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

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum
Internationales Büro

PCT

(43) Internationales Veröffentlichungsdatum
18. Oktober 2007 (18.10.2007)

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer
WO 2007/115981 A1

(51) Internationale Patentklassifikation:
C07F 15/00 (2006.01)

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2007/053262

(22) Internationales Anmeldedatum:
3. April 2007 (03.04.2007)

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:
06112198.4 4. April 2006 (04.04.2006) EP

(71) Anmelder *(für alle Bestimmungsstaaten mit Ausnahme von US)*: **BASF AKTIENGESELLSCHAFT** [DE/DE]; 67056 Ludwigshafen (DE).

(72) Erfinder; und

(75) Erfinder/Anmelder *(nur für US)*: **MOLT, Oliver** [DE/DE]; Talstrasse 1a, 69493 Hirschberg (DE). **FUCHS, Evelyn** [DE/DE]; Waldhornstrasse 17, 68199 Mannheim (DE). **LENNARTZ, Christian** [DE/DE]; Hans-Purrmann-Strasse 24, 67105 Schifferstadt (DE). **KAHLE, Klaus** [DE/DE]; Hugenottenstrasse 40, 67069 Ludwigshafen (DE). **MOONEN, Nicolle** [NL/DE]; Schwarzwaldstrasse 97, 68163 Mannheim (DE). **SCHILDKNECHT, Christian** [DE/DE]; Danziger Strasse 5, 67125 Dannstadt-schauernheim (DE). **RUDOLPH, Jens** [DE/DE]; Wilhelm-Leuchner-Strasse 2, 67547 Worms (DE).

(74) Anwalt: **ISENBRUCK, Günter**; ISENBRUCK BÖSL HÖRSCHLER WICHMANN HUHN, Theodor-Heuss-Anlage 12, 68165 Mannheim (DE).

(81) Bestimmungsstaaten *(soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare nationale Schutzrechtsart)*: AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, 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, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RS, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, 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, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MT, NL, 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*

— *vor Ablauf der für Änderungen der Ansprüche geltenden Frist; Veröffentlichung wird wiederholt, falls Änderungen eintreffen*

Zur Erklärung der Zweibuchstaben-Codes und der anderen Abkürzungen wird auf die Erklärungen ("Guidance Notes on Codes and Abbreviations") am Anfang jeder regulären Ausgabe der PCT-Gazette verwiesen.

(54) Title: TRANSITION METAL COMPLEXES COMPRISING ONE NONCARBENE LIGAND AND ONE OR TWO CARBENE LIGANDS AND THEIR USE IN OLEDS

(54) Bezeichnung: ÜBERGANGSMETALLKOMPLEXE, ENTHALTEND EINEN NICHT-CARBEN- UND EIN ODER ZWEI CARBENLIGANDEN UND DEREN VERWENDUNG IN OLEDS

(57) Abstract: The present invention relates to heteroleptic carbene complexes comprising both carbene ligands and heterocyclic noncarbene ligands, to a process for preparing the heteroleptic carbene complexes, to the use of the heteroleptic carbene complexes in organic light-emitting diodes, to organic light-emitting diodes comprising at least one inventive heteroleptic carbene complex, to a light-emitting layer comprising at least one inventive heteroleptic carbene complex, to organic light-emitting diodes comprising at least one inventive light-emitting layer and to devices which comprise at least one inventive organic light-emitting diode.

(57) Zusammenfassung: Die vorliegende Erfindung betrifft heteroleptische Carbenkomplexe enthaltend sowohl Carbenliganden als auch heterocyclische Nicht-Carbenliganden, ein Verfahren zur Herstellung der heteroleptischen Carbenkomplexe, die Verwendung der heteroleptischen Carbenkomplexe in organischen Leuchtdioden, organische Leuchtdioden enthaltend mindestens einen erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplex, eine Licht-emittierende Schicht, enthaltend mindestens einen erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplex, organische Leuchtdioden, enthaltend mindestens eine erfindungsgemäße Licht-emittierende Schicht sowie Vorrichtungen, die mindestens eine erfindungsgemäße organische Leuchtdiode enthalten.

WO 2007/115981 A1

Übergangsmetallkomplexe, enthaltend einen Nicht-Carben- und ein oder zwei Carbenliganden und deren Verwendung in OLEDs

Beschreibung

Die vorliegende Erfindung betrifft heteroleptische Carbenkomplexe enthaltend sowohl Carbenliganden als auch heterocyclische Nicht-Carbenliganden, ein Verfahren zur Herstellung der heteroleptischen Carbenkomplexe, die Verwendung der heteroleptischen Carbenkomplexe in organischen Leuchtdioden, organische Leuchtdioden enthaltend mindestens einen erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplex, eine Licht-emittierende Schicht, enthaltend mindestens einen erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplex, organische Leuchtdioden, enthaltend mindestens eine erfindungsgemäße Licht-emittierende Schicht sowie Vorrichtungen, die mindestens eine erfindungsgemäße organische Leuchtdiode enthalten.

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, zum Beispiel für Anwendungen in Handys, Laptops usw.

Die Grundprinzipien der Funktionsweise von OLEDs sowie geeignete Aufbauten (Schichten) von OLEDs sind zum Beispiel in WO 2005/113704 und der darin zitierten Literatur genannt.

Im Stand der Technik wurden bereits zahlreiche Materialien vorgeschlagen, die bei der Anregung durch elektrischen Strom Licht emittieren.

In WO 2005/019373 ist erstmals die Verwendung von neutralen Übergangsmetallkomplexen, die mindestens einen Carbenliganden enthalten, in OLEDs offenbart. Diese Übergangsmetallkomplexe können gemäß WO 2005/019373 in jeder Schicht eines OLEDs eingesetzt werden, wobei das Ligandgerüst oder Zentralmetall zur Anpassung an gewünschte Eigenschaften der Übergangsmetallkomplexe variiert werden kann. Beispielsweise ist der Einsatz der Übergangsmetallkomplexe in einer Blockschicht für Elektronen, einer Blockschicht für Excitonen, einer Blockschicht für Löcher oder der Licht-emittierenden Schicht des OLEDs möglich, wobei die Übergangsmetallkomplexe bevorzugt als Emittermoleküle in OLEDs eingesetzt werden.

WO 2005/113704 betrifft lumineszierende Verbindungen, die Carbenliganden tragen. Gemäß WO 2005/113704 sind zahlreiche Übergangsmetallkomplexe mit verschiedenen Carbenliganden genannt, wobei die Übergangsmetallkomplexe bevorzugt als phosphoreszierendes Licht-emittierendes Material, besonders bevorzugt als Dotiersubstanz, eingesetzt werden.

Obwohl bereits Verbindungen bekannt sind, die zum Einsatz in OLEDs, insbesondere als Licht-emittierende Substanzen, geeignet sind, ist die Bereitstellung von effizienteren Verbindungen, die technisch einsetzbar sind, wünschenswert. Im Sinne der vorliegenden Anmeldung ist unter Elektrolumineszenz sowohl Elektrofluoreszenz als auch Elektrophosphoreszenz zu verstehen.

Aufgabe der vorliegenden Anmeldung ist daher die Bereitstellung von neuartigen Carbenkomplexen, die zum Einsatz in OLEDs geeignet sind. Insbesondere ist die Bereitstellung von Übergangsmetallkomplexen wünschenswert, die ein gegenüber bekannten Übergangsmetallkomplexen verbessertes Eigenschaftsspektrum zeigen, z.B. verbesserte Effizienzen und/oder eine verbesserte Lebensdauer.

Diese Aufgabe wird durch die Bereitstellung von heteroleptischen Carbenkomplexen der allgemeinen Formel (I) gelöst

$$M^1[carben]_n[het]_m \qquad (I)$$

enthaltend sowohl Carbenliganden als auch heterocyclische Nicht-Carbenliganden,

worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

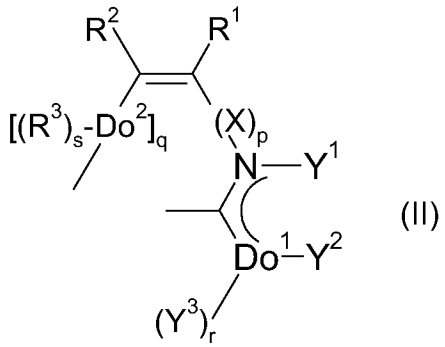
M^1 Metallatom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Ir, Co, Rh, Ni, Pd, Pt, Fe, Ru, Os, Cr, Mo, W, Mn, Tc, Re, Cu und Au, bevorzugt Ir, Os, Ru, Rh, Pd, Co und Pt, besonders bevorzugt Ir, Pt, Rh und Os, ganz besonders bevorzugt Ir, in jeder für das entsprechende Metallatom möglichen Oxidationsstufe;

n Zahl der Carbenliganden, wobei n in dem Fall, dass die Summe (n + m) = 2 ist, 1 bedeutet, und in dem Fall, dass die Summe (n + m) ≥ 3 ist, mindestens 2 bedeutet, wobei die Carbenliganden in dem Fall, wenn n mindestens 2 bedeutet, gleich oder verschieden sein können;

m Zahl der heterocyclischen Nicht-Carbenliganden, wobei m ≥ 1 ist, wobei die heterocyclischen Nicht-Carbenliganden in dem Fall, wenn m > 1 ist, gleich oder verschieden sein können;

wobei n und m von der Oxidationsstufe und Koordinationszahl des eingesetzten Metallatoms und von der Ladung der Liganden carben und het abhängig sind;

carben Carbenligand der allgemeinen Formel (II)



(II)

wobei die Symbole in dem Carbenliganden der allgemeinen Formel II die folgenden Bedeutungen aufweisen:

Do^1 Donoratom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus C, P, N, O, S und Si, bevorzugt P, N, O und S;

Do^2 Donoratom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus C, N, P, O und S;

r 2, wenn Do^1 C oder Si ist, 1, wenn Do^1 N oder P ist und 0, wenn Do^1 O oder S ist;

s 2, wenn Do^2 C ist, 1, wenn Do^2 N oder P ist und 0, wenn Do^2 O oder S ist;

X Spacer ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Silylen, Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{13}, PR^{14}, BR^{15}, O, S, SO, SO_2, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{16}R^{17})_w$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{16}R^{17})$ durch NR^{13}, PR^{14}, BR^{15}, O, S, SO, SO_2, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können;

w 2 bis 10;

R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}

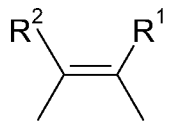
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl;

p 0 oder 1;

q 0 oder 1;

Y^1, Y^2 jeweils unabhängig voneinander Wasserstoff oder eine kohlenstoffhaltige Gruppe ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- und Alkenylgruppen;
oder
Y^1 und Y^2 bilden gemeinsam eine Brücke zwischen dem Donoratom Do^1 und dem Stickstoffatom N die mindestens zwei Atome aufweist, wovon mindestens eines ein Kohlenstoffatom ist,

R^1, R^2 unabhängig voneinander Wasserstoff, Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylreste,
oder
R^1 und R^2 bilden gemeinsam eine Brücke mit insgesamt drei bis fünf Atomen, wovon 1 bis 5 Atome Heteroatome sein können und die restlichen Atome Kohlenstoffatome sind, so dass die Gruppe



einen fünf- bis siebengliedrigen Ring bildet, der gegebenenfalls - neben der bereits vorhandenen Doppelbindung - eine - oder im Falle eines sechs- oder siebengliedrigen Rings - zwei weitere Doppelbindungen aufweisen kann und gegebenenfalls mit Alkyl- oder Arylgruppen und/oder Gruppen mit Donor- oder Akzeptorwirkung substituiert sein kann und gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, und der fünf- bis siebengliedrige Ring gegebenenfalls mit einem oder mehreren weiteren Ringen anelliert sein kann;

weiterhin können Y^1 und R^1 über eine Brücke miteinander verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

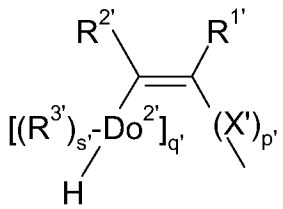
Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{21}R^{22})_x$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{21}R^{22})$ durch NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

x 2 bis 10;
und
R^{18}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{30}, R^{31}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten;

R^3 Wasserstoff, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest;

Y^3 Wasserstoff, ein Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylrest,

oder



wobei $Do^{2'}$, q', s', $R^{3'}$, $R^{1'}$, $R^{2'}$, X' und p' unabhängig die gleichen Bedeutungen wie Do^2, q, s, R^3, R^1, R^2, X und p aufweisen;

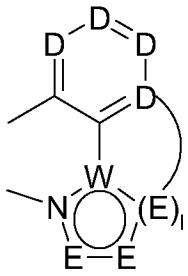
weiterhin können Y^3 und Y^2 in jedem der n Carbenliganden über eine Brücke miteinander verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{25}, PR^{26}, BR^{27}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{32}R^{33}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{28}R^{29})_y$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{28}R^{29})$ durch NR^{25}, PR^{26}, BR^{27}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{32}R^{33}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

y 2 bis 10;
und
R^{25}, R^{26}, R^{27}, R^{28}, R^{29}, R^{32}, R^{33}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten;

und

het heterocyclischer Nicht-Carbenligand der allgemeinen Formel (III)



(III)

worin die Symbole in dem Liganden het der allgemeinen Formel III die folgenden Bedeutungen aufweisen:

D unabhängig voneinander CR^{34} oder N;

W C, N, P;

E unabhängig voneinander CR^{35}, N, NR^{36}, S, O, P oder PR^{37};

l 1 oder 2;

R^{34}, R^{35}, R^{36}, R^{37} unabhängig voneinander H, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste R^{34}, R^{35}, R^{36} oder R^{37} bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R^{34}, R^{35}, R^{36} oder R^{37} bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

wobei die gestrichelte Linie eine optionale Verbrückung zwischen einer der Gruppen D und einer der Gruppen E bedeutet; wobei die Verbrückung die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{38}, PR^{39}, BR^{40}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{41}R^{42}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{43}R^{44})_v$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{43}R^{44})$ durch NR^{38}, PR^{39}, BR^{40}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{41}R^{42}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

v 2 bis 10;

und

R^{38}, R^{39}, R^{40}, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl

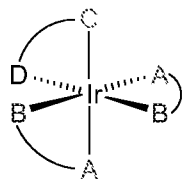
bedeuten.

Die erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe der Formel I zeichnen sich somit dadurch aus, dass sie mindestens einen Carbenliganden der allgemeinen Formel II und mindestens einen heterocyclischen Nicht-Carbenliganden der allgemeinen Formel III aufweisen. In Abhängigkeit von der Oxidationsstufe und Koordinationszahl des eingesetzten Metallatoms M^1 sowie von der Ladung der Liganden können neben dem mindestens einen Carbenliganden der allgemeinen Formel II und dem mindestens einen heterocyclischen Nicht-Carbenliganden der allgemeinen Formel III in dem erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplex weitere Carbenliganden der allgemeinen Formel II vorliegen, wobei die Substitutionsmuster der einzelnen Carbenliganden der allgemeinen Formel II gleich oder unterschiedlich sein können. In dem Fall, wenn M^1 ein Metall mit einer Koordinationszahl von 4 ist (z.B. Pt(II) oder Pd(II), Ir(I), Rh(I)), weisen die erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe einen Carbenliganden der allgemeinen Formel II und einen heterocyclischen Nicht-Carbenliganden der allgemeinen Formel III auf. In dem Fall, wenn M^1 ein Metall mit einer Koordinationszahl von 6 ist (z.B. Ir(III), Co(II), Co(III), Rh(III), Os(II), Pt(IV)), weisen die erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe zwei Carbenliganden der allgemeinen Formel II, die gleich oder verschieden sein können, und einen heterocyclischen Nicht-Carbenliganden der allgemeinen Formel III auf. Weist das Metallatom M^1 eine Koordinationszahl von 8 oder mehr auf, können die heteroleptischen Carbenkomplexe der allgemeinen Formel I neben zwei Carbenliganden der allgemeinen Formel II und einem heterocyclischen Nicht-Carbenliganden der allgemeinen Formel III entweder einen oder mehrere weitere Carbenliganden der allgemeinen Formel II und/oder einen oder mehrere heterocyclische Nicht-Carbenliganden der allgemeinen Formel III aufweisen. In einer bevorzugten Ausführungsform betrifft die vorliegende Erfindung heteroleptische Carbenkomplexe der allgemeinen Formel I, die ein Metall M^1 mit einer Koordinationszahl von 6, zwei Carbenliganden der allgemeinen Formel II und einen heterocyclischen Nicht-Carbenliganden der allgemeinen Formel III aufweisen.

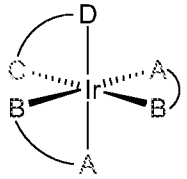
Es wurde gefunden, dass sich die erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe, die mindestens einen Carbenliganden der allgemeinen Formel II und mindestens einen heterocyclischen Nicht-Carbenliganden enthalten, insbesondere die erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe, die mehrere Carbenliganden der allgemeinen Formel II aufweisen, bei ihrem Einsatz in organischen Leuchtdioden (OLED) dadurch auszeichnen, dass sie überraschend hohe Quantenausbeuten zeigen. Mit Hilfe der speziellen Ligandkombination der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe kann des Weiteren eine Rotverschiebung in der Emission gegenüber reinen Carbenkomplexen erzielt werden. Somit können die erfindungsgemäßen hetero-

leptischen Carbenkomplexe in OLEDs für eine gezielte Farbeinstellung bei hoher Quantenausbeute eingesetzt werden.

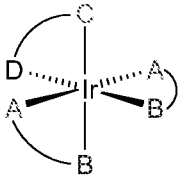
In Abhängigkeit von der Koordinationszahl des eingesetzten Metalls M^1 und der Zahl der eingesetzten Carbenliganden und Nicht-Carbenliganden können verschiedene Isomere der entsprechenden Metallkomplexe bei gleichem Metall M^1 und gleicher Natur der eingesetzten Carbenliganden und Nicht-Carbenliganden vorliegen. Zum Beispiel sind bei Komplexen mit einem Metall M^1 mit der Koordinationszahl 6 (also oktaedrischen Komplexen), zum Beispiel Ir(III)-Komplexen, „fac-mer-Isomere" (facial/meridional-Isomere) möglich, wenn es sich um Komplexe der allgemeinen Zusammensetzung $M(AB)_2(CD)$, wobei AB und CD bidentate Liganden sind, handelt. Dabei sind im Sinne der vorliegenden Anmeldung unter „fac-mer-Isomeren" die im Folgenden dargestellten Isomere zu verstehen:



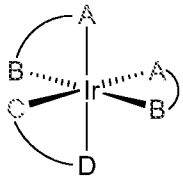
***fac*-Isomer 1**



***fac*-Isomer 2**

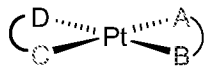


***mer*-Isomer 3**

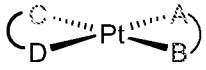


***mer*-Isomer 4**

Bei quadratisch planaren Komplexen mit einem Metall M^1 mit der Koordinationszahl 4, zum Beispiel Pt(II)-Komplexen, sind „Isomere" möglich, wenn es sich um Komplexe der allgemeinen Zusammmensetzung M(AB)(CD), wobei AB und CD bidentate Liganden sind, handelt. Dabei sind im Sinne der vorliegenden Anmeldung unter „Isomeren" die im Folgenden dargestellten Isomere zu verstehen:



Isomer 1



Isomer 2

Bei den Symbolen A und B sowie C und D handelt es sich jeweils um eine Bindungsstelle eines Liganden, wobei nur bidentate Liganden vorliegen. Ein bidentater Ligand weist gemäß der vorstehend erwähnten allgemeinen Zusammensetzung eine Gruppe A und eine Gruppe B bzw. eine Gruppe C und eine Gruppe D auf.

Dem Fachmann ist grundsätzlich bekannt, was unter cis/trans- bzw. fac-mer-Isomeren zu verstehen ist. Bei Komplexen der Zusammensetzung MA_3B_3 können drei Gruppen der gleichen Art entweder die Ecken einer Oktaederfläche besetzen (faciales Isomer) oder einen Meridian, das heißt zwei der drei Ligandenbindungsstellen sind zueinander trans-ständig (meridionales Isomer). Bezüglich der Definition von cis/trans-Isomeren bzw. fac-mer-Isomeren in oktaedrischen Metallkomplexen siehe zum Beispiel J. Hu-

heey, E. Keiter, R. Keiter, Anorganische Chemie: Prinzipien von Struktur und Reaktivität, 2., neu bearbeitete Auflage, übersetzt und erweitert von Ralf Steudel, Berlin; New York: de Gruyter, 1995, Seiten 575, 576.

Bei quadratisch planaren Komplexen bedeutet cis-Isomerie, dass bei Komplexen der Zusammensetzung MA_2B_2 sowohl die beiden Gruppen A als auch die beiden Gruppen B benachbarte Ecken eines Quadrats belegen, während sowohl die beiden Gruppen A als auch die beiden Gruppen B bei der trans-Isomerie jeweils die beiden einander diagonal gegenüber liegenden Ecken eines Quadrats belegen. Bezüglich der Definition von cis/trans-Isomeren in quadratisch planaren Metallkomplexen siehe zum Beispiel J. Huheey, E. Keiter, R, Keiter, Anorganische Chemie: Prinzipien von Struktur und Reaktivität, 2., neu bearbeitete Auflage, übersetzt und erweitert von Ralf Stendel, Berlin; New York: de Gruyter, 1995, Seiten 557 bis 559.

Im Allgemeinen können die verschiedenen Isomere der Metallkomplexe der Formel I nach dem Fachmann bekannten Verfahren, zum Beispiel durch Chromatographie, Sublimation oder Kristallisation, getrennt werden.

Die vorliegende Erfindung betrifft somit sowohl jeweils die einzelnen Isomere der Carbenkomplexe der Formel I als auch Gemische verschiedener Isomere in jedem beliebigen Mischungsverhältnis.

Besonders bevorzugt weisen die erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe der allgemeinen Formel I ein Metallatom M^1 ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Ir, Os, Rh und Pt auf, wobei Os(II), Rh(III), Ir(III) und Pt(II) ganz besonders bevorzugt sind. Insbesondere ganz besonders bevorzugt ist Ir(III).

Die Zahl n der Carbenliganden der allgemeinen Formel II beträgt in den erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexen der Formel I, worin das Übergangsmetallatom M^1 eine Koordinationszahl von 6 aufweist, wobei Ir(III) besonders bevorzugt ist, 2 und die Zahl m der heterocyclischen Nicht-Carbenliganden der allgemeinen Formel III beträgt in diesen Komplexen 1.

Die Zahl n der Carbenliganden der allgemeinen Formel II beträgt in Übergangsmetallkomplexen, worin das Übergangsmetallatom M^1 eine Koordinationszahl von 4 aufweist, wobei Pt(II) besonders bevorzugt ist, 1 und die Zahl m der heterocyclischen Nicht-Carbenliganden der allgemeinen Formel III beträgt in diesen Komplexen ebenfalls 1.

Für die Gruppen Y^1 und Y^2 gilt im Sinne der vorliegenden Anmeldung:

die Substituenten der Gruppen Y^1 und Y^2 können gemeinsam eine Brücke mit insgesamt zwei bis vier, bevorzugt zwei bis drei Atomen, bilden, wovon ein oder zwei Atome Heteroatome, bevorzugt N, sein können und die restlichen Atome Kohlenstoffatome sind, so dass die Gruppierung $NCDo^1$ gemeinsam mit dieser Brücke einen fünf- bis siebengliedrigen, bevorzugt fünf- bis sechsgliedrigen Ring bilden, der gegebenenfalls zwei - oder im Falle eines sechs- oder siebengliedrigen Rings – drei Doppelbindungen aufweisen kann und gegebenenfalls mit Alkyl- oder Arylgruppen und/oder Gruppen mit Donor- oder Akzeptorwirkung substituiert sein kann und gegebenenfalls Heteroatome, bevorzugt N, enthalten kann, wobei ein fünfgliedriger oder sechsgliedriger aromatischer Ring, der mit Alkyl- oder Arylgruppen und/oder Gruppen mit Donor- oder Akzeptorwirkung substituiert oder unsubstituiert ist, bevorzugt ist, oder der bevorzugte fünfgliedrige oder sechsgliedrige aromatische Ring ist mit weiteren Ringen, die gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom, bevorzugt N, enthalten können, bevorzugt sechsgliedrigen aromatischen Ringen, anelliert.

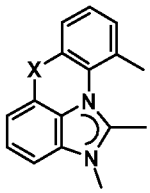
Die Gruppe Y^1 kann mit dem Rest R^1 über eine Brücke verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:
Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{21}R^{22})_x$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{21}R^{22})$ durch NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

x 2 bis 10;
und
R^{18}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{30}, R^{31}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten.

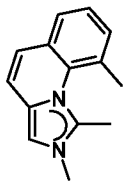
In dem Fall, dass Y^1 und Y^2 gemeinsam eine Brücke bilden, wobei ein fünf- bis siebengliedriger Ring gebildet wird, kann die verknüpfende Brücke zu dem Rest R^1 direkt mit dem fünf- bis siebengliedrigen Ring verknüpft sein oder an einen Substituenten dieses Rings geknüpft sein, wobei eine direkte Verknüpfung mit dem fünf- bis siebengliedrigen Ring bevorzugt ist. Besonders bevorzugt ist das dem N-Atom (in der allgemeinen Formel II) des fünf- bis siebengliedrigen Rings direkt benachbarte Atom über eine Brücke mit R^1 verknüpft, wenn eine solche Verknüpfung vorliegt (siehe z.B. die nachstehend genannten verbrückten Strukturen). In dem Fall, dass der durch eine gemeinsame Brücke von Y^1 und Y^2 gebildete fünf- bis siebengliedrige Ring mit einem weiteren fünf- bis siebengliedrigen Ring anelliert ist, kann die verknüpfende Brücke mit einem Atom des anellierten Rings verknüpft sein (siehe z.B. die nachstehend genannten verbrückten Strukturen).

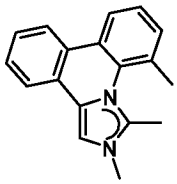
Im Folgenden sind bevorzugte verbrückte Strukturen beispielhaft für die Carbenliganden der allgemeinen Formel II genannt. Die in den dargestellten Ligandsystemen dargestellten Gruppen können z.B. Substituenten tragen oder eine oder mehrere CH-Gruppen in den gezeigten aromatischen Gruppen können durch Heteroatome ersetzt sein. Es ist ebenfalls möglich, dass die Carbenliganden mehrere gleiche oder verschiedene Brücken aufweisen. Die dargestellten Brücken können auch in anderen erfindungsgemäß eingesetzten Ligandsystemen, z.B. in den nachstehend erwähnten Ligandsystemen der Formeln aa bis ae, vorkommen.

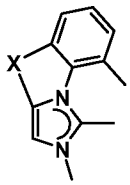
Beispiele für Carbenliganden mit verbrückten Strukturen:



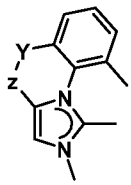
X=O, S, SO, SO_2,
CH_2 CMe_2, $SiR^{30}R^{31}$, NMe



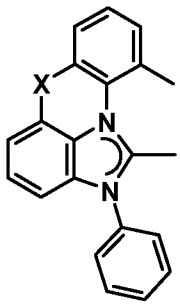


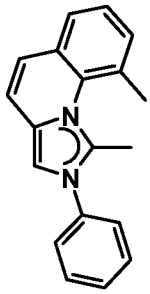


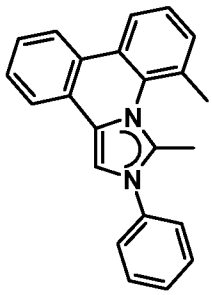
X=O, S, SO, SO_2,
CH_2, CMe_2, $SiR^{30}R^{31}$, NMe



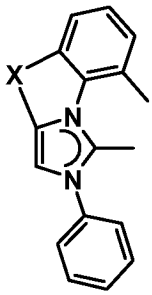
Y-Z=1x $CR^{21}R^{22}$ und 1x O, S,
SO, SO_2, $CR^{21}R^{22}$, $SiR^{30}R^{31}$, NR^{18}
oder Y-Z=CO-O, O-CO



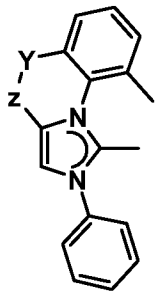




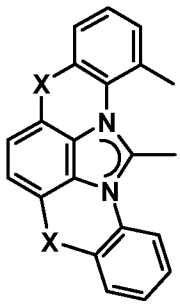
X=O, S, SO, SO_2,
CH_2 CMe_2, $SiR^{30}R^{31}$, NMe

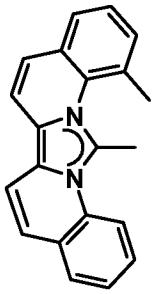


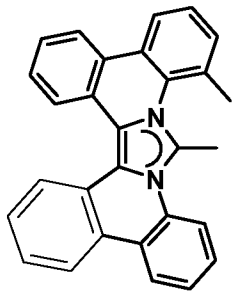
X=O, S, SO, SO_2,
CH_2, CMe_2, $SiR^{30}R^{31}$, NMe



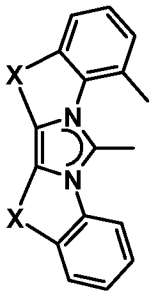
Y-Z=1x $CR^{21}R^{22}$ und 1x O, S,
SO, SO_2, $CR^{21}R^{22}$, $SiR^{30}R^{31}$, NR^{18}
oder Y-Z=CO-O, O-CO



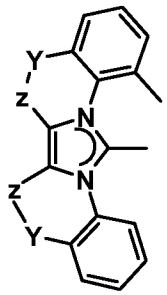




X=O, S, SO, SO_2,
CH_2 CMe_2, $SiR^{30}R^{31}$, NMe



X=O, S, SO, SO_2,
CH_2, CMe_2, $SiR^{30}R^{31}$, NMe



Y-Z=1x $CR^{21}R^{22}$ und 1x O, S,
SO, SO_2, $CR^{21}R^{22}$, $SiR^{30}R^{31}$, NR^{18}
oder Y-Z=CO-O, O-CO

Die Reste R^{18}, R^{21}, R^{22}, R^{30} und R^{31} wurden bereits vorstehend definiert.

Im Sinne der vorliegenden Anmeldung haben die Begriffe Arylrest oder -gruppe, Heteroarylrest oder -gruppe, Alkylrest oder -gruppe und Alkenylrest oder -gruppe und Alkinylrest oder –gruppe die folgenden Bedeutungen:

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 Alkylreste, bevorzugt Alkylreste mit 1 bis 8 Kohlenstoffatomen, besonders bevorzugt Methyl, Ethyl oder i-Propyl, Arylreste, bevorzugt C_6-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. Geeignete Gruppen, mit Donor- oder Akzeptorwirkung sind nachstehend genannt. Ganz besonders bevorzugt tragen die Arylreste Substituenten ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Methyl, F, Cl, CN, Aryloxy und Alkoxy, Sulfonyl, Heteroaryl. Bevorzugt ist der Arylrest oder die Arylgruppe ein C_6-C_{18}-Arylrest, besonders bevorzugt ein C_6-Arylrest, der gegebenenfalls mit mindestens einem der vorstehend genannten Substituenten substituiert ist. Besonders bevorzugt weist der C_6-C_{18}-Arylrest, bevorzugt C_6-Arylrest, einen oder zwei der vorstehend genannten Substituenten auf, wobei im Falle eines C_6-Arylrests der eine Substituent in ortho-, meta- oder para-Position zur weiteren Verknüpfungsstelle des Arylrestes angeordnet ist, und - im Falle von zwei Substituenten - können diese jeweils in meta-Position oder ortho-Position zur weiteren Verknüpfungsstelle des Arylrestes angeordnet sein oder ein Rest ist in ortho-Position und ein Rest in meta-Position angeordnet oder ein Rest ist in ortho- oder meta-Position angeordnet und der weitere Rest ist in para-Position angeordnet.

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 Pyridin und fünfgliedrigen Heteroaromaten wie Pyrrol, Furan, Pyrazol, Imidazol, Thiophen, Oxazol, Thiazol. 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.

Unter einem Alkylrest oder einer Alkylgruppe ist ein Rest mit 1 bis 20 Kohlenstoffatomen, bevorzugt 1 bis 10 Kohlenstoffatomen, besonders bevorzugt 1 bis 8 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. 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 und iso-Propyl.

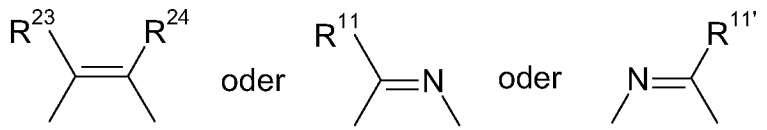
Unter einem Alkenylrest oder einer Alkenylgruppe ist ein Rest zu verstehen, der den vorstehend genannten Alkylresten mit mindestens zwei Kohlenstoffatomen entspricht, mit dem Unterschied, dass mindestens eine C-C-Einfachbindung des Alkylrests durch eine C-C-Doppelbindung ersetzt ist. Bevorzugt weist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

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.

Die Begriffe Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen und Alkenylen haben im Sinne der vorliegenden Anmeldung die bezüglich der Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- und Alkenylreste genannten Bedeutungen mit dem Unterschied, dass die Alkylen-, Arylen-, Heteroarylen-, Alkinylen- und Alkenylengruppen zwei Bindungsstellen zu Atomen des Liganden der Formel II aufweisen.

Unter einer aus Y^1 und Y^2 gebildeten Brücke, die mindestens zwei Atome aufweist, wovon mindestens eines ein Kohlenstoffatom ist und die weiteren Atome bevorzugt Stickstoff- oder Kohlenstoffatome sind, wobei die Brücke gesättigt oder bevorzugt ungesättigt sein kann und die mindestens zwei Atome der Brücke substituiert oder unsubstituiert sein können, sind bevorzugt die folgenden Gruppen zu verstehen:

- Eine Brücke, die zwei Kohlenstoffatome oder ein Kohlenstoffatom und ein Stickstoffatom aufweist, wobei die Kohlenstoffatome bzw. ein Kohlenstoffatom und ein Stickstoffatom durch eine Doppelbindung miteinander verbunden sind, so dass die Brücke eine der folgenden Formeln aufweist, wobei die Brücke bevorzugt zwei Kohlenstoffatome aufweist:

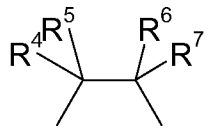


R^{23}, R^{24}, R^{11} und $R^{11'}$ bedeuten unabhängig voneinander Wasserstoff, Alkyl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl, Aryl oder ein Substituent mit Donor- oder Akzeptorwirkung, oder

R^{23} und R^{24} bilden gemeinsam eine Brücke mit insgesamt 3 bis 5, bevorzugt 4, Atomen, wovon gegebenenfalls 1 bis 5 Atome Heteroatome, bevorzugt N, sein kön-

nen und die restlichen Atome Kohlenstoffatome sind, so dass diese Gruppe einen 5- bis 7-gliedrigen, bevorzugt sechsgliedrigen Ring bildet, der gegebenenfalls - neben der bereits vorhandenen Doppelbindung - eine - oder im Falle eines sechs- oder siebengliedrigen Rings - zwei weitere Doppelbindungen aufweisen kann und gegebenenfalls mit Alkyl- oder Arylgruppen und/oder Gruppen mit Donor- oder Akzeptorwirkung substituiert sein kann. Bevorzugt ist dabei ein sechsgliedriger aromatischer Ring. Dieser kann mit Alkyl- oder Arylgruppen und/oder Gruppen mit Donor- oder Akzeptorwirkung substituiert oder unsubstituiert sein. Des Weiteren ist es möglich, dass an diesem, bevorzugt sechsgliedrigen, aromatischen Ring ein oder mehrere weitere aromatische Ringe anelliert sind. Dabei ist jede denkbare Anellierung möglich. Diese anellierten Reste können wiederum substituiert sein, bevorzugt mit den in der allgemeinen Definition der Arylreste genannten Resten.

- Eine Brücke, die zwei Kohlenstoffatome aufweist, wobei die Kohlenstoffatome durch eine Einfachbindung miteinander verbunden sind, so dass die Brücke die folgende Formel aufweist:



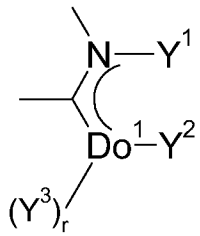
worin R^4,
R^5, R^6
und R^7 unabhängig voneinander Wasserstoff, Alkyl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl, Aryl oder ein Substituent mit Donor- oder Akzeptorwirkung bedeuten, bevorzugt Wasserstoff, Alkyl oder Aryl.

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

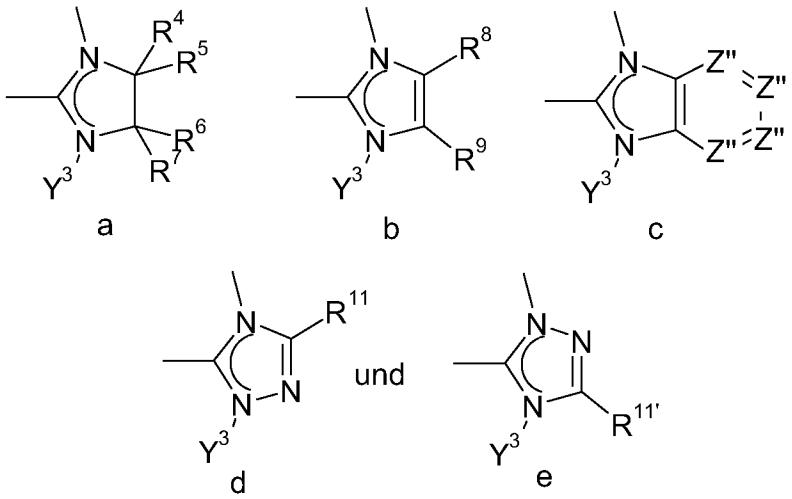
Unter Gruppen mit Donorwirkung sind Gruppen zu verstehen, die einen +I- und/oder +M-Effekt aufweisen, und unter Gruppen mit Akzeptorwirkung sind Gruppen zu verstehen, die einen -I- und/oder –M-Effekt aufweisen. Geeignete Gruppen, mit Donor- oder Akzeptorwirkung sind Halogenreste, bevorzugt F, Cl, Br, besonders bevorzugt F, Alkoxyreste, Aryloxyreste, Carbonylreste, Esterreste, sowohl Oxycarbonyl als auch Carbonyloxy, Aminreste, Amidreste, CH_2F-Gruppen, CHF_2-Gruppen, CF_3-Gruppen, CN-Gruppen, Thiogruppen, Sulfonsäuregruppen, Sulfonsäureestergruppen, Boronsäuregruppen, Boronsäureestergruppen, Phosphonsäuregruppen, Phosphonsäureestergruppen, Phosphinreste, Sulfoxidreste, Sulfonylreste, Sulfidreste, Heteroarylreste, Nitrogruppen, OCN, Boranreste, Silylgruppen, Stannatreste, Iminogruppen,

Hydrazinreste, Hydrazonreste, Oximreste, Nitrosogruppen, Diazogruppen, Phosphinoxidgruppen, Hydroxygruppen oder SCN-Gruppen. Ganz besonders bevorzugt sind F, Cl, CN, Aryloxy, Alkoxy, Sulfonyl und Heteroaryl.

Die Gruppierung



in dem Carbenliganden der allgemeinen Formel II ist bevorzugt ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus



worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

Z'' unabhängig voneinander CR^{10} oder N; bevorzugt sind 0 bis 3 der Gruppen Z'' N, besonders bevorzugt 0 bis 2, ganz besonders bevorzugt 0 oder 1, wobei die übrigen Gruppen Z'' CR^{10} bedeuten;

R^4, R^5, R^6,

R^7, R^8, R^9, R^{11}

und $R^{11'}$ Wasserstoff, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkinyl oder Alkenyl oder ein Substituent mit Donor- oder Akzeptorwirkung, bevorzugt Wasserstoff, Alkyl, Heteroaryl oder Aryl;

R^{10} Wasserstoff, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkinyl oder Alkenyl oder jeweils 2 Reste R^{10} bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom, bevorzugt N, enthalten kann, oder R^{10} bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

weiterhin können R^4 oder R^5 in der Gruppierung a, R^8 in der Gruppierung b, einer der Reste R^{10} in der Gruppierung c und R^{11} in der Gruppierung d mit R^1 über eine Brücke verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{21}R^{22})_x$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{21}R^{22})$ durch NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

x 2 bis 10;

und

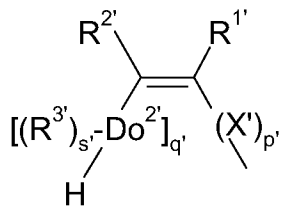
R^{18}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22},R^{30}, R^{31}

H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl

bedeuten, wobei Beispiele betreffend bevorzugt geeignete Brücken vorstehend gezeigt sind.

Der Rest Y^3 in den Strukturen a, b, c, d und e bedeutet erfindungsgemäß Wasserstoff, ein Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, wobei bevorzugte Alkyl-, Alkinyl- und Alkenylreste vorstehend genannt sind, besonders bevorzugt ist ein Alkylrest, ganz besonders bevorzugt Methyl, Ethyl, iso-Propyl, n-Propyl, n-Butyl, iso-Butyl oder tert-Butyl, insbesondere besonders bevorzugt Methyl oder iso-Propyl;

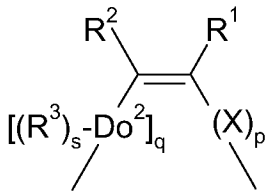
oder



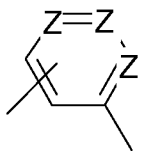
wobei $Do^{2'}$, q', s', $R^{3'}$, $R^{1'}$, $R^{2'}$, X' und p' unabhängig die gleichen Bedeutungen wie Do^2, q, s, R^3, R^1, R^2, X und p – die bereits vorstehend definiert sind – aufweisen;

bevorzugt ist Y^3 in den Strukturen a, b, c, d und e, ein Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, wobei bevorzugte Alkyl-, Alkinyl- und Alkenylreste vorstehend genannt sind, besonders bevorzugt ein Alkylrest, ganz besonders bevorzugt Methyl, Ethyl, iso-Propyl, n-Propyl, n-Butyl, iso-Butyl oder tert-Butyl, insbesondere besonders bevorzugt Methyl oder iso-Propyl.

Die Gruppierung

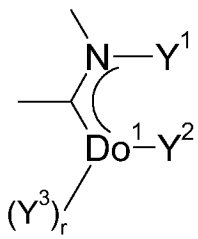


des Carbenliganden der Formel II weist bevorzugt die Struktur



auf, worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

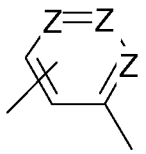
Z unabhängig voneinander CR^{12} oder N, wobei 0 bis 3 der Symbole Z N bedeuten können, bevorzugt 0 bis 2, besonders bevorzugt 0 oder 1, und Z in dem Fall, dass ein Symbol Z N bedeutet, in o-, m- oder p-Position, bevorzugt in o- oder p-Position, zur Verknüpfungsstelle der Gruppierung mit der Guppierung



angeordnet sein kann;

R^{12} in den Gruppen Z unabhängig voneinander H, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl-, Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste R^{12} bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom, bevorzugt N, enthalten kann, oder R^{12} bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung; bevorzugt H oder ein Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

weiterhin kann die Gruppe der Struktur



über den aromatischen Grundkörper oder über einen der Reste R^{12} mit Y^1 über eine Brücke verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{21}R^{22})_x$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{21}R^{22})$ durch NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

x 2 bis 10;

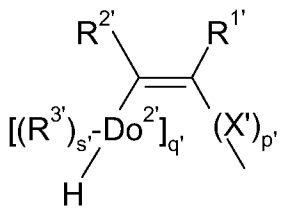
und

R^{18}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{30}, R^{31}

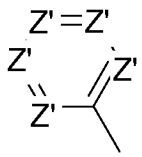
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl

bedeuten.

In einer bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung weist die Gruppe

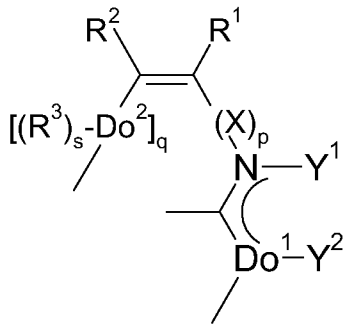


die folgende Bedeutung auf:



worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

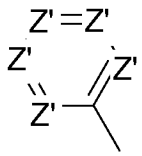
Z' unabhängig voneinander $CR^{12'}$ oder N, wobei 0 bis 5 der Symbole Z' N bedeuten können, bevorzugt 0 bis 4, besonders bevorzugt 0 bis 3, ganz besonders bevorzugt 0 bis 2, insbesondere ganz besonders bevorzugt 0 oder 1, und Z' in dem Fall, dass 1 Symbol Z' N bedeutet, in o-, m- oder p-Position, bevorzugt in o- oder p-Position, zur Verknüpfungsstelle der Gruppierung mit der Gruppierung



angeordnet sein kann;

$R^{12'}$ in den Gruppen Z' unabhängig voneinander H, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl-, Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste $R^{12'}$ bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom, bevorzugt N, enthalten kann, oder $R^{12'}$ bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung; bevorzugt H oder ein Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

weiterhin kann die Gruppe der Struktur



über den aromatischen Grundkörper oder über einen der Reste $R^{12'}$ mit Y^1 über eine Brücke verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{21}R^{22})_x$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{21}R^{22})$ durch NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

x 2 bis 10;
und

R^{18}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{30}, R^{31}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten.

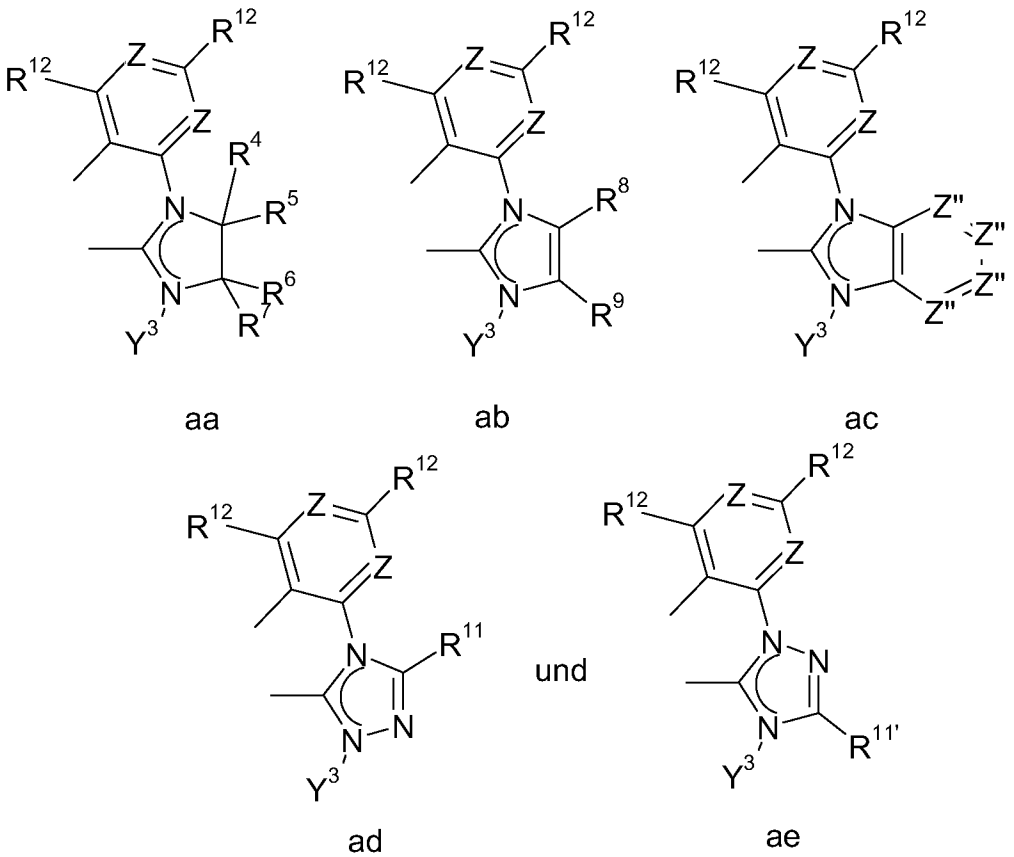
Weiterhin können Y^3 und Y^2 in jedem der n Carbenliganden der allgemeinen Formel II über eine Brücke miteinander verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{25}, PR^{26}, BR^{27}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{32}R^{33}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{28}R^{29})_y$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{28}R^{29})$ durch NR^{25}, PR^{26}, BR^{27}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{32}R^{33}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

y 2 bis 10;
und

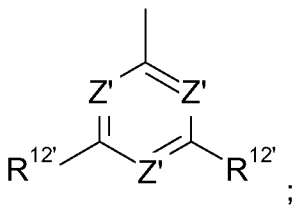
R^{25}, R^{26}, R^{27}, R^{28}, R^{29}, R^{32}, R^{33}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten.

In einer ganz besonders bevorzugten Ausführungsform betrifft die vorliegende Erfindung heteroleptische Carbenkomplexe der Formel I, worin der mindestens eine Carbenligand ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus



worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

Y^3 ein Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylrest
oder
eine Gruppe der folgenden Struktur



;

Z gleich oder verschieden CR^{12} oder N;

Z' gleich oder verschieden $CR^{12'}$ oder N;

Z'' gleich oder verschieden CR^{10} oder N;

R^{12}, $R^{12'}$ gleich oder verschieden jeweils unabhängig voneinander H, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste R^{12} bzw. $R^{12'}$

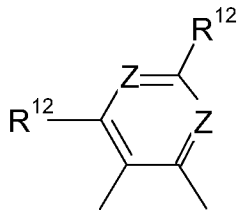
bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R^{12} bzw. $R^{12'}$ bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

R^4, R^5, R^6,
R^7, R^8, R^9, R^{11}

und $R^{11'}$ Wasserstoff, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkinyl oder Alkenyl oder ein Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

R^{10} in den Gruppen Z'' unabhängig voneinander H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkinyl oder Alkenyl oder jeweils 2 Reste R^{10} bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R^{10} bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

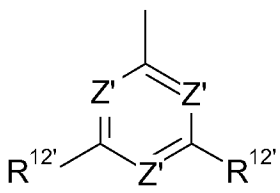
weiterhin kann die Gruppe der Struktur



über den aromatischen Grundkörper oder über einen der Reste R^{12} mit R^4 oder R^5 oder dem Kohlenstoffatom, mit dem R^4 und R^5 verknüpft sind, in der Gruppierung aa, R^8 oder dem Kohlenstoffatom, mit dem R^8 verknüpft ist, in der Gruppierung ab, einen der Reste R^{10} oder einem der Kohlenstoffatome, mit dem R^{10} verknüpft ist, in der Gruppierung ac und R^{11} oder dem Kohlenstoffatom, mit dem R^{11} verknüpft ist, in der Gruppierung ad über eine Brücke verknüpft sein;

und/oder

die Gruppe der Struktur



über den aromatischen Grundkörper oder über einen der Reste $R^{12'}$ mit R^6 oder R^7 oder dem Kohlenstoffatom, mit dem R^6 und R^7 verknüpft sind, in der Gruppierung aa, R^9 oder dem Kohlenstoffatom, mit dem R^9 verknüpft ist, in der Gruppierung ab, einen

der Reste R^{10} oder einem der Kohlenstoffatome, mit dem R^{10} verknüpft ist, in der Gruppierung ac und $R^{11'}$ oder dem Kohlenstoffatom, mit dem $R^{11'}$ verknüpft ist, in der Gruppierung ae über eine Brücke verknüpft sein;

wobei die jeweilige Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

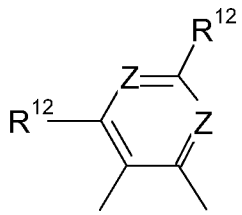
Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{21}R^{22})_x$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{21}R^{22})$ durch NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

x 2 bis 10;

und

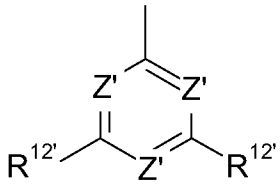
R^{18}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{30}, R^{31}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten;

wobei in den Fällen, worin die Gruppe der Struktur



über eine Brücke mit dem Kohlenstoffatom, mit dem R^4 und R^5 verknüpft sind (Gruppierung aa), dem Kohlenstoffatom, mit dem R^8 verknüpft ist (Gruppierung ab), einem der Kohlenstoffatome, mit dem R^{10} verknüpft ist (Gruppierung ac) oder dem Kohlenstoffatom, mit dem R^{11} verknüpft ist (Gruppierung ad), verknüpft ist, der jeweilige Rest R^4 oder R^5, R^8, einer der Reste R^{10} oder R^{11} durch eine Bindung zu der Brücke ersetzt ist;

und in den Fällen, worin die Gruppe der Struktur

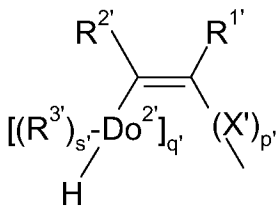


über eine Brücke mit dem Kohlenstoffatom, mit dem R^6 und R^7 verknüpft sind (Gruppierung aa), dem Kohlenstoffatom, mit dem R^9 verknüpft ist (Gruppierung ab), einem der Kohlenstoffatome, mit dem R^{10} verknüpft ist (Gruppierung ac) oder dem Kohlenstoffatom, mit dem $R^{11'}$ verknüpft ist (Gruppierung ad), verknüpft ist, der jeweilige Rest R^6 oder R^7, R^9, einer der Reste R^{10} oder $R^{11'}$ durch eine Bindung zu der Brücke ersetzt ist.

Besonders bevorzugt ist Y^3 in den Strukturen aa, ab, ac, ad und ae ein Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, wobei bevorzugte Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylreste vorstehend erwähnt sind.

Bei dem Carbenliganden der Formel II handelt es sich in einer bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung somit um einen „unsymmetrischen" Carbenliganden, worin Y^3 Wasserstoff, ein Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, bevorzugt ein Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylrest ist, wobei bevorzugte Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylreste vorstehend erwähnt sind.

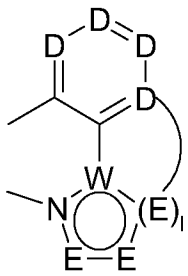
Falls in den erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexen weitere Carbenliganden vorliegen (wenn n in den Carbenkomplexen der Formel I ≥ 2 ist), können diese mit dem ersten Carbenliganden indentisch sein oder von dem ersten Carbenliganden verschieden sein. Bevorzugt sind die Carbenliganden in dem Fall von $n \geq 2$ identisch. In dem Fall, dass die Carbenliganden verschieden sind, kann z.B. ein Carbenligand „unsymmetrisch" sein, d.h. Y^3 bedeutet: Wasserstoff, ein Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, bevorzugt ein Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, und ein weiterer Carbenligand „symmetrisch" sein, d.h. Y^3 bedeutet:



wobei $Do^{2'}$, q', s', $R^{3'}$, $R^{1'}$, $R^{2'}$, X' und p' vorstehend definiert sind. Es ist auch möglich, dass der heteroleptische Carbenkomplex der Formel I mehrere verschiedene symmet-

rische Carbenliganden oder mehrere verschiedene unsymmetrische Carbenliganden aufweist.

Erfindungsgemäß enthalten die heteroleptischen Carbenkomplexe der allgemeinen Formel I der vorliegenden Anmeldung neben mindestens einem Carbenliganden der allgemeinen Formel II mindestens einen heterocyclischen Nicht-Carbenliganden (het) der allgemeinen Formel III:



(III)

worin die Symbole in dem Liganden het der allgemeinen Formel III die folgenden Bedeutungen aufweisen:

D unabhängig voneinander CR^{34} oder N; bevorzugt CR^{34};

W C, N, P; bevorzugt C oder N;

E unabhängig voneinander CR^{35}, N, NR^{36}, S, O, P oder PR^{37}; bevorzugt unabhängig voneinander CR^{35}, N, NR^{36}, S oder O;

l 1 oder 2;

R^{34}, R^{35}, R^{36}, R^{37} unabhängig voneinander H, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste R^{34}, R^{35}, R^{36} oder R^{37} bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R^{34}, R^{35}, R^{36} oder R^{37} bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

wobei die gestrichelte Linie eine optionale Verbrückung zwischen einer der Gruppen D und einer der Gruppen E bedeutet; wobei die Verbrückung die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{38}, PR^{39}, BR^{40}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{41}R^{42}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{43}R^{44})_v$, wobei eine oder mehrere nicht benachbar-

te Gruppen ($CR^{43}R^{44}$) durch NR^{38}, PR^{39}, BR^{40}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{41}R^{42}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

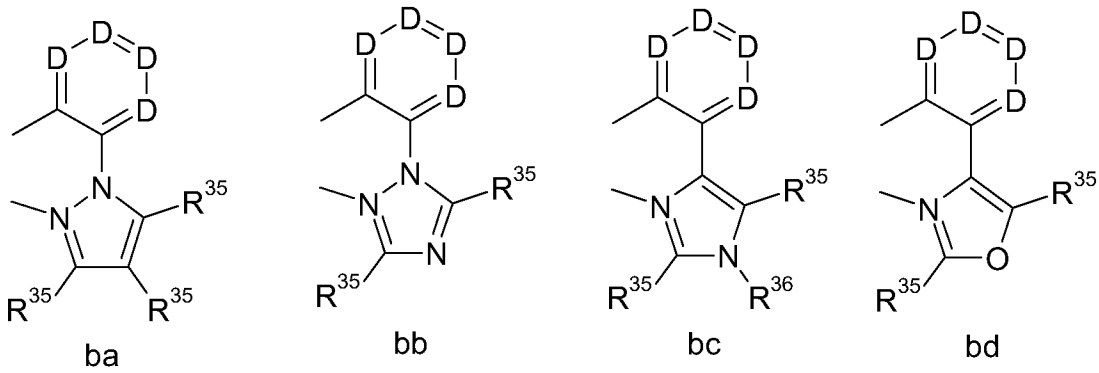
v 2 bis 10;

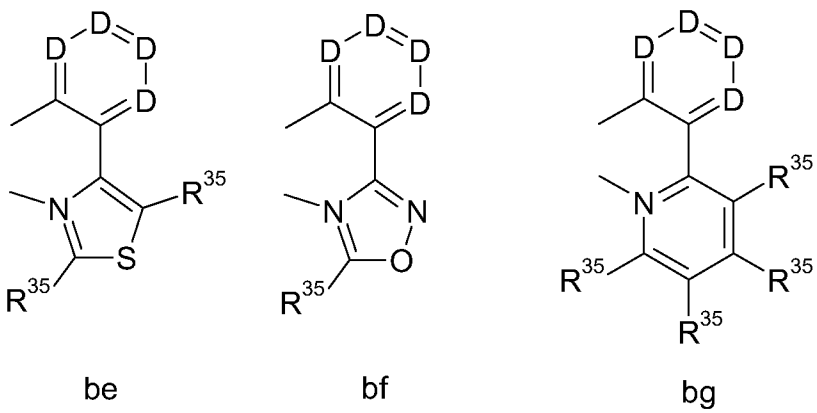
und

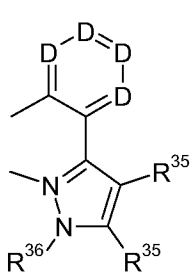
R^{38}, R^{39}, R^{40}, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten.

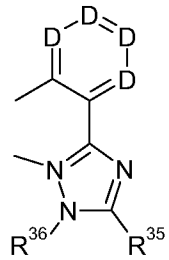
Ganz besonders bevorzugt sind Liganden der allgemeinen Formel III, die neben dem N-Atom 0, 1 oder 2 weitere Heteroatome, bevorzugt ausgewählt aus N, O und S, aufweisen.

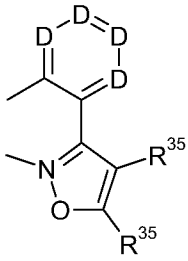
Insbesondere ganz besonders bevorzugt weisen die heterocyclischen Nicht-Carbenliganden der allgemeinen Formel III die folgenden Strukturen ba bis bu auf:

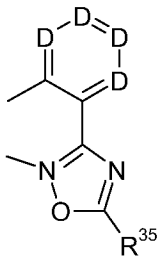


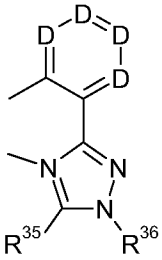


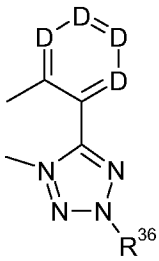

bh

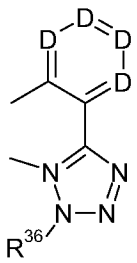

bi

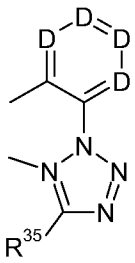

bj

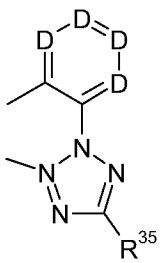

bk

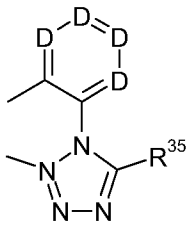

bl

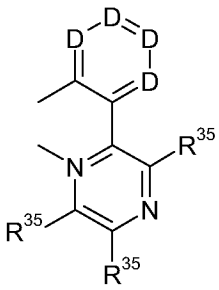

bm

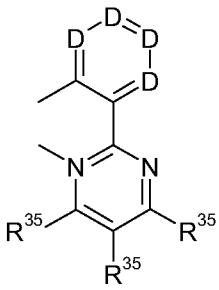

bn

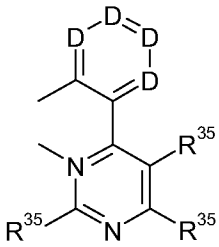

bo


bp

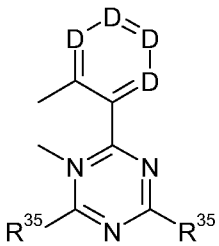

bq


br


bs


bt

und


bu

worin bedeuten:

D unabhängig voneinander CR^{34} oder N; bevorzugt bedeuten 0 bis 3 Gruppen D N, besonders bevorzugt 0 bis 2, ganz besonders bevorzugt 0, 1 oder 2, wobei die weiteren Gruppen D CR^{34} bedeuten; insbesondere ganz besonders bevorzugt bedeutet D in den Strukturen ba bis bu CR^{34};

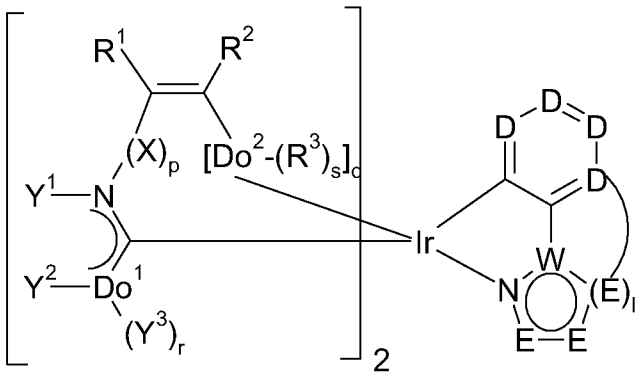
R^{34}, R^{35},

R^{36} unabhängig voneinander H, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste R^{34}, R^{35} oder R^{36} bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R^{34}, R^{35} oder R^{36} bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung; bevorzugt H, ein Alkyl- oder Arylrest oder ein Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung.

Das Metallatom M^1 ist in den erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexen der allgemeinen Formel I besonders bevorzugt ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Ir, Os, Rh und Pt, wobei Os(II), Rh(III), Ir(III) und Pt(II) bevorzugt sind. Besonders bevorzugt ist Ir(III).

In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform ist das Metallatom M^1 Fe(II), Fe(III), Ru(II), Cr(III), Mo(VI), W(0), Re(II), Mn(II), Ir(III), Co(II), Co(III), Rh(III), Os(II), Pt(IV)), n = 2 und m = 1. Ganz besonders bevorzugt sind heteroleptische Carbenkomplexe, worin M^1 Ir(III), n = 2 und m = 1 ist. Diese erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe zeichnen sich gegenüber heteroleptischen Carbenkomplexen, die die gleichen Liganden auweisen, worin jedoch n = 1 und m = 2 ist, durch eine wesentlich verbesserte Effizienz aus.

Die erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe weisen somit in einer ganz besonders bevorzugten Ausführungsform die Formel (Ii) auf:



(Ii)

wobei die Symbole in den Carbenkomplexen der allgemeinen Formel (Ii) die folgenden Bedeutungen aufweisen:

Do^1 Donoratom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus C, P, N, O, S und Si, bevorzugt P, N, O und S;

Do^2 Donoratom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus C, N, P, O und S;

r 2, wenn Do^1 C oder Si ist, 1, wenn Do^1 N oder P ist und 0, wenn Do^1 O oder S ist;

s 2, wenn Do^2 C ist, 1, wenn Do^2 N oder P ist und 0, wenn Do^2 O oder S ist;

X Spacer ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Silylen, Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{13}, PR^{14}, BR^{15}, O, S, SO, SO_2, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{16}R^{17})_w$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{16}R^{17})$ durch NR^{13}, PR^{14}, BR^{15}, O, S, SO, SO_2, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können;

w 2 bis 10;

R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl;

p 0 oder 1;

q 0 oder 1;

Y^1, Y^2 jeweils unabhängig voneinander Wasserstoff oder eine kohlenstoffhaltige Gruppe ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- und Alkenylgruppen;

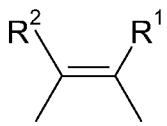
oder

Y^1 und Y^2 bilden gemeinsam eine Brücke zwischen dem Donoratom Do^1 und dem Stickstoffatom N die mindestens zwei Atome aufweist, wovon mindestens eines ein Kohlenstoffatom ist,

R^1, R^2 unabhängig voneinander Wasserstoff, Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylreste,

oder

R^1 und R^2 bilden gemeinsam eine Brücke mit insgesamt drei bis fünf Atomen, wovon 1 bis 5 Atome Heteroatome sein können und die restlichen Atome Kohlenstoffatome sind, so dass die Gruppe



einen fünf- bis siebengliedrigen Ring bildet, der gegebenenfalls - neben der bereits vorhandenen Doppelbindung - eine - oder im Falle eines sechs- oder siebengliedrigen

Rings - zwei weitere Doppelbindungen aufweisen kann und gegebenenfalls mit Alkyl- oder Arylgruppen und/oder Gruppen mit Donor- oder Akzeptorwirkung substituiert sein kann und gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, und der fünf- bis siebengliedrige Ring gegebenenfalls mit einem oder mehreren weiteren Ringen anelliert sein kann;

weiterhin können Y^1 und R^1 über eine Brücke miteinander verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{21}R^{22})_x$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{21}R^{22})$ durch NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

x 2 bis 10;

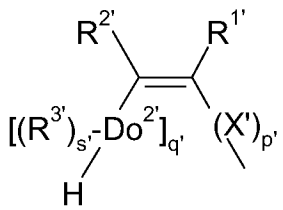
und

R^{18}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{30}, R^{31}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten;

R^3 Wasserstoff, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest;

Y^3 Wasserstoff, ein Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylrest,

oder



wobei $Do^{2'}$, q', s', $R^{3'}$, $R^{1'}$, $R^{2'}$, X' und p' unabhängig die gleichen Bedeutungen wie Do^2, q, s, R^3, R^1, R^2, X und p aufweisen;

weiterhin können Y^3 und Y^2 in jedem der n Carbenliganden über eine Brücke miteinander verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{25}, PR^{26}, BR^{27}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{32}R^{33}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{28}R^{29})_y$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{28}R^{29})$ durch NR^{25}, PR^{26}, BR^{27}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{32}R^{33}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

y 2 bis 10;

und

R^{25}, R^{26}, R^{27}, R^{28}, R^{29}, R^{32}, R^{33}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten;

D unabhängig voneinander CR^{34} oder N;

W C, N, P;

E unabhängig voneinander CR^{35}, N, NR^{36}, S, O, P oder PR^{37};

l 1 oder 2;

R^{34}, R^{35},
R^{36}, R^{37} unabhängig voneinander H, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste R^{34}, R^{35}, R^{36} oder R^{37} bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R^{34}, R^{35}, R^{36} oder R^{37} bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

wobei die Reste, Gruppen und Indizes R^1, R^2, R^3, Do^1, Do^2, Y^1, Y^2, Y^3, X, p, q und r in den Carbenliganden in den Verbindungen der allgemeinen Formel Ii gleich oder verschieden sein können;

wobei die gestrichelte Linie eine optionale Verbrückung zwischen einer der Gruppen D und einer der Gruppen E bedeutet; wobei die Verbrückung die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{38}, PR^{39}, BR^{40}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{41}R^{42}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{43}R^{44})_v$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{43}R^{44})$ durch NR^{38}, PR^{39}, BR^{40}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{41}R^{42}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

v 2 bis 10;

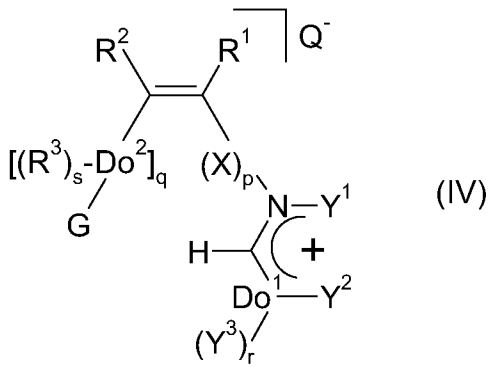
und
R^{38}, R^{39}, R^{40}, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten.

Bevorzugte Ausführungsformen und Definitionen der in der allgemeinen Formel Ii genannten Reste, Gruppen und Indizes entsprechen den bereits vorstehend für diese Reste, Gruppen und Indizes genannten Bedeutungen.

Die erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe der Formel I können grundsätzlich analog zu dem Fachmann bekannten Verfahren hergestellt werden, wobei zu berücksichtigen ist, dass die erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe der Formel I mindestens einen Carbenliganden der allgemeinen Formel II und mindestens einen heterocyclischen Nicht-Carbenliganden der allgemeinen Formel III tragen. Geeignete Verfahren zur Herstellung von Carbenkomplexen sind zum Beispiel in den Übersichtsartikeln W. A. Hermann et al., Advances in Organometallic Chemistry, 2001 Vol. 48, 1 bis 69, W. A. Hermann et al., Angew. Chem. 1997, 109, 2256 bis 2282 und G. Bertrand et al. Chem. Rev. 2000, 100, 39 bis 91 und der darin zitierten Literatur aufgeführt, sowie in WO 2005/113704, WO 2005/019373 und in der nicht vorveröffentlichten europäischen Anmeldung mit dem Aktenzeichen EP 06 101 109.4.

In einer Ausführungsform werden die erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe der Formel I aus den Carbenliganden entsprechenden Ligandvorläufern, den heterocyclischen Nicht-Carbenligandvorläufern und geeigneten, das gewünschte Metall enthaltenden, Metallkomplexen hergestellt.

Geeignete Ligandvorläufer der Carbenliganden sind dem Fachmann bekannt. Bevorzugt handelt es sich um kationische Vorstufen der Carbenliganden der allgemeinen Formel IV



(IV)

worin

Q^- ein monoanionisches Gegenion, bevorzugt Halogenid, Pseudohalogenid, BF_4^-, BPh_4^-, PF_6^-, AsF_6^- oder SbF_6^-;

und

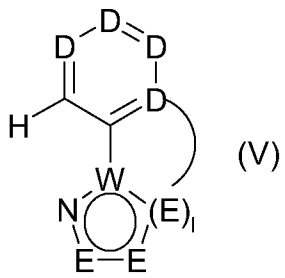
G wenn Do^2 = C oder q = 0 ist, H bedeutet, und
wenn Do^2 = N, S, O oder P ist, H oder ein freies Elektronenpaar des Heteroatoms bedeutet;

bedeuten, und

die weiteren Reste, Symbole und Indizes in dem Ligandvorläufer der allgemeinen Formel IV die vorstehend genannten Bedeutungen aufweisen.

Die Ligandvorläufer der allgemeinen Formel IV können gemäß dem Fachmann bekannten Verfahren hergestellt werden. Geeignete Verfahren sind z.B. in WO 2005/019373 und der darin zitierten Literatur, z.B. Organic Letters, 1999, *1*, 953-956; Angewandte Chemie, 2000, *112*, 1672-1674 genannt. Weitere geeignete Verfahren sind z.B. in T. Weskamp et al., J. Organometal. Chem. 2000, 600, 12-22; G. Xu et al., Org. Lett. 2005, 7, 4605-4608 ; V. Lavallo et al., Angew. Chem. Int. Ed. 2005, 44, 5705-5709 genannt. Einige der geeigneten Ligandvorläufer sind kommerziell erhältlich.

Geeignete heterocyclische Nicht-Carbenligandvorläufer sind dem Fachmann ebenfalls bekannt. Bevorzugt handelt es sich um Ligandvorläufer der allgemeinen Formel V



(V)

worin bedeuten:

D unabhängig voneinander CR^{34} oder N;

W C, N, P;

E unabhängig voneinander CR^{35}, N, NR^{36}, S, O, P oder PR^{37};

l 1 oder 2;

R^{34}, R^{35}, R^{36}, R^{37} unabhängig voneinander H, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste R^{34}, R^{35}, R^{36} oder R^{37} bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R^{34}, R^{35}, R^{36} oder R^{37} bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

wobei die gestrichelte Linie eine optionale Verbrückung zwischen einer der Gruppen D und einer der Gruppen E bedeutet; wobei die Verbrückung die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{38}, PR^{39}, BR^{40}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{41}R^{42}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{43}R^{44})_v$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{43}R^{44})$ durch NR^{38}, PR^{39}, BR^{40}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{41}R^{42}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

v 2 bis 10;

und

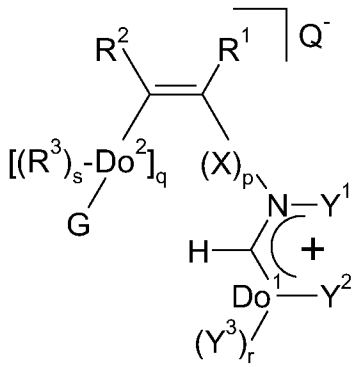
R^{38}, R^{39}, R^{40}, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten.

Bevorzugte Ausführungsformen der genannten Reste, Symbole und Indizes sind vorstehend genannt.

Die Ligandvorläufer der allgemeinen Formel V können gemäß dem Fachmann bekannten Verfahren hergestellt werden bzw. sind kommerziell erhältlich. Geeignete Herstellungsverfahren sind z.B. in B.M Choudary et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 9948; H. Zhang et al., *J. Org. Chem.* **2005**, *70*, 5164; S.V. Ley et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, *42*, 5400; J. Hassan et al., *Chem. Rev.* **2002**, *102*, 1359; *Metal-catalyzed Cross-coupling Reactions*, A. de Meijere, F. Diederich, Wiley-VCH, **2004** offenbart.

In einer bevorzugten Ausführungsform betrifft die vorliegende Erfindung ein Verfahren zur Herstellung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe der allgemeinen Formel I, wobei die Herstellung den folgenden Schritt umfasst:

Umsetzung von mindestens einem Ligandvorläufer der allgemeinen Formel (IV)

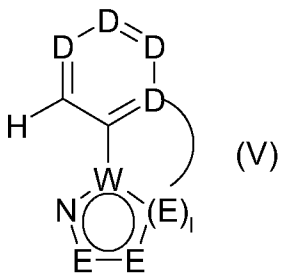


(IV)

worin die Symbole, Reste und Indizes die vorstehend genannten Bedeutungen aufweisen;

und

mindestens einem Ligandvorläufer der allgemeinen Formel V



(V)

worin die Symbole, Reste und Indizes die vorstehend genannten Bedeutungen aufweisen;

mit einem Metallkomplex enthaltend mindestens ein Metall $M^{1'}$, wobei $M^{1'}$ die folgenden Bedeutungen aufweist:

$M^{1'}$ Metallatom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Ir, Co, Rh, Ni, Pd, Pt, Fe, Ru, Os, Cr, Mo, W, Mn, Tc, Re, Cu und Au, bevorzugt Ir, Os, Ru, Rh, Pd, Co und Pt, besonders bevorzugt Ir, Pt, Rh und Os, in jeder für das entsprechende Metallatom möglichen Oxidationsstufe.

Die Herstellung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe ist grundsätzlich durch gleichzeitige Umsetzung von Carbenligandvorläufern der allgemeinen Formel IV und Ligandvorläufern der allgemeinen Formel V mit einem Metallkomplex

enthaltend mindestens ein Metall $M^{1'}$ möglich („Eintopfverfahren") oder bevorzugt durch sequentielle Umsetzung. Die sequentielle Umsetzung kann entweder durch Umsetzung des Metallkomplexes mit mindestens einem Carbenligandvorläufer der allgemeinen Formel IV in einem ersten Schritt erfolgen, wobei zunächst als Zwischenstufe ein Carbenkomplex, der mindestens einen Carbenliganden entweder der allgemeinen Formel II oder als nicht-cyclometallierte Form und mindestens eine weitere Koordinationsmöglichkeit (wobei die weitere Koordinationsmöglichkeit entweder durch eine freie Koordinationsstelle am Metall $M^{1'}$ oder durch die Verdrängung anderer Liganden vorliegt) für mindestens einen weiteren bidentaten heterocyclischen Nicht-Carbenliganden der Formel III aufweist, gebildet wird; oder durch Umsetzung des Metallkomplexes mit mindestens einem Ligandvorläufer der allgemeinen Formel V in einem ersten Schritt, wobei zunächst als Zwischenstufe ein Komplex, der mindestens einen heterocyclischen Nicht-Carbenliganden entweder der allgemeinen Formel III oder als nicht-cyclometallierte Form und mindestens eine weitere Koordinationsmöglichkeit (wobei die weitere Koordinationsmöglichkeit entweder durch eine freie Koordinationsstelle am Metall $M^{1'}$ oder durch die Verdrängung anderer Liganden vorliegt) für mindestens einen bidentaten Carbenliganden der Formel II aufweist, gebildet wird. In einem auf den ersten Schritt folgenden zweiten Schritt erfolgt eine Umsetzung des jeweiligen im ersten Schritt erhaltenen Komplexes mit mindestens einem Ligandvorläufer der allgemeinen Formel V (wenn im ersten Schritt mindestens ein Carbenligandvorläufer der allgemeinen Formel IV eingesetzt wurde) bzw. mit mindestens einem Carbenligandvorläufer der allgemeinen Formel IV (wenn im ersten Schritt mindestens ein Ligandvorläufer der allgemeinen Formel V eingesetzt wurde).

In dem besonders bevorzugten Fall, dass das Metall M^1 in den erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexen der Formel I Ir(III) mit einer Koordinationszahl von 6 ist, ergeben sich bei einer sequentiellen Umsetzung z.B. die folgenden besonders bevorzugten Wege, wobei ein Carbenkomplex der allgemeinen Formel Ii erhalten wird:

Weg ia:

(iaa) Umsetzung eines Metallkomplexes enthaltend mindestens ein Metall $M^{1'}$, worin das mindestens eine Metall $M^{1'}$ Ir ist, mit einer im Verhältnis zu Ir mindestens doppelt stöchiometrischen Menge eines Carbenligandvorläufers IV, wobei ein Di-Carbenkomplex gebildet wird, der Carbenliganden der allgemeinen Formel II und eine weitere Koordinationsstelle für einen weiteren bidentaten Liganden aufweist, und

(iab) anschließende Umsetzung des erhaltenen Di-Carbenkomplexes mit einer im Verhältnis zu Ir mindestens stöchiometrischen Menge eines Ligandvorläufers der

allgemeinen Formel V, wobei ein heteroleptischer Ir-Carbenkomplex der allgemeinen Formel Ii erhalten wird.

Weg ib:

(iba) Umsetzung eines Metallkomplexes enthaltend mindestens ein Metall $M^{1'}$, worin das mindestens eine Metall $M^{1'}$ Ir ist, mit einer im Verhältnis zu Ir mindestens stöchiometrischen Menge eines Ligandvorläufers der allgemeinen Formel V, wobei ein Komplex gebildet wird, der einen heterocyclischen Nicht-Carbenliganden der allgemeinen Formel III und zwei weitere Koordinationsstellen für zwei weitere bidentate Liganden aufweist, und

(ibb) anschließende Umsetzung des erhaltenen Komplexes mit einer im Verhältnis zu Ir mindestens doppelt stöchiometrischen Menge eines Carbenligandvorläufers der allgemeinen Formel IV, wobei ein heteroleptischer Ir-Carbenkomplex der allgemeinen Formel Ii erhalten wird.

In den in den Schritten (iaa) und (iba) gebildeten Zwischenstufen können die jeweiligen Carbenliganden bzw. Nicht-Carbenliganden entweder in cyclometallierter Form oder in nicht cyclometallierter Form vorliegen.

In einer besonders bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung erfolgt die Umsetzung zu einem Carbenkomplex der allgemeinen Formel Ii gemäß Weg ia.

Die vorstehend in Schritt (iaa) oder (iba) erhaltenen Komplexe können ggf. isoliert werden oder „in situ“, d.h. ohne Aufarbeitung, mit dem/den weiteren Ligandvorläufern umgesetzt werden.

Bei dem Metallkomplex enthaltend mindestens ein Metall $M^{1'}$ handelt es sich um einen Metallkomplex enthaltend mindestens ein Metall ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Ir, Co, Rh, Ni, Pd, Pt, Fe, Ru, Os, Cr, Mo, W, Mn, Tc, Re, Cu und Au, bevorzugt Ir, Os, Ru, Rh, Pd, Co und Pt, besonders bevorzugt Ir, Pt, Rh und Os, ganz besonders bevorzugt Ir, in jeder für das entsprechende Metallatom möglichen Oxidationsstufe, bevorzugt Ir(I) oder Ir(III). Geeignete Metallkomplexe sind dem Fachmann bekannt. Beispiele für geeignete Metallkomplexe sind $Pt(cod)Cl_2$, $Pt(cod)Me_2$, $Pt(acac)_2$, $Pt(PPh_3)_2Cl_2$, $PtCl_2$, $[Rh(cod)Cl]_2$, $Rh(acac)CO(PPh_3)$, $Rh(acac)(CO)_2$, $Rh(cod)_2BF_4$, $RhCl(PPh_3)_3$, $RhCl_3$ x n H_2O, $Rh(acac)_3$, $[Os(CO)_3I_2]_2$, $[Os_3(CO)_{12}]$, $OsH_4(PPH_3)_3$, Cp_2Os, Cp^*_2Os, H_2OsCl_6 x $6H_2O$, $OsCl_3$ x H_2O), sowie $[(\mu\text{-Cl})Ir(\eta^4\text{-}1,5\text{-cod})]_2$, $[(\mu\text{-Cl})Ir(\eta^2\text{-coe})_2]_2$, $Ir(acac)_3$, $IrCl_3$ x n H_2O, $(tht)_3IrCl_3$, $Ir(\eta^3\text{-Allyl})_3$, $Ir(\eta^3\text{-Methallyl})_3$, worin cod Cyclooctadien, coe Cycloocten, acac Acetylacetonat und tht Te-

trahydrothiophen bedeuten. Die Metallkomplexe können gemäß dem Fachmann bekannten Verfahren hergestellt werden bzw. sind kommerziell erhältlich.

Bei der Herstellung von Iridium(III)-Komplexen der allgemeinen Formel I (M^1 in Formel I ist Ir), die gemäß der vorliegenden Anmeldung besonders bevorzugt sind, können die vorstehend genannten Iridium(I)- oder (III)-Komplexe eingesetzt werden, insbesondere $[(\mu\text{-Cl})Ir(\eta^4\text{-1,5-cod})]_2$, $[(\mu\text{-Cl})Ir(\eta^2\text{-coe})_2]_2$, $Ir(acac)_3$, $IrCl_3$ x n H_2O, $(tht)_3IrCl_3$, $Ir(\eta^3\text{-Allyl})_3$, $Ir(\eta^3\text{-Methallyl})_3$, worin cod Cyclooctadien, coe Cycloocten, acac Acetylacetonat und tht Tetrahydrothiophen bedeuten.

Im Anschluss an die Umsetzung wird der erfindungsgemäße heteroleptische Carbenkomplex nach dem Fachmann bekannten Verfahren aufgearbeitet und ggf. gereinigt. Üblicherweise erfolgen die Aufarbeitung und Reinigung durch Extraktion, Säulenchromatographie und/oder Umkristallisation gemäß dem Fachmann bekannten Verfahren.

Die erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe eignen sich hervorragend als Emittersubstanzen, da sie eine Emission (Elektrolumineszenz) im sichtbaren Bereich des elektromagnetischen Spektrums aufweisen. Mit Hilfe der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Emittersubstanzen ist es möglich, Verbindungen bereit zu stellen, die Elektrolumineszenz im roten, grünen sowie im blauen Bereich des elektromagnetischen Spektrums mit sehr guter Effizienz zeigen. Dabei ist die Quantenausbeute hoch und die Stabilität der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe im Device hoch.

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

Organische Licht-emittierende Dioden (OLEDs) sind grundsätzlich aus mehreren Schichten aufgebaut:

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

Es ist jedoch auch möglich, dass das OLED nicht alle der genannten Schichten aufweist, zum Beispiel ist ein 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 heteroleptischen Carbenkomplexe gemäß der vorliegenden Anmeldung können in verschiedenen Schichten eines OLEDs eingesetzt werden. Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ist daher die Verwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe in organischen Leuchtdioden (OLEDs), sowie ein OLED enthaltend mindestens einen erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplex. Die erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe werden bevorzugt in der Licht-emittierenden Schicht, besonders bevorzugt als Emittermoleküle, eingesetzt. Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ist daher eine Licht-emittierende Schicht enthaltend mindestens einen heteroleptischen Carbenkomplex, bevorzugt als Emittermolekül. Bevorzugte heteroleptische Carbenkomplexe sind vorstehend genannt.

Die erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe können in Substanz – ohne weitere Zusätze - in der Licht-emittierenden Schicht oder einer anderen Schicht des OLEDs, bevorzugt in der Licht-emittierenden Schicht, vorliegen. Es ist jedoch ebenfalls möglich und bevorzugt, dass neben den erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexen weitere Verbindungen in den Schichten enthaltend mindestens einen erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplex, bevorzugt in der Licht-emittierenden Schicht, vorliegen. Beispielsweise kann in der Licht-emittierenden Schicht ein fluoreszierender Farbstoff anwesend sein, um die Emissionsfarbe des als Emittermoleküls eingesetzten heteroleptischen Carbenkomplexes zu verändern. Des Weiteren kann – in einer bevorzugten Ausführungsform - ein Verdünnungsmaterial eingesetzt werden. Dieses Verdünnungsmaterial kann ein Polymer sein, zum Beispiel Poly(N-vinylcarbazol) oder Polysilan. Das Verdünnungsmaterial kann jedoch ebenfalls ein kleines Molekül sein, zum Beispiel 4,4'-N, N'-Dicarbazolbiphenyl (CDP=CBP) oder tertiäre aromatische Amine.

Die einzelnen der vorstehend genannten Schichten des OLEDs können wiederum aus 2 oder mehreren Schichten aufgebaut sein. Beispielsweise kann die Löchertransportierende 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, worin Elektronen durch die Elektrode injiziert werden, und einer Schicht, die aus der Elektroneninjektionsschicht Elektronen erhält und in die Licht-emittierende Schicht transportiert. Diese genannten Schichten werden jeweils nach Faktoren wie Energieniveau, Temperaturresistenz und Ladungsträgerbeweglichkeit, sowie Energiedifferenz der genannten Schichten mit den organischen Schichten oder den Metallelektroden ausgewählt. Der Fachmann ist in der Lage, den Aufbau der OLEDs so zu wählen, dass er optimal an die erfindungsgemäß, bevorzugt als Emittersubstanzen, verwendeten heteroleptischen Carbenkomplexe angepasst ist.

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 elektronentransportierenden Schicht sollte mit der Arbeitsfunktion der Kathode angeglichen sein.

Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Anmeldung ist ein 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.

Die Anode (1) ist eine Elektrode, die positive Ladungsträger bereitstellt. Sie kann zum Beispiel aus Materialien aufgebaut sein, die ein Metall, eine Mischung verschiedener 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 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.

Geeignete Lochtransportmaterialien für die Schicht (2) des 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 als auch Polymere können als Lochtransportmaterial eingesetzt werden. Üblicherweise eingesetzte Löcher transportierende Moleküle sind ausgewählt aus der Gruppe bestehend 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-Biphenylyl)-5-(4-t-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazol (PBD) und 3-(4-Biphenylyl)-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 Tetrafluorotetracyano-chinodimethan (F4-TCNQ) dotiert werden. Die Elektronentransportmaterialien können zum Beispiel mit Alkalimetallen dotiert werden, beispielsweise Alq_3 mit Lithium. Die elektronische Dotierung ist dem Fachmann bekannt und zum Beipsiel 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.

Das 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.

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

- eine Loch-Injektionsschicht zwischen der Anode (1) und der Löcher-transportierenden Schicht (2);
- eine Blockschicht für Elektronen und/oder Excitonen zwischen der Löcher-transportierenden 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);
- eine Elektronen-Injektionsschicht zwischen der Elektronen-transportierenden Schicht (4) und der Kathode (5).

Wie bereits vorstehend erwähnt, ist es jedoch auch möglich, dass das OLED nicht alle der genannten Schichten (1) bis (5) aufweist, zum Beispiel ist ein 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.

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 und z.B. in WO2005/113704 offenbart.

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

Die Herstellung des erfindungsgemäßen OLEDs kann nach dem Fachmann bekannten Methoden erfolgen. Im Allgemeinen wird das OLED durch aufeinander folgende Dampfabscheidung (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 Verdampfung, Chemical Vapor Deposition und andere. In einem alternativen Verfahren können die organischen Schichten aus Lösungen oder Dispersionen in geeigneten Lösungsmitteln beschichtet werden, wobei dem Fachmann bekannte Beschichtungstechniken angewendet werden. Zusammensetzungen, die neben dem mindestens einen erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplex ein polymeres Material in einer der Schichten des OLEDs, bevorzugt in der Licht-emittierenden Schicht, aufweisen, werden im Allgemeinen mittels lösungsverarbeitenden Verfahren als Schicht aufgebracht.

Im Allgemeinen haben die verschiedenen Schichten folgende Dicken: Anode (2) 500 bis 5000 Å, bevorzugt 1000 bis 2000 Å; Löcher-transportierende Schicht (3) 50 bis 1000 Å, bevorzugt 200 bis 800 Å, Licht-emittierende Schicht (4) 10 bis 1000 Å, bevorzugt 100 bis 800 Å, Elektronen transportierende Schicht (5) 50 bis 1000 Å, bevorzugt 200 bis 800 Å, Kathode (7) 200 bis 10.000 Å, bevorzugt 300 bis 5000 Å. Die Lage der Rekombinationszone von Löchern und Elektronen in dem erfindungsgemäßen OLED und somit das Emissionsspektrum des OLED können durch die relative Dicke jeder Schicht beeinflusst werden. Das bedeutet, die Dicke der Elektronentransportschicht sollte bevorzugt so gewählt werden, dass die Elektronen/Löcher Rekombinationszone in der Licht-emittierenden Schicht liegt. Das Verhältnis der Schichtdicken der einzelnen Schichten in dem OLED ist von den eingesetzten Materialien abhängig. Die Schichtdicken von gegebenenfalls eingesetzten zusätzlichen Schichten sind dem Fachmann bekannt.

Durch Einsatz der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe in mindestens einer Schicht des erfindungsgemäßen OLEDs, 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 vorhanden sein, um die Energielevel der verschiedenen Schichten einzustellen und um Elektrolumineszenz zu erleichtern.

Die erfindungsgemäßen OLEDs können in allen Vorrichtungen eingesetzt werden, worin Elektrolumineszenz nützlich ist. Geeignete Vorrichtungen sind bevorzugt ausgewählt 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, Digitalkameras, Fahrzeugen sowie Zielanzeigen an Bussen und Bahnen.

Weiterhin können die erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe in OLEDs mit inverser Struktur eingesetzt werden. Bevorzugt werden die erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe in diesen inversen OLEDs wiederum in der Lichtemittierenden Schicht eingesetzt. Der Aufbau von inversen OLEDs und die üblicherweise darin eingesetzten Materialien sind dem Fachmann bekannt.

Die vorstehend beschriebenen erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe können neben dem Einsatz in OLEDs als Färbemittel eingesetzt werden, die bei Einstrahlung von Licht im sichtbaren Bereich des elektromagnetischen Spektrums emittieren (Photolumineszenz).

Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Anmeldung ist daher die Verwendung der vorstehend beschriebenen erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe zur Massenfärbung polymerer Materialien.

Geeignete polymere Materialien sind Polyvinylchlorid, Celluloseacetat, Polycarbonate, Polyamide, Polyurethane, Polyimide, Polybenzimidazole, Melaminharze, Silikone, Polyester, Polyether, Polystyrol, Polymethylmethacrylat, Polyethylen, Polypropylen, Polyvinylacetat, Polyacrylnitril, Polybutadien, Polychlorbutadien, Polyisopren bzw. die Copolymere der aufgeführten Monomere.

Des Weiteren können die vorstehend beschriebenen erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe in den folgenden Anwendungen eingesetzt werden:

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als oder in Küpenfarbstoffe(n), zum Beispiel zur Färbung von Naturstoffen, Beispiele sind Papier, Holz, Stroh, Leder, Felle oder natürliche Fasermaterialien wie Baumwolle, Wolle, Seide, Jute, Sisal, Hanf, Flachs oder Tierhaare (zum Beispiel Rosshaar) und

deren Umwandlungsprodukte wie zum Beispiel die Viskosefaser, Nitratseide oder Kupferrayon (Reyon)

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Farbmittel, zum Beispiel zur Färbung von Farben, Lacken und anderen Anstrichstoffen, Papierfarben, Druckfarben, Tinten und andere Farben für Mal- und Schreib-Zwecke.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Pigmentfarbstoffe, zum Beispiel zur Färbung von Farben, Lacken und anderen Anstrichsstoffen, Papierfarben, Druckfarben, Tinten und andere Farben für Mal- und Schreib-Zwecke.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Pigmente in der Elektrophotographie: zum Beispiel für Trockenkopiersysteme (Xerox-Verfahren) und Laserdrucker.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe für Sicherheitsmarkierungs-Zwecke, wobei die große chemische und photochemische Beständigkeit und gegebenenfalls auch die Lumineszenz der Substanzen von Bedeutung ist. Bevorzugt ist dies für Schecks, Scheckkarten, Geldscheine Coupons, Dokumente, Ausweispapiere und dergleichen, bei denen ein besonderer, unverkennbarer Farbeindruck erzielt werden soll.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Zusatz zu anderen Farben, bei denen eine bestimmte Farbnuance erzielt werden soll, bevorzugt sind besonders leuchtende Farbtöne.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe zum Markieren von Gegenständen zum maschinellen Erkennen dieser Gegenstände über die Lumineszenz, bevorzugt ist die maschinelle Erkennung von Gegenständen zum Sortieren, zum Beispiel auch für das Recycling von Kunststoffen.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Lumineszenzfarbstoffe für maschinenlesbare Markierungen, bevorzugt sind alphanumerische Aufdrucke oder Barcodes.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe zur Frequenzumsetzung von Licht, zum Beispiel um aus kurzwelligem Licht längerwelliges, sichtbares Licht zu machen.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe in Anzeigeelementen für vielerlei Anzeige-, Hinweis- und Markierungszwecke, zum Beispiel in passiven Anzeigeelementen, Hinweis- und Verkehrszeichen, wie Ampeln.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe in Tintenstrahldruckern, bevorzugt in homogener Lösung als lumineszierende Tinte.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Ausgangsmaterial für supraleitende organische Materialien.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe für Feststoff-Lumineszenz-Markierungen.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe für dekorative Zwecke.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe zu Tracer-Zwecken, zum Beispiel in der Biochemie, Medizin, Technik und Naturwissenschaft. Hierbei können die Farbstoffe kovalent mit Substraten verknüpft sein oder über Nebenvalenzen wie Wasserstoffbrückenbindungen oder hydrophobe Wechselwirkungen (Adsorption).

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Lumineszenzfarbstoffe in hochempfindlichen Nachweisverfahren (siehe C. Aubert, J. Fünfschilling, I. Zschocke-Gränacher und H. Langhals, Z. Analyt. Chem. 320 (1985) 361).

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Lumineszenzfarbstoffe in Szintillatoren.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Farbstoffe oder Lumineszenzfarbstoffe in optischen Lichtsammelsystemen.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Farbstoffe oder Lumineszenzfarbstoffe in Lumineszenz-Solarkollektoren (siehe Langhals, Nachr. Chem. Tech. Lab. 28 (1980) 716).

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Farbstoffe oder Lumineszenzfarbstoffe in Lumineszenz-aktivierten Displays (siehe W. Greubel und G. Baur, Elektronik 26 (1977) 6).

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Farbstoffe oder Lumineszenzfarbstoffe in Kaltlichtquellen zur lichtinduzierten Polymerisation zur Darstellung von Kunststoffen.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Farbstoffe oder Lumineszenzfarbstoffe zur Materialprüfung, zum Beispiel bei der Herstellung von Halbleiterschaltungen.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Farbstoffe oder Lumineszenzfarbstoffe zur Untersuchung von Mikrostrukturen von integrierten Halbleiterbauteilen.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Farbstoffe oder Lumineszenzfarbstoffe in Photoleitern.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Farbstoffe oder Lumineszenzfarbstoffe in fotografischen Verfahren.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Farbstoffe oder Lumineszenzfarbstoffe in Anzeige-, Beleuchtungs- oder Bildwandlersystemen, bei denen die Anregung durch Elektronen, Ionen oder UV-Strahlung erfolgt, zum Beispiel in Lumineszenzanzeigen, Braunschen Röhren oder in Leuchtstoffröhren.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Farbstoffe oder Lumineszenzfarbstoffe als Teil einer integrierten Halbleiterschaltung, die Farbstoffe als solche oder in Verbindung mit anderen Halbleitern zum Beispiel in Form einer Epitaxie.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Farbstoffe oder Lumineszenzfarbstoffe in Chemilumineszenzsystemen, zum Beispiel in Chemilumineszenz-Leuchtstäben, in Lumineszenzimmunessays oder anderen Lumineszenznachweisverfahren.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Farbstoffe oder Lumineszenzfarbstoffe als Signalfarben, bevorzugt zum optischen Hervorheben von Schriftzügen und Zeichnungen oder anderen graphischen Produkten, zum Kennzeichnen von Schildern und anderen Gegenständen, bei denen ein besonderer optischer Farbeindruck erreicht werden soll.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Farbstoffe oder Lumineszenzfarbstoffe in Farbstoff-Lasern, bevorzugt als Lumineszenzfarbstoffe zur Erzeugung von Laserstrahlen.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als aktive Substanzen für eine nichtlineare Optik, zum Beispiel für die Frequenzverdopplung und die Frequenzverdreifachung von Laserlicht.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Rheologieverbesserer.

- Anwendung der erfindungsgemäßen heteroleptischen Carbenkomplexe als Farbstoffe in photovoltaischen Anordnungen zur Umwandlung elektromagnetischer Strahlung in elektrische Energie.

Patentansprüche

1. Heteroleptische Carbenkomplexe der allgemeinen Formel (I)

$$M^1[carben]_n[het]_m \quad (I)$$

enthaltend sowohl Carbenliganden als auch heterocyclische Nicht-Carbenliganden,

worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

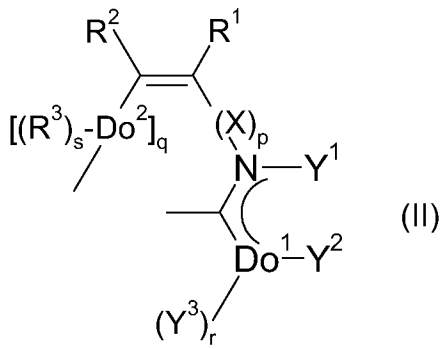
M^1 Metallatom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Ir, Co, Rh, Ni, Pd, Pt, Fe, Ru, Os, Cr, Mo, W, Mn, Tc, Re, Cu und Au, bevorzugt Ir, Os, Ru, Rh, Pd, Co und Pt, besonders bevorzugt Ir, Pt, Rh und Os, in jeder für das entsprechende Metallatom möglichen Oxidationsstufe;

n Zahl der Carbenliganden, wobei n in dem Fall, dass die Summe (n + m) = 2 ist, 1 bedeutet, und in dem Fall, dass die Summe (n + m) ≥ 3 ist, mindestens 2 bedeutet, wobei die Carbenliganden in dem Fall, wenn n mindestens 2 bedeutet, gleich oder verschieden sein können;

m Zahl der heterocyclischen Nicht-Carbenliganden, wobei m ≥ 1 ist, wobei die heterocyclischen Nicht-Carbenliganden in dem Fall, wenn m > 1 ist, gleich oder verschieden sein können;

wobei n und m von der Oxidationsstufe und Koordinationszahl des eingesetzten Metallatoms und von der Ladung der Liganden carben und het abhängig sind;

carben Carbenligand der allgemeinen Formel (II)



(II)

wobei die Symbole in dem Carbenliganden der allgemeinen Formel II die folgenden Bedeutungen aufweisen:

Do^1 Donoratom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus C, P, N, O, S und Si, bevorzugt P, N, O und S;

Do^2 Donoratom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus C, N, P, O und S;

r 2, wenn Do^1 C oder Si ist, 1, wenn Do^1 N oder P ist und 0, wenn Do^1 O oder S ist;

s 2, wenn Do^2 C ist, 1, wenn Do^2 N oder P ist und 0, wenn Do^2 O oder S ist;

X Spacer ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Silylen, Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{13}, PR^{14}, BR^{15}, O, S, SO, SO_2, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{16}R^{17})_w$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{16}R^{17})$ durch NR^{13}, PR^{14}, BR^{15}, O, S, SO, SO_2, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können;

w 2 bis 10;

R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl;

p 0 oder 1;

q 0 oder 1;

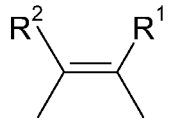
Y^1, Y^2 jeweils unabhängig voneinander Wasserstoff oder eine kohlenstoffhaltige Gruppe ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- und Alkenylgruppen;
oder

Y^1 und Y^2 bilden gemeinsam eine Brücke zwischen dem Donoratom Do^1 und dem Stickstoffatom N die mindestens zwei Atome aufweist, wovon mindestens eines ein Kohlenstoffatom ist,

R^1, R^2 unabhängig voneinander Wasserstoff, Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylreste,

oder

R^1 und R^2 bilden gemeinsam eine Brücke mit insgesamt drei bis fünf Atomen, wovon 1 bis 5 Atome Heteroatome sein können und die restlichen Atome Kohlenstoffatome sind, so dass die Gruppe



einen fünf- bis siebengliedrigen Ring bildet, der gegebenenfalls - neben der bereits vorhandenen Doppelbindung - eine - oder im Falle eines sechs- oder siebengliedrigen Rings - zwei weitere Doppelbindungen aufweisen kann und gegebenenfalls mit Alkyl- oder Arylgruppen und/oder Gruppen mit Donor- oder Akzeptorwirkung substituiert sein kann und gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, und der fünf- bis siebengliedrige Ring gegebenenfalls mit einem oder mehreren weiteren Ringen anelliert sein kann;

weiterhin können Y^1 und R^1 über eine Brücke miteinander verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{21}R^{22})_x$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{21}R^{22})$ durch NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

x 2 bis 10;

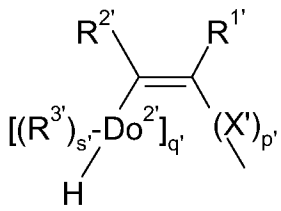
und

R^{18}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{30}, R^{31}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten;

R^3 Wasserstoff, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest;

Y^3 Wasserstoff, ein Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylrest,

oder



wobei $Do^{2'}$, q', s', $R^{3'}$, $R^{1'}$, $R^{2'}$, X' und p' unabhängig die gleichen Bedeutungen wie Do^2, q, s, R^3, R^1, R^2, X und p aufweisen;

weiterhin können Y^3 und Y^2 in jedem der n Carbenliganden über eine Brücke miteinander verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

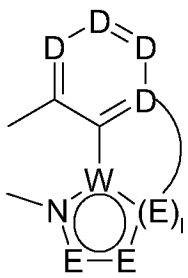
Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{25}, PR^{26}, BR^{27}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{32}R^{33}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{28}R^{29})_y$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{28}R^{29})$ durch NR^{25}, PR^{26}, BR^{27}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{32}R^{33}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

y 2 bis 10;

und
R^{25}, R^{26}, R^{27}, R^{28}, R^{29}, R^{32}, R^{33}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten;

und

het heterocyclischer Nicht-Carbenligand der allgemeinen Formel (III)



(III)

worin die Symbole in dem Liganden het der allgemeinen Formel III die folgenden Bedeutungen aufweisen:

D unabhängig voneinander CR^{34} oder N;

W C, N, P;

E unabhängig voneinander CR^{35}, N, NR^{36}, S, O, P oder PR^{37};

l 1 oder 2;

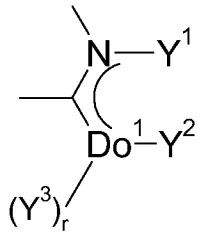
R^{34}, R^{35},
R^{36}, R^{37} unabhängig voneinander H, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste R^{34}, R^{35}, R^{36} oder R^{37} bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R^{34}, R^{35}, R^{36} oder R^{37} bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

wobei die gestrichelte Linie eine optionale Verbrückung zwischen einer der Gruppen D und einer der Gruppen E bedeutet; wobei die Verbrückung die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

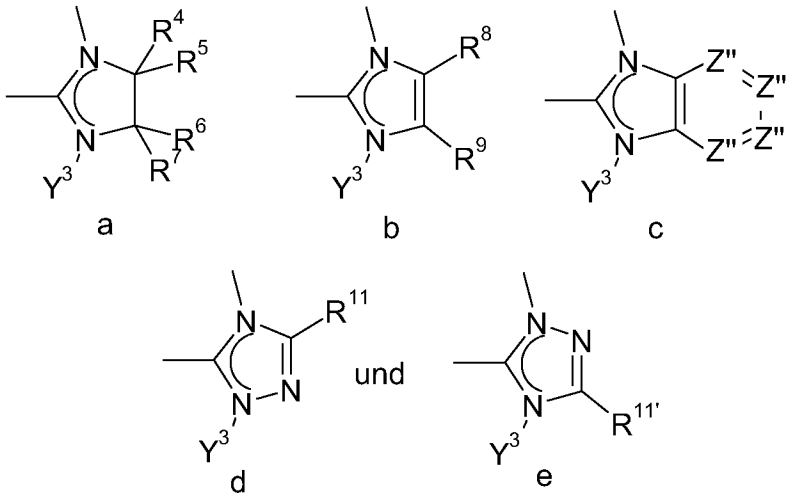
Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{38}, PR^{39}, BR^{40}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{41}R^{42}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{43}R^{44})_v$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{43}R^{44})$ durch NR^{38}, PR^{39}, BR^{40}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{41}R^{42}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

v 2 bis 10;
und
R^{38}, R^{39}, R^{40}, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten.

2. Carbenkomplexe nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass die Gruppierung



ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus



worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

Z'' unabhängig voneinander CR^{10} oder N;

R^4, R^5, R^6,

R^7, R^8, R^9, R^{11}

und $R^{11'}$ Wasserstoff, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkinyl oder Alkenyl oder ein Substituent mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

R^{10} Wasserstoff, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkinyl oder Alkenyl oder jeweils 2 Reste R^{10} bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R^{10} bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

weiterhin können R^4 oder R^5 in der Gruppierung a, R^8 in der Gruppierung b, einer der Reste R^{10} in der Gruppierung c und R^{11} in der Gruppierung d mit R^1 über eine Brücke verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

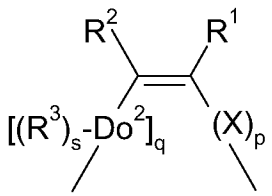
Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{21}R^{22})_x$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{21}R^{22})$ durch NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

x 2 bis 10;

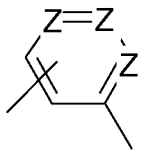
und

R^{18}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{30}, R^{31}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten.

3. Carbenkomplexe nach Anspruch 1 oder 2, dadurch gekennzeichnet, dass die Gruppierung



die Struktur

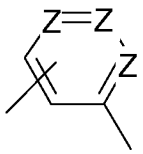


bedeutet,
worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

Z unabhängig voneinander CR^{12} oder N, wobei 0 bis 3 Symbole Z N bedeuten können;

R^{12} in den Gruppen Z unabhängig voneinander H, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl-, Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste R^{12} bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R^{12} bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

weiterhin kann die Gruppe der Struktur

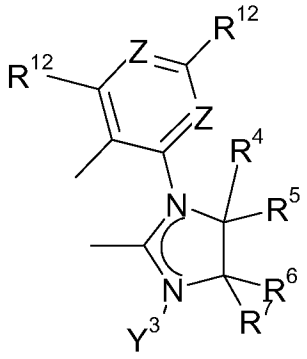


über den aromatischen Grundkörper oder über einen der Reste R^{12} mit Y^1 über eine Brücke verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

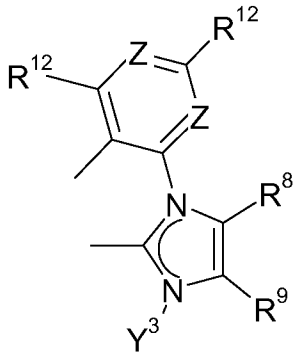
Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{21}R^{22})_x$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{21}R^{22})$ durch NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

x 2 bis 10;
und
R^{18}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{30}, R^{31}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten.

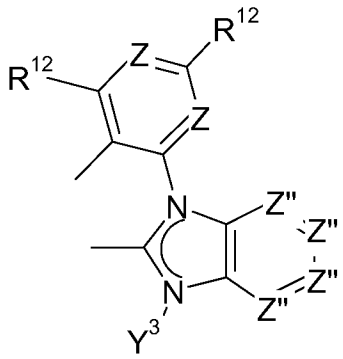
4. Carbenkomplexe nach einem der Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, dass der mindestens eine Carbenligand ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus



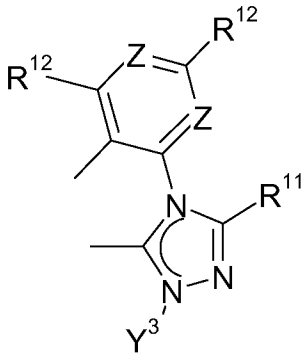
aa



ab

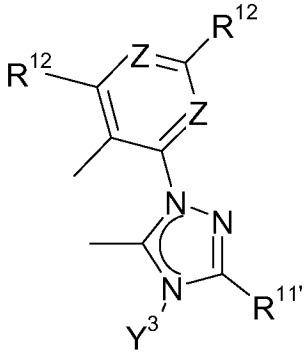


ac



ad

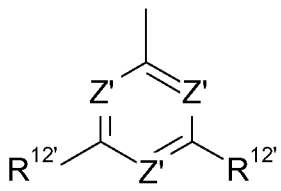
und



ae

worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

Y^3 ein Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylrest
oder
eine Gruppe der folgenden Struktur



;

Z gleich oder verschieden CR^{12} oder N;

Z' gleich oder verschieden $CR^{12'}$ oder N;

Z'' gleich oder verschieden CR^{10} oder N;

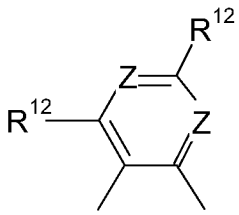
R^{12}, $R^{12'}$ gleich oder verschieden jeweils unabhängig voneinander H, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste R^{12}

bzw. $R^{12'}$ bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R^{12} bzw. $R^{12'}$ bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

R^4, R^5, R^6,
R^7, R^8, R^9, R^{11}
und $R^{11'}$ Wasserstoff, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkinyl oder Alkenyl oder ein Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

R^{10} in den Gruppen Z'' unabhängig voneinander H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkinyl oder Alkenyl oder jeweils 2 Reste R^{10} bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R^{10} bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

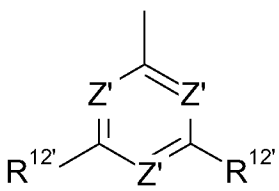
weiterhin kann die Gruppe der Struktur



über den aromatischen Grundkörper oder über einen der Reste R^{12} mit R^4 oder R^5 oder dem Kohlenstoffatom, mit dem R^4 und R^5 verknüpft sind, in der Gruppierung aa, R^8 oder dem Kohlenstoffatom, mit dem R^8 verknüpft ist, in der Gruppierung ab, einen der Reste R^{10} oder einem der Kohlenstoffatome, mit dem R^{10} verknüpft ist, in der Gruppierung ac und R^{11} oder dem Kohlenstoffatom, mit dem R^{11} verknüpft ist, in der Gruppierung ad über eine Brücke verknüpft sein;

und/oder

die Gruppe der Struktur



über den aromatischen Grundkörper oder über einen der Reste $R^{12'}$ mit R^6 oder R^7 oder dem Kohlenstoffatom, mit dem R^6 und R^7 verknüpft sind, in der Gruppierung aa, R^9 oder dem Kohlenstoffatom, mit dem R^9 verknüpft ist, in der Gruppierung ab, einen der Reste R^{10} oder einem der Kohlenstoffatome, mit dem R^{10} verknüpft ist, in der Gruppierung ac und $R^{11'}$ oder dem Kohlenstoffatom, mit dem $R^{11'}$ verknüpft ist, in der Gruppierung ad über eine Brücke verknüpft sein;

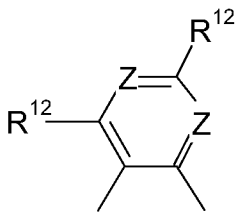
wobei die jeweilige Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{21}R^{22})_x$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{21}R^{22})$ durch NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

x 2 bis 10;

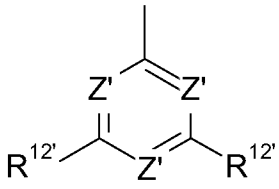
und
R^{18}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{30}, R^{31}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten;

wobei in den Fällen, worin die Gruppe der Struktur



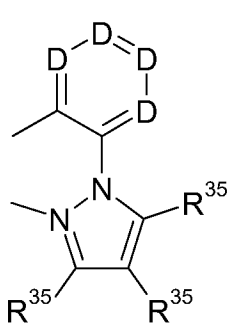
über eine Brücke mit dem Kohlenstoffatom, mit dem R^4 und R^5 verknüpft sind (Gruppierung aa), dem Kohlenstoffatom, mit dem R^8 verknüpft ist (Gruppierung ab), einem der Kohlenstoffatome, mit dem R^{10} verknüpft ist (Gruppierung ac) oder dem Kohlenstoffatom, mit dem R^{11} verknüpft ist (Gruppierung ad), verknüpft ist, der jeweilige Rest R^4 oder R^5, R^8, einer der Reste R^{10} oder R^{11} durch eine Bindung zu der Brücke ersetzt ist;

und in den Fällen, worin die Gruppe der Struktur

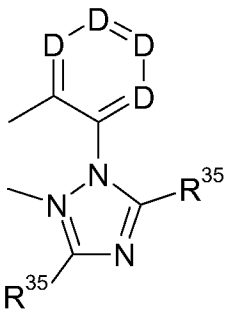


über eine Brücke mit dem Kohlenstoffatom, mit dem R^6 und R^7 verknüpft sind (Gruppierung aa), dem Kohlenstoffatom, mit dem R^9 verknüpft ist (Gruppierung ab), einem der Kohlenstoffatome, mit dem R^{10} verknüpft ist (Gruppierung ac) oder dem Kohlenstoffatom, mit dem $R^{11'}$ verknüpft ist (Gruppierung ad), verknüpft ist, der jeweilige Rest R^6 oder R^7, R^9, einer der Reste R^{10} oder $R^{11'}$ durch eine Bindung zu der Brücke ersetzt ist.

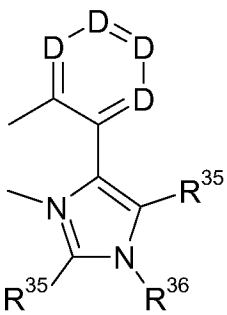
5. Carbenkomplexe nach einem der Ansprüche 1 bis 4, dadurch gekennzeichnet, dass der heterocyclische Nicht-Carbenligand het ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus



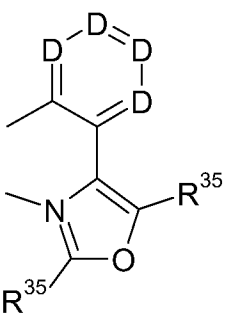
ba



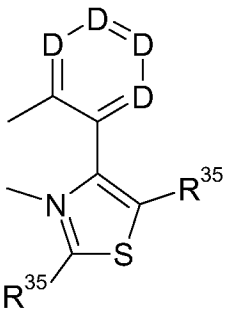
bb



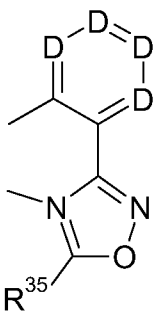
bc



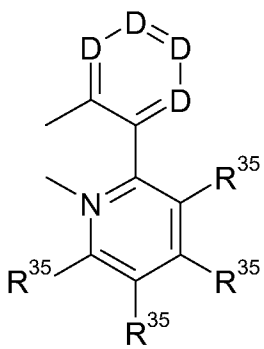
bd



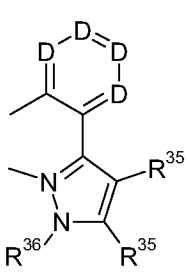
be

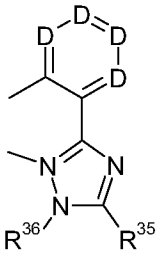


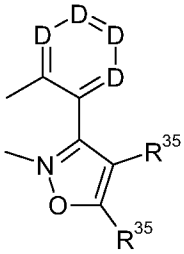
bf

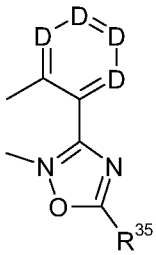


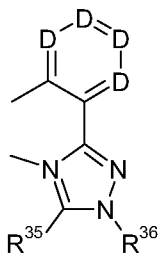
bg

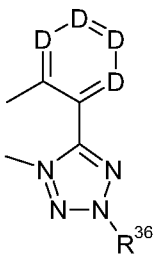

bh

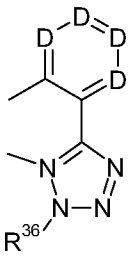

bi

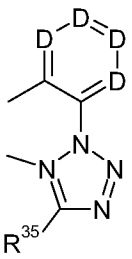

bj

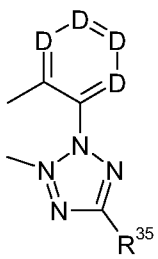

bk

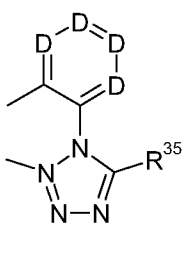

bl

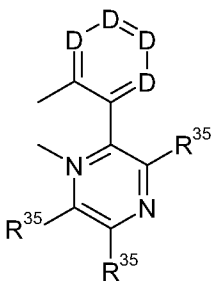

bm

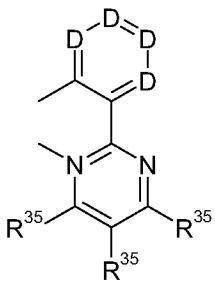

bn

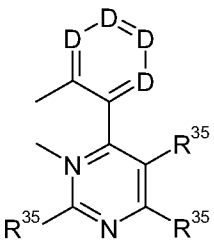

bo


bp

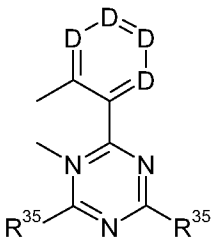

bq


br


bs


bt

und


bu

worin bedeuten:

D unabhängig voneinander CR^{34} oder N;

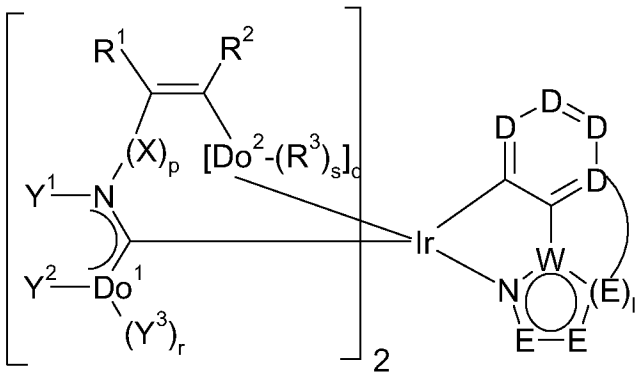
R^{34}, R^{35},

R^{36} unabhängig voneinander H, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste R^{34}, R^{35} oder R^{36} bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R^{34}, R^{35} oder R^{36} bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung.

6. Carbenkomplexe nach einem der Ansprüche 1 bis 5, dadurch gekennzeichnet, dass M^1 Fe(II), Fe(III), Ru(II), Cr(III), Mo(VI), W(0), Re(II), Mn(II), Ir(III), Co(II), Co(III), Rh(III), Os(II), Pt(IV)) ist und n = 2 und m = 1 ist.

7. Carbenkomplexe nach Anspruch 6, dadurch gekennzeichnet, dass M^1 Ir(III) und n = 2 und m = 1 ist.

8. Carbenkomplexe nach Anspruch 7, dadurch gekennzeichnet, dass die Carbenkomplexe die allgemeine Formel (Ii) aufweisen:



(Ii)

wobei die Symbole in den Carbenkomplexen der allgemeinen Formel (Ii) die folgenden Bedeutungen aufweisen:

Do^1 Donoratom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus C, P, N, O, S und Si, bevorzugt P, N, O und S;

Do^2 Donoratom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus C, N, P, O und S;

r 2, wenn Do^1 C oder Si ist, 1, wenn Do^1 N oder P ist und 0, wenn Do^1 O oder S ist;

s 2, wenn Do^2 C ist, 1, wenn Do^2 N oder P ist und 0, wenn Do^2 O oder S ist;

X Spacer ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Silylen, Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{13}, PR^{14}, BR^{15}, O, S, SO, SO_2, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{16}R^{17})_w$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{16}R^{17})$ durch NR^{13}, PR^{14}, BR^{15}, O, S, SO, SO_2, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können;

w 2 bis 10;

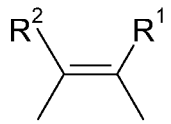
R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl;

p 0 oder 1;

q 0 oder 1;

Y^1, Y^2 jeweils unabhängig voneinander Wasserstoff oder eine kohlenstoffhaltige Gruppe ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- und Alkenylgruppen;
oder
Y^1 und Y^2 bilden gemeinsam eine Brücke zwischen dem Donoratom Do^1 und dem Stickstoffatom N die mindestens zwei Atome aufweist, wovon mindestens eines ein Kohlenstoffatom ist,

R^1, R^2 unabhängig voneinander Wasserstoff, Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylreste,
oder
R^1 und R^2 bilden gemeinsam eine Brücke mit insgesamt drei bis fünf Atomen, wovon 1 bis 5 Atome Heteroatome sein können und die restlichen Atome Kohlenstoffatome sind, so dass die Gruppe



einen fünf- bis siebengliedrigen Ring bildet, der gegebenenfalls - neben der bereits vorhandenen Doppelbindung - eine - oder im Falle eines sechs- oder siebengliedrigen Rings - zwei weitere Doppelbindungen aufweisen kann und gegebenenfalls mit Alkyl- oder Arylgruppen und/oder Gruppen mit Donor- oder Akzeptorwirkung substituiert sein kann und gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, und der fünf- bis siebengliedrige Ring gegebenenfalls mit einem oder mehreren weiteren Ringen anelliert sein kann;

weiterhin können Y^1 und R^1 über eine Brücke miteinander verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

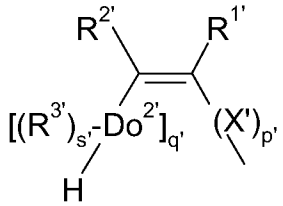
Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{21}R^{22})_x$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{21}R^{22})$ durch NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

x 2 bis 10;
und
R^{18}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{30}, R^{31}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten;

R^3 Wasserstoff, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest;

Y^3 Wasserstoff, ein Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylrest,

oder



wobei $Do^{2'}$, q', s', $R^{3'}$, $R^{1'}$, $R^{2'}$, X' und p' unabhängig die gleichen Bedeutungen wie Do^2, q, s, R^3, R^1, R^2, X und p aufweisen;

weiterhin können Y^3 und Y^2 in jedem der n Carbenliganden über eine Brücke miteinander verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{25}, PR^{26}, BR^{27}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{32}R^{33}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{28}R^{29})_y$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{28}R^{29})$ durch NR^{25}, PR^{26}, BR^{27}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{32}R^{33}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

y 2 bis 10;
und
R^{25}, R^{26}, R^{27}, R^{28}, R^{29}, R^{32}, R^{33}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten;

D unabhängig voneinander CR^{34} oder N;

W C, N, P;

E unabhängig voneinander CR^{35}, N, NR^{36}, S, O, P oder PR^{37};

l 1 oder 2;

R^{34}, R^{35}, R^{36}, R^{37} unabhängig voneinander H, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste R^{34}, R^{35}, R^{36} oder R^{37} bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R^{34}, R^{35}, R^{36} oder R^{37} bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

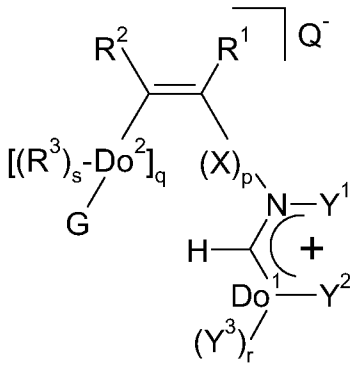
wobei die Reste, Gruppen und Indizes R^1, R^2, R^3, Do^1, Do^2, Y^1, Y^2, Y^3, X, p, q und r in den Carbenliganden in den Verbindungen der allgemeinen Formel Ii gleich oder verschieden sein können;
wobei die gestrichelte Linie eine optionale Verbrückung zwischen einer der Gruppen D und einer der Gruppen E bedeutet; wobei die Verbrückung die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{38}, PR^{39}, BR^{40}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{41}R^{42}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{43}R^{44})_v$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{43}R^{44})$ durch NR^{38}, PR^{39}, BR^{40}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{41}R^{42}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

v 2 bis 10;

und
R^{38}, R^{39}, R^{40}, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl
bedeuten.

9. Verfahren zur Herstellung von heteroleptischen Carbenkomplexen der allgemeinen Formel I nach einem der Ansprüche 1 bis 8, dadurch gekennzeichnet, dass die Herstellung den folgenden Schritt umfasst:
Umsetzung von mindestens einem Ligandvorläufer der allgemeinen Formel (IV)



(IV)

worin

Q^- ein monoanionisches Gegenion, bevorzugt Halogenid, Pseudohalogenid, BF_4^-, BPh_4^-, PF_6^-, AsF_6^- oder SbF_6^-;

und

G wenn Do^2 = C oder q = 0 ist, H bedeutet, und
wenn Do^2 = N, S, O oder P ist, H oder ein freies Elektronenpaar des Heteroatoms bedeutet;

bedeuten, und

die weiteren Symbole in dem Ligandvorläufer der allgemeinen Formel IV die folgenden Bedeutungen aufweisen:

Do^1 Donoratom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus C, P, N, O, S und Si, bevorzugt P, N, O und S;

Do^2 Donoratom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus C, N, P, O und S;

r 2, wenn Do^1 C oder Si ist, 1, wenn Do^1 N oder P ist und 0, wenn Do^1 O oder S ist;

s 2, wenn Do^2 C ist, 1, wenn Do^2 N oder P ist und 0, wenn Do^2 O oder S ist;

X Spacer ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Silylen, Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{13}, PR^{14}, BR^{15}, O, S, SO, SO_2, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{16}R^{17})_w$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{16}R^{17})$ durch NR^{13}, PR^{14}, BR^{15}, O, S, SO, SO_2, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können;

w 2 bis 10;

R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl;

p 0 oder 1;

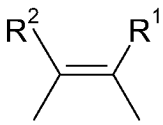
q 0 oder 1;

Y^1, Y^2 jeweils unabhängig voneinander Wasserstoff oder eine kohlenstoffhaltige Gruppe ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- und Alkenylgruppen;
oder

Y^1 und Y^2 bilden gemeinsam eine Brücke zwischen dem Donoratom Do^1 und dem Stickstoffatom N die mindestens zwei Atome aufweist, wovon mindestens eines ein Kohlenstoffatom ist,

R^1, R^2 unabhängig voneinander Wasserstoff, Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylreste,
oder

R^1 und R^2 bilden gemeinsam eine Brücke mit insgesamt drei bis fünf Atomen, wovon 1 bis 5 Atome Heteroatome sein können und die restlichen Atome Kohlenstoffatome sind, so dass die Gruppe



einen fünf- bis siebengliedrigen Ring bildet, der gegebenenfalls - neben der bereits vorhandenen Doppelbindung - eine - oder im Falle eines sechs- oder siebengliedrigen Rings - zwei weitere Doppelbindungen aufweisen kann und gegebenenfalls mit Alkyl- oder Arylgruppen und/oder Gruppen mit Donor- oder Akzeptorwirkung substituiert sein kann und gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann und der fünf- bis siebengliedrige Ring gegebenenfalls mit einem oder mehreren weiteren Ringen anelliert sein kann.

weiterhin können Y^1 und R^1 über eine Brücke miteinander verknüpft sein, wobei die Brücke die folgenden Bedeutungen aufweisen kann:

Alkylen, Arylen, Heteroarylen, Alkinylen, Alkenylen, NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO und $(CR^{21}R^{22})_x$, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte Gruppen $(CR^{21}R^{22})$ durch NR^{18}, PR^{19}, BR^{20}, O, S, SO, SO_2, $SiR^{30}R^{31}$, CO, CO-O, O-CO ersetzt sein können, wobei

x 2 bis 10;

und

R^{18}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{30}, R^{31}

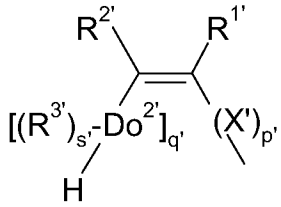
H, Alkyl, Aryl, Heteroaryl, Alkenyl, Alkinyl

bedeuten;

R^3 Wasserstoff, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest;

Y^3 Wasserstoff, ein Alkyl-, Alkinyl- oder Alkenylrest,

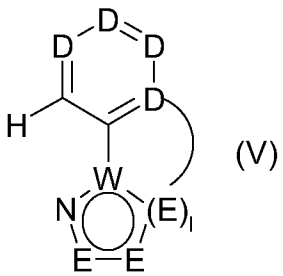
oder



wobei $Do^{2'}$, q', s', $R^{3'}$, $R^{1'}$, $R^{2'}$, X' und p' unabhängig die gleichen Bedeutungen wie Do^2, q, s, R^3, R^1, R^2, X und p aufweisen;

und

mindestens einem Ligandvorläufer der allgemeinen Formel V



(V)

worin bedeuten:

D unabhängig voneinander CR^{34} oder N;

W C, N, P;

E unabhängig voneinander CR^{35}, N, NR^{36}, S, O, P oder PR^{37};

l 1 oder 2;

R^{34}, R^{35}, R^{36}, R^{37} unabhängig voneinander H, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkinyl- oder Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste R^{34}, R^{35}, R^{36} oder R^{37} bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R^{34}, R^{35}, R^{36} oder R^{37} bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

mit einem Metallkomplex enthaltend mindestens ein Metall $M^{1'}$, wobei $M^{1'}$ die folgenden Bedeutungen aufweist:

$M^{1'}$ Metallatom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Ir, Co, Rh, Ni, Pd, Pt, Fe, Ru, Os, Cr, Mo, W, Mn, Tc, Re, Cu und Au, bevorzugt Ir, Os, Ru, Rh, Pd, Co und Pt, besonders bevorzugt Ir, Pt, Rh und Os, in jeder für das entsprechende Metallatom möglichen Oxidationsstufe.

10. Verfahren nach Anspruch 9, dadurch gekennzeichnet, dass als Metall $M^{1'}$ Ir, bevorzugt Ir(I) oder Ir(III) eingesetzt wird.

11. Verwendung von heteroleptischen Carbenkomplexen gemäß einem der Ansprüche 1 bis 8 oder hergestellt gemäß Anspruch 9 oder 10 in organischen Leuchtdioden.

12. Organische Leuchtdiode enthaltend mindestens einen heteroleptischen Carbenkomplex gemäß einem der Ansprüche 1 bis 8 oder hergestellt gemäß Anspruch 9 oder 10.

13. Licht-emittierende Schicht enthaltend mindestens einen heteroleptischen Carbenkomplex gemäß einem der Ansprüche 1 bis 8 oder hergestellt gemäß Anspruch 9 oder 10.

14. Organische Leuchtdiode enthaltend mindestens eine Licht-emittierende Schicht nach Anspruch 13.

15. 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 12 oder 14.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2007/053262

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
INV. 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

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

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2006/018292 A (BASF AG [DE]; BOLD MARKUS [DE]; EGEN MARTINA [DE]; WAGENBLAST GERHARD) 23 February 2006 (2006-02-23) page 15, line 1 - page 21, line 10; claims 1,14,21-23	1-15

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☒ 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
13 July 2007	10/08/2007

Name and mailing address of the ISA/	Authorized officer
European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL – 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl, Fax: (+31-70) 340-3016	Richter, Herbert

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No
PCT/EP2007/053262

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 2006018292 A	23-02-2006	DE 102004040005 A1	23-02-2006
		EP 1784471 A2	16-05-2007

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen
PCT/EP2007/053262

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES
INV. C07F15/00

Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPC) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPC

B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)
C07F

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

C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	WO 2006/018292 A (BASF AG [DE]; BOLD MARKUS [DE]; EGEN MARTINA [DE]; WAGENBLAST GERHARD) 23. Februar 2006 (2006-02-23) Seite 15, Zeile 1 - Seite 21, Zeile 10; Ansprüche 1,14,21-23	1-15

☐ Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen ☒ 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

"&" Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist

Datum des Abschlusses der internationalen Recherche	Absendedatum des internationalen Recherchenberichts
13. Juli 2007	10/08/2007

Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde	Bevollmächtigter Bediensteter
Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL – 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl, Fax: (+31-70) 340-3016	Richter, Herbert

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen
PCT/EP2007/053262

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 2006018292 A	23-02-2006	DE 102004040005 A1	23-02-2006
		EP 1784471 A2	16-05-2007