

**Chemical engineering of the electronic properties  
of ITO-organics interface in  
Phthalocyanine/C<sub>60</sub>-Fullerene organic solar cells**

Inaugural-Dissertation  
to obtain the academic degree  
Doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)  
submitted to the Department of Biology, Chemistry and Pharmacy  
of Freie Universität Berlin

by

**Boyan Johnev**

from Sofia, Bulgaria

Berlin, November 2005

Prepared at Hahn-Meitner Institut, Berlin, department SE2,  
in the group “Organic Solar Cells” of Dr. Konstantinos Fostiropoulos

1<sup>st</sup> reviewer: Prof. Dr. Helmut Tributsch  
2<sup>nd</sup> reviewer: Dr. Christian-Herbert Fischer

Date of defense: 10.02.2006

## Table of contents

1	Introduction and theoretical part.....	6
1.1	Organic photovoltaic devices.....	6
1.2	Zn-Phthalocyanine - C <sub>60</sub> heterojunction cell architecture.....	8
1.3	Theoretical model and energy diagram.....	9
1.4	Stability and reproducibility problems .....	11
1.5	Topics and goals of the present work .....	12
2	Experimental part: Methods, Reagents, Syntheses .....	13
2.1	Environments.....	13
2.2	Chemicals, reagents and materials.....	13
2.3	Cleaning procedure for ITO.....	14
2.4	ITO Passivations.....	15
2.5	Conventional treatment – PEDOT:PSS Spin-coating.....	15
2.6	Syntheses .....	16
2.6.1	8-Hydroxyquinoline deposition .....	16
2.6.2	Zinc-Phthalocyaninetetraphosphonic acid synthesis .....	18
2.7	Solar cell production in UHV .....	21
2.8	Electrical characterization of solar cells .....	24
2.9	X-ray reflection.....	28
2.10	Ellipsometry .....	30
2.11	Kelvin Probe Force Microscopy (KPFM) .....	32
3	Results and discussion.....	33
3.1	Studies on ITO.....	33
3.1.1	Scanning Electron Microscopy.....	33
3.1.2	Different ITO types by resistance.....	36
3.1.3	Annealing/Resistance .....	38
3.1.4	Work function - KPFM, XPS .....	40
3.2	Active layers stability tests – FTIR.....	42
3.3	UV-VIS Spectroscopy of cell layers and computer simulation .....	46
3.3.1	Practical measurement of R and T; n and k calculation.....	46
3.3.2	Optical simulation and result discussion.....	50

3.4	Layer thickness measurements .....	54
3.4.1	Profilometer measurement .....	54
3.4.2	X-ray reflection .....	55
3.4.3	Ellipsometry .....	60
3.5	Different ITO passivations and their I/V results .....	63
3.5.1	Spin coating.....	63
3.5.2	Monolayer sublimation-deposition.....	65
3.5.3	Electro-codeposition.....	66
3.5.4	Dipping.....	67
3.5.4.1	HCl.....	67
3.5.4.2	H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> .....	68
3.5.4.3	HIO <sub>4</sub> .....	70
3.5.4.4	NH <sub>3</sub> .....	72
3.5.5	Further analysis of ITO passivations .....	73
3.5.5.1	SEM .....	73
3.5.5.2	KPFM.....	75
3.5.5.3	XPS .....	83
3.5.6	Short review and estimation of the passivations .....	84
3.6	ZnPc4P – a chemically engineered passivation material.....	85
3.6.1	I/V characterization .....	88
3.6.2	SEM.....	90
3.6.3	KPFM.....	95
3.6.4	XPS .....	96
3.6.5	FTIR of ZnPc4P on TiO <sub>2</sub> P25 .....	96
3.7	Cell up scaling and space resolved I/V measurements.....	99
4	Ca and Mg as counter electrode materials.....	102
5	Summary .....	105
6	Zusammenfassung.....	108
7	Appendix.....	111
6.1	Appendix A: Theoretical basis of material constants “n” and “k” calculation .....	111
6.2	Appendix B: Cell up-scaling – sample holder, mask, encapsulation ...	121
8	Literature and references.....	124

## 5 Summary

In this work, organic solar cells consisting of Zinc Phthalocyanine (ZnPc), Fullerene (C<sub>60</sub>) and Bathocuproine (BCP), with an overall thickness of about 70 nm, were studied. In this layer system, interface processes dominate over their bulk properties. The most challenging interfaces in these cells are between inorganic electrodes and organic photoactive layers, where an ohmic contact is difficult to achieve. In the present dissertation, a comprehensive study of the Indium-Tin Oxide (ITO)-organics interface was carried out. The main topic of this work is to improve the contact resistance by chemical passivation of ITO surface and enhance charge carrier transport through this interface.

The surface of the ITO electrode, as the main focus of the current dissertation, was thoroughly examined, before any modifications were undertaken. To establish an understanding of the commercial ITO substrates, a comparison between different ITO types, offered by the industry was made. On the basis of optical transmission, electrical resistance and surface homogeneity, 5 ohm ITO was chosen as a solar cell substrate.

Annealing of the ITO electrode and measuring its resistance in situ, showed that up to 250°C this TCO can be reversibly heated and cooled. Irreversible change in resistance appears to happen above this temperature. The work function of ITO, as an important parameter and a reference value, was measured using X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS) and Kelvin Probe Force Microscope (KPFM). The resultant values were in good agreement: 4,2±0,1 and 4,3±0,2 eV, respectively.

The chemical stability of the active layer materials, under air and UV irradiance was examined using Fourier-Transform Infrared Spectroscopy (FTIR) spectroscopy. No significant change in substance IR absorption spectrum, before and after air/UV treatment, was observed. The initial purity of the material 99%, rest unchanged.

An optical study of the solar cell was made, with a computer simulation. For this, layer thickness, refraction index (**n**) and extinction coefficient (**k**) for each cell material were supplied to a computer program. **n** and **k** were calculated from spectroscopic measurements of material reflection and transmission in the visible region. The optical cell simulation yielded the sun light intensity distribution in the solar cell, depending on the material properties. The simulation showed that the good absorption properties of ZnPc and C<sub>60</sub> are not fully utilized. The intensity distribution of the wavelengths, beneficial for the two materials (570-720 nm for ZnPc, 420-520 nm for C<sub>60</sub>), is very wide, thus no wavelength is absorbed completely by the narrow layers. This is an indication of the big potential of these solar cells, if geometry can be modified. In addition, the optical simulation demonstrates, that wavelengths around the sun energy

## 5 Summary

---

spectrum maximum ( $\approx 540$  nm) are very weakly absorbed, thus broadening the potential of these cells to better absorption through additional absorber dye mixing or extending the current absorption with chemical modifications.

The optical simulation of the solar cell emphasized on the importance of precise layer thickness. As a standard, calibration of the deposition controllers is done with profilometer, despite its 10% error. The calibration was revised with X-ray reflection and Ellipsometry. X-ray reflection showed for ZnPc 20% and for C<sub>60</sub> 7% higher thicknesses, than measured with the deposition controllers. Ellipsometry confirmed for ZnPc and C<sub>60</sub> a thickness with 14%, respectively 17% higher, than by the measurements of the deposition controllers. The structure of the ZnPc film was determined with a fit of the x-ray reflection data and two different molecule orientations were found. Ellipsometry proved BCP and C<sub>60</sub> to have too high roughness for x-ray analysis.

As the main highlight of the present work, the chemical modification of the ITO surface with monomolecular layer, has the objectives to adjust its conduction band to the valence band (HOMO) of ZnPc and improve the electrical conductivity through this interface. Two general approaches were examined.

Introducing an aromatic passivation on the ITO surface, consisting of covalently bound 8-Hydroxyquinoline, yielded a solar cell with 1,3% efficiency ( $\eta$ ), compared to 0,8% for untreated ITO. The cell parameter, contributing mostly for this improvement, is the increased short circuit current ( $J_{sc}$ )  $5,5 \cdot 10^{-3} \text{ A/cm}^2$ . The corresponding value for  $J_{sc}$  of untreated ITO cell is  $4,56 \cdot 10^{-3} \text{ A/cm}^2$ . Comparison showed also, that the fitted serial resistance ( $R_s$ ) of the passivated cell  $15,19 \pm 0,28 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}^2$  is roughly four times less than the one for non-passivated ITO cell  $63,25 \pm 0,76 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}^2$ . Most likely, the serial resistance is influenced by improved contact resistance, at this interface. Since conductivity between ITO and ZnPc is improved with an aromatic termination of the ITO surface, it is concluded that an aromatic ITO passivation is helpful for the cell performance.

Creation of a surface dipole, by dipping ITO in acidic solutions, increased its work function from  $4,2 \pm 0,2$  eV for untreated ITO to  $4,8 \pm 0,1$  eV for H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> passivated and  $4,8 \pm 0,1$  eV for HIO<sub>4</sub> passivated ITO. This had positive influence on the solar cell parameters. Improved were mainly the fill factor (FF) and  $J_{sc}$  which for H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> passivated ITO were: FF 0,54%,  $I_{sc}$   $6 \cdot 10^{-3} \text{ A/cm}^2$  and for HIO<sub>4</sub> FF 0,54%,  $I_{sc}$   $5,28 \cdot 10^{-3} \text{ A/cm}^2$ . The cell parameter improvement contributed to the efficiency ( $\eta$ ) the following way:  $\eta_{\text{H}_3\text{PO}_4}$  1,72%,  $\eta_{\text{HIO}_4}$  1,5%. Both acid passivations brought the  $R_s$  of the solar cells to very lower values,  $3,06 \pm 0,0025 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}^2$  for H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> and  $2,82 \pm 0,039 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}^2$  for HIO<sub>4</sub>, thus improving the contact resistance of the ITO-ZnPc interface and charge carrier transport from the organic layer to the TCO electrode. XPS proved that phosphoric acid creates very stable (up to  $\approx 300^\circ\text{C}$ ) adsorption species on ITO surface.

## 5 Summary

---

A surface dipole in the opposite direction, created with an alkaline treatment of ITO ( $\text{NH}_3$  solution), ruined the solar cell, which showed no photocurrent at all.

From all tested ITO surface chemical modifications, organic and acid passivations had the biggest contribution to solar cell performance.

To combine both requirements contributing to cell performance, aromatic passivation and anionic (acid) surface dipole, a new chemical passivation for ITO was designed, namely Zincphthalocyaninetetraphosphonic acid (ZnPc4P). This concept of combining organic and acid in one substance for TCO passivation was never reported before. ZnPc4P was never used for a TCO passivation in organic solar cells up to the present. It is a water soluble, aromatic acid molecule, even from the phthalocyanine class. It has four  $-\text{PO}_3\text{H}_2$  groups, covalently bound to the benzene rings of the four benzopyrrole rests. The acid groups were chosen by the high stability of adsorbed phosphate species on ITO, proven by XPS studies. ZnPc4P retained this property, so that after passivating ITO with it, the blue coloration could not be removed by washing with water. This passivation created a surface dipole, which pushed the ITO work function to the highest value of 5,2 eV, comparable to that of PEDOT:PSS. Solar cells, made on ITO passivated with ZnPc4P, had the highest FF ever observed by us: 57%. The open circuit voltage ( $V_{oc}$ ) is at the upper limit, which this cell concept ever showed 0,54V.  $J_{sc}$  with a value of  $4,2 \cdot 10^{-3} \text{ A/cm}^2$  was not significantly improved. The fitted  $R_s$  of the cell  $2,55 \pm 0,1 \Omega \cdot \text{cm}^2$  is the lowest ever measured by us and is attributed to an improved contact resistance on the ITO-ZnPc interface.  $R_p$  of  $1351 \pm 62 \Omega \cdot \text{cm}^2$  is almost the double, compared to other passivations, and stands for extremely low recombination of charge carriers and lack of leakage currents. Although the power conversion efficiency is 1,3%, the influence of this new treatment on the cell parameters proves the potential of the cell concept.

In order to obtain a better understanding of  $V_{oc}$ , a counter-electrode study was made, where instead of the standard aluminum, Ca and Mg as materials with different work function were used. It showed that  $V_{oc}$  is in linear dependence of the back-electrode work function in these solar cells. This was attributed to the creation of an energetic barrier hindering electron transport from the bulk to the contact.

It can be summarized, that in the present dissertation the charge transport through the interface ITO-organics in ZnPc/ $\text{C}_{60}$  organic solar cells was studied and optimized. Using a self designed chemical passivation, the work function of ITO electrode was adjusted for optimal charge transport. It is shown that driving the TCO work function to higher values exhausts its contribution to cell improvement, so different ways of optimization have to be sought. In this work it was shown that mono-molecular layers can be used as buffers in solar cells and thus they can be made thinner and economical in production through buffer layer substitution.

### 6 Zusammenfassung

Diese Arbeit befasst sich mit der Untersuchung einer organischen Solarzelle, deren aktive Schichten aus Zink-Phthalocyanin (ZnPc), Fullerenen ( $C_{60}$ ) und Bathocuproin (BCP) mit einer Gesamtdicke von 70 nm bestehen. Innerhalb dieses Systems dominieren Grenzschichtenprozesse gegenüber den Volumeneigenschaften. Diejenigen Grenzflächen, die die größte Herausforderung darstellen, liegen zwischen anorganischen Elektroden und organischen, photoaktiven Schichten, in deren Bereich ein ohmscher Kontakt nur schwer hergestellt werden kann. In der vorliegenden Dissertation wurde eine umfassende Studie über die Grenzfläche zwischen Indium-Zinnoxid (ITO) und organischer Schicht durchgeführt. Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt auf der Reduktion des Kontaktwiderstandes durch chemische Passivierung der ITO-Oberfläche, um eine Verbesserung des Ladungstransports durch diese Grenzfläche zu erreichen.

Die Oberfläche der ITO-Elektrode ist ein Fokus der vorliegenden Dissertation und wurde deshalb eingehend untersucht, bevor jegliche Modifizierungen vorgenommen wurden. Zum besseren Verständnis kommerzieller ITO-Substrate wurden unterschiedliche, von der Industrie zur Verfügung gestellte ITO-Typen verglichen. Durch Gegenüberstellung der optischen Transmissionen, elektrischen Widerstände und Oberflächenhomogenitäten wurde ein ITO mit 5 Ohm/square als besonders geeignet ausgewählt.

In-situ-Messungen des Widerstandes solcher Elektroden in Temperexperimenten zeigten, dass dieser sich bis 250°C mit der Temperatur reversibel ändert. Irreversible Veränderungen hinsichtlich des Widerstands scheinen erst oberhalb dieser Temperatur einzutreten. Die Austrittsarbeit von ITO als wichtiger Parameter und als Referenzwert wurde mittels Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS) und Kelvinsondenkraft-mikroskopie (KPFM) gemessen. Die daraus resultierenden Messwerte,  $4,2\pm 0,1$  und  $4,3\pm 0,2$  eV, verzeichneten eine gute Übereinstimmung.

Die chemische Stabilität von ZnPc und  $C_{60}$  unter dem Einfluss von Luft und UV-Bestrahlung wurde mittels Fourier-Transform-Infrarot-(FTIR)-Spektroskopie untersucht. Nach der Luft/UV-Behandlung waren im IR-Absorptionsspektrum der Substanzen keine signifikanten Veränderungen zu beobachten. Die anfängliche Reinheit des 99%-igen Materials blieb unverändert.

Für eine optische Studie der Zelle wurden die einzelnen Schichten in Transmission und Reflexion spektroskopisch vermessen. Aus diesen Spektren wurden dann Brechungsindex  $n$  und Extinktionskoeffizient  $k$  für den ganzen sichtbaren Spektralbereich berechnet. Diese Werte dienen in einer optischen Computersimulation zur Bestimmung der Intensitätsverteilung innerhalb der Zellschichten. Die Simulation demonstrierte, dass die guten Absorptionseigenschaften von ZnPc und  $C_{60}$  nicht vollständig genutzt werden. Die (stationäre) räumliche Intensitätsverteilung bei den Wellenlängen, die in den beiden Materialien absorbiert werden können (570-720 nm für ZnPc, 420-520 nm für  $C_{60}$ ), ist viel breiter als die entsprechende Schicht. Daher wird in beiden Fällen das Licht von den Schichten nicht vollständig absorbiert. Außerdem treffen die Intensitätsmaxima der genannten Spektralbereiche nicht in die Mitte der Schichten. Daraus ergibt sich das große Potential dieser Solarzellen, falls



## 6 Zusammenfassung

---

die Geometrie modifiziert werden kann. Zudem zeigt die Studie, dass Wellenlängen nahe dem Maximum des Sonnenenergiespektrums ( $\approx 540$  nm) wenig absorbiert werden. D.h. diese Zelle hat weiteres Potential die Absorption dadurch zu verbessern, dass einerseits durch Beimischung von zusätzlichen Farbstoffen oder andererseits durch Verbreiterung der aktuellen Absorption mittels chemischer Modifikationen.

Die optische Simulation der Solarzelle unterstrich die Wichtigkeit der genauen Angabe der Schichtdicken. Standardmäßig wird die Kalibrierung der Schichtdickenmeßgeräte mit einem Profilometer durchgeführt. Diese Kalibrierung wurde durch Röntgenreflexion und Ellipsometrie überprüft. Die Röntgenreflexion zeigt für ZnPc und  $C_{60}$  um je 20% und 7% höhere Dicken als mit dem Schichtdickenmeßgerät gemessene. Die Ellipsometrie bestätigte diese Tendenz für ZnPc und  $C_{60}$  mit den Werten von 14% bzw. 17% höherer Dicke. Außerdem wurde die Struktur der ZnPc-Schicht anhand einer Modellierung der Röntgenreflexionsdaten untersucht und Hinweise für zwei unterschiedliche Molekülorientierungen gefunden.

Ein Hauptpunkt der vorliegenden Arbeit – die chemische Modifikation der ITO-Oberfläche mit einer monomolekularen Schicht – verfolgt das Ziel, dessen Leitungsband ans Valenzband (HOMO) von ZnPc anzupassen, um die elektrische Leitfähigkeit durch diese Grenzschicht zu verbessern. Zwei Methoden wurden untersucht.

Die erste Methode besteht darin, durch eine kovalent gebundene, aromatische Monolage, bestehend aus 8-Hydroxyquinolin, die ITO-Oberfläche chemisch zu passivieren. Bei der zweiten Methode wird durch nasschemische Behandlung mit verschiedenen anorganischen Säuren ein Oberflächendipol auf der ITO-Oberfläche erzeugt, der zu einer Erhöhung der Austrittsarbeit der Elektrode führt.

Solarzellen, die auf derart präparierten Substraten hergestellt wurden, zeigten im ersten Fall einem Wirkungsgrad von 1,3% ( $\eta$ ) im Vergleich zu 0,8% bei unbehandeltem ITO. Die Verbesserung ist vor allem dem hohen Kurzschlussstrom von  $J_{sc} = 5,5 \cdot 10^{-3} \text{ A/cm}^2$  zuzuschreiben. Der entsprechende Wert für eine Zelle mit unbehandeltem ITO ist  $J_{sc} = 4,56 \cdot 10^{-3} \text{ A/cm}^2$ . Ein Vergleich zeigte ebenfalls, dass der serielle Widerstand ( $R_s$ ) der passivierten Zelle mit  $15,19 \pm 0,28 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}^2$  etwa viermal kleiner ist als derjenige für die nicht-passivierte ITO-Zelle mit  $63,25 \pm 0,76 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}^2$ . Höchstwahrscheinlich wurde der serielle Widerstand durch einen verbesserten Kontaktwiderstand an dieser Grenzfläche beeinflusst. Daraus lässt sich schließen, dass eine aromatische Passivierung des ITO die Zelleigenschaften positiv beeinflusst.

Die Bildung eines Oberflächendipols durch das Eintauchen von ITO in Säurelösungen erhöhte dessen Austrittsarbeit von  $4,2 \pm 0,2$  eV bei unbehandeltem ITO auf  $4,8 \pm 0,1$  eV bei  $\text{H}_3\text{PO}_4$ - oder  $\text{HIO}_4$ -passiviertem ITO. Dies beeinflusste die Solarzellenparameter in positiver Weise. Hauptsächlich wurden Füllfaktor (FF) und  $J_{sc}$  verbessert. Für  $\text{H}_3\text{PO}_4$ -passiviertes ITO betragen sie  $\text{FF}=54\%$  und  $I_{sc} = 6 \cdot 10^{-3} \text{ A/cm}^2$  und für  $\text{HIO}_4$ -passiviertes ITO  $\text{FF}=54\%$  und  $I_{sc} = 5,28 \cdot 10^{-3} \text{ A/cm}^2$ . Die Verbesserung der Zellparameter trugen wie folgt zur Effizienz ( $\eta$ ) bei:  $\eta_{\text{H}_3\text{PO}_4} = 1,72\%$ ,  $\eta_{\text{HIO}_4} = 1,5\%$ . Beide Säurepassivierungen drückten  $R_s$  der Solarzellen auf sehr niedrige Werte, indem sie den Kontaktwiderstand der ITO-ZnPc-Grenzfläche verringerten. XPS zeigte, dass auf der ITO-Oberfläche sehr stabile Verbindungen (bis zu  $\approx 300^\circ\text{C}$ ) der Phosphorsäure existieren.

## 6 Zusammenfassung

---

Ein Oberflächendipol in entgegen gesetzter Richtung, hergestellt durch eine alkalische Behandlung (in  $\text{NH}_3$ -Lösung) von ITO, zerstörte die Solarzelle, die keinerlei Photostrom mehr aufwies.

Von allen getesteten, chemisch modifizierten ITO-Oberflächen, brachten organische und Säurepassivierungen die größte Steigerung im Wirkungsgrad.

Um die beiden Vorteile, resultierend aus aromatischer Passivierung und anionischem Oberflächendipol, zu kombinieren, wurde eine neue chemische Passivierung für ITO mittels Zink-Phthalozyanintetraphosphonische Säure (ZnPc4P) designt. Dabei handelt es sich um ein wasserlösliches, aromatisches Säuremolekül, das vier  $-\text{PO}_3\text{H}_2$  Gruppen aufweist, die kovalent an die Benzolringe der vier Benzopyrrolreste gebunden sind und das zudem aus der Klasse der Phthalozyanine stammt. Die Stabilität der Phosphat-ITO-Verbindung bleibt auch hier erhalten, so dass nach der Passivierung mit ZnPc4P die blaue Färbung auf ITO nicht mit Wasser entfernt werden konnte. Diese Passivierung schuf einen Dipol, der die ITO-Austrittsarbeit auf den höchsten Wert von 5,2 eV verschob und damit nur mit PEDOT:PSS vergleichbar war. Solarzellen auf Basis von ZnPc4P-passiviertem ITO hatten den höchsten von uns beobachtete FF von 57%. Die offene Klemmenspannung ( $V_{oc}$ ) liegt am oberen Limit, das dieses Zellkonzept jemals aufwies: 0,54V, während  $J_{sc}$  mit einem Wert von  $4,2 \cdot 10^{-3} \text{A/cm}^2$  nicht bedeutend verbessert wurde. Der ermittelte Wert für  $R_s$  der Zelle ist mit  $2,55 \pm 0,1 \Omega \cdot \text{cm}^2$  der niedrigste in dieser Arbeit gemessene und wird einem verbesserten Kontaktwiderstand an der ITO-ZnPc-Grenzfläche zugeschrieben.  $R_p$  mit einem Wert von  $1351 \pm 62 \Omega \cdot \text{cm}^2$  ist im Vergleich zu anderen Passivierungen beinahe doppelt so hoch und steht für eine äußerst niedrige Rekombination von Ladungsträgern und geringe Leckströme. Obgleich der Wirkungsgrad nur 1,3% beträgt, beweist der Einfluss dieser neuen Behandlung auf die Zellparameter das Potential sowohl des Zell- wie auch des Passivierungskonzepts.

Zum besseren Verständnis von  $V_{oc}$  wurde eine Studie an der Rückelektrode durchgeführt. Anstatt einer Standardelektrode aus Al wurde hier Ca und Mg mit ihren niedrigeren Austrittsarbeiten verwendet. Die Studie zeigte, dass  $V_{oc}$  sich proportional zur Austrittsarbeit der Rückelektroden verhält. Dieses Ergebnis wurde der Bildung einer Energiebarriere, die den Elektronentransport an der Grenzfläche zur Rückelektrode behindert, zugeschrieben.

Abschließend lässt sich sagen, dass in der vorliegenden Dissertation der Ladungstransport an der ITO-ZnPc-Grenzfläche in ZnPc/ $\text{C}_{60}$  Solarzellen untersucht und optimiert wurde. Die Verbesserung der Zellparameter lediglich durch Erhöhung der ITO- Austrittsarbeit mittels Säurepassivierung war erschöpft. Es mussten neue Wege zur Optimierung erkundet werden. Dafür wurde hier eine neu designte chemische Passivierung vorgeschlagen, wodurch die Austrittsarbeit der ITO-Elektrode angepasst wie auch der Kontaktwiderstand für einen optimalen Ladungstransport verringert wurde. Gleichzeitig wurde gezeigt, dass monomolekulare Schichten als Puffer in Solarzellen genutzt werden können.

## Acknowledgements

For the contents and quality of this dissertation I would like to express gratitude to the following people:

**Prof. Dr. Helmut Tributsch**, for the scientific supervision on behalf of FU-Berlin. His fine polish of this dissertation made it what it is now.

**Dr. Christian-Herbert Fischer**, for the guidance and dissertation corrections. As a second referee of this work, his opinion was very important for the overall impression, which this work leaves.

**Dr. Konstantinos Fostiropoulos**, for the scientific and overall support. Thanks for bearing the backstage work, so that now your PhD students can stand in the spotlight. Thank you for providing money, chemicals, apparatus and everything else for our research.

**Prof. Dr. Alois Weidinger**, for giving me the opportunity to do research in Hahn-Meitner-Institute, Berlin. By accepting me in his scientific group, he showed me the world of solar energy science.

**Prof. Dr. Martha Lux-Steiner**, for the support our group received from the department Heterogenous Material Systems.

**Mirko Vogel**, for scientific discussions, general help and coffee brakes.

**Martina Mohr**, for the help with the optical simulation, as a part of her practicum at HMI.

**Marin Rusu**, our guru in energetic diagrams, interfaces and surface work function. Thanks, for the fruitful discussions and ideas.

**Bernd Mertesacker**, the technician, who could fix a space shuttle with a chewing gum. Thank you, for spending endless hours repairing what we broke.

**Fr. Elke Schramm**, my first contact to Hahn-Meitner-Institute. Thank you for giving me this opportunity.

**Dr. Hendrik Zollondz**, the long distance runner in the group. Thanks for arguing with me and showing me the right direction in science. Always keep the tempo.

**Sven Hinzer**, for keeping our apparatus alive and working.

**K.I.H.**, for introducing science to me.

**Boris Naydenov**, for the dissertation corrections. Three years of friendship and support, which will not be forgotten!

**Eduard Wassmann**, for the sport and physical support. Let your motorcycles be always bigger and faster.

**Liuben Zhechkov**, the man married to his computer, for giving me nice time in Dresden, when I had enough from Berlin.

**My Father**, for creating this, what I am now.

My wife **Bistra** for the total support and everything else.