

# Abstract

Organic electronics is being investigated in basic research and has also already reached the industrial market. For an organic electronic device the arrangement of the molecules in relation to each other and to the device plays a decisive role. Some organic dye molecules are capable of forming molecular aggregates, such as the extensively investigated J- and H-aggregates. These are characterized, among other things, by coherent energy transport. The aim of this work is to elucidate in detail the molecular arrangement in thin films for organic electronic devices using a merocyanine molecule as an example. The main focus is on the investigation of the influence of molecular aggregation on charge transport.

The morphological, optical and electrical properties of such thin films were determined as a function of the fabrication process and correlated with each other. For this purpose, atomic force microscopy (AFM), X-ray diffraction (XRD) and optical spectroscopy methods were combined. In addition, the electrical properties were determined and evaluated using field-effect transistors (FET). In order to further influence the coherent energy transport of the molecular aggregates, optical microcavities were fabricated which allow for coupling of the excitons of the molecular aggregates with the electric field of the microcavity.

The results enable the identification of the arrangement of the merocyanine molecules within the thin films. They form molecular aggregates, which exhibit perpendicularly oriented J- and H-transitions. It is shown that molecular aggregation leads to an enhancement of charge transport. By using templating substrates, the long-range order of the thin films could be further improved. The investigations of the ordered thin films carried out in this thesis represent preliminary work for the graduate program "Template-Designed Optoelectronic Devices" (TIDE) of the University of Cologne and the University of Bonn. Furthermore, in the optical microcavities, strong light-matter coupling of both the J- and H-transitions with the cavity modes was observed. An influence of this light-matter coupling on the charge transport was investigated using FETs embedded in microcavities. However, no change in the charge transport could be observed in this thesis.

The results of this thesis demonstrate that the use of molecular aggregates in organic electronic devices can be beneficial for their performance. Molecular aggregation should thus be considered in appropriate cases and with consideration of the device geometry when designing organic-electronic devices.

# Kurzzusammenfassung

Organische Elektronik wird in der Grundlagenforschung untersucht und hat darüber hinaus bereits den industriellen Markt erreicht. Für ein organisch elektronisches Bauteil spielt die Anordnung der Moleküle zueinander und in Relation zum Bauteil eine entscheidende Rolle. Einige organische Farbstoffmoleküle sind in der Lage, molekulare Aggregate auszubilden, wie z.B. die umfangreich erforschten J- und H-aggregate. Diese zeichnen sich unter anderem durch kohärenten Energietransport aus. Ziel dieser Arbeit ist es, am Beispiel eines Merocyanin Moleküls die molekulare Anordnung in Dünnschichten für organisch elektronische Bauteile im Detail aufzuklären. Das Hauptaugenmerk liegt auf der Untersuchung des Einflusses molekularer Aggregation auf den Ladungstransport.

Die morphologischen, optischen und elektrischen Eigenschaften solcher Dünnschichten wurden in Abhängigkeit des Herstellungsprozesses bestimmt und miteinander in Zusammenhang gestellt. Hierzu wurden Rasterkraftmikroskopie, Röntgenbeugung und Methoden der optischen Spektroskopie miteinander kombiniert. Außerdem wurden die elektrischen Eigenschaften mithilfe von Feld-Effekt Transistoren ermittelt und bewertet. Um den kohärenten Energietransport der molekularen Aggregate weiter zu beeinflussen wurden optische Mikrokavitäten hergestellt welche die Kopplung der Exzitonen der molekularen Aggregate mit dem elektrischen Feld der Mikrokavität erlauben.

Die Ergebnisse ermöglichen die Identifikation der Anordnung der Merocyanin Moleküle innerhalb der Dünnschichten. Sie bilden molekulare Aggregate, welche senkrecht zueinander orientierte J- und H-Übergänge aufweisen. Es konnte gezeigt werden, dass molekulare Aggregation zu einer Verbesserung des Ladungstransports führt. Durch die Nutzung von templierenden Substraten konnte die Fernordnung der Dünnschichten weiter verbessert werden. Die im Rahmen dieser Thesis durchgeführten Untersuchungen der geordneten Dünnschichten stellen Vorarbeiten für das Graduiertenkolleg "Template-Designed Optoelectronic Devices" (TIDE) der Universität zu Köln und der Universität Bonn dar. In den optischen Mikrokavitäten konnte des Weiteren starke Licht-Materie Kopplung sowohl des J- als auch des H-Übergangs mit den Kavitätsmoden beobachtet werden. Ein Einfluss dieser Licht-Materie Kopplung auf den Ladungstransport wurde mithilfe von in Mikrokavitäten eingebetteten FETs untersucht. Jedoch konnte im Rahmen dieser Thesis keine Änderung des Ladungstransports festgestellt werden.

Die Resultate dieser Thesis veranschaulichen, dass der Einsatz von molekularen Aggregaten in organisch-elektronischen Bauteilen vorteilhaft für deren Leistung sein kann. Molekulare Aggregation sollte somit in geeigneten Fällen und unter Berücksichtigung der Bauteilgeometrie bei der Konzeptionierung von organisch-elektronischen Bauteilen in Betracht gezogen werden.