

Anlage 1

(zu Nr. 3.1 BNBest-BMBF 98)

Abschlussbericht NanoDyes

ZE: FSU Jena	Förderkennzeichen: 03EK3507
Vorhabenbezeichnung: Selbstorganisierte Farbstoffnanostrukturen für photovoltaische Anwendungen	
Laufzeit des Vorhabens: 1.10.2013 – 31.12.2017	

GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Die Verantwortung für den Inhalt der Veröffentlichung liegt bei den Autoren

1 Zusammenfassung

1.1 Aufgabenstellung

Im Fokus des Projektes stand die Etablierung von Techniken zur Herstellung von Modellschichten von organischen Elektronendonator-(D)- und –Akzeptor-(A)-Materialien an denen photovoltaische Prozesse grundlegend studiert werden können. In diesen Modellschichten sollte die supramolekulare Struktur gezielt eingestellt und variiert werden, um deren Einfluss auf optische und elektronische Materialeigenschaften sowie Elementarprozesse der organischen Photovoltaik detailliert charakterisieren zu können. Durch die so zu erlangenden Erkenntnisgewinne sollen höhere Wirkungsgrade von Solarzellen ermöglicht werden.

Diese Aufgaben wurden im Wesentlichen erfüllt. Insbesondere konnten Grenzflächenassemblierungsprozesse und -techniken in unserem Labor etabliert und angewendet werden, um supramolekulare Strukturen herzustellen und zu variieren. Somit konnten Absorption, Ladungstransport, Energielagen und offene Klemmspannungen eingestellt und erhöhte Solarzellwirkungsgrade als für vergleichbare Solarzellen mit aufgeschleuderten Aktivschichten ermöglicht werden.

1.2 Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

Der Gruppe stand ein renoviertes Labor zum Projektstart zur Verfügung, welches in der zweiten Jahreshälfte 2014 voll ausgestattet und betriebsfähig war. Die wesentliche im Projekt verwendete Technik ist die Langmuir-Blodgett-(LB)-Technik, die in der Folge in der Gruppe etabliert wurde. Alle Projektstellen konnten im Jahr 2013 besetzt werden; zusätzlich konnte ein Doktorand ein Stipendium mit theoretischem Schwerpunkt einwerben, sodass die Theoriearbeiten in AP1 und AP2 wesentlich gestärkt werden konnten. Die Nachbesetzung der entsprechenden Projektstelle mit einem Chemiker hat die Personalstruktur in der Nachwuchsgruppe strategisch sinnvoll weiterentwickelt.

1.3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Das Vorhaben wurde mit vier Arbeitspaketen (APs) und zwei Unteraufträgen geplant, die folgenden Forschungsaktivitäten gewidmet waren:

AP1 und UA1: Substanzbasis: funktionalisierte Chromophore

In diesen APs stand die Synthese amphiphiler Derivate von Elektronendonator-(D)- und –Akzeptor-(A)-Verbindungen im Vordergrund. Derivate etablierter Donoren sollten im Unterauftrag (UA1.1) von der Firma JenPolymers und solche von Akzeptoren von unserem Partner der Gruppe um Uwe Ritter (AP1.1, TU Ilmenau) bereitgestellt werden. Neuartige amphiphile Donoren auf Grundlage von 4-Hydroxythiazolen wurden in Kooperation mit der Gruppe von Rainer Beckert (FSU Jena, AP1.2) hergestellt.

AP2: Schichtherstellung

Quasi-Zweidimensionale Schichten sollten im Projekt im Wesentlichen mittels der Langmuir-Blodgett-(LB)-Technik hergestellt und charakterisiert werden. Mit dieser Technik können die Molekül-Packungsdichte und –Orientierung – allgemein die supramolekulare Geometrie – eingestellt und damit die im Vorhaben zentralen DA-Modellschichten hergestellt werden. Die resultierende supramolekulare Geometrie hängt allerdings nicht nur von den LB- sondern auch von Molekülparametern, wie Form, Amphiphilie und Löslichkeit ab. Es ist folglich ein enger Austausch zwischen AP1 und 2 notwendig, um geeignete Struktur motive für die LB-Technik und den herzustellenden Modellschichten zu identifizieren.

AP3: Charakterisierung

Die Modellschichten werden in AP3 grundlegend hinsichtlich ihrer supramolekularen Struktur, UV-vis-Absorptions- und elektronischer Eigenschaften charakterisiert. Um darüber hinaus den Einfluss der supramolekularen Struktur auf photovoltaische Kenngrößen zu studieren, werden aus den Modellschichten Solarzellen hergestellt und charakterisiert.

AP4 und UA2: Skalierung

Die gezielte Herstellung von organischen Halbleiterschichten mit optimalen supramolekularen Strukturen hat nicht nur extrem große Relevanz für Grundlagenforschungsfragestellungen der organischen Photovoltaik, sondern auch für die kommerzielle Produktion von organischen Solarzellen. Da eine solche Produktion mittels klassischer LB-Technik auf kleine Flächen und einem diskontinuierlichen Betrieb beschränkt ist, sollte in AP4 ein kontinuierlicher Betrieb mittels der Kombination aus LB- und Rolle-zu-Rolle-Technik erprobt werden, um die im Projekt erforschte supramolekulare Struktursteuerung für großtechnische Produktionen anwendbar zu machen.

Ablauf

Zum Projektstart stand in **AP1** die Synthese von amphiphilen Donoren und Akzeptoren (UA1.1 (Oligothiophene), APs 1.1 (Fullerene), 1.2 (Thiazole)) und deren Erprobung und Charakterisierung in homogenen LB-Schichten im Vordergrund (APs 2.1 (homogene LB-Schichten), 3.1 (Morphologie und Spektroskopie)). Die synthetischen Arbeiten in AP1 verliefen so erfolgreich, dass erste Derivate sehr schnell zur Verfügung standen (entspricht MS1: Verfügbarkeit amphiphiler Donoren und Akzeptoren), aber auch periphere Substitutionsmuster und die Chromophore systematisch und sehr vielfältig variiert werden konnten (entspricht MS2: Variation von Filmbildungseigenschaften und Grenzorbitalenergien). Dieser synthetische Erfolg, aber auch die Parametervielfalt bei der Herstellung der LB-Filme führten zu einem größeren Arbeitsaufwand als ursprünglich geplant. Die entsprechende Mittelumwidmung und kostenneutrale Verlängerung erlaubten das detaillierte Studium des Einflusses von molekularen Eigenschaften auf supramolekulare Strukturen. Die variierten molekularen Parameter sind im Folgenden zusammen mit den entsprechenden Publikationen kurz aufgelistet:

- Chromophore:
 - Gampe, D. M., et al., Stable and Easily Accessible Functional Dyes: Dihydroetrazaanthracenes as Versatile Precursors for Higher Acenes. *Chemistry – A European Journal* **2015**, 21 (20), 7571-7581.
 - Habenicht, S. H., et al., Tuning the polarity and surface activity of hydroxythiazoles - extending the applicability of highly fluorescent self-assembling chromophores to supra-molecular photonic structures. *Journal of Materials Chemistry C* **2016**, 4 (5), 958-971.
 - Preiß, J., et al., Absorption and Fluorescence Features of an Amphiphilic meso-Pyrimidinylcorrole: Experimental Study and Quantum Chemical Calculations. *The Journal of Physical Chemistry A* **2017**, 121 (45), 8614-8624.
 - Hupfer, M. L., et al., On the Influence of Peripheral Substituents of and at Thiazole-Chromophores on Supramolecular Structures at the Air-Water-Interface. *to be submitted 2018*.
- polare Kopfgruppen:
 - Das, S., et al., Controlling Electronic Transitions in Fullerene van der Waals Aggregates via Supramolecular Assembly. *ACS Appl Mater Interfaces* **2016**, 8 (33), 21512-21.
 - Das, S. K., et al., Controlling Intermolecular Interactions at Interfaces: Case of Supramolecular Tuning of Fullerene's Electronic Structure. *Advanced Energy Materials* **2018**, submitted.
 - Hupfer, M. L., et al., On the Influence of Peripheral Substituents of and at Thiazole-Chromophores on Supramolecular Structures at the Air-Water-Interface. *to be submitted 2018*.
 - Hupfer, M. L., et al., Tripodal Amphiphilic Push-Pull-Thiazoles: Intramolecular Acid-Base-Chemistry Determines Supramolecular Structure and Optoelectronic Properties. *to be published 2018*.
 - Kaufmann, M., et al., Introducing double polar heads to highly fluorescent Thiazoles: Influence on supramolecular structures and photonic properties. *J. Colloid Interface Sci.* **2018**, 526, 410-418.
- Spacer:
 - Hupfer, M. L., et al., Tripodal Amphiphilic Push-Pull-Thiazoles: Intramolecular Acid-Base-Chemistry Determines Supramolecular Structure and Optoelectronic Properties. *to be published 2018*.
- Quantenchemische Arbeiten zur Vorhersage molekularer und supramolekularer Eigenschaften:
 - Preiß, J., et al., How Does Peripheral Functionalization of Ruthenium(II)-Terpyridine Complexes Affect Spatial Charge Redistribution after Photoexcitation at the Franck-Condon Point? *ChemPhysChem* **2015**, 16 (7), 1395-1404.
 - Song, C., et al., Efficient implementation of effective core potential integrals and gradients on graphical processing units. *The Journal of Chemical Physics* **2015**, 143 (1), 014114.
 - Sachse, T., et al., A program for automatically predicting supramolecular aggregates and its application to urea and porphyrin. *J. Comput. Chem.* **2018**, 39 (13), 763-772.

Die Variation der oben aufgelisteten molekularen Parameter sowie von Prozessparametern ermöglichte die Realisierung verschiedenster supramolekularer Strukturen und Morphologien (Erfüllung von MS3: Kenntnis optimaler Herstellungsparameter für homogene Lagen). Der Einfluss von Prozessparametern auf supramolekulare Struktur und Materialeigenschaften konnte im Zusammenspiel der **APs 2 und 3** am eindrucklichsten für das Beispiel eines amphiphilen Fulleren-Derivats gezeigt werden, bei dem die

Grenzorbitalenergien allein durch die supramolekulare Struktur um beachtliche 120 meV variiert werden konnten. Während es sich im Projekt herausstellte, dass die Kontrolle supramolekularer Strukturen an der Grenzfläche zwischen zwei weichen Materialien sehr herausfordernd hinsichtlich experimenteller Verifizierung ist, gelingt dies für ein weiches Material auf einem anorganischen harten Material, wie Glas oder Silizium ohne Schwierigkeiten. Daher wurden die vorgenannten supramolekularen Fullerenfilme auf einem p-i-Si-Stapel aufgebracht und entsprechende Hybridsolarzellen realisiert und charakterisiert. Die aus der supramolekularen Struktursteuerung resultierende LUMO-Energievariation konnte linear auf eine Variation in der offenen Klemmspannung dieser Hybridsolarzellen übertragen werden. Im Zuge der systematischen Variation der LUMO-Energien und entsprechender offener Klemmspannungen wurde zudem ein neuer Weltrekord für den Wirkungsgrad von p-i-Si:Fulleren-Hybridsolarzellen erreicht (2,9%; entspricht MS4 für Hybridsolarzellen; der Wirkungsgrad ist 55 - 66% höher als der mittels klassischen Aufschleudern hergestellten p-i-Si:Fulleren-Hybridsolarzellen - je nach Tempern letzterer; dies entspricht MS8 für Hybridsolarzellen). Dies zeigt eindrücklich die zentrale Bedeutung von supramolekularer Strukturkontrolle für die zielgerichtete Optimierung optoelektronischer Eigenschaften.

An dipolaren Merocyanin-Farbstoffen konnten die Grenzen der supramolekularen Kontrolle demonstriert werden. Aufgrund von starken intermolekularen Kräften und für eine zweidimensionale Anordnung ungeeignete molekulare Form bilden die untersuchten Merocyanine nicht Langmuir-typische 2D-supramolekulare Strukturen, sondern reorganisieren an der Wasser-Luft-Grenzfläche zu 3D-Kristalliten. Diese heterogenen Strukturen (siehe MS5) weisen wesentlich kürzere Lebenszeiten des energetisch niedrigsten elektronisch angeregten Zustandes auf, als aufgeschleuderte (spin casting) oder aufgetropfte (drop-casting) Filme sowie Lösungen der Merocyanine (entspricht MS7), was das Erreichen eines nennenswerten Wirkungsgrades entsprechender organischer Solarzellen verhindert. Da die Lebenszeiten solcher elektronisch angeregten Zustände intrinsisch die Fluoreszenzquantenausbeuten beeinflussen, erlaubt das in der Nachwuchsgruppe realisierte online-Fluoreszenzmonitoring (entspricht MS6) das Studium des Zusammenhangs zwischen supramolekularer Struktur, die während der Herstellung von Langmuir-Monolagen variiert wird, und Lebenszeiten der angeregten Zustände. Um ein vollständiges Verständnis dieses Zusammenhangs zu erreichen, bei dem ein komplexes Zusammenspiel zwischen dynamischem und statischem Fluoreszenz-Quenchen stattfindet, sind weiterführende Arbeiten notwendig, bei denen das existierende Setup um die Möglichkeit für zeitaufgelöste Messungen erweitert werden muss.

Im **AP4** konnte die LB-Technik erfolgreich mit einer Rolle-zu-Rolle-(R2R)-Anlage verknüpft werden. Im Technikum des R2R-Anleganeherstellers Coatema Coating Machinery GmbH konnte unser LB-R2R-Labora Aufbau erfolgreich in eine großindustrielle R2R-Anlage (inklusive Folienvorbehandlung mittels Corona und Nachbehandlung in einer Trockenstrecke samt Aufwicklung) integriert werden. Dies stellte eine besondere Herausforderung dar, da die LB-Technik bei sehr kleinen und die R2R-Technik aber für sehr große Filmbildungsgeschwindigkeiten konzipiert sind. Für langsame Fahrgeschwindigkeiten in der R2R-Technik und hohe LB-R2R-Geschwindigkeiten können beide Techniken aber gut kombiniert werden.

1.4 Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

Organische Solarzellen wurden bereits intensiv untersucht, die Zusammenhänge zwischen molekularer Struktur, supramolekularen Strukturen, Morphologien und optoelektronischer Parameter wurden aber noch immer nicht vollständig verstanden. Insbesondere zum Einfluss der supramolekularen Struktur auf optoelektronische Eigenschaften gibt es bis heute, im Vergleich zu Arbeiten mit Morphologie-Fokus, relativ wenig Arbeiten. Im Gegensatz dazu werden Grenzflächeneffekten zur Herstellung wohl-definierter Filme seit langem ausgenutzt, insbesondere in der Langmuir-Blodgett-Technik. Das zugrunde liegende chemische Strukturmotiv der Amphiphilie wird aber vor allem für biologische Fragestellungen, bspw. zum Aufbau von Zellmembranmodellen, eingesetzt. Die Anwendung dieser molekularen Struktur motive und Techniken auf organische Halbleiter war zum Projektbeginn ein völlig neuer Ansatz.

1.5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Die Nachwuchsgruppe kooperierte sehr intensiv mit den Synthesegruppen von Prof. Rainer Beckert (FSU Jena) und Prof. Uwe Ritter (TU Ilmenau) hinsichtlich Synthese amphiphiler Donor- und Akzeptor-Materialien. Im Laufe des Projektes entstand zudem eine Kooperation mit der Gruppe von Prof. Kalina Peneva (FSU Jena) zur Synthese amphiphiler Perylene. Weiterhin wurde mit der Gruppe von Prof. Felix Schacher intensiv hinsichtlich Lichtstreuungsmethoden und Elektronenmikroskopie zur Charakterisierung von Aggregaten und supramolekularen Strukturen kooperiert. Zur routinemäßigen Atomkraftmikroskopie wurde mit der Gruppe von Dr. Andrea Csaki (Leibniz IPHT Jena) zusammen gearbeitet. In Kooperation mit der Gruppe von Dr. Jan Dellith (Leibniz IPHT Jena) wurden Röntgenbeugungsexperimente zur Charakterisierung von Morphologien molekularer Schichten durchgeführt. Zeitaufgelöste Absorptionsspektroskopie und elektrochemische Experimente wurden zusammen mit der Gruppe von Prof. Benjamin Dietzek (Leibniz IPHT Jena) durchgeführt.

2 Eingehende Darstellung

2.1 Verwendung der Zuwendung und erzielte Ergebnisse

AP1: Synthese

Die Synthese amphiphiler Akzeptoren (AP1.1) wurde in der Gruppe von Prof. Uwe Ritter (TU Ilmenau) durchgeführt. Entsprechend der beantragten Zuwendung lag der Fokus dabei auf C60-Fullerenen, die mit systematisch variiertes Anzahl an polaren Oligoethylenglycolketten funktionalisiert wurden. Die dafür nötigen Verbrauchsmittel wurden entsprechend des Zuwendungsbescheids verausgabt. Entsprechend des Zuwendungsbescheides wurden im Unterauftrag UA1.1 ein amphiphiles Oligothiophenderivat von der Firma JenPolymers synthetisiert. Ein Doktorand der Nachwuchsgruppe konnte in Kooperation mit der Gruppe von Prof. Rainer Beckett (FSU Jena) eine große Vielzahl neuartiger amphiphiler 4-Hydroxythiazol-Derivate synthetisieren. Dabei wurde das Chromophor verändert, aber vor allem die Anzahl, Position, Natur und Verknüpfung von polaren Kopfgruppen variiert, wie in Abbildung 1 zusammengefasst ist. Die Matrix an realisierten Derivaten enthält solche mit sehr verschiedenen Amphiphilie-Motiven (mono- bis tri-polar, terminale und zentrale Funktionalisierung, ...), mit verschiedenen optischen Eigenschaften (sehr gute Fluorophore bis hin zu Derivaten mit hohen Extinktionskoeffizienten) und unterschiedlichem Anteil an π -konjugierten und alkyllischen Einheiten. Darüber hinaus wurden im Rahmen dieser Kooperation neue Nicht-Fulleren-Akzeptoren, die Azaacene, hergestellt. Damit wurden nicht nur die bei Projektstart angestrebten Chromophorvariationen realisiert, sondern darüber hinaus eine große Anzahl von peripheren Funktionalisierungsmustern synthetisiert, von denen sich einige als für die LB-Technik geeignet erwiesen haben. Die Synthesearbeiten im Projekt haben insbesondere das Feld der 4-Hydroxythiazole systematisch bezüglich peripherer Funktionalisierung weiter entwickelt. Die synthetisierten Chromophore wurden in hinsichtlich ihrer RedOx-, UV-vis-Absorptions- und -Emissions-Eigenschaften umfänglich und detailliert charakterisiert.

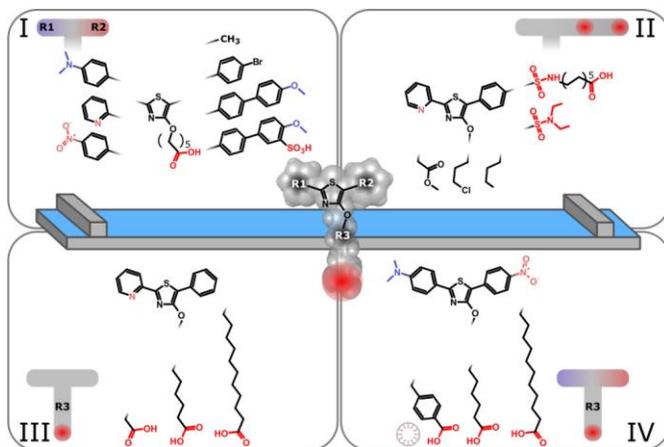


Abbildung 1: Übersicht einer Auswahl an 4-Hydroxythiazol-Derivaten, die im Projekt synthetisiert wurden

AP2 und AP3: Schichtherstellung und supramolekulare Charakterisierung

Entsprechend des Forschungskonzeptes der Nachwuchsgruppe und der bewilligten Mittel wurde das Labor der Nachwuchsgruppe mit einem Langmuir-Blodgett-Trog zur Herstellung molekular dünner Filme ausgestattet. In der Ausführung als „Alternate“-Modell verfügt der LB-Trog über zwei Subphasenoberflächen, sodass zwei verschiedene amphiphile Derivate gespreitet und als Langmuir-, LB- oder Langmuir-Schäfer-Filme verarbeitet werden können. Dieser LB-Trog ist das zentrale Arbeitsgerät der Nachwuchsgruppe. Die entsprechenden Prozesse zur Detektion von LB-Isothermen wurden während der Förderphase hinsichtlich Reproduzierbarkeit kontinuierlich weiterentwickelt. Zusätzlich wurde ein Standard-LB-Trog als Leihgerät während des Förderzeitraums in unserem Labor installiert, um die hohe Anzahl systematisch variiertes Farbstoff-Derivate hinsichtlich ihrer LB-Isothermen charakterisieren zu können.

In AP2 stand insbesondere die Herstellung homogener LB-Schichten (AP1.1) und die Charakterisierung derer supramolekularer Struktur im Forschungsfokus, da diese die Grundlage sind, um definierte Grenzflächen realisieren zu können. In Abbildung 2A sind beispielhaft einige LB-Isothermen dargestellt, aus denen (genauer aus den mittleren Molekülflächen in den festen Phasen) mittlere Moleküllorientierungen abgeschätzt und damit Modelle der supramolekularen Struktur vorgeschlagen werden können (siehe Abbildung 2B). Wesentliche Ergebnisse der Untersuchung der Derivatevielfalt aus AP1 hinsichtlich ihrer Eignung zur Ausprägung zweidimensionaler Langmuir-Filme können wie folgt zusammengefasst werden:

- a. Terminale Funktionalisierung von linearen Thiazolen mit polaren Kopfgruppen, insbesondere Sulfonamide, führen zu wohl-definierten und hoch-geordneten Schichten; deren Kompressibilität kann durch die Erweiterung der polaren Gruppe um eine flexibel angebundene zusätzliche polare Gruppe signifikant erhöht werden.
- b. Nitro-Gruppen gelten als deutlich schwächere Anker für polare Medien als Sulfonamide; In Kombination mit einem zusätzlichen, zentralen Carbonsäure-Anker und bei supramolekularer Stabilisierung durch $\pi\pi$ -Wechselwirkungen, können mit Nitro-Carbonsäure-Ankern aber deutlich

höhere Ordnungen und Grenzflächendrücke erreicht werden (60 mN/m, siehe Abbildung 2A) als mittels der Sulfonamide (ca. 10 mN/m)

- c. Nicht nur mittels terminaler, auch mittels zentraler Funktionalisierung können hoch-geordnete Filme hergestellt werden
- d. Die supramolekulare Struktur stark dipolarer und hinsichtlich lipophilen und hydrophilen Platzbedarf nicht ausbalancierter Farbstoffe kann mittels der LB-Technik wenig beeinflusst werden
- e. Polyethylenglycolketten können nicht nur als polare Anker, sondern bei sorgfältiger LB-Parameterwahl zusätzlich auch als intermolekulare Spacer fungieren

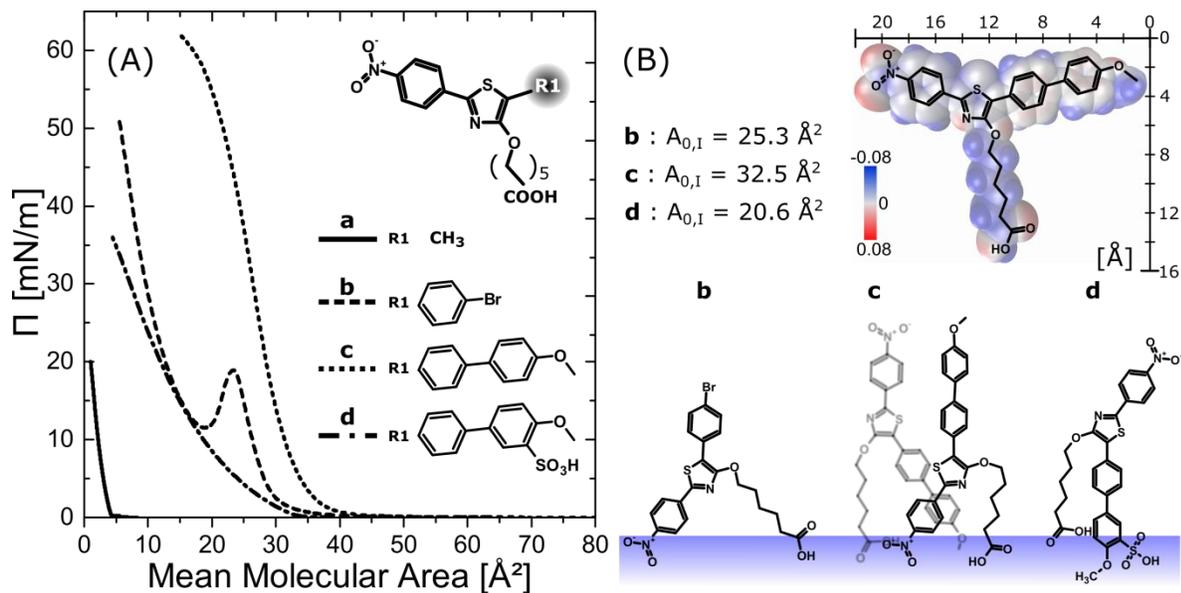


Abbildung 2: (A) Gemittelte $\Pi(A)$ -Isotherme des 2-4-Nitrophenyl-4-Hydroxy-5-R1-1,3 Thiazols (3) und einer Methyl (a) (durchgezogen), Phenyl-4-Bromo (b) (gepunktet), Phenyl-4-Methoxyphenyl (c) (gestrichelt) und 3-Phenyl-4-Methoxyphenyl-3-Sulfonylphenyl (d) (gepunktet gestrichelt) R2 Substitution. (B) Die aus der $\Pi(A)$ -Isotherme bestimmten möglichen supramolekularen Geometrien der Moleküle in den jeweiligen kristallinen Phasen zusammen mit der molekularen Geometrie (exemplarisch für c), deren Dimension und dem elektrostatischen Potential über der Van-der-Waals Oberfläche.

AP3: Schichtherstellung und optoelektronische Charakterisierung

Die Herstellung und Charakterisierung molekularer Monolagen mit einstellbarer supramolekularer Struktur erfordert neben der LB- und weiterer Dünnschichttechniken zur Herstellung dieser Filme auch besonders sensitive Techniken zu deren Charakterisierung. Entsprechend der bewilligten Mittel wurde in der Nachwuchsgruppe ein Messplatz für die photothermische Ablenkungsspektroskopie (engl. Photothermal Deflection Spectroscopy - PDS) aufgebaut, um die ultradünnen Filme (Monolagen haben typischerweise eine Dicke von etwa einem Nanometer; siehe molekulare Abmessungen in Abbildung 2B) detailliert hinsichtlich ihrer UV-vis-Absorptionsspektren charakterisieren zu können. Die hohe Sensitivität der PDS erlaubt darüber hinaus die Untersuchung von Sub-Bandkanten-Absorptionen, wie Polaronen-Übergänge und Urbach-Tails. Letztere korrelieren mit der supramolekularen Ordnung in den organischen

Halbleiterfilmen, wie beispielhaft in Abbildung 3 gezeigt ist. Je geordneter die Filme sind (reine Filme > homogene Filme > heterogene/gemischte Filme), desto niedriger ist die Sub-Bandkanten- oder Urbach-Absorption.

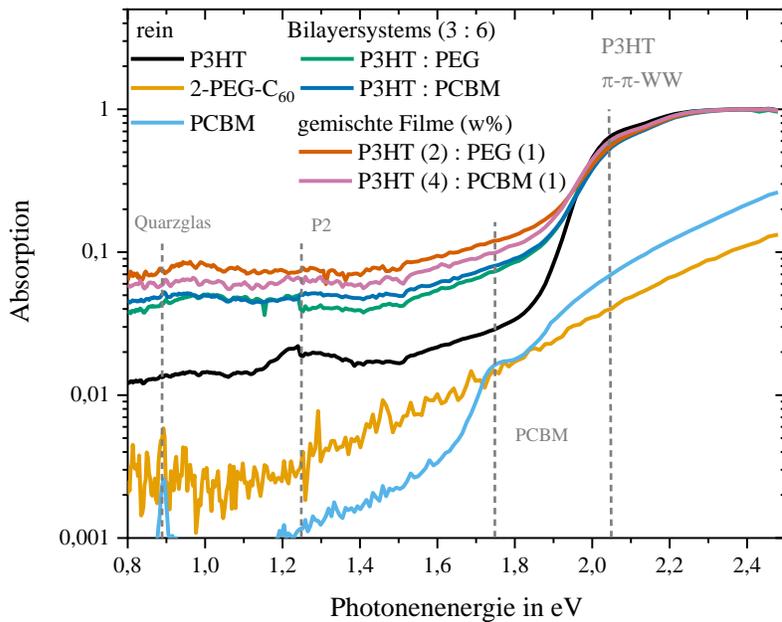


Abbildung 3: Photothermische Ablenkungsspektren von verschiedenen Langmuir Filmen auf Quarzglas. Die gemischten Filme bestehen im jeweiligen Mischungsverhältnis aus sechs Langmuir Filmen. Bei den Bilayersystemen gibt das Zahlenverhältnis die Anzahl der jeweils reinen Langmuir Filmen wieder. P3HT, 2-PEG-C₆₀, und PCBM rein sind ebenfalls Multilayersysteme

Die eindrucklichste Beeinflussung optoelektronischer Eigenschaften durch die supramolekulare Struktur gelang anhand eines amphiphilen C₆₀-Fullerenderivates. Es war zwar bekannt, dass die Absorptionsspektren von Fullerenen wegen der Herzberg-Teller-Kopplung stark von der supramolekularen Symmetrie abhängen, in unseren Arbeiten konnten wir aber zudem zeigen, dass dies auch für die supramolekulare Symmetrie gilt. Da diese in der LB-Technik, nicht aber bei klassischem Aufschleudern kontrolliert werden kann, zeigen die LB-Filme in Abbildung 4 ein nahezu unveränderliches UV-vis-Absorptionsspektrum, wohingegen die Spektren aufgeschleuderter Filme für hohe Verdünnungen des Fullerenes in der Matrix ein großes UV/vis-Absorptionsverhältnis haben, das bei zunehmender inter-Fullerenwechselwirkung und Symmetriestörung bei höheren Konzentrationen gegen Eins konvergiert.

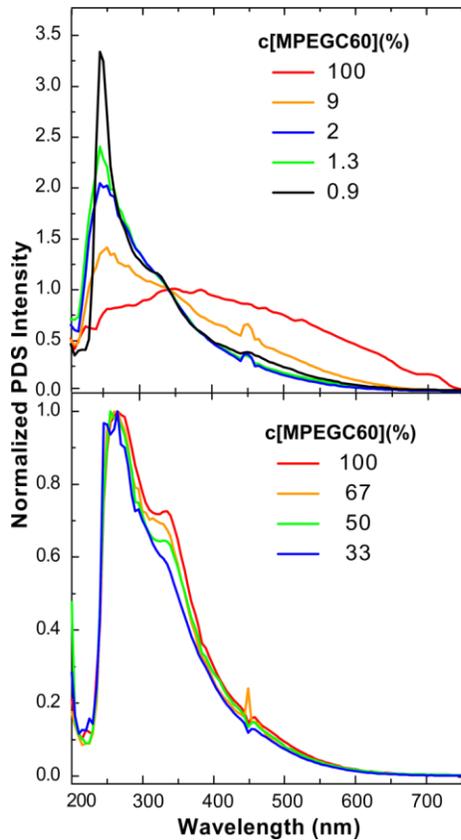


Abbildung 4: Absorptionsspektren von Filmen, bei denen amphiphile Fullerene in variierter Konzentration in Stearinsäure eingebettet wurden. Oben: Aufgeschleuderte Filme ohne Symmetrieeerhalt ändern das UV/vis-Absorptionsverhältnis mit zunehmender Fullerenkonzentration und Symmetriestörung; Unten: LB-produzierte Filme mit Symmetrieeerhalt und wenig Änderungen in den spektralen Formen

Weiterhin konnte durch Anwenden verschiedenster Filmherstellungsmethoden eine Reihe unterschiedlicher Morphologien und supramolekularen Strukturen in Filmen desselben amphiphilen Fullenderivates realisiert werden. Dies ist für die grenzflächenbasierten Methoden in Abbildung 5 dargestellt. Herauszustellen ist dabei, dass durch die Grenzflächenanordnung (insbesondere bei Verwendung der Liquid-Liquid-Interface-Precipitation-(LLIP)-Technik) separierte Fullerene resultieren, sodass deren LUMO nicht durch intermolekulare Wechselwirkungen energetisch stabilisiert werden. Im Vergleich zu aufgeschleuderten Filmen bewirkt dies eine deutliche Erhöhung der LUMO-Energien, wie in Abbildung 6b dargestellt ist. Diese Energien wurden direkt an den dünnen Filmen mithilfe der Square-Wave-Voltammetrie bestimmt.

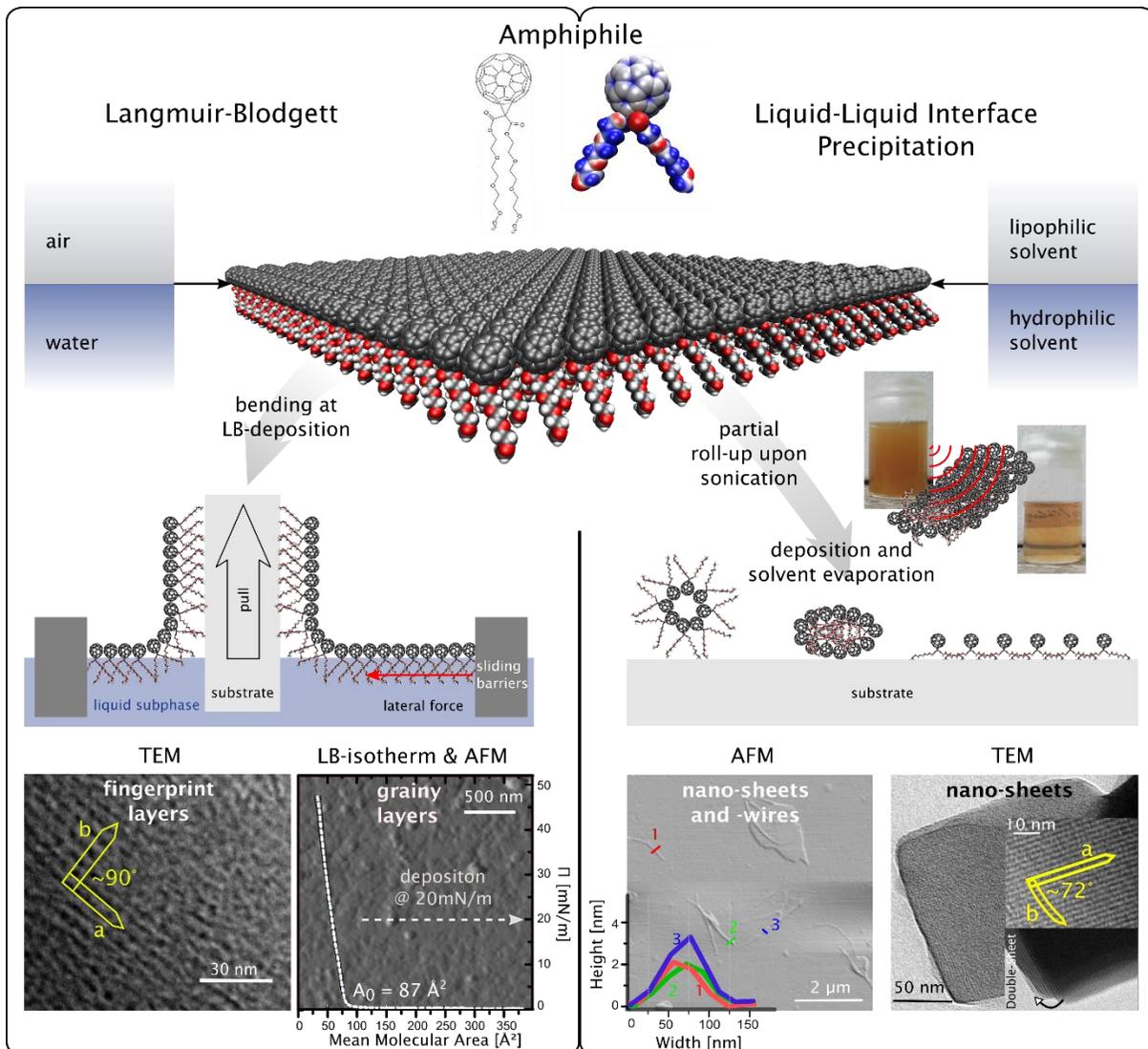


Abbildung 5: Grenzflächen-basierte Methoden zur Assemblierung amphiphiler Fullerene und resultierende Morphologien und supramolekulare Strukturen

Um den Einfluss der variierten LUMO-Energien auf die offene Klemmspannung in Solarzellen zu untersuchen, wurde zunächst auf hybride Solarzellen fokussiert (Abbildung 6a), da die zugrunde liegenden Silizium-Stacks in ihrer Oberflächenbeschaffenheit der von Glas stark ähneln und alle bis dahin gewonnen Erkenntnisse leicht zu übertragen schienen. Wie in Abbildung 7 gezeigt ist, können die Variationen in den LUMO-Energien linear auf Variationen in der offenen Klemmspannung der Hybridsolarzellen abgebildet werden. Die dabei erreichte Variation in der offenen Klemmspannung durch Kontrolle der supramolekularen Struktur belegt eindrücklich die Bedeutung der supramolekularen Chemie für die organische und hybride Photovoltaik.

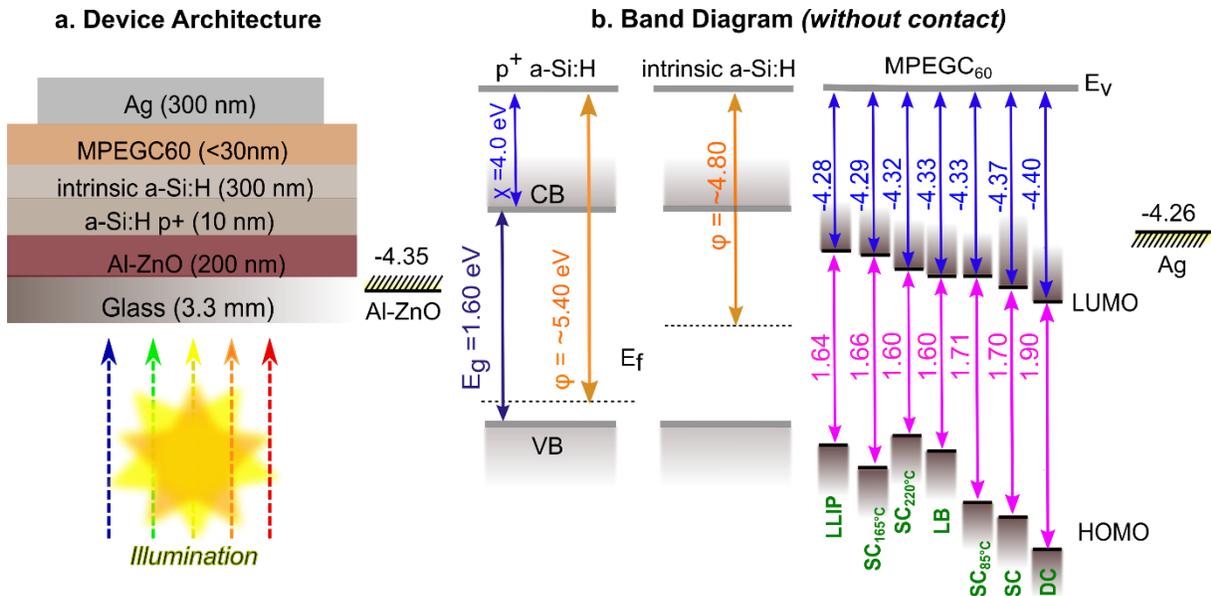


Abbildung 6: (a) Aufbau der hergestellten Hybridsolarzellen und (b) Variation der HOMO- und LUMO-Energien in Abhängigkeit der Morphologie und supramolekularen Struktur

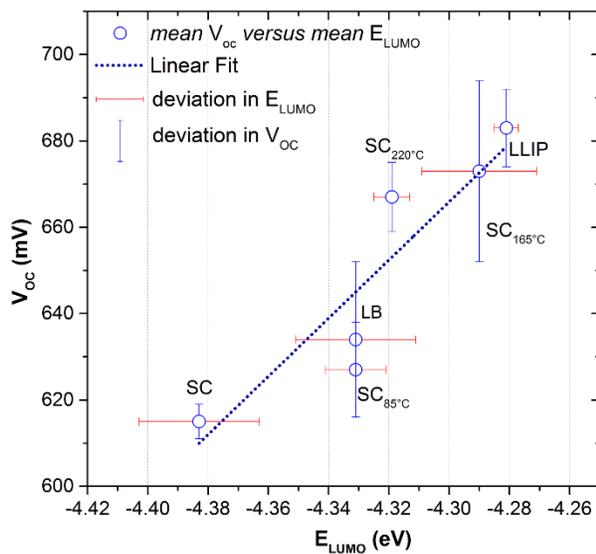


Abbildung 7: Korrelation von LUMO-Energie-Variationen mit Änderungen der offenen Klemmspannung in pi-Silizium:Fulleren-Hybridsolarzellen

Weiterhin wurde die Abhängigkeit von Exzitonenlebensdauern von der supramolekularen Struktur für das Beispiel dipolarer Merocyanine untersucht. In Abbildung 8 ist dargestellt, dass die hochgeordneten supramolekularen Strukturen, die mittels der LB-Technik hergestellt wurden, eine deutlich schnellere strahlungslose Deaktivierung angeregter Zustände aufweisen, als solche mit ungeordneteren Strukturen (spin cast (SC) und drop cast (DC) Filme; siehe MS7).

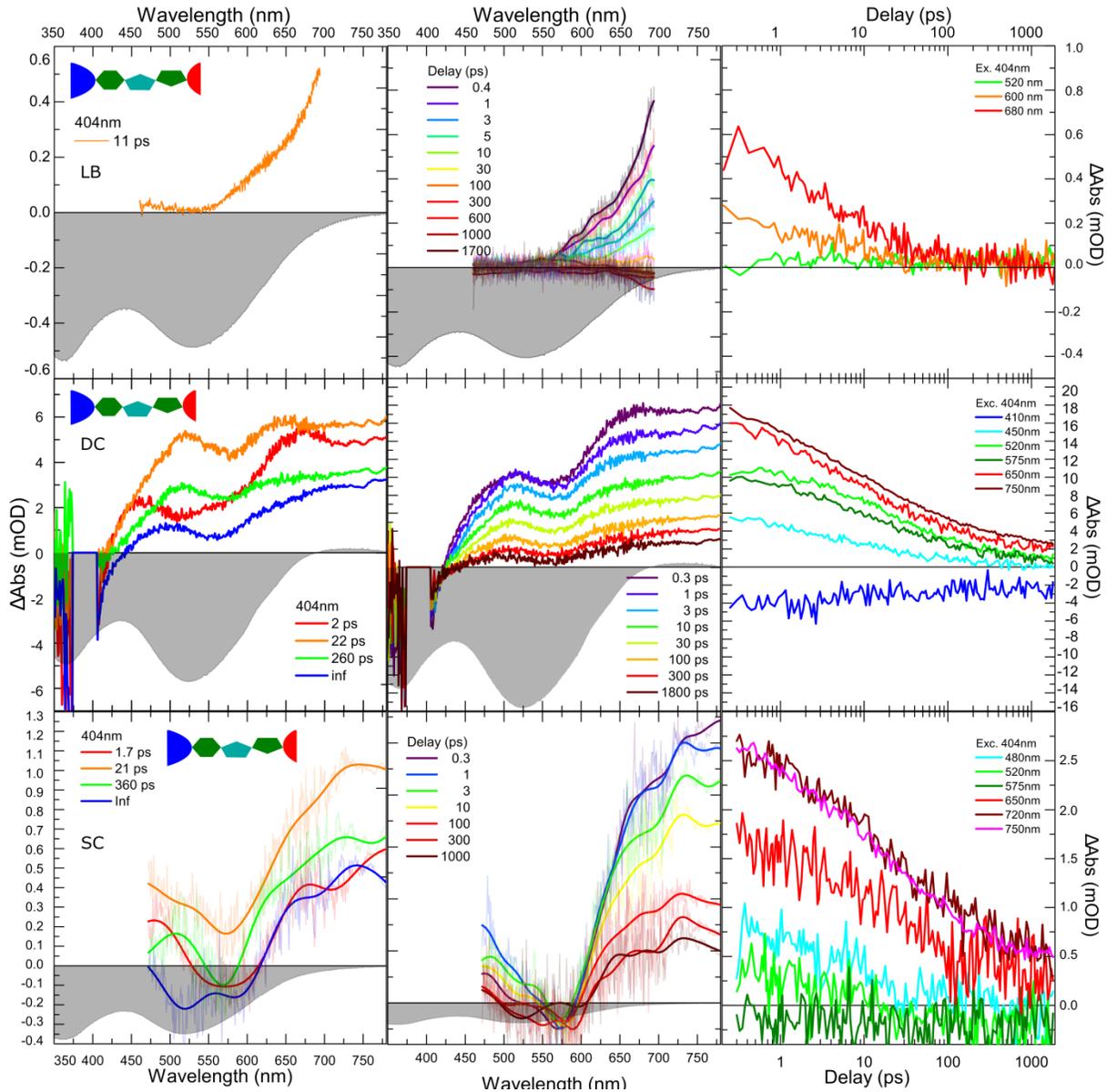


Abbildung 8: Transiente Absorptions-(TA)-Spektren von dünnen Filmen eines Merocyanins die mittels unterschiedlicher Methoden hergestellt wurden und dementsprechend unterschiedlicher Morphologien aufweisen. Die erste Spalte zeigt die Fit-Ergebnisse der spektralen Komponenten mit der dazugehörigen Lebenszeit in der Legende. Die mittlere Spalte zeigt ausgewählte TA Spektren bei verschiedenen Zeiten nach Anregung und die rechte Spalte zeigt die Kinetiken der transienten Absorption bei definierten Wellenlängen.

AP4:, UA2 Skalierung

Um die Kontrolle und gezielte Einstellung supramolekularer Strukturen für die großtechnische Herstellung optisch, elektronisch oder optoelektronisch aktiver Schichten nutzbar zu machen, wurde in AP4 und UA2 erprobt, in wie weit die für langsame Prozesse entwickelte LB-Technik mit der für schnelle Prozesse entwickelte Rolle-zu-Rolle-Technik sinnvoll kombinierbar ist. Eine Laborversion der LB-R2R-Technik konnte

durch die Zuwendungen an die Nachwuchsgruppe in unserem Labor erfolgreich etabliert werden. Darüber hinaus konnte diese LB-R2R-Anlage auch erfolgreich in eine großtechnische R2R-Anlage der Firma Coatema Coating Machinery GmbH integriert und getestet werden. Es ist dabei aber festzuhalten, dass bei der LB-R2R-Technik nicht ohne weiteres die gleichen Maximaldrücke wie bei der klassischen LB-Technik erreicht wurden. Dies erscheint nicht weiter kritisch, da die Filmherstellungen typischerweise signifikant unter den Maximaldrücken durchgeführt werden, um Beschädigungen der Filme beim Übertragen auf ein Substrat zu vermeiden.

2.2 Wichtigsten Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

siehe Verwendungsnachweis

2.3 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit

siehe Erfolgskontrollbericht

2.4 Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit der Ergebnisse im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplanes

Entsprechend des fortgeschriebenen Verwertungsplans können folgende Ergebnisse wie folgt verwertet werden:

- 1) Supramolekulare Steuerung von LUMO-Energien:
 - a) Erhöhung der offenen Klemmspannung und des Wirkungsgrades von Solarzellen
 - b) Verringerung von Potentialbarrieren in organischen Halbleiterbauelementen

- 2) Homogene Orientierung linearer Chromophore:
 - a) Herstellung optisch anisotroper Materialien; bspw. Sonnenschutzfolien mit blinkwinkelabhängiger Transparenz (PCT Patentanmeldung - 17 195 284.9 und PCT/EP2017/082055; entsprechendes ZIM-Projekt 2018 eingereicht)
 - b) Herstellung teiltransparenter Solarzellen für die Fassadenintegration

- 3) LB-R2R-Technik-Kombination:
 - a) Automatisierung der Herstellung organischer Halbleiterproduktionen mit wesentlich verbesserter Reproduzierbarkeit supramolekularer Strukturen

2.5 Fortschritte auf dem Gebiet bei anderen Stellen

Dem Zuwendungsempfänger sind keine Aktivitäten anderer Stellen hinsichtlich des verfolgten Forschungsansatzes bekannt.

2.6 Erfolgte und geplante Veröffentlichungen

1. Gampe, D. M., et al., Stable and Easily Accessible Functional Dyes: Dihydropentaazaanthracenes as Versatile Precursors for Higher Acenes. *Chemistry – A European Journal* **2015**, 21 (20), 7571-7581.
2. Herrmann, F., et al., Influence of Interface Doping on Charge-Carrier Mobilities and Sub-Bandgap Absorption in Organic Solar Cells. *The Journal of Physical Chemistry C* **2015**, 119 (17), 9036-9040.
3. Preiß, J., et al., How Does Peripheral Functionalization of Ruthenium(II)–Terpyridine Complexes Affect Spatial Charge Redistribution after Photoexcitation at the Franck–Condon Point? *ChemPhysChem* **2015**, 16 (7), 1395-1404.
4. Song, C., et al., Efficient implementation of effective core potential integrals and gradients on graphical processing units. *The Journal of Chemical Physics* **2015**, 143 (1), 014114.
5. Das, S., et al., Controlling Electronic Transitions in Fullerene van der Waals Aggregates via Supramolecular Assembly. *ACS Appl Mater Interfaces* **2016**, 8 (33), 21512-21.
6. De la Cadena, A., et al., Intermolecular exciton–exciton annihilation in phospholipid vesicles doped with [Ru(bpy)₂dppz]²⁺. *Chem. Phys. Lett.* **2016**, 644, 56-61.
7. Habenicht, S. H., et al., Tuning the polarity and surface activity of hydroxythiazoles - extending the applicability of highly fluorescent self-assembling chromophores to supra-molecular photonic structures. *Journal of Materials Chemistry C* **2016**, 4 (5), 958-971.
8. Reinspach, J. A., et al., Tuning the Morphology of Solution-Sheared P3HT:PCBM Films. *ACS Applied Materials & Interfaces* **2016**, 8 (3), 1742–1751.
9. Schulz, M., et al., Neutral, Heteroleptic Copper(I)-4h-Imidazolate Complexes: Synthesis and Characterization of their Structural, Spectral and Redox Properties. *Dalton transactions* **2016**, 45(11), 4835-42.
10. Hupfer, M. L., et al., On the Control of Chromophore Orientation, Supra-Molecular Structure and Thermodynamic Stability of an Amphiphilic Pyridyl-Thiazol upon Lateral Compression and Spacer Length Variation. *ACS Appl Mater Interfaces* **2017**, 9, 44181-44191.
11. Preiß, J., et al., Absorption and Fluorescence Features of an Amphiphilic meso-Pyrimidinylcorrole: Experimental Study and Quantum Chemical Calculations. *The Journal of Physical Chemistry A* **2017**, 121 (45), 8614-8624.

12. Wahyuono, R. A., et al., Effect of annealing on the sub-bandgap, defects and trapping states of ZnO nanostructures. *Chem. Phys.* **2017**, *483*, 112-121.
13. Das, S., et al., New horizons in supramolecular non-bonded fullerene aggregates with tunable optoelectronic properties. **2018**.
14. Das, S., et al., Macroscopic Quantum Electrodynamics and (Time-Dependent) Density Functional Theory Approaches to Electronic Ground and Excited State Dispersion Interactions between Fullerenes. *J. Chem. Phys.* **2018**.
15. Das, S., et al., Synthetic, Interfacial and Optoelectronic chemistry of PEG-functionalized Fullerenes. *Soft Mater/JMC C/ PCCP* **2018**.
16. Das, S. K., et al., Controlling Intermolecular Interactions at Interfaces: Case of Supramolecular Tuning of Fullerene's Electronic Structure. *Advanced Energy Materials* **2018**, *submitted*.
17. Herrmann-Westendorf, F., et al., Pressure-Induced Aggregation of Merocyanine Dyes. *in preparation* **2018**.
18. Herrmann-Westendorf, F., et al., Photo-Annealing of Merocyanine Aggregates. *Journal of Physical Chemistry C* **2018**, *to be submitted*.
19. Hupfer, M. L., et al., Interface-Assembly of Perylenes. **2018**, *in preparation*.
20. Hupfer, M. L., et al., On the Influence of Peripheral Substituents of and at Thiazole-Chromophores on Supramolecular Structures at the Air-Water-Interface. *to be submitted* **2018**.
21. Hupfer, M. L., et al., Tripodal Amphiphilic Push-Pull-Thiazoles: Intramolecular Acid-Base-Chemistry Determines Supramolecular Structure and Optoelectronic Properties. *to be published* **2018**.
22. Kaufmann, M., et al., Introducing double polar heads to highly fluorescent Thiazoles: Influence on supramolecular structures and photonic properties. *J. Colloid Interface Sci.* **2018**, *526*, 410-418.
23. Preiß, J., et al., Ab-initio Prediction of Fluorescence Lifetimes Involving Solvent Environments by Means of COSMO and Vibrational Broadening. *J. Phys. Chem. A* **2018**, *to be submitted*.
24. Sachse, T., et al., On Combining the Conductor-Like Screening Model and Optimally-Tuned Range-Separated Hybrid Density Functionals. *Journal of Chemical Theory and Computation* **2018**, *to be submitted*.
25. Sachse, T., et al., A program for automatically predicting supramolecular aggregates and its application to urea and porphyrin. *J. Comput. Chem.* **2018**, *39* (13), 763-772.

3 Erfolgskontrollbericht

3.1 Beitrag zu den förderpolitischen Zielen

Die Nachwuchsgruppe konnte einen wesentlichen Beitrag zum förderpolitischen Ziel eines verbesserten Verständnisses grundlegender Vorgänge in organischen Solarzellen und deren Abhängigkeit von Strukturparametern leisten. Folgende wesentliche Erkenntnisse wurden gewonnen:

- *Quantifizierung und experimentelle Realisierung der Variationsbreite von LUMO-Energien durch supramolekulare Strukturvariationen*

Eine Abhängigkeit der LUMO-Energien von der supramolekularen Struktur konnte zwar theoretisch erwartet werden, wurde in unseren Arbeiten aber erstmalig experimentell demonstriert und quantifiziert. Es wurde dabei auch ein Modell entwickelt, das morphologische Größenskalen mit supramolekularen Energiedifferenzen vereint, um die experimentell gefundenen Abhängigkeiten zu beschreiben (Berücksichtigung der Anzahl von Oberflächen- und Bulk-Zuständen sowie supramolekulare Wechselwirkungen). Dieses Modell ist allgemeingültig und auf weitere Materialien anwendbar.

- *Anwendung / Erschließung von Grenzflächentechnologien auf / für die organische Photovoltaik*

Die klassische LB-Technik wurde bislang kaum zur Herstellung organischer Halbleiterschichten genutzt. In unseren Arbeiten wurde demonstriert, welche Prozess- und molekulare Parameter entscheidend sind, um die LB-Technik für die Herstellung wohl-definierter organischer Halbleiterfilme erfolgreich einsetzen zu können. Da dies einer der wesentlichen Schwerpunkte der Forschungsaktivitäten im Förderzeitraum war, können die erforschten Materialien gezielt eingesetzt werden, um weitere Aspekte der supramolekularen Struktur, wie Grenzflächenmorphologie und Leitfähigkeit, in Anschlussprojekten zu studieren.

- *Etablierung der LB-R2R-Technik*

Die LB-R2R-Technik erlaubt das kontinuierliche Herstellen organischer Halbleiterschichten mit wohl-definierter supramolekularer Struktur. Der Rückgriff auf diese Technik erlaubt Forschungsgruppen damit ein hohes Maß an Reproduzierbarkeit der Morphologie der herzustellenden Filme und erleichtert damit das systematische Auffinden grundlegender Zusammenhänge zwischen Morphologie und Solarzellparametern.

- *Entwicklung von Protokollen zur Realisierung von organischen Solarzellen mittels der Langmuir-Blodgett-Technik*

Die klassischen Protokolle zur Herstellung von organischen Solarzellen setzen eine Minimierung von Feuchtigkeit voraus. Dies steht im Widerspruch zur LB-Technik, bei der Aktivschichten an der Wasser-Luft-Grenzfläche synthetisiert werden. In der Nachwuchsgruppe konnte dieser

Widerspruch durch Verwenden der Langmuir-Schäfer-Technik und den Verzicht auf das wasserlösliche Lochleitermaterial PEDOT:PSS minimiert werden, sodass funktionierende Solarzellen resultierten. Diese Protokolle sind eine erste Grundlage zur Produktion von neuartigen, optisch anisotropen LB-Solarzellen, müssen in weiteren Projekten aber noch weiterentwickelt werden.

- *Entwicklung eines Programms zur automatischen Generation von energetisch günstigen molekularen Aggregatstrukturen*

Zur Vorhersage von supramolekularen Strukturen wurde in der Nachwuchsgruppe das Programm EnergyScan entwickelt¹, welches der wissenschaftlichen Gemeinschaft frei zur Verfügung steht. Aktuell entwickeln wir Skripte für einen automatisierten Ablauf, sodass EnergyScan im Routinebetrieb eingesetzt werden kann.

3.2 Wissenschaftlich-technische Ergebnisse, erreichte Nebenergebnisse und wesentliche Erfahrungen

Siehe Kapitel 2.1 des Schlussberichtes

3.3 Fortschreibung des Verwertungsplanes

Siehe Kapitel 2.4 des Schlussberichtes; im Folgenden werden die dort aufgeführten Punkte näher erläutert:

- *Supramolekulare Steuerung von LUMO-Energien:*
Nicht nur LUMO-Energien sondern faktisch alle für die organische Photovoltaik relevanten Materialeigenschaften hängen von der supramolekularen Struktur ab, wie in vielen Publikationen über empirische Morphologievariation gezeigt wurde. Nachdem die LB-Technik in der Nachwuchsgruppe etabliert, nun vollständig beherrscht wird und viel Erfahrung zum Einfluss von molekularen und Prozess-Parametern gesammelt wurde, kann der Einfluss der supramolekularen Struktur auf weitere optoelektronisch relevante Eigenschaften und Prozesse in Nachfolgeprojekten zu Grundlagenfragestellungen studiert werden. Diese könnten auf folgende Aspekte fokussieren:
 - Herstellung von Donor-(D)-Akzeptor-(A)-Grenzflächen und Steuerung der molekularen Orientierung und Durchmischung von A und D sowie Auswirkung der beiden Eigenschaften auf die Ladungstrennung und -Rekombination.

¹ Sachse, T., et al., A program for automatically predicting supramolecular aggregates and its application to urea and porphin. *J. Comput. Chem.* **2018**, 39 (13), 763-772.

- Weiterentwicklung des Protokolls zur Herstellung von LB-Solarzellen mit Fokus auf eine ausgeprägte Abhängigkeit der Transmission vom Einstrahlwinkel des Lichtes. Diese Forschung wird durch eine potentielle Fassadenintegration von organischen LB-Solarzellen getrieben, sodass organische Solarzellen tatsächlich exklusive Anwendungen adressieren können, bei denen Sie sich von anorganischen Silizium-Solarzellen abgrenzen. Mehrfachverglaste Fenster sind zudem ideale Umgebungen für organische Solarzellen, da integrierte Solarzellen dort vor UV-Strahlung, Wasser und Sauerstoff geschützt sind.

- *Homogene Orientierung linearer Chromophore:*

Eine blickwinkelabhängige Transparenz konnte bereits in ersten Experimenten für LB-Filme nachgewiesen werden. Diese Filme können bei ausreichender optischer Dichte als intelligente Sonnenschutzfolien eingesetzt werden, da sich die Transparenz für Sonnenlicht im Tagesverlauf ändert (vgl. schaltbare Konkurrenztechnologien auf Basis von Flüssigkristalldisplays - bspw. Merck ICRIVISION®). Der genannte LB-Ansatz wurde als Patent angemeldet (PCT Patentanmeldung - 17 195 284.9 und PCT/EP2017/082055) und als entsprechendes ZIM-Projekt 2018 beantragt. In einer weiteren Entwicklungsstufe können solche Filme perspektivisch als Donor-Akzeptor-Systeme kombiniert und zu teiltransparenten Solarzellen für die Fassadenintegration entwickelt werden.

- *LB-R2R-Technik-Kombination:*

Die LB-R2R-Technik bietet eine ungeheure Vielzahl an Anwendungsmöglichkeiten, die im Folgenden kurz skizziert werden sollen:

 - Automatisierung der Herstellung organischer Halbleiterproduktionen mit wesentlich verbesserter Reproduzierbarkeit supramolekularer Strukturen (siehe oben)
 - Herstellung zweidimensionaler Membranen (vgl. Carbon NanoMaterials - CNMs): In jüngster Vergangenheit wurden in der Nachwuchsgruppe erste Experimente zur Realisierung mechanisch stabiler zweidimensionaler Membranen mittels der LB-Technik durchgeführt. Da bei der LB-R2R-Technik die ganze Stärke der organischen und anorganischen Synthesechemie zum Tragen gebracht werden kann, steht zu erwarten, dass mittels der LB-R2R-Technik sehr viel zielgerichteter, schneller und kostengünstiger ultradünne Membranen mit definierten Eigenschaften hergestellt werden können als über die klassischen Vakuum- und Elektronenstrahlvernetzungstechniken die aktuell zur Herstellung von CNMs genutzt werden. Die Anwendung solcher Membranen ist sehr breit, von Filtration, Dialyse, Elektrochemie bis hin zu Solarzellen. Hier würden sich verschiedenste grundlagenwissenschaftliche Anschlussprojekte aber vor allem auch anwendungsorientierte Projekt und Ausgründungen anbieten. Aufgrund der Fülle möglicher Anwendungen steht in den nächsten Monaten die Identifizierung der attraktivsten Anwendung im Vordergrund.

3.4 Arbeiten, die zu keiner Lösung führten

Der wesentliche Teil der Arbeiten führte zu Lösungen; allerdings wurden die intensiven Bemühungen, mittels dipolarer Merocyanine supramolekulare Strukturen und Solarzellen herzustellen eingestellt als realisiert wurde, dass die entsprechenden Strukturen reorganisieren, insbesondere unter „photovoltaischen Bedingungen“, wie Beleuchten.

3.5 Präsentationsmöglichkeiten für mögliche Nutzer

Die oben genannten Ergebnisse wurden zum Teil auf verschiedenen Tagungen und Seminaren der wissenschaftlichen Gemeinschaft vorgestellt:

- 2014 Technologies for Polymer Electronics (Ilmenau, Germany)
- 2016 MRS Spring Meeting (Phoenix, USA)
- 2016 Gruppenseminar (Dr. Resch-Genger, BAM, Berlin, Deutschland)
- 2017 Gruppenseminar (Prof. Brütting, Experimental Physics, Augsburg University, Deutschland)
- 2017 Kolloquium des chemischen und physikalischen Instituts (eingeladen von Prof. Ritter, TU Ilmenau, Deutschland)
- 2017 Gruppenseminar (Dr. Stefan Buhmann, Quantum Optics and Statistics, Physikalisches Institut, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Freiburg, Deutschland)
- 2018 Institutskolloquium (Dr. Bernd Grünler, Innovent e.V.)
- 2018 Keynote-Vortrag auf der X International Conference “Solvation and complex formation in solutions” (Suzdal, Russland)
- 2018 Young scientists summer school “Modeling of smart materials” (Suzdal, Russland)

Weitere Präsentationen auf internationalen Konferenzen sollen folgen (insbesondere MRS Spring Meeting 2019).

3.6 Einhaltung der Ausgaben- und Zeitplanung

Die Ausgaben und Zeitplanung wurden während der Projektlaufzeit entsprechend des Bewilligungsbescheides vom 29.9.2016 aufgrund von hohem Aufwand in den APs 2 und 3 angepasst.

4 Kurzfassung des wissenschaftlichen Schlussberichts

In der Nachwuchsgruppe stand die Herstellung von organischen Filmen mit definierter supramolekularer Struktur im Vordergrund. Der Einsatz solcher Filme in Solarzellen erlaubt das detaillierte und systematische Studium des Einflusses der supramolekularen Struktur auf optoelektronische Materialeigenschaften und photovoltaischer Prozesse und stellt damit eine wertvolle Alternative zu empirischen Temperexperimenten zur Variation von Morphologie und supramolekularer Struktur dar. Für die Herstellung der definierten Filme wurde die Anordnung von amphiphilen Farbstoffen mittels der Langmuir-Blodgett-(LB)-Technik genutzt. Dafür wurde eine große Anzahl amphiphiler und systematisch variiertes Derivate neuartiger sowie etablierter Farbstoffe bzw. Halbleitermaterialien synthetisiert. Insbesondere der Einfluss von molekularen Funktionalisierungen und LB-Prozessparametern auf die Filmbildungseigenschaften und resultierenden supramolekularen Strukturen wurde mittels experimenteller und theoretischer Methoden (insbesondere LB-Isothermen-Analyse, Atomkraftmikroskopie, UV-vis Spektroskopie und Dichtefunktionaltheorie) untersucht. Ein weiterer Forschungsfokus lag auf der Abhängigkeit der optoelektronischen Materialeigenschaften von den supramolekularen Strukturen. So konnte unter anderem demonstriert werden, in wie weit die LUMO-Energien eines amphiphilen Fullerenderivates durch Variation der supramolekularen Struktur verändert werden können. Die erreichte LUMO-Energie-Variation von 120 meV konnte linear in eine Variation der offenen Klemmspannung in entsprechenden Solarzellen von 70 mV übersetzt werden. Zur Beschreibung der Abhängigkeit der LUMO-Energie von der supramolekularen Struktur aber auch von morphologischen Parametern, wie Korngrößen, wurde ein einfaches Modell entwickelt, welches auf jegliche Materialien anwendbar ist.

5 Weitere Verwendung der angeschafften Geräte

Alle im Rahmen der Nachwuchsgruppenförderung angeschafften Geräte befinden sich im Routinebetrieb der Arbeitsgruppe Presselt, die aus der Nachwuchsgruppe hervorgegangen ist. Diese Geräte werden für studentische Qualifizierungsarbeiten, Routineforschung sowie in Anschlussprojekten eingesetzt.