

Kurzzusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden organische Halbleiter für die Verwendung in organischen Leuchtdioden (OLEDs) synthetisiert, um deren Effizienz und Lebensdauer in Bauteilen zu verbessern. Die physikalischen Eigenschaften der Zielmoleküle wurden durch gezielte chemische Modifikation eingestellt und optimiert. Durch die zusätzliche Funktionalisierung der Zielmoleküle mit Oxetaneinheiten sind die hier synthetisierten organischen Halbleiter speziell für die nass-chemische Herstellung mehrschichtiger Bauteile geeignet. Diese Oxetangruppen können durch Ringöffnungspolymerisation in ein unlösliches Polyethernetzwerk umgewandelt werden. Dadurch wird die Durchmischung oder die Ablösung von Material bei der nass-chemischen Abscheidung einer weiteren Schicht verhindert.

Im ersten Teil dieser Arbeit wird eine Serie von lochleitenden Molekülen auf Basis des 1,1-bis[4-[*N,N'*-di(*p*-tolyl)amino]phenyl]cyclohexan (TAPC) Gerüsts beschrieben. Die für diese Materialklasse wichtigen Energieniveaus, wie höchstes besetztes- (HOMO) und niedrigstes unbesetztes Molekülorbital (LUMO), wurden durch gezielte chemische Variation beeinflusst. Dies konnte durch Einbringen elektronenziehender, sowie elektronenschiebender Gruppen, wie Fluoro- oder Methoxysubstituenten, erreicht werden. Der Einfluss der veränderten elektronischen Eigenschaften dieser Lochleiterklasse wurde hinsichtlich der Effizienz in blau phosphoreszierenden OLEDs untersucht und mit der Wirkungsweise einer anderen Lochleiterklasse, *N*⁴,*N*⁴,*N*^{4'},*N*^{4'}-tetraphenylbiphenyl-4,4'-diamin (TPD), in analogen Bauteilen verglichen. Es zeigte sich, dass TAPCs aufgrund ihrer höheren Ladungsträgermobilität und höherem LUMO-Niveau bei vergleichbarem HOMO den TPDs als Lochleiterschicht in OLEDs überlegen sind. Fernerhin besitzen TAPCs eine höhere Triplettenergie, die den verlustbringenden thermischen Energierücktransfer angrenzender angeregter Emittermoleküle auf das nichtemittierende Triplettniveau des Lochleiters im Vergleich zu TPD-Derivaten erschwert.

Der zweite Teil dieser Arbeit beschreibt die Synthese elektrolumineszierender Materialien auf Basis von Iridium(III)-Komplexen, sowie Matrixmaterialien auf Spirobifluoren- und Carbazol-Basis. Zudem wird deren Implementierung als sogenanntes Wirt-Gast-System in mehrschichtigen, aus Lösung prozessierten, organischen Leuchtdioden evaluiert. Diese OLEDs wurden hinsichtlich ihrer maximalen Leuchteffizienz optimiert.

Übergangsmetallkomplexe, wie Iridium(III)-Verbindungen, stellen den sogenannten Gast dar, der durch effektive Spin-Bahn-Kopplung die Ausnutzung der Phosphoreszenz in elektrisch betriebenen OLEDs erlaubt. Im Gegensatz zu fluoreszierenden Emittern führt dies zu einer Erhöhung der internen Quantenausbeute einer OLED auf bis zu 100%. Bei angepassten Energieniveaus von Wirt und Gast führt dies zum Übertrag von Tripletzuständen, dem sogenannten „Ernten“, auf den Emitter, der in der Folge unter Lichtemission in den Grundzustand zurückkehrt und somit die Effizienz der OLEDs drastisch verbessert.

Als sogenannte Wirte wurden Carbazolverbindungen aufgrund ihres hohen Tripletniveaus und ihrer angemessenen Lochbeweglichkeit ausgewählt. Ebenfalls wurden Spirobifluorene als Wirtsmoleküle eingesetzt, da diese die verbrückte Verknüpfung zweier Molekülsegmente, wie Donor und Akzeptor, erlaubt. Gleichzeitig sind die senkrecht zueinander orientierten Molekülsegmente elektronisch entkoppelt, was ihre ursprünglichen Eigenschaften weitestgehend erhält. Durch die räumliche Separation von HOMO und LUMO in Spiroverbindungen wird die Singulett-Triplett-Aufspaltung im Vergleich zu nicht spiroverbrückten Molekülen verringert. Dies sichert ein hochenergetisches Tripletniveau des Wirtes und erschwert den Übertrag von Anregungsenergie des Emitters auf das nicht-strahlende Tripletniveau des Wirtes.

Die oben genannten Molekülklassen konnten erfolgreich in mehrschichtige, aus Lösung hergestellte OLEDs implementiert und getestet werden. Es zeigte sich, dass die Spiroverbindungen den Carbazolverbindungen, trotz niedrigerem Tripletniveau, in den entsprechenden OLEDs hinsichtlich der maximalen Leuchteffizienz überlegen sind. Dies ist maßgeblich auf die Bipolarität der Spiroverbindungen zurückzuführen, da diese eine Ladungsträgerbalance innerhalb der Emissionsschicht sicherstellt und somit für eine hohe Quanteneffizienz der OLED sorgt.