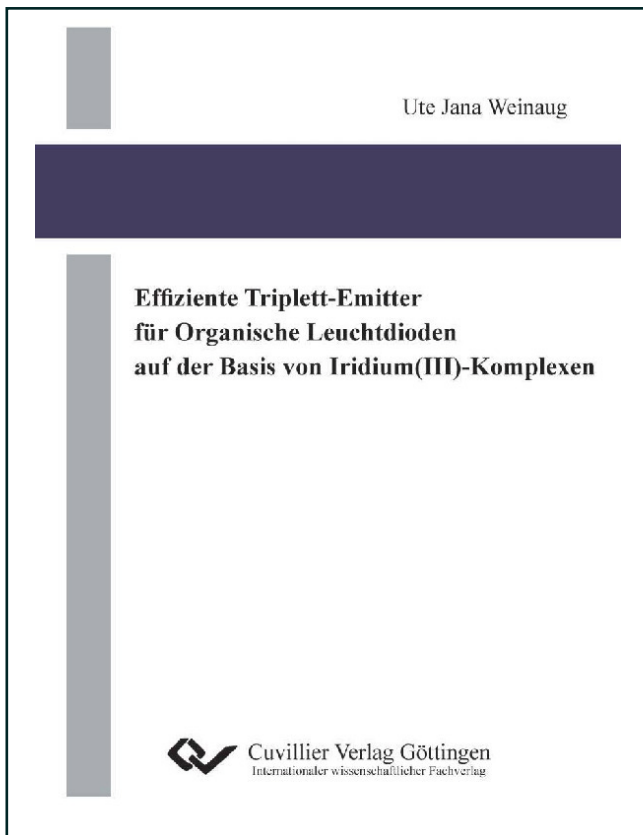




Ute Jana Weinaug (Autor)

Effiziente Triplett-Emitter für Organische Leuchtdioden auf der Basis von Iridium(III)-Komplexen



<https://cuvillier.de/de/shop/publications/874>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen, Germany
Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	1
1 Einleitung	7
1.1 <i>Motivation und Zielsetzung</i>	9
1.2 <i>Gliederung</i>	11
2 Grundlagen	13
2.1 <i>Quantenmechanische Beschreibung von Molekülen</i>	13
2.1.1 Die SCHRÖDINGER-Gleichung	13
2.1.2 Atom- und Molekülorbitale	14
2.2 <i>Beschreibung von Elektronenübergängen in Molekülen</i>	17
2.2.1 Intensität von Elektronenübergängen	17
2.2.2 Das FRANCK-CONDON-Prinzip	18
2.2.3 Auswahlregeln	20
2.3 <i>Das Phänomen Licht</i>	24
2.3.1 Absorption, Transmission, Reflexion	24
2.3.2 Das JABLONSKI-Diagramm	25
2.4 <i>Parameter der Emission</i>	28
2.4.1 Quantenausbeute	28
2.4.2 Abklingzeit	31
2.4.3 Nicht-Strahlende Konkurrenzprozesse	33
2.4.4 Anregungsprozesse von Elektronen	35
2.5 <i>OLEDs – Aufbau, Funktionsweise und Materialeigenschaften</i>	36
2.5.1 Aufbau und Funktionsweise	36
2.5.2 Transport- und Matrixmaterialien	39
2.5.3 Emittermaterialien	41
3 Synthese	45
3.1 <i>Allgemeine Synthesemöglichkeiten zur Darstellung von Iridium(III)-Komplexen</i>	45

3.1.1	Einstufige Synthese homoleptischer Ir(III)-Komplexe	47
3.1.2	Zweistufige Synthese homoleptischer Ir(III)-Komplexe	51
3.1.3	Synthese von heteroleptischen Iridium(III)-Komplexen	53
3.2	<i>Synthese substituierter fac-Tris[2-(2-pyridyl-κN)phenyl]-iridium(III)-Verbindungen</i>	58
3.2.1	Synthese substituierter 2-Phenylpyridine	58
3.2.2	Einstufige Synthese von substituierten homoleptischen Ir(ppy) ₃ -Derivaten	60
3.2.3	Synthese der Chlorodimere	63
3.2.4	Synthese heteroleptischer Ir(ppy) ₂ XY-Derivate	65
3.3	<i>Synthese der Heterofünfringsysteme</i>	67
3.3.1	Neuartiges Heterofünfring-Ligandensystem	67
3.3.2	Variation von Heterofünfring-Derivaten: Synthese der Liganden	69
3.3.3	Einstufige Synthese von Heterofünfring-Komplexen	75
3.3.4	Zweistufige Synthese dreifach substituierter <i>facialer</i> Iridium(III)-Komplexe	77
3.3.5	Synthese heteroleptischer Heterofünfring-Komplexe	86
3.3.6	Vergleich verbrückter und unverbrückter Heterofünfring-Komplexe	91
4	Strukturmerkmale	93
4.1	<i>Röntgenstrukturanalysen</i>	93
4.1.1	Literaturbekannte Kristalldaten von Iridium(III)-Komplexen	95
4.1.2	Methoxy-substituierter Heterofünfring-Ligand	97
4.1.3	Heteroleptischer Heterofünfring-Komplex ohne Substituenten	99
4.1.4	Einfluss einer Trifluormethylgruppe im Sättigungsliganden	102
4.1.5	Einfluss der Methoxy-Gruppe im farbgebenden Liganden	104
4.1.6	Isomere von Heterofünfring-Komplexen	108
4.1.7	Unverbrückter <i>fac</i> -Tris[4-(2-methylthiazol-4-yl-κN)biphenyl-3-yl]-iridium(III)-Komplex	110
4.1.8	Vergleich der Bindungseigenschaften verbrückter und unverbrückter Heterofünfring-Ligandensysteme	114
4.2	<i>NMR-Spektroskopische Untersuchungen</i>	117
4.2.1	Publizierte NMR-spektroskopische Untersuchungen an Iridium(III)-Komplexen	117
4.2.2	Untersuchungen substituierter Ir(ppy) ₃ -Derivate	118
4.2.3	Heterofünfring-Verbindungen	133
5	Grenzorbital-Betrachtung	151
5.1	<i>Elektrochemische Messungen – Cyclovoltammetrie</i>	151
5.1.1	Eine kurze Einführung zur Messtechnik der Cyclovoltammetrie	152
5.1.2	Auswahl der Lösemittel	153
5.1.3	Substituierte Ir(ppy) ₃ -Komplexe	155

5.1.4	Cyclovoltammetrische Untersuchungen an homoleptischen Heterofünfring-Komplexen	161
5.1.5	Heteroleptische Iridium(III)-Komplexe	163
5.2	<i>Molecular Modelling</i>	169
5.2.1	Hintergründe	169
5.2.2	Mechanistische Studien zum Reaktionsverlauf verbrückter Heterofünfring-Systeme	172
5.2.3	Variation der Emission durch Substitution	177
6	Optische Charakterisierung	185
6.1	<i>Substituierte Ir(ppy)₃-Komplexe</i>	186
6.1.1	Aspekte der Literatur am Beispiel Ir(ppy) ₃	186
6.1.2	Absorptionseigenschaften substituierter Ir(ppy) ₃ -Komplexe	189
6.1.3	Emissionseigenschaften substituierter Ir(ppy) ₃ -Komplexe	194
6.2	<i>Substituierte heteroleptische Ir(ppy)₂XY-Komplexe</i>	204
6.2.1	Absorptionseigenschaften substituierter heteroleptischer Ir(ppy) ₂ XY-Komplexe	204
6.2.2	Emissionseigenschaften substituierter heteroleptischer Ir(ppy) ₂ XY-Komplexe	209
6.3	<i>Heterofünfring-Ir(III)-Komplexe</i>	217
6.3.1	Homoleptische Heterofünfring-Komplexe	217
6.3.2	Verbrückte, heteroleptische Heterofünfring-Komplexe	231
6.3.3	Substitution am farbgebenden Heterofünfring-Liganden	238
7	Organische Leuchtdioden	245
7.1	<i>Messtechnik und Kenngrößen</i>	245
7.2	<i>Optimierte Devices</i>	249
7.2.1	Unverbrückter, unsubstituierter Heterfünfring-Komplex 73 als Emittermaterial	249
7.2.2	Phenylsubstituierter, unverbrückter Heterofünfring-Komplex 86	253
7.2.3	Verbrückter, homoleptischer Heterofünfring-Komplex 72	256
7.2.4	Einfluss der Fixierung des Liganden im Devicevergleich	258
7.3	<i>Weiß-emittierende OLED</i>	260
7.3.1	Realisierung weißer Emission einer OLED	260
7.3.2	Optimierte, weiß-emittierende OLED mit Ir(MNTZ) ₃ (72)	262
8	Experimenteller Teil	265
8.1	<i>Allgemeine Angaben</i>	265
8.1.1	Allgemeine Angaben zur Arbeitstechnik	265
8.1.2	Nomenklatur	266
8.1.3	Allgemeine Angaben zur analytischen Messtechnik	267

8.2	<i>Verwendete Abkürzungen</i>	272
8.3	<i>Allgemeine Arbeitsvorschriften</i>	273
8.3.1	Synthesevorschrift zur einstufigen Herstellung homoleptischer Iridium(III)-Komplexe (AAV 1)	273
8.3.2	Synthesevorschrift zur Herstellung von Chlorodimeren (AAV 2)	273
8.3.3	Synthesevorschrift zur zweistufigen Herstellung homoleptischer Iridium(III)-Komplexe über die Chlorodimer-Zwischenstufe (AAV 3)	274
8.3.4	Synthesevorschrift zur Herstellung heteroleptischer Iridium(III)-Komplexe (AAV 4)	274
8.4	<i>Synthese substituierter 2-Phenylpyridin-Verbindungen</i>	275
8.4.1	Synthese substituierter 2-Phenylpyridin-Ligandsysteme	275
8.4.2	Synthese substituierter Ir(ppy) ₃ -Derivate	283
8.4.3	Synthese substituierter Tetrakis[2-(2-pyridyl-κN)phenyl]bis(μ-chloro)diiridium(III)-Verbindungen	292
8.4.4	Synthese substituierter heteroleptischer Bis(2-(2-pyridyl-κN)phenyl)-iridium(III)-Komplexe	295
8.5	<i>Synthese von Heterofünfring-Verbindungen</i>	307
8.5.1	Synthese verbrückter Heterofünfring-Liganden	307
8.5.2	Synthese unverbrückter Heterofünfring-Liganden	315
8.5.3	Synthese von Chlorodimeren verbrückter Heterofünfring-Verbindungen	317
8.5.4	Synthese von Chlorodimeren unverbrückter Heterofünfringsysteme	320
8.5.5	Synthese homoleptischer Ir(III)-Komplexe mit verbrückten Heterofünfring-Liganden	322
8.5.6	Synthese homoleptischer Ir(III)-Komplexe mit unverbrückten Heterofünfring-Liganden	323
8.5.7	Synthese verbrückter und unsubstituierter Heterofünfring-Liganden zu heteroleptischen Ir(III)-Komplexen	326
8.5.8	Synthese verbrückter substituierter Heterofünfring-Liganden zu heteroleptischen Ir(III)-Komplexen	339
8.5.9	Synthese unverbrückter Heterofünfring-Liganden zu heteroleptischen Ir(III)-Komplexen	347
	Anhang A – Transport- und Matrixmaterialien	355
	Anhang B – Kristallstrukturdaten	357
	Anhang C – NMR-spektroskopische Daten	374
	Danksagung	387
	Literaturverzeichnis	389