

Optoelectronic Properties of Highly Dipolar Merocyanines on Highly Ordered Surfaces



Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades

der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Universität zu Köln

vorgelegt von

Baris Öcal

aus Istanbul

Universität zu Köln

Institut für Licht und Materialien

Optoelectronic Properties of Highly Dipolar Merocyanines on Highly Ordered Surfaces

Baris Öcal

- 1. Gutachter: Prof. Dr. Klaus Meerholz
- 2. Gutachter: Prof. Dr. Moritz Sokolowski

Abstract

Organic semiconductors have attracted significant interest from researchers and are already used in consumer technologies. The orientation, crystallinity, and molecular packing of these materials are critical factors that determine their optoelectronic performance. In particular, highly crystalline and well-ordered structures are essential for the development of high-performance devices.

This research was conducted within the framework of the graduate school "Template-Designed Optoelectronic Devices" (TIDE) at the University of Cologne. The primary objective of the project is to utilize two-dimensional (2D) materials as substrates to induce order in organic thin films, thereby achieving well-ordered structures from organic semiconductors. The goal of this study is to fabricate ordered layers of organic molecules by employing highly ordered substrates and understand the differences in the optoelectronic properties of thin films. For this purpose, various substrates—including metal single crystals, graphene, graphite, and hexagonal boron nitride (hBN)—were used.

The influence of the substrate on the monolayer structure and optoelectronic properties was first investigated. In addition, thickness-dependent experiments were conducted to explore how the substrate and monolayer formation affect molecular growth and ordering. Monolayer structures were characterized using low-energy electron diffraction (LEED) and low-energy electron microscopy (LEEM), while multilayer structures were analyzed with X-ray diffraction (XRD). Optical properties were examined via differential reflectance spectroscopy (DRS), and the electronic structure was probed using ultraviolet photoelectron spectroscopy (UPS). Chemical interactions between the organic molecules and the substrates were studied using X-ray photoelectron spectroscopy (XPS).

The results of this thesis demonstrate the influence of substrate choice on the molecular structure of organic semiconductors. Furthermore, a clear relationship between molecular structure and optoelectronic properties has been established. These findings are valuable for the design of next-generation organic semiconductors.

Zusammenfassung

Organische Halbleiter stehen im Fokus der wissenschaftlichen Forschung und finden bereits Anwendung in Verbrauchertechnologien. Die Orientierung, Kristallinität und molekulare Packung dieser Materialien sind entscheidende Faktoren, die ihre optoelektronischen Eigenschaften beeinflussen. Insbesondere hochkristalline und gut geordnete Strukturen sind für die Entwicklung von Hochleistungsbauteilen entscheidend.

Diese Thesis wurde im Rahmen der Graduiertenschule "Template-Designed Optoelectronic Devices"(TIDE) an der Universität zu Köln durchgeführt. Das Hauptziel des Graduiertenkollegs ist es, zweidimensionale (2D) Materialien als Substrate zu verwenden, um Ordnung in organischen Dünnschichten zu erzeugen und so geordnete Strukturen aus organischen Halbleitern herzustellen. Ziel dieser Arbeit ist es, geordnete Schichten aus organischen Molekülen auf hochgeordneten Substraten herzustellen und die Unterschiede in den optoelektronischen Eigenschaften der dünnen Schichten zu verstehen. Dafür wurden verschiedene Substrate verwendet, wie Metall-Einkristalle, Graphen, Graphit und hexagonales Bornitrid (hBN).

Erstens wurde der Einfluss des Substrats auf die Struktur der Monolage und die optoelektronischen Eigenschaften untersucht. Darüber hinaus wurden dickenabhängige Experimente durchgeführt, um zu analysieren, wie das Substrat und die Bildung der Monolage das Molekülwachstum und die Ordnung beeinflussen. Die Monolagenstrukturen wurden mittels Niederenergetische Elektronenbeugung (LEED) und niederenergetischer Elektronenmikroskopie (LEEM) charakterisiert und mehrlagige Strukturen mit Röntgendiffraktometrie (XRD) analysiert wurden. Die optischen Eigenschaften wurden mit differentieller Reflexionsspektroskopie (DRS) untersucht und die elektronische Struktur mittels Ultraviolett-Photoelektronenspektroskopie (UPS) bestimmt. Die chemische Wechselwirkung zwischen den Molekülen und dem Substrat wurde mit Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS) analysiert.

Die Ergebnisse dieser Arbeit verdeutlichen zudem den Einfluss der Substratwahl auf die molekulare Struktur organischer Halbleiter. Darüber hinaus konnte eine klare Struktur-Eigenschafts-Beziehung nachgewiesen werden. Diese Ergebnisse sind von großem Wert für das Design der nächsten Generation organischer Halbleiter.