

## Abstract

In this thesis, the aggregation behavior of a Merocyanine (MC) dye with large dipole moment is investigated with Atomic Force Microscopy (AFM) with the aim of improvement of Organic Solar Cell (OSC) devices by tuning of the order of the MC donor layer. It is shown, that the observed aggregates can be categorized into four types, depending on the molecular orientation relative to the substrate and the layer thickness. The resulting types are the Face-on Mono Layer (F-Mono), Face-on Multi Layer (F-Multi), Edge-on Mono Layer (E-Mono), and Edge-on Multi Layer (E-Multi). For two of the substrates, they can act as a template to induce order. The properties of the individual aggregation types are explored for growth and energetic stability.

With the aggregation understood, the impact of the properties of the substrate on the thin film growth behavior is investigated. Microscopic and nanoscopic defects lead to smaller domains and can induce directional growth. The relation between surface roughness and molecular order is examined. The surface roughness counteracts the order and leads to amorphous growth.

When the growth is studied in relation to the surface polarization of the substrate, it is shown, that the aggregation with suitable alignment of the molecular dipole relative to the substrate dominates the thin film growth.

The influence of deposition parameters on the molecular order is explored. Molecular order can be increased by elevated substrate temperature during thin film deposition. Above a critical temperature, the disadvantages, that are introduced with the increased temperature, exceed the advantages. The molecular order decreases with deposition rate. This behavior can be counteracted via elevated substrate temperature during deposition.

The results are then used in planar heterojunction (PHJ) OSC devices to investigate the impact of an ordered donor layer on the device performance. The enhancements in performance of molecular ordered donor layers overcompensate the reduced absorption of the devices and lead to an increase in device performance by up to two magnitudes relative to an amorphous reference device.

## Kurzzusammenfassung

In dieser Arbeit wird das Wachstumsverhalten eines Merocyanin Farbstoffs mit großem Dipolmoment mittels Rasterkraftmikroskopie untersucht mit dem Ziel, die Effizienz von organischen Solarzellen durch das Anpassen einer geordneten Donatorschicht zu erhöhen. Es wird gezeigt, dass sämtliche Aggregate in vier Gruppen unterteilt werden können, abhängig von der molekularen Orientierung relativ zum Substrat und der Schichtdicke. Die vier Gruppen sind die Face-on Mono Layer (F-Mono), Face-on Multi Layer (F-Multi), Edge-on Mono Layer (E-Mono), und Edge-on Multi Layer (E-Multi). Für zwei der Gruppen wird nachgewiesen, dass das verwendete Substrat als Templat für die Ordnung fungieren werden. Das Wachstumsverhalten und die energetische Stabilität der Aggregationstypen wird untersucht.

Mit der Möglichkeit, sämtliche Aggregate beschreiben zu können, wird der Einfluss der Substrateigenschaften auf das Dünnschichtwachstum untersucht. Mikroskopische und nanoskopische Defekte führen zu kleineren Domänengrößen und können zu einem gerichteten Wachstum führen. Die Oberflächenrauigkeit verhindert eine Ordnung und führt zu amorphem Wachstum.

Das Wachstumsverhalten wird in Abhängigkeit von Oberflächenladung des Substrats untersucht. Es wird gezeigt, dass diejenigen Aggregationen dominieren, deren molekulare Dipole entlang der Oberflächenladung ausgerichtet sind.

Die molekulare Ordnung wird durch erhöhte Substrattemperatur während des Wachstums erhöht. Über einer kritischen Temperatur überwiegen die temperaturbedingt auftretenden negativen Effekte gegenüber den positiven Effekten. Die molekulare Ordnung nimmt mit erhöhter Wachstumsrate ab. Diesem Verhalten kann mit Erhöhen der Substrattemperatur während des Schichtwachstums entgegengewirkt werden.

Diese Erkenntnisse werden dann genutzt, um den Einfluss einer geordneten Donatorschicht auf die Effizienz organischer Solarzellen mit planarer Heterojunction-Architektur zu untersuchen. Die Vorteile in den elektrischen Eigenschaften dieser Bauteile überkompensieren die Reduktion der Extinktion. Die Effizienz organischer Solarzellen kann im Vergleich zu einem amorphen Referenzbauteil um bis zu zwei Größenordnungen gesteigert werden.