

Abstract

This work presents reliable and highly flexible analytical methods of organic electronic (OE) devices on the molecular level and bridges a gap between two important research fields, organic electronics and mass spectrometry (MS).

High resolution electrospray ionization (ESI), liquid injection field desorption ionization (LIFDI) and laser desorption ionization (LDI) MS are applied for analysis of organic semiconducting materials in solution and in solid devices.

Solution-based analysis using ESI- and LIFDI-MS is conducted on different material classes and structures with a strong focus on hole transport materials (HTMs). Collision induced dissociation (CID) experiments provided detailed information about the materials' fragmentation behavior. Material specific features, similarities and differences are identified and discussed.

For both, polymer and non-polymer small molecule OE devices, analytical methods are introduced. A toolbox of methods for further analysis of organic electronics is established, especially regarding the minimization of sample preparation steps and possible contamination.

- For polymer systems, analysis of organic electronic devices with minimum sample preparation ('on-device') is introduced using LDI-MS. As the polymer acts as a matrix, small amounts of non-polymerized material, such as dopants, trap states or degraded material ("guests"), can be identified and analyzed both qualitatively and quantitatively besides the polymer material. Preliminary degradation experiments of these non-crosslinkable guests are presented and show the high potential of this method for identification of molecular degradation processes.
- Solvent-based analysis of non-polymer small molecule OE devices is demonstrated with LIFDI-MS. Isolation of the sample material of interest from an OE device, *e.g.* of priorily operated pixel areas, is realized. A major advantage of this method is the low amount of interfering signals, enabling the identification of very low amounts of material, *e.g.* of degradation products in runtime experiments of these devices.

Kurzzusammenfassung

In dieser Arbeit werden verlässliche, flexible analytische Methoden vorgestellt, die auf molekularer Ebene Analytik organischer elektronischer (OE) Bauteile ermöglichen. Hierbei wird eine Brücke zwischen zwei wichtigen Forschungsbereichen, der organischen Elektronik und der Massenspektrometrie, geschlagen.

Elektrospray-Ionisation (ESI), Liquid Injection Field Desorption Ionisation (LIFDI) und Laser-Desorption/Ionisation (LDI) wurden zur hochauflösenden massenspektrometrischen Analyse von organischen Halbleitermaterialien mit Fokus auf Lochtransportmaterialien in Lösung sowie im Bauteil angewandt. Kollisionsinduzierte Dissoziationsexperimente (CID) wurden durchgeführt um detaillierte Informationen über die jeweiligen Materialien sowie ihr Fragmentierungsverhalten in der Gasphase zu erhalten. Materialspezifische Eigenheiten, Ähnlichkeiten und Unterschiede wurden herausgearbeitet und diskutiert.

Für polymere und nichtvernetzte OE Bauteile wurden analytische Methoden entwickelt und vorgestellt. Eine Reihe von Methoden für aufbauende analytische Fragestellungen wurde mit besonderem Schwerpunkt auf die Reduzierung der Probenvorbereitung und somit möglicher Kontaminierung der Probe vor der Messung entwickelt.

- Messungen polymerbasierter Bauteile wurde unter Verwendung von LDI-MS präsentiert, welche bei Bedarf mit geringen Mengen an nicht-vernetztem Material, beispielsweise Dotanden oder elektronischen Fallen, angereichert werden können. Die Methode ermöglicht sowohl qualitative als auch quantitative Analyse solcher nichtvernetzter Additive. Erste Experimente an Bauteilen mit nichtvernetztem Material, die zuvor für eine gewisse Zeit elektrisch belastet wurden, zeigten zudem großes Potential dieser Methode zur Identifizierung ihrer molekularen Degradationsprozesse.
- Nichtvernetzte niedermolekulare Bauteile wurden mithilfe der lösungsmittelbasierten LIFDI-Methode analysiert. Die Evaluation der Methode zeigte vor allem einen Vorteil in einer geringen Störsignalmenge sowie einer möglichen Isolierung des für die Messung relevanten Materials auf dem Bauteil, beispielsweise der Pixel-Flächen.