

## Abstract

Although organic electronics is an emerging and promising field with high research interest, only few research groups have investigated the influence of small amounts of impurities on electronic properties of devices. Already small amount of impurities in the active materials (e.g. emitter in OLED = organic light emitting diode or donor material in OSC = organic solar cell) may negatively affect the electronic properties of devices by reacting with organic electronic materials or acting as charge-carrier traps in organic electronic devices.

In this work, differences in purity of different batches of hole-conducting materials and their effect on the characteristics of organic electronic devices have been studied. These investigations have been carried out for two materials: the merocyanine dye HB194 as a donor compound in OSCs and the hole transporting material QUPD in OLEDs. The purity of the synthesis products of different batches of hole conducting materials have been quantitatively and qualitatively determined by liquid chromatography methods. The main impurities have been isolated and their chemical structures have been elucidated by means of different analytical methods (HPLC-UV, HPLC-MS and NMR). The energy levels of these impurities have been characterized electrochemically. Whether this has a negative effect on the device characteristics, has been investigated by means of different methods (cyclic voltammetry, LIV-characteristics).

To control for the negative impact of different amounts of impurities on the device performance, organic electronic devices with different batches of hole conducting materials and different impurities have been investigated. By comparing the performance of these devices with the purity of the materials, it has been investigated which impurity had a negative impact on the electronic properties of the devices. Further one impurity has exemplarily been isolated and added to the devices in varying amounts to prove its negative influence on the devices of this modified hole conducting material. For those impurities that could not be isolated in a sufficient amount, conclusions have been drawn from the comparison of the amount of impurities in the different batches and the resulting device characteristics.

Generally, it has been shown that purities in – in this case – hole conducting materials have a significant detrimental effect on device performances.

As expected, in this work such materials have been identified as especially harmful for device performance, that act as charge carrier traps due of the position of their energy levels. Most impurities which do not act as charge carrier traps do not have a measurable detrimental effect on the device performance. Possible influences on the lifetime of devices have not yet been investigated. This needs to be a subject of subsequent works.

In this work, chromatographic methods have been optimized in such a way that impurities could be isolated out of the different batches and that these impurities could be identified. For the future there is still potential for further optimization. The conclusions from this and following works will be useful in order to optimize the synthesis of such materials and the purification after synthesis. This will open new ways to more clean materials and thus to better device performance.

# Kurzzusammenfassung

Im Bereich der organischen Elektronik haben sich bisher nur wenige Arbeitsgruppen mit dem Thema befasst, welchen Einfluss Verunreinigungen in organisch elektronischen Materialien auf die Charakteristik von organisch elektronischen Bauteilen haben. Bereits kleine Mengen an Verunreinigungen in den aktiven Materialien (z.B. Emitter in OLED oder Donorkomponente in OSC) können Einbußen in der Bauteil-Performance verursachen, indem sie z.B. Nebenreaktionen eingehen können oder als Ladungsträgerfallen wirken.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Reinheitsunterschiede verschiedener lochleitender Materialien und deren Einfluss auf die Charakteristik der daraus hergestellten organisch elektronischen Bauteile (OEB) untersucht. Diese wurden exemplarisch für den Merocyanin Farbstoff HB194 (als Donorkomponente in organischen Solarzellen) sowie für das Lochleitermaterial QUPD (als Lochleiterkomponente in organischen Leuchtdioden) durchgeführt. Mit Hilfe chromatographischer Methoden wurden die Reinheitsunterschiede der untersuchten Lochleiter-Chargen sowohl quantitativ als auch qualitativ bestimmt. Die Hauptverunreinigungen in den Lochleitermaterialien konnten isoliert werden, und deren chemische Strukturen wurden mit Hilfe unterschiedlicher analytischer Methoden (HPLC-UV, HPLC-MS und NMR) aufgeklärt. Die Energieniveaus dieser Verunreinigungen wurden elektrochemisch (Cyclovoltammetrie) charakterisiert. Anschließend wurde der Zusammenhang zwischen der Lage ihrer elektronischen Niveaus und deren Einfluss auf die Bauteileffizienz untersucht. Um zu überprüfen, ob diese Verunreinigungen die Charakteristik organisch elektronischer negativ beeinflussen, wurden Bauteile aus verschiedenen Chargen und mit unterschiedlichen Mengen der Verunreinigungen hergestellt. Zusätzlich wurde exemplarisch eine Verunreinigung isoliert und in unterschiedlichen Mengen einem Bauteil zugesetzt. Bei Verunreinigungen, die nicht in ausreichender Menge isoliert werden konnten, wurden durch Vergleich der Menge dieser Verunreinigung in den verschiedenen Chargen mit der Bauteilcharakteristik Schlussfolgerungen gezogen.

Allgemein wurde gezeigt, dass die Reinheiten von Ausgangsmaterialien, hier der Lochleitermaterialien, einen sehr großen Einfluss auf die Bauteilperformance haben.

Erwartungsgemäß zeigten sich im Rahmen dieser Arbeit solche Materialien als besonders schädlich für die Bauteilperformance, die aufgrund der Lage ihrer elektronischen Niveaus als Ladungsträgerfallen wirken. Die meisten untersuchten Verunreinigungen, die nicht als Ladungsträgerfallen wirken, hatten keinen messbaren nachteiligen Einfluss auf die Bauteilperformance. Ein möglicher Einfluss auf die Lebensdauer wurde dabei noch nicht untersucht und sollte in nachfolgenden Arbeiten durchgeführt werden.

Im Rahmen der Arbeit wurden chromatographische Methoden so optimiert, dass damit Verunreinigungen aus den Chargen isoliert und identifiziert werden konnten. Hierbei besteht für die Zukunft noch weiteres Optimierungspotenzial. Diese Erkenntnisse können künftig auf die Verbesserung der Reaktionsführung und die Aufreinigung der Materialien nach der Synthese angewendet werden. Dies würde den Weg zu saubereren Ausgangsmaterialien und damit zu verbesserter Bauteilperformance öffnen.