

Kurzzusammenfassung

In der vorliegenden Doktorarbeit wird die Anwendbarkeit von Merocyaninen als Elektronendonorkomponente in organischen Bulk-Heterojunction(BHJ)-Solarzellen in Kombination mit auf Fullerenen basierenden Elektronenakzeptoren umfassend untersucht. Merocyanine sind konjugierte, niedermolekulare organische Verbindungen. Sie stellen eine wichtige Farbstoffklasse dar und werden für Massenanwendungen – zum Beispiel als Textilfarbstoffe – im technischen Maßstab hergestellt. Bisher wurde diese Stoffklasse jedoch noch nicht als aktive Komponente in organischen BHJ-Solarzellen getestet.

Im Zuge dieser Arbeit werden circa 50 verschiedene Farbstoffe in organischen BHJ-Solarzellen mit lösungsprozessierten und thermisch aufgedampften aktiven Schichten untersucht. Der Fokus liegt dabei auf der Charakterisierung von lösungsprozessierten Bauteilen.

Der Chromophor eines Merocyanins ist aus einer elektronenschiebenden und einer elektronenziehenden Gruppe aufgebaut. Diese Struktur führt zur Ausbildung eines großen Dipolmoments. An den Farbstoffchromophor sind organische Substituenten gebunden. Der Einfluss der chemischen Struktur dieser beiden Elemente – Chromophor und Substitutionsmuster – auf die Leistung der Solarzellen wird durch die systematische Untersuchung mehrerer Farbstoffserien dargelegt. Es wird gezeigt, dass die chemische Struktur des Farbstoffes molekulare und supramolekulare Eigenschaften der Merocyanine beeinflusst und somit einen starken Effekt auf die Leistung der Solarzelle ausübt. Mithilfe der Ergebnisse dieser Untersuchung werden Farbstoffstrukturelemente gesichtet, die für eine Anwendung von Merocyaninen in hocheffizienten Solarzellen geeignete sind.

Alle im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Ansätze zur Optimierung der Schichtmorphologie sind nicht auf Merocyanin-Solarzellen anwendbar. Der Wirkungsgrad der Solarzellen kann jedoch durch Optimierung des Bauteilaufbaus gesteigert werden. Die angewendeten Optimierungsverfahren werden Schritt für Schritt diskutiert.

Der höchste Wirkungsgrad, der in dieser Arbeit mit einer lösungsprozessierten Merocyanin-Solarzelle erreicht wird, beträgt 3,3% und liegt somit im Bereich der

höchsten Wirkungsgrade, die für lösungsprozessierte organische Solarzellen, basierend auf molekularen Donorkomponenten veröffentlicht wurden.

Während lösungsprozessierte Merocyanin-Solarzellen große Leerlaufspannungen von bis zu 1,0 V und ansehnliche Kurzschlussstromdichten von über 8 mA cm^{-2} aufweisen, sind die Füllfaktoren der Bauteile mit Maximalwerten von 0,5 nur mäßig.

Die Zusammenhänge zwischen der Leistung der Solarzellen und den physikalischen Eigenschaften der Merocyanine werden untersucht. Dabei wird das Augenmerk besonders auf die hohe Polarität der Farbstoffe gerichtet, die zu einer ausgeprägten Aggregation der Moleküle im Festkörper führt und somit die physikalischen Eigenschaften der Bauteile beeinflusst. Andere wesentliche physikalische Parameter, die in dieser Doktorarbeit analysiert werden, sind Ladungsträgertransport und Permittivität der aktiven Schichten.

Durch umfangreiche Versuche an Merocyanine-Solarzellen mit lösungsprozessierten und thermisch aufgedampften aktiven Schichten wird der Einfluss der Formulierungsweise der BHJ-Schicht untersucht. Die gefundenen Unterschiede in der Solarzellenleistung werden durch supramolekulare Effekte und Änderung der Morphologie erklärt. Der höchste Wirkungsgrad, der in dieser Arbeit mit einer thermisch aufgedampften Merocyanine-Solarzelle erreicht wird, beträgt 4,9%. Dieser Wert ist vergleichbar mit den höchsten Wirkungsgraden, die für aufgedampfte, organische Solarzellen, mit ähnlich einfachem Schichtaufbau, veröffentlicht wurden.

Abstract

The thesis at hand reports on an in-depth investigation on the application of merocyanines as electron donor component in organic bulk heterojunction (BHJ) solar cells in combination with fullerene-based acceptors. Merocyanines are conjugated organic small molecules and represent an important class of traditional colorants that are manufactured on a technical scale for mass applications, e.g. as textile dyes. Yet, they have been never applied in organic BHJ solar cells before.

During the course of this work about 50 dyes were investigated in devices with solution-processed and thermal-evaporated active layers. This thesis mainly focuses on devices with solution-processed active layers.

The chromophore core of merocyanines consists of an electron donor and an electron acceptor subunit leading to the formation of a high dipole moment. Alkyl substituents are bound to the dye core. The structural influence of both, the chromophore core and the substitution pattern on solar cell performances is systematically studied by means of several dye series. It is shown that the structure of the dye influences molecular and supramolecular properties of the dyes and has a strong impact on the device performance. The results allow for the identification of well-suited structural motifs for application of merocyanines in highly efficient solar cells.

All traditional attempts to control the morphology in BHJ solar cells investigated in this thesis fail. However, efficiency enhancements are realized by an optimization of the solar cell device setup. The optimization procedure is discussed step-by-step.

The highest power conversion efficiency achieved with a solution-processed device is 3.3%. This value is among the highest efficiencies reported for solution-processed solar cells containing small molecular donor compounds.

While large open-circuit voltages up to 1.0 V and decent short-circuit current densities above 8 mA cm⁻² are obtained for solution-processed merocyanine solar cells, all devices feature only moderate fill factor of at best 0.5.

Relationships between the performance of merocyanine solar cells and physical properties of the dyes are examined. Thereby, particular attention is paid to the high dipolarity of the dyes, which leads to pronounced dye aggregation and thus influences physical properties of the devices. Other important parameters, such as the charge

carrier transport and the permittivity of the active layers, are analyzed in this thesis as well.

In a comprehensive study on merocyanine solar cells with solution-processed and thermal-evaporated active layers, the influence of the two deposition techniques on device performances is systematically investigated. The differences in solar cell performance are explained consider supramolecular and morphology effects. The highest efficiency achieved with a vacuum-deposited solar cell is 4.9%. This value is among the highest efficiencies reported for organic vacuum-deposited solar cells with a similar simple layer stack.

