

## Kurzzusammenfassung

In dieser Doktorarbeit werden Merocyaninfarbstoffe (MC) in Kombination mit Fullerenakzeptoren in organischen Solarzellen untersucht. Aufgrund ihrer intensiven, flexibel einstellbaren Absorption und ihrer elektronischen Struktur stellen MCs vielversprechende Kandidaten als Donormaterial für hocheffiziente Solarzellen dar. Vorangegangene Studien mit MC-basierten bulk heterojunction (BHJ) Solarzellen zeigten hohe Werte sowohl für den erzeugten Strom, als auch für die erreichte Spannung. Die Umwandlungseffizienz dieser Bauteile ist jedoch durch einen geringen Füllfaktor limitiert. Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit MC-basierten Solarzellen auf unterschiedlichen Größenskalen, d.h. auf molekularer, supramolekularer und bulk heterojunction Ebene sowie auf Bauteilebene. Die Ergebnisse ermöglichen es, Faktoren zu identifizieren, die für eine weitere Verbesserung von MC-basierten Solarzellen nötig sind.

Der Einfluss des Heteroatoms in der Donoruntereinheit von Merocyaninen wird durch Photoelektronenspektroskopie untersucht und mit der Bindungslängenalternanz im Einkristall sowie den Absorptionseigenschaften in dünnen Filmen in Zusammenhang gebracht. Die Ergebnisse zeigen, dass das Erscheinungsbild von MCs in dünnen Filmen durch deren zwitterionische Resonanzstruktur dominiert ist, jedoch nahe dem Cyanin-Limit liegt.

Die Einbindung eines neuen bis(Merocyanins) als Donor in BHJ Solarzellen führt zu einer außergewöhnlichen Photostromerzeugung in stark aggregierten MC-Phasen. Die Effizienzen dieser Solarzellen übersteigen die des Referenzsystems mit dem korrespondierenden Merocyanin, hauptsächlich durch verbesserte Absorptions- und Ladungstransporteigenschaften. Die gleichzeitige Verminderung der Leerlaufspannung bei Anwesenheit von aggregierten MC-Domänen wird gesondert untersucht.

Die geringe Effizienz von Solarzellen mit verunreinigten MC-Chargen kann auf Bestandteile zurückgeführt werden, die sowohl als Fallen für Ladungsträger dienen als auch die Deaktivierung von Exzitonen verursachen. Intensitätsabhängige Messungen deuten auf einen hohen Grad an monomolekularer sowie bimolekularer Rekombination in MC-Solarzellen hin. Eine neue Methode zur Einstellung der Austrittsarbeit der Lochsammелеlektrode zeigt die Abhängigkeit der Leerlaufspannung von der Höhe der Injektionsbarriere. Abschließend wird eine neue Technik zur Bestimmung des komplexen Brechungsindex von BHJ-Schichten aus Standardmessungen für Solarzellen entwickelt.