

## Design und Synthese elektronenleitender Materialien

Hoge, B., Bielefeld/D, Hettel, S., Bielefeld/D, Patron, Ch., Köln/D,

Meerholz, K. Köln/D

Prof. Dr. Berthold Hoge, Universität Bielefeld, Universitätsstr. 25, 33615 Bielefeld

Unsere Arbeiten konzentrieren sich auf die Synthese von elektronenleitenden Materialien für den Ersatz von  $C_{60}$  und seinen Derivaten in organischen Solarzellen. Wir nutzten zunächst quantenmechanische Rechnungen, um anhand von Kennzahlen - z. B. der Elektronenaffinität (EA) - ideale Grundstrukturen zu ermitteln. Anhand von electron only-Messungen konnte gezeigt werden, dass Perfluorphenylenphosphan-Derivate (PFPPs) eine neue Substanzklasse elektronenleitender Materialien repräsentieren. Des Weiteren konnten PFPPs erfolgreich für den Aufbau von organischen Solarzellen eingesetzt werden.

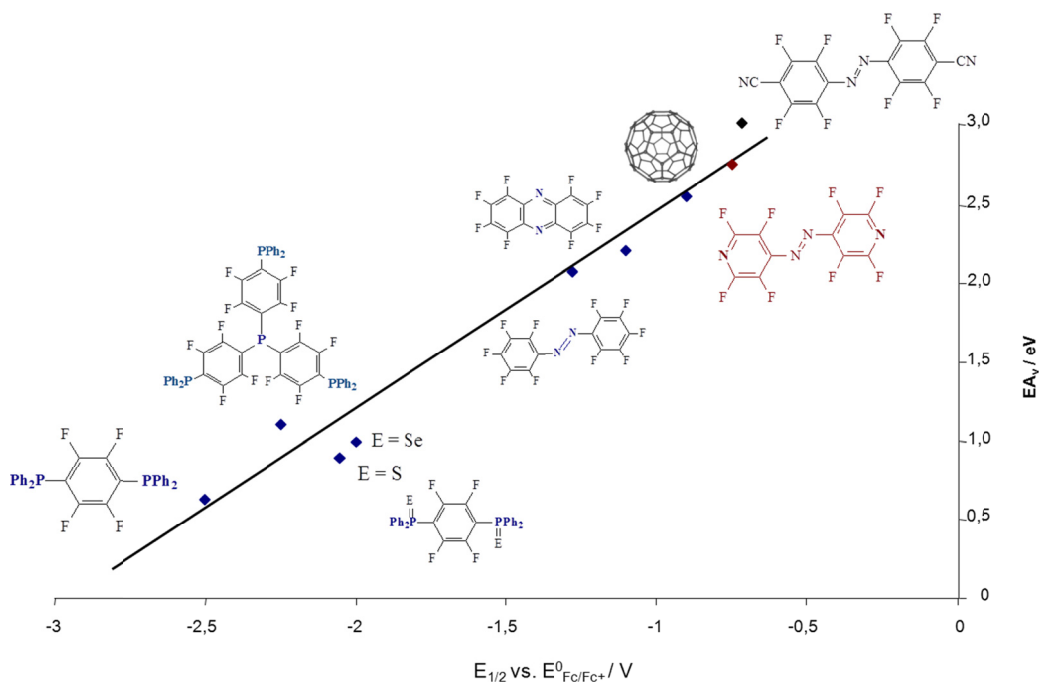


Abb. 1: Auf B3LYP/6-311+G(2d,p)-Level berechnete vertikale Elektronenaffinitäten (EA) vs. experimentelle cyclovoltammetrische Reduktionspotentiale

Quantenmechanische Rechnungen sagen voraus, dass Perfluorphenazin- und Perfluorazobenzol-Derivate chemische Grundstrukturen repräsentieren, deren Elektronenaffinitäten nahe an die von  $C_{60}$  heranreichen bzw. diese sogar übertreffen (vgl. Abb. 1). Die Zuverlässigkeit der berechneten vertikalen Elektronenaffinitäten konnte anhand von cyclovoltammetrischen Messungen experimentell bestätigt werden.