

Kurzzusammenfassung

In dieser Arbeit wurden organische Solarzellen (OSCs), hauptsächlich auf der Basis von Bulk-Heterojunction (BHJ) Blends aus dem lochleitenden Polymer Poly(3-hexylthiophen) (P3HT) und dem Fullerenderivat [6,6]-Phenyl-C61 Buttersäuremethylester (PCBM), untersucht. Dieses Donor:Akzeptor Paar gilt derzeit als Referenzsystem. Die beiden Materialien sind einfach herzustellen und zu verarbeiten und liefern eine gute Effizienz. Die vorliegende Arbeit kann in drei Abschnitte unterteilt werden. Der erste behandelt die Veränderung der Austrittsarbeit der löcherextrahierenden Elektrode. Bei der lösungsbasierten Herstellung von OSCs wird üblicherweise Poly(3,4-ethylenedioxythiophen) (PEDOT) dotiert mit Polystyrolsulfonat (PSS⁻) als Elektrodenmodifikation verwendet und ist als fertige Emulsion zu erwerben. Allerdings ist die Austrittsarbeit dieses "Standard PEDOTs" auf elektrochemischen Wege, wahrscheinlich aufgrund der Größe des polymeren Gegenions, kaum zu verändern. In-situ PEDOT (IS-PEDOT) Filme mit monomerem Gegenion wurden durch die oxidative Polymerisation von EDOT auf dem Substrat selber hergestellt. Die Austrittsarbeit der dünnen transparenten Filme konnte nachträglich elektrochemisch verändert werden. Durch Einsatz dieser IS-PEDOT Filme als Elektrodenmodifikation mit variabler Austrittsarbeit in P3HT:PCBM BHJ Solarzellen wurden verschiedene Funktionsweisen realisiert. Zum Beispiel wurden invertierte Zellen hergestellt, in denen IS-PEDOT als polymere lochinjizierende Elektrode fungiert. Des Weiteren wurden die Austrittsarbeiten einer Reihe von Lochinjektionsschichten (HILs) bestimmt und die Auswirkungen von Ozon auf diese untersucht.

Der Zusammenhang zwischen der Morphologie der aktiven Schicht und den Energieniveaus der individuellen Komponenten wird im zweiten Teil untersucht. Die energetischen Lagen der Molekülorbitale (MOs) werden normalerweise durch Cyclovoltammetrie (CV) der reinen Materialien in Lösung oder durch Photoelektronenspektroskopie (UPS) bestimmt. Während die so erhaltenen Energien für eine grobe Abschätzung der offenen Zellspannung (V_{OC}) durchaus herangezogen werden können, erklären sie nicht die Veränderungen der V_{OC} innerhalb eines vorgegebenen Systems. Auch in der Literatur wurden viele Fälle beschrieben, in denen die V_{OC} von auf CV (UPS) Messungen basierenden Erwartungswerten abweicht. Mittels gängiger Methoden wurden

P3HT:PCBM Filme mit einer Vielzahl von unterschiedlichen Morphologien hergestellt und Trends bezüglich des Verhältnisses von aggregiertem:amorphem P3HT durch UV/Vis Absorptionsspektroskopie aufgezeigt. Die oberflächensensitiven Messmethoden Rasterkraftmikroskopie (AFM) und Rasterelektronenmikroskopie (SEM) erwiesen sich als weniger geeignet, die relevante Morphologie im Inneren der aktiven Schicht zu untersuchen, vor allem bei der Analyse getemperter Filme. Kontaktpotentialdifferenzmessungen mit der *Kelvin* Probe führten zu dem Ergebnis, dass das höchste besetzte Molekülorbital (HOMO) von P3HT durch zunehmende Aggregation angehoben wird, und zwar bis zum Erreichen des thermodynamischen Gleichgewichts. Dieses Resultat erwies sich als unabhängig vom verwendeten Fulleren und wurde mit zunehmenden HOMO-HOMO Wechselwirkungen erklärt. Unter Berücksichtigung der built-in Spannung V^* wurden die relativen Energien der niedrigsten unbesetzten Molekülorbitale (LUMOs) von verschiedenen Fullerenderivaten bestimmt. Konsequenterweise wurden Variationen der LUMO Energien mit LUMO-LUMO Wechselwirkungen aufgrund der Bildung von Fullerenagglomeraten erklärt. Im Gegensatz zum P3HT HOMO Level zeigen die LUMO Level der Fullerenderivate relativ unregelmäßiges Verhalten. Verschiedene Erklärungsansätze wurden dahingehend diskutiert, wobei die genaue Ursache noch näher untersucht werden muß. Zusätzlich konnte mittels ortsaufgelöster Photostrommessungen (LBIC) und Reflexionsmikroskopie (ROM) gezeigt werden, dass ausgeprägte PCBM-Agglomerate Einbußen im Photostrom zur Folge haben.

Der dritte Teil dieser Arbeit behandelt monochromatische Photostrommessungen in Abhängigkeit vom Einfallswinkel. Unter Berücksichtigung fundamentaler Gesetze der Optik wurden standardisierte Mess- und Auswertungsverfahren etabliert. Experimentelle Ergebnisse wurden mit optisch simulierter Absorption der aktiven Schicht verglichen. In diesem Zusammenhang wurden die optischen Konstanten der einzelnen Schichten im Solarzellenaufbau bestimmt. Dabei erwiesen sich PEDOT sowie P3HT:PCBM Filme als doppelbrechend. Differenzen zwischen Experiment und Simulation konnten darauf zurückgeführt werden, dass das verwendete Transfermatrixmodell auf der Annahme isotroper Medien beruht und Oberflächenrauigkeiten vernachlässigt. Des Weiteren wurde das Konzept der Verbesserung der Einkopplungseffizienz durch ein holografisches Gitter erfolgreich bestätigt. Der Effekt der Vergrößerung der Absorptionslänge war dabei für weniger stark absorbierte Wellenlängen erwartungsgemäß stärker ausgeprägt. Einstrahlung von bestimmten Wellenlängen unter bestimmten Einfallswinkeln führte durch Einkopplung von Licht in wellengeleitete Moden zu Photostromsteigerungen um einen Faktor von bis zu 3,1 gegenüber flachen Referenzbauteilen. Direkte Strukturierung der aktiven Schicht sowie Steigerung der Einkopplungseffizienz unter senkrechter Beleuchtung sind Ziele weiterer Untersuchungen.