

|   |    |
|---|----|
| Kurzzusammenfassung.....  | 1  |
| 1 Einleitung .....  | 2  |
| 1.1 Hinführung: Eine kleine Geschichte des Lichts .....                             | 2  |
| 1.1.1 Der Mensch und das Licht.....   | 2  |
| 1.1.2 Künstliche Beleuchtungsquellen .....  | 3  |
| 1.1.3 Lumineszierende Halbleiter: Das Phänomen der Elektrolumineszenz.....          | 4  |
| 1.1.4 Organische Leuchtdioden: Geschichte und Status Quo.....                       | 6  |
| 1.2 Die Funktionsweise von OLEDs .....  | 10 |
| 1.2.1 Charakteristische Größen .....  | 10 |
| 1.2.2 Elementarprozesse im OLED-Betrieb .....                                       | 12 |
| 1.2.3 Grenzbereiche: Begriffe, Bedeutung und experimentelle Abschätzung .....       | 18 |
| 1.2.4 Mehrschichtanordnungen bei OLEDs .....  | 23 |
| 1.2.5 Auskopplungseffekte.....  | 24 |
| 1.2.6 Die funktionellen Schichten einer OLED.....                                   | 25 |
| 1.2.7 Stabilität von Mehrschichtarchitekturen und Vernetzungskonzepte .....         | 29 |
| 1.2.8 Chemische Stabilität und Degradation .....                                    | 30 |
| 1.3 Photophysik für OLEDs .....   | 33 |
| 1.3.1 Entstehung von Excitonen aus Ladungsträgern, Spin-Statistik.....              | 33 |
| 1.3.2 Thermisch aktivierte, verzögerte Fluoreszenz und Singlet Harvesting .....     | 34 |
| 1.3.3 Triplettenergie: Abschätzung und Bedeutung für die Herstellung von OLEDs..... | 38 |

|       |  |     |
|-------|--|-----|
| 1.3.4 | Quenchingprozesse.....   | 40  |
| 1.4   | Kupfer(I)-Komplexe: Koordinationschemie und grundlegende Eigenschaften .....                       | 41  |
| 1.4.1 | Allgemeine Trends für Cu(I)-Verbindungen.....  | 41  |
| 1.4.2 | Geschichte und Strukturchemie der WHITE-Komplexe.....  | 45  |
| 1.4.3 | Ausgewählte Kupferkomplexe mit überbrückenden Liganden .....                                       | 48  |
| 1.4.4 | Photophysikalische Eigenschaften von Kupfer(I)halogenidkomplexen.....                              | 55  |
| 1.4.5 | Kupferhaltige Funktionsmaterialien in OLEDs.....   | 56  |
| 2     | Ziele der Arbeit .....   | 61  |
| 3     | Hauptteil .....  | 62  |
| 3.1   | Synthese neuer Kupfer(I)-Komplexe .....  | 62  |
| 3.1.1 | Betrachtungen über die Chemie von Kupfer(I)-Komplexen .....  | 62  |
| 3.1.2 | Heteroleptische NHetPHOS-Komplexe vom Typ $\text{Cu}_2\text{X}_2(\text{N,P})(\text{ER}_3)_2$ ..... | 75  |
| 3.1.3 | Heteroleptische Komplexe vom Typ $[(\text{CuX})(\text{N})(\text{P})]_2$ : Das White-System .....   | 96  |
| 3.1.4 | Homoleptische Komplexe vom Typ $[(\text{CuX})(\text{N,P})]_2$ .....                                | 103 |
| 3.2   | Photophysikalische Aspekte: Kupfer(I)-Komplexe als OLED-Leuchtstoffe.....                          | 111 |
| 3.2.1 | Thermisch aktivierte, verzögerte Fluoreszenz: Plausibilitätsbetrachtung .....                      | 111 |
| 3.2.2 | Abhängigkeit der Emissionseigenschaften von der Probenform.....                                    | 117 |
| 3.3   | Aspekte zur Prozessierbarkeit von Kupfer(I)-Komplexen .....  | 131 |
| 3.3.1 | Sublimierbarkeit .....   | 131 |
| 3.3.2 | Nasschemische Prozessierung .....  | 134 |
| 3.3.3 | Selbst-katalysierte Quervernetzung.....  | 136 |

---

|       |  |     |
|-------|--|-----|
| 3.3.4 | Thermische Vernetzung durch Bulk-Polymerisation .....                    | 144 |
| 3.3.5 | Der Chemistry in the Layer-Ansatz.....                                   | 156 |
| 3.4   | Neue organische Materialien mit hoher Triplett-Energie.....              | 163 |
| 3.4.1 | Die Eigenschaften von Kupfer(I)-Komplexen in Matrixmaterialien.....      | 163 |
| 3.4.2 | 2,6-Di-carbazoyl-pyridin: Syntheseoptimierung und Eigenschaften .....    | 167 |
| 3.4.3 | 2,6-Di-heteroaryl-pyridine: Eine neue Klasse an Hostmaterialien.....     | 173 |
| 3.4.4 | Derivate des 2,6-Di-carbazoyl-benzols h2 .....                           | 183 |
| 3.5   | Elektrolumineszenz-Studien.....  | 185 |
| 3.5.1 | Herstellung von OLED-Bauteilen .....                                     | 185 |
| 3.5.2 | Screening der monodentaten Phosphine <sup>242</sup> .....                | 186 |
| 3.5.3 | Optimierung der OLED-Effizienz mit den Komplexen 1-I-s und 1-I-o.....    | 188 |
| 3.5.4 | OLED-Bauteile mit White-Komplexen.....                                   | 193 |
| 3.5.5 | OLED-Bauteile mit WhitePHOS-Komplexen.....                               | 195 |
| 3.5.6 | OLED-Bauteile mit DabaPHOS-Komplexen .....                               | 197 |
| 3.5.7 | OLED Bauteile unter Verwendung von Click-Vernetzung <sup>175</sup> ..... | 199 |
| 4     | Zusammenfassung und Ausblick.....  | 202 |
| 5     | Experimentalteil .....   | 206 |
| 5.1   | Verwendete Arbeitstechniken .....  | 206 |
| 5.1.1 | Chemische Analytik .....   | 206 |
| 5.1.2 | Waage, Aufreinigung, Reaktionskontrolle .....                            | 208 |
| 5.1.3 | Röntgenstrukturanalyse .....   | 209 |

## Inhaltsverzeichnis

---

|       |  |     |
|-------|--|-----|
| 5.1.4 | Photophysikalische Messungen.....                | 210 |
| 5.1.5 | Cyclovoltammetrie .....                          | 213 |
| 5.1.6 | Lösemittel und Chemikalien.....                  | 213 |
| 5.1.7 | Allgemeine Arbeitsweise.....                     | 213 |
| 5.2   | Synthesevorschriften und chemische Analytik..... | 214 |
| 5.2.1 | Allgemeine Arbeitsvorschriften .....             | 214 |
| 5.2.2 | Synthese der Liganden .....                      | 219 |
| 5.2.3 | Synthese der Kupfer(I)-Komplexe .....            | 221 |
| 5.2.4 | Organische Materialien .....                     | 239 |
| 5.3   | Kristallographische Daten .....                  | 249 |
| 5.3.1 | Zusätzliche Verbindungen.....                    | 249 |
| 5.3.2 | Strukturberichte.....                            | 252 |
| 6     | Referenzen.....                                  | 274 |
| 7     | Abkürzungsverzeichnis .....                      | 293 |
| 8     | Lebenslauf.....                                  | 295 |
| 9     | Publikationen, Konferenzbeiträge, Patente .....  | 296 |
| 9.1.1 | Publikationen.....                               | 296 |
| 9.1.2 | Konferenzbeiträge und Poster .....               | 297 |
| 9.1.3 | Patente .....                                    | 298 |
| 10    | Danksagungen .....                               | 299 |