

(12) NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES PATENTWESENS (PCT) VERÖFFENTLICHTE INTERNATIONALE ANMELDUNG

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum
Internationales Büro



(43) Internationales Veröffentlichungsdatum
17. Dezember 2009 (17.12.2009)

PCT

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer
WO 2009/150151 A1

- (51) **Internationale Patentklassifikation:**
H01L 51/00 (2006.01) *C07F 15/00* (2006.01)
- (21) **Internationales Aktenzeichen:** PCT/EP2009/057089
- (22) **Internationales Anmeldedatum:**
9. Juni 2009 (09.06.2009)
- (25) **Einreichungssprache:** Deutsch
- (26) **Veröffentlichungssprache:** Deutsch
- (30) **Angaben zur Priorität:**
08157913.8 10. Juni 2008 (10.06.2008) EP
- (71) **Anmelder (für alle Bestimmungsstaaten mit Ausnahme von US):** **BASF SE** [DE/DE]; 67056 Ludwigshafen (DE).
- (72) **Erfinder; und**
- (75) **Erfinder/Anmelder (nur für US):** **MOLT, Oliver** [DE/DE]; Talstrasse 1a, 69493 Hirschberg (DE). **LENN-ARTZ, Christian** [DE/DE]; Hans-Purrmann-Strasse 24, 67105 Schifferstadt (DE). **FUCHS, Evelyn** [DE/DE]; Waldhornstrasse 17, 68199 Mannheim (DE). **DOR-MANN, Korinna** [DE/DE]; Portugieser Strasse 21, 67098 Bad Dürkheim (DE). **LANGER, Nicolle** [NL/DE]; Rebenstrasse 20, 64646 Heppenheim (DE). **SCHILD-KNECHT, Christian** [DE/DE]; Winkelweg 52, 68305 Mannheim (DE). **RUDOLPH, Jens** [DE/DE]; Wilhelm-Leuchner-Strasse 2, 67547 Worms (DE). **WAGENBLAST, Gerhard** [DE/DE]; Am Judenacker 8, 67157 Wachenheim (DE). **WATANABE, Soichi** [JP/DE]; S6, 34, 68161 Mannheim (DE).
- (74) **Anwalt:** **ISENBRUCK, Günter**; Isenbruck Bösl Hörschler Wichmann LLP, Patentanwälte, EASTSITE ONE, Seckenheimer Landstrasse 4, 68163 Mannheim (DE).
- (81) **Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare nationale Schutzrechtsart):** AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, RO, RS, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
- (84) **Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare regionale Schutzrechtsart):** ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).
- Veröffentlicht:**
— mit internationalem Recherchenbericht (Artikel 21 Absatz 3)

(54) **Title:** DEUTERATED TRANSITION METAL COMPLEX AND USE THEREOF IN ORGANIC LIGHT-EMITTING DIODES V

(54) **Bezeichnung:** DEUTERIERTE ÜBERGANGSMETALL- KOMPLEXE UND DEREN VERWENDUNG IN ORGANISCHEN LEUCHTDIODEN - V

(57) **Abstract:** Metal complexes comprising at least one polycyclic aromatic ligand, wherein the metal complexes contain at least one deuterium atom, an organic light-emitting diode comprising at least one metal complex according to the invention, a light-emitting layer comprising at least one metal complex according to the invention, an organic light-emitting diode comprising at least one light-emitting layer according to the invention, use of the at least one metal complex according to the invention in organic light-emitting diodes and a device selected from the group consisting of stationary screens, such as computer or television screens, screens in printers, cooking devices and billboards, lighting, information boards and mobile screens such as screens in cell phones, laptops, digital cameras, vehicles and destination displays on busses, trams and trains, said device comprising at least one organic light-emitting diode according to the invention.

(57) **Zusammenfassung:** Metallkomplexe enthaltend mindestens einen polycyclischen aromatischen Liganden, wobei die Metallkomplexe mindestens ein Deuteriumatom tragen, eine organische Leuchtdiode enthaltend mindestens einen erfindungsgemäßen Metallkomplex, eine Licht-emittierende Schicht enthaltend mindestens einen erfindungsgemäßen Metallkomplex, eine organische Leuchtdiode enthaltend mindestens eine erfindungsgemäße Licht-emittierende Schicht, die Verwendung des mindestens einen erfindungsgemäßen Metallkomplexes in organischen Leuchtdioden sowie eine Vorrichtung ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus stationären Bildschirmen, wie Bildschirmen von Computern, Fernsehern, Bildschirmen in Druckern, Küchengeräten sowie Reklametafeln, Beleuchtungen, Hinweistafeln und mobilen Bildschirmen, wie Bildschirmen in Handys, Laptops, Digitalkameras, Fahrzeugen sowie Zielanzeigen an Bussen und Bahnen, enthaltend mindestens eine erfindungsgemäße organische Leuchtdiode.



WO 2009/150151 A1

DEUTERIERTE ÜBERGANGSMETALL-KOMPLEXE UND DEREN VERWENDUNG IN ORGANISCHEN LEUCHTDIODEN – V

Beschreibung

5

Die vorliegende Erfindung betrifft Metallkomplexe enthaltend mindestens einen polycyclischen aromatischen Liganden, wobei die Metallkomplexe mindestens ein Deuteriumatom tragen, eine organische Leuchtdiode enthaltend mindestens einen erfindungsgemäßen Metallkomplex, eine Licht-emittierende Schicht enthaltend mindestens einen erfindungsgemäßen Metallkomplex, eine organische Leuchtdiode enthaltend mindestens eine erfindungsgemäße Licht-emittierende Schicht, die Verwendung des mindestens einen erfindungsgemäßen Metallkomplexes in organischen Leuchtdioden sowie eine Vorrichtung ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus stationären Bildschirmen, wie Bildschirmen von Computern, Fernsehern, Bildschirmen in Druckern, Küchengeräten sowie Reklametafeln, Beleuchtungen, Hinweistafeln und mobilen Bildschirmen, wie Bildschirmen in Handys, Laptops, Digitalkameras, Fahrzeugen sowie Zielanzeigen an Bussen und Bahnen, enthaltend mindestens eine erfindungsgemäße organische Leuchtdiode.

20 In organischen Leuchtdioden (OLED) wird die Eigenschaft von Materialien ausgenutzt, Licht zu emittieren, wenn sie durch elektrischen Strom angeregt werden. OLEDs sind insbesondere interessant als Alternative zu Kathodenstrahlröhren und Flüssigkristalldisplays zur Herstellung von Flachbildschirmen. Aufgrund der sehr kompakten Bauweise und des intrinsisch niedrigen Stromverbrauchs eignen sich die Vorrichtungen enthaltend OLEDs insbesondere für mobile Anwendungen, z. B. für Anwendungen in Handys, Laptops, usw.

Die Grundprinzipien der Funktionsweise von OLEDs sowie geeignete Aufbauten (Schichten) von OLEDs sind z. B. in WO 2005/113704 und deren zitierten Literatur genannt.

Als Licht-emittierende Materialien (Emitter) können neben fluoreszierenden Materialien (Fluoreszenz-Emitter) phosphoreszierende Materialien (Phosphoreszenz-Emitter) eingesetzt werden. Bei den Phosphoreszenz-Emittern handelt es sich üblicherweise um metallorganische Komplexe, die im Gegensatz zu den Fluoreszenz-Emittern, die eine Singulett-Emission zeigen, eine Triplett-Emission zeigen (M. A. Baldo et al., Appl. Phys. Lett. 1999, 75, 4 – 6). Aus quantenmechanischen Gründen ist bei Verwendung der Phosphoreszenz-Emitter eine bis zu vierfache Quanten-, Energie- und Leistungseffizienz möglich. Um die Vorteile des Einbaus der metallorganischen Phosphoreszenz-Emitter in die Praxis umzusetzen, ist es erforderlich, Phosphoreszenz-Emitter bereitzustellen, die eine hohe operative Lebensdauer, eine hohe Effizienz, eine hohe Stabilität

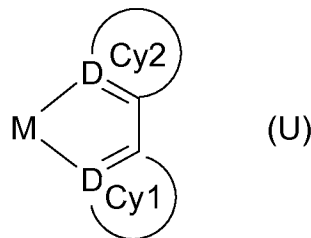
40

gegenüber Temperaturbelastung und eine niedrige Einsatz- und Betriebsspannung aufweisen.

Um den vorstehend genannten Anforderungen zu genügen, sind zahlreiche Phosphoreszenz-Emitter im Stand der Technik vorgeschlagen worden.

So betrifft WO 2007/095118 Metallkomplexe cyclometallierter Imidazo[1,2-f]phenanthridin- und Diimidazo[1,2-A:1',2'-C]chinazolinliganden sowie isoelektronischer und benzanellierter Derivate davon. Die Metallkomplexe sind phosphoreszierend und werden in OLEDs eingesetzt. Die OLEDs zeigen gemäß WO 2007/095118 eine langlebige und effiziente blaue, grüne und rote Emission. Deuterierte Systeme sind in WO 2007/095118 nicht erwähnt.

In WO 2007/093282 ist ein spezielles elektronisches Bauteil sowie ein Verfahren zu dessen Herstellung und dessen Verwendung erwähnt. Bei diesem elektronischen Bauteil kann es sich z. B. um eine OLED handeln. Gemäß der Beschreibung in WO 2007/093282 enthält das elektronische Bauteil chemisch reaktive Materialien, wobei es sich um Elektrolumineszenz- bzw. Lasermaterialien handelt. Unter anderem sind als reaktive Materialien metallorganische Komplexe genannt, die zur Phosphoreszenz befähigt sind (J). Bei diesen metallorganischen Komplexen handelt es sich u. a. um metallorganische Komplexe der Formel (T) $[M(L)_n(L')_m(L'')_o]$ handeln, die eine Teilstruktur $M(L)_n$ gemäß Formel (U) aufweisen können



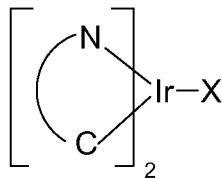
Die Zyklen Cy1 und Cy2 können mit Resten R substituiert sein, wobei es sich bei R u. a. um Deuterium handeln kann. Beispiele für Verbindungen der Formel (T), die Struktureinheiten der Formel (U) enthalten, sind in WO 2007/093282 nicht erwähnt. Des Weiteren ergibt sich aus WO 2007/093282 nicht, ob Metallkomplexe der Formel (T), die Struktureinheiten der Formel (U) enthalten, wobei einer der Zyklen Cy1 bzw. Cy2 mit Deuterium substituiert ist, für den Einsatz in OLEDs vorteilhaft sind.

EP-A 1 372 360 betrifft organische elektrolumineszente Polymere mit verbesserter Stabilität. Als Polymere werden Poly(phenylvinylene) eingesetzt. Um die Stabilität der Vinylbindungen in den Poly(phenylvinylene) entlang der konjugierten Polymerkette weiter zu verbessern, werden gemäß EP-A 1 372 360 Poly(phenylvinylene)

eingesetzt, die eine Deuterium-Substitution am Vinylenteil aufweisen. Der Grund für den Einsatz deuterierter Polymere ist gemäß EP-A 1 372 360 somit die Stabilisierung der reaktiven Vinylen-Doppelbindungen der Poly(phenylenvinylene).

- 5 In WO 02/47440 A1 sind organische Halbleitermaterialien offenbart, worin ein oder mehrere Wasserstoffatome durch Deuterium ersetzt sind. Die organischen Halbleiter weisen eine hohe Lumineszenz und eine gute thermische Stabilität auf. Es wird behauptet, dass optoelektronische Elemente, die die organischen Halbleiter enthalten, eine verbesserte Performance und Lebensdauer aufweisen. Bevorzugt handelt es sich bei den organischen Halbleitern um lumineszierende organische Polymere oder metallorganische Verbindungen. In der Beschreibung ist eine große Zahl verschiedener organischer Halbleitermaterialien genannt. In den Beispielen in WO 02/47440 A1 ist erwähnt, dass eine organische Leuchtdiode, die vollständig deuteriertes $\text{Ir}(\text{ppy})_3\text{-d8}$ als Emittermaterial aufweist, eine höhere Quanteneffizienz und Leuchstärke aufweist als eine organische Leuchtdiode, die nicht deuteriertes $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ als Emittermaterial enthält.

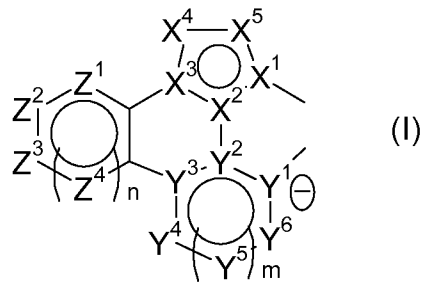
Die In WO 02/47440 A1 offenbarten Ergebnisse entsprechen den in WO 2006/095951 A1 offenbarten Ergebnissen. In WO 02006/095951 A1 sind deuterierte phosphoreszieren-



- rende Ir-Komplexe , worin X ein bidentater Ligand ist, und deren Einsatz als Emittermaterial in OLEDs offenbart. OLEDs, die diese deuterierten Komplexe als Emittermaterial enthalten weisen gemäß WO 2006/095951 A1 eine höhere Quanteneffizienz und Leuchstärke auf als OLEDs, die die entsprechenden nicht deuterierten Ir-Komplexe als Emittermaterial enthalten.
- 25 Aufgabe der vorliegenden Erfindung gegenüber dem vorstehend genannten Stand der Technik ist es, weitere zur Phosphoreszenz geeignete Metallkomplexe für die Verwendung in OLEDs bereitzustellen, die ein ausgewogenes Eigenschaftsspektrum zeigen, z. B. gute Effizienzen, eine verbesserte Lebensdauer und höhere Stabilitäten im Device sowie gute Ladungstransporteigenschaften und thermische Stabilität. Dabei sollen insbesondere Phosphorenzemitter bereitgestellt werden, die eine verbesserte Lebensdauer der OLEDs ermöglichen.

Diese Aufgabe wird gelöst durch einen Metallkomplex enthaltend mindestens einen Liganden der allgemeinen Formel (I)

4



worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

- 5 Y^5, Z^4
unabhängig voneinander CD, CR¹, CH, N;
- $X^1, X^2, X^3, Y^1, Y^2, Y^3$
unabhängig voneinander N oder C;
- 10 X^4, X^5
unabhängig voneinander CD, CR¹, CH, N, S oder O; wobei X⁴ oder X⁵ des Weiteren NR¹ sein können, wenn der jeweils andere Rest X⁵ oder X⁴ N, CH, CD oder CR¹ bedeutet;
- 15 Y^4, Y^6
unabhängig voneinander CD, CR¹, CH, N; wobei Y⁴ oder Y⁶ im Falle von m = 0 des Weiteren S, O oder NR¹ bedeuten können;
- 20 Z^1, Z^2, Z^3
unabhängig voneinander CD, CR¹, CH, N; wobei Z¹, Z² oder Z³ im Falle von n = 0 des Weiteren S, O oder NR¹ bedeuten können;
- 25 R¹ unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl, unsubstituiertes oder substituiertes Cycloalkyl, unsubstituiertes oder substituiertes Heterocycloalkyl, unsubstituiertes oder substituiertes Aryl, unsubstituiertes oder substituiertes Heteroaryl, unsubstituiertes oder substituiertes Alkenyl, unsubstituiertes oder substituiertes Cycloalkenyl, unsubstituiertes oder substituiertes Alkinyl, SiR²₃, Halogen, ein Substituent mit Donor- oder Akzeptorwirkung wobei in dem Fall, wenn R¹ an ein N-Atom gebunden ist, R¹ unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl oder unsubstituiertes oder substituiertes Aryl oder unsubstituiertes oder substituiertes Heteroaryl bedeutet, wobei zwei beliebige Reste R¹ des Weiteren gemeinsam eine Alkylen- oder Arylenbrücke bilden können;
- 30
- 35

R^2 unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl oder unsubstituiertes oder substituiertes Aryl oder unsubstituiertes oder substituiertes Heteroaryl;

5 m, n unabhängig voneinander 0 oder 1, wobei die Gruppen Z^4 bzw. Y^5 bei n bzw. m = 0 nicht vorhanden sind;

dadurch gekennzeichnet, dass der Metallkomplex mindestens ein Deuteriumatom enthält.

10

Gemäß der vorliegenden Erfindung können der Ligand der Formel (I) und/oder einer oder mehrere weitere gegebenenfalls in dem erfindungsgemäßen Metallkomplex vorliegende Liganden mindestens ein Deuteriumatom aufweisen. In einer bevorzugten Ausführungsform enthält der Ligand der Formel (I) mindestens ein Deuteriumatom.

15

Dabei kann das mindestens eine Deuteriumatom in einem oder mehreren der Reste R^1 und/oder R^2 vorliegen und/oder mindestens eine der Gruppen X^4 , X^5 , Y^4 , Y^5 , Y^6 , Z^1 , Z^2 , Z^3 , Z^4 bedeutet CD. Besonders bevorzugt bedeutet mindestens eine der Gruppen X^4 , X^5 , Y^4 , Y^5 , Y^6 , Z^1 , Z^2 , Z^3 , Z^4 CD.

20

Es wurde gefunden, dass für die Verwendung in OLEDs geeignete Metallkomplexe bereitgestellt werden können, wobei sich die OLEDs durch ein ausgewogenes Eigenschaftsspektrum, z. B. durch gute Effizienzen, eine hervorragende Lebensdauer und sehr gute Stabilitäten im Device sowie gute Ladungstransporteigenschaften und thermische Stabilität gegenüber im Stand der Technik bekannten OLEDs auszeichnen.

25

Insbesondere können bei Verwendung der erfindungsgemäßen Metallkomplexe OLEDs bereitgestellt werden, die im blauen Bereich des elektromagnetischen Spektrums Licht emittieren.

30

Die erfindungsgemäßen Metallkomplexe können in jeder Schicht einer OLED eingesetzt werden, wobei das Ligandgerüst oder Zentralmetall zur Anpassung an gewünschte Eigenschaften der Metallkomplexe variiert werden kann. Beispielsweise ist der Einsatz der erfindungsgemäßen Metallkomplexe in der Licht-emittierenden Schicht, einer Blockschicht für Elektronen, einer Blockschicht für Excitonen, einer Blockschicht für Löcher, einer Lochtransportschicht und/oder einer Elektronentransportschicht der OLED in Abhängigkeit von dem Substitutionsmuster der erfindungsgemäßen Metallkomplexe und den elektronischen Gegebenheiten in weiteren in der OLED vorliegenden Schichten möglich. Bevorzugt werden die erfindungsgemäßen Metallkomplexe in der Licht-emittierenden Schicht eingesetzt. Darin können die erfindungsgemäßen Metallkomplexe als Emittiermaterialien und/oder Matrixmaterialien eingesetzt werden. Bevorzugt werden die erfindungsgemäßen Metallkomplexe als Emittiermaterialien in OLEDs eingesetzt.

40

Im Sinne der vorliegenden Anmeldung haben die Begriffe unsubstituierter oder substituierter Arylrest oder -gruppe, unsubstituierter oder substituierter Heteroarylrest oder -gruppe, unsubstituierter oder substituierter Alkylrest oder -gruppe, unsubstituierter oder substituierter Cycloalkylrest oder -gruppe, unsubstituierter oder substituierter Heterocycloalkylrest oder -gruppe, unsubstituierter oder substituierter Alkenylrest oder -gruppe, unsubstituierter oder substituierter Alkynylrest oder -gruppe, Alkylrest oder -gruppe, und Gruppen mit Donor- und/oder Akzeptorwirkung die folgenden Bedeutungen:

10

Unter einem Arylrest (oder -gruppe) ist ein Rest mit einem Grundgerüst von 6 bis 30 Kohlenstoffatomen, bevorzugt 6 bis 18 Kohlenstoffatomen zu verstehen, der aus einem aromatischen Ring oder mehreren kondensierten aromatischen Ringen aufgebaut ist. Geeignete Grundgerüste sind zum Beispiel Phenyl, Naphthyl, Anthracenyl oder Phenanthrenyl. Dieses Grundgerüst kann unsubstituiert sein (d. h., dass alle Kohlenstoffatome, die substituierbar sind, Wasserstoffatome tragen), oder an einer, mehreren oder allen substituierbaren Positionen des Grundgerüsts substituiert sein. Geeignete Substituenten sind zum Beispiel Deuterium, Alkylreste, bevorzugt Alkylreste mit 1 bis 8 Kohlenstoffatomen, besonders bevorzugt Methyl, Ethyl oder i-Propyl, Arylreste, bevorzugt C₆-Arylreste, die wiederum substituiert oder unsubstituiert sein können, Heteroarylreste, bevorzugt Heteroarylreste, die mindestens ein Stickstoffatom enthalten, besonders bevorzugt Pyridylreste, Alkenylreste, bevorzugt Alkenylreste, die eine Doppelbindung tragen, besonders bevorzugt Alkenylreste mit einer Doppelbindung und 1 bis 8 Kohlenstoffatomen, oder Gruppen mit Donor- oder Akzeptorwirkung. Die vorstehend genannten Alkylreste, Arylreste, Heteroarylreste, Alkenylreste und Gruppen mit Donor- oder Akzeptorwirkung können an einer oder mehreren Positionen deuteriert sein. Geeignete Gruppen, mit Donor- oder Akzeptorwirkung sind nachstehend genannt. Ganz besonders bevorzugt tragen die substituierten Arylreste Substituenten ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Deuterium, Methyl, Isopropyl, F, CN, Aryloxy und Alkoxy, Thioaryl, Thioalkyl, Heteroaryl. Bevorzugt ist der Arylrest oder die Arylgruppe ein C₆-C₁₈-Arylrest, besonders bevorzugt ein C₆-Arylrest, der gegebenenfalls mit mindestens einem oder mehreren der vorstehend genannten Substituenten substituiert ist. Besonders bevorzugt weist der C₆-C₁₈-Arylrest, bevorzugt C₆-Arylrest, keinen, einen, zwei, drei oder vier der vorstehend genannten Substituenten auf.

35

Unter einem Heteroarylrest oder einer Heteroarylgruppe sind Reste zu verstehen, die sich von den vorstehend genannten Arylresten dadurch unterscheiden, dass in dem Grundgerüst der Arylreste mindestens ein Kohlenstoffatom durch ein Heteroatom ersetzt ist. Bevorzugte Heteroatome sind N, O und S. Ganz besonders bevorzugt sind ein oder zwei Kohlenstoffatome des Grundgerüsts der Arylreste durch Heteroatome ersetzt. Insbesondere bevorzugt ist das Grundgerüst ausgewählt aus Systemen wie

40

Pyridin und fünfgliedrigen Heteroaromaten wie Pyrrol, Furan, Pyrazol, Imidazol, Thiophen, Oxazol, Thiazol, Triazol. Das Grundgerüst kann an einer, mehreren oder allen substituierbaren Positionen des Grundgerüsts substituiert sein. Geeignete Substituenten sind dieselben, die bereits bezüglich der Arylgruppen genannt wurden.

5

Unter einem Alkylrest oder einer Alkylgruppe ist ein Rest mit 1 bis 20 Kohlenstoffatomen, bevorzugt 1 bis 10 Kohlenstoffatomen, besonders bevorzugt 1 bis 8, ganz besonders bevorzugt 1 bis 4 Kohlenstoffatomen zu verstehen. Dieser Alkylrest kann verzweigt oder unverzweigt sein und gegebenenfalls mit einem oder mehreren Heteroatomen, bevorzugt Si, N, O oder S, besonders bevorzugt N, O oder S, unterbrochen sein. Des Weiteren kann dieser Alkylrest mit einem oder mehreren der bezüglich der Arylgruppen genannten Substituenten substituiert sein. Es ist ebenfalls möglich, dass der Alkylrest eine oder mehrere (Hetero-)Arylgruppen trägt. Im Sinne der vorliegenden Anmeldung stellen z. B. Benzylreste somit substituierte Alkylreste dar. Dabei sind alle der vorstehend aufgeführten (Hetero-)Arylgruppen geeignet. Besonders bevorzugt sind die Alkylreste ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Methyl, Ethyl, iso-Propyl, n-Propyl, n-Butyl, iso-Butyl und tert-Butyl, ganz besonders bevorzugt sind Methyl, iso-Propyl, sowie den entsprechenden teilweise oder vollständig deuterierten Derivaten, z. B. CD_3 , $-C(CD_3)_2D$ oder $-C(CD_3)_3$.

15
20

Unter einem Cycloalkylrest oder einer Cycloalkylgruppe ist ein Rest mit 3 bis 20 Kohlenstoffatomen, bevorzugt 3 bis 10 Kohlenstoffatomen, besonders bevorzugt 3 bis 8 Kohlenstoffatomen zu verstehen. Dieses Grundgerüst kann unsubstituiert sein (d. h., dass alle Kohlenstoffatome, die substituierbar sind, Wasserstoffatome tragen), oder an einer, mehreren oder allen substituierbaren Positionen des Grundgerüsts substituiert sein. Geeignete Substituenten sind die bereits vorstehend bezüglich der Arylreste genannten Gruppen. Beispiele für geeignete Cycloalkylreste sind Cyclopropyl, Cyclopentyl und Cyclohexyl.

25

Unter einem Heterocycloalkylrest oder einer Heterocycloalkylgruppe sind Reste zu verstehen, die sich von den vorstehend genannten Cycloalkylresten dadurch unterscheiden, dass in dem Grundgerüst der Cycloalkylreste mindestens ein Kohlenstoffatom durch ein Heteroatom ersetzt ist. Bevorzugte Heteroatome sind N, O und S. Ganz besonders bevorzugt sind ein oder zwei Kohlenstoffatome des Grundgerüsts der Cycloalkylreste durch Heteroatome ersetzt. Beispiele für geeignete Heterocycloalkylreste sind Reste abgeleitet von Pyrrolidin, Piperidin, Piperazin, Tetrahydrofuran, Dioxan.

30
35

Unter einem Alkenylrest oder einer Alkenylgruppe ist ein Rest zu verstehen, der den vorstehend genannten Alkylresten mit mindestens zwei Kohlenstoffatomen entspricht, mit dem Unterschied, dass mindestens eine C-C-Einfachbindung des Alkylrests durch

40

eine C-C-Doppelbindung ersetzt ist. Bevorzugt weist der Alkenylrest eine oder zwei Doppelbindungen auf.

5 Unter einem Alkinylrest oder einer Alkinylgruppe ist ein Rest zu verstehen, der den vorstehend genannten Alkylresten mit mindestens zwei Kohlenstoffatomen entspricht, mit dem Unterschied, dass mindestens eine C-C-Einfachbindung des Alkylrests durch eine C-C-Dreifachbindung ersetzt ist. Bevorzugt weist der Alkinylrest eine oder zwei Dreifachbindungen auf.

10 Die Begriffe Alkylen und Arylen haben im Sinne der vorliegenden Anmeldung die bezüglich der Alkyl-, und Arylreste genannten Bedeutungen mit dem Unterschied, dass die Alkylen-, und Arylengruppen zwei Bindungsstellen aufweisen.

15 Bevorzugte Alkylengruppen sind $(CR^4)_n$, wobei R^4 Deuterium, H oder Alkyl, bevorzugt Deuterium, H, Methyl oder Ethyl, besonders bevorzugt H oder D und n 1 bis 3, bevorzugt 1 oder 2, besonders bevorzugt 1 bedeutet. Ganz besonders bevorzugt ist die Alkylengruppe CH_2 oder CD_2 .

20 Bevorzugte Arylengruppen sind 1,2-, 1,3- oder 1,4-Phenylengruppen, die unsubstituiert sind oder die bezüglich der Arylreste genannten Substituenten tragen können.

Unter einer Gruppe oder einem Substituenten mit Donor- oder Akzeptorwirkung sind im Sinne der vorliegenden Anmeldung die folgenden Gruppen zu verstehen:

25 Unter Gruppen mit Donorwirkung sind Gruppen zu verstehen, die einen +I- und/oder +M-Effekt aufweisen, und unter Gruppen mit Akzeptorwirkung sind Gruppen zu verstehen, die einen -I- und/oder -M-Effekt aufweisen. Geeignete Gruppen, mit Donor- oder Akzeptorwirkung sind Halogenreste, bevorzugt F, Cl, Br, besonders bevorzugt F, Alkoxyreste oder Aryloxyreste, OR^2 , Carbonylreste, Esterreste, sowohl Oxycarbonyl als
30 auch Carbonyloxy, Aminogruppen, NR_2^2 , Amidreste, CH_2F -Gruppen, CHF_2 -Gruppen, CF_3 -Gruppen, CN-Gruppen, Thiogruppen, Sulfonsäuregruppen, Sulfonsäureestergruppen, Boronsäuregruppen, Boronsäureestergruppen, Phosphonsäuregruppen, Phosphonsäureestergruppen, Phosphinreste, Sulfoxidreste, Sulfonylreste, Sulfidreste, SR^2 , Nitrogruppen, OCN, Boranreste, Silylgruppen, SiR_3^2 , Stannatreste, Iminogruppen,
35 Hydrazinreste, Hydrazonreste, Oximreste, Nitrosogruppen, Diazogruppen, Phosphinoxidgruppen, Hydroxygruppen oder SCN-Gruppen. Ganz besonders bevorzugt sind F, Cl, CN, Aryloxy, Alkoxy, Amino, CF_3 -Gruppen, Sulfonyl, Silyl, Sulfid und Heteroaryl. Insbesondere ganz besonders bevorzugt sind Heteroaryl, Silyl (SiR_3^2), F, Alkoxy oder Aryloxy (OR^2), Sulfidreste (SR^2), Amino (NR_2^2) und CN. Die Reste R^2 sind nachstehend
40 definiert.

Die vorstehend genannten Gruppen mit Donor- oder Akzeptorwirkung schließen nicht aus, dass weitere der in der vorliegenden Anmeldung genannte Reste und Substituenten, die nicht in der vorstehenden Liste der Gruppen mit Donor- oder Akzeptorwirkung aufgeführt sind, eine Donor- oder Akzeptorwirkung aufweisen.

5

Die Arylreste oder –gruppen, Heteroarylreste oder –gruppen, Alkylreste oder –gruppen, Cycloalkylreste oder –gruppen, Heterocycloalkylreste oder –gruppen, Alkenylreste oder –gruppen, Alkynylreste oder –gruppen und Gruppen mit Donor- und/oder Akzeptorwirkung, sowie die Alkylen- und Arylenreste oder –gruppen können – wie vorstehend erwähnt - substituiert oder unsubstituiert sein. Unter einer unsubstituierten Gruppe ist im Sinne der vorliegenden Anmeldung eine Gruppe zu verstehen, worin die substituierbaren Atome der Gruppe Wasserstoffatome tragen. Unter einer substituierten Gruppe ist im Sinne der vorliegenden Anmeldung eine Gruppe zu verstehen, worin ein oder mehrere substituierbare Atom(e) mindestens an einer Position anstelle eines Wasserstoffatoms einen Substituenten tragen. Geeignete Substituenten sind die vorstehend bezüglich der Arylreste oder –gruppen genannten Substituenten.

10

15

20

Kommen Reste mit denselben Nummerierungen mehrfach in den Verbindungen gemäß der vorliegenden Anmeldung vor, so können diese Reste jeweils unabhängig voneinander die genannten Bedeutungen aufweisen.

25

In einer bevorzugten Ausführungsform bedeutet mindestens eine der Gruppen X^1 oder Y^1 in dem Liganden der Formel (I) N, wobei bevorzugt genau eine der Gruppen X^1 oder Y^1 N bedeutet, wobei besonders bevorzugt X^1 N bedeutet.

30

Die Symbole $X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, Y^1, Y^2, Y^3, Y^4, Y^5, Y^6, Z^1, Z^2, Z^3, Z^4$ weisen unabhängig voneinander die folgenden Bedeutungen auf:

35

Y^5, Z^4

unabhängig voneinander CD, CR^1 , CH, N;

40

$X^1, X^2, X^3, Y^1, Y^2, Y^3$

unabhängig voneinander N oder C;

X^4, X^5

unabhängig voneinander CD, CR^1 , CH, N, S oder O; wobei X^4 oder X^5 des Weiteren NR^1 sein können, wenn der jeweils andere Rest X^5 oder X^4 N, CH, CD oder CR^1 bedeutet;

45

Y^4, Y^6

unabhängig voneinander CD, CR^1 , CH, N; wobei Y^4 oder Y^6 im Falle von $m = 0$ des Weiteren S, O oder NR^1 bedeuten können;

Z^1, Z^2, Z^3

unabhängig voneinander CD, CR¹, CH, N; wobei Z¹, Z² oder Z³ im Falle von n = 0 des Weiteren S, O oder NR¹ bedeuten können.

5

In einer bevorzugten Ausführungsform enthält mindestens eine der Gruppen X⁴, X⁵, Y⁴, Y⁵, Y⁶, Z¹, Z², Z³, Z⁴ mindestens ein Deuteriumatom. Besonders bevorzugt bedeutet mindestens eine der Gruppen X⁴, X⁵, Y⁴, Y⁵, Y⁶, Z¹, Z², Z³, Z⁴ CD.

10 Bevorzugt bedeuten 0, 1, 2 der vorstehend genannten Gruppen X⁴, X⁵, Y⁴, Y⁶, Z¹, Z² und Z³, besonders bevorzugt X⁴, Y⁴, Y⁶, Z¹, Z² und Z³ S oder O, wobei z. B. Y⁴ und/oder Z¹ in den Liganden der allgemeinen Formel (I) S oder O bedeuten und die übrigen Gruppen die vorstehend genannten Bedeutungen, jedoch nicht S oder O, aufweisen.

15

In einer besonders bevorzugten Ausführungsform betrifft die vorliegende Erfindung einen Metallkomplex, in dem die Gruppe X¹ N bedeutet und die übrigen vorstehend erwähnten Gruppen die vorstehend genannten Bedeutungen aufweisen.

20 Ganz besonders bevorzugt weisen die Symbole X¹, X², X³, X⁴, X⁵, Y¹, Y², Y³, Y⁴, Y⁵, Y⁶, Z¹, Z², Z³, Z⁴ unabhängig voneinander die folgenden Bedeutungen auf:

X², Y¹, Y², Y³

C;

25 X¹

N;

X³

C oder N, bevorzugt N;

X⁵

30 N, CD oder CR¹; bevorzugt CD;

X⁴

CR¹, CD, NR¹, O oder S, bevorzugt CR¹ oder CD;

Y⁴, Y⁵, Y⁶

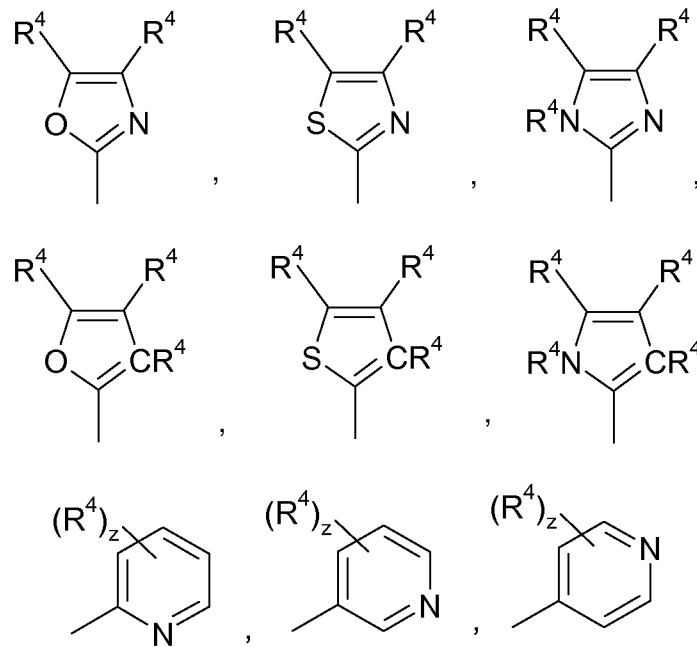
unabhängig voneinander CH, CD oder CR¹, bevorzugt CD;

35 Z¹, Z², Z³, Z⁴

unabhängig voneinander CH, CD, CR¹ oder N, wobei Z¹, Z² oder Z³ im Falle von n = 0 des Weiteren S, O oder NR¹ bedeuten können, bevorzugt bedeuten Z¹, Z² und Z⁴ CD und Z³ CR¹.

40 Weiter bevorzugt bedeutet X¹ N und X⁴ und/oder X⁵ CD, wobei die übrigen vorstehend genannten Gruppen die vorstehend genannten Bedeutungen aufweisen. Ganz beson-

- ders bevorzugt bedeuten X^1 und X^3 N, wobei bevorzugt X^5 zusätzlich CD oder CR^1 und X^4 CR^1 bedeutet. Die übrigen vorstehend genannten Gruppen weisen die vorstehend genannten Bedeutungen auf. Insbesondere ganz besonders bevorzugt bedeuten X^1 und X^3 N, X^4 und Z^3 CR^1 und X^5 , Y^4 , Y^5 , Y^6 , Z^1 , Z^2 und Z^4 CD, wobei die übrigen vorstehend erwähnten Gruppen die vorstehend genannten Bedeutungen aufweisen. Ganz besonders bevorzugt weisen die übrigen vorstehend erwähnten Gruppen in dem letztgenannten Fall die Bedeutungen Deuterium oder R^1 auf, wobei R^1 die nachstehend genannten Definitionen aufweisen kann.
- 5
- 10 R^1 bedeutet in den Liganden der allgemeinen Formel (I) unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl, unsubstituiertes oder substituiertes Cycloalkyl, unsubstituiertes oder substituiertes Heterocycloalkyl, unsubstituiertes oder substituiertes Aryl, unsubstituiertes oder substituiertes Heteroaryl, unsubstituiertes oder substituiertes Alkenyl, unsubstituiertes oder substituiertes Cycloalkenyl, unsubstituiertes oder substituiertes Alkynyl, SiR^2_3 , Halogen, einen Substituenten mit Donor- oder Akzeptorwirkung, wobei in dem Fall, wenn R^1 an ein N-Atom gebunden ist, R^1 unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl oder unsubstituiertes oder substituiertes Aryl oder unsubstituiertes oder substituiertes Heteroaryl bedeutet, oder zwei beliebige Reste R^1 können gemeinsam eine Alkylen- oder Arylenbrücke bilden. Dabei
- 15
- 20 können die beiden Reste R^1 zu einem einzigen Zyklus der Liganden der allgemeinen Formel (I) oder zu zwei verschiedenen Zyklen des Liganden der allgemeinen Formel (I) gehören. Z. B. können in dem Fall, wenn X^4 und X^5 CR^1 bedeuten, die beiden Reste R^1 gemeinsam eine Alkylen- oder Arylenbrücke bilden. Es ist ebenfalls möglich, dass in dem Fall, wenn Z^1 und X^4 oder Z^4 (bei $n = 1$) bzw. Z^3 (bei $n = 0$) und Y^4 CR^1 bedeuten,
- 25
- zwei Reste R^1 gemeinsam eine Alkylen- oder Arylenbrücke bilden. Geeignete und bevorzugte Alkyl-, Cycloalkyl-, Heterocycloalkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkenyl-, Cycloalkenyl-, Alkynylgruppen sowie Substituenten mit Donor- oder Akzeptorwirkung und Alkylen- und Arylengruppen sind die vorstehend genannten Gruppen. Bevorzugt bedeutet R^1 unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl, unsubstituiertes oder substituiertes Aryl, unsubstituiertes oder substituiertes Heteroaryl, SiR^2_3 , Halogen, bevorzugt F, OR^2 , SR^2 , NR^2_2 , CF_3 oder CN, wobei R^1 in dem Fall, wenn R^1 an ein N-Atom gebunden ist, bevorzugt unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl, unsubstituiertes oder substituiertes Aryl bedeutet. Ganz besonders bevorzugt bedeutet R^1 unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl, unsubstituiertes oder substituiertes Aryl, unsubstituiertes oder substituiertes Heteroaryl oder SiR^2_3 . Weiter ganz besonders bevorzugt bedeutet R^1 Methyl, iso-Propyl, oder deren entsprechende teilweise oder vollständig deuterierte Derivate, z. B. CD_3 , $-C(CD_3)_2D$ oder $-C(CD_3)_3$; unsubstituiertes oder substituiertes C_6 -Aryl, wobei als Substituenten insbesondere Deuterium, Methyl, Isopropyl, CD_3 , $-C(CD_3)_2D$ oder $-C(CD_3)_3$ geeignet
- 30
- 35
- 40 sind, wobei ortho-disubstituierte C_6 -Aryle besonders bevorzugt sind; oder C_5 - oder C_6 -Heteroaryl, z. B.



5 worin

10 R^4 unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl, unsubstituiertes oder substituiertes Aryl, unsubstituiertes oder substituiertes Herterioaryl oder SiR^2_3 bedeutet, bevorzugt Wasserstoff, Deuterium, Methyl, Ethyl, n-Propyl, iso-Propyl, n-Butyl, sec-Butyl, iso-Butyl, tert-Butyl oder deren teilweise oder vollständig deuterierte Derivate, z. B. CD_3 , $-C(CD_3)_2D$ oder $-C(CD_3)_3$; unsubstituiertes oder substituiertes C_6 -Aryl oder C_5 - oder C_6 -Heteroaryl, besonders bevorzugt Wasserstoff oder Deuterium; und

15 z 0, 1, 2, 3 oder 4, bevorzugt 0, 1 oder zwei;

bedeuten;

wobei R^1 in dem Fall, wenn R^1 an ein N-Atom gebunden ist, besonders bevorzugt unabhängig voneinander Methyl, Ethyl, iso-Propyl, n-Propyl, n-Butyl, iso-Butyl, sec-Butyl oder tert.-Butyl oder C_6 -Aryl, das unsubstituiert oder substituiert sein kann, bevorzugt Phenyl oder Toly, bedeutet.

20

R^2 bedeutet unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl oder unsubstituiertes oder substituiertes Aryl, wobei geeignete und bevorzugte Alkyl- und Arylreste sowie geeignete Substituenten vorstehend genannt sind. Bevorzugt ist R^2 Methyl, Ethyl, iso-Propyl, n-Propyl, n-Butyl, iso-Butyl, sec-Butyl oder tert.-Butyl oder C_6 -

25 Aryl, das unsubstituiert oder substituiert sein kann, bevorzugt Phenyl oder Toly.

m und n können in den Liganden der allgemeinen Formel (I) unabhängig voneinander 0 oder 1 bedeuten, wobei die Gruppen Z^4 bzw. Y^5 bei n bzw. $m = 0$ nicht vorhanden sind. Für den Fall von $m = 0$ ist der aus den Elementen X^1 , X^2 , X^3 , X^4 und X^5 gebildete

aromatische 5-Ring somit mit einem aus den Elementen Y^1 , Y^2 , Y^3 , Y^4 und Y^6 gebildeten 5-Ring verbunden. Für $m = 1$ ist der aus X^1 , X^2 , X^3 , X^4 und X^5 gebildete aromatische 5-Ring mit einem aus den Elementen Y^1 , Y^2 , Y^3 , Y^4 , Y^5 und Y^6 gebildeten aromatischen 6-Ring verbunden. Für $n = 0$ ist der aus X^1 , X^2 , X^3 , X^4 , X^5 gebildete aromatische 5-Ring mit einem aus Z^1 , Z^2 , Z^3 und zwei Kohlenstoffatomen gebildeten aromatischen 5-Ring verbunden und für $n = 1$ ist der aus X^1 , X^2 , X^3 , X^4 und X^5 gebildete aromatische 5-Ring mit einem aus Z^1 , Z^2 , Z^3 , Z^4 und zwei Kohlenstoffatomen gebildeten aromatischen 6-Ring verbunden. Bevorzugt ist $m = 1$. In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform ist $n = 1$. Besonders bevorzugt sind sowohl n als auch $m = 1$.

10

Der erfindungsgemäße Metallkomplex enthält bevorzugt ein Metallatom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Übergangsmetallen der Gruppe IB, IIB, IIIB, IVB, VB, VIB, VIIB, VIII des Periodensystems der Elemente (CAS-Version), in jeder für das entsprechende Metallatom möglichen Oxidationsstufe. Bevorzugt enthalten die erfindungsgemäßen Metallkomplexe ein Metallatom M ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Ir, Co, Rh, Ni, Pd, Pt, Fe, Ru, Os, Cr, Mo, W, Mn, Tc, Re, Ag, Au und Cu auf, besonders bevorzugt Ir, Os, Ru, Rh, Pd, Co, Ni und Pt, ganz besonders bevorzugt Ir, Pt, Rh, Ru und Os, in jeder für das entsprechende Metallatom möglichen Oxidationsstufe. Insbesondere bevorzugt werden Pt(II), Pt(IV), Ir(I), Ir(III), Os(II) und Ru(II), weiter insbesondere bevorzugt Pt(II), Ir(III) und Os(II) und ganz besonders bevorzugt Ir(III) eingesetzt.

20

Neben dem mindestens einen Liganden der allgemeinen Formel (I) kann der erfindungsgemäße Metallkomplex weitere von dem Liganden der allgemeinen Formel (I) verschiedene Liganden enthalten. Beispielsweise können neben dem mindestens einen Liganden der allgemeinen Formel (I) einer oder mehrere neutrale mono- oder bidentate Liganden K sowie gegebenenfalls einer oder mehrere mono- oder dianionische Liganden J, die mono- oder bidentat sein können, vorliegen. Des Weiteren können unterschiedliche Liganden der Formel (I) in dem erfindungsgemäßen Metallkomplex vorliegen. Dabei ist unter einem bidentaten Liganden ein Ligand zu verstehen, der an zwei Stellen an das Metallatom M koordiniert ist. Im Sinne der vorliegenden Anmeldung wird der Begriff „zweizählig“ synonym mit dem Begriff „bidentat“ verwendet.

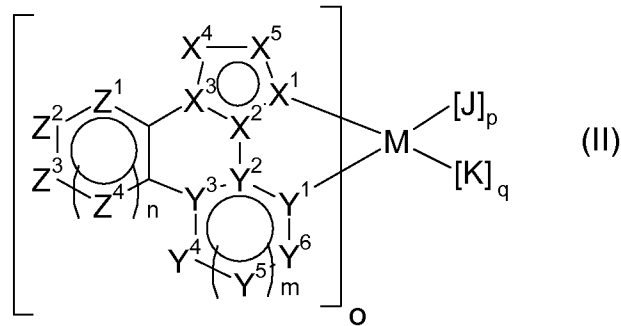
25

30

Unter einem monodentaten Liganden ist ein Ligand zu verstehen, der an einer Stelle des Liganden mit dem Metallatom M koordiniert.

35

Somit betrifft die vorliegende Erfindung in einer bevorzugten Ausführungsform Metallkomplexe der allgemeinen Formel (II)



worin bedeuten:

- 5 M Metallatom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Übergangsmetallen der Gruppe IB, IIB, IIIB, IVB, VB, VIB, VIIB, VIII des Periodensystems der Elemente (CAS-Version), in jeder für das entsprechende Metallatom möglichen Oxidationsstufe; bevorzugt Ir(III), Pt(II) oder Os(II), besonders bevorzugt Ir(III);
- 10 J mono- oder dianionischer Ligand, der mono- oder bidentat sein kann, bevorzugt bidentater, monoanionischer Ligand;
- K neutraler, mono- oder bidentater Ligand, der im Allgemeinen nicht photoaktiv ist: bevorzugte Liganden K sind Phosphine, insbesondere Trialkylphosphine, z. B. PEt_3 , PnBu_3 , Triarylphosphine, z. B. PPh_3 ; Phosphonate und Derivate davon, Arsenate und Derivate davon, Phosphite, CO, Nitrile, Amine, Diene, die einen π -Komplex mit M bilden können, z. B. 2,4-Hexadien, η^4 -Cyclooctadien und η^2 -Cyclooctadien (jeweils 1,3 und 1,5), Allyl, Methallyl, Cycloocten, Norbornadien und neutralen Biscarbene, z. B. die in WO 2008/000726 offenbarten neutralen Biscarbene;
- 15
- 20 o 1, 2, 3 oder 4; wobei für M = Ir(III) 1, 2 oder 3, bevorzugt 2 oder 3; für M = Pt(II) oder Os(II) 1 oder 2; bedeutet;
- 25 p 0, 1, 2, 3 oder 4; wobei p für M = Ir(III) 0, 1, 2, 3 oder 4, bevorzugt 0 oder 2; für M = Pt(II) und Os(II) 0, 1 oder 2, bevorzugt 0 oder 2; bedeutet, wobei p die Zahl der Bindungsstellen zum Metall M bedeutet, d.h., wenn p = 2 ist, kann es sich um zwei monodentate oder einen bidentaten Liganden handeln;
- 30 q 0, 1, 2, 3 oder 4; wobei q für M = Ir(III) 0, 1 oder 2, bevorzugt 0; für M = Pt(II) 0 oder 1, bevorzugt 0; für Os(II) 2 oder 3, bevorzugt 2 bedeutet, wobei q die Zahl der Bindungsstellen zum Metall M bedeutet, d.h., wenn q = 2 ist, kann es sich um zwei monodentate oder einen bidentaten Liganden handeln;

wobei o, p und q von der Oxidationsstufe und Koordinationszahl des eingesetzten Metallatoms und der Ladung der Liganden abhängig sind.

5 Sowohl der Ligand J als auch der Ligand K kann ein oder mehrere Deuteriumatome aufweisen.

Für den Fall, dass die Zahl o, p oder q > 1 ist, können die eingesetzten Liganden der Formel (I), K oder J jeweils gleich oder verschieden sein.

- 10 Für M = Ir(III) ist die Summe o, p + q in den erfindungsgemäßen Metallkomplexen der Formel (II) im Allgemeinen 3, 4 oder 5, d.h. in dem Fall, wenn 3 Liganden der Formel I vorliegen, ist o 3 und wenn 2 Liganden der Formel I und z. B. 1 bidentater, monoanionischer Ligand J vorliegt, ist o 2 und p 2. Für M = Pt(II) ist die Summe o + p im Allgemeinen 2 oder 3, d.h. in dem Fall, wenn 2 Liganden der Formel I vorliegen, ist o 2 und
- 15 wenn 1 Ligand der Formel I und z. B. 1 bidentater, monoanionischer Ligand J vorliegt, ist o 1 und p 2, wobei o jeweils mindestens 1 ist. Für Os(II) ist die Summe o, p + q in den erfindungsgemäßen Metallkomplexen der Formel (II) im Allgemeinen 4 oder 5, d. h. wenn 2 Liganden der Formel (I) und z. B. 1 bidentater, neutraler Ligand K vorliegt, ist o 2 und q 2, und in dem Fall, wenn z. B. 1 Ligand der Formel (I), 1 bidentater, monoanionischer Ligand J und 1 neutraler bidentater Ligand K vorliegen, ist o 1, p 2 und q
- 20 2.

Die Symbole X¹, X², X³, X⁴, X⁵, Y¹, Y², Y³, Y⁴, Y⁵, Y⁶, Z¹, Z², Z³, Z⁴, m und n in dem Metallkomplex der Formel (II) weisen die vorstehend genannten Bedeutungen auf.

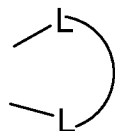
25

Falls verschiedene Isomere der erfindungsgemäßen Metallkomplexe vorliegen können, umfasst die vorliegende Erfindung sowohl jeweils die einzelnen Isomere der Metallkomplexe, als auch Gemische verschiedener Isomere in jedem beliebigen Mischungsverhältnis. Im Allgemeinen können verschiedene Isomere der Metallkomplexe nach

30 dem Fachmann bekannten Verfahren, z. B. durch Chromatographie, Sublimation oder Kristallisation, getrennt werden.

Üblicherweise werden als bidentate, monoanionische Liganden J nicht photoaktive oder photoaktive (z. B. heteroleptische Komplexe mit Carbenen, Phenylpyridinen oder

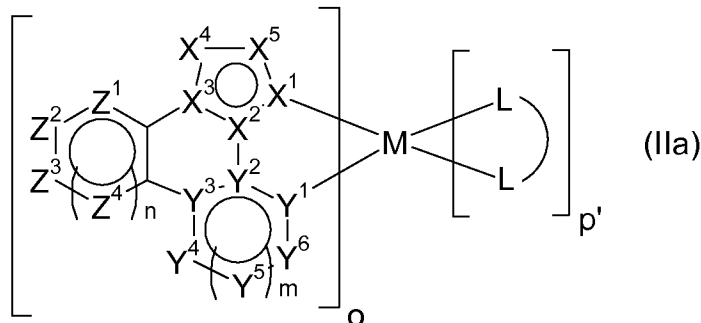
35 Phenylimidazolen) Liganden eingesetzt. Geeignete Liganden J sind z. B. bidentate, monoanionische Liganden der allgemeinen Formel



, worin L jeweils unabhängig voneinander ausgewählt ist aus O, N und C. Bevorzugt sind bidentate, monoanionische Liganden J, worin beide Gruppen L O, C oder N be-

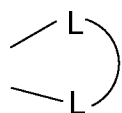
deuten, oder eine Gruppe L O bedeutet und die andere Gruppe L N oder C bedeutet, oder eine Gruppe L C bedeutet und die anderen Gruppe L N bedeutet. Besonders bevorzugte bidentate, monoanionische Liganden sind Acetylacetonat und dessen Derivate, Picolinat und dessen Derivate, bidentate, monoanionische Carbenliganden und dessen Derivate, z. B. Carbenliganden, die in WO 2005/019373, WO 2005/0113704, WO 2006/018292, WO 2006/056418, WO 2007/115981, WO 2007/115970, WO 2008/000727, WO 2006/067074, WO 2006/106842, WO 2007/018067, WO 2007/058255, WO 2007/069542, US 2007/108891, WO 2007/058080, WO 2007/058104 genannt sind, sowie die in WO 02/15645, WO 2005/123873, US 2007/196690, WO 2006/121811 genannten bidentaten, monoanionischen Liganden. Besonders bevorzugt sind die bidentaten, monoanionischen Liganden ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Acetylacetonat, Picolinat, Carbenen wie N-Methyl-N-arylimidazolcarben, Arylpyridinen wie 2-Arylpyridinen, insbesondere Phenylpyridinen wie 2-Phenylpyridin, Arylimidazolen wie 2-Arylimidazolen, insbesondere Phenylimidazolen, wie 2-Phenylimidazol und Derivaten der vorstehend genannten Verbindungen. In den vorstehend genannten bidentaten, monoanionischen Liganden können eine oder mehrere Wasserstoffatome der Liganden durch Deuterium ersetzt sein.

In einer besonders bevorzugten Ausführungsform weist der erfindungsgemäße Metallkomplex die allgemeine Formel (IIa) auf.



worin bedeuten:

M Metallatom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Übergangsmetallen der Gruppe IB, IIB, IIIB, IVB, VB, VIB, VIIB, VIII des Periodensystems der Elemente (CAS-Version), in jeder für das entsprechende Metallatom möglichen Oxidationsstufe; bevorzugt Ir(III), Pt(II), besonders bevorzugt Ir(III);

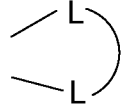


bidentater monoanionischer Ligand, der einen oder mehrere Deuteriumatome aufweisen kann; bevorzugt ist L in dem bidentaten monoanionischen Liganden jeweils unabhängig voneinander ausgewählt ist aus O, N

und C; besonders bevorzugt sind bidentate monoanionische Liganden, worin beide Gruppen L O, C oder N bedeuten oder eine Gruppe L O bedeutet und die andere Gruppe L N oder C bedeutet oder eine Gruppe L C bedeutet und die andere Gruppe L N bedeutet; ganz besonders bevorzugt sind die bidentaten monoanionischen Liganden ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Acetylacetonat, Picolinat, Carbenen wie N-Methyl-N-arylimidazolcarben, Arylpyridinen wie 2-Arylpyridinen, insbesondere Phenylpyridinen wie 2-Phenylpyridin und Arylimidazolen wie 2-Arylimidazolen, insbesondere Phenylimidazolen, wie 2-Phenylimidazol und Derivaten der vorstehend genannten Verbindungen

o 1, 2, 3, 4; wobei für M = Ir(III) 1, 2 oder 3, bevorzugt 2 oder 3; für M = Pt(II) 1 oder 2; bedeutet

15 p' 0, 1 oder 2; wobei p für M = Ir(III) 0, 1 oder 2, bevorzugt 0 oder 1; für M =

Pt(II) 0 oder 1; bedeutet, wobei p' die Zahl der Liganden  bedeutet;

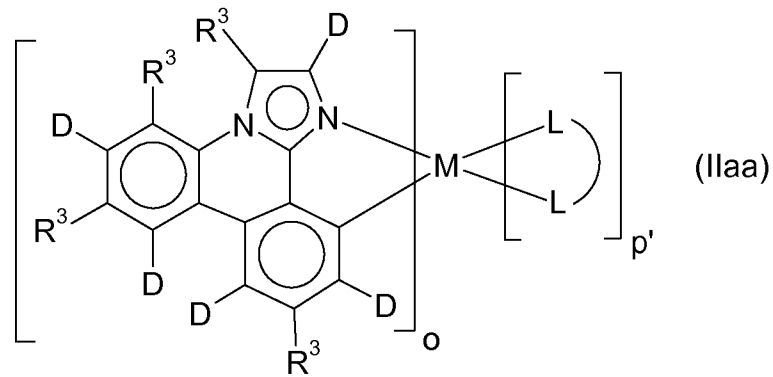
wobei o und p' von der Oxidationsstufe und Koordinationszahl des eingesetzten Metallatoms abhängig sind.

Für M = Ir(III) ist die Summe o + p' in den erfindungsgemäßen Metallkomplexen der Formel (IIa) im Allgemeinen 3, und für M = Pt(II) ist die Summe o + p' im Allgemeinen 2, wobei o jeweils mindestens 1 ist.

25 Die Symbole X¹, X², X³, X⁴, X⁵, Y¹, Y², Y³, Y⁴, Y⁵, Y⁶, Z¹, Z², Z³, Z⁴, m und n in dem Metallkomplex der Formel (II) weisen die vorstehend genannten Bedeutungen auf. Des Weiteren sind weitere Ausführungsformen von M, des bidentaten, monoanionischen Liganden sowie von o und p' die vorstehend für M, den bidentaten, monoanionischen Liganden, o und p' (bzw. p, wobei p' = 1 p = 2 entspricht) genannten Ausführungsformen.

In einer besonders bevorzugten Ausführungsform betrifft die vorliegende Erfindung Metallkomplexe der Formel (IIaa)

18



worin M, o und p' die vorstehend genannten Bedeutungen aufweisen;

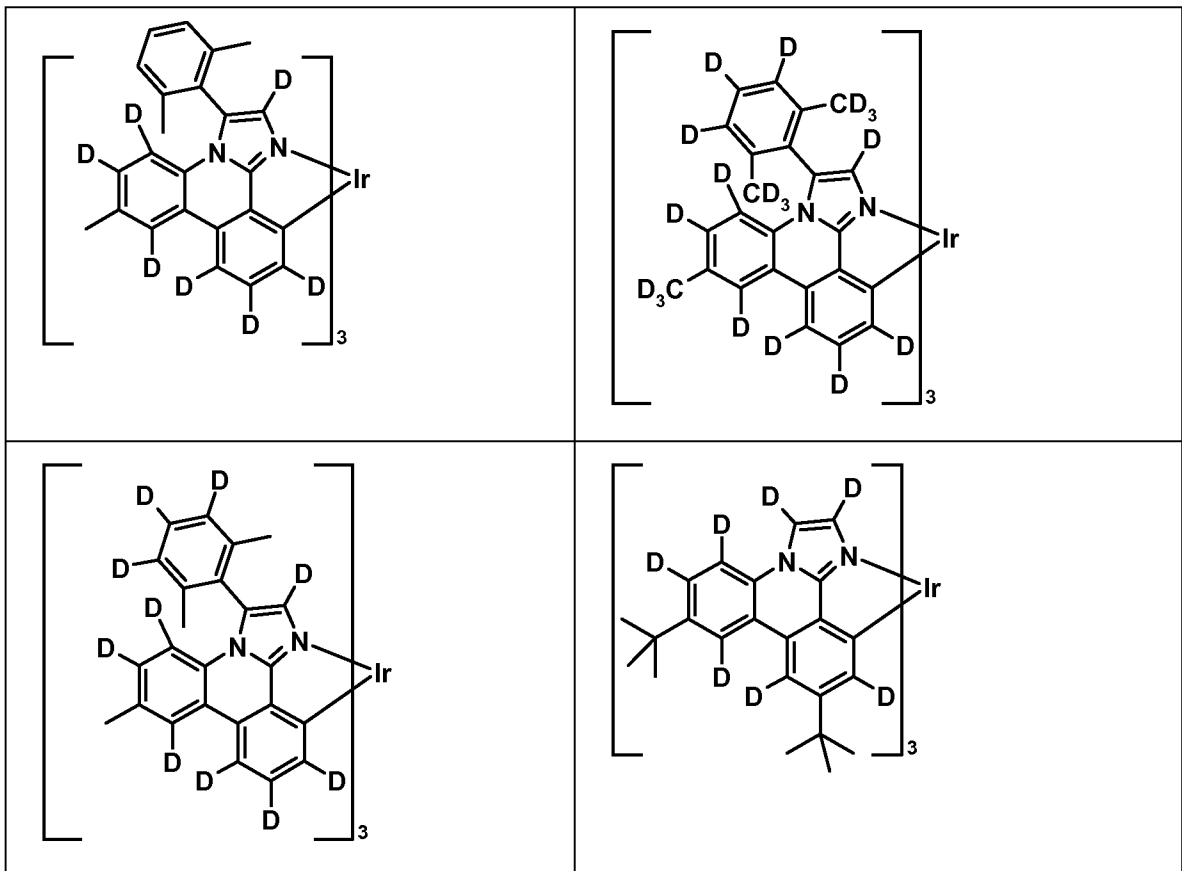
5 D Deuterium, und

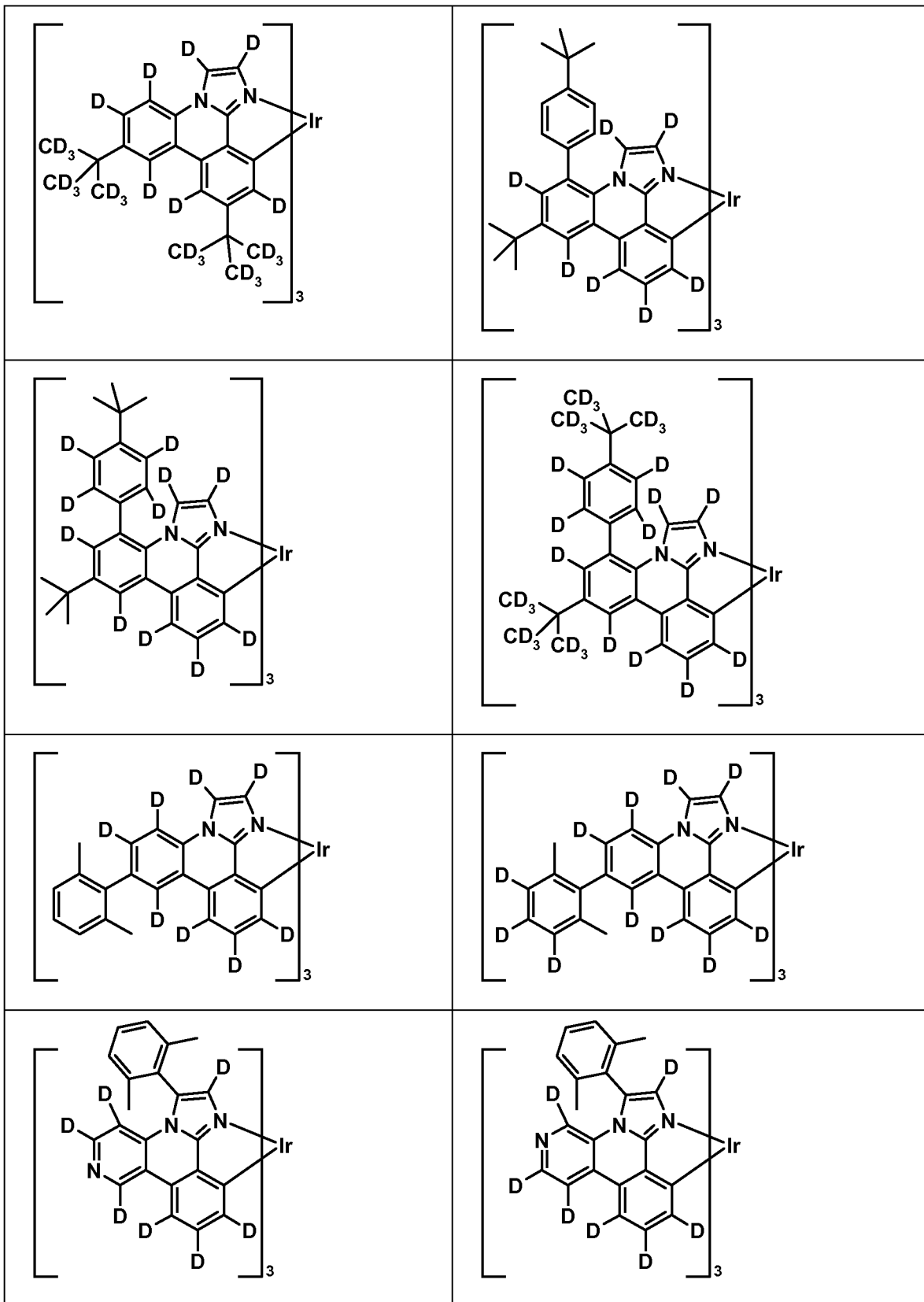
R³ unabhängig voneinander Deuterium oder R¹ bedeutet.

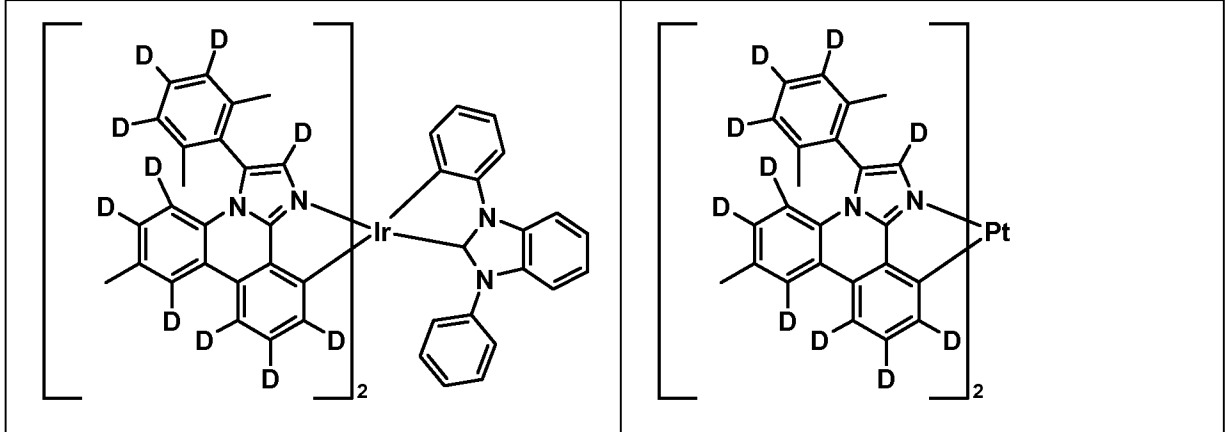
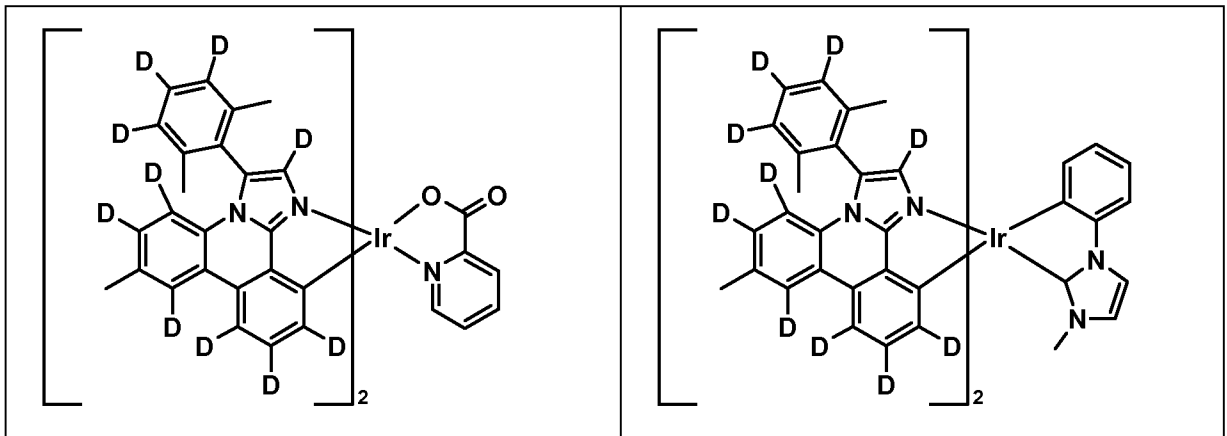
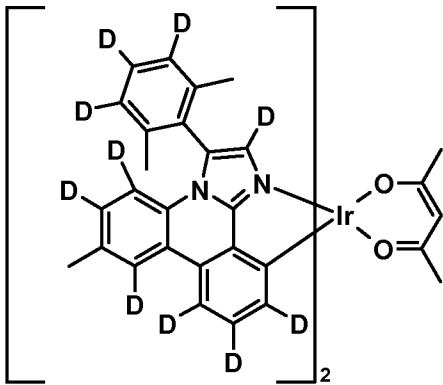
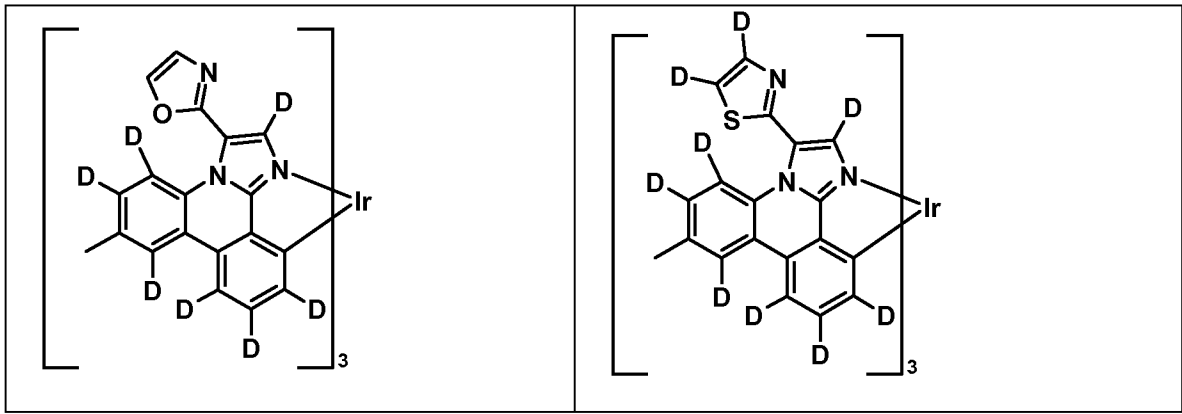
Geeignete Ausführungsformen für R¹ sind vorstehend genannt.

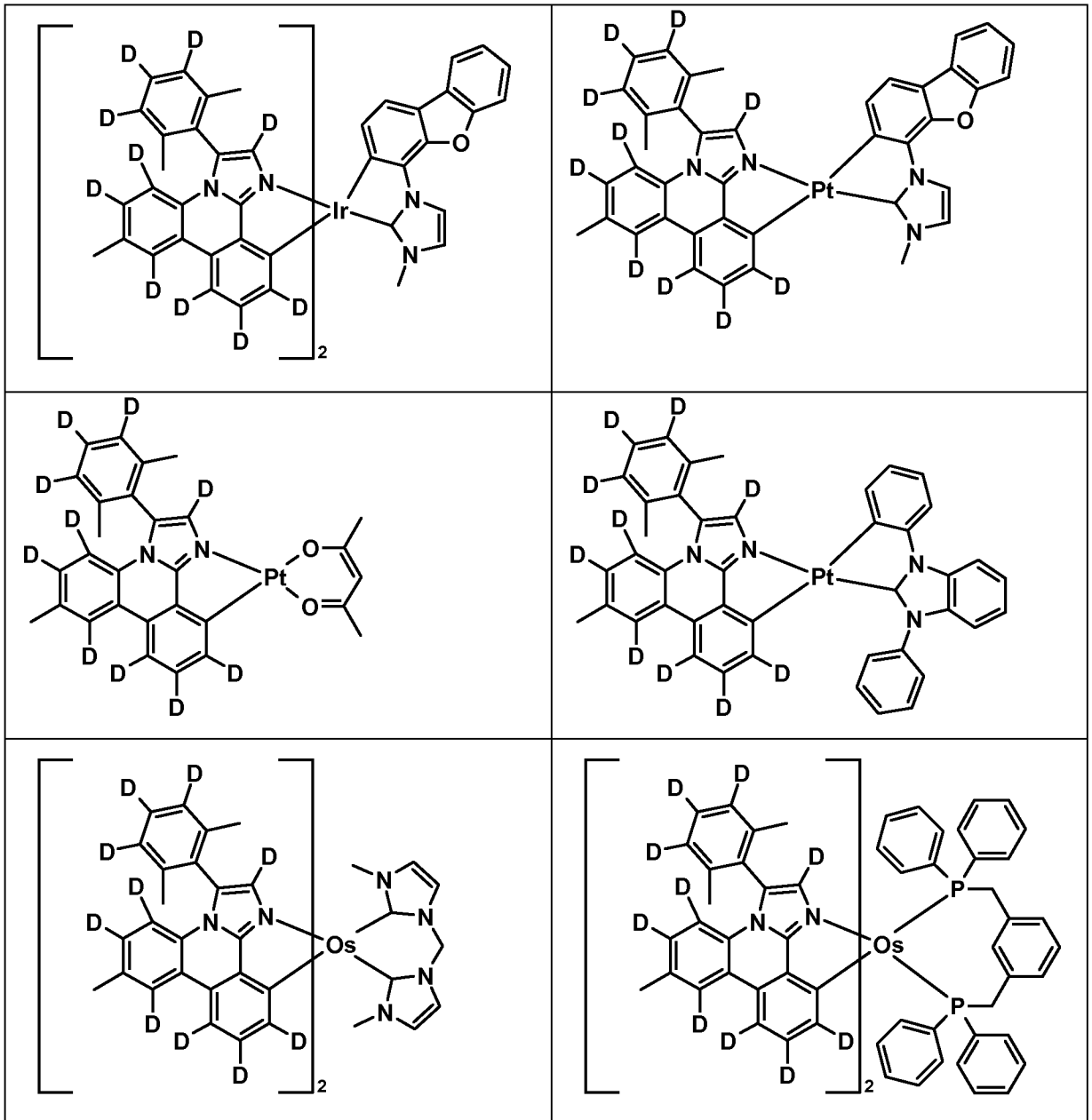
10

Im Folgenden sind beispielhaft bevorzugte erfindungsgemäße Metallkomplexe der Formel (IIaa) aufgeführt.

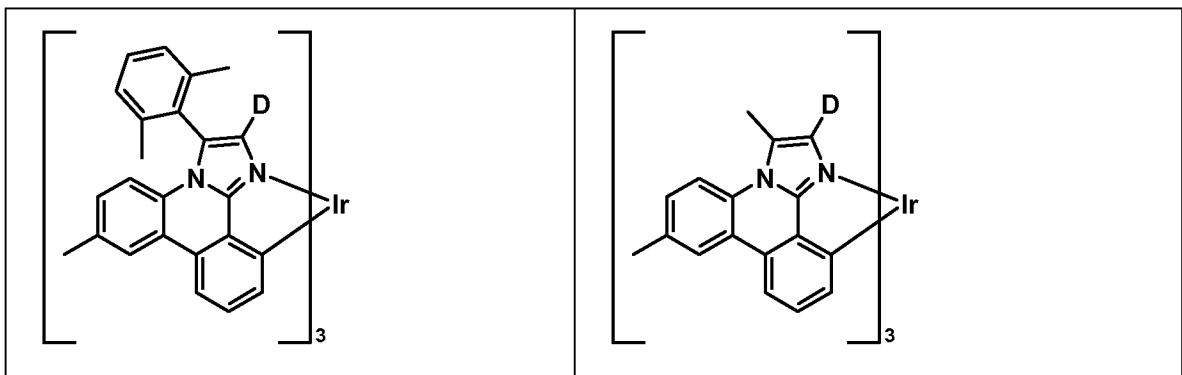


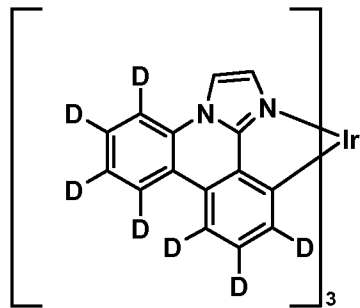
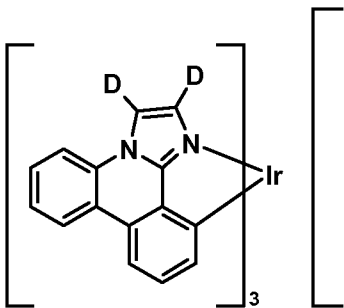
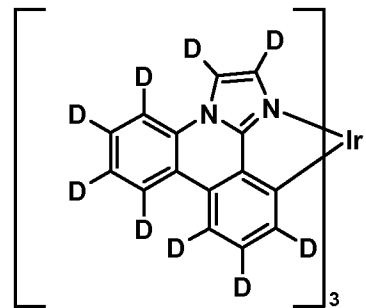
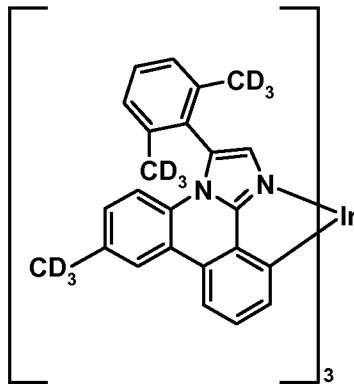
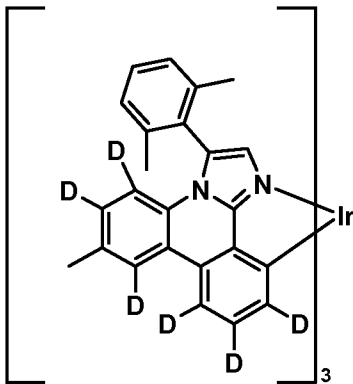
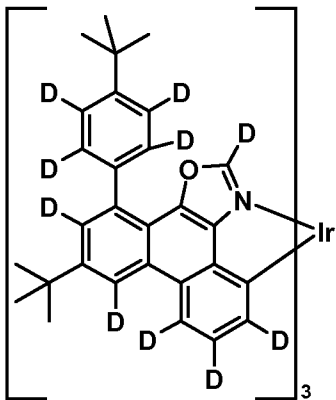
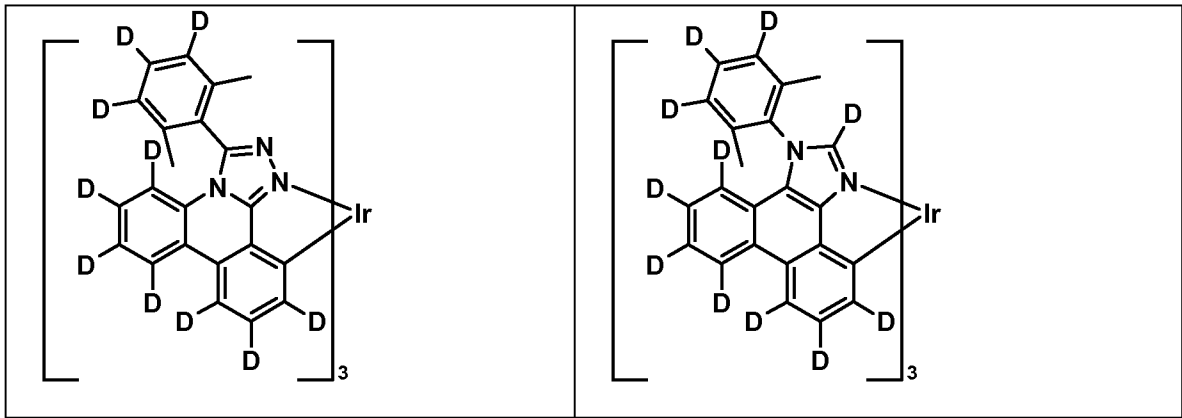


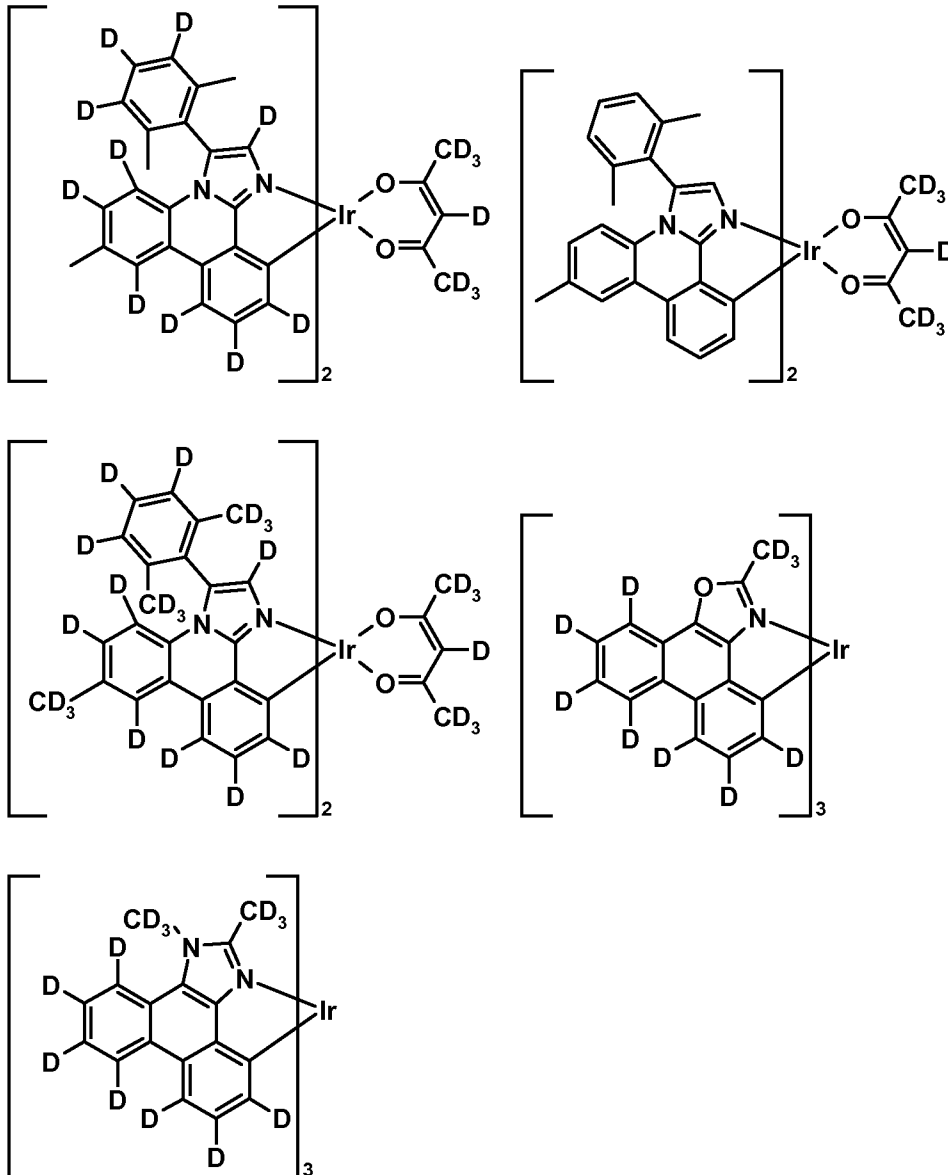




Im Folgenden sind weitere Beispiele für bevorzugte erfindungsgemäße Metallkomplexe genannt:







- 5 Die erfindungsgemäßen Metallkomplexe können gemäß dem Fachmann bekannten Verfahren bzw. analog zu dem Fachmann bekannten Verfahren hergestellt werden. Geeignete Herstellungsverfahren sind z. B. analog zu in den Beispielen von WO 2007/095118 genannten Verfahren, wobei die Herstellung der erfindungsgemäßen Metallkomplexe zusätzlich den Schritt der Einführung mindestens eines Deuteriumatoms in den Metallkomplex umfasst. Die Einbringung von Deuteriumatomen in den Liganden der Formel (I) des erfindungsgemäßen Metallkomplexes erfolgt gemäß dem Fachmann bekannten Verfahren. Geeignete Verfahren zum Austausch von Wasserstoffatomen gegen Deuteriumatome sind z. B. in dem Übersichtsartikel J. Atzrodt, V. Derau, T. Fey, J. Zimmermann, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, 46, 7744-7765 genannt.
- 10
- 15

Üblicherweise werden die erfindungsgemäßen Metallkomplexe ausgehend von den Liganden der allgemeinen Formel (I) entsprechenden Ligandvorläufern hergestellt. Dabei erfolgt die Herstellung der erfindungsgemäßen Metallkomplexe durch Umsetzung von mindestens einem Ligandvorläufer basierend auf den Liganden der allgemeinen Formel (I) mit einem Metallkomplex enthaltend mindestens ein Metall M, wobei M die vorstehend genannten Bedeutungen aufweist.

Das molare Verhältnis zwischen den Ligandvorläufern basierend auf den Liganden der Formel (I) und dem Metallkomplex enthaltend mindestens ein Metall M ist von der Struktur des gewünschten erfindungsgemäßen Metallkomplexes abhängig sowie von der Anzahl der Liganden der Formel (I). In dem Fall, dass o in den erfindungsgemäßen Metallkomplexen > 1 ist, ist es möglich, dass diese Metallkomplexe durch Umsetzung des Metallkomplexes enthaltend mindestens ein Metall M mit identischen Ligandvorläufern oder durch Umsetzung mit verschiedenen Ligandvorläufern erhalten werden. Geeignete Verfahren und Umsetzungsreihenfolgen zur Herstellung der verschiedenen erfindungsgemäßen Metallkomplexe sind dem Fachmann bekannt.

Bei dem mit dem Ligandvorläufer umzusetzenden Metallkomplex enthaltend mindestens ein Metall M handelt es sich um einen Metallkomplex enthaltend mindestens ein Metallatom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Übergangsmetallen der Gruppe IIB, IIIB, IVB, VB, VIB, VIIB, VIII des Periodensystems der Elemente (CAS-Version) und Cu, bevorzugt ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Ir, Co, Rh, Ni, Pd, Pt, Fe, Ru, Os, Cr, Mo, W, Mn, Tc, Re und Cu, besonders bevorzugt Ir, Os, Ru, Rh, Pd, Co und Pt, ganz besonders bevorzugt Ir, Pt, Rh, Pd, Ru und Os in jeder geeigneten für das entsprechende Metall möglichen Oxidationsstufe.

Geeignete mit dem Ligandvorläufer umzusetzende Metallkomplexe sind dem Fachmann bekannt. Beispiele für geeignete Metallkomplexe sind: Pd(OAc)₂, Pt(cod)Cl₂, Pt(cod)Me₂, Pt(acac)₂, Pt(PPh₃)₂Cl₂, PtCl₂, [Rh(cod)Cl]₂, Rh(acac)CO(PPh₃), Rh(acac)(CO)₂, Rh(cod)₂BF₄, RhCl(PPh₃)₃, RhCl₃ x nH₂O, Rh(acac)₃, [Os(CO)₃]₂, [Os₃(CO)₁₂], OsH₄ (PPh₃)₃Cp₂Os, Cp^{*}₂Os, H₂OsCl₆ x 6H₂O, OsCl₃ x H₂O, Ru(acac)₃, RuCl₂(cod), Ru(2-methylallyl)₂(cod), [(μ-Cl)Ir(η⁴-1,5-cod)]₂, [(μ-Cl)Ir(η²-coe)]₂, Ir(acac)₃, IrCl₃ x nH₂O, (tht)₃IrCl₃, Ir(η³-allyl)₃, Ir(η³-metallyl)₃, worin cod Cyclooctadien, coe Cycloocten, acac Acetylacetonat und tht Tetrahydrothiophen bedeuten. Die Metallkomplexe können gemäß dem Fachmann bekannten Verfahren hergestellt werden bzw. sind kommerziell erhältlich.

Im Anschluss an die vorstehend erwähnte Umsetzung des mit dem Ligandvorläufer umzusetzenden Metallkomplexes mit einem oder mehreren Ligandvorläufern wird der erhaltene erfindungsgemäße Metallkomplex im Allgemeinen nach dem Fachmann bekannten Verfahren aufgearbeitet und gegebenenfalls gereinigt. Üblicherweise erfolgen

Aufarbeitung und Reinigung durch Extraktion, Säulenchromatographie und/oder Umkristallisation gemäß dem Fachmann bekannten Verfahren.

Die erfindungsgemäßen Metallkomplexe werden in organischen Leuchtdioden (OLEDs) verwendet. Sie eignen sich als Emittersubstanzen, da sie eine Emission (Elektrolumineszenz) im sichtbaren Bereich des elektromagnetischen Spektrums aufweisen. Mithilfe der erfindungsgemäßen Metallkomplexe als Emittersubstanzen ist es möglich, Verbindungen bereitzustellen, die Elektrolumineszenz insbesondere im blauen Bereich des elektromagnetischen Spektrums mit guter Effizienz zeigen. Dabei ist die Quantenausbeute hoch und insbesondere die Lebensdauer und die Stabilität der erfindungsgemäßen Metallkomplexe im Device hoch.

Des Weiteren sind die erfindungsgemäßen Metallkomplexe als Elektronen-, Excitonen- oder Lochblocker, Lochleiter, Elektronenleiter, Lochinjektionsschicht oder Matrixmaterial in OLEDs geeignet, in Abhängigkeit von den eingesetzten Liganden und dem eingesetzten Zentralmetall.

Organische Leuchtdioden (OLEDs) sind grundsätzlich aus mehreren Schichten aufgebaut:

20

1. Anode (1)
2. Löcher-transportierende Schicht (2)
3. Licht-emittierende Schicht (3)
4. Elektronen-transportierende Schicht (4)
5. Kathode (5)

25

Es ist jedoch auch möglich, dass die OLED nicht alle der genannten Schichten aufweist, zum Beispiel ist eine OLED mit den Schichten (1) (Anode), (3) (Licht-emittierende Schicht) und (5) (Kathode) ebenfalls geeignet, wobei die Funktionen der Schichten (2) (Löcher-transportierende Schicht) und (4) (Elektronen-transportierende Schicht) durch die angrenzenden Schichten übernommen werden. OLEDs, die die Schichten (1), (2), (3) und (5) bzw. die Schichten (1), (3), (4) und (5) aufweisen, sind ebenfalls geeignet.

Die erfindungsgemäßen Metallkomplexe können in verschiedenen Schichten einer OLED eingesetzt werden. Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ist daher eine OLED enthaltend mindestens einen erfindungsgemäßen Metallkomplex sowie die Verwendung mindestens eines erfindungsgemäßen Metallkomplexes in OLEDs. Die erfindungsgemäßen Metallkomplexe werden bevorzugt in der Licht-emittierenden Schicht, besonders bevorzugt als Emittiermoleküle, eingesetzt. Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ist daher eine Licht-emittierende Schicht enthaltend

40

mindestens einen erfindungsgemäßen Metallkomplex als Matrixmaterial oder Emittermolekül, bevorzugt als Emittermolekül. Bevorzugte erfindungsgemäße Metallkomplexe sind vorstehend genannt.

- 5 Die erfindungsgemäßen Metallkomplexe können in Substanz – ohne weitere Zusätze -
in der Licht-emittierenden Schicht oder einer anderen Schicht der OLED, bevorzugt in
in der Licht-emittierenden Schicht, vorliegen. Es ist jedoch ebenfalls möglich und bevor-
zugt, dass neben den erfindungsgemäßen Metallkomplexen weitere Verbindungen in
den Schichten, bevorzugt in der Licht-emittierenden Schicht, vorliegen. Beispielsweise
10 kann in der Licht-emittierenden Schicht ein fluoreszierender Farbstoff anwesend sein,
um die Emissionsfarbe des als Emittermoleküls eingesetzten erfindungsgemäßen Me-
tallkomplexes zu verändern. Des Weiteren kann – in einer bevorzugten Ausführungs-
form – mindestens ein Matrixmaterial eingesetzt werden. Geeignete Matrixmaterialien
sind dem Fachmann bekannt. Im Allgemeinen wird das Matrixmaterial so ausgewählt,
15 dass die Bandlücke des Matrixmaterials größer ist als die Bandlücke des als Emitter
eingesetzten, erfindungsgemäßen Metallkomplexes. Unter Bandlücke ist im Sinne der
vorliegenden Anmeldung die Triplettenergie zu verstehen. Bevorzugt eingesetzte ge-
eignete Matrixmaterialien, insbesondere bei Verwendung von erfindungsgemäßen Me-
tallkomplexen als Emittermaterialien, die im blauen Bereich des elektromagnetischen
20 Spektrums Licht emittieren, sind z. B. Carbenkomplexe, insbesondere die in
WO 2005/019373, WO 2005/0113704, WO 2006/018292, WO 2006/056418,
WO 2007/115981, WO 2008/000726 und WO 2008/000727 genannten Carbenkomple-
xe; Disilylcarbazole, z. B. 9-(4-tert.-Butyl-phenyl)-3,6-bis(triphenylsilylcarbazol),
9-(Phenyl)-3,6-bis(triphenylsilyl)carbazol sowie in der nicht vorveröffentlichten PCT-
25 Anmeldung mit dem Aktenzeichen PCT/EP 2007/059648 genannte Disilylcarbazole
und die in WO 2004/095889, EP 1617710, EP 1617711, WO 2006/112265,
WO 2006/130598 aufgeführten Verbindungen.

- Die einzelnen der vorstehend genannten Schichten der OLED können wiederum aus 2
30 oder mehreren Schichten aufgebaut sein. Beispielsweise kann die Löcher-
transportierende Schicht aus einer Schicht aufgebaut sein, in die aus der Elektrode
Löcher injiziert werden und einer Schicht, die die Löcher von der Lochinjektionsschicht
weg in die Licht-emittierende Schicht transportiert. Die Elektronen-transportierende
Schicht kann ebenfalls aus mehreren Schichten bestehen, zum Beispiel einer Schicht,
35 worin Elektronen durch die Elektrode injiziert werden, und einer Schicht, die aus der
Elektroneninjectionsschicht Elektronen erhält und in die Licht-emittierende Schicht
transportiert. Diese genannten Schichten werden jeweils nach Faktoren wie Energie-
niveau, Temperaturresistenz und Ladungsträgerbeweglichkeit, sowie Energiedifferenz
der genannten Schichten mit den organischen Schichten oder den Metallelektroden
40 ausgewählt. Der Fachmann ist in der Lage, den Aufbau der OLEDs so zu wählen, dass

er optimal an die erfindungsgemäßen, bevorzugt als Emittersubstanzen verwendeten Metallkomplexe angepasst ist.

5 Um besonders effiziente OLEDs zu erhalten, sollte das HOMO (höchstes besetztes Molekülorbital) der Loch-transportierenden Schicht mit der Arbeitsfunktion der Anode angeglichen sein und das LUMO (niedrigstes unbesetztes Molekülorbital) der elektrontransportierenden Schicht sollte mit der Arbeitsfunktion der Kathode angeglichen sein.

10 Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Anmeldung ist eine OLED enthaltend mindestens eine erfindungsgemäße Licht-emittierende Schicht. Die weiteren Schichten in dem OLED können aus einem beliebigen Material aufgebaut sein, das üblicherweise in solchen Schichten eingesetzt wird und dem Fachmann bekannt ist.

15 Geeignete Materialien für die vorstehend genannten Schichten (Anode, Kathode, Loch- und Elektroneninjektionsmaterialien, Loch- und Elektronentransportmaterialien und Loch- und Elektronenblockermaterialien, Matrixmaterialien, Fluoreszenz- und Phosphoreszenzemitter) sind dem Fachmann bekannt und z. B. in H. Meng, N. Herron, *Organic Small Molecule Materials for Organic Light-Emitting Devices in Organic Light-Emitting*
20 *Materials and Devices*, Ed.: Z. Li, H. Meng, Taylor & Francis, 2007, Chapter 3, Seiten 295 bis 411 genannt.

Die Anode (1) ist eine Elektrode, die positive Ladungsträger bereitstellt. Sie kann zum Beispiel aus Materialien aufgebaut sein, die ein Metall, eine Mischung verschiedener
25 Metalle, eine Metalllegierung, ein Metalloxid oder eine Mischung verschiedener Metalloxide enthält. Alternativ kann die Anode ein leitendes Polymer sein. Geeignete Metalle umfassen die Metalle der Gruppen 11, 4, 5 und 6 des Periodensystems der Elemente sowie die Übergangsmetalle der Gruppen 8 bis 10. Wenn die Anode lichtdurchlässig sein soll, werden im Allgemeinen gemischte Metalloxide der Gruppen 12, 13 und 14
30 des Periodensystems der Elemente eingesetzt, zum Beispiel Indium-Zinn-Oxid (ITO). Es ist ebenfalls möglich, dass die Anode (1) ein organisches Material, zum Beispiel Polyanilin enthält, wie beispielsweise in *Nature*, Vol. 357, Seiten 477 bis 479 (11. Juni 1992) beschrieben ist. Zumindest entweder die Anode oder die Kathode sollten mindestens teilweise transparent sein, um das gebildete Licht auskoppeln zu können.
35

Geeignete Lochtransportmaterialien für die Schicht (2) der erfindungsgemäßen OLEDs sind zum Beispiel in *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technologie*, 4. Auflage, Vol. 18, Seiten 837 bis 860, 1996 offenbart. Sowohl Löcher transportierende Moleküle
40 als auch Polymere können als Lochtransportmaterial eingesetzt werden. Üblicherweise eingesetzte Löcher transportierende Moleküle sind ausgewählt aus der Gruppe beste-

hend aus 4,4'-Bis[N-(1-naphthyl)-N-phenyl-amino]biphenyl (α -NPD), N, N'-Diphenyl-N, N'-Bis(3-methylphenyl)-[1,1'-biphenyl]-4,4'-diamin (TPD), 1,1-Bis[(di-4-tolylamino)-phenyl]cyclohexan (TAPC), N, N'-Bis(4-methylphenyl)-N, N'-Bis(4-ethylphenyl)-[1,1'-(3,3'-dimethyl)biphenyl]-4,4'-diamin (ETPD), Tetrakis-(3-methylphenyl)-N,N,N',N'-2,5-phenylendiamin (PDA), α -Phenyl-4-N,N-diphenylaminostyrol (TPS), p-(Diethylamino)-benzaldehyddiphenylhydrazon (DEH), Triphenylamin (TPA), Bis[4-(N,N-diethylamino)-2-methylphenyl](4-methyl-phenyl)methan (MPMP), 1-Phenyl-3-[p-(diethylamino)styryl]-5-[p-(diethylamino)phenyl]pyrazolin (PPR oder DEASP), 1,2-trans-Bis(9H-carbazol-9-yl)cyclobutan (DCZB), N,N,N',N'-tetrakis(4-methylphenyl)-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamin (TTB) 4,4',4''-tris(N,N-Diphenylamino)triphenylamin (TDTA) und Porphyrinverbindungen sowie Phthalocyaninen wie Kupferphthalocyanine. Üblicherweise eingesetzte Löcher transportierende Polymere sind ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Polyvinylcarbazolen, (Phenylmethyl)polysilanen, PEDOT (Poly(3,4-ethylendioxythiophen)), bevorzugt PEDOT dotiert mit PSS (Polystyrolsulfonat), und Polyanilinen. Es ist ebenfalls möglich, Löcher transportierende Polymere durch Dotieren Löcher transportierender Moleküle in Polymere wie Polystyrol und Polycarbonat zu erhalten. Geeignete Löcher transportierende Moleküle sind die bereits vorstehend genannten Moleküle.

Geeignete Elektronentransportmaterialien für die Schicht (4) der erfindungsgemäßen OLEDs umfassen mit oxinoiden Verbindungen chelatisierte Metalle wie Tris(8-hydroxychinolato)aluminium (Alq_3), Verbindungen auf Phenanthrolinbasis wie 2,9-Dimethyl, 4,7-Diphenyl-1, 10-phenanthrolin (DDPA = BCP) oder 4,7-Diphenyl-1,10-phenanthrolin (DPA) und Azolverbindungen wie 2-(4-Biphenyl)-5-(4-t-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazol (PBD) und 3-(4-Biphenyl)-4-phenyl-5-(4-t-butylphenyl)-1,2,4-triazol (TAZ). Dabei kann die Schicht (4) sowohl zur Erleichterung des Elektronentransports dienen als auch als Pufferschicht oder als Sperrschicht, um ein Quenchen des Excitons an den Grenzflächen der Schichten des OLEDs zu vermeiden. Vorzugsweise verbessert die Schicht (4) die Beweglichkeit der Elektronen und reduziert ein Quenchen des Excitons.

Von den vorstehend als Lochtransportmaterialien und Elektronen transportierende Materialien genannten Materialien können einige mehrere Funktionen erfüllen. Zum Beispiel sind einige der Elektronen leitenden Materialien gleichzeitig Löcher blockende Materialien, wenn sie ein tief liegendes HOMO aufweisen.

Die Ladungstransportschichten können auch elektronisch dotiert sein, um die Transporteigenschaften der eingesetzten Materialien zu verbessern, um einerseits die Schichtdicken großzügiger zu gestalten (Vermeidung von Pinholes/Kurzschlüssen) und um andererseits die Betriebsspannung des Devices zu minimieren. Beispielsweise können die Lochtransportmaterialien mit Elektronenakzeptoren dotiert werden, zum Beispiel können Phthalocyanine bzw. Arylamine wie TPD oder TDTA mit Tetrafluoro-

tetracyano-chinodimethan (F4-TCNQ) dotiert werden. Die Elektronentransportmaterialien können zum Beispiel mit Alkalimetallen dotiert werden, beispielsweise Alq₃ mit Lithium. Die elektronische Dotierung ist dem Fachmann bekannt und zum Beispiel in W. Gao, A. Kahn, J. Appl. Phys., Vol. 94, No. 1, 1 July 2003 (p-dotierte organische Schichten); A. G. Werner, F. Li, K. Harada, M. Pfeiffer, T. Fritz, K. Leo, Appl. Phys. Lett., Vol. 82, No. 25, 23 June 2003 und Pfeiffer et al., Organic Electronics 2003, 4, 89 – 103 offenbart.

Die Kathode (5) ist eine Elektrode, die zur Einführung von Elektronen oder negativen Ladungsträgern dient. Die Kathode kann jedes Metall oder Nichtmetall sein, das eine geringere Arbeitsfunktion aufweist als die Anode. Geeignete Materialien für die Kathode sind ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Alkalimetallen der Gruppe 1, zum Beispiel Li, Cs, Erdalkalimetallen der Gruppe 2, Metallen der Gruppe 12 des Periodensystems der Elemente, umfassend die Seltenerdmetalle und die Lanthanide und Aktinide. Des Weiteren können Metalle wie Aluminium, Indium, Calcium, Barium, Samarium und Magnesium sowie Kombinationen davon eingesetzt werden. Weiterhin können Lithium enthaltende organometallische Verbindungen oder LiF zwischen der organischen Schicht und der Kathode aufgebracht werden, um die Betriebsspannung (Operating Voltage) zu vermindern.

20

Die OLED gemäß der vorliegenden Erfindung kann zusätzlich weitere Schichten enthalten, die dem Fachmann bekannt sind. Beispielsweise kann zwischen der Schicht (2) und der Licht emittierenden Schicht (3) eine Schicht aufgebracht sein, die den Transport der positiven Ladung erleichtert und/oder die Bänderlücke der Schichten aneinander anpasst. Alternativ kann diese weitere Schicht als Schutzschicht dienen. In analoger Weise können zusätzliche Schichten zwischen der Licht emittierenden Schicht (3) und der Schicht (4) vorhanden sein, um den Transport der negativen Ladung zu erleichtern und/oder die Bänderlücke zwischen den Schichten aneinander anzupassen. Alternativ kann diese Schicht als Schutzschicht dienen.

30

In einer bevorzugten Ausführungsform enthält die erfindungsgemäße OLED zusätzlich zu den Schichten (1) bis (5) mindestens eine der im Folgenden genannten weiteren Schichten:

- 35 - eine Loch-Injektionsschicht zwischen der Anode (1) und der Löchertransportierenden Schicht (2);
 - eine Blockschicht für Elektronen und/oder Excitonen zwischen der Löchertransportierenden Schicht (2) und der Licht-emittierenden Schicht (3);
 - eine Blockschicht für Löcher und/oder Excitonen zwischen der Licht-emittierenden Schicht (3) und der Elektronen-transportierenden Schicht (4);
- 40

- eine Elektronen-Injektionsschicht zwischen der Elektronen-transportierenden Schicht (4) und der Kathode (5).

Wie bereits vorstehend erwähnt, ist es jedoch auch möglich, dass die OLED nicht alle
5 der genannten Schichten (1) bis (5) aufweist, zum Beispiel ist eine OLED mit den
Schichten (1) (Anode), (3) (Licht-emittierende Schicht) und (5) (Kathode) ebenfalls ge-
eignet, wobei die Funktionen der Schichten (2) (Löcher-transportierende Schicht) und
(4) (Elektronen-transportierende Schicht) durch die angrenzenden Schichten über-
nommen werden. OLEDs, die die Schichten (1), (2), (3) und (5) bzw. die Schichten (1),
10 (3), (4) und (5) aufweisen, sind ebenfalls geeignet.

Dem Fachmann ist bekannt, wie er (zum Beispiel auf Basis von elektrochemischen
Untersuchungen) geeignete Materialien auswählen muss. Geeignete Materialien für die
einzelnen Schichten sowie geeignete OLED-Aufbauten sind dem Fachmann bekannt
15 und z. B. in WO2005/113704 offenbart.

Des Weiteren kann jede der genannten Schichten der erfindungsgemäßen OLED aus
zwei oder mehreren Schichten aufgebaut sein. Des Weiteren ist es möglich, dass eini-
ge oder alle der Schichten (1), (2), (3), (4) und (5) oberflächenbehandelt sind, um die
20 Effizienz des Ladungsträgertransports zu erhöhen. Die Auswahl der Materialien für
jede der genannten Schichten ist bevorzugt dadurch bestimmt, eine OLED mit einer
hohen Effizienz zu erhalten.

Die Herstellung der erfindungsgemäßen OLED kann nach dem Fachmann bekannten
25 Methoden erfolgen. Im Allgemeinen wird die OLED durch aufeinander folgende Dampf-
abscheidung (Vapor deposition) der einzelnen Schichten auf ein geeignetes Substrat
hergestellt. Geeignete Substrate sind zum Beispiel Glas oder Polymerfilme. Zur
Dampfabscheidung können übliche Techniken eingesetzt werden wie thermische Ver-
dampfung, Chemical Vapor Deposition und andere. In einem alternativen Verfahren
30 können die organischen Schichten aus Lösungen oder Dispersionen in geeigneten
Lösungsmitteln beschichtet werden, wobei dem Fachmann bekannte Beschichtungs-
techniken angewendet werden. Zusammensetzungen, die neben dem mindestens ei-
nen erfindungsgemäßen Metallkomplex ein polymeres Material in einer der Schichten
der OLED, bevorzugt in der Licht-emittierenden Schicht, aufweisen, werden im Allge-
35 meinen mittels lösungsverarbeitenden Verfahren als Schicht aufgebracht.

Im Allgemeinen haben die verschiedenen Schichten folgende Dicken: Anode (1) 500
bis 5000 Å, bevorzugt 1000 bis 2000 Å; Löcher-transportierende Schicht (2) 50 bis
1000 Å, bevorzugt 200 bis 800 Å, Licht-emittierende Schicht (3) 10 bis 1000 Å, bevor-
40 zugt 100 bis 800 Å, Elektronen transportierende Schicht (4) 50 bis 1000 Å, bevorzugt

200 bis 800 Å, Kathode (5) 200 bis 10.000 Å, bevorzugt 300 bis 5000 Å. Die Lage der Rekombinationszone von Löchern und Elektronen in der erfindungsgemäßen OLED und somit das Emissionsspektrum der OLED können durch die relative Dicke jeder Schicht beeinflusst werden. Das bedeutet, die Dicke der Elektronentransportschicht
5 sollte bevorzugt so gewählt werden, dass die Elektronen/Löcher Rekombinationszone in der Licht-emittierenden Schicht liegt. Das Verhältnis der Schichtdicken der einzelnen Schichten in der OLED ist von den eingesetzten Materialien abhängig. Die Schichtdicken von gegebenenfalls eingesetzten zusätzlichen Schichten sind dem Fachmann bekannt.

10

Durch Einsatz der erfindungsgemäßen Metallkomplexe in mindestens einer Schicht der erfindungsgemäßen OLED, bevorzugt als Emittermolekül in der Licht-emittierenden Schicht der erfindungsgemäßen OLEDs, können OLEDs mit hoher Effizienz erhalten werden. Die Effizienz der erfindungsgemäßen OLEDs kann des Weiteren durch Optimierung der anderen Schichten verbessert werden. Beispielsweise können hoch effiziente Kathoden wie Ca, Ba oder LiF eingesetzt werden. Geformte Substrate und neue Löcher-transportierende Materialien, die eine Reduktion der Operationsspannung oder eine Erhöhung der Quanteneffizienz bewirken, sind ebenfalls in den erfindungsgemäßen OLEDs einsetzbar. Des Weiteren können zusätzliche Schichten in den OLEDs
15 vorhanden sein, um die Energielevel der verschiedenen Schichten einzustellen und um Elektrolumineszenz zu erleichtern.

20

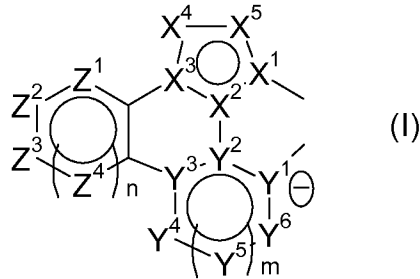
Die erfindungsgemäßen OLEDs können in allen Vorrichtungen eingesetzt werden, worin Elektrolumineszenz nützlich ist. Geeignete Vorrichtungen sind bevorzugt ausgewählt
25 aus stationären und mobilen Bildschirmen. Stationäre Bildschirme sind z. B. Bildschirme von Computern, Fernsehern, Bildschirme in Druckern, Küchengeräten sowie Reklametafeln, Beleuchtungen und Hinweistafeln. Mobile Bildschirme sind z. B. Bildschirme in Handys, Laptops, Kameras, insbesondere Digitalkameras, Fahrzeugen sowie Zielanzeigen an Bussen und Bahnen.

30

Weiterhin können die erfindungsgemäßen Metallkomplexe in OLEDs mit inverser Struktur eingesetzt werden. Bevorzugt werden die erfindungsgemäßen Metallkomplexe in diesen inversen OLEDs wiederum in der Licht-emittierenden Schicht eingesetzt. Der Aufbau von inversen OLEDs und die üblicherweise darin eingesetzten Materialien sind
35 dem Fachmann bekannt.

Patentansprüche

1. Metallkomplex enthaltend mindestens einen Liganden der allgemeinen Formel (I)



5

worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

- 10 Y^5, Z^4
unabhängig voneinander CD, CR¹, CH, N;
- $X^1, X^2, X^3, Y^1, Y^2, Y^3$
unabhängig voneinander N oder C;
- 15 X^4, X^5
unabhängig voneinander CD, CR¹, CH, N; wobei X⁴ oder X⁵ des Weiteren NR¹, S oder O sein können, wenn der jeweils andere Rest X⁵ oder X⁴ N, CH, CD oder CR¹ bedeutet;
- 20 Y^4, Y^6
unabhängig voneinander CD, CR¹, CH, N; wobei Y⁴ oder Y⁶ im Falle von m = 0 des Weiteren S, O oder NR¹ bedeuten können;
- 25 Z^1, Z^2, Z^3
unabhängig voneinander CD, CR¹, CH, N; wobei Z¹, Z² oder Z³ im Falle von n = 0 des Weiteren S, O oder NR¹ bedeuten können;
- 30 R¹ unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl, unsubstituiertes oder substituiertes Cycloalkyl, unsubstituiertes oder substituiertes Heterocycloalkyl, unsubstituiertes oder substituiertes Aryl, unsubstituiertes oder substituiertes Heteroaryl, unsubstituiertes oder substituiertes Alkenyl, unsubstituiertes oder substituiertes Cycloalkenyl, unsubstituiertes oder substituiertes Alkinyl, SiR²₃, Halogen, ein Substituent mit Donor- oder Akzeptorwirkung, wobei in dem Fall, wenn R¹ an ein N-Atom gebunden ist, R¹

unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl oder unsubstituiertes oder substituiertes Aryl oder unsubstituiertes oder substituiertes Heteroaryl bedeutet, wobei zwei beliebige Reste R^1 des Weiteren gemeinsam eine Alkylen- oder Arylenbrücke bilden können;

5

R^2 unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl oder unsubstituiertes oder substituiertes Aryl oder unsubstituiertes oder substituiertes Heteroaryl;

10

m, n unabhängig voneinander 0 oder 1, wobei die Gruppen Z^4 bzw. Y^5 bei n bzw. $m = 0$ nicht vorhanden sind;

dadurch gekennzeichnet, dass der Metallkomplex mindestens ein Deuteriumatom enthält.

15

2. Metallkomplex nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass mindestens eine der Gruppen $X^4, X^5, Y^4, Y^5, Y^6, Z^1, Z^2, Z^3, Z^4$ CD bedeutet.

20

3. Metallkomplex nach Anspruch 1 oder 2, dadurch gekennzeichnet, dass mindestens eine der Gruppen X^1 oder Y^1 N bedeutet, wobei bevorzugt genau eine der Gruppen X^1 oder Y^1 N bedeutet, wobei besonders bevorzugt X^1 N bedeutet.

25

4. Metallkomplex nach einem der Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, dass $X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, Y^1, Y^2, Y^3, Y^4, Y^5, Y^6, Z^1, Z^2, Z^3, Z^4$ unabhängig voneinander die folgenden Bedeutungen aufweisen:

X^2, Y^1, Y^2, Y^3

C;

X^1

30

N;

X^3

C oder N, bevorzugt N;

X^5

N, CD oder CR^1 ; bevorzugt CD;

35

X^4

CR^1, CD, N, NR^1, O oder S, bevorzugt CR^1 oder CD;

Y^4, Y^5, Y^6

unabhängig voneinander CH, CD oder CR^1 , bevorzugt CD;

Z^1, Z^2, Z^3, Z^4

unabhängig voneinander CH, CD, CR¹ oder N, wobei Z¹, Z² oder Z³ im Falle von n = 0 des Weiteren S, O oder NR¹ bedeuten können, bevorzugt bedeuten Z¹, Z² und Z⁴ CD und Z³ CR¹.

5 5. Metallkomplex nach Anspruch 3 oder 4, dadurch gekennzeichnet, dass

X¹ N,
X⁴ CD oder CR¹, und
X⁵ CD

10 bedeuten.

6. Metallkomplex nach Anspruch 5, dadurch gekennzeichnet, dass

X³ N, und
Y⁴, Y⁵, Y⁶, Z¹, Z² und Z⁴
CD
X⁴, Z³
CR¹

15 bedeuten.

20

7. Metallkomplex nach einem der Ansprüche 1 bis 6, dadurch gekennzeichnet, dass

R¹ unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl, unsubstituiertes oder substituiertes Aryl, unsubstituiertes oder substituiertes Heteroaryl, SiR²₃, F, OR², SR², NR²₂, CF₃ oder CN, wobei R¹ in dem Fall, wenn R¹ an ein N-Atom gebunden ist, unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl, unsubstituiertes oder substituiertes Aryl bedeutet; und

30

R² unabhängig voneinander unsubstituiertes oder substituiertes Alkyl oder unsubstituiertes oder substituiertes Aryl

bedeuten.

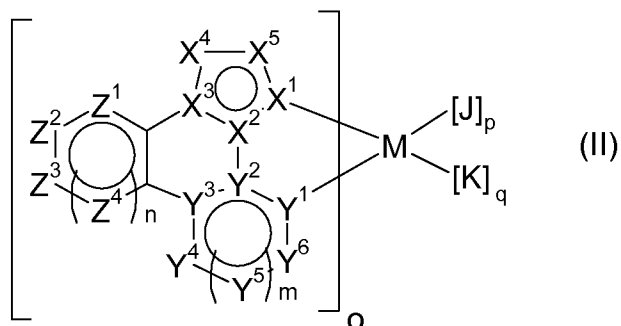
35

8. Metallkomplex nach einem der Ansprüche 1 bis 7, dadurch gekennzeichnet, dass

m 1 bedeutet.

40

9. Metallkomplex nach einem der Ansprüche 1 bis 8, dadurch gekennzeichnet, dass der Metallkomplex die allgemeine Formel (II) aufweist



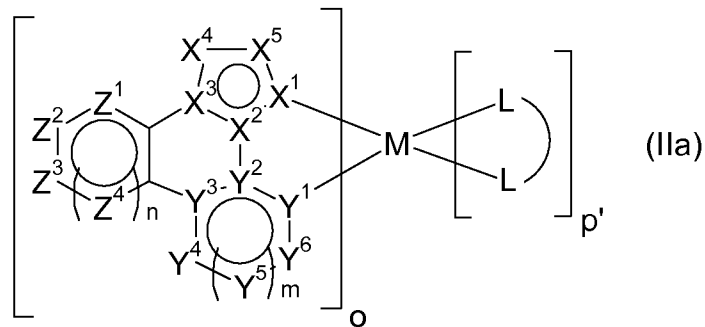
5 worin bedeuten:

- M Metallatom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Übergangsmetallen der Gruppe IB, IIB, IIIB, IVB, VB, VIB, VIIB, VIII des Periodensystems der Elemente (CAS-Version), in jeder für das entsprechende Metallatom möglichen Oxidationsstufe; bevorzugt Ir(III), Pt(II) oder Os(II), besonders bevorzugt Ir(III);
- 10
- J mono- oder dianionischer Ligand, der mono- oder bidentat sein kann, bevorzugt bidentater, monoanionischer Ligand;
- 15
- K neutraler, mono- oder bidentater Ligand, der im Allgemeinen nicht photoaktiv ist; bevorzugte Liganden K sind Phosphine, insbesondere Trialkylphosphine, z. B. PEt_3 , PnBu_3 , Triarylphosphine, z. B. PPh_3 ; Phosphonate und Derivate davon, Arsenate und Derivate davon, Phosphite, CO, Nitrile, Amine, Diene, die einen π -Komplex mit M bilden können, z. B. 2,4-Hexadien, η^4 -Cyclooctadien und η^2 -Cyclooctadien (jeweils 1,3 und 1,5), Allyl, Methallyl, Cycloocten, Norbornadien und neutrale Biscarbene;
- 20
- o 1, 2, 3 oder 4; wobei für M = Ir(III) 1, 2 oder 3, bevorzugt 2 oder 3; für M = Pt(II) oder Os(II) 1 oder 2; bedeutet;
- 25
- p 0, 1, 2, 3 oder 4; wobei p für M = Ir(III) 0, 1, 2, 3 oder 4, bevorzugt 0 oder 2; für M = Pt(II) und Os(II) 0, 1 oder 2, bevorzugt 0 oder 2; bedeutet, wobei p die Zahl der Bindungsstellen zum Metall M bedeutet, d.h., wenn p = 2 ist, kann es sich um zwei monodentate oder einen bidentaten Liganden handeln;
- 30
- q 0, 1, 2, 3 oder 4; wobei q für M = Ir(III) 0, 1 oder 2, bevorzugt 0; für M = Pt(II) 0 oder 1, bevorzugt 0; für Os(II) 2 oder 3, bevorzugt 2 bedeutet, wobei

q die Zahl der Bindungsstellen zum Metall M bedeutet, d.h., wenn q= 2 ist, kann es sich um zwei monodentate oder einen bidentaten Liganden handeln;

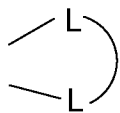
- 5 wobei o, p und q von der Oxidationsstufe und Koordinationszahl des eingesetzten Metallatoms und der Ladung der Liganden abhängig sind.
10. Metallkomplex nach Anspruch 9, dadurch gekennzeichnet, dass der Metallkomplex die allgemeine Formel (IIa) aufweist

10



worin

- 15 M Metallatom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Übergangsmetallen der Gruppe IB, IIB, IIIB, IVB, VB, VIB, VIIB, VIII des Periodensystems der Elemente (CAS-Version), in jeder für das entsprechende Metallatom möglichen Oxidationsstufe; bevorzugt Ir(III), Pt(II), besonders bevorzugt Ir(III);



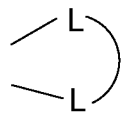
20

bidentater monoanionischer Ligand, der einen oder mehrere Deuteriumatome aufweisen kann;

- o 1, 2, 3, 4; wobei für M = Ir(III) 1, 2 oder 3, bevorzugt 2 oder 3; für M = Pt(II) 1 oder 2; bedeutet

25

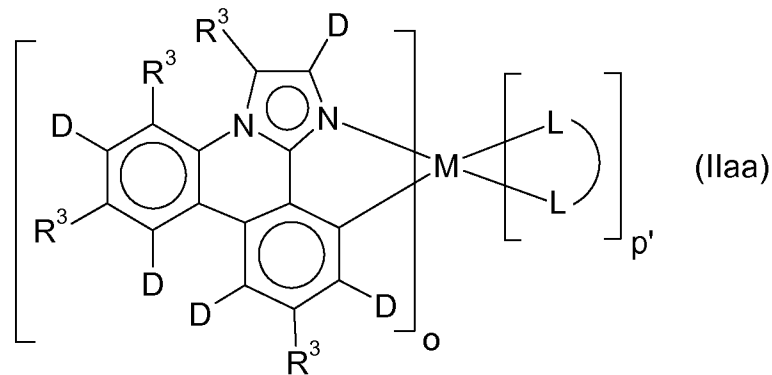
- p' 0, 1 oder 2; wobei p für M = Ir(III) 0, 1 oder 2, bevorzugt 0 oder 1; für M =

Pt(II) 0 oder 1; bedeutet, wobei p' die Zahl der Liganden  bedeutet;

wobei o und p' von der Oxidationsstufe und Koordinationszahl des eingesetzten Metallatoms abhängig sind.

30

11. Metallkomplex nach Anspruch 10, dadurch gekennzeichnet, dass L in dem bidentaten monoanionischen Liganden jeweils unabhängig voneinander ausgewählt ist aus O, N und C; bevorzugt sind monoanionische bidentate Liganden, worin beide Gruppen L O, C oder N bedeutet oder eine Gruppe L O bedeutet und die andere Gruppe L N oder C bedeutet oder eine Gruppe L C bedeutet und die andere Gruppe L N bedeutet; besonders bevorzugt sind die bidentaten monoanionischen Liganden ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Acetylacetonat, Picolinat, Carbenen, Arylpyridinen und Arylimidazolen und Derivaten der vorstehend genannten Verbindungen.
12. Metallkomplex nach Anspruch 10 oder 11, dadurch gekennzeichnet, dass der Metallkomplex die allgemeine Formel (IIaa) aufweist



15

worin

D Deuterium, und

20 R^3 unabhängig voneinander Deuterium oder R^1 bedeutet.

13. Metallkomplex nach einem der Ansprüche 10 bis 12, worin bedeuten:

25 M Ir(III), Pt(II), bevorzugt Ir(III);

o für M = Ir(III), 1, 2 oder 3, bevorzugt 2 oder 3; für M = Pt(II) 1 oder 2;

p' für M = Ir(III), 0, 1 oder 2, bevorzugt 0 oder 1; für M = Pt(II) 0 oder 1;

30 wobei die Summe $o + p'$ für M = Ir(III) 3 und für M = Pt(II) 2 bedeutet und o mindestens 1 ist.

14. Organische Leuchtdiode enthaltend mindestens einen Metallkomplex gemäß einem der Ansprüche 1 bis 13.
- 5 15. Licht-emittierende Schicht enthaltend mindestens einen Metallkomplex gemäß einem der Ansprüche 1 bis 13.
16. Organische Leuchtdiode enthaltend mindestens eine Licht-emittierende Schicht gemäß Anspruch 15.
- 10 17. Verwendung von mindestens einem Metallkomplex gemäß einem der Ansprüche 1 bis 13 in organischen Leuchtdioden.
- 15 18. Vorrichtung ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus stationären Bildschirmen wie Bildschirmen von Computern, Fernsehern, Bildschirmen in Druckern, Küchengeräten sowie Reklametafeln, Beleuchtungen, Hinweistafeln und mobilen Bildschirmen wie Bildschirmen in Handys, Laptops, Digitalkameras, Fahrzeugen sowie Zielanzeigen an Bussen und Bahnen enthaltend mindestens eine organische Leuchtdiode gemäß Anspruch 14 oder 16.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2009/057089

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER INV. H01L51/00 C07F15/00		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C07F H01L		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used) EPO-Internal, INSPEC, CHEM ABS Data		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	WO 2007/095118 A (UNIVERSAL DISPLAY CORP [US]; KNOWLES DAVID B [US]; LIN CHUN [US]; MACK) 23 August 2007 (2007-08-23) claims 1,2; figure 3; compounds ES1,ES4	1-4,7,8, 14-18
Y	WO 2006/096951 A (ALELLYX SA [BR]; PAPES FABIO [BR]; GERHARDT ISABEL RODRIGUES [BR]; ARR) 21 September 2006 (2006-09-21) paragraph [0021] - paragraph [0026]; tables 1,2	1-4,7,8, 14-18
P,Y	WO 2008/156879 A (UNIVERSAL DISPLAY CORP [US]; KNOWLES DAVID B [US]; LIN CHUN [US]; MACK) 24 December 2008 (2008-12-24) the whole document	1-4, 7-11, 14-18
----- -/--		
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents :		
A document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance *E* earlier document but published on or after the international filing date *L* document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) *O* document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means *P* document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	*T* later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention *X* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone *Y* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art. *&* document member of the same patent family	
Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report	
19 August 2009	27/08/2009	
Name and mailing address of the ISA/ European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016	Authorized officer Königstein, C	

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No

PCT/EP2009/057089

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	WO 02/47440 A (CANON KK [JP]; LI XIAO CHANG CHARLES [US]; UENO KAZUNORI [JP]) 13 June 2002 (2002-06-13) the whole document	1-4, 7-11, 14-18

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No

PCT/EP2009/057089

Patent document cited in search report	A	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 2007095118	A	23-08-2007	EP 1981898 A2 KR 20080098489 A	22-10-2008 10-11-2008
WO 2006096951	A	21-09-2006	NONE	
WO 2008156879	A	24-12-2008	US 2008297033 A1	04-12-2008
WO 0247440	A	13-06-2002	AU 2720102 A CN 1480012 A EP 1342392 A1 JP 4065521 B2 JP 2004515506 T US 2003129439 A1 US 2003134140 A1 US 2003138657 A1 US 2002076576 A1	18-06-2002 03-03-2004 10-09-2003 26-03-2008 27-05-2004 10-07-2003 17-07-2003 24-07-2003 20-06-2002

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2009/057089

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES INV. H01L51/00 C07F15/00		
Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPC) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPC		
B. RECHERCHIERTE GEBIETE Recherchiertes Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole) C07F H01L		
Recherchierte, aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen		
Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe) EPO-Internal, INSPEC, CHEM ABS Data		
C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
Y	WO 2007/095118 A (UNIVERSAL DISPLAY CORP [US]; KNOWLES DAVID B [US]; LIN CHUN [US]; MACK) 23. August 2007 (2007-08-23) Ansprüche 1,2; Abbildung 3; Verbindungen ES1,ES4	1-4,7,8, 14-18
Y	WO 2006/096951 A (ALELLYX SA [BR]; PAPES FABIO [BR]; GERHARDT ISABEL RODRIGUES [BR]; ARR) 21. September 2006 (2006-09-21) Absatz [0021] - Absatz [0026]; Tabellen 1,2	1-4,7,8, 14-18
P,Y	WO 2008/156879 A (UNIVERSAL DISPLAY CORP [US]; KNOWLES DAVID B [US]; LIN CHUN [US]; MACK) 24. Dezember 2008 (2008-12-24) das ganze Dokument	1-4, 7-11, 14-18
	-/--	
<input checked="" type="checkbox"/> Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen <input checked="" type="checkbox"/> Siehe Anhang Patentfamilie		
* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen : *A* Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist *E* älteres Dokument, das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist *L* Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt) *O* Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht *P* Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist *T* Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist *X* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung, die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden *Y* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung, die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren anderen Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist *8* Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist		
Datum des Abschlusses der internationalen Recherche 19. August 2009		Absenddatum des internationalen Recherchenberichts 27/08/2009
Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016		Bevollmächtigter Bediensteter Königstein, C

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2009/057089

C. (Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
Y	WO 02/47440 A (CANON KK [JP]; LI XIAO CHANG CHARLES [US]; UENO KAZUNORI [JP]) 13. Juni 2002 (2002-06-13) das ganze Dokument -----	1-4, 7-11, 14-18

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2009/057089

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 2007095118 A	23-08-2007	EP 1981898 A2 KR 20080098489 A	22-10-2008 10-11-2008
WO 2006096951 A	21-09-2006	KEINE	
WO 2008156879 A	24-12-2008	US 2008297033 A1	04-12-2008
WO 0247440 A	13-06-2002	AU 2720102 A CN 1480012 A EP 1342392 A1 JP 4065521 B2 JP 2004515506 T US 2003129439 A1 US 2003134140 A1 US 2003138657 A1 US 2002076576 A1	18-06-2002 03-03-2004 10-09-2003 26-03-2008 27-05-2004 10-07-2003 17-07-2003 24-07-2003 20-06-2002