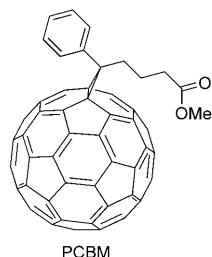


Herausragende Kurzschlussströme in BHJ-Solarzellen auf Basis NIR-absorbierender, akzeptorsubstituierter Squaraine**

Ulrich Mayerhöffer, Kaja Deing, Katrin Gruß, Holger Braunschweig, Klaus Meerholz* und Frank Würthner*

Angesichts des steigenden weltweiten Energiebedarfs und der endlichen Ressourcen fossiler Energieträger steigt das Interesse an der Photovoltaik. In diesem Zusammenhang gelten als Lösung prozessierbare organische Halbleiter als eine vielversprechende Klasse neuer organischer photovoltaischer (OPV-)Materialien für die preisgünstige Herstellung flexibler, mobiler Bauteile bis hin zu großflächigen Installationen.^[1] Die bisher besten Solarzellen, die auf aus Lösung prozessierten organischen Materialien beruhen, bestehen aus einem Netzwerk sich gegenseitig durchdringender Bereiche von löslichen, n-halbleitenden Fullerenen wie [6,6]-Phenyl-C₆₁-buttersäuremethylester (PCBM) als Akzeptor- und p-



halbleitenden Polymeren wie Poly(3-hexylthiophen) (P3HT) als Elektrodendonormaterial, die die aktive Grenzfläche bilden. Solche BHJ-OPV-Zellen (BHJ: bulk heterojunction, Heteroübergang) erreichen Wirkungsgrade (power conversion efficiencies, PCEs) von bis zu 6%.^[2] Trotz ihres immer noch geringeren Wirkungsgrades von etwa 4% rücken aber aus Lösung prozessierte BHJ-Solarzellen auf Grundlage kleiner Moleküle

immer mehr in den Mittelpunkt des Interesses.^[3] Mit niedermolekularen organischen p-Halbleitermolekülen lassen sich dank ihrer einfachen Zugänglichkeit, ihrer Monodispersität

und ihrer leichten Modifizierbarkeit viele Nachteile ihrer polymeren Analoga überwinden.^[4] Während etablierte organische p-Halbleiter wie Oligothiophene,^[3a,b] Triarylamine^[3c] und Acene^[3d] in den ersten BHJ-Zellen dieses Typs eingesetzt wurden, fanden in letzter Zeit traditionelle Farbstoffe wie Merocyanine,^[5a] Squaraine^[5b] und Dipyrrromethenbordiäthylfluorid(Bodipy)-Farbstoffe^[5c] Verwendung, die Wirkungsgrade von bis zu 1.7% erreichten. Wegen der einfachen Optimierbarkeit der farbstoffbasierten Materialien – gerade auch im Hinblick auf die angestrebte Absorption im roten und nahinfraroten (NIR-)Spektralbereich, in dem der solare Photonenstrom sein Maximum durchläuft^[6] – bestehen weitere Anwendungsmöglichkeiten derartiger Materialien in Tandemzellen^[2a] und dem Bau transparenter Solarzellen, wie sie für das Aufbringen auf Fensterscheiben benötigt werden.

Eine vielversprechende Farbstoffklasse für NIR-OPV-Zellen sind die Squaraine. Sie haben eine scharfe und intensive Absorptionsbande im angestrebten langwelligen Bereich und sind beachtlich stabil unter Standardbedingungen.^[7] Daher werden Squaraine in zahlreichen Anwendungen eingesetzt.^[8] So fanden sie auch bereits in Einsichtsolarzellen, in Aufdampfzellen und in Grätzel-Zellen Verwendung.^[9] Vor kurzem berichteten Silvestri et al. erstmals über die Verwendung von Squarainen in aus Lösung prozessierten Solarzellen mit einem PCE von bis zu 1.2%.^[5b]

Hier berichten wir über eine Serie von Squarainen, **5a–e** (Schema 1), die eine zusätzliche Dicyanvinylakzeptorfunktion an der zentralen Akzeptoreinheit aufweisen und die in aus Lösung prozessierten BHJ-Solarzellen einen PCE von bis zu 1.79% erreichen. Noch wichtiger ist die Tatsache, dass mit diesen Squarainen eine Absorption im wichtigen NIR-Bereich und Kurzschlussstromdichten von $J_{SC} = 12.6 \text{ mA cm}^{-2}$ erzielt werden konnten. Dieser J_{SC} -Wert ist nach unserem Wissen der höchste bisher publizierte Wert für BHJ-Solarzellen auf Basis kleiner Moleküle^[3,5] und liegt im Bereich der besten polymerbasierten BHJ-Solarzellen.^[2]

Die Squaraine **5a–e** und die Referenzverbindungen **7a,b** wurden nach dem Syntheseweg in Schema 1 hergestellt.^[10] Für alle Squaraine wurde eine Reihe von BHJ-Solarzellen gebaut, die durch Rotationsbeschichtung einer Squarain/PCBM-Lösung auf ein ITO/PEDOT:PSS-Substrat und anschließendes Aufdampfen von Ca/Al als Kathode hergestellt wurden [ITO = Indiumzinnoxid, PEDOT = Poly(3,4-ethylenedioxythiophen, PSS = Poly(styrolsulfonat)]. Die Photovoltaikeigenschaften dieser Bauteile wurden unter Standard-AM-1.5-Sonnenstrahlung (AM = Luftmasse) bestimmt. Die Kennzahlen der untersuchten BHJ-Solarzellen sind in Tabelle 1 aufgeführt.

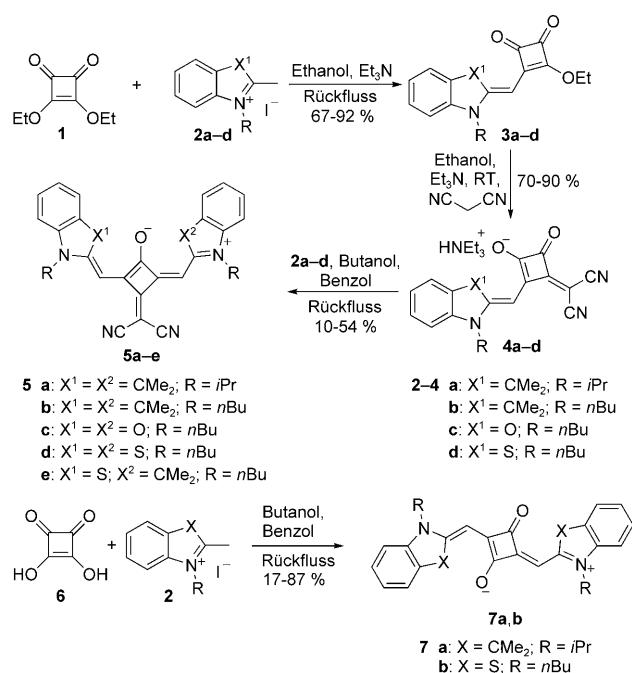
[*] U. Mayerhöffer, Prof. Dr. F. Würthner
Universität Würzburg, Institut für Organische Chemie
und
Röntgen Research Center for Complex Material Systems
Am Hubland, 97074 Würzburg (Deutschland)
Fax: (+49) 931-318-4756
E-Mail: wuerthner@chemie.uni-wuerzburg.de

K. Deing, Prof. Dr. K. Meerholz
Department für Chemie, Universität zu Köln
Luxemburger Straße 116, 50939 Köln (Deutschland)
E-Mail: klaus.meerholz@uni-koeln.de

K. Gruß, Prof. Dr. H. Braunschweig
Universität Würzburg, Institut für Anorganische Chemie
und
Röntgen Research Center for Complex Material Systems
Am Hubland, 97074 Würzburg (Deutschland)

[**] Finanzielle Unterstützung der Deutschen Forschungsgemeinschaft im Schwerpunktprogramm „Elementarprozesse der Organischen Photovoltaik“ wird dankend anerkannt. U.M. dankt dem Fonds der Chemischen Industrie für ein Doktorandenstipendium. BHJ: bulk heterojunction, Heteroübergang.

Hintergrundinformationen zu diesem Beitrag sind im WWW unter <http://dx.doi.org/10.1002/ange.200903125> zu finden.



Scheme 1. Synthese der akzeptorsubstituierten Squaraine **5a–e** und der Referenzsquaraine **7a,b**.

Tabelle 1: Elektronische Eigenschaften der untersuchten Squaraine und Kennzahlen der entsprechenden BHJ-Solarzellen mit Ca/Al-Deckelektrode und einer typischen Schichtdicke von etwa 80 nm.

Farbstoff	λ_{max} [nm] ^[c] (ϵ_{max} [L mol ⁻¹ cm ⁻¹])	$E_{1/2}(Ox)$ [V] ^[d]	E_{HOMO} [eV] ^[e]	E_{LUMO} [eV] ^[f]	Gew.-% PCBM	U_{OC} [V]	J_{SC} [mA cm ⁻²]	FF ^[g]	PCE [%]
7a ^[a]	646 (250 000)	0.013	−5.16	−3.24	70	0.44	1.08	0.31	0.15
7b ^[b]	685 (210 000)	−0.167	−4.98	−3.17	70	0.22	1.02	0.30	0.07
5a ^[b]	683 (185 000)	0.101	−5.25	−3.42	70	0.63	3.28	0.36	0.74
5b ^[b]	683 (195 000)	0.120	−5.27	−3.45	70	0.66	3.49	0.37	0.84
5c ^[b]	625 (142 000)	0.009	−5.16	−3.18	40	0.42	2.79	0.42	0.49
5d ^[b]	701 (170 000)	−0.013	−5.14	−3.37	40	0.31	12.6	0.47	1.79
5e ^[b]	688 (180 000)	0.015	−5.17	−3.37	70	0.54	3.00	0.39	0.64

[a] Beste Zelle für Squarain/PCBM-Mischung ohne Tempern. [b] Beste Zelle für Squarain/PCBM-Mischung nach Tempern bei 110°C für 15 min. [c] UV/Vis-Messungen in CH₂Cl₂-Lösungen ($c = 10^{-5}$ M). [d] Bestimmt durch Cyclovoltammetrie und kalibriert gegen das Ferrocen/Ferrocenium-Redoxpaar. [e] $E_{HOMO} = -5.15$ eV $- E_{Ox}$. [f] $E_{LUMO} = E_{HOMO} + (hc/\lambda_{max})$, siehe Abbildungen S5–S8 in den Hintergrundinformationen. [g] FF = Füllfaktor.

Die Zellen aus den Referenzsquarainen **7a,b** zeigen einen geringen PCE von 0.15 bzw. 0.07 % bei einem Squarain/PCBM-Verhältnis von 3:7 (w/w), das sich innerhalb einer Konzentrationsreihe als optimal erwiesen hat. Diese schlechten PCEs gehen einher mit niedrigen Stromdichten von etwa 1 mA cm⁻² und Leerlaufspannungen $U_{OC} = 0.44$ V für **7a** und $U_{OC} = 0.22$ V für **7b**. Dabei hat weder die Temperatur noch die Dauer des Temperns einen Einfluss auf die Leistung der Zelle.

Dagegen bewirkt die Einführung der Dicyanvinyleinheit in **5a** einen drastischen (fünffachen) Anstieg des Wirkungsgrades auf 0.74 % beim gleichen Squarain/PCBM-Verhältnis von 3:7 (w/w). Die Leerlaufspannung und die Kurzschlussstromdichte der Bauteile steigen dabei auf $U_{OC} = 0.63$ V bzw. $J_{SC} = 3.28$ mA cm⁻². Ähnliche Werte werden für **5b** mit $U_{OC} = 0.66$ V und $J_{SC} = 3.49$ mA cm⁻² erhalten, was in einem PCE

von 0.84 % resultiert. Für **5a** und **5b** verbessert sich dabei der PCE durch 15-minütiges Tempern bei 110°C um etwa 10 %. Diese Steigerung des PCE geht mit einem Anstieg der Kurzschlussstromdichte einher, während die Leerlaufspannung nahezu unverändert bleibt. Dies lässt darauf schließen, dass der Temperprozess zu einer verbesserten Zellmorphologie führt.^[11]

Auch die anderen akzeptorsubstituierten Squaraine **5c–e** weisen überlegene Photovoltaikeigenschaften gegenüber jenen von **7a,b** auf (Tabelle 1). **5d** hat einzigartige Photovoltaikeigenschaften: Während die Referenzverbindung **7b** die schlechtesten Werte aufweist, liefert das entsprechende dicyanvinylfunktionalisierte **5d** mit einem PCE von 1.79 % die besten der gegenwärtigen Serie. Allerdings wird dieser gute Wirkungsgrad nur nach 15-minütigem Tempern bei 110°C erzielt, wodurch der U_{OC} -Wert leicht reduziert, der J_{SC} -Wert aber stark erhöht wird. Dieses Verhalten deutet wiederum auf drastische Veränderungen der Zellmorphologie hin.^[11] Für **5c** und **5d** wurden die leistungstärksten Zellen bei einem Squarain/PCBM-Verhältnis von 6:4 (w/w) erhalten. Ein solch hoher Farbstoffgehalt ist für BHJ-Materialien recht ungewöhnlich, aber sehr vorteilhaft, da durch einen höheren Squarainanteil in der aktiven Schicht bei gleich bleibender Schichtdicke mehr Photonen absorbiert werden können.

Diese günstigen Materialeigenschaften von **5d** werden anhand der Kurzschlussstromdichte $J_{SC} = 12.6$ mA cm⁻² deutlich (Abbildung 1).

Diese hohen Photoströme sind dem Vorhandensein gut gepackter Domänen von PCBM und **5d** zuzuschreiben (eine Diskussion der Packungseigenschaften findet sich weiter unten), die einen ausgeglichenen Ladungsträgertransport von Elektronen und Löchern ermöglichen. In der Tat weisen dünne Filme von **5d** in organischen Feldeffekttransistoren eine hohe Lochmobilität auf.

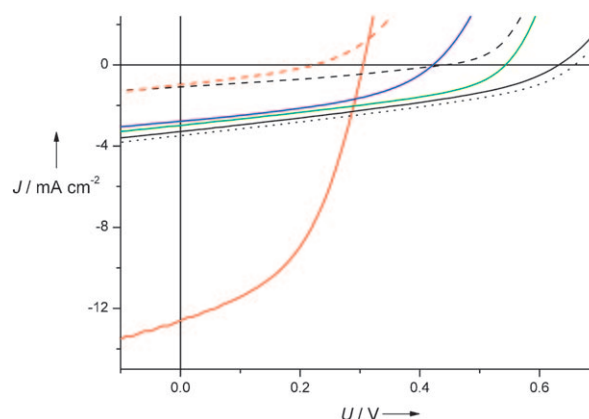


Abbildung 1. J - U -Kennlinie von **5a** (schwarze Linie), **5b** (schwarze gestrichelte Linie), **5c** (blaue Linie), **5d** (rote Linie), **5e** (grüne Linie) sowie **7a** (schwarze gestrichelte Linie) und **7b** (rote gestrichelte Linie) für die jeweils beste Solarzelle unter AM-1.5-Bestrahlung.

tät von $\mu_h = 1.5 \times 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ auf, die durch das Tempern auf $\mu_h = 1.3 \times 10^{-3} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ steigt (Details siehe Hintergrundinformationen). Einen weiteren Hinweis auf die relativ hohen Ladungsträgermobilitäten von **5d** in den Zellen gibt der Füllfaktor (*FF*) von 47 %, der höchste der vorliegenden Serie.^[12]

Aus den obigen Photovoltaikdaten wird deutlich, dass die Einführung der Dicyanvinyleinheit die Molekül- und Materialeigenschaften der Squaraine stark beeinflusst. Die Auswirkungen dieser Gruppe auf die Molekülstruktur werden durch Röntgenstrukturanalysen von Einkristallen von **5a** und **5d** (Abbildung 2 und Hintergrundinformationen) offen-

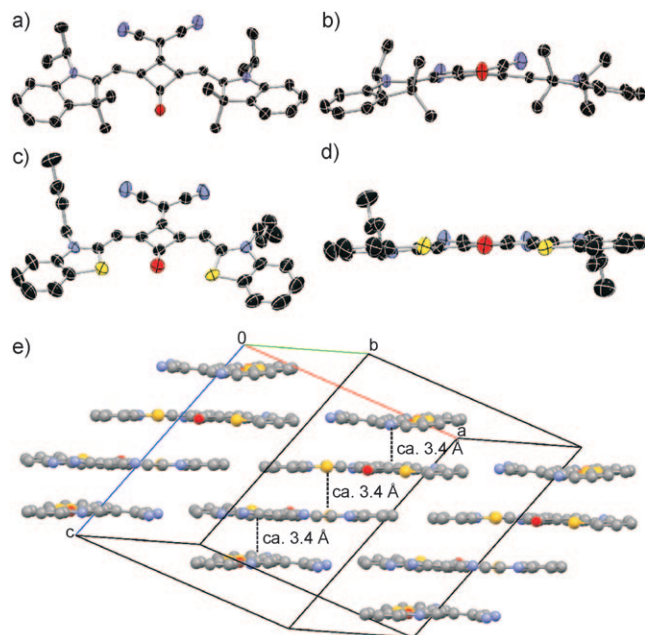


Abbildung 2. a) Molekülstruktur und b) Frontansicht auf die Squarainebene von **5a**; c) Molekülstruktur und d) Frontansicht auf die Squarainebene von **5d** (Schwingungsellipsoide für 50 % Wahrscheinlichkeit; H-Atome, die Fehlordnung einer Alkylkette in **5d** und Lösungsmittelmoleküle in **5a** sind nicht gezeigt); schwarz C, blau N, rot O, gelb S. e) Räumliche Anordnung von **5d** im Kristallgitter (nur das Squarain- π -System ist dargestellt).

bart.^[13] Für Squaraine des Typs **7a,b** wurde eine *trans*-Anordnung der Donorgruppen und ein Inversionszentrum im Squaratripp gefunden, wie es auch aus Schema 1 deutlich wird.^[14] Die Einführung der Dicyanvinylgruppe verhindert ein Inversionszentrum, und der gestiegene sterische Anspruch der zusätzlichen Akzeptoreinheit zwingt die Donorgruppen in eine *cis*-Anordnung.

Die Strukturen von **5a** und **5d** zeigen aber auch deutliche Unterschiede: So ist das π -Gerüst von Squarain **5a** gebogen, wobei eine Indolenineinheit in der Ebene des zentralen Squaratripps liegt, während die andere mit einem Torsionswinkel von 12° aus der Ebene gedreht ist (Abbildung 2b). Außerdem ist die Dicyanvinyleinheit um etwa 9° gegenüber der Ebene des zentralen Vierrings verdreht. Squarain **5d** hat dagegen ein fast planares π -Gerüst (Abbildung 2d).

Diese Planarität ermöglicht es **5d**, in der monoklinen Raumgruppe *C2/c* in einer dichten „Backsteinanordnung“ zu packen, in der der kleinste Abstand zwischen den Schichten nur 3.4 \AA beträgt (Abbildung 2e). Diese Backsteinanordnung ermöglicht eine ausgezeichnete Überlappung der π -Systeme, wie sie für einen effizienten Ladungstransport im Material benötigt wird. Diese vorteilhafte Anordnung erklärt die beobachteten überlegenen Leitfähigkeiten^[12] von **5d** gegenüber jenen von **5a**, dessen gebogene Struktur eine solch günstige Anordnung im Festkörper verhindert.

Der Dicyanvinylakzeptor wirkt sich auch günstig auf die Absorptionseigenschaften von **5a–e** aus (Abbildung 3 sowie Abbildungen S1–S4 in den Hintergrundinformationen). Re-

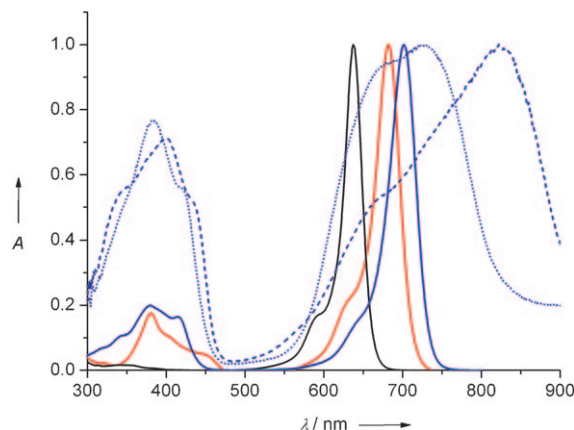


Abbildung 3. UV/Vis-Spektren der Squaraine (schwarze Linie), **5a** (rote Linie) und **5d** (blaue Linie) in CH_2Cl_2 ($c = 10^{-5} \text{ M}$) sowie von **5d** im Film (blaue gepunktete Linie: vor Tempern; blaue gestrichelte Linie: nach 15 min Tempern bei 110°C).

ferenzverbindung **7a** zeigt eine für Squaraine typische scharfe und extinktionsstarke Absorptionsbande bei 646 nm ($\epsilon = 2.5 \times 10^5 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$).^[7b] Die höhere Akzeptorstärke der Dicyanvinyleinheit ruft bei **5a** eine Rotverschiebung des Absorptionsmaximums um etwa 40 nm hervor ($\epsilon = 1.85 \times 10^5 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$); zusätzlich tritt eine zweite Absorptionsbande bei 380 nm ($\epsilon = 3.2 \times 10^4 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$) auf. Die gleichen Absorptionseigenschaften werden für alle akzeptorsubstituierten Squaraine beobachtet (Tabelle 1) und können daher der veränderten Molekülsymmetrie der Farbstoffe zugeschrieben werden.

Dank einer ausgeprägten Exzitonenkopplung dieser dicht gepackten Chromophore (Abbildung 2e) wird im Festkörper eine beachtliche Rotverschiebung und Bandenverbreiterung beobachtet (gepunktete und gestrichelte Linien in Abbildung 3). Diese beiden spektralen Eigenschaften sind sehr erstrebenswert, da sie den Absorptionsquerschnitt für die Sonnenstrahlung erhöhen und, besonders bedeutend für die Anwendung auf Fensterglas, die Absorption des getemperten Films weit in den NIR-Bereich ausdehnen (Abbildung 3).^[11] Diese günstigen Eigenschaften manifestieren sich in der externen Quanteneffizienz (EQE). So hat die **5d**/PCBM-Zelle eine maximale EQE von 41 % bei 750 nm , die zu den besten bisher bekannten externen Quanteneffizienzen in BHJ-

Zellen zählt, die auf kleinen Molekülen beruhen (Abbildung S10 in den Hintergrundinformationen).

Die einzige Begrenzung für eine effektive Nutzung der Sonneneinstrahlung erwächst aus den relativ niedrigen Leerlaufspannungen, besonders für Solarzellen aus den Squarainen **7a,b** und **5c,d** (Tabelle 1). Ein Grund dafür besteht in den relativ hoch liegenden HOMO-Energieniveaus von Squarainen, die durch den Dicyanvinylsubstituenten in **5a-e** um 0.1–0.2 eV abgesenkt werden konnten. Ein anderer Grund scheint die starke Wechselwirkung dieser Farbstoffe im Festkörper zu sein, die nicht nur die optischen Eigenschaften, sondern auch die Grenzorbitalenergien beeinflusst.^[5a] Es ist allerdings darauf hinzuweisen, dass die Nutzung des NIR-Bereichs immer mit einer Verringerung der nutzbaren Anregungsenergie pro absorbiertes Photon einhergeht, da diese bei 400 nm 3.1 eV beträgt, bei 900 nm jedoch lediglich 1.4 eV.

Durch systematisches Moleküldesign wurden hoch begehrte NIR-absorbierende Farbstoffe für BHJ-Solarzellen erhalten. Auf Basis dieser Farbstoffe konnten Solarzellen mit einem Wirkungsgrad von bis zu 1.79% und Kurzschlussstromdichten von bis zu 12.6 mA cm⁻² hergestellt werden. Diese Stromdichte ist die höchste, die bislang für aus Lösung prozessierte BHJ-Solarzellen auf Basis kleiner Moleküle gemessen wurde, und kommt nahe an die Werte der leistungstärksten Polymer-BHJ-Zellen heran. Weitere Untersuchungen werden momentan durchgeführt, um die Zellmorphologie und die elektronischen Eigenschaften der Farbstoffe im Hinblick auf höhere U_{OC} -Werte zu verbessern. **5d**/PCBM-Schichten zeigen mit ihrer Absorption im NIR-Bereich und den hohen J_{SC} -Werten vielversprechende Eigenschaften für Anwendungen in Tandemzellen mit etablierten Polymermaterialien wie P3HT/PCBM, die den kurzwelligen Bereich des Sonnenspektrums nutzen.

Eingegangen am 10. Juni 2009

Online veröffentlicht am 13. Oktober 2009

Stichwörter: BHJ-Solarzellen · Donor-Akzeptor-Systeme · Dünne Filme · Farbstoffe/Pigmente · Squaraine

- [1] a) R. M. Nault, *Basic Research Needs for Solar Energy Utilization—Report of the Basic Energy Sciences Workshop on Solar Energy Utilization*, 18–21. April 2005; http://www.sc.doe.gov/bes/reports/files/SEU_rpt.pdf; b) C. J. Brabec, N. S. Sariciftci, J. C. Hummelen, *Adv. Funct. Mater.* **2001**, *11*, 15–26.
- [2] a) J. Y. Kim, K. Lee, N. Coates, D. Moses, T.-Q. Nguyen, M. Dante, A. J. Heeger, *Science* **2007**, *317*, 222–225; b) J. Peet, J. Y. Kim, N. E. Coates, W. L. Ma, D. Moses, A. J. Heeger, G. C. Bazan, *Nat. Mater.* **2007**, *6*, 497–500.
- [3] a) B. Walker, A. B. Tamayo, X.-D. Dang, P. Zalar, J. H. Seo, A. Garcia, M. Tantiwiwat, T.-Q. Nguyen, *Adv. Funct. Mater.* **2009**, *19*, 3063–3069; b) C.-Q. Ma, M. Fonrodona, M. C. Schikora, M. M. Wienk, R. A. J. Janssen, P. Bäuerle, *Adv. Funct. Mater.* **2008**, *18*, 3323–3331; c) M. T. Lloyd, A. C. Mayer, S. Subramanian, D. A. Mourey, D. J. Herman, A. V. Bapat, J. E. Anthony, G. G. Malliaras, *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 9144–9149; d) S. Roquet, A. Cravino, P. Leriche, O. Aleveque, P. Frere, J. Roncali, *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 3459–3466.
- [4] M. Brumbach, D. Placencia, N. R. Armstrong, *J. Phys. Chem. C* **2008**, *112*, 3142–3151.
- [5] a) N. M. Kronenberg, M. Deppisch, F. Würthner, H. W. A. Lademann, K. Deing, K. Meerholz, *Chem. Commun.* **2008**, 6489–6491; b) F. Silvestri, M. D. Irwin, L. Beverina, A. Facchetti, G. A. Pagani, T. J. Marks, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 17640–17641; c) T. Rousseau, A. Cravino, T. Bura, G. Ulrich, R. Ziessel, J. Roncali, *Chem. Commun.* **2009**, 1673–1675.
- [6] M. M. Wienk, M. G. R. Turbiez, M. P. Struijk, M. Fonrodona, R. A. J. Janssen, *Appl. Phys. Lett.* **2006**, *88*, 153511.
- [7] a) D. Keil, H. Hartmann, T. Moschny, *Dyes Pigm.* **1991**, *17*, 19–27; b) S. Sreejith, P. Carol, P. Chithra, A. Ajayaghosh, *J. Mater. Chem.* **2008**, *18*, 264–274.
- [8] a) G. J. Ashwell, G. Jefferies, D. G. Hamilton, D. E. Lynch, M. P. S. Roberts, G. S. Bagra, C. R. Brown, *Nature* **1995**, *375*, 385–388; b) D. Ramaiah, I. Eckert, K. T. Arun, L. Weidenfeller, B. Epe, *Photochem. Photobiol.* **2002**, *76*, 672–677; c) K.-Y. Law, *Chem. Rev.* **1993**, *93*, 449–486; d) J. V. Ros-Lis, R. Martínez-Mañez, F. Sancenón, J. Soto, M. Spieles, K. Rurack, *Chem. Eur. J.* **2008**, *14*, 10101–10114.
- [9] a) D. L. Morel, A. K. Ghosh, T. Feng, E. L. Stogryn, P. E. Purwin, R. F. Shaw, C. Fishman, *Appl. Phys. Lett.* **1978**, *32*, 495–497; b) S. Wang, E. I. Mayo, M. D. Perez, L. Griffe, G. Wei, P. I. Djurovich, S. R. Forrest, M. E. Thompson, *Appl. Phys. Lett.* **2009**, *94*, 233304; c) J.-H. Yum, P. Walter, S. Huber, D. Rentsch, T. Geiger, F. Nüesch, F. De Angelis, M. Grätzel, M. K. Nazee-ruddin, *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 10320–10321.
- [10] Synthesedetails und Charakterisierung siehe Hintergrundinformationen.
- [11] Details über die Zellmorphologie siehe Hintergrundinformationen.
- [12] Ein limitierender Faktor für BHJ-Zellen ist die Bildung von Raumladungen. Diese können auftreten, wenn sich die Ladungsträgermobilitäten der Donor- und Akzeptorphase um zwei Größenordnungen unterscheiden. Unter diesen Umständen ist der FF-Wert auf 42% limitiert; siehe: a) V. D. Mihailetschi, J. Wildeman, P. W. M. Blom, *Phys. Rev. Lett.* **2005**, *94*, 126602; b) L. J. A. Koster, V. D. Mihailetschi, P. W. M. Blom, *Appl. Phys. Lett.* **2006**, *88*, 052104.
- [13] CCDC 734983 (**5a**) und 734984 (**5d**) enthalten die ausführlichen kristallographischen Daten zu dieser Veröffentlichung. Die Daten sind kostenlos beim Cambridge Crystallographic Data Centre über www.ccdc.cam.ac.uk/data_request/cif erhältlich.
- [14] D. E. Lynch, K. A. Byriel, *Cryst. Eng.* **1999**, *2*, 225–239.