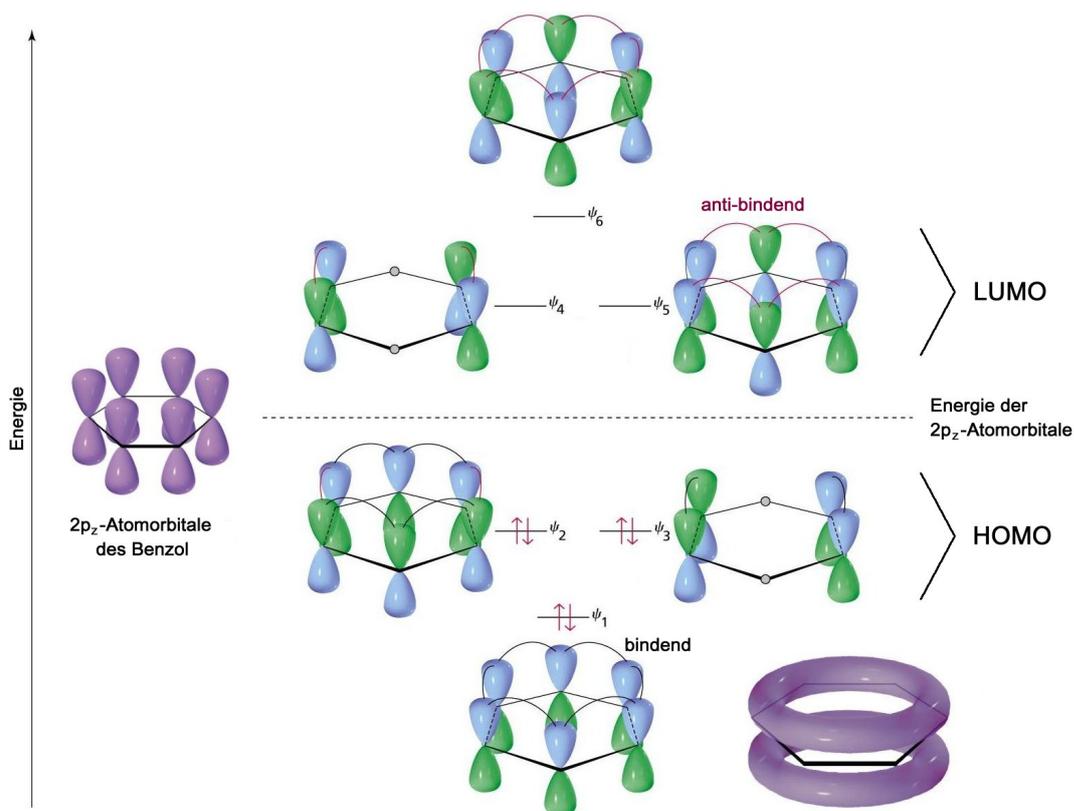
- Die drei sp<sup>2</sup>-Hybridorbitale richten sich trigonal planar (innerhalb einer Ebene) aus und sind mit je einem Elektron besetzt. Das nicht hybridisierte 2p<sub>z</sub>-Orbital richtet sich senkrecht zu den Hybridorbitalen aus und ist ebenfalls mit einem Elektron besetzt (Hundsche Regel):



- Die sp<sup>2</sup>-Hybridisierung veranschaulicht die Bindungsverhältnisse des Kohlenstoffs in **konjugierten Kohlenwasserstoffen** (z.B. Benzol). Überlappen sich z.B. ein sp<sup>2</sup>-Hybridorbital eines C-Atoms und ein 1s-Orbital eines benachbarten H-Atoms (oder je ein sp<sup>2</sup>-Hybridorbital zweier benachbarter C-Atome), so verschmelzen die zwei sich überlappenden Atomorbitale zu zwei lokalisierten σ-Molekülorbitalen: dem bindenden (im Grundzustand doppelt besetzten) σ-Orbital, und dem anti-bindenden (im Grundzustand unbesetzten) σ\*-Orbital.
- Im Molekül des Benzol (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>) bilden die insgesamt 18 sp<sup>2</sup>-Hybridorbitale der C-Atome und die sechs 1s-Orbitale der H-Atome insgesamt 12 bindende und 12 anti-bindende lokalisierte σ-Molekülorbitale, die alle in der Ebene des Moleküls liegen:

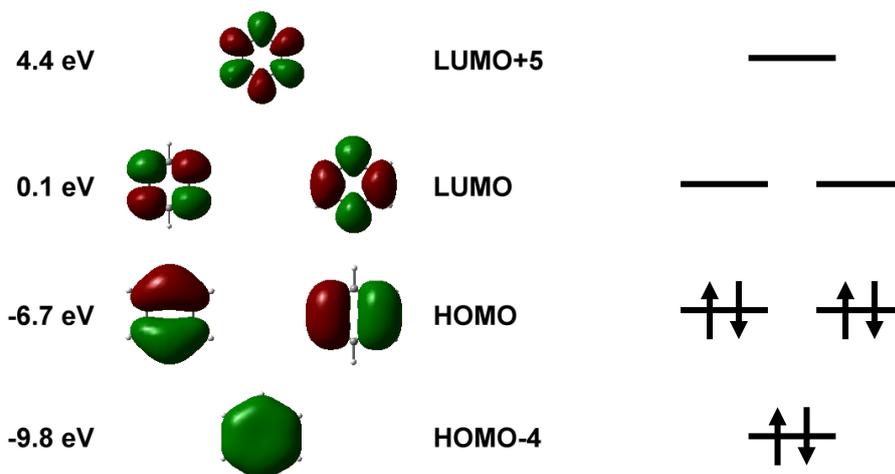


- Zusätzlich überlappen sich die sechs nicht hybridisierten, senkrecht zur Molekülebene angeordneten  $2p_z$ -Atomorbitale und verschmelzen zu sechs  **$\pi$ -Molekülorbitalen**. Im Gegensatz zu den  $\sigma$ -Orbitalen sind die  $\pi$ -Orbitale **delokalisiert** und erstrecken sich über das gesamte Molekül.
- Konstruktive Interferenz gleichphasiger Wellenfunktionen unmittelbar benachbarter C-Atome führt zu einer bindenden Wechselwirkung zwischen diesen benachbarten C-Atomen. Dagegen führt destruktive Interferenz gegenphasiger Wellenfunktionen benachbarter C-Atome zu einer anti-bindenden Wechselwirkung. Entsprechend den möglichen Kombinationen aus gleichphasiger und gegenphasiger Überlappung benachbarter C-Atome ist jedes der sechs entstandenen  $\pi$ -Orbitale durch eine bestimmte Anzahl **bindender und anti-bindender Wechselwirkungen** zwischen unmittelbar benachbarten C-Atomen charakterisiert. Je größer die Differenz zwischen der Anzahl der bindenden und der Anzahl der anti-bindenden Wechselwirkungen ist, umso kleiner ist die Energie dieses  $\pi$ -Orbitals.
- Ist die Anzahl der bindenden Wechselwirkungen größer als die Anzahl der anti-bindenden Wechselwirkungen, so ist das  **$\pi$ -Orbital** bindend. Ist die Anzahl der bindenden Wechselwirkungen kleiner als die Anzahl der anti-bindenden Wechselwirkungen, so handelt es sich um ein anti-bindendes  **$\pi^*$ -Orbital**. Im Benzol gibt es drei bindende  $\pi$ -Orbitale und drei anti-bindende  $\pi^*$ -Orbitale. Im Grundzustand besetzen die sechs  $\pi$ -Elektronen die drei bindenden  $\pi$ -Orbitale, während die drei anti-bindenden  $\pi^*$ -Orbitale unbesetzt bleiben:



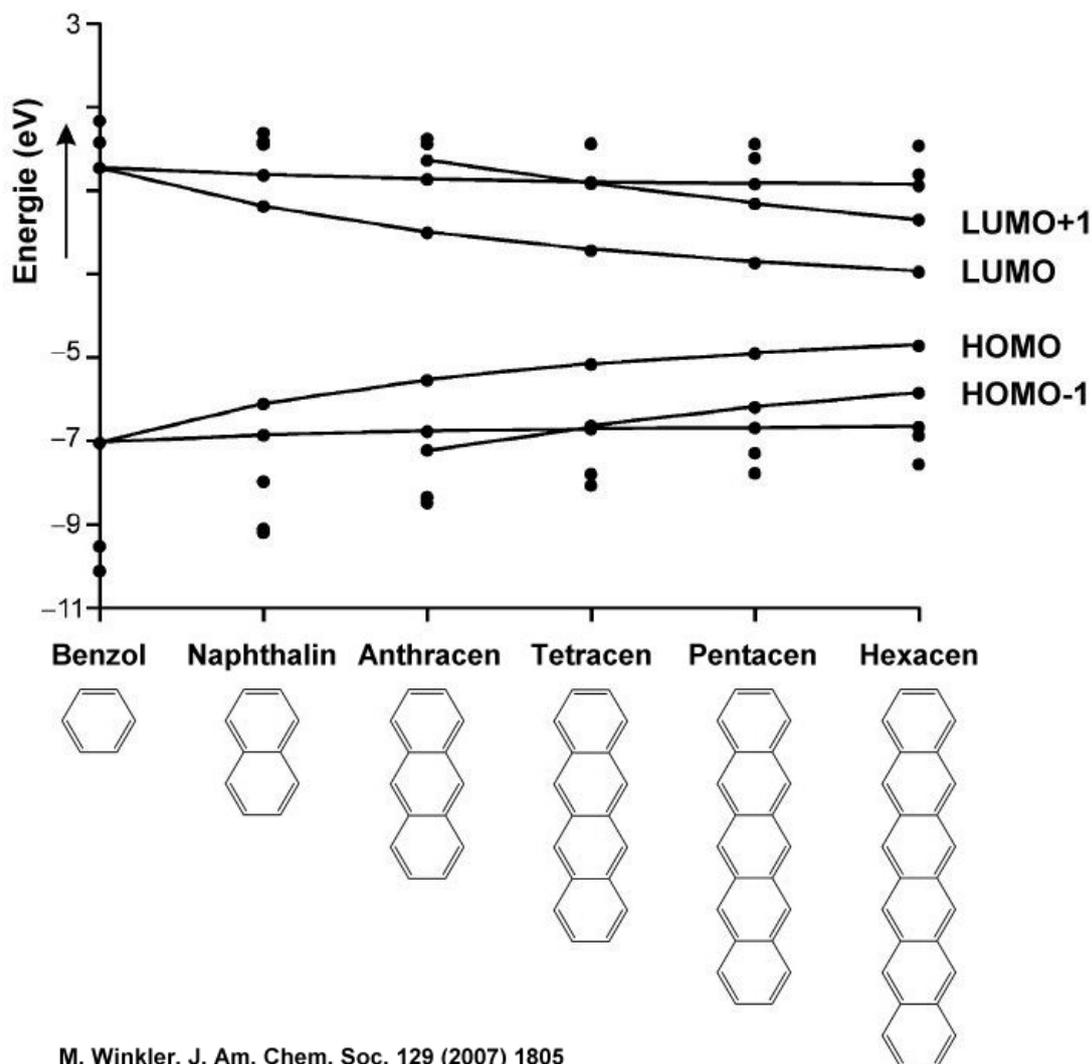
P. Y. Bruice, Organic Chemistry, Pearson

- Jede anti-bindende Wechselwirkung führt zu einem Knoten im Molekülorbital. Je kleiner die Anzahl der Knoten im Orbital ist, umso kleiner ist die Energie dieses Orbitals.
- Im Benzol haben die bindenden Molekülorbitale  $\psi_2$  und  $\psi_3$  und die anti-bindenden Molekülorbitale  $\psi_4$  und  $\psi_5$  jeweils die gleiche Energie (das heißt, diese Orbitale sind entartet). Unter den bindenden, also im Grundzustand besetzten, Molekülorbitalen sind  $\psi_2$  und  $\psi_3$  diejenigen mit der höchsten Energie; sie werden als höchste besetzte Molekülorbitale oder **HOMO** (*highest occupied molecular orbital*) bezeichnet. Unter den anti-bindenden, also im Grundzustand unbesetzten, Molekülorbitalen sind  $\psi_4$  und  $\psi_5$  diejenigen mit der niedrigsten Energie; sie heißen niedrigste unbesetzte Molekülorbitale oder **LUMO** (*lowest unoccupied molecular orbital*).
- Für die elektrischen Eigenschaften organischer Festkörper haben HOMO und LUMO die größte Bedeutung. Die Energie des HOMO entspricht der **Ionisierungsenergie** des Moleküls. Die Energie des LUMO entspricht der **Elektronenaffinität** des Moleküls. Der Differenz zwischen der Energie des HOMO und der Energie des LUMO (also die **Energielücke** zwischen HOMO und LUMO) eines organischen Festkörpers kommt eine ähnliche Bedeutung zu wie der Differenz zwischen Valenzband- und Leitungsbandkante (Bandlücke) in anorganischen Festkörpern.
- Um die Energien der einzelnen  $\pi$ -Orbitale organischer Moleküle exakt zu bestimmen, müsste die Schrödinger-Gleichung für das Vielelektronensystem gelöst werden. Dies ist für größere Moleküle praktisch nicht möglich. Alternativ werden die Orbitalenergien organischer Moleküle näherungsweise mittels der **Dichtefunktionaltheorie** (*density functional theory*, DFT) berechnet. Die Dichtefunktionaltheorie ermittelt die Elektronendichte des Systems im Grundzustand, indem für jedes Elektron eine Wellenfunktion angesetzt wird. Die Wellenfunktionen der einzelnen Elektronen sind voneinander unabhängige Lösungen der Schrödinger-Gleichung in einem effektiven Potential. Da das effektive Potenzial von der Elektronendichte (also von den Lösungen der Schrödinger-Gleichungen) abhängt, müssen die Lösungen iterativ ermittelt werden.
- Für das Molekül des Benzol ergibt sich aus den DFT-Berechnungen eine Energielücke zwischen HOMO und LUMO von etwa 6.8 eV:



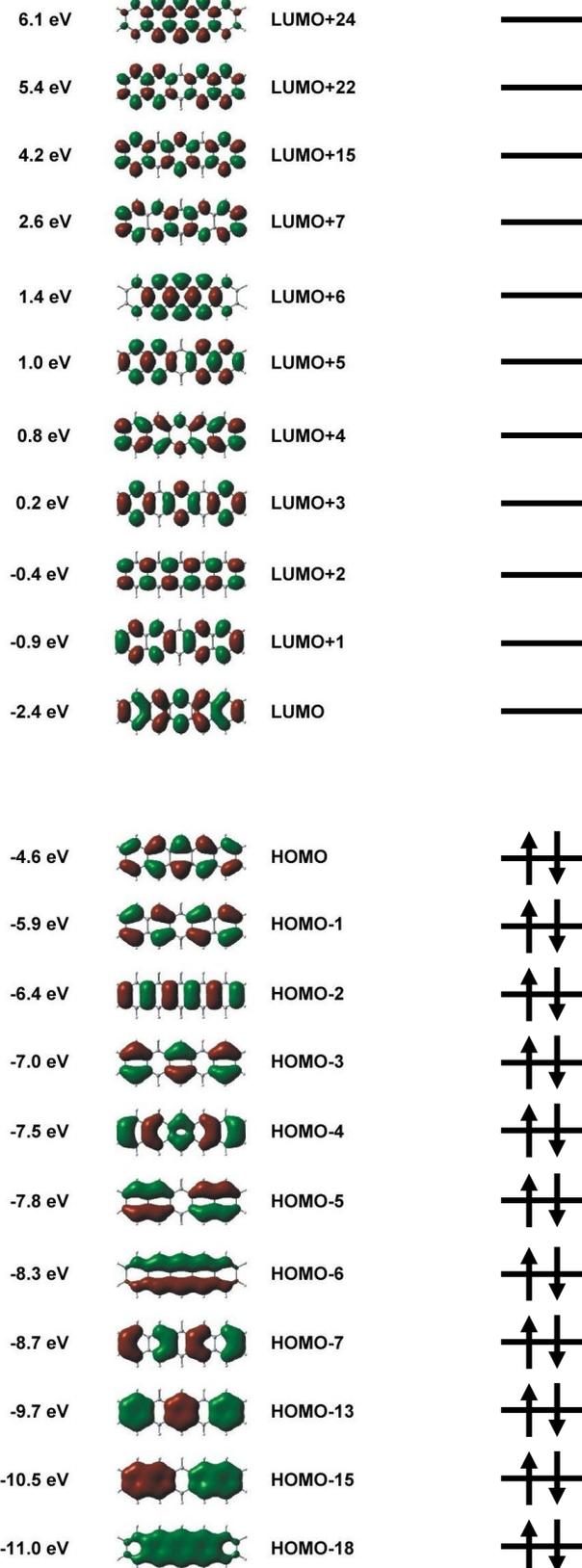
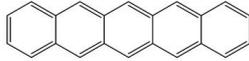
M. Winkler

- Je größer die Anzahl der am  $\pi$ -System eines Moleküls beteiligten C-Atome ist, umso größer ist die Anzahl der  $\pi$ -Orbitale und umso kleiner ist die Energielücke zwischen HOMO und LUMO. Dieser Trend wird am Beispiel der Acene (lineare polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe) deutlich. Die Energiedifferenz zwischen HOMO und LUMO des Benzol (etwa 6.8 eV) ist vergleichbar mit der Bandlücke anorganischer Isolatoren (z.B.  $\text{SiO}_2$ : 9 eV), während die Energiedifferenz zwischen HOMO und LUMO des **Pentacen** (etwa 2.2 eV) vergleichbar ist mit der Bandlücke anorganischer **Halbleiter** (z.B. GaAs: 1.4 eV; Si: 1.1 eV):



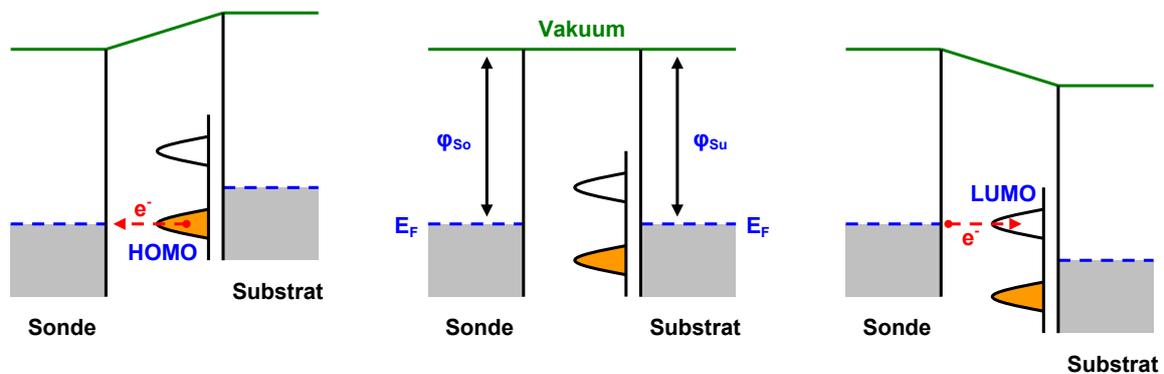
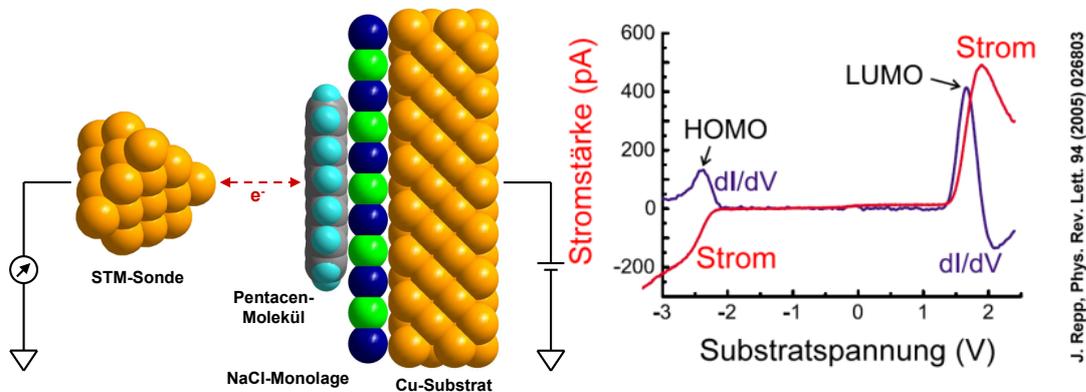
- Einer der am häufigsten für die Herstellung organischer Transistoren verwendeten organischen Halbleiter ist **Pentacen**. Pentacen hat eine LUMO-Energie von etwa -2.4 eV, eine HOMO-Energie von etwa -4.6 eV und eine Energielücke zwischen HOMO und LUMO von etwa 2.2 eV:

**Pentacen**

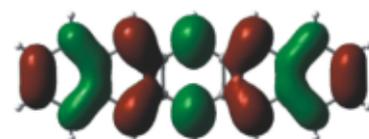
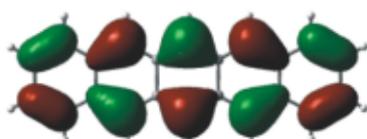


M. Winkler

- Die räumliche Ausdehnung und die Energie der delokalisierten Molekülorbitale konjugierter Moleküle können auch mittels **Rastersondenspektroskopie** (*scanning tunneling spectroscopy*, STS) bestimmt werden. Dabei wird der Tunnelstrom, der im Vakuum zwischen einer atomar spitzen Metallsonde und dem auf einem metallischen Substrat adsorbierten Molekül fließt, in Abhängigkeit von der elektrischen Spannung zwischen Substrat und Sonde und in Abhängigkeit von der Position der Sonde über dem Molekül gemessen. Um die Wechselwirkungen zwischen den Molekülorbitalen des konjugierten Moleküls und dem metallischen Substrat zu minimieren, wird auf der Substratoberfläche zunächst eine dünne Isolatorschicht erzeugt:

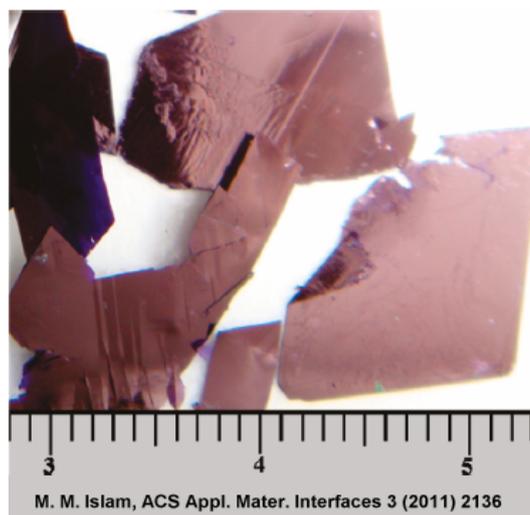
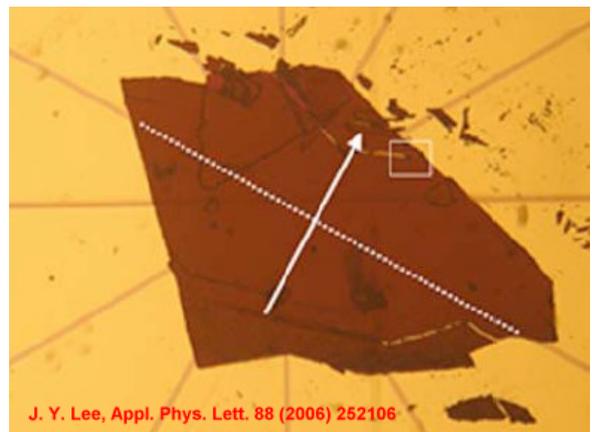
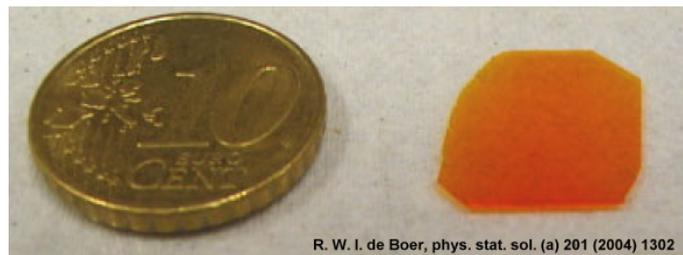
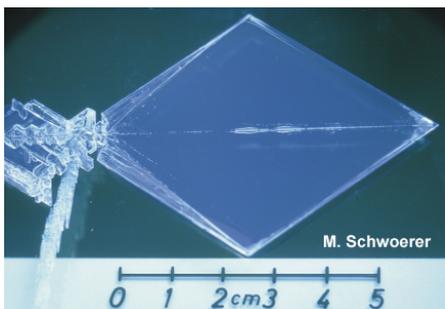


J. Repp, Phys. Rev. Lett. 94 (2005) 026803

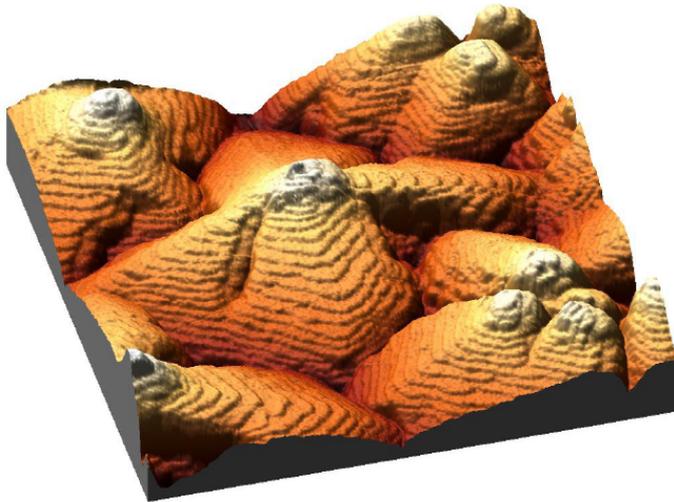


## 2. Kristallstruktur molekularer organischer Festkörper

- Viele aromatische Kohlenwasserstoffe bilden **Molekülkristalle**. Da die periodische Anordnung der Moleküle auf relativ schwachen intermolekularen van-der-Waals-Bindungen (d. h., nicht kovalenten Wechselwirkungen) beruht, ist die Herstellung organischer Einkristalle in der Regel auf Kristalle mit wenigen Millimetern Größe beschränkt. Darüber hinaus sind die chemische Reinheit und die kristalline Güte selbst der besten organischen Einkristalle nicht vergleichbar mit der Qualität anorganischer Halbleiterkristalle. Die Fotos zeigen einen Anthracen-Kristall mit einer Größe von etwa 5 cm (oben links), einen Tetracen-Kristall mit einer Größe von etwa 1 cm (oben rechts), mehrere Rubren-Kristalle mit einer Länge zwischen etwa 5 mm und 1 cm (Mitte links), einen Pentacen-Kristall mit einer Größe von etwa 5 mm (Mitte rechts) und mehrere 2.3-Dimethylpentacen-Kristalle mit einer Länge zwischen etwa 3 mm und 1 cm (unten):



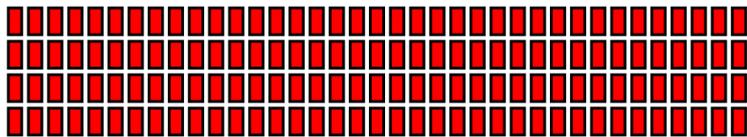
- Dagegen ist die Erzeugung **polykristalliner Schichten** auf der Basis aromatischer Kohlenwasserstoffe, wie zum Beispiel Pentacen, vergleichsweise einfach und auch für praktische Anwendungen, z.B. für die Herstellung organischer Transistoren, sehr gut geeignet. Da unsubstituierte Acene, wie z.B. Pentacen, in organischen Lösungsmitteln praktisch unlöslich sind, werden dünne Schichten fast immer mittels thermischer Sublimation und Desublimation in einer Vakuumkammer erzeugt. Die Abbildung zeigt eine rastersondenmikroskopische Aufnahme (*atomic force microscopy*, AFM) einer etwa 30 nm dicken polykristallinen Schicht Pentacen, die durch thermische Abscheidung im Vakuum auf einem Polymersubstrat erzeugt wurde. Der dargestellte Ausschnitt hat eine Größe von  $2\ \mu\text{m} \times 2\ \mu\text{m}$ . Die Kristallinität der Schicht, die Ausdehnung der einzelnen Kristallite und die Korngrenzen sind deutlich zu erkennen:



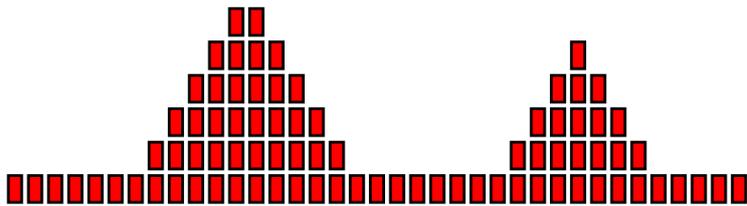
S. Schiefer, J. Am. Chem. Soc. 129 (2007) 10316

- Viele molekulare organische Halbleiter, wie z.B. Pentacen, neigen bei der Schichtbildung nach Sublimation im Vakuum zum **Stranski-Krastonov-Wachstum**. Dabei wird die Substratoberfläche zunächst ganzflächig mit einer Monolage bedeckt, gefolgt von ausgeprägtem Inselwachstum (im Gegensatz zum Frank-van-der-Merwe-Wachstum, bei dem vollständig geschlossene Monolagen entstehen, und dem Volmer-Weber-Wachstum, bei dem das Wachstum in Form hoher Inseln erfolgt):

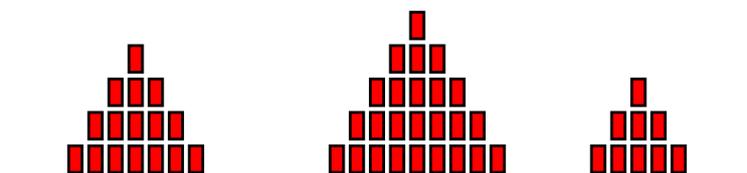
Frank-van-der-Merwe-Wachstum



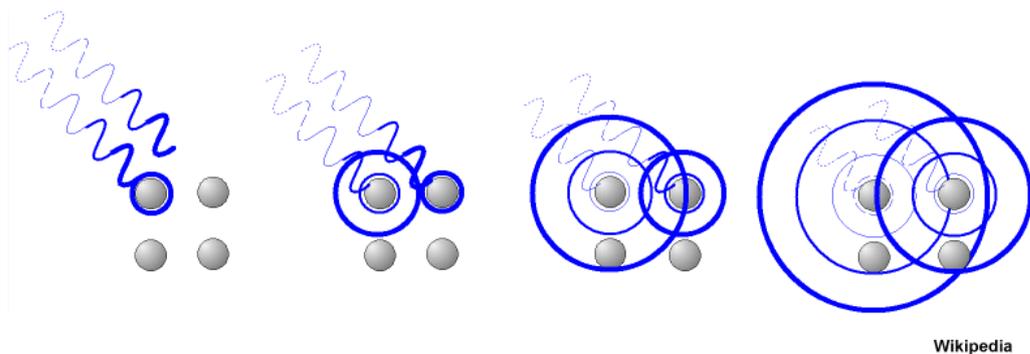
Stranski-Krastonov-Wachstum



Volmer-Weber-Wachstum

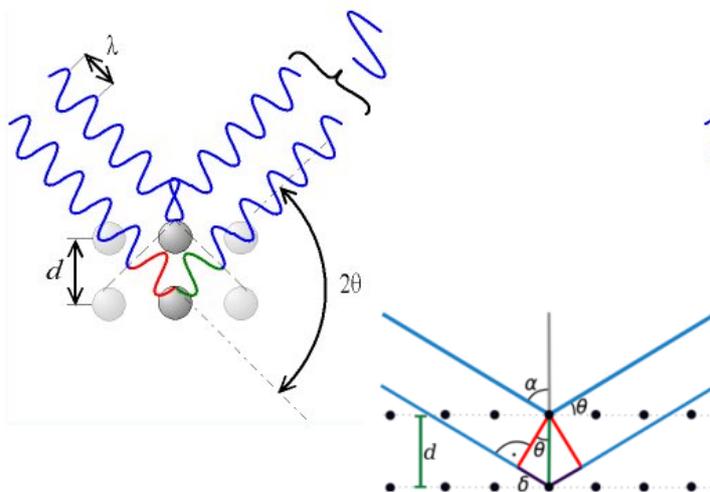


- Die Bestimmung der **Kristallstruktur** erfolgt mittels **Röntgenbeugung**. Dabei wird ein monochromatischer und kollimierter (parallel gerichteter) Röntgenstrahl auf die Probe gelenkt. Durch die einfallende Röntgenstrahlung werden die Elektronen der Atome zu Schwingungen angeregt und emittieren daraufhin Röntgenstrahlen gleicher Wellenlänge (Sekundärstrahlung). Ist die Wellenlänge der Röntgenstrahlung ähnlich dem Abstand der Netzebenen, so überlagern sich die von den angeregten Elektronen ausgehenden kugelförmigen Wellen und bilden gemäß der Bragg'schen Gleichung Interferenzmuster, die Aufschluss über die Periodizität der Netzebenen geben:

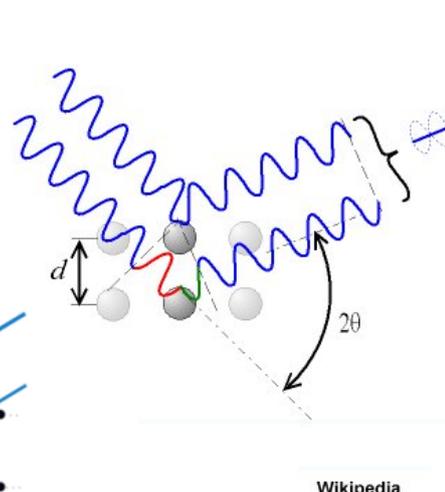


Wikipedia

#### konstruktive Interferenz



#### destruktive Interferenz



Wikipedia

Bedingung für  
konstruktive Interferenz  
(Bragg-Gleichung):

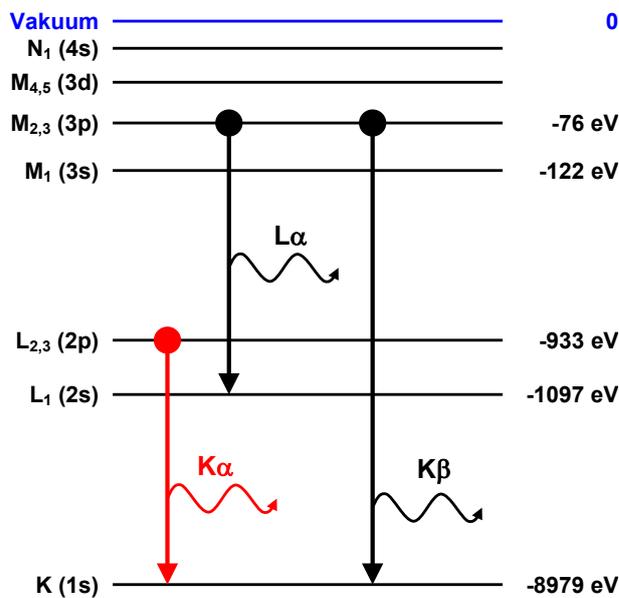
$$n \lambda = 2 d \sin \theta$$

Bedingung für  
destruktive Interferenz:

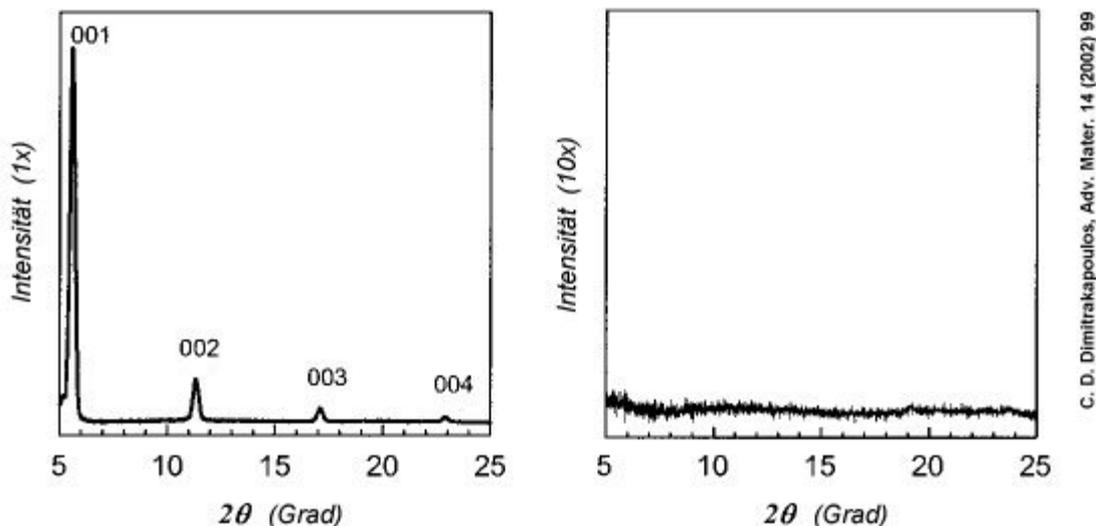
$$\frac{2n-1}{2} \lambda = 2 d \sin \theta$$

- n ... Ordnung der Interferenz
- λ ... Wellenlänge der Röntgenstrahlung
- d ... Netzebenenabstand
- θ ... charakteristischer Bragg-Winkel

- Für Röntgenbeugungsexperimente zur Kristallstrukturaufklärung kommt meist **Cu K $\alpha$ -Strahlung** mit einer Wellenlänge  $\lambda = 1.55 \text{ \AA}$  (Photonenenergie 8 keV) zum Einsatz. Diese charakteristische Röntgenstrahlung entsteht im Kupferatom beim Elektronenübergang von der L-Schale (2p-Orbital) zur K-Schale (1s-Orbital):

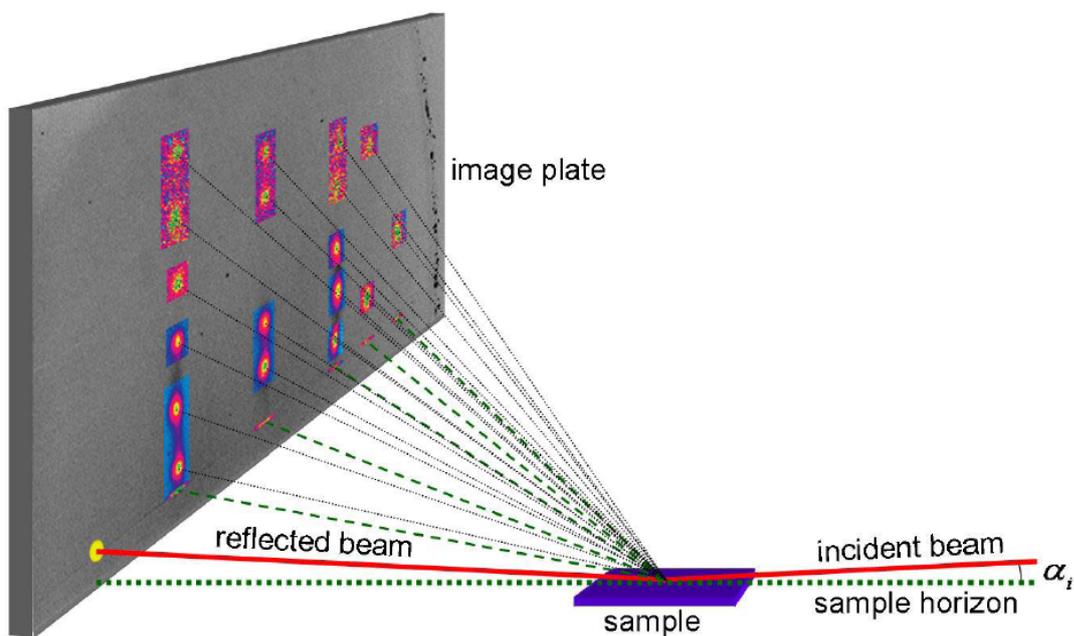
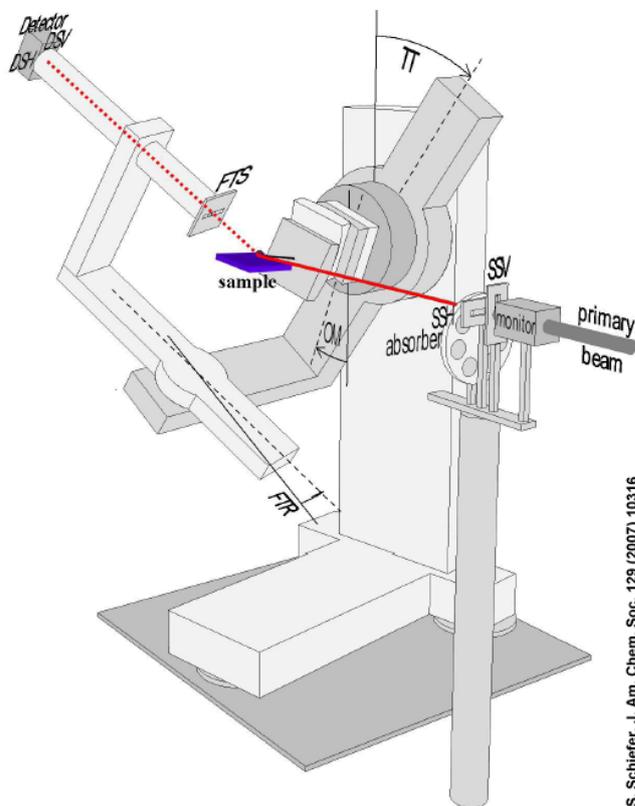


- Nachfolgend sind die experimentell ermittelten Röntgenbeugungs-Spektren einer Pentacen-Schicht mit hohem Ordnungsgrad (links) und einer ungeordneten (amorphen) Pentacen-Schicht dargestellt:



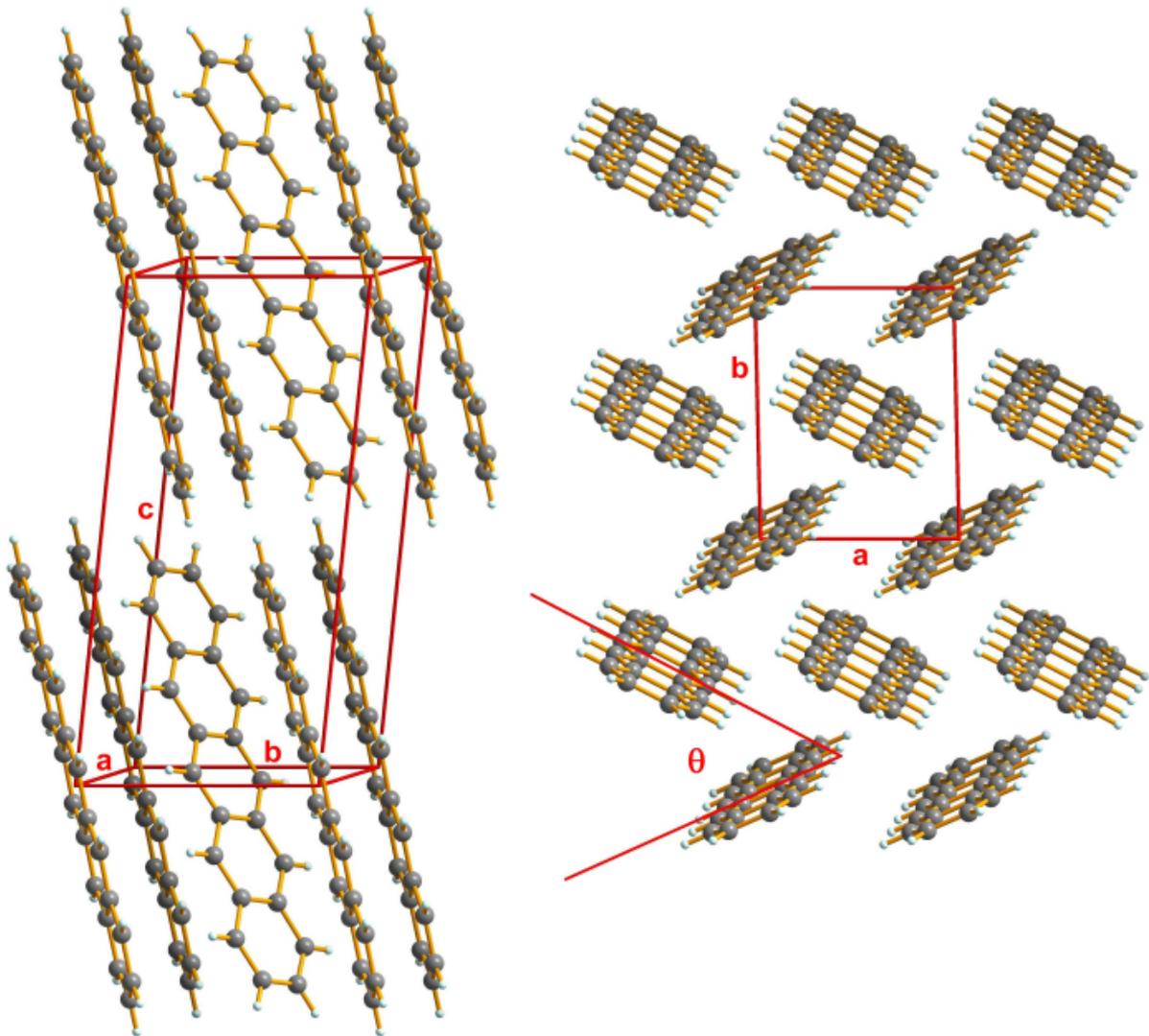
- Aus dem Beugungsspektrum der geordneten Pentacen-Schicht ist der charakteristische Bragg-Winkel ersichtlich ( $\theta = 2.86^\circ$ ). Mit Hilfe der Bragg-Gleichung und mit Kenntnis der Wellenlänge der Röntgenstrahlung ( $\lambda = 1.55 \text{ \AA}$ ) kann aus dem charakteristischen Bragg-Winkel der Abstand der Netzebenen parallel zur Substratoberfläche berechnet werden. Für Pentacen erhält man  $d_{001} = 15.5 \text{ \AA}$ .

- Um die Kristallstruktur vollständig aufzuklären, müssen auch diejenigen Netzebenen analysiert werden, die nicht parallel zur Substratoberfläche ausgerichtet sind. Zu diesem Zweck ist es notwendig, den Detektor aus der Ebene, die der einfallende Röntgenstrahl mit der Substratnormalen bildet, heraus zu drehen. Das Ergebnis ist eine zweidimensionale Anordnung von Interferenzmustern, aus denen die vollständige Kristallstruktur ermittelt werden kann:



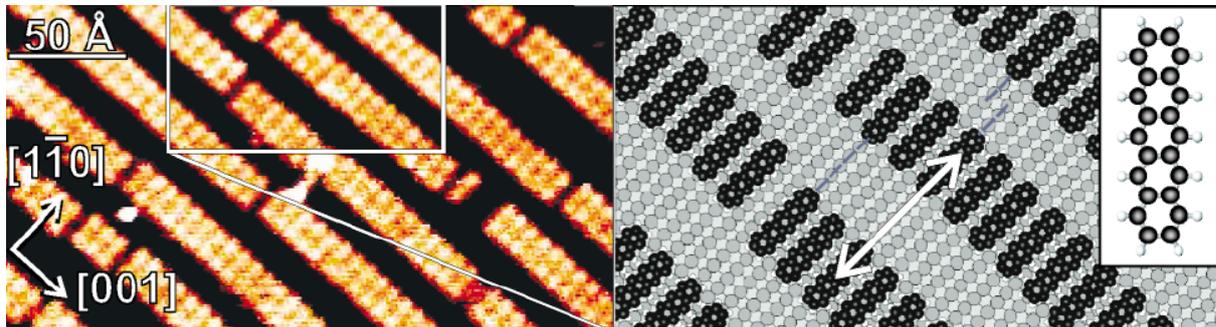
S. Schiefer, J. Am. Chem. Soc. 129 (2007) 10316

- Wie Röntgenbeugungsexperimente zeigen, weisen organische Molekulkristalle meist eine **trikline** Kristallstruktur mit zwei gegeneinander rotierten Molekülen je Elementarzelle auf. Die Abbildung zeigt die Kristallstruktur dünner Pentacen-Schichten. In der Tabelle sind die Werte für die Gitterparameter dieser Kristallstruktur zusammen gefasst (Quelle: S. Schiefer et al., *J. Am. Chem. Soc.* 129 (2007) 10316):



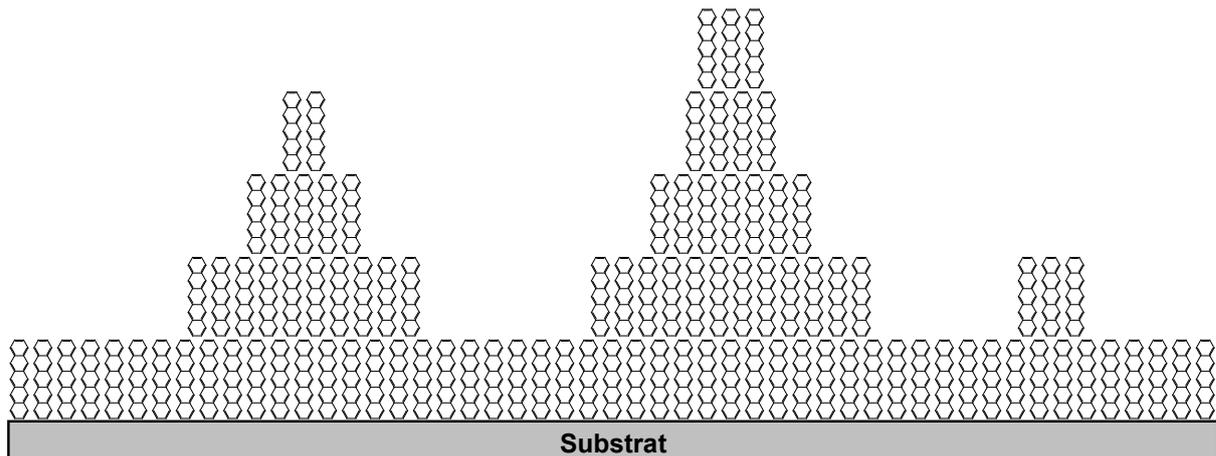
a	0.596 nm
b	0.760 nm
c	1.56 nm
$\alpha$	81.2°
$\beta$	86.6°
$\gamma$	89.8°
$\theta$	~ 55°
Volumen der Einheitszelle	0.697 nm <sup>3</sup>
molekulare Dichte	$3 \times 10^{21}$ Moleküle je cm <sup>-3</sup>

- Wird Pentacen in Form einer dünnen Schicht auf einem elektrisch leitfähigen Substrat (z.B. auf einer Metallschicht) abgeschieden, so führen die relativ starken Wechselwirkungen zwischen den Molekülen und dem Substrat dazu, dass sich die Moleküle flach auf die Substratoberfläche legen. Die Abbildung zeigt die Anordnung von Pentacen-Molekülen auf einer **Kupfer-Oberfläche**:



S. Lukas, Phys. Rev. Lett. 88 (2002) 028301

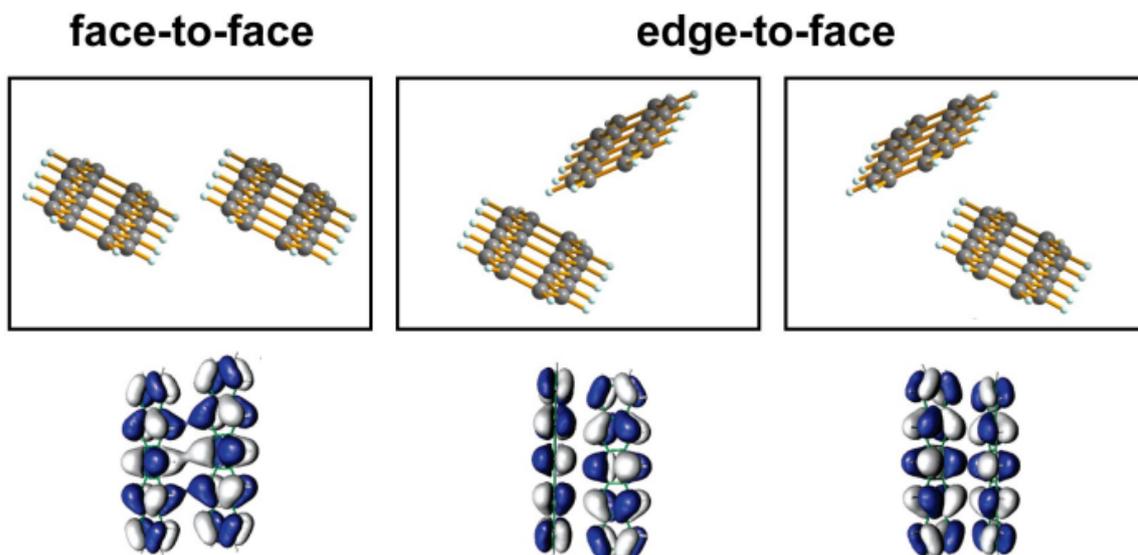
- Dagegen kommt es bei der Abscheidung auf einem **elektrisch nicht leitfähigen Substrat** auf Grund der relativ schwachen Wechselwirkungen zwischen dem Substrat und den Molekülen dazu, dass die Längsachse der Moleküle einen Winkel von nahezu  $90^\circ$  zur Substratoberfläche bildet, das heißt die Moleküle stehen nahezu senkrecht auf der Oberfläche. Der Netzebenenabstand  $d_{001}$  entspricht in diesem Fall ungefähr der Länge eines Pentacen-Moleküls (etwa  $15 \text{ \AA}$ ):



- Bei der Herstellung organischer Feldeffekttransistoren wird Pentacen auf der Oberfläche eines (elektrisch nicht leitfähigen) Gate-Dielektrikums abgeschieden. Das heißt, in organischen Transistoren ist die a-b-Ebene der Halbleiterschicht parallel zur Substratoberfläche angeordnet und die Moleküle stehen nahezu senkrecht auf der Oberfläche des Gate-Dielektrikums.

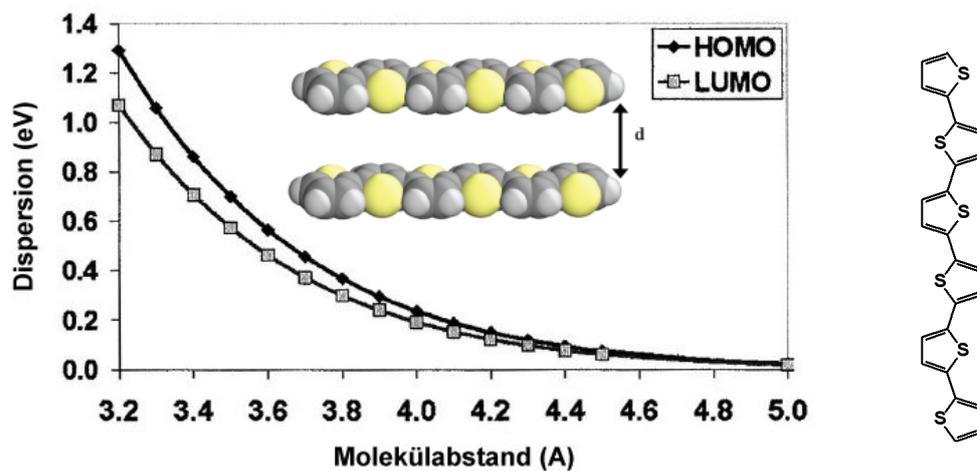
### 3. Elektronische Eigenschaften organischer Festkörper

- Die van-der-Waals-Wechselwirkungen zwischen den konjugierten Molekülen innerhalb der a-b-Ebene führen zu einer Kombination aus face-to-face-Anordnungen und edge-to-face-Anordnungen benachbarter Moleküle innerhalb dieser Ebene. Die Ausbildung von edge-to-face-Anordnungen wird dabei begünstigt durch die anziehenden Wechselwirkungen zwischen den (schwach) positiv geladenen H-Atomen einerseits und den (schwach) negativ geladenen konjugierten  $\pi$ -Systemen andererseits.
- Berechnungen mit der Dichtefunktionaltheorie (DFT) zeigen, dass es in beiden Anordnungen zur **Überlappung der konjugierten  $\pi$ -Systeme** benachbarter Moleküle kommt. Diese Überlappung ermöglicht den Austausch elektronischer Ladungen zwischen Molekülen innerhalb der a-b-Ebene und somit den Transport elektronischer Ladungen durch den Kristall in der Ebene parallel zur Substratoberfläche. Im Gegensatz dazu ist die Überlappung der konjugierten  $\pi$ -Systeme senkrecht zur a-b-Ebene sehr gering und der Ladungstransport senkrecht zur Substratoberfläche also sehr langsam. Für organische Feldeffekt-Transistoren spielt im Wesentlichen der Transport in der Ebene parallel zur Substratoberfläche eine Rolle. Die Abbildung zeigt die räumliche Anordnung und die höchsten besetzten Molekülorbitale (HOMO) jeweils zweier benachbarter Moleküle im Pentacen für die drei Anordnungen innerhalb der a-b-Ebene:



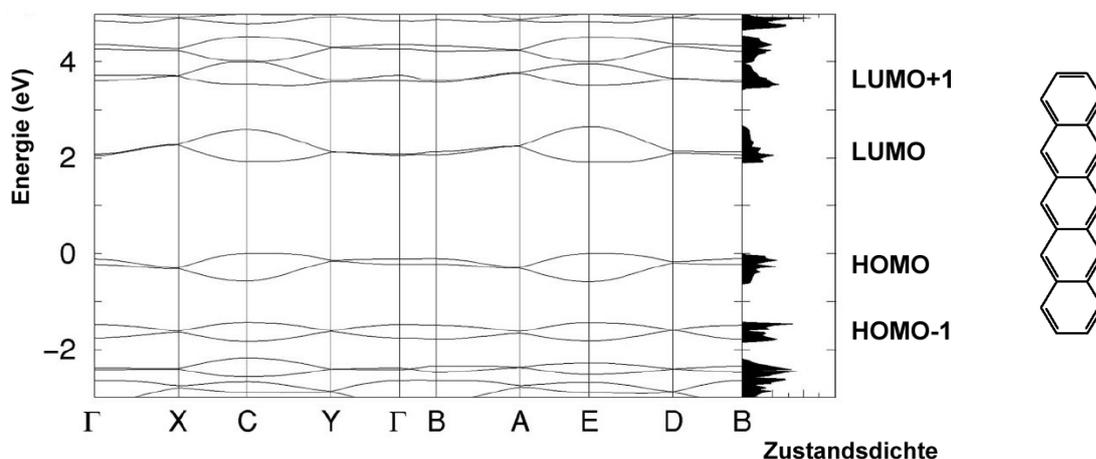
A. Troisi, J. Phys. Chem. B 109 (2005) 1849

- Gemäß des Pauli-Prinzips führt die Überlappung der Molekülorbitale benachbarter Moleküle zur Aufspaltung der diskreten Orbitalenergien (**Dispersion**) und zur Bildung von Energiebändern. Die Breite der **Energiebänder** wird maßgeblich durch den Abstand zwischen den Molekülen bestimmt. Im Vergleich zu den Atomabständen in kovalent gebundenen anorganischen Halbleitern (z.B. Si: 2.35 Å) sind die molekularen Abstände in organischen Halbleitern deutlich größer (z.B. Pentacen: edge-to-face 4.83 Å, face-to-face: 5.96 Å bzw. 7.6 Å). Infolge dessen sind die Energiebänder in organischen Halbleitern schmaler als in anorganischen Halbleitern. Die Abbildung zeigt exemplarisch die mittels Dichtefunktionaltheorie berechnete Breite des HOMO und des LUMO für eine Anordnung aus zwei Sexithiophen-Molekülen als Funktion des Molekülabstands (die Struktur des Sexithiophen-Moleküls ist in der Abbildung rechts dargestellt):



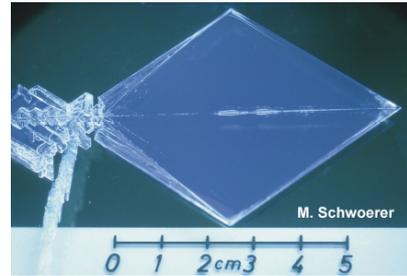
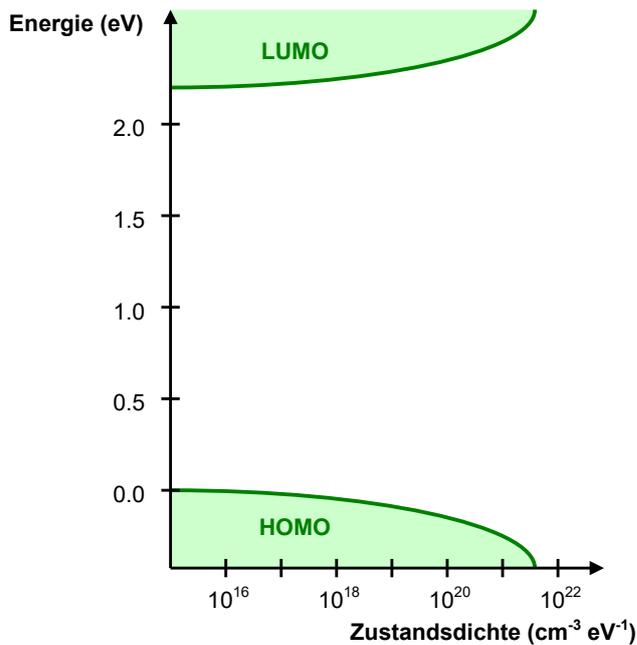
J. L. Bredas, PNAS 99 (2002) 5804

- Da der Abstand zwischen benachbarten Molekülen und der Grad der Überlappung der Molekülorbitale benachbarter Moleküle entlang der verschiedenen Kristallrichtungen unterschiedlich ist, sind auch die Dispersion und die Breite der Energiebänder entlang der Kristallrichtungen unterschiedlich. Die elektronische Struktur organischer Molekülkristalle ist also in der Regel **anisotrop**. Dies ist nachfolgend für Pentacen dargestellt:



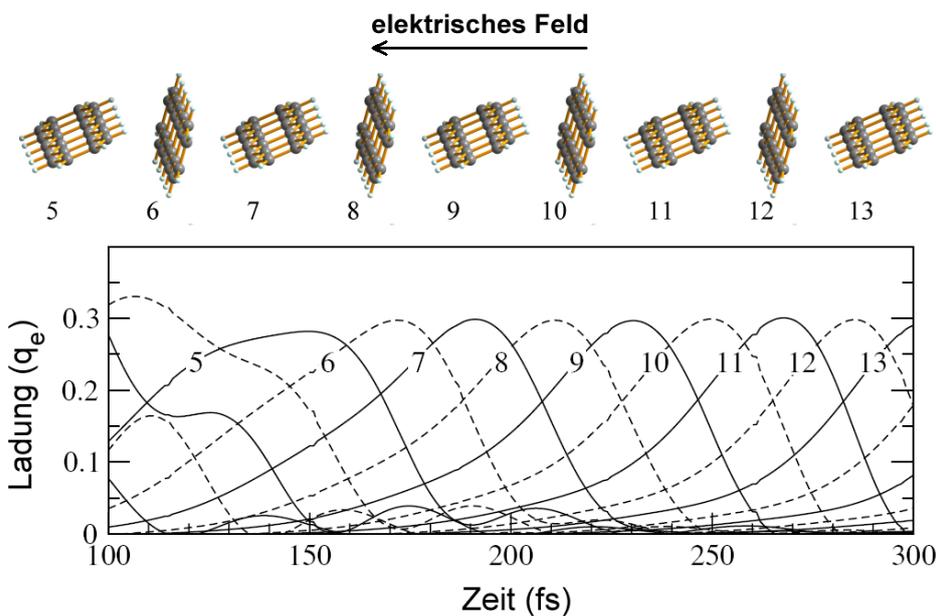
M. L. Tiago, Phys. Rev. B 67 (2003) 115212

- Innerhalb des LUMO-Energiebands und des HOMO-Energiebands sind die elektronischen Zustände delokalisiert, also über den gesamten Kristall ausgedehnt. Die **Zustandsdichte** innerhalb der Energiebänder ist proportional zur Quadratwurzel der Energie:



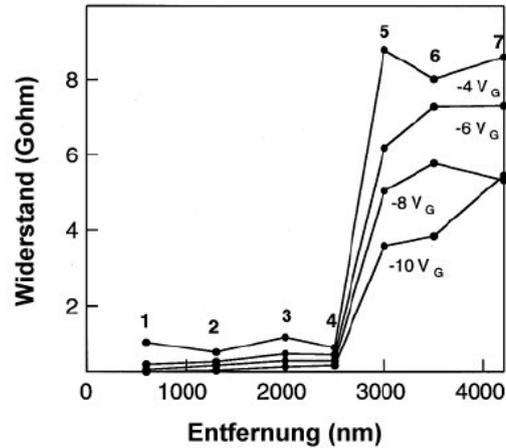
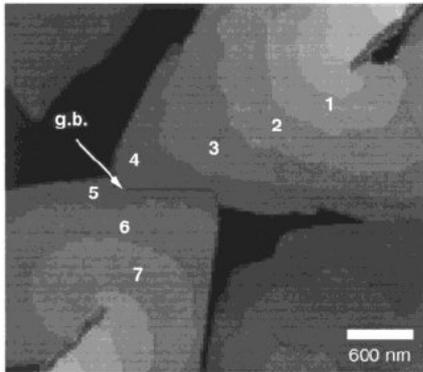
$$D(E) = \frac{(2m)^3}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}$$

- Elektronen, die delokalisierte Energiezustände im LUMO-Energieband besetzen, können sich unter dem Einfluss eines gerichteten elektrischen Feldes im gesamten Kristall nahezu frei (**quasi-frei**) bewegen. Die Wellenfunktionen dieser Elektronen dehnen sich über mehrere Moleküle aus, d. h. die Elektronen sind über mehrere benachbarte Moleküle delokalisiert:



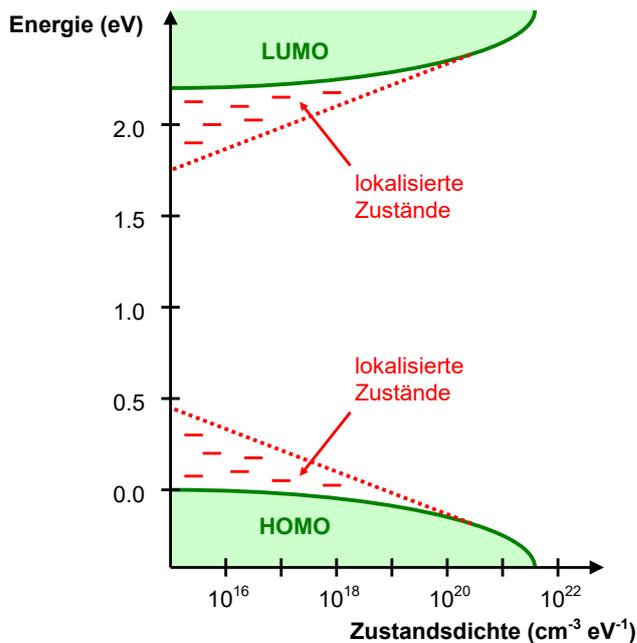
M. Hufte, Chem. Phys. Lett. 428 (2006) 446

- Im Gegensatz zu perfekten Einkristallen treten in polykristallinen Schichten diverse **Defekte** auf. Dazu zählen z.B. chemische Verunreinigungen, Variationen in den Molekülabständen, Gitterfehler und vor allem **Korngrenzen**. Der Einfluss der Korngrenzen auf den Transport der Ladungsträger durch den Festkörper ist erheblich. Die Abbildung zeigt das Ergebnis einer rastersondenmikroskopischen Messung des Spannungsabfalls an einer einzelnen Korngrenze im Vergleich zum Spannungsabfall innerhalb der angrenzenden Kristallite:

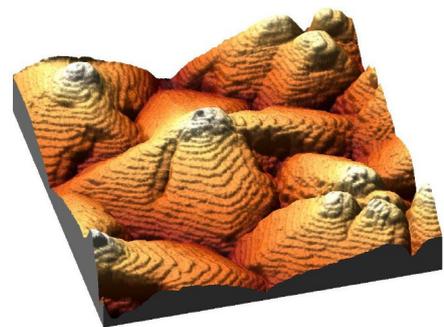


T. W. Kelley, J. Phys. Chem. B 105 (2001) 4538

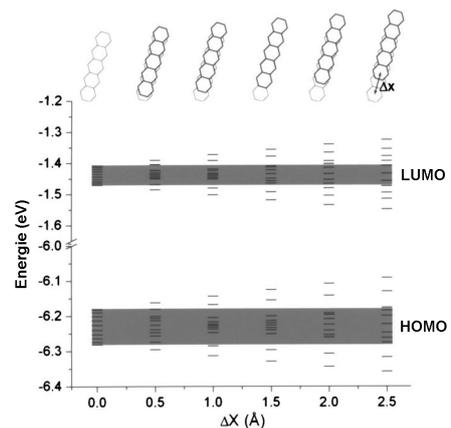
- Die in polykristallinen Schichten auftretenden Defekte verändern die Energieverteilung der Zustandsdichte. Da Defekte die Periodizität des Gitters stören, resultieren sie in der Regel in **lokalisierten Zuständen** innerhalb der HOMO-LUMO-Lücke. Die Energieverteilung dieser Zustände kann annähernd durch eine Exponentialfunktion beschrieben werden:



$$D(E) = \frac{N}{kT} \exp\left(\frac{-E}{kT}\right)$$

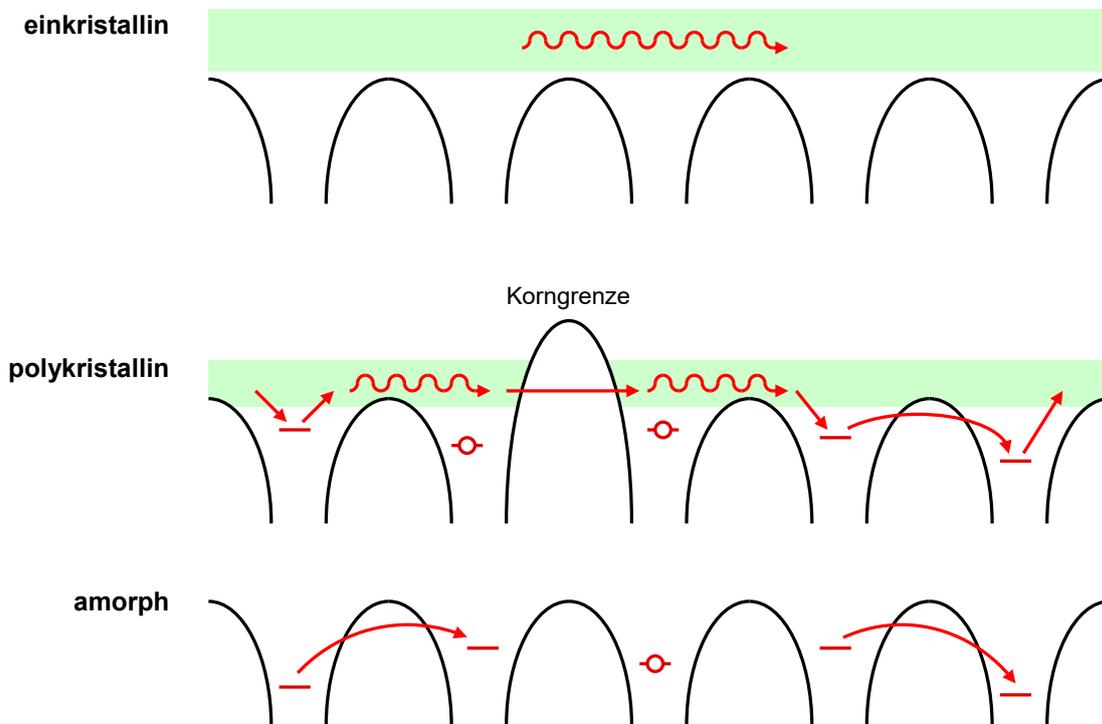


S. Schiefer, J. Am. Chem. Soc. 129 (2007) 10316



J. H. Kang, Appl. Phys. Lett 86 (2015) 152115

- Lokalisierte Zustände innerhalb der HOMO-LUMO-Lücke wirken als Ladungsträgerfallen und üben so erheblichen Einfluss auf den Ladungstransport aus. Insbesondere an den Korngrenzen sind die Periodizität des Gitters und somit der kohärente Bandtransport erheblich gestört. Der Ladungstransport in polykristallinen Festkörpern ist demnach eine Kombination aus kohärentem Transport innerhalb eines delokalisierten Transportbandes (der ausschließlich in perfekten Einkristallen auftritt) und inkohärentem Transport in Form von thermisch aktiviertem Hüpfen (*hopping*) zwischen lokalisierten Zuständen (der für vollständig ungeordnete, d. h. amorphe, Festkörper typisch ist):

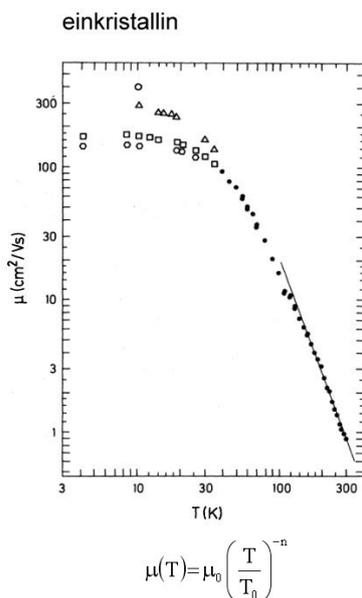


- Die Effizienz, mit der elektronische Ladungen unter dem Einfluss eines gerichteten elektrischen Feldes durch den Festkörper transportiert werden, wird durch die **Beweglichkeit**  $\mu$  beschrieben:

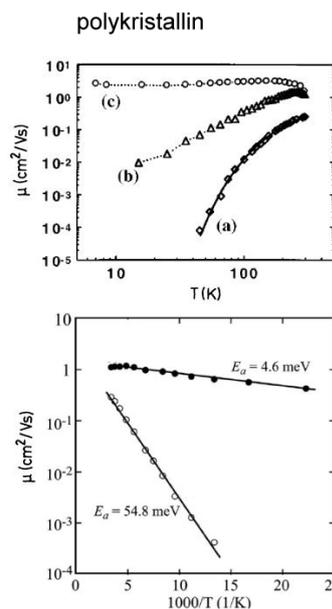
$$\mu = \frac{\partial v}{\partial E}$$

$\mu$	...	Ladungsträgerbeweglichkeit ( $\text{cm}^2/\text{Vs}$ )
$v$	...	Ladungsträgergeschwindigkeit ( $\text{cm/s}$ )
$E$	...	elektrisches Feld ( $\text{V/cm}$ )

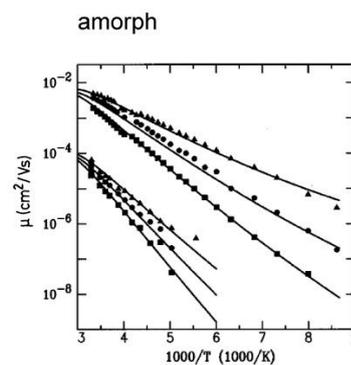
- Der Wert der Ladungsträgerbeweglichkeit in organischen Halbleitern hängt von vielen Faktoren ab, zum Beispiel vom Grad der Überlappung der konjugierten  $\pi$ -Systeme, benachbarter Moleküle, von der chemischen Reinheit und dem Grad der molekularen Ordnung (Kristallinität) des Festkörpers, und von der Dichte und Energieverteilung der lokalisierten Zustände (Ladungsträgerfallen). Je nach Material und Prozessierung liegen die Beweglichkeiten in organischen Halbleitern bei Zimmertemperatur zwischen  $10^{-5}$  und etwa  $10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ . In polykristallinen Pentacen-Schichten liegen die Beweglichkeiten meist zwischen  $0.1$  und  $1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ . Zum Vergleich: Die Beweglichkeit der Ladungsträger im Kanal eines Silizium-Feldeffekttransistors liegt zwischen  $500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  für Elektronen und  $200 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  für Löcher (elektronische Fehlstellen im Valenzband).
- Der Grad der molekularen Ordnung und die Energieverteilung der Zustände im Festkörper stehen in engem Zusammenhang mit der **Temperaturabhängigkeit** der Beweglichkeit. In hochreinen organischen Einkristallen wird die Beweglichkeit der Ladungsträger mit abnehmender Temperatur größer, da der Ladungsträgertransport vorwiegend kohärent ist und der Einfluss der Phononenstreuung auf die mittlere freie Weglänge der Ladungsträger mit abnehmender Temperatur kleiner wird. Im Gegensatz dazu erfolgt der Transport der Ladungsträger in amorphen Schichten ausschließlich durch thermisch aktiviertes Hüpfen (*hopping*) zwischen lokalisierten Zuständen, so dass die Ladungsträgerbeweglichkeit mit abnehmender Temperatur kleiner wird. Der Ladungstransport in polykristallinen Festkörpern ist eine Kombination aus kohärentem und inkohärentem Transport, so dass je nach Reinheit und Kristallinität unterschiedliche Temperaturabhängigkeiten der Ladungsträgerbeweglichkeit beobachtet werden:



W. Warta, Phys. Rev. B 32 (1985) 1172



S. F. Nelson, Appl. Phys. Lett. 72 (1998) 1854  
T. Minari, J. Appl. Phys. 99 (2006) 034506



$$\mu(T) = \mu_0 \exp\left(\frac{-E_A}{kT}\right)$$

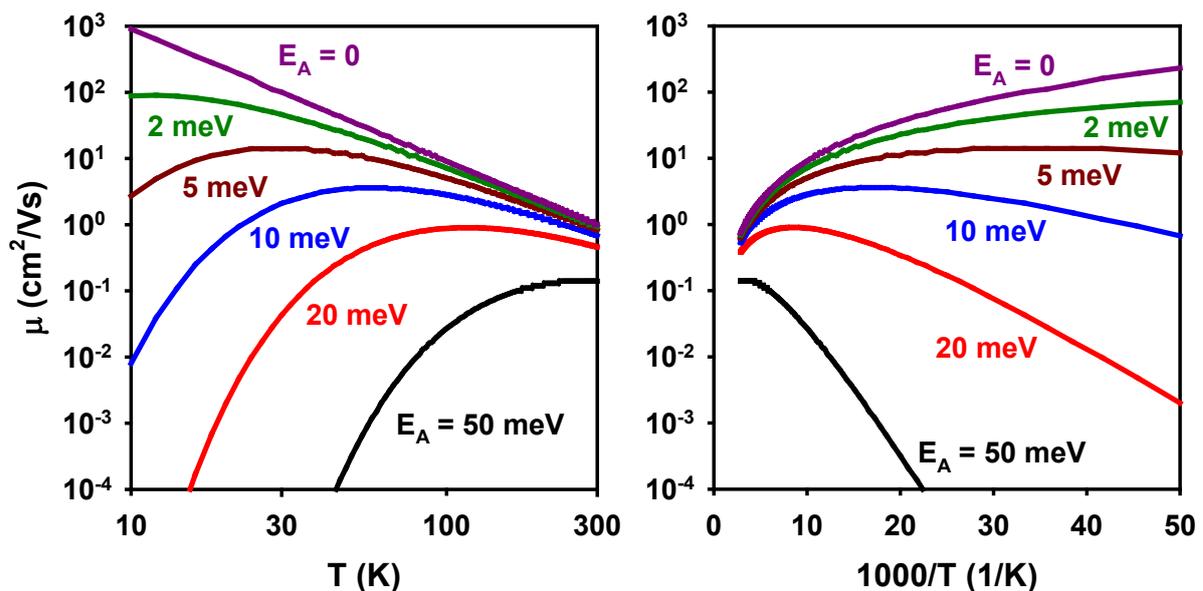
M. C. J. M. Vissenberg, Phys. Rev. B 57 (1998) 12964

- Die in organischen Festkörpern beobachtete Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit kann durch folgende Gleichung beschrieben werden:

$$\mu(T) = \mu_0 \left( \frac{T}{T_0} \right)^{-n} \exp\left( \frac{-E_A}{kT} \right)$$

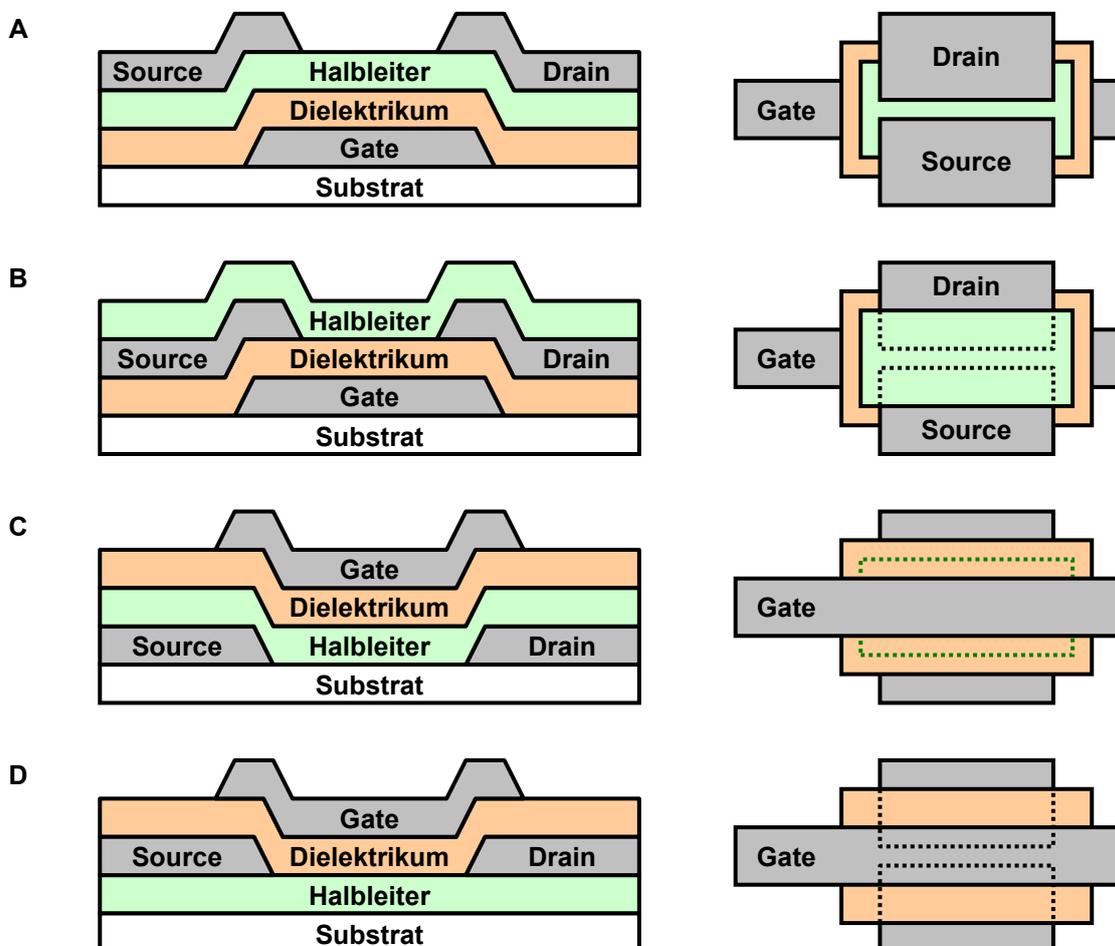
T ... Temperatur (K)  
 E<sub>A</sub> ... Aktivierungsenergie (eV)  
 k ... Boltzmann-Konstante (8.6 × 10<sup>-5</sup> eV/K)

- Die **Aktivierungsenergie** E<sub>A</sub> entspricht der Energie, die ein lokalisierter Ladungsträger aufnehmen muss, um den lokalisierten Zustand verlassen und zum Transport beitragen zu können. Ist die Aktivierungsenergie deutlich größer als kT, so wird die Temperaturabhängigkeit durch den Term exp(-E<sub>A</sub>/kT) dominiert. Dies ist generell in amorphen Schichten der Fall, die durch das Fehlen jeglicher Fernordnung und eine hohe Defektdichte gekennzeichnet sind. Der Ladungstransport erfolgt in diesem Fall durch thermisch aktiviertes Hüpfen (*hopping*). Ist die Aktivierungsenergie deutlich kleiner als kT, so wird die Temperaturabhängigkeit durch den Term (T/T<sub>0</sub>)<sup>-n</sup> dominiert. Dieser Fall ist in hochreinen Einkristallen mit kohärentem Ladungstransport zu beobachten. Der Wert der Konstante n liegt meist zwischen 1.5 und 3. Die Abbildung zeigt die berechnete Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerbeweglichkeit für Aktivierungsenergien zwischen 50 meV (amorpher Halbleiter) und 0 meV (defektfreier Halbleiter); für die Konstanten wurden die Werte μ<sub>0</sub> = 1 cm<sup>2</sup>/Vs, T<sub>0</sub> = 300 K und n = 2 angenommen:



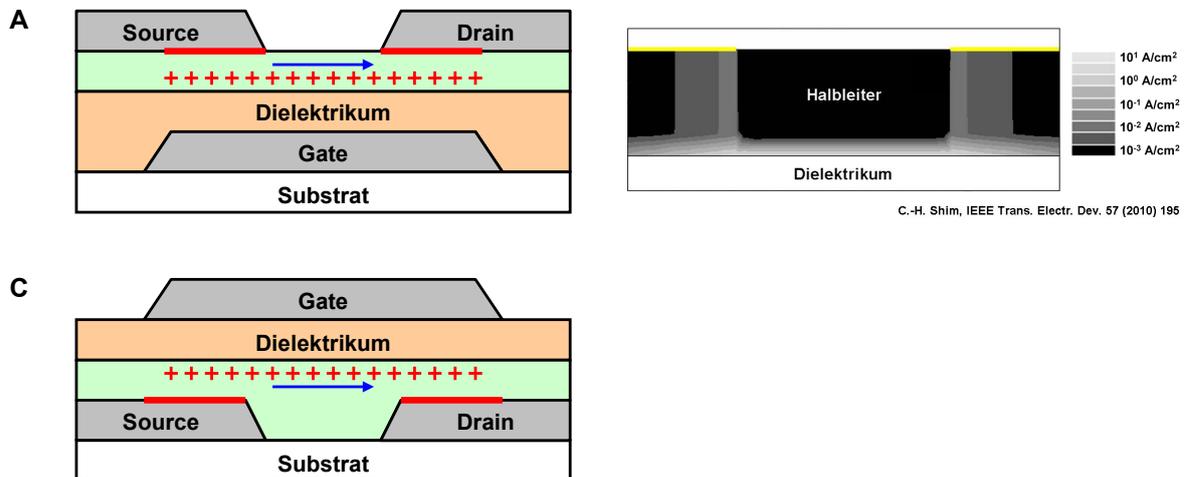
#### 4. Aufbau und Herstellung organischer Transistoren

- Der prinzipielle Vorteil organischer Halbleiter gegenüber anorganischen Halbleitern besteht darin, dass organische Halbleiterschichten bei relativ niedrigen Prozesstemperaturen – im Idealfall bei Zimmertemperatur – erzeugt werden können. Dies ermöglicht es, organische Transistoren auch auf unkonventionellen (z.B. flexiblen) Substraten (z.B. Polymerfolien oder Papier) und über große Flächen verteilt herzustellen. Zu diesem Zweck müssen alle Komponenten des Transistors sukzessive in der Form **dünnere, strukturierter Schichten** auf dem Substrat erzeugt werden.
- Organische Transistoren sind **Feldeffekt-Transistoren** und bestehen aus folgenden Komponenten: Gate-Elektrode, Gate-Dielektrikum, organische Halbleiterschicht, Source-Kontakt und Drain-Kontakt. Diese Komponenten müssen auf dem Substrat sukzessive abgeschieden und strukturiert werden.
- Hinsichtlich der Anordnung der Komponenten des Transistors (Gate, Dielektrikum, Halbleiter, Kontakte) auf dem Substrat kann zwischen vier **Transistorstrukturen** unterschieden werden:

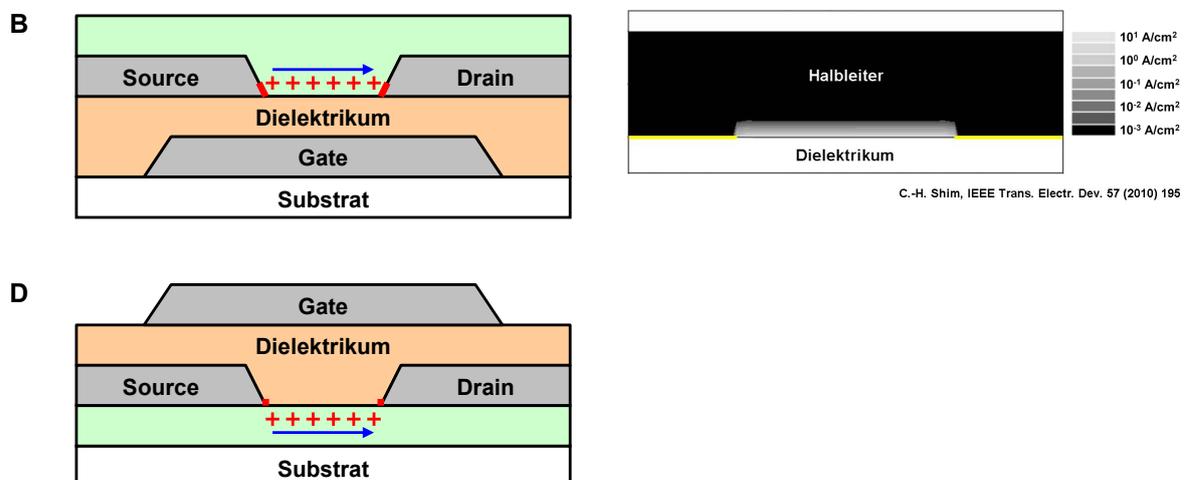


- A: bottom-gate (inverted) staggered (versetzt)  
 B: bottom-gate (inverted) coplanar (koplanar)  
 C: top-gate staggered (versetzt)  
 D: top-gate coplanar (koplanar)

- Die Wahl der Transistorstruktur hat einen Einfluss auf die Fläche, die für den Austausch von Ladungsträgern zwischen den Source- und Drain-Kontakten und dem Ladungsträgerkanal zur Verfügung steht. Bei den Transistorstrukturen A und C (*staggered*, versetzt) sind die Source- und Drain-Kontakte auf der dem Gate-Dielektrikum gegenüberliegenden Seite der Halbleiterschicht angeordnet. In dieser Anordnung ist die für den Ladungsträgeraustausch zur Verfügung stehende Fläche relativ groß und der parasitäre Kontaktwiderstand relativ klein, da der Einfluss des elektrischen Feldes der Gate-Elektrode auf den Ladungsträgerkanal nicht durch die Source- und Drain-Kontakte behindert wird und sich der Ladungsträgerkanal somit auch in den Überlappbereichen unterhalb der der Kontakte ausbildet:



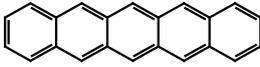
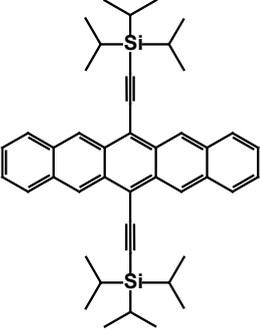
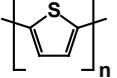
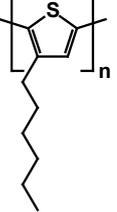
- Dagegen sind bei den Transistorstrukturen B und D (*coplanar*) das Gate-Dielektrikum und die Source- und Drain-Kontakte auf der gleichen Seite der Halbleiterschicht angeordnet. Deshalb wird das elektrische Feld der Gate-Elektrode teilweise durch die Source- und Drain-Kontakte abgeschirmt, so dass sich der Ladungsträgerkanal nur zwischen Source- und Drain-Kontakt ausbildet. Folglich ist die Fläche für den Ladungsträgeraustausch sehr klein und der parasitäre Kontaktwiderstand relativ groß:



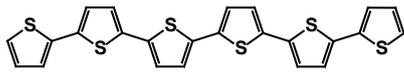
- Für die Halbleiterschicht kommen entweder niedermolekulare konjugierte Verbindungen oder halbleitende Polymere in Frage. Für die Herstellung der Gate-Elektrode, des Gate-Dielektrikums und der Source- und Drain-Kontakte können prinzipiell sowohl **organische als auch anorganische Materialien** zum Einsatz kommen. Hinsichtlich der Erzeugung der Schichten kann prinzipiell zwischen Verfahren zur Schichtabscheidung aus der Gasphase und Verfahren zur Schichtabscheidung aus der Flüssigphase unterschieden werden:

	Abscheidung aus der Gasphase	Abscheidung aus der Flüssigphase
Gate-Elektrode	anorganische Metalle (z.B. Cr, Al)	leitfähige Polymere (z.B. PEDOT:PSS); metallische Nanopartikel (z.B. Ag)
Gate-Dielektrikum	anorganische Oxide (z.B. SiO <sub>2</sub> , Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> )	nichtleitfähige Polymere (z.B. Polyvinylphenol)
Halbleiter	niedermolekulare konjugierte Kohlenwasserstoffe (z.B. Pentacen)	halbleitende Polymere (z.B. Poly(3-hexylthiophen))
Source/Drain-Kontakte	anorganische Metalle, bevorzugt Edelmetalle (z.B. Ag, Au)	leitfähige Polymere (z.B. PEDOT:PSS); metallische Nanopartikel (z.B. Ag)

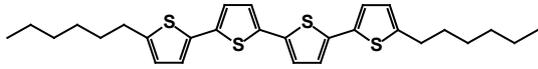
- Die Anzahl der für die Realisierung der organischen Halbleiterschicht in Frage kommenden Materialien ist relativ groß. Prinzipiell wird zwischen niedermolekularen und makromolekularen (polymeren) Halbleitern unterschieden. Je nach Löslichkeit und Molekülmasse werden konjugierte Halbleiterschichten entweder aus der Gasphase oder aus organischen Lösemitteln abgeschieden. Die Löslichkeit der Substanz in organischen Lösemitteln wird vor allem durch das Vorhandensein von Seitenketten bestimmt:

	nicht löslich	gut löslich
niedermolekulare Verbindungen (kleine Molekülmasse)	 <u>Pentacen</u> (schlecht löslich; Abscheidung aus der Gasphase)	 <u>TIPS-Pentacen</u> (aus Gasphase oder aus Lösung)
Polymere (große Molekülmasse)	 <u>Polythiophen</u> (schlecht löslich; ungeeignet)	 <u>Poly(3-hexylthiophen)</u> (aus Lösung)

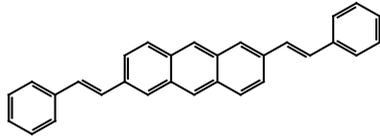
- Weitere Beispiele für organische Halbleiterverbindungen:



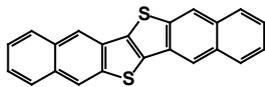
Sexithiophen (6T)



Dihexylquaterthiophen (DH4T)



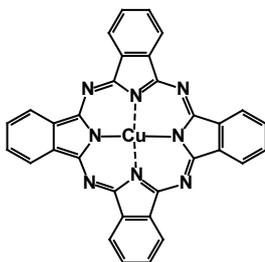
Diphenylvinylanthracen (DPVAnt)



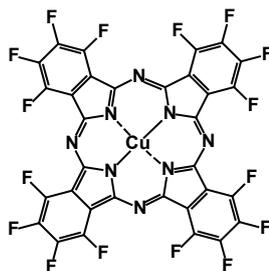
Dinaphthothienothiophen (DNTT)



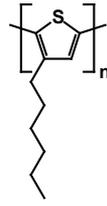
Rubren



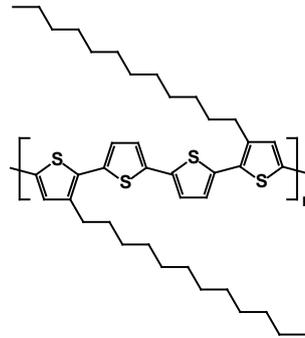
Kupferphthalocyanin (CuPc)



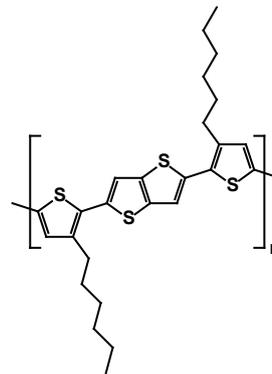
Perfluorokupferphthalocyanin (F<sub>16</sub>CuPc)



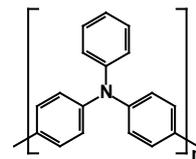
Poly(3-hexylthiophen)



Poly(didodecylquaterthiophen)  
(PQT-12)

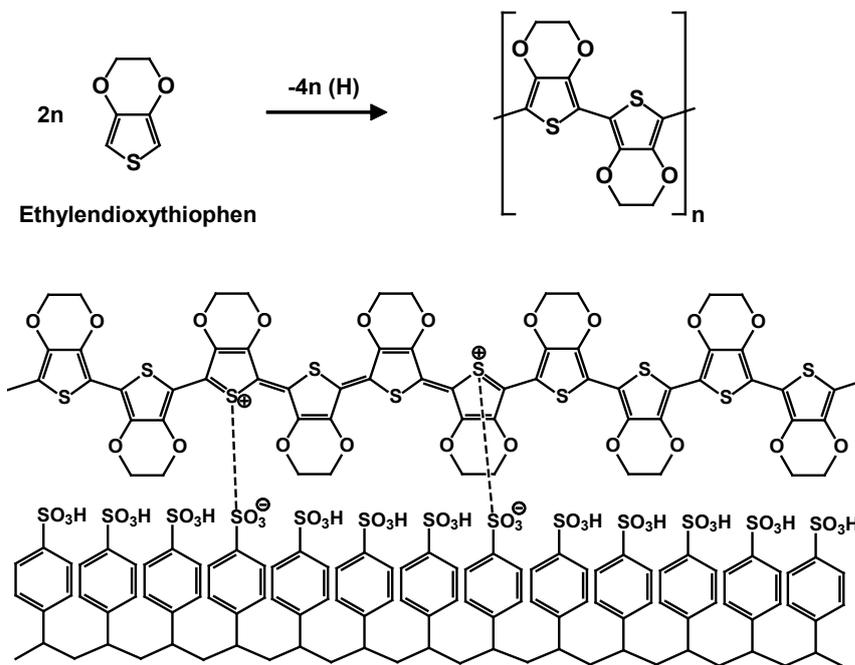


Poly(bis-hexylthiophen-thienothiophene)  
(pBTTT)

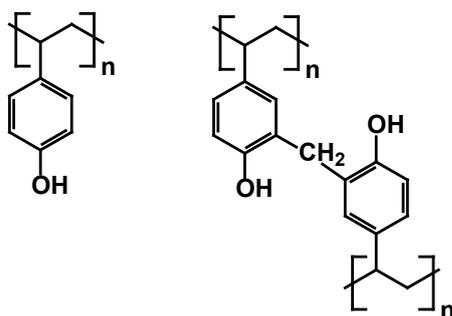


Polytriarylamin  
(PTAA)

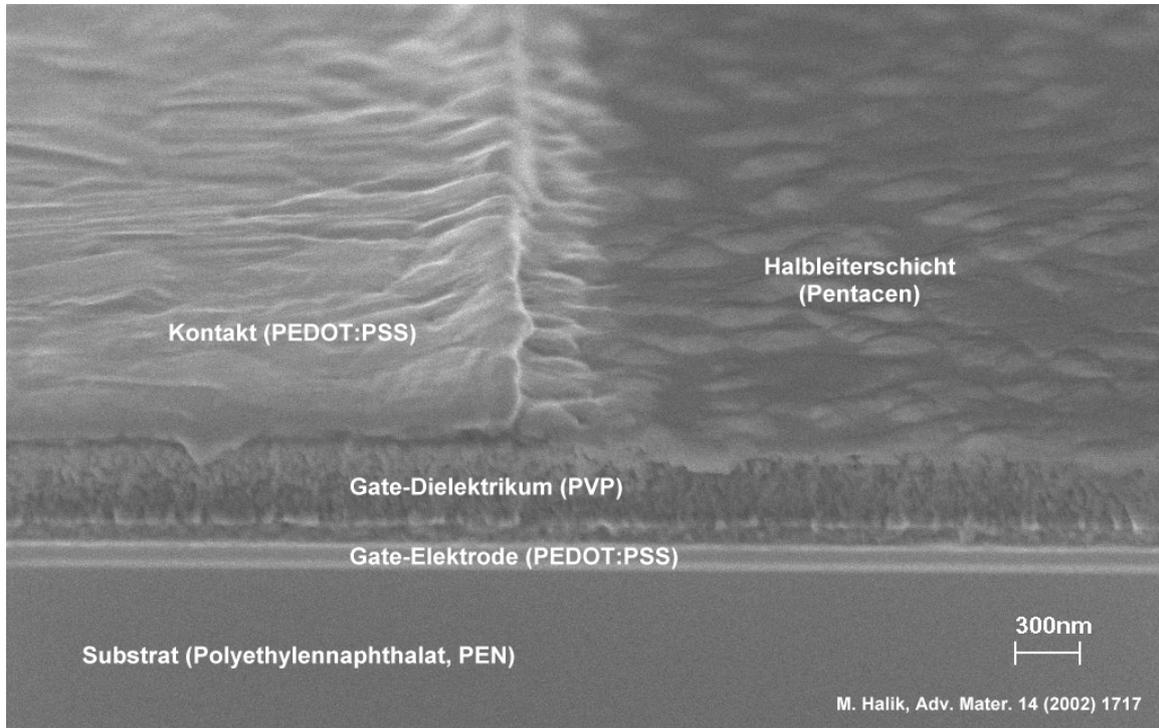
- Poly-(3,4-ethyldioxythiophen) (PEDOT) ist ein konjugiertes Polymer, das durch oxidative Polymerisation von Ethylen-3,4-Dioxythiophen (EDOT) synthetisiert wird. PEDOT hat im undotierten Zustand eine nur geringe elektrische Leitfähigkeit. Wird die Synthese von PEDOT in einer Lösung von Polystyrolsulfonsäure (PSS) durchgeführt, so entsteht ein wasserlösliches Gemisch aus teilweise deprotoniertem (negativ geladenem) PSS und teilweise elektronenarmem (positiv geladenem) PEDOT, das als **PEDOT:PSS** bezeichnet wird. Die beiden entgegengesetzt geladenen Ionomere stabilisieren sich in der Suspension. Der Entzug von Elektronen aus der PEDOT-Kette wirkt wie eine Dotierung und bedingt eine hohe elektrische Leitfähigkeit – je nach Wahl der Syntheseparameter bis zu  $10^3$  S/cm. Damit ist PEDOT:PSS als Material für die Gate-Elektrode und die Source/Drain-Kontakte organischer Transistoren geeignet:



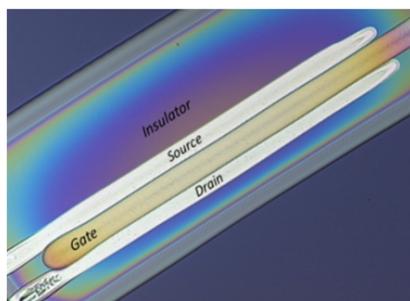
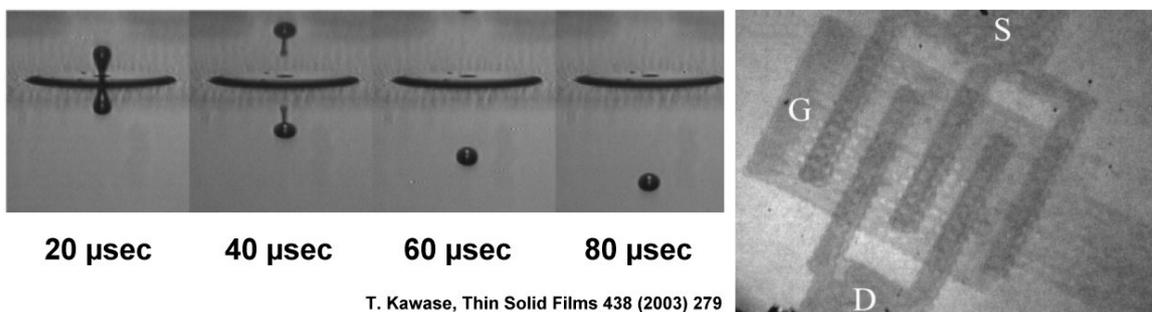
- **Polyvinylphenol (PVP)** ist ein elektrisch nichtleitfähiges Polymer, das in vielen organischen Lösemitteln gut löslich ist. Homogene Schichten mit hoher Qualität können durch Aufschleudern erzeugt werden. Wird der PVP-Lösung ein Quervernetzer beigemischt, so kann die Schicht nach der Abscheidung auf dem Substrat entweder durch thermische oder optische Anregung vernetzt werden; dadurch verliert das Material seine Löslichkeit und es entsteht eine chemisch und mechanisch robuste Isolatorschicht, die sich als Gate-Dielektrikum für organische Transistoren eignet (und z.B. im flexiblen Bildschirm des RADIUS von Polymer Vision eingesetzt wird):



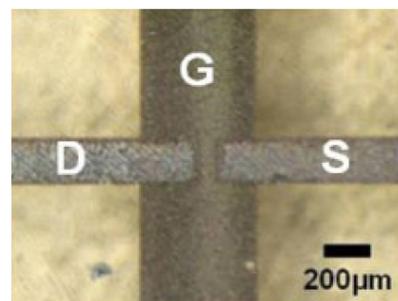
- Lösliche Polymere wie Polyvinylphenol (PVP) und PEDOT:PSS sowie Nanopartikel-Suspensionen können wahlweise durch Aufschleudern (ähnlich wie Fotolacke) oder durch Tintenstrahldrucken abgeschieden werden. Aufgeschleuderte Schichten zeichnen sich durch eine sehr homogene Schichtdicke aus, so dass auch dünne Schichten (~50 nm) ohne Fehlstellen erzeugt werden können; dies ist besonders für Gate-Dielektrika von Vorteil:



- Dagegen hat das Tintenstrahldrucken den Vorteil, dass das abgeschiedene Material nicht nachträglich strukturiert werden muss, und ist somit besonders für die Prozessierung der Gate-Elektroden und Source/Drain-Kontakte geeignet:

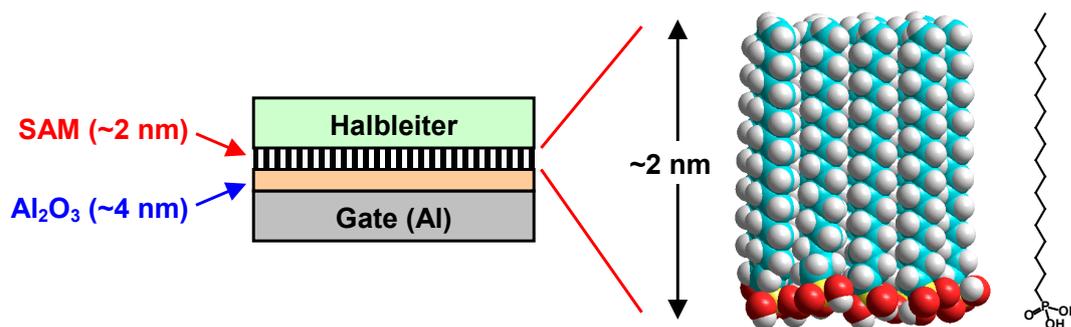


H. Y. Tseng, Org. Electronics 12 (2011) 249

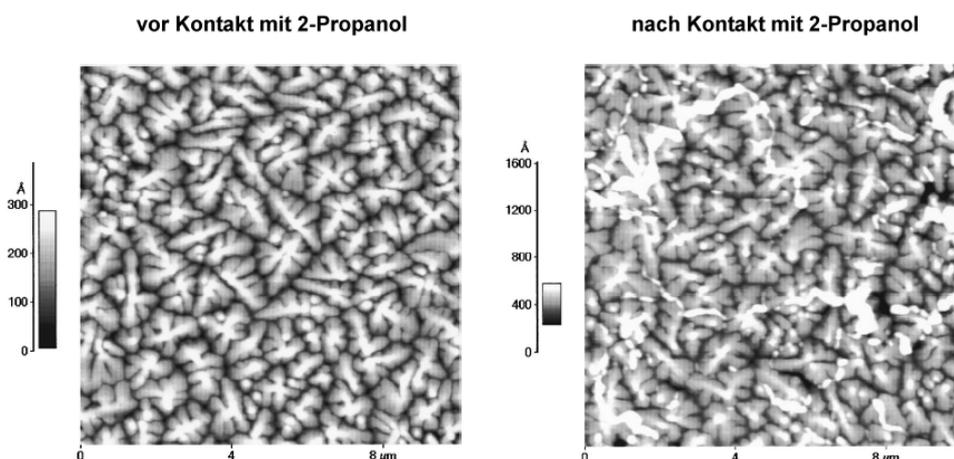


S. Chung, Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 03CB05

- Eine mögliche Alternative zu anorganischen und organischen Dielektrika, die aus der Gasphase bzw. aus flüssiger Lösung abgeschieden werden, sind Hybrid-Dielektrika, in denen eine anorganische und eine organische Isolatorschicht kombiniert und Oberflächenoxidations- und molekulare Selbstorganisationsprozesse ausgenutzt werden. Ein Beispiel ist die Kombination eines Metalloxids, das durch Oxidation der Oberfläche der metallischen Gate-Elektrode entsteht, und einer organischen Monolage, die sich spontan auf der so erzeugten Oxidoberfläche anordnet. Dieses Hybrid-Dielektrikum ist für die Transistorstrukturen A und B (*bottom-gate*) geeignet. Besteht die Gate-Elektrode z.B. aus Aluminium, so bildet sich durch Behandlung der Aluminiumoberfläche in einem Sauerstoff-Plasma eine dünne Schicht  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , deren Schichtdicke im Wesentlichen von der elektrischen Leistung des Plasmas abhängt und in der Regel etwa 4 nm beträgt. Wird das Substrat mit der so erzeugten  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Schicht in eine verdünnte Lösung aus Alkan-Phosphonsäure-Molekülen getaucht, so bilden die Moleküle spontan eine qualitativ hochwertige selbstorganisierende Monolage (*self-assembled monolayer, SAM*) auf der  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Oberfläche:

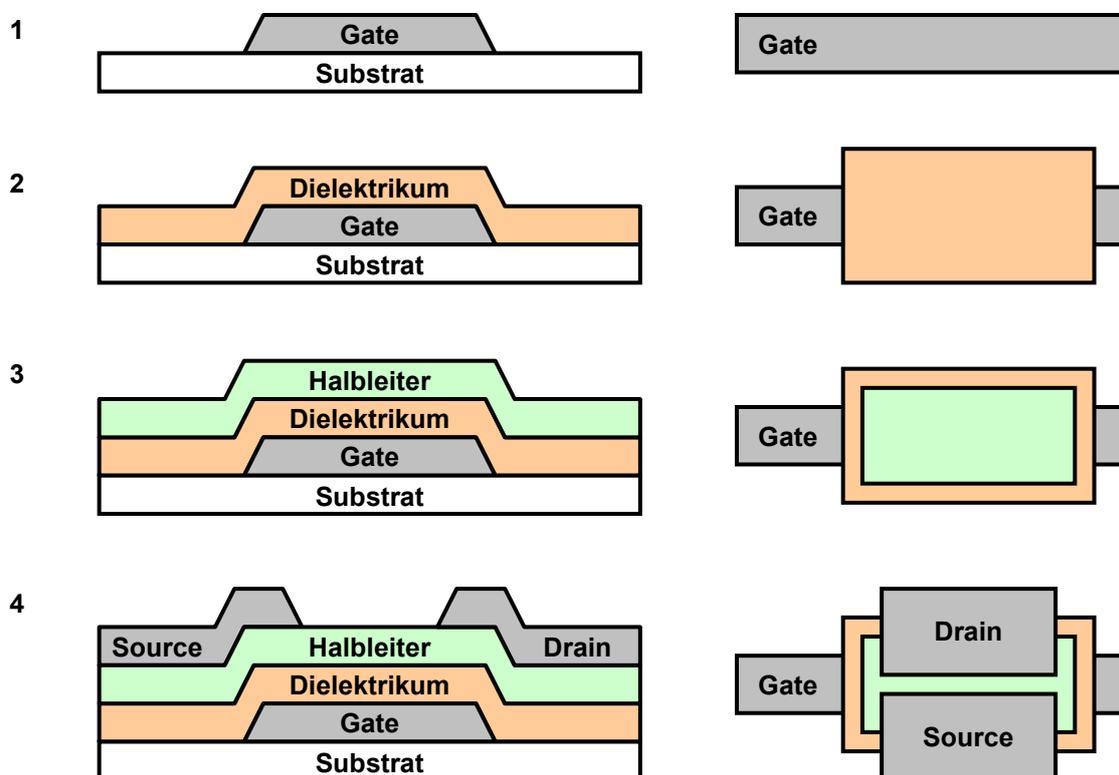


- Die Realisierung organischer Transistoren erfordert die gegenseitige **Kompatibilität** der einzelnen Komponenten. Z.B. muss für die Transistorstrukturen A und D gewährleistet sein, dass die Abscheidung und Strukturierung der Source- und Drain-Kontakte nicht zu einer Beschädigung der darunter liegenden organischen Halbleiterschicht führt. Bei den Transistorstrukturen C und D darf die Abscheidung des Gate-Dielektrikums nicht zu einer Beschädigung der organischen Halbleiterschicht führen. Die Gewährleistung der gegenseitigen Kompatibilität muss bei der Wahl der Materialien und der Verfahren zur Abscheidung und Strukturierung der einzelnen Schichten berücksichtigt werden. Z.B. ist bekannt, dass polykristalline Pentacen-Schichten durch den Kontakt mit organischen **Lösemitteln** in eine andere Kristallstruktur übergehen; dieser Übergang kann zu mechanischen Beschädigungen an den Schichten führen:



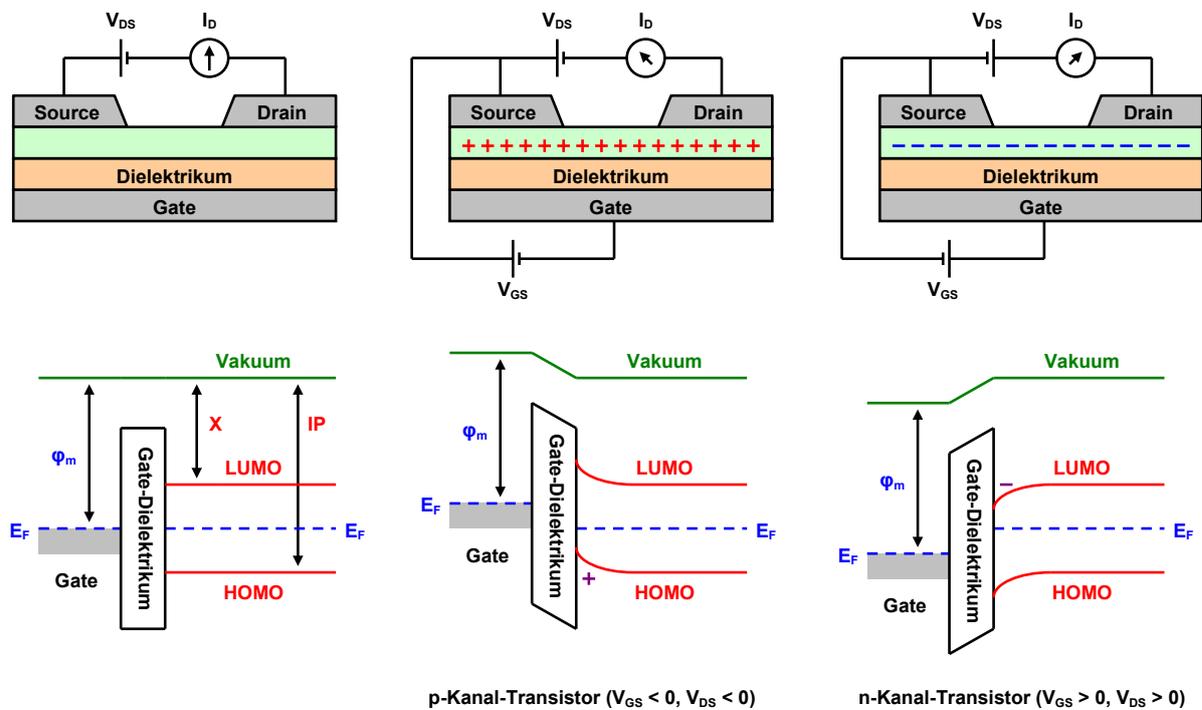
D. J. Gundlach, Appl. Phys. Lett. 74 (1999) 3302

- Soll also ein Pentacen-Transistor mit der Transistorstruktur A implementiert werden, so muss die Prozessierung der Source/Drain-Kontakte so erfolgen, dass die Pentacen-Schicht nicht in Kontakt mit Lösemitteln kommt. Auf Grund dieser Randbedingung ist die Verwendung fotolithographischer Methoden zur Strukturierung der Source/Drain-Kontakte auf der Oberfläche der Pentacen-Schicht in der Regel nicht möglich. Eine Alternative ist die Strukturierung mittels Verwendung von Schattenmasken.
- Die **Prozessfolge** für die Herstellung organischer Transistoren mit der Transistorstruktur A ist nachfolgend schematisch dargestellt. Im ersten Schritt wird auf dem Substrat die Gate-Elektrode erzeugt, im einfachsten Fall durch das Aufdampfen einer dünnen Schicht Aluminium durch eine Schattenmaske. Im zweiten Schritt erfolgt die Erzeugung des Gate-Dielektrikums, z.B. durch Plasma-Oxidierung der Aluminium-Oberfläche und nachfolgende Erzeugung einer molekularen selbstorganisierenden Monolage. Der dritte Schritt ist die Abscheidung der organischen Halbleiterschicht, z.B. durch Sublimation und Kondensation einer dünnen Schicht Pentacen. Im vierten und letzten Schritt werden die Source- und Drain-Kontakte erzeugt; dies kann z.B. durch das Aufdampfen einer dünnen Schicht Gold durch eine Schattenmaske erfolgen.



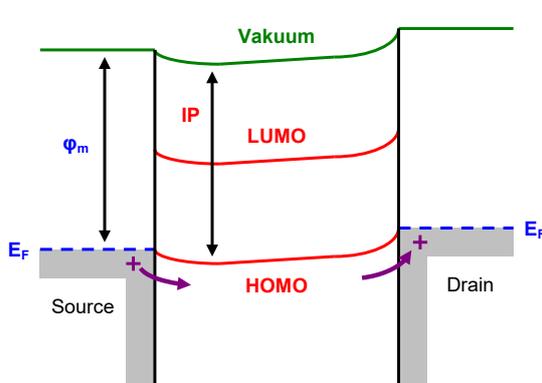
## 5. Funktionsweise organischer Transistoren

- Organische Transistoren sind Feldeffekt-Transistoren, bei denen der Halbleiter als dünne Schicht eines konjugierten organischen Materials ausgebildet ist (*organic thin-film transistor, TFT*). Die Funktion von Feldeffekt-Transistoren beruht auf der Anreicherung eines **Ladungsträgerkanals** im Halbleiter in Abhängigkeit von der Gate-Source-Spannung ( $V_{GS}$ ) und der daraus resultierenden Modulation des bei angelegter Drain-Source-Spannung ( $V_{DS}$ ) fließenden Drain-Stroms ( $I_D$ ). Die durch den Halbleiter fließenden Ladungen werden am Source-Kontakt in den Halbleiter injiziert und verlassen den Halbleiter am Drain-Kontakt. Bei **p-Kanal-Transistoren** sind die im Ladungsträgerkanal angereicherten Ladungen positiv, bei **n-Kanal-Transistoren** sind die Ladungen negativ:

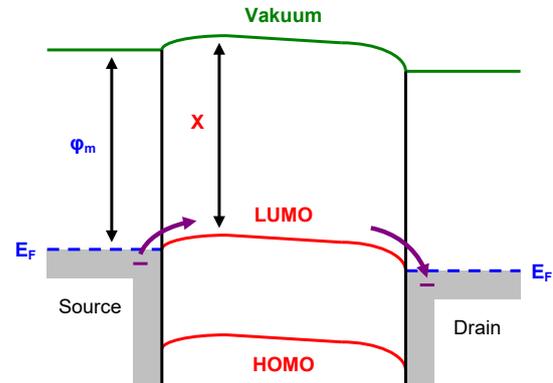


- Im Gegensatz zu Silizium-MOSFETs werden organische Transistoren nicht gezielt **dotiert**, d. h. die organische Halbleiterschicht ist sowohl im Kanalbereich als auch im Bereich der Source- und Drain-Kontakte intrinsisch (undotiert). Im Gegensatz zu Silizium-MOSFETs existieren an den Source- und Drain-Kontakten organischer Transistoren also keine pn-Übergänge, die die (gewünschte) Injektion von Minoritätsladungen vom Source-Kontakt in den Kanal erleichtern und die (unerwünschte) Injektion von Majoritätsladungen vom Drain-Kontakt in den Halbleiter blockieren.
- Stattdessen existieren an den Kontakten organischer Transistoren **Schottky-Barrieren**. Demzufolge werden die elektrischen Eigenschaften organischer Transistoren maßgeblich durch die Höhe der Schottky-Barrieren zwischen den Kontakten und dem HOMO bzw. LUMO des organischen Halbleiters bestimmt. Im Idealfall werden die Materialien für Halbleiter und Kontakte so gewählt, dass das Fermi-Niveau der Kontakte entweder mit dem HOMO oder dem LUMO des Halbleiters übereinstimmt.

- Bei hinreichend kleiner Energiebarriere zwischen den Kontakten und dem HOMO können Löcher effizient injiziert und extrahiert werden; in diesem Fall wird der Transistor als p-Kanal-Transistor betrieben. Ist dagegen die Energiebarriere zwischen den Kontakten und dem LUMO klein, so können Elektronen effizient injiziert und extrahiert werden; in diesem Fall handelt es sich um einen n-Kanal-Transistor:

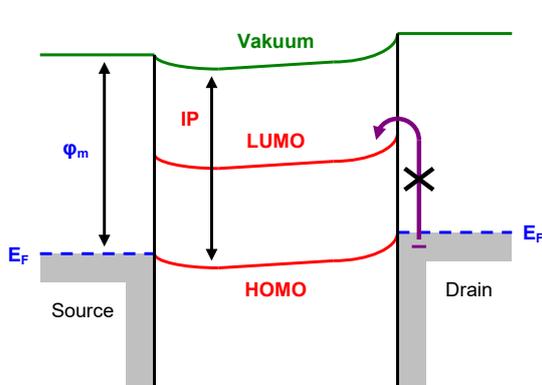


Fermi-Niveau der Kontakte stimmt mit dem HOMO überein ( $\varphi_m \sim IP$ ); Injektion und Extraktion von Löchern ist möglich; Voraussetzung für p-Kanal-Transistor ist erfüllt

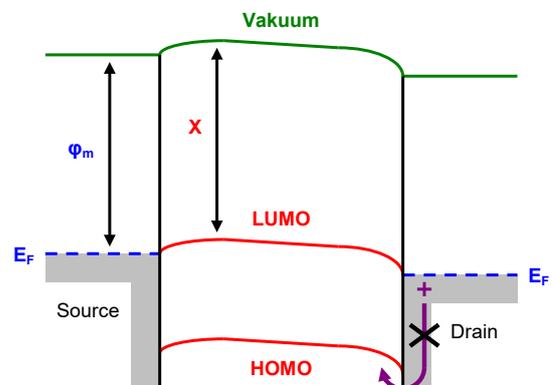


Fermi-Niveau der Kontakte stimmt mit dem LUMO überein ( $\varphi_m \sim X$ ); Injektion und Extraktion von Elektronen ist möglich; Voraussetzung für n-Kanal-Transistor ist erfüllt

- Um die **unerwünschte Injektion** des jeweils anderen Ladungstyps am Drain-Kontakt zu vermeiden, ist eine möglichst große Energiebarriere zwischen den Kontakten und dem jeweils anderen Energieband erforderlich. Bei p-Kanal-Transistoren sollte die Energiebarriere zwischen den Kontakten und dem LUMO also möglichst groß sein, um die unerwünschte Injektion von Elektronen vom Drain-Kontakt in das LUMO zu blockieren. Bei n-Kanal-Transistoren sollte die Energiebarriere zwischen den Kontakten und dem HOMO möglichst groß sein, um die unerwünschte Injektion von Löchern vom Drain-Kontakt in das HOMO zu verhindern:

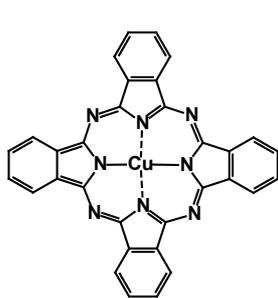


Energiebarriere zwischen Kontakt und LUMO ist hinreichend groß ( $\varphi_m \gg X$ ), um unerwünschte Injektion von Elektronen vom Drain-Kontakt zu blockieren; Voraussetzung für p-Kanal-Transistor ist erfüllt

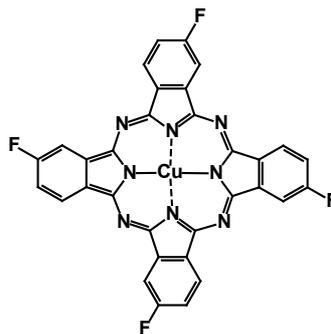


Energiebarriere zwischen Kontakt und HOMO ist hinreichend groß ( $\varphi_m \ll IP$ ), um unerwünschte Injektion von Löchern am Drain-Kontakt zu blockieren; Voraussetzung für n-Kanal-Transistor ist erfüllt

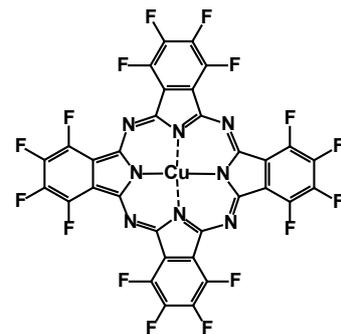
- Bei vielen organischen Halbleitern ist die Energiedifferenz zwischen HOMO und LUMO tatsächlich so groß, dass nur einer der beiden Ladungsträgertypen effizient injiziert und extrahiert werden kann. Pentacen z.B. hat eine HOMO-Energie von etwa -5 eV. Für die Injektion von Löchern in das HOMO kommen deshalb prinzipiell alle Metalle in Frage, die eine Austrittsarbeit von etwa 5 eV haben, also z.B. Gold (5.1 eV) und Palladium (5.1 eV). Da die LUMO-Energie von Pentacen bei etwa -3 eV liegt, ist die Energiebarriere zwischen den genannten Metallen und dem LUMO so groß (~2 eV), dass die unerwünschte Injektion von Elektronen in das LUMO unterdrückt wird. Aus diesem Grund ist Pentacen für die Herstellung von **p-Kanal-Transistoren** geeignet.
- Für die Herstellung von **n-Kanal-Transistoren** ist Pentacen dagegen ungeeignet, da für die effiziente Injektion von Elektronen in das LUMO ein Metall mit einer Austrittsarbeit von etwa 3 eV erforderlich ist. Zwar existieren solche Metalle (z.B. Calcium), allerdings sind diese Metalle sehr reaktiv und unbeständig.
- Für die Herstellung organischer **n-Kanal-Transistoren** empfiehlt sich daher der Einsatz organischer Halbleiter, deren LUMO-Energie im Bereich von etwa -5 eV liegt. Da die HOMO- und LUMO-Energien organischer Halbleiter im Wesentlichen durch die Molekülstruktur bestimmt sind, können solche Verbindungen in der Tat gezielt synthetisiert werden. Eine besonders erfolgreiche Strategie zur Herstellung organischer Halbleitermaterialien mit einer LUMO-Energie im Bereich von etwa -5 eV ist die Synthese aromatischer Verbindungen mit stark elektronegativen Substituenten, wie zum Beispiel Fluoratomen. Ein Beispiel ist die vollständige Substitution von Kupferphthalocyanin (CuPc; im Bild links) mit Fluoratomen zu Hexadecafluorokupferphthalocyanin (F<sub>16</sub>CuPc; im Bild rechts), die zu einer Absenkung der LUMO-Energie von etwa -2.7 eV auf etwa -4.5 eV führt:



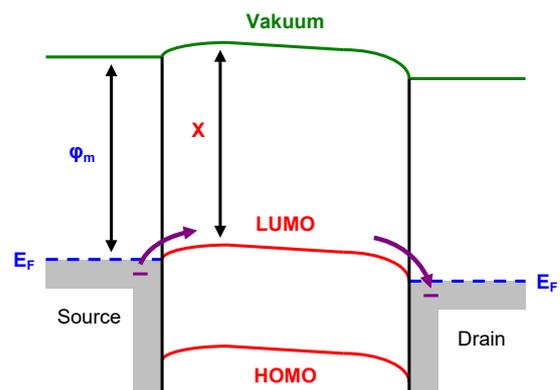
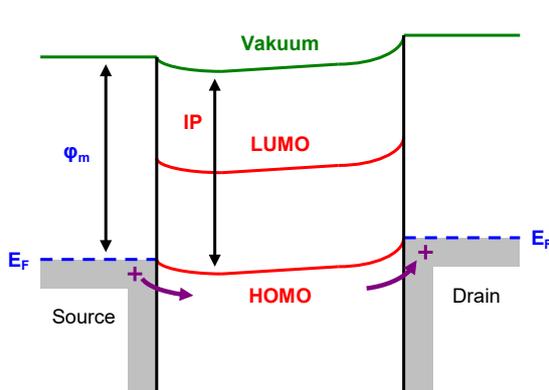
X = 2.7 eV  
IP = 4.8 eV



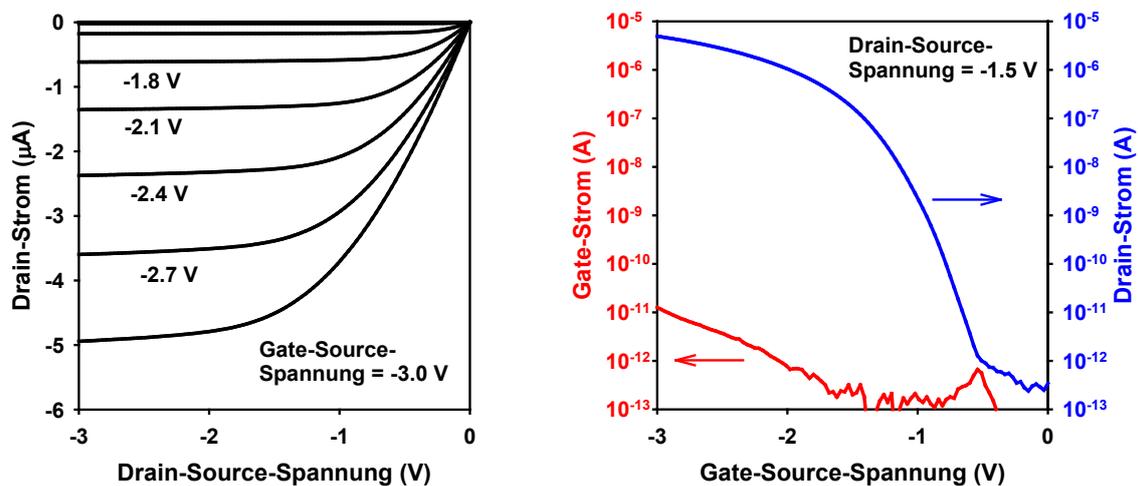
X = 3.6 eV  
IP = 5.6 eV



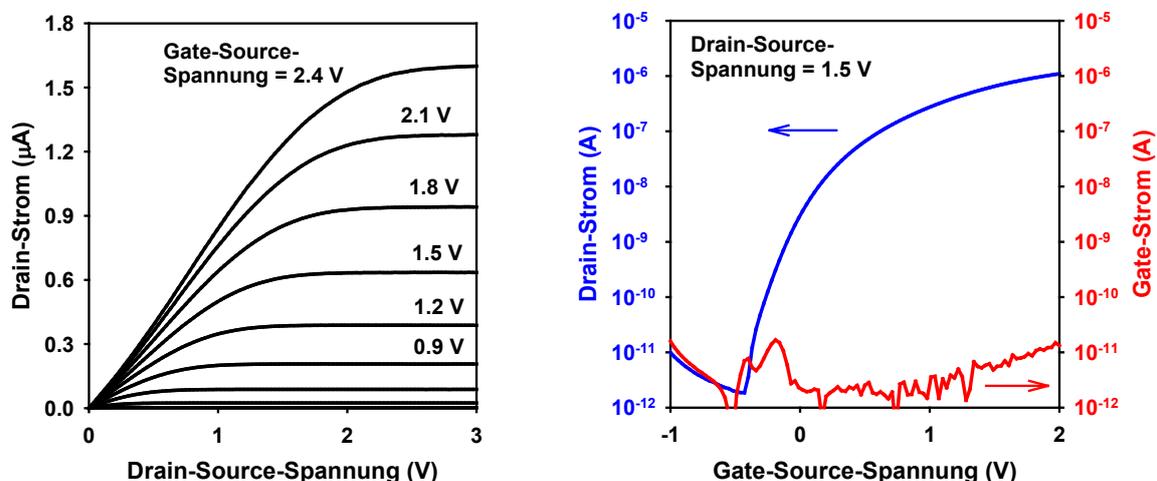
X = 4.5 eV  
IP = 6.3 eV



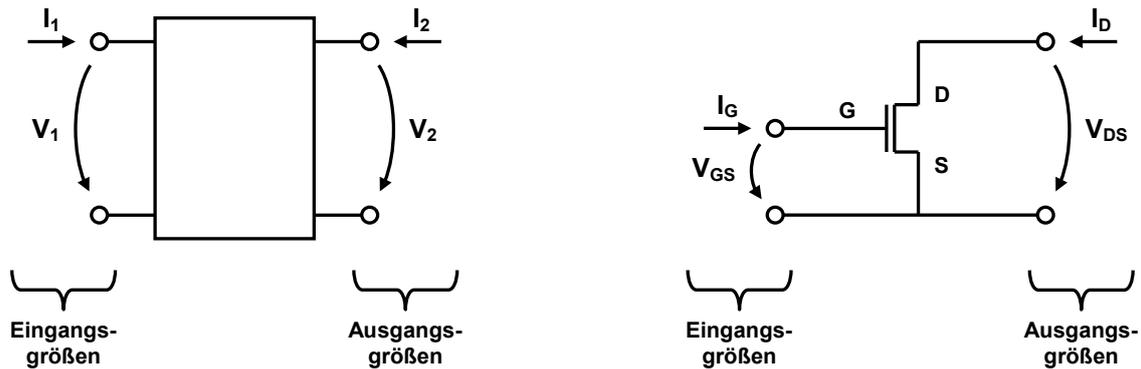
- Die **Strom-Spannungs-Kennlinien** eines Pentacen-Transistors (**p-Kanal-Transistor**) sind nachstehend dargestellt. Für die Herstellung des Transistors wurde die Transistorstruktur A verwendet. Der Transistor besteht aus einer Gate-Elektrode aus Aluminium, einem Gate-Dielektrikum aus Aluminiumoxid und einer selbstorganisierenden Monolage (*self-assembled monolayer, SAM*;  $C_{\text{diel}} = 0.7 \mu\text{F}/\text{cm}^2$ ), einer polykristallinen Pentacen-Schicht und Source- und Drain-Kontakten aus Gold. In der Ausgangskennlinie (links) ist der Drain-Strom ( $I_D$ ) als Funktion der Drain-Source-Spannung ( $V_{DS}$ ) für mehrere Gate-Source-Spannungen ( $V_{GS}$ ) aufgetragen. In der kombinierten Eingangs- und Transferkennlinie (rechts) sind der Gate-Strom ( $I_G$ ) und der Drain-Strom als Funktion der Gate-Source-Spannung dargestellt:



- Die **Strom-Spannungs-Kennlinien** eines  $\text{F}_{16}\text{CuPc}$ -Transistors (**n-Kanal-Transistor**) sind nachstehend dargestellt. Für die Herstellung des Transistors wurde ebenfalls die Transistorstruktur A verwendet. Der Transistor besteht aus einer Gate-Elektrode aus Aluminium, einem Gate-Dielektrikum aus Aluminiumoxid und einer selbstorganisierenden Monolage ( $C_{\text{diel}} = 0.7 \mu\text{F}/\text{cm}^2$ ), einer polykristallinen  $\text{F}_{16}\text{CuPc}$ -Schicht und Source- und Drain-Kontakten aus Gold:



- Die Nomenklatur der Spannungen und Ströme des Transistors erfolgt in Anlehnung an die **Vierpoltheorie**:



- Obwohl der Ladungsträgertransport in organischen Transistoren auf anderen physikalischen Grundlagen beruht als der Ladungsträgertransport in Silizium-MOSFETs, sind die Strom-Spannungs-Kennlinien organischer Transistoren denen von Silizium-MOSFETs qualitativ ähnlich. Aus diesem Grund erfolgt die **analytische Beschreibung** des Strom-Spannungs-Verhaltens organischer Transistoren im einfachsten Fall mit denselben Gleichungen, die ursprünglich für Silizium-MOSFETs entwickelt wurden:

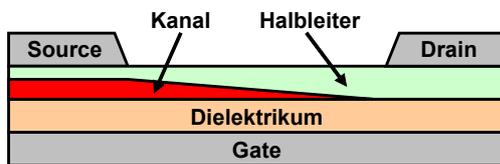
$$I_D = \frac{\mu C_{\text{diel}} W}{L} \left( (V_{\text{GS}} - V_{\text{th}}) V_{\text{DS}} - \frac{V_{\text{DS}}^2}{2} \right) \quad \text{wenn } |V_{\text{GS}} - V_{\text{th}}| > |V_{\text{DS}}| > 0 \quad (1)$$

$$I_D = \frac{\mu C_{\text{diel}} W}{2L} (V_{\text{GS}} - V_{\text{th}})^2 \quad \text{wenn } |V_{\text{DS}}| > |V_{\text{GS}} - V_{\text{th}}| > 0 \quad (2)$$

$I_D$	...	Drain-Strom ( $\mu\text{A}$ )
$V_{\text{GS}}$	...	Gate-Source-Spannung (V)
$V_{\text{DS}}$	...	Drain-Source-Spannung (V)
$V_{\text{th}}$	...	Schwellspannung ( <i>threshold voltage</i> )
$\mu$	...	Ladungsträgerbeweglichkeit im Halbleiterkanal ( $\text{cm}^2/\text{Vs}$ )
$C_{\text{diel}}$	...	Kapazität je Einheitsfläche des Gate-Dielektrikums ( $\mu\text{F}/\text{cm}^2$ )
$W$	...	Kanaltbreite ( $\mu\text{m}$ )
$L$	...	Kanallänge ( $\mu\text{m}$ )

- Der durch Gleichung (1) beschriebene Arbeitsbereich wird als **linearer Bereich** bezeichnet, da der Drain-Strom in diesem Bereich annähernd proportional zur Drain-Source-Spannung ist. (Wenn  $V_{\text{DS}}$  klein ist, kann der Term  $V_{\text{DS}}^2/2$  gegenüber dem Term  $(V_{\text{GS}} - V_{\text{th}})V_{\text{DS}}$  vernachlässigt werden). Im linearen Bereich erstreckt sich der im Halbleiter angereicherte Ladungsträgerkanal über die gesamte Strecke vom Source-Kontakt bis zum Drain-Kontakt.

- Der durch Gleichung (2) beschriebene Arbeitsbereich wird als **Sättigungsbereich** bezeichnet, da der Drain-Strom in diesem Bereich unabhängig von der Drain-Source-Spannung ist. Der Grund für die Sättigung des Drain-Stroms ist die Abschnürung des Kanals am Drain-Kontakt, die durch das zusätzlich auf den Halbleiter wirkende (und das Gate-Potential teilweise kompensierende) Drain-Potential verursacht wird:



- Im Falle von Silizium-MOSFETs ist die **Schwelspannung**  $V_{th}$  definiert als die Gate-Source-Spannung, bei der der Halbleiter an der Grenzfläche zum Gate-Dielektrikum invertiert, d. h. bei der sich ein Kanal aus Minoritätsladungsträgern ausbildet. Im Falle organischer Transistoren ist die Unterscheidung zwischen Majoritäts- und Minoritätsladungsträgern nicht sinnvoll, da organische Halbleiter in der Regel intrinsisch sind. Obwohl der Schwelspannung im Falle organischer Transistoren also keine physikalische Bedeutung zugeordnet werden kann, ist sie als mathematische Größe für die Analyse des Strom-Spannungs-Verhaltens durchaus nützlich.
- Gleichungen (1) und (2) beschreiben das Verhalten des Transistors für Gate-Source-Spannungen oberhalb der Schwelspannung ( $|V_{GS} - V_{th}| > 0$ ). Unterhalb der Schwelspannung existiert ein Bereich, in dem der Drain-Strom exponentiell von der Gate-Source-Spannung abhängt, der sogenannte **Unterschwel-Bereich**. Der Drain-Strom im Unterschwelbereich wird durch Ladungsträger verursacht, die dank ausreichender thermischer Anregung über die Energiebarriere am Source-Kontakt hinweg in den Halbleiter injiziert werden und durch den Halbleiter zum Drain-Kontakt diffundieren:

$$|I_D| = I_0 \exp\left(\frac{q|V_{GS}|}{n k T}\right) \quad \text{wenn } V_{th} < V_{GS} < V_{so} \text{ (p-Kanal-Transistor)} \quad (3)$$

$$\text{bzw. } V_{so} < V_{GS} < V_{th} \text{ (n-Kanal-Transistor)}$$

$n$	...	Idealitätsfaktor
$q$	...	Elementarladung ( $1.6 \times 10^{-19}$ As)
$k$	...	Boltzmann-Konstante ( $1.38 \times 10^{-23}$ J/K)
$T$	...	Temperatur (K)
$V_{th}$	...	Schwelspannung ( <i>threshold voltage</i> )
$V_{so}$	...	Einschaltspannung ( <i>switch-on voltage</i> )

- Demzufolge wird die Steilheit der Kurve  $\log(I_D) / V_{GS}$  im Unterschwel-Bereich durch den Idealitätsfaktor  $n$  und die Temperatur  $T$  bestimmt. Zur Quantifizierung der Steilheit wird gewöhnlich der reziproke Anstieg der Kurve  $\log(I_D) / V_{GS}$  (der **Unterschwellanstieg**  $S$ ) angegeben:

$$S = \frac{\partial V_{GS}}{\partial(\log_{10} I_D)} = \frac{n k T}{q} \ln 10 \quad (4)$$

- Der Idealitätsfaktor  $n$  wiederum ist vom Verhältnis zwischen der Konzentration der an der Grenzfläche zwischen Halbleiter und Gate-Dielektrikum elektrisch aktiven **Störstellen**  $N_{it}$  und der Kapazität des Gate-Dielektrikums  $C_{diel}$ :

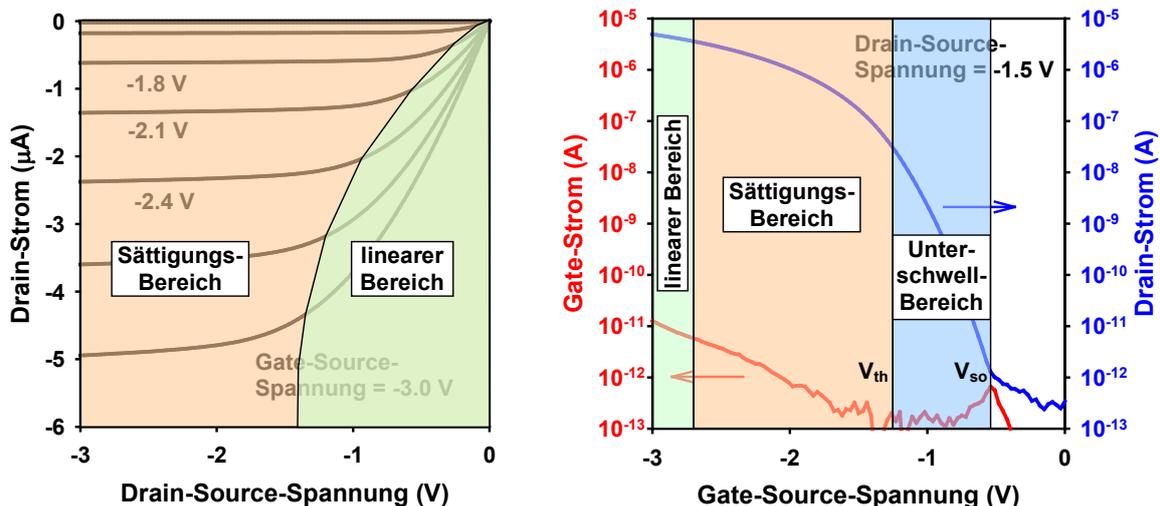
$$n = 1 + \frac{q N_{it}}{C_{diel}} \quad (5)$$

$$S = \frac{kT}{q} \ln 10 \left( 1 + \frac{q N_{it}}{C_{diel}} \right) \quad (6)$$

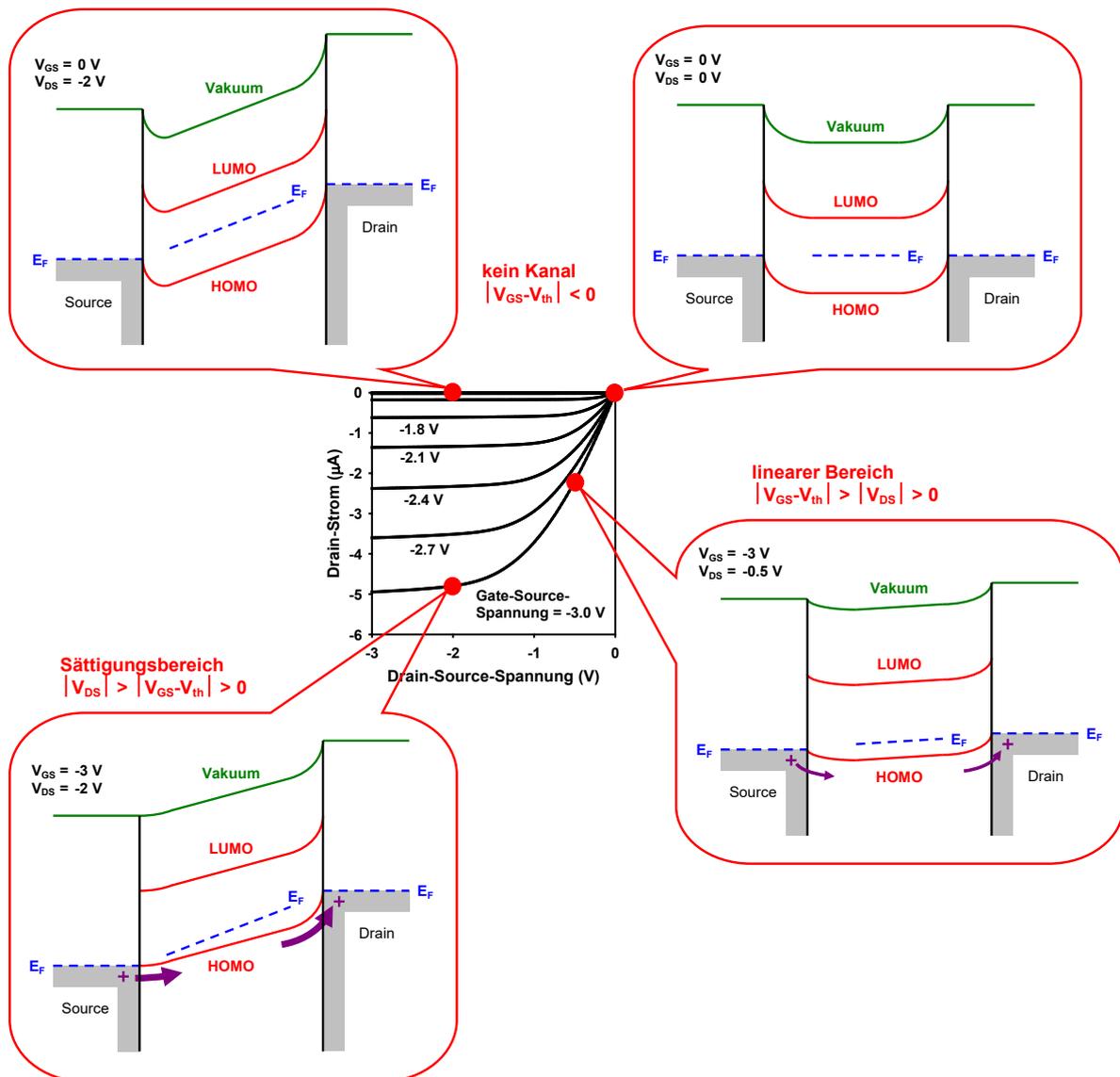
- Wenn das Verhältnis  $N_{it} / C_{diel}$  klein ist, nähert sich der Idealitätsfaktor dem Wert 1 und der Unterschwellanstieg bei Raumtemperatur ( $T = 300 \text{ K}$ ) dem Wert  $60 \text{ mV/Dekade}$  an. Bei Silizium-MOSFETs wird dieser Idealwert tatsächlich erreicht, da die Qualität der Grenzfläche zwischen hochreinem, einkristallinem Silizium und Siliziumdioxid sehr hoch ist. Da organische Transistoren in der Regel aus polykristallinen Schichten aufgebaut sind, ist die Grenzfläche zwischen Halbleiter und Gate-Dielektrikum üblicherweise durch eine höhere Konzentration an strukturellen, elektrisch aktiven Defekten gekennzeichnet. Folglich ist der Unterschwellanstieg organischer Transistoren in der Regel weniger steil als in Silizium-MOSFETs und wird als Indikator für die Güte der Transistoren herangezogen:

$\epsilon_{diel}$	$t_{diel} \text{ (nm)}$	$C_{diel} = \epsilon_0 \cdot \epsilon_{diel} / t_{diel} \text{ (}\mu\text{F/cm}^2\text{)}$	$N_{it} \text{ (cm}^{-2} \cdot \text{V}^{-1}\text{)}$	$S \text{ (mV/Dekade)}$
3.9 (SiO <sub>2</sub> )	3	1.1	$10^{12}$	68
3.9 (SiO <sub>2</sub> )	3	1.1	$10^{10}$	60
4.7 (AlO <sub>x</sub> +SAM)	6	0.7	$5 \times 10^{13}$	750
4.7 (AlO <sub>x</sub> +SAM)	6	0.7	$3 \times 10^{12}$	100

- Der Unterschwell-Bereich erstreckt sich zwischen der Schwellspannung  $V_{th}$  und der **Einschaltspannung**  $V_{so}$ . Unterhalb der Einschaltspannung ist der Drain-Strom im Idealfall sehr klein und wird lediglich durch geringe Leckströme durch den Halbleiter, durch das Gate-Dielektrikum oder entlang der Substratoberfläche bestimmt.
- Nachfolgend ist die Ausdehnung und gegenseitige Abgrenzung der drei Arbeitsbereiche (linearer Bereich, Sättigungsbereich, Unterschwell-Bereich) in den Strom-Spannungs-Kennlinien eines p-Kanal-Transistors schematisch dargestellt:



- Der Strom durch den Transistor wird durch die elektrischen Potentiale an Gate und Drain gesteuert. Das Potential im organischen Halbleiter entlang des Kanals an der Grenzfläche zum Gate-Dielektrikum sowie die Höhe der Energiebarrieren an Source und Drain in Abhängigkeit von der Gate-Source-Spannung und der Drain-Source-Spannung sind nachfolgend schematisch dargestellt:



## 6. Frequenzverhalten organischer Transistoren

- Die Beschreibung des Frequenzverhaltens von Feldeffekt-Transistoren erfolgt mit Hilfe des **Kleinsignal-Ersatzschaltbilds**. Bei **niedrigen Frequenzen** kann der Transistor (stark vereinfacht) durch das folgende Ersatzschaltbild beschrieben werden:



- Der Feldeffekt-Transistor ist eine Spannungs-gesteuerte Stromquelle. Die Steuerung des Drain-Stroms (Ausgangsstrom) durch die Gate-Source-Spannung (Eingangsspannung) wird quantitativ durch den Parameter  $g_m$  (**Durchgangsleitwert**, *transconductance*) beschrieben:

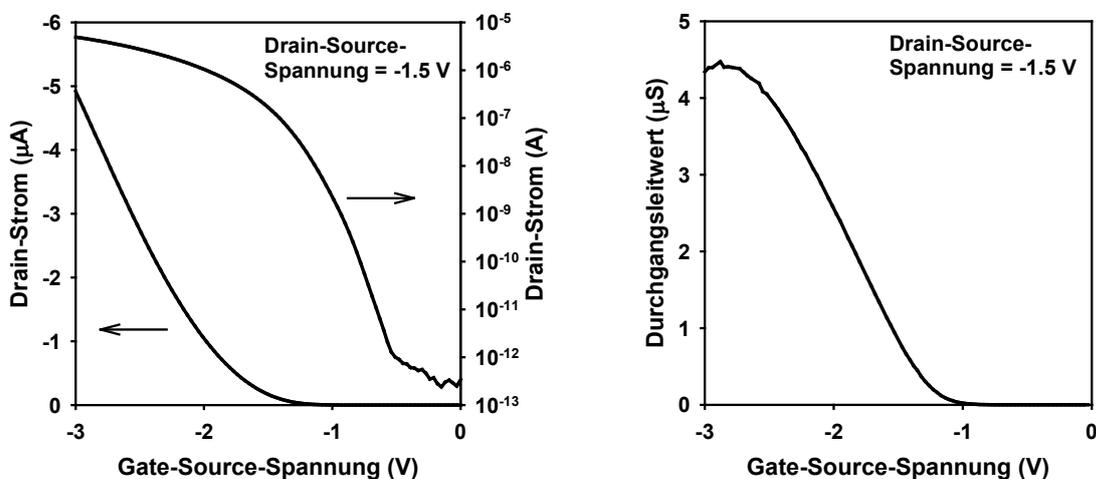
$$i_D = g_m v_{GS}$$

$$g_m = \frac{i_D}{v_{GS}} = \left. \frac{\partial I_D}{\partial V_{GS}} \right|_{V_{DS} = \text{const.}}$$

$V_{GS}, I_G, I_D$  ... Großsignalparameter

$v_{GS}, i_G, i_D$  ... Kleinsignalparameter (partielle Ableitung im Arbeitspunkt)

- Entsprechend der Relation  $g_m = \partial I_D / \partial V_{GS}$  kann der **Durchgangsleitwert** des Transistors aus der Transferkennlinie ( $I_D = f(V_{GS})$ ) durch Ableitung des Drain-Stroms nach der Gate-Source-Spannung berechnet und als Funktion der Gate-Source-Spannung dargestellt werden:



- Alternativ kann der **Durchgangsleitwert** analytisch aus den Gleichungen für den Drain-Strom  $I_D$  abgeleitet werden:

linearer Bereich:

$$I_D = \frac{\mu C_{\text{diel}} W}{L} \left( (V_{GS} - V_{th}) V_{DS} - \frac{V_{DS}^2}{2} \right) \quad \text{wenn } |V_{GS} - V_{th}| > |V_{DS}| > 0$$

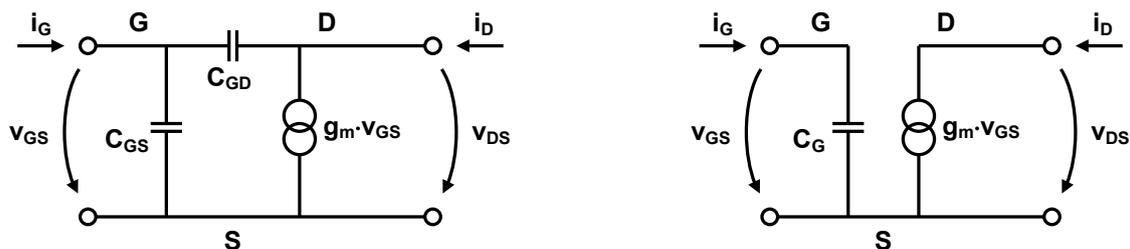
$$\rightarrow g_{m,L} = \frac{\partial I_D}{\partial V_{GS}} = \frac{\mu C_{\text{diel}} W}{L} V_{DS}$$

Sättigungsbereich:

$$I_D = \frac{\mu C_{\text{diel}} W}{2L} (V_{GS} - V_{th})^2 \quad \text{wenn } |V_{DS}| > |V_{GS} - V_{th}| > 0$$

$$\rightarrow g_{m,S} = \frac{\partial I_D}{\partial V_{GS}} = \frac{\mu C_{\text{diel}} W}{L} (V_{GS} - V_{th})$$

- In der Darstellung des Durchgangsleitwerts als Funktion der Gate-Source-Spannung ( $g_m = f(V_{GS})$ ) sind die beiden Arbeitsbereiche des Transistors gut zu erkennen: Im Sättigungsbereich ( $-2.7 \text{ V} < V_{GS} < -1.2 \text{ V}$ ) ist der Durchgangsleitwert proportional zur Gate-Source-Spannung; im linearen Bereich ( $-3 \text{ V} < V_{GS} < -2.7 \text{ V}$ ) ist der Durchgangsleitwert unabhängig von der Gate-Source-Spannung ( $g_m \sim 4 \mu\text{S}$ ).
- Bei **hohen Frequenzen**, d. h. bei schnellen Änderungen der Gate-Source-Spannung, muss der Einfluss der **Gate-Kapazität** berücksichtigt werden:



- Bei jeder Änderung der Gate-Source-Spannung ändert sich die elektrische Ladung auf der Gate-Kapazität:

$$\frac{dQ_G}{dt} = C_G \frac{dV_{GS}}{dt}$$

- Je schneller sich die Gate-Source-Spannung ändert, umso mehr Ladung wird je Zeiteinheit über den Eingang des Transistors transportiert, d. h. umso höher ist der **Gate-Strom**:

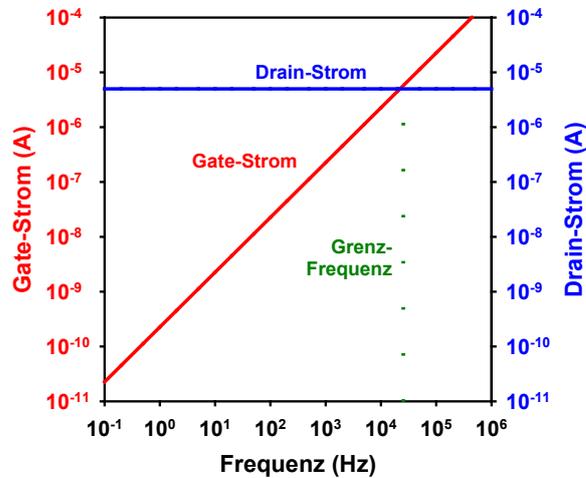
$$i_G = \frac{dQ_G}{dt} = C_G \frac{dV_{GS}}{dt} = j\omega C_G V_{GS} = j2\pi f C_G V_{GS}$$

- Während der Drain-Strom frequenzunabhängig ist, steigt der Gate-Strom mit größer werdender Frequenz der Gate-Source-Spannung an. Das Verhältnis aus den Beträgen des Gate-Stroms und des Drain-Stroms ist die **Stromverstärkung** des Transistors. Wenn der Gate-Strom den Wert des Drain-Stroms übersteigt, d. h. wenn die Stromverstärkung kleiner als 1 wird, kann der Transistor nicht mehr sinnvoll betrieben werden. Deshalb ist die Frequenz, bei der Gate-Strom und Drain-Strom gleich groß sind, als **Grenzfrequenz**  $f_T$  (*cut-off frequency*) definiert:

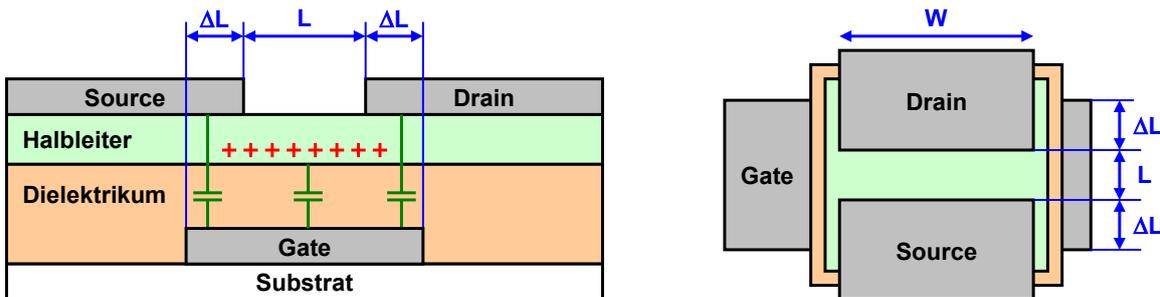
$$\left| \frac{i_D}{i_G} \right| = \frac{g_m V_{GS}}{2\pi f C_G V_{GS}} = \frac{g_m}{2\pi f C_G}$$

$$f_T = f \left( \left| \frac{i_D}{i_G} \right| = 1 \right)$$

$$f_T = \frac{g_m}{2\pi C_G}$$



- Die Gate-Kapazität des Transistors ist die Kapazität, die sich durch die Überlappung der Gate-Elektrode einerseits und der Source- und Drain-Kontakte und des Ladungsträgerkanals in der Halbleiterschicht andererseits ergibt:

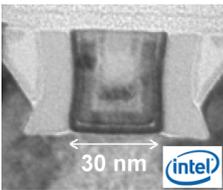
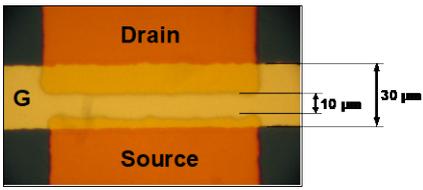
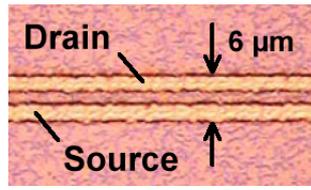


$$C_G \approx C_{\text{diel}} W(L + 2\Delta L)$$

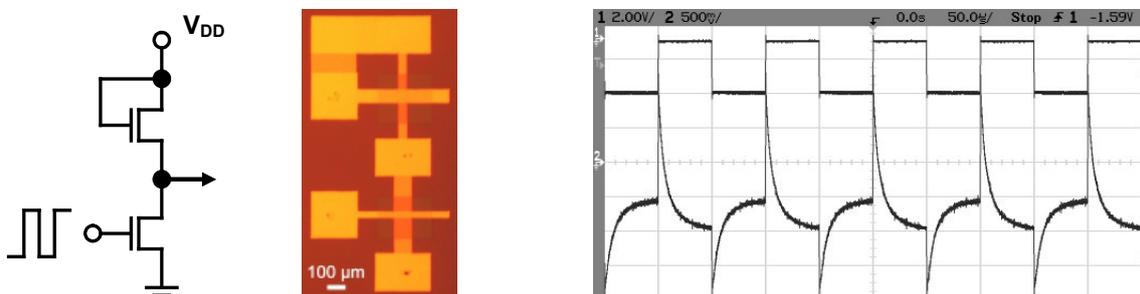
- $C_G$  ... Gate-Kapazität (pF)
- $C_{\text{diel}}$  ... Kapazität je Einheitsfläche des Gate-Dielektrikums ( $\mu\text{F}/\text{cm}^2$ )
- $W$  ... Kanalbreite ( $\mu\text{m}$ )
- $L$  ... Kanallänge ( $\mu\text{m}$ )
- $\Delta L$  ... Überlapplänge ( $\mu\text{m}$ )

- Silizium-MOSFETs mit Kanallängen unterhalb von 100 nm und selbstjustierten Kontaktbereichen haben Gate-Kapazitäten von wenigen Femtofarad. In organischen Transistoren sind die Gate-Kapazitäten auf Grund der größeren Strukturabmessungen deutlich größer. Ein wichtiger Trend in der Entwicklung organischer Transistoren ist die Reduzierung der Strukturabmessungen mit dem Ziel, die Gate-Kapazitäten zu reduzieren:

	$C_{\text{diel}} = \epsilon_0 \cdot \epsilon_{\text{diel}} / t_{\text{diel}}$	W	L	$\Delta L$	$C_G$
Intel® 4004 (1971)	43 nF/cm <sup>2</sup>	10 μm	10 μm	1 μm	52 fF
Intel Sandy Bridge (2011)	2.9 μF/cm <sup>2</sup>	10 μm	30 nm	10 nm	14 fF
organischer Transistor	0.7 μF/cm <sup>2</sup>	10 μm	10 μm	10 μm	2.1 pF
organischer Transistor	0.7 μF/cm <sup>2</sup>	10 μm	2 μm	2 μm	0.42 pF

Silizium-MOSFET (Intel Sandy Bridge)	Pentacen-Transistor (Schattenmasken)	Pentacen-Transistor (Inkjet)
		

- Für einen Pentacen-Transistor mit einem Durchgangsleitwert von 4 μS und einer Gate-Kapazität von 20 pF wird entsprechend der Gleichung  $f_T = g_m / (2\pi C_G)$  eine Grenzfrequenz von etwa 30 kHz erwartet. Diese Grenzfrequenz gilt streng genommen nur für den Betrieb mit Kleinsignalparametern, also nur für kleine Aussteuerungen. Wird der Transistor stattdessen über den gesamten Arbeitsbereich angesteuert, so ist die maximale Frequenz, bei der das Ausgangssignal dem Eingangssignal folgen kann, etwas kleiner (im vorliegenden Beispiel etwa 10 kHz):



- Sowohl der Durchgangsleitwert  $g_m$  als auch die Gate-Kapazität  $C_G$  sind proportional zur Kapazität je Einheitsfläche des Gate-Dielektrikums,  $C_{diel}$ , und zur Kanalbreite  $W$ . Folglich ist die Grenzfrequenz unabhängig von  $C_{diel}$  und von  $W$ :

linearer Bereich:

$$g_{m,L} = \frac{\mu C_{diel} W}{L} V_{DS} \quad \text{wenn } |V_{GS} - V_{th}| > |V_{DS}| > 0$$

$$\rightarrow f_T = \frac{g_{m,L}}{2\pi C_G} = \frac{\mu}{2\pi L(L + 2\Delta L)} V_{DS}$$

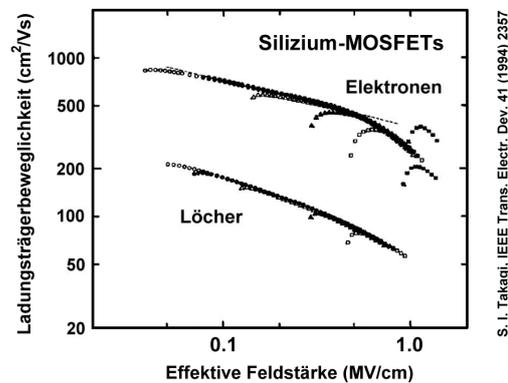
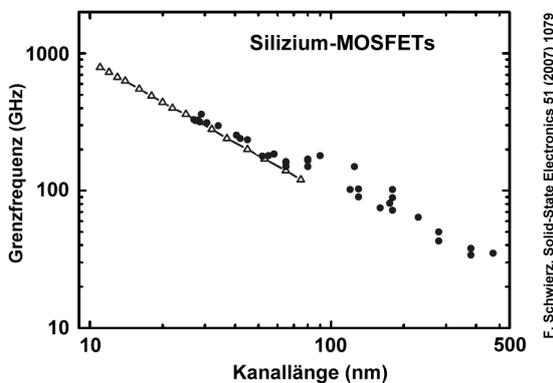
Sättigungsbereich:

$$g_{m,S} = \frac{\mu C_{diel} W}{L} (V_{GS} - V_{th}) \quad \text{wenn } |V_{DS}| > |V_{GS} - V_{th}| > 0$$

$$\rightarrow f_T = \frac{g_{m,S}}{2\pi C_G} = \frac{\mu}{2\pi L(L + 2\Delta L)} (V_{GS} - V_{th})$$

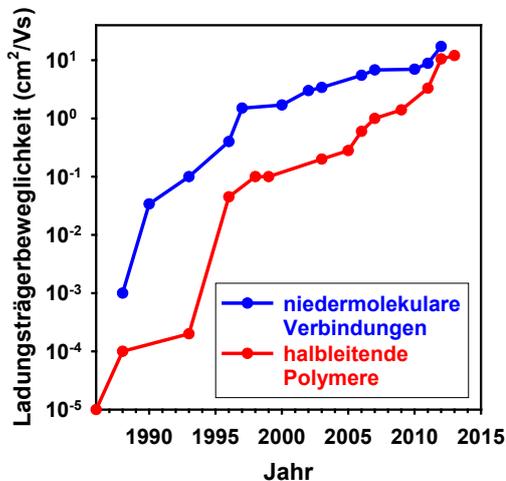
- Mit Hilfe dieser Gleichungen kann die Grenzfrequenz für verschiedene Technologien abgeschätzt werden. Für moderne Silizium-MOSFETs mit Kanallängen unterhalb von 100 nm ergeben sich Grenzfrequenzen oberhalb von 100 GHz. Für Pentacen-Transistoren mit reduzierten Strukturabmessungen (2  $\mu\text{m}$ ) wird eine Grenzfrequenz nahe 1 MHz projiziert:

	$\mu$ (cm <sup>2</sup> /Vs)	L	$\Delta L$	$V_{DS}$	$f_T$
Intel® 4004 (1971)	100	10 $\mu\text{m}$	1 $\mu\text{m}$	15 V	100 MHz
Intel® Haswell (2014)	60	25 nm	20 nm	1 V	600 GHz
organischer Transistor	1	10 $\mu\text{m}$	10 $\mu\text{m}$	2 V	100 kHz
organischer Transistor	1	2 $\mu\text{m}$	2 $\mu\text{m}$	2 V	2 MHz

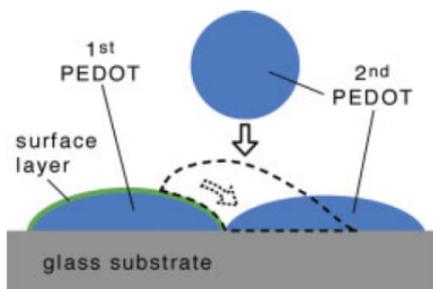


- Um die Grenzfrequenz organischer Transistoren weiter zu erhöhen, muss die Ladungsträgerbeweglichkeit  $\mu$  erhöht oder die Kanallänge  $L$  bzw. die Überlapplänge  $\Delta L$  reduziert werden.

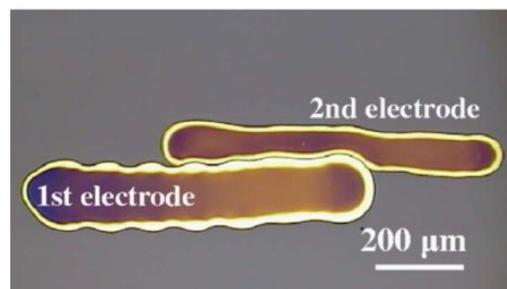
- Möglichkeiten zur **Erhöhung der Ladungsträgerbeweglichkeiten** eröffnen sich z.B. durch die Synthese konjugierter Halbleiter, die durch einen höheren Grad der Überlappung der  $\pi$ -Orbitale benachbarter Moleküle gekennzeichnet sind, oder durch die gezielte Reduzierung chemischer und/oder struktureller Defekte innerhalb der Halbleiterschicht bzw. an der Grenzfläche zwischen Halbleiter und Gate-Dielektrikum. Allerdings deutet die historische Entwicklung der maximalen Beweglichkeit organischer Transistoren darauf hin, dass das Potential für weitere dramatische Erhöhungen weitgehend ausgeschöpft ist:



- Im Gegensatz dazu gibt es für die weitere Miniaturisierung organischer Transistoren interessante Ansätze. Ein Beispiel ist die **Reduzierung der Kanallänge** auf etwa 100 nm durch die gezielte Ausnutzung eines Selbstorganisationsprozesses bei der Abscheidung eines funktionellen Materials aus der Flüssigphase (in diesem Fall ein elektrisch leitfähiges Polymer oder eine flüssige Suspension metallischer Nanopartikel) auf eine bereits vorliegende, hydrophobe Struktur des gleichen Materials:

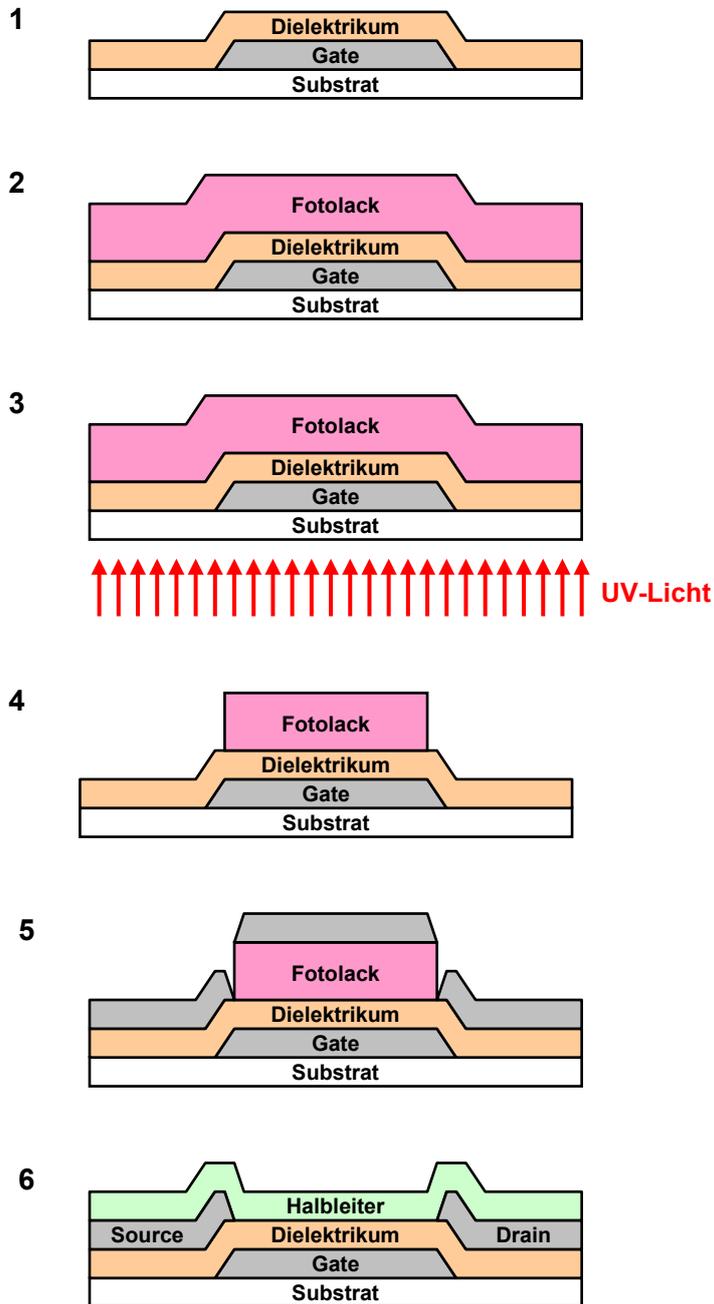


Sele, Adv. Mater. 17 (2005) 987



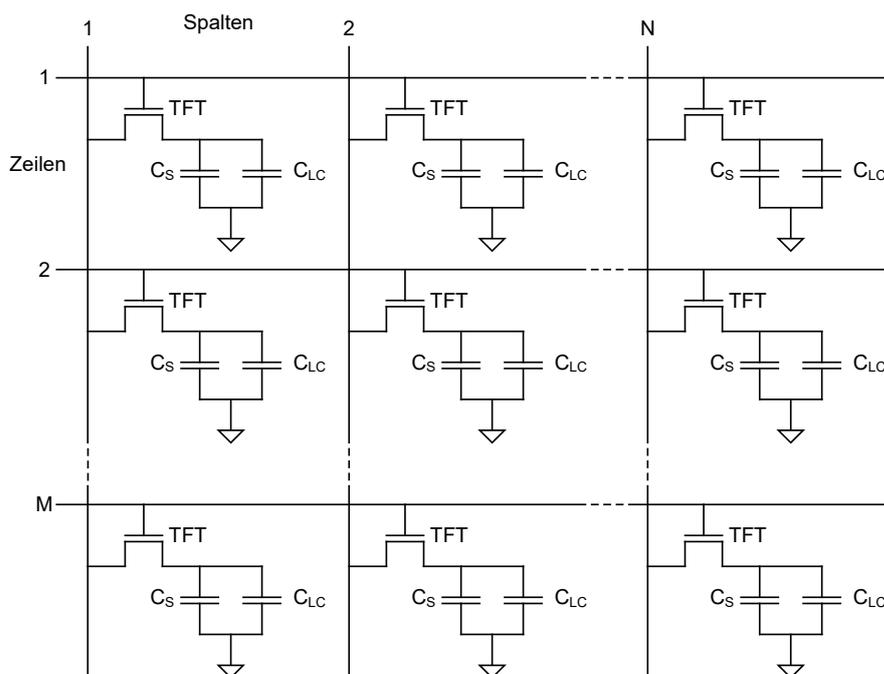
N. Zhao, J. Appl. Phys. 101 (2007) 064513

- Eine Möglichkeit, die **Überlapplänge  $\Delta L$**  zu minimieren, ist die Anwendung eines fotolithografischen Prozesses mit einer Rückseitenbelichtung, bei der die zuvor definierte (nicht transparente) Gate-Elektrode als Belichtungsmaske für die selbstjustierte Definition der Bereiche für die Source- und Drain-Kontakte genutzt wird:



## 7. Einsatz organischer Transistoren in Flachbildschirmen

- Organische Transistoren sind **Dünnschicht-Transistoren** (*thin film transistor, TFT*) und können im Gegensatz zu monokristallinen Silizium-Transistoren auf großflächigen Glas- oder Polymersubstraten erzeugt werden. Aus diesem Grund eignen sich organische Transistoren für die Realisierung von **Aktiv-Matrix-Flachbildschirmen**.
- In einem Aktiv-Matrix-Bildschirm ist in jedem der Bildelemente (*picture element, pixel*) eine Transistorschaltung integriert, die es ermöglicht, das elektro-optische Element dieses Pixels vom Rest des Bildschirms elektrisch zu isolieren. Dadurch wird gewährleistet, dass die dem Pixel zugewiesene Helligkeitsinformation in Form einer elektrischen Ladung innerhalb des Pixels gespeichert werden kann. Dank der im Pixel gespeicherten Ladung sind alle Pixel des Bildschirms ständig aktiv, d. h. in jedem Pixel wird die gewünschte Bildinformation zu jedem Zeitpunkt dargestellt.
- In Aktiv-Matrix-Bildschirmen, die auf Spannungs-gesteuerten elektro-optischen Elementen (z.B. Flüssigkristall, elektrophoretische Zelle) basieren, besteht die Pixelschaltung aus nur einem Transistor (dem Auswahltransistor). In Bildschirmen mit Strom-gesteuerten elektro-optischen Elementen (z.B. Leuchtdiode) besteht die Pixelschaltung aus mindestens zwei Transistoren (dem Auswahltransistor und einem oder mehreren Steuertransistoren).
- Nachfolgend ist die Funktion eines Aktiv-Matrix-Flüssigkristall-Bildschirms (*active-matrix liquid-crystal display, AMLCD* oder *TFT-LCD*) beschrieben. Die Pixel sind in M Zeilen und N Spalten angeordnet. Die Helligkeitsinformation für die einzelnen Pixel wird zeilenweise und für alle Pixel innerhalb einer Zeile simultan über die Spaltenleitungen aktualisiert:



- Um die Pixel einer Zeile zu aktualisieren, wird an die entsprechende Zeilenleitung ein Potential angelegt, welches die Auswahltransistoren dieser Zeile in den leitenden (niederohmigen) Zustand schaltet. Während dieser Zeit sind die Auswahltransistoren aller anderen Zeilen im nicht leitenden (hochohmigen) Zustand und die Pixel dieser Zeilen somit vom Rest des Bildschirms isoliert.
- Zeitgleich wird an jede der Spaltenleitungen ein Potential angelegt, das der gewünschten Helligkeit des jeweiligen Pixels in der adressierten Zeile entspricht. Dieses Potential wird in den adressierten Pixeln gespeichert, indem die der Helligkeitsinformation entsprechende Ladung von der Spaltenleitung über den (leitenden) Auswahltransistor auf die Pixelkapazität fließt.
- Die Zeit, die notwendig ist, um die Pixelkapazitäten zu laden ( $t_{\text{select}}$ ), hängt vom Widerstand des (leitenden) Auswahltransistors ( $R_{\text{on}}$ ), der Pixelkapazität ( $C_{\text{pixel}} = C_{\text{LC}} + C_{\text{S}}$ ) und der maximal erlaubten Abweichung zwischen tatsächlicher und gewünschter Spannung ( $V/V_0$ ) ab:

$$V = V_0 \left( 1 - \exp \left( - \frac{t_{\text{select}}}{R_{\text{on}} C_{\text{pixel}}} \right) \right)$$

$$t_{\text{select}} = -R_{\text{on}} C_{\text{pixel}} \ln \left( 1 - \frac{V}{V_0} \right)$$

$t_{\text{select}}$	...	zum Laden der Pixelkapazität vorgesehene Zeit (Zeilenzugriffszeit)
$V_0$	...	an der Spaltenleitung anliegendes Potential
$V$	...	Spannung über der Pixelkapazität nach Ablauf der Zeilenzugriffszeit $t_{\text{select}}$
$R_{\text{on}}$	...	Widerstand des Transistors im niederohmigen (leitenden) Zustand
$C_{\text{pixel}}$	...	Pixelkapazität ( $C_{\text{LC}} + C_{\text{S}}$ )

- Nach Ablauf der Zeilenzugriffszeit  $t_{\text{select}}$  wird das Potential von der Zeilenleitung entfernt, so dass die Auswahltransistoren dieser Zeile in den hochohmigen (nicht leitenden) Zustand übergehen. Dadurch wird verhindert, dass die auf den Pixeln gespeicherte Bildinformation verloren geht.
- Auf diese Weise werden nacheinander alle Zeilen des Bildschirms einzeln aktualisiert. Die Zeit, die notwendig ist, um alle Zeilen des Bildschirms nacheinander zu aktualisieren ( $t_{\text{frame}}$ ) ist das Produkt aus der Anzahl der Zeilen ( $M$ ) und der Zeit, die für die Aktualisierung einer Zeile aufgewendet wird ( $t_{\text{select}}$ ):

$$t_{\text{frame}} = M t_{\text{select}}$$

- Jeweils nach Ablauf der Zeit  $t_{\text{frame}}$  werden die Zeilen erneut nacheinander aktualisiert. Während der Zeit  $t_{\text{frame}}$  ist in allen Pixeln die der Bildinformation entsprechende Ladung gespeichert. Allerdings geht auf Grund des endlichen Widerstands des Auswahltransistors in jedem Pixel ein kleiner Teil der Ladung verloren, so dass sich im Verlauf von  $t_{\text{frame}}$  die Spannung über der Pixelkapazität verringert:

$$V = V_0 \exp\left(-\frac{t_{\text{frame}}}{R_{\text{off}} C_{\text{pixel}}}\right)$$

- $t_{\text{frame}}$  ... zum Aktualisieren aller Zeilen des Bildschirms notwendige Zeit
- $V_0$  ... ursprünglich über der Pixelkapazität anliegende Spannung
- $V$  ... Spannung über der Pixelkapazität nach Ablauf der Zeit  $t_{\text{frame}}$
- $R_{\text{off}}$  ... Widerstand des Transistors im hochohmigen (nicht leitenden) Zustand
- $C_{\text{pixel}}$  ... Pixelkapazität ( $C_{\text{LC}} + C_{\text{S}}$ )

- Beispiel:

### Display-Design:

- $M = 1080$  (Bildschirmauflösung HD)
- $t_{\text{frame}} = 20 \text{ ms}$  (Bildwiederholrate 50 Hz)
- $C_{\text{pixel}} = 1 \text{ pF}$  ( $C_{\text{LC}} + C_{\text{S}}$ )
- $V/V_0 > 0.99$  (<1% Abweichung)

$$t_{\text{select}} = \frac{t_{\text{frame}}}{M}$$

$$R_{\text{on}} = -\frac{t_{\text{select}}}{C_{\text{pixel}}} \frac{1}{\ln(1 - V/V_0)}$$

$$t_{\text{select}} = \frac{20 \text{ ms}}{1080}$$

$$R_{\text{on}} < -\frac{18 \mu\text{s}}{1 \text{ pF}} \frac{1}{\ln(1 - 0.99)}$$

$$\underline{t_{\text{select}} = 18 \mu\text{s}}$$

$$\underline{R_{\text{on}} < 4 \text{ M}\Omega}$$

### Transistor-Technologie:

- $L = 4 \mu\text{m}$
- $\mu = 0.1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$
- $C_{\text{diel}} = 0.1 \mu\text{F}/\text{cm}^2$
- $V_{\text{GS}} - V_{\text{th}} = 10 \text{ V}$
- $V_{\text{DS}} = 5 \text{ V}$

$$R_{\text{off}} = -\frac{t_{\text{frame}}}{C_{\text{pixel}}} \frac{1}{\ln(V/V_0)}$$

$$R_{\text{off}} > -\frac{20 \text{ ms}}{1 \text{ pF}} \frac{1}{\ln(0.99)}$$

$$\underline{R_{\text{off}} > 2 \text{ T}\Omega}$$

Bei Adressierung der Zeile schaltet der Auswahltransistor in den linearer Bereich ( $|V_{\text{GS}} - V_{\text{th}}| > |V_{\text{DS}}| > 0$ ):

$$R_{\text{on}} = \frac{V_{\text{DS}}}{I_{\text{D,lin}}} \cong \frac{L}{\mu C_{\text{diel}} W (V_{\text{GS}} - V_{\text{th}})}$$

$$W = \frac{L}{\mu C_{\text{diel}} (V_{\text{GS}} - V_{\text{th}}) R_{\text{on}}}$$

$$W > \frac{4 \mu\text{m}}{0.1 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \cdot 0.1 \frac{\mu\text{F}}{\text{cm}^2} \cdot 10 \text{ V} \cdot 4 \text{ M}\Omega}$$

$$\underline{W > 10 \mu\text{m}}$$

Während die Zeile nicht adressiert ist, ist der Auswahltransistor im nicht leitenden Zustand ( $V_{\text{GS}}$  unterhalb  $V_{\text{so}}$ ):

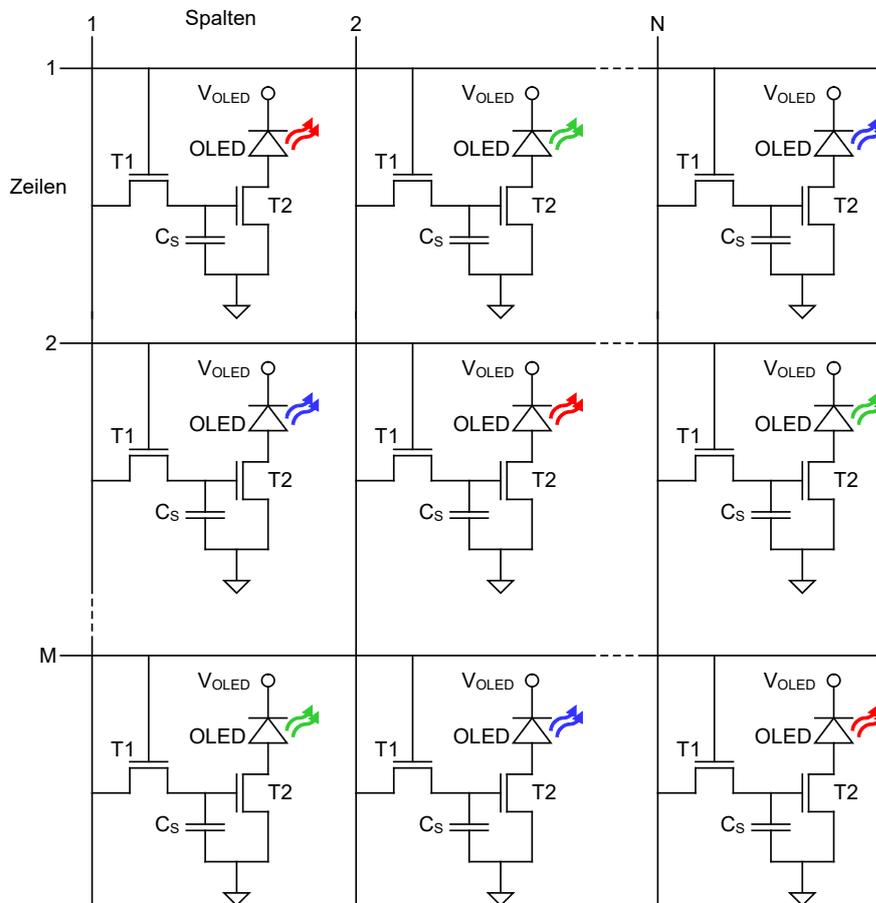
$$R_{\text{off}} = \frac{V_{\text{DS}}}{I_{\text{D,off}}}$$

$$I_{\text{D,off}} = \frac{V_{\text{DS}}}{R_{\text{off}}}$$

$$I_{\text{D,off}} < \frac{5 \text{ V}}{2 \text{ T}\Omega}$$

$$\underline{I_{\text{D,off}} < 2.5 \text{ pA}}$$

- Nachfolgend ist die Funktion eines Aktiv-Matrix-Bildschirms mit organischen Leuchtdioden (*organic light-emitting diode, OLED, AM-OLED*) beschrieben. Jedes Pixel besteht aus einem Auswahltransistor T1, einem Steuertransistor T2, einem Kondensator  $C_S$  und einer Leuchtdiode (OLED). Die Pixel sind in Zeilen und Spalten angeordnet. Die Helligkeitsinformation wird auf dem Kondensator  $C_S$  gespeichert:



- Wenn eine Zeile adressiert wird, schaltet der Auswahltransistor T1 in den niederohmigen (leitenden) Zustand und der Kondensator  $C_S$  wird über die Spaltenleitung geladen. Die Spannung am Kondensator wirkt als Gate-Source-Spannung des Steuertransistors T2 und legt somit den Drain-Strom von T2, also den durch die Leuchtdiode fließenden Strom ( $I_{OLED}$ ) und damit die Helligkeit bzw. Luminanz des Pixels ( $L$ ) fest. Nach dem Laden des Pixelkondensators wird das Potential von der Zeilenleitung entfernt, so dass der Auswahltransistor T1 in den hochohmigen (nicht leitenden) Zustand übergeht und die Ladung auf dem Kondensator isoliert wird. Während die anderen Zeilen des Bildschirms nacheinander adressiert und aktualisiert werden, bleibt T2 entsprechend der auf dem Kondensator  $C_S$  gespeicherten Ladung leitend und die Leuchtdiode aktiv.
- Die Anforderungen an den Auswahltransistor T1 sind ähnlich wie beim LCD-Bildschirm. Der Steuertransistor T2 wird in der Regel im Sättigungsbereich betrieben und muss so ausgelegt sein, dass er den für die maximal gewünschte Helligkeit ( $L_{max}$ ) notwendigen Drain-Strom ( $I_{D,max} = I_{OLED,max}$ ) liefert.

- Beispiel:

### OLED-Design:

$$L_{\max} = 1000 \text{ cd/m}^2$$

$$A_{\text{OLED}} = 10^{-3} \text{ cm}^2$$

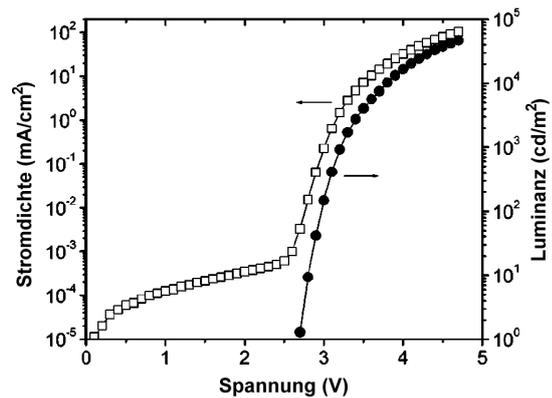
### Transistor-Technologie:

$$L = 5 \mu\text{m}$$

$$\mu = 0.1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$$

$$C_{\text{diel}} = 0.1 \mu\text{F}/\text{cm}^2$$

$$V_{\text{GS}} - V_{\text{th}} = 10 \text{ V}$$



He, Appl. Phys. Lett. 85 (2004) 3911

$$J_{\text{OLED,max}} = J_{\text{OLED}} (L_{\max})$$

$$J_{\text{OLED,max}} = J_{\text{OLED}} \left( L = 1000 \frac{\text{cd}}{\text{m}^2} \right)$$

$$\underline{\underline{J_{\text{OLED,max}} = 2 \frac{\text{mA}}{\text{cm}^2}}}$$

$$I_{\text{OLED,max}} = J_{\text{OLED,max}} A_{\text{OLED}}$$

$$I_{\text{OLED,max}} = 2 \frac{\text{mA}}{\text{cm}^2} \cdot 10^{-3} \text{ cm}^2$$

$$\underline{\underline{I_{\text{OLED,max}} = 2 \mu\text{A}}}$$

$$I_{\text{OLED,max}} = I_{\text{D,max}}$$

$$I_{\text{OLED,max}} = \frac{\mu C_{\text{diel}} W}{2L} (V_{\text{GS,max}} - V_{\text{th}})^2$$

$$W = \frac{2L}{\mu C_{\text{diel}} (V_{\text{GS,max}} - V_{\text{th}})^2} I_{\text{OLED,max}}$$

$$W = \frac{2 \cdot 5 \mu\text{m}}{0.1 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \cdot 0.1 \frac{\mu\text{F}}{\text{cm}^2} \cdot (10 \text{ V})^2} \cdot 2 \mu\text{A}$$

$$\underline{\underline{W = 20 \mu\text{m}}}$$