

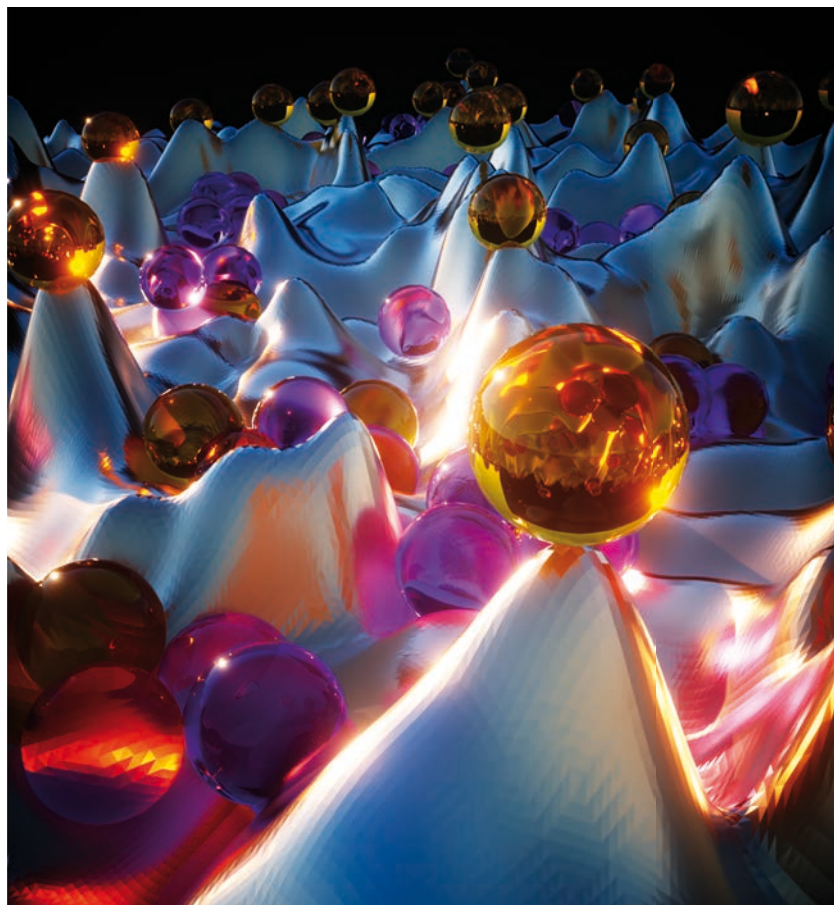
# Vorteilhafte Unordnung

Strukturelle Unordnung verbessert die Eigenschaften von Perowskiten für Solarzellen und Leuchtdioden.

David A. Egger

Eine wichtige Aufgabe der Materialforschung besteht darin, neue halbleitende Systeme zu entdecken, die als zentrale Elemente in transformativen Technologien wie Solarzellen und Leuchtdioden zum Einsatz kommen können. Dies soll zum einen helfen, Sonnenlicht mit Solarzellen effizienter und ökonomischer in elektrische Energie umzuwandeln. Zum anderen können neue Materialien, zusammen mit einem mikroskopischen Verständnis der prägenden physikalischen Effekte, auch Türen zu ganz neuen Technologien wie der Spintronik und zur ultraschnellen Photonik öffnen. Einem Team von Wissenschaftlern ist es nun gelungen, einen möglicherweise entscheidenden Vorteil neuartiger Perowskit-Kristalle gegenüber konventionellen Halbleitern zu entdecken: In diesen Materialien erweist sich ein gewisses Maß an Unordnung vorteilhaft für technologische Anwendungen [1].

In den letzten zehn Jahren fand in der Halbleiterphysik eine kleine Revolution statt, die auf die Entdeckung halbleitender Perowskit-Kristalle für Solarzellen und Leuchtdioden zurückgeht. Perowskit bezeichnet eine Klasse von Festkörpern, in denen die Atome unterschiedlich geladen – als Kationen und Anionen – in einem charakteristischen Muster periodisch im Raum angeordnet sind. Die häufigsten Vertreter dieses Strukturtyps sind Oxide, also jene Festkörper, in denen Sauerstoffatome die Anionen des Perowskites bilden. Die für die Halbleiterphysik revolutionären Materialien sind sogenannte hybride Halogenid-Perowskite, die 1978 erstmals detailliert charakterisiert wurden [2]. Sie unterscheiden sich wesentlich von den Oxiden, denn sie bestehen, neben anorganischen Halogen-Anionen (den Halogeniden), auch aus organischen Molekülen – daher der Zusatz „hybrid“ im Namen.



Ella Maru-Studio

**Abb. 1** Strukturelle Unordnungen in hybriden Perowskit-Materialien modulieren die lokale Konzentration von Ladungsträgern, was nützlich für Anwendungen wie Solarzellen und Leuchtdioden sein könnte.

Im Vergleich zu den konventionellen, technologisch wichtigen Halbleitern wie kristallinem Silizium oder Galliumarsenid ist die Herstellung erstklassiger Halogenid-Perowskite vergleichsweise simpel. Fast scheint es, als seien sie auf erstaunliche Weise „immun“ gegen all jene „Krankheiten“, welche konventionelle Halbleiterkristalle befallen können und die deren Eigenschaften für technologische Applikationen negativ beeinflussen. Dazu zählen vor allem kristalline Verunreinigungen und strukturelle Unordnung. Diese stören die durch die Kristallperiodizität gegebene Harmonie der Ladungsträger elektrischen

Stroms, also der Elektronen und Löcher. Aus diesem Grund verschlechtern sie in der Regel die optischen und elektrischen Charakteristiken.

## Ordnung versus Unordnung

Eine Reihe von Studien der letzten Jahre zeigte, dass Perowskite eine besonders ausgeprägte strukturelle und dynamische Unordnung aufweisen. Das liegt unter anderem daran, dass sie mechanisch vergleichsweise weich sind: Es kostet verhältnismäßig wenig Energie, die Kristallatome aus deren Gleichgewichtspositionen zu verschieben. Dadurch führen diese bei

Raumtemperatur sehr ausgeprägte, anharmonische Schwingungen aus. Theoretische Berechnungen zeigten, dass die ausgeprägten dynamischen Unordnungseffekte überraschenderweise zu den ausgezeichneten optischen Eigenschaften der Perowskit-Kristalle beitragen [3].

Die jüngsten Experimente eines internationalen Teams rund um die Emmy-Noether-Forschungsgruppe von Felix Deschler belegten nun, dass eine erhöhte strukturelle Unordnung der Halogenid-Perowskite, welche die Periodizität des Kristallgitters stört und damit die optischen und elektrischen Eigenschaften negativ beeinflussen sollte, diese paradoxerweise sogar verbessert [1]. Um dies zu demonstrieren, veränderten die Forscher die lokale strukturelle Unordnung der eingesetzten Perowskite mittels verschiedener Perowskit-Legierungen. Solche Legierungen wurden in den letzten Jahren vermehrt für hocheffiziente Solarzellen vorgeschlagen [4], wengleich es bis dato nicht gelungen war, die Ursache der positiven Effekte gänzlich aufzuklären.

Die Experimente zielten darauf ab, die Verteilung und Dynamik der durch Licht angeregten Ladungsträger zu vermessen. Diese Informationen ließen sich gewinnen aus einer Kombination aus zeitaufgelöster optischer Spektroskopie und einer Abbildung

der lokalen Verteilung der optischen Bandlücke. Letztere wurde wiederum mit Ergebnissen aus Transportmessungen und theoretischen Berechnungen verknüpft.

Auf diese Weise gelang es zu zeigen, dass die optische Bandlücke in strukturell ungeordneten Perowskit-Legierungen lokal moduliert wird. Dies sorgt dafür, dass sich die angeregten Ladungsträger räumlich im Material konzentrieren können (**Abb. 1**). Die daraus resultierende lokal erhöhte Konzentration an Ladungsträgern reduziert die negativen Folgen von Störstellen und Defekten für die elektrischen und optischen Eigenschaften. Somit verbessert ein gewisses Maß an struktureller Unordnung in Perowskit-Kristallen deren Charakteristiken für technologisch wichtige Anwendungen.

Diese Ergebnisse ermöglichen einen neuen Blickwinkel auf die Fabrikation hochwertiger Materialien für Solarzellen und Leuchtdioden. Bisher war man davon ausgegangen, dass möglichst geordnete und reine Verbindungen herzustellen sind, was meist sehr aufwändig ist. Die neuen Ergebnisse legen nahe, dass ein gewisser Grad an Unordnung die Leistungsfähigkeit der Perowskite sogar steigert. Dies könnte zu neuen Stoßrichtungen im Auffinden verbesserter Kristalle

führen. Unter anderem könnte man damit versuchen, Antworten auf offene Fragen für neuartige Perowskit-Legierungen zu finden, die einer praktischen Anwendbarkeit dieser Materialien derzeit noch im Weg stehen: Wie lässt sich die Verwendung giftigen Bleis minimieren oder deren Stabilität gegenüber Wasser maximieren? Überdies sind die Ergebnisse aus wissenschaftlicher Sicht hochinteressant, da sie neue Denkmöglichkeiten eröffnen, um den tieferegreifenden Zusammenhang zwischen struktureller oder dynamischer Unordnung und opto-elektronischen Eigenschaften dieser Halbleiterkristalle physikalisch zu ergründen.

- [1] S. Feldmann et al., Nat. Photonics (2019), doi:10.1038/s41566-019-0546-8
- [2] D. Weber, Z. Naturforsch. B 33, 1443 (1978).
- [3] C. Gehrman und D. A. Egger, Nat. Commun. 10, 3141 (2019)
- [4] M. D. Saliba et al., Science 354, 206 (2016)

## Autor

**Prof. Dr. David A. Egger**, Theorie der funktionalen Energematerialien, Physik Department, TU München, James-Franck-Straße 1, 85748 Garching

## Kurzgefasst

### Schnell wachsende Schwarze Löcher

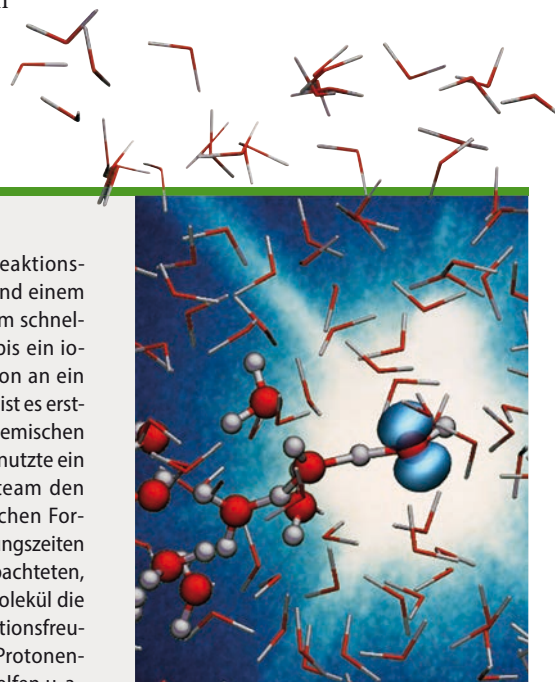
Schwarze Löcher, die milliardenfach schwerer sind als unsere Sonne, finden sich bereits im jungen Universum. Einige dieser Objekte entstanden schon wenige hundert Millionen Jahre nach dem Urknall im Herzen ihrer Wirtsgalaxie. Nun konnte im Rahmen des Projekts REQUIEM erstmals gezeigt werden, dass für das schnelle Wachstum der Schwarzen Löcher ausgedehnte und überraschend dichte Wasserstoffwolken verantwortlich sind, welche die Wirtsgalaxie umhüllen. Mit dem Spektrographen MUSE am Very Large Telescope der ESO detektierte die internationale Kollaboration das rotverschobene charakteristische Leuchten des Wasserstoffs. Seine Geschwindigkeitsverteilung zeigte, dass das Gas zum Zentrum der Galaxie strömt und das Schwarze Loch mit Masse füttert.

E. P. Farina et al., ApJ 887, 196 (2019)

### Ultraschnelle Radiolyse

Die Radiolyse von Wasser zum reaktionsfreudigen Hydroxyl-Radikal OH und einem Hydronium-Ion  $H_3O^+$  ist ein extrem schneller Prozess: Nur 50 fs vergehen, bis ein ionisiertes Wassermolekül ein Proton an ein benachbartes Molekül abgibt. Nun ist es erstmals gelungen, diesen physiko-chemischen Prozess sichtbar zu machen. Dazu nutzte ein internationales Wissenschaftlerteam den Röntgenlaser LCLS am kalifornischen Forschungszentrum SLAC, der Belichtungszeiten von nur 30 fs ermöglicht. Sie beobachteten, wie sich dem ionisierten Wassermolekül die Nachbarn annähern und ihre reaktionsfreudige Seite zudrehen, bis es zum Protonentransfer kommt. Die Ergebnisse helfen u. a., besser zu verstehen, wie im Körper Schäden durch ionisierende Strahlung entstehen.

Z.-H. Loh et al., Science 367, 179 (2020)



Das ionisierte Wassermolekül, gekennzeichnet durch ein leeres Elektronenorbital (blau), gibt ein Proton (grau) an einen Nachbarn ab. Sauerstoffatome sind rot dargestellt.