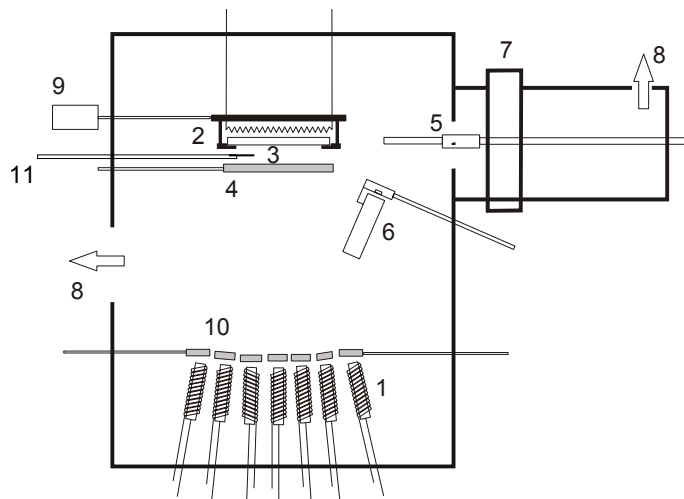


## Anhang

### A Die Hochvakuum-Beschichtungsanlage

Im Folgenden soll kurz die Hochvakuum-Beschichtungsanlage erläutert werden, mit der in der vorliegenden Arbeit die Beschichtung mit den organischen Materialien sowie der Aluminium-Elektrode vorgenommen wurden.

Die Anlage besteht aus der Hauptkammer, in der die Substrate beschichtet werden, und einer Schleuse (Abbildung A.1), die einen schnellen Transfer von Proben an Luft oder in die Stickstoffatmosphäre eines Inertgasarbeitsplatzes ermöglicht. Der Probentransport erfolgt mit Hilfe eines Zangenmanipulators, der die runden Substrathalter von einem Magazin in der Schleuse in die Hauptkammer bringt und dort auf dem Rotator ablegt. Die Rotation des Substrathalters während der Bedampfung gewährleistet eine homogene Beschichtung.

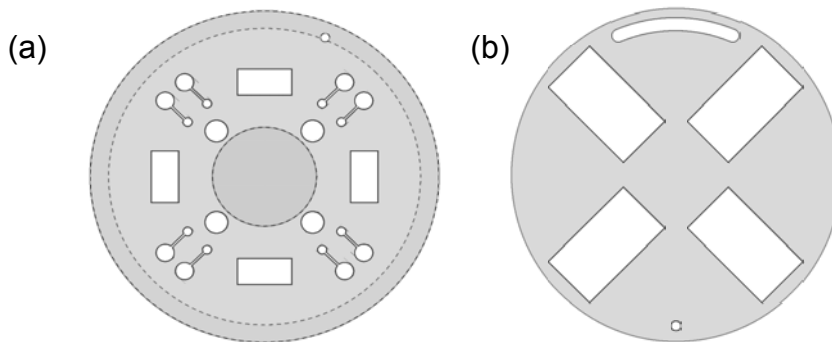


**Abbildung A.1:** Querschnitt der Hochvakuum-Beschichtungsanlage. Dargestellt sind die Effusoren (1), der Rotator mit Substratheizung (2), ein Substrathalter (3), der Substratdeckel (4), der Zangenmanipulator zum Transfer von der Schleuse in die Hauptkammer (5), ein Schwingquarz zur Schichtdickenkontrolle (6), das Ventil zur Schleuse (7), die Anschlüsse an die Turbopumpen (8), der Motor mit Drehdurchführung als Rotatorantrieb, die pressluftbetriebenen Effusorendeckel (10), und der Manipulator für den Maskenwechsel (11).

Als Effusoren werden Tiegel mit einer Widerstandsheizung eingesetzt. Für die Phthalocyanine,  $C_{60}$  und Bathocuproin bestehen die Tiegel aus Graphit. Sie sind mit einer Wasserkühlung die benachbarten Effusoren abgeschirmt. Lediglich das Aluminium wurde in einem Tiegel aus einer speziellen Keramik verdampft, der wiederum von einer Graphithülle gehalten wird. Insgesamt sind 12 Effusoren in der Anlage eingebaut, 3 für niedrige Temperaturen bis  $400\text{ °C}$  zur Verdampfung von Materialien wie Bathocuproin, 6 für mittlere Temperaturen von  $400\text{--}700\text{ °C}$  für die Verdampfung der Phthalocyanine und von  $C_{60}$  sowie 3 Effusoren für höhere Temperaturen, darunter der Aluminium-Effusor für Temperaturen bis zu  $1200\text{ °C}$ .

Die Temperatur jedes Effusors wurde einzeln mit Hilfe eines hierfür entwickelten Computerprogramms angesteuert, das den gleichzeitigen Betrieb mehrerer Effusoren z.B. für die Herstellung von Mischschichten durch Koverdampfung ermöglichte. Die Schichtdickenkontrolle erfolgte mit Hilfe von 4 verschiedenen Schwingquarzen, die durch ergänzende Messungen, insbesondere mit einem Profilometer [Vogel02] kalibriert wurden.

Die Schattenmaske, die einen Teil des Probenhalters bildet, ist in Abbildung A.2 (a) dargestellt. Die rechteckigen Öffnungen dienen der Bedampfung mit organischen Materialien, die runden Öffnungen der Bedampfung mit der Aluminium-Elektrode. Die Substratscheibe in Abbildung A.2 (b) fixiert mit ihren  $13 \cdot 24 \text{ mm}^2$  großen Öffnungen die Proben. Eine Führungsschiene, in die eine Schraube in der Schattenmaske greift, definiert zwei Positionen der Substrate relativ zu den Öffnungen der Schattenmaske. Der Schattenmaskenwechsel zwischen Beschichtung des Substrats mit den organischen Schichten und der Bedampfung mit Aluminium wurde wie folgt vorgenommen: Die Schattenmaske wurde mit Hilfe eines Manipulators (Abbildung A.1) festgehalten. Währenddessen wurde der Probenhalter mit Hilfe des Rotators gedreht. Dadurch wurde die Schattenmaske so weit verschoben, dass die Gruppe von runden Öffnungen vor das Substrat gelangte.



**Abbildung A.2:** Schattenmaske (a) und Substratscheibe (b), die Teil des Probenhalters für die Hochvakuum-Beschichtungsanlage sind. Die dunklere Einfärbung von Teilen der Schattenmaske deutet an, dass die Oberfläche dort um  $1/10 \text{ mm}$  erhaben ist.

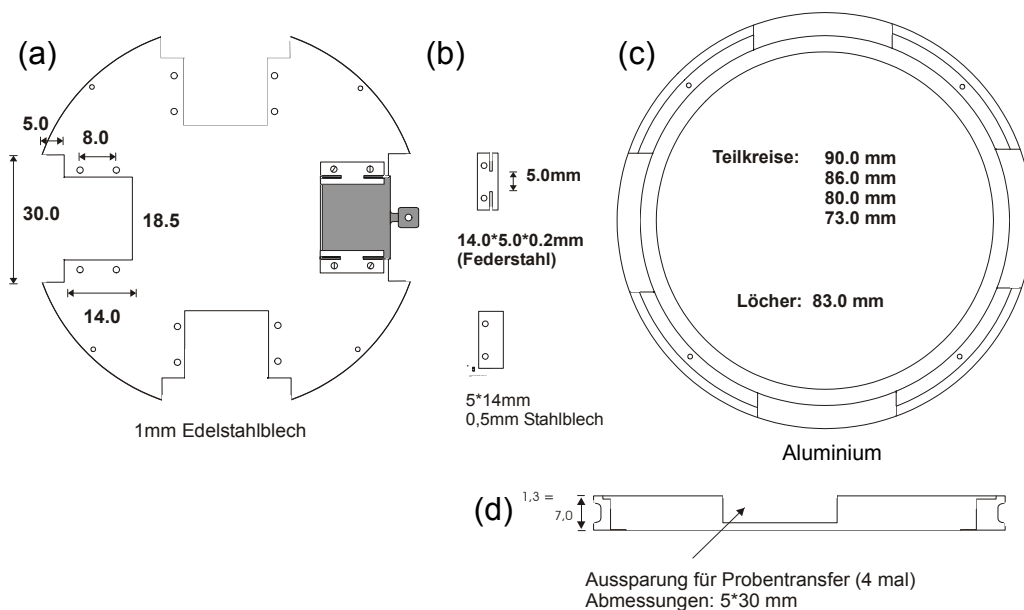
Die erhabenen Bereiche auf der Schattenmaske sorgten dafür, dass die aufgebrauchten Schichten während des Maskenwechsels nicht in Kontakt mit der Maske waren und deshalb nicht verkratzt werden konnten.

## B Technische Neuentwicklungen – Vakuumtransfersystem

Um Proben im Hochvakuum von der Beschichtungsanlage zum Kammerystem der Photoelektronenspektroskopieanlage mit Hilfe einer bestehenden Vakuumtransportkammer zu transferieren, waren umfangreiche Anpassungen an der Beschichtungsanlage notwendig. Diese Anpassungen waren:

1. Entwurf und Bau eines Probenträgerhalters, der die Manipulation von Probenträgern, die mit der Vakuumtransportkammer und der Photoelektronenspektroskopieanlage kompatibel sind, in der Beschichtungsanlage ermöglichte.
2. Entwurf und Bau einer zusätzlichen Transferkammer mit eigenem Manipulator. Dies war notwendig, da mit dem Manipulator der bestehenden Vakuumtransportkammer nicht der benötigte Hub von über 60 cm aufgebracht werden konnte, um Proben aus der Beschichtungsanlage zu entnehmen.

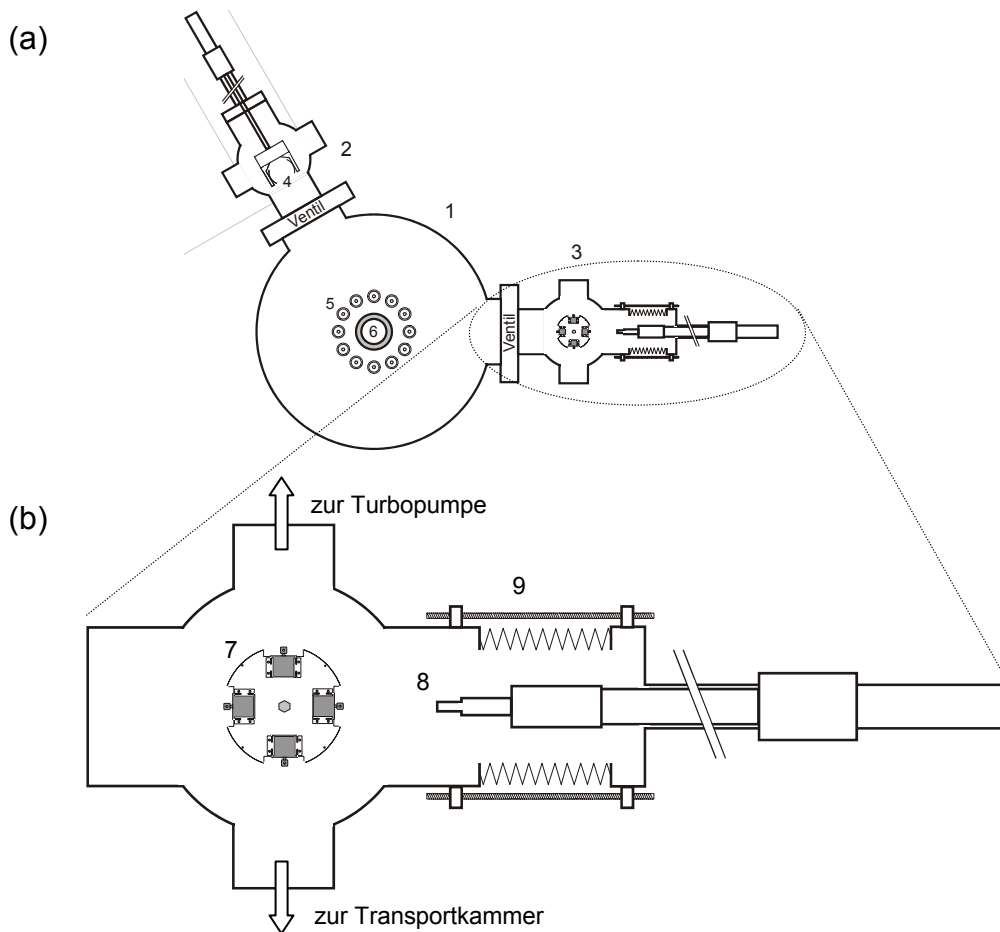
Abbildung B.1 zeigt die Einzelteile des neuen Probenträgerhalters. Das runde Stahlblech mit Aussparungen (Abbildung B.1 (a)) sowie ein Federblech und ein Führungsblech (Abbildung B.1 (b)), die oberhalb und unterhalb mit Schrauben daran befestigt werden, dienen dazu, die Molybdänprobenträger (grau ausgefüllt in Abbildung B.1 (a)) zu fixieren. Der Aluminiumring (Abbildung B.1 (c) und (d)) wird mit dem Stahlblech verschraubt und erlaubt die Manipulation mit dem Zangenmanipulator der Schleuse der Beschichtungsanlage. Die vier Aussparungen erlauben es, die Probenträger einzeln mit dem Manipulator der Transferkammer zu entnehmen.



**Abbildung B.1:** Konstruktionszeichnungen der Einzelteile des Probenträgerhalters, der die Manipulation von Probenträgern der Photoelektronenspektroskopieanlage in der Beschichtungsanlage erlaubt. (a) und (b): Stahlbleche zur Fixierung von 4 Probenträgern. Diese werden mit einem Aluminiumring ((c) und (d)) verschraubt, der durch den Zangenmanipulator der Beschichtungsanlage gegriffen werden kann und gleichzeitig die Entnahme einzelner Probenträger mit einem weiteren Manipulator ermöglicht.

Abbildung B.2 (a) zeigt schematisch das Kammerystem der Hochvakuum-Beschichtungsanlage (vgl. Anhang A) mit Präparationskammer (1), Schleuse (2)

und neu angebaute Transferkammer (3). Die Proben können mit Hilfe der Schleuse (2) und des Zangenmanipulators (4) innerhalb von ca. 15 Min. in die Präparationskammer gebracht werden. Die Beschichtung erfolgt durch die Effusoren (5). Während der Beschichtung befindet sich der Probenträgerhalter auf einem Rotator (6).



**Abbildung B.2:** (a) Kammersystem mit Präparationskammer (1), Schleuse (2) und neu angebaute Transferkammer (3). In der Schleuse ist der Zangenmanipulator (4) zu erkennen, in der Beschichtungskammer sind die Effusoren (5) und der Rotator (6) angedeutet. (b) Transferkammer mit Probenrad (7), Manipulator (8) und Justier Vorrichtung aus einem Balg und Gewindestangen (9).

Die Entnahme der einzelnen Probenträger erfolgt mit Hilfe des Manipulators der Transferkammer, die in Abbildung B.2 (b) vergrößert dargestellt ist. Das Probenrad (7) in der Transferkammer ist auf einer Dreh- und Hubdurchführung befestigt, so dass der Manipulator (8) darüber hinweg bis in die Präparationskammer gefahren werden kann. Das Rad ist hier mit vier Probenhaltern in den vier Positionen dargestellt. Zur präzisen Aufnahme der Probenträger in der Präparationskammer war eine Justierung des Manipulators unerlässlich. Diese konnte mit Hilfe von vier Gewindestangen und eines Balges (9) vorgenommen werden.

Die Übernahme der Probenträger aus der Transferkammer erfolgte durch den Manipulator der Transportkammer. Einige kleinere Anpassungen am Probenrad der Transferkammer, auf die hier nicht näher eingegangen werden soll, stellten Kompatibilität mit diesem Manipulator her. Der Probentransfer von der Transportkammer in die Photoelektronenspektroskopieanlage konnte ohne größere apparative Anpassungen vorgenommen werden.

## C Ergänzende Literaturübersicht zur Bestimmung chemischer Komponenten der Indium-Zinnoxid-Oberfläche

Zur Interpretation der Bindungsenergiewerte der XPS-Spektren in Abschnitt II.2 wurden umfangreiche Literaturdaten gesammelt. Oft gründet die Interpretation der Spektren in Abschnitt II.2 auf eine Vielzahl von Quellen. Diese werden hier ergänzend aufgeführt. Dabei wird jeweils zu einer Bindungsenergie eine Kurzbeschreibung der Probe und die Interpretation der Autoren angegeben.

Es werden Daten für die Elemente Sauerstoff (O1s, Tabelle C.1), Indium (In3d<sub>5/2</sub>, Tabelle C.2) und Zinn (Sn3d<sub>5/2</sub>, Tabelle C.3) als Bestandteile von Indium-Zinnoxid (ITO) angegeben. Zur Interpretation der Bindungsenergiewerte von phosphorsäure- und periodsäurebehandelten ITO-Proben dienen die Literaturdaten zu den Rumpfniveaus von Phosphor (P2p, Tabelle C.4) und Iod (I3d<sub>5/2</sub>, Tabelle C.5).

**Tabelle C.1:** O1s-Bindungsenergiewerte aus der Literatur

<b>O1s</b>				
Bindungsenergie (eV)	Probe	Interpretation	Ref.	
530,3	Lösemittelgereinigtes ITO	In <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Song01	
530,5	Lösemittelgereinigtes ITO	In <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Nguyen02	
530,6	In <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	In <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Hewitt80	
530,7	Lösemittelgereinigtes ITO	In <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Papaef04	
530,8	SnO <sub>2</sub>	SnO <sub>2</sub>	Moses78	
531,0	SnO <sub>2</sub>	SnO <sub>2</sub>	Kato97	
531,2	InOOH	InOOH	Donley02	
531,3	In(OH) <sub>3</sub>	In(OH) <sub>3</sub>	Donley02	
531,5	Lösemittelgereinigtes ITO	C-O-Verbindungen	Song01	
531,6	In(OH) <sub>3</sub>	In(OH) <sub>3</sub>	Wagner80	
531,9	In <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	In(OH) <sub>3</sub> oder ads. O <sub>2</sub>	Hewitt80	
532,0	Oxidiertes InP	InH <sub>x</sub> PO <sub>4</sub> oder In(OH) <sub>x</sub>	Thurga90	
532,4	Lösemittelgereinigtes ITO	In-OH-Gruppen	Papaef04	
532,5	Lösemittelgereinigtes ITO	In-O-H-Verbindungen	Nguyen02	
532,9	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O	Wagner80	
533,0	Lösemittelgereinigtes ITO	H <sub>2</sub> O	Kim99	
533,2	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O	Nefedo75, zit. n. NIST03	
533,3	Oxidiertes Fe	H <sub>2</sub> O	Grosve04	
534,0	V <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> O	Toleda01	

**Tabelle C.2:**  $In3d_{5/2}$ -Bindungsenergiewerte aus der Literatur.

Bindungsenergie (eV)	$In3d_{5/2}$		Ref.
	Probe	Interpretation	
443,9	Lösemittelgereinigtes ITO	$In_2O_3$	Donley02
444,3	InOOH	InOOH	Donley02
444,9	Lösemittelgereinigtes ITO	$In(OH)_3$	Donley02
444,7	Lösemittelgereinigtes ITO	$In_2O_3$	Song01
444,7	Oxidierter In-Folie	$In_2O_3$	Lin77
444,8	Ar+-gesputtertes ITO	$In_2O_3$	Yoshio00
444,9	$In_2O_3$	$In_2O_3$	Hewitt00
445,0	Lösemittelgereinigtes ITO	$In_2O_3$	Papaef04
445,1	Oxidiertes InP	$In(OH)_3H_2O$	Faur90
445,2	Oxidiertes InP	$In(OH)_3$	Faur90
445,6	Oxidiertes InP	$InPO_4$ oder $In(OH)_3$	Wager81
445,6	Oxidiertes InP	$(In)_xH_yPO_4$	Thurga90
445,6	$InP + H_3PO_4$	$InPO_4$ oder $In(OH)_x$	Mouton90
445,2-446,0	$InI_3$	$InI_3$	Wagner78
446,0	Lösemittelgereinigtes ITO	$In(OH)_x$	Nguyen02
446,3	Lösemittelgereinigtes ITO	$In_x(OH)_y$	Papaef04

**Tabelle C.3:**  $Sn3d_{5/2}$ -Bindungsenergiewerte aus der Literatur.

Bindungsenergie (eV)	$Sn3d_{5/2}$		Ref.
	Probe	Interpretation	
485,6	$SnO_2$	$Sn^{2+}$	Themli92
485,8	Lösemittelgereinigtes ITO	$SnO_2$	Donley02
486,5	Lösemittelgereinigtes ITO	$Sn^{2+}$	01
486,7	Lösemittelgereinigtes ITO	$Sn^{2+}$	Lee02
486,8	Lösemittelgereinigtes ITO	Sn-OH-Verbindungen	Donley02
487,0	$SnO_2$	$Sn^{4+}$	Themli92
487,0	$SnO_2$	$SnO_2$	Kato97
487,4	SnO auf $SiO_2$	SnO	Jiméne96
487,5	Lösemittelgereinigtes ITO	$Sn^{4+}$	Yu01
487,7	Lösemittelgereinigtes ITO	$Sn^{4+}$	Lee02
487,9	Sn auf NiTi	$SnO_2$	Silvain04
488,3	$SnO_2$ auf $SiO_2$	$SnO_2$	Jiméne96

**Tabelle C.4:** P2p-Bindungsenergiewerte aus der Literatur.

Bindungsenergie (eV)	P2p		Ref.
	Probe	Interpretation	
133,9	$KH_2PO_4$	$K^+ H_2PO_4^-$	Pelavi69
134,15	$InPO_4$	$InPO_4$	Franke91
134,2	Oxidiertes InP	$InPO_4$	Faur90
134,2	V behandelt mit $H_3PO_4$	$VO^+ H_2PO_4^-$	Asunsk03
134,3	Oxidiertes InP	$In_xH_yPO_4$	Thurga90

**Tabelle C.5:**  $I3d_{5/2}$ -Bindungsenergiewerte aus der Literatur.

Bindungsenergie (eV)	Probe	$I3d_{5/2}$ Interpretation	Ref.
619,1	$InI_3$	$InI_3$	Freela77
619,8	$I_2$	$I_2$	Sherwood76
623,1	$HIO_3$	$HIO_3$	Sherwood76
623,3	$I_2O_3$	$I_2O_3$	Sherwood76
624,0	$NaIO_4$	$NaIO_4$	Sherwood76





**D Abkürzungsverzeichnis**

AFM	Atomic Force Microscope - Rasterkraftmikroskop
BE	Bindungsenergie
CuPc	Kupfer-Phthalocyanin
EQE	Externe Quantenausbeute
FWHM	Full width half maximum - Halbwertsbreite
HOMO	Highest occupied molecular orbital – höchstes besetztes molekulares Orbital
i.d.R.	in der Regel
IQE	Interne Quantenausbeute
ITO	Indium-Zinnoxid
KPFM	Kelvin Probe Force Microscopy – Kelvin-Kraftsondenmikroskopie
LUMO	Lowest unoccupied molecular orbital – niedrigstes unbesetztes molekulares Orbital
OLED	Organische Leuchtdiode
Pc	Phthalocyanin
PES	Photoelektronen-Spektroskopie
SEEK	Sekundärelektronenemissionskante
SEM	Scanning electron microscope - Rasterelektronenmikroskop
UHV	Ultra-Hochvakuum
unbeh.	unbehandelt
UPS	UV-Photoelektronen-Spektroskopie
vgl.	vergleiche
w. E.	willkürliche Einheiten
XPS	Röntgen-Photoelektronen-Spektroskopie
ZnPc	Zink-Phthalocyanin



## E Symbolverzeichnis

Symbol	Einheit	Bezeichnung
$A$	Vs/m	Vektorpotential
$A_A$	eV	Elektronenaffinität des Akzeptormoleküls
$A_{as}$	-	opt. Absorption in der aktiven Schicht einer Solarzelle
$A_{sub}$	-	opt. Absorption im Substrat einer Solarzelle
$c$	m/s	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ( $2,998 \cdot 10^8$ )
$d$	nm	Schichtdicke
$e$	C	Elementarladung ( $1,602 \cdot 10^{-19}$ )
$E_{B\ cutoff}$	eV	Bindungsenergie der Kante des höchsten bestetzten molekularen Orbitals (HOMO) auf Seite niedriger Bindungsenergien
$E_{B\ Kante}$	eV	Bindungsenergie der Kante des höchsten bestetzten molekularen Orbitals (HOMO) auf Seite niedriger Bindungsenergien
$E_{B\ Max}$		Bindungsenergie des Maximums des höchsten bestetzten molekularen Orbitals (HOMO)
$\Delta E_D$	eV	Detektorverbreiterung
$E_F$	eV	Fermi-Niveau
$E_g$	eV	Bandlücke
$E_{HOLU}$	eV	Differenz der Bindungsenergien des LUMOs des Akzeptors und des HOMOs des Donators
$E_{kin}$	eV	kinetische Energie
$E_{Vak}$	eV	lokales Vakuumniveau einer Oberfläche
$E_{Vak(\infty)}$	eV	absolutes Vakuumniveau
$eD$	eV	Grenzflächendipol
$\eta$	%	Wirkungsgrad einer Solarzelle
$\eta_{CC}$	%	Anteil der Ladungsträger, die von den Elektroden gesammelt werden
$\eta_{ED}$	%	Anteil der Exzitonen, die die Donator-Akzeptor-Grenzfläche einer Solarzelle erreichen
$\eta_{ET}$	%	Anteil der Exzitonen an der Donator-Akzeptor-Grenzfläche, die dort getrennt werden
$\eta_{ext}$	%	externe Quantenausbeute einer Solarzelle
$\eta_{int}$	%	interne Quantenausbeute einer Solarzelle
$\Phi$	eV	Austrittsarbeit
$FF$	-	Füllfaktor einer Solarzelle
$\hbar$	J·s	Plancksches Wirkungsquantum ( $6,626 \cdot 10^{-34}$ ) geteilt durch $2\pi$
$H_w$	J	Störoperator
$I_{D^*}$	eV	Ionisierungsenergie des angeregten Donatormoleküls
$I_D$	A	Diodenstrom
$IE$	eV	Ionisierungsenergie
$I_m$	A	Stromkoordinate des Arbeitspunktes einer Solarzelle
$J_{sc}$	mA/cm <sup>2</sup>	Kurzschlussstromdichte einer Solarzelle
$k_B$	J/K	Boltzmannkonstante ( $1,381 \cdot 10^{-23}$ )
$L_D^{Ex}$	nm	Exzitonendiffusionslänge
$L_D^{n,p}$	nm	Ladungsträgerdiffusionslänge

$\mu$	cm <sup>2</sup> /Vs	Ladungsträgermobilität
$m$	kg	Masse
$n$	-	Diodequalitätsfaktor
$p$	kg·m/s	Impuls
$p$	mbar	Druck
$P_{Licht}$	W	einstrahlende Lichtleistung
$P_{max}$	W	Leistung einer Solarzelle am Arbeitspunkt
$R_{sz}$		opt. Reflexion einer Solarzelle mit Al-Rückelektrode
$R$	%	relative Reflexion
$T$	%	relative Transmission
$\tau$	s	Ladungsträgerlebensdauer
$U_C$	eV	Coulomb-Energie von ionisiertem Donator- und Akzeptormolekül
$V_b$	eV	Bandverbiegung
$V_m$	V	Spannungskoordinate des Arbeitspunktes einer Solarzelle
$V_{oc}$	V	Leerlaufspannung einer Solarzelle
$w_{fi}$	s <sup>-1</sup>	Übergangsrate nach Fermis Goldener Regel
$ \Psi_i\rangle$		Anfangszustand
$ \Psi_f\rangle$		Endzustand
$\omega$	s <sup>-1</sup>	Kreisfrequenz elektromagnetischer Strahlung