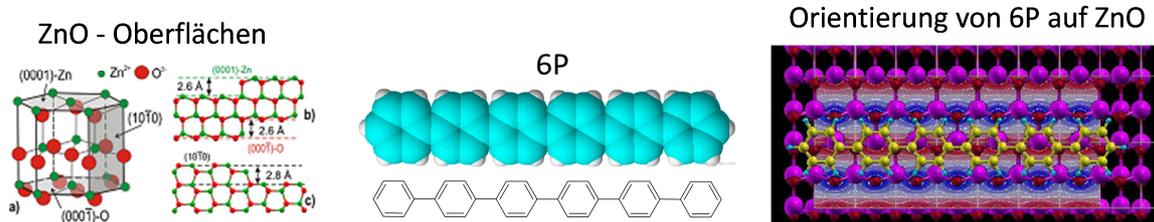


5% Bonusaufgabe

Abgabe bis 10. Januar per Email an azykov@physik.hu-berlin.de

Der Einfluß von Wechselwirkungen der elektrostatischen Felder von Molekül und Substrat
auf die Morphologie von organischen Dünnschichten



In dieser Aufgabe soll die elektrostatische Wechselwirkung zwischen Molekülen und Substrat sowie deren Einfluß auf die Molekülorientierung untersucht werden. Als Grundlage soll das Paper von Della Salla, Blumstengel, Hennerberger, *PRL* (2011) dienen (s. pdf im zip file).

In dem Paper wurde ermittelt, dass sich das Molekül Sexiphenyl (6P) auf einer (1010) ZnO-Oberfläche flachliegend, parallel zu den Zn-Linienladungen der Oberfläche anordnet. Der Grund für diese Anordnung liegt in der Wechselwirkung des Quadrupolmoments des Moleküls mit dem Dipolfeld der Oberfläche. Wie in der Vorlesung und den Übungsaufgaben angesprochen, kann die Orientierung von Molekülen die optoelektronischen Eigenschaften von Heterostrukturen stark beeinflussen und ein aktuelles Forschungsthema besteht darin, ob man durch chemische Manipulation von bekannten Molekülen (beispielsweise Austausch eines H- durch ein F-Atom im 6P, was zu einer Ausbildung eines lokalen Dipols im Molekül führt) die Orientierung von Molekülen auf der Oberfläche beeinflussen kann.

Im ersten Teil der Aufgabe soll zunächst das Ergebnis aus dem Paper rekonstruiert werden. Als Weiterführung soll dann berechnet werden, wie stark ein im Molekül eingebauter Dipol sein müßte, um die Anordnung des 6P-Moleküls auf der ZnO-Oberfläche um 90° in der Ebene zu drehen.

- 1) Simulieren Sie mit Mathematica, Matlab oder einer Software ihrer Wahl das Dipolfeld von ZnO als Linienladungen von Zn- und O-Atomen. Benutzen Sie dazu das Feld aus dem Paper:

$$\begin{aligned} F_y(y, z) &\approx Ae^{-kz} \cos(ky), \\ F_z(y, z) &\approx -Ae^{-kz} \sin(ky), \end{aligned} \quad (1)$$

Nutzen Sie die im Paper gemachten Angaben bezüglich des Quadrupolmoments und der Polarisierbarkeit von 6P (s. Tabelle 1 im Paper) und folgende Formel zur Energie des Moleküls im elektrischen Feld:

$$\Delta E \approx -\frac{1}{2} \sum_{i=y,z} [M_{ii}(\nabla F_i)_i + \alpha_{ii} F_i^2] \quad (2)$$

um zu rekonstruieren, dass es für das Molekül energetisch am günstigsten ist, sich entlang der Linienladungen der Zn- und O-Atome des Substrats auszurichten.

Hinweis: Nehmen Sie an, dass sich das Molekül in einer Höhe von $z=3,5\text{Å}$ über der Substratoberfläche befindet.

- 2) Nehmen Sie an, dass es möglich wäre ein Dipol beliebiger Stärke in das 6P-Molekül einzubauen. Wie groß müsste dieser Dipol sein, damit sich das Molekül quer zu den Linienladungen des Substrats auszurichten. Ist das überhaupt möglich?

Hinweis: Nehmen Sie an, dass sich das Molekül in einer Höhe von $z=3,5\text{Å}$ über der Substratoberfläche befindet.