

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

(19) Weltorganisation für geistiges
Eigentum

Internationales Büro

(43) Internationales
Veröffentlichungsdatum
28. Juli 2016 (28.07.2016)



(10) Internationale Veröffentlichungsnummer
WO 2016/116523 A1

- (51) **Internationale Patentklassifikation:**
H01L 51/50 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
- (21) **Internationales Aktenzeichen:** PCT/EP2016/051165
- (22) **Internationales Anmeldedatum:**
20. Januar 2016 (20.01.2016)
- (25) **Einreichungssprache:** Deutsch
- (26) **Veröffentlichungssprache:** Deutsch
- (30) **Angaben zur Priorität:**
15151870.1 20. Januar 2015 (20.01.2015) EP
10 2015 107 904.6 20. Mai 2015 (20.05.2015) DE
- (71) **Anmelder:** CYNORA GMBH [DE/DE]; Werner-von-Siemens-Str. 2 - 6, 76646 Bruchsal (DE).
- (72) **Erfinder:** AMBROSEK, David; Raumerstr. 19, 10437 Berlin (DE). DANZ, Michael; Nagoldstraße 7g, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen (DE). FLÜGGE, Harald; Goethestraße 50, 76135 Karlsruhe (DE). FRIEDRICH, Jana; Hirschstraße 108, 76137 Karlsruhe (DE). GRAB, Tobias; Kaiserallee 17a, 76133 Karlsruhe (DE). JACOB, Andreas; Marienstraße 94, 76137 Karlsruhe (DE). SEIFERMANN, Stefan; Hardhopfweg 3, 77815 Bühl (DE). VOLZ, Daniel; Roonstr. 7, 76137 Karlsruhe (DE).
- (74) **Anwalt:** HOPPE, Georg J.; Beuckestr. 20, 14163 Berlin (DE).
- (81) **Bestimmungsstaaten** (soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare nationale Schutzrechtsart): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, 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, LR, LS, MW, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), europäisches (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

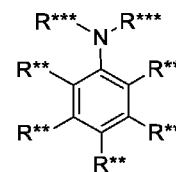
[Fortsetzung auf der nächsten Seite]

(54) **Title:** ORGANIC MOLECULES, IN PARTICULAR FOR USE IN OPTOELECTRONIC COMPONENTS

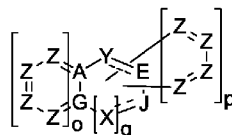
(54) **Bezeichnung :** ORGANISCHE MOLEKÜLE, INSBESONDERE ZUR VERWENDUNG IN OPTOELEKTRONISCHEN BAUELEMENTEN



Formel 1



Formel 1a



Formel 1b

(57) **Abstract:** The invention relates to an organic molecule and the use thereof in optoelectronic devices, having a structure of formula 1, wherein m is a whole number between 1 and 3, n is a whole number between 1 and 3, with $m + n =$ a whole number between 2 and 4, $AF1 \neq AF2$, and wherein the contained entity/ies AF2 has/have a structure according to formula 1a (formula 1a), and wherein the contained entity/ies AF1 has/have a structure according to formula 1b (formula 1b).

(57) **Zusammenfassung:** Die Erfindung betrifft ein organisches Molekül und dessen Verwendung in optoelektronischen Vorrichtungen, aufweisend eine Struktur der Formel 1: wobei gilt: m ist eine ganze Zahl von 1 bis 3; n ist eine ganze Zahl von 1 bis 3; mit $m + n =$ ganze Zahl von 2 bis 4; $AF1 \neq AF2$; und wobei die enthaltene(n) Einheit(en) AF2 eine Struktur nach Formel 1a aufweist/aufweisen (Formel 1a) und wobei die enthaltene(n) Einheit(en) AF1 eine Struktur nach Formel 1b aufweist/aufweisen (Formel 1b).



WO 2016/116523 A1



Veröffentlicht:

— mit internationalem Recherchenbericht (Artikel 21 Absatz 3)

— vor Ablauf der für Änderungen der Ansprüche geltenden Frist; Veröffentlichung wird wiederholt, falls Änderungen eingehen (Regel 48 Absatz 2 Buchstabe h)

Organische Moleküle, insbesondere zur Verwendung in optoelektronischen Bauelementen

Die Erfindung betrifft rein organische Moleküle und deren Verwendung in organischen lichtemittierenden Dioden (OLEDs) und in anderen optoelektronischen Bauelementen.

Stand der Technik

In den letzten Jahren hat sich die auf OLED (organische lichtemittierende Dioden) basierende Technik im Bereich Bildschirmtechnik etabliert, so dass nun die ersten hierauf aufbauenden kommerziellen Produkte erhältlich werden. Neben der Bildschirmtechnik eignen sich OLEDs auch für die Anwendung in flächiger Beleuchtungstechnik. Aus diesem Grund wird bezüglich der Entwicklung neuer Materialien intensive Forschung betrieben.

OLEDs sind in der Regel in Schichtenstrukturen realisiert, welche überwiegend aus organischen Materialien bestehen. Zum besseren Verständnis ist in Figur 1 ein vereinfachter Aufbau exemplarisch dargestellt. Herzstück solcher Bauteile ist die Emitterschicht, in der in der Regel emittierende Moleküle in einer Matrix eingebettet sind. In dieser Schicht treffen sich negative Ladungsträger (Elektronen) und positive Ladungsträger (Löcher), die zu sogenannten Exzitonen (= angeregte Zustände) rekombinieren. Die in den Exzitonen enthaltene Energie kann von den entsprechenden Emittlern in Form von Licht abgegeben werden, wobei man in diesem Fall von Elektrolumineszenz spricht. Einen Überblick über die Funktion von OLEDs findet sich beispielsweise bei H. Yersin, Top. Curr. Chem. 2004, 241, 1 und H. Yersin, „Highly Efficient OLEDs with Phosphorescent Materials“; Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2008.

Seit den ersten Berichten bezüglich OLEDs (Tang et al. Appl. Phys. Lett. 1987, 51, 913) ist diese Technik besonders auf dem Gebiet der Emittermaterialien immer weiterentwickelt worden. Während die ersten Materialien, die auf rein organischen Molekülen beruhen, aufgrund von Spinstatistik maximal 25 % der Exzitonen in Licht umwandeln konnten, konnte durch die Verwendung von phosphoreszierenden Verbindungen dieses grundsätzliche Problem umgangen werden, so dass zumindest theoretisch alle Exzitonen in Licht umgewandelt werden können. Bei diesen Materialien handelt es sich in der Regel um Übergangsmetall-Komplexverbindungen, in denen das Metall aus der dritten Periode der Übergangsmetalle gewählt wird. Hierbei werden vorwiegend sehr teure Edelmetalle wie Iridium, Platin oder auch Gold eingesetzt. (Siehe dazu auch H. Yersin, Top. Curr. Chem. 2004, 241, 1 und M. A. Baldo, D. F. O'Brien, M. E. Thompson, S. R. Forrest, Phys. Rev. B

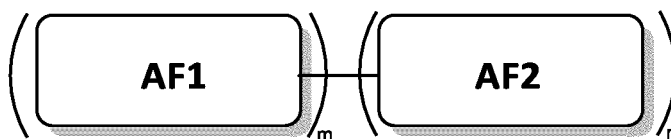
1999, 60, 14422). Neben den Kosten ist auch die Stabilität der Materialien zum Teil nachteilig für die Verwendung.

Eine neue Generation von OLEDs basiert auf der Ausnutzung von verzögerter Fluoreszenz (TADF: thermally activated delayed fluorescence oder auch singlet harvesting). Hierbei können beispielsweise Cu(I)-Komplexe verwendet werden, die aufgrund eines geringen Energieabstandes zwischen dem untersten Triplett-Zustand T_1 und dem darüberliegenden Singulett-Zustand S_1 ($\Delta E(S_1-T_1)$) Triplett-Exzitonen thermisch in einen Singulett-Zustand rückbesetzen können. Neben der Verwendung von Übergangsmetallkomplexen können auch rein organische Moleküle diesen Effekt ausnutzen.

Einige solcher TADF-Materialien wurden bereits in ersten optoelektronischen Bauelementen eingesetzt. Die bisherigen Lösungen weisen jedoch Nachteile und Probleme auf: Die TADF-Materialien weisen in den optoelektronischen Bauelementen oftmals keine ausreichende Langzeitstabilität, keine ausreichende thermische oder keine ausreichende chemische Stabilität gegenüber Wasser und Sauerstoff auf. Außerdem sind nicht alle wichtigen Emissionsfarben verfügbar. Weiterhin sind einige TADF-Materialien nicht verdampfbar und dadurch für den Einsatz in kommerziellen optoelektronischen Bauteilen nicht geeignet. Auch weisen einige TADF-Materialien keine passenden Energielagen zu den weiteren im optoelektronischen Bauteil verwendeten Materialien (z.B. HOMO-Energien von TADF-Emittern von größer gleich -5,9 eV) auf. Nicht mit allen TADF-Materialien lassen sich ausreichend hohe Effizienzen der optoelektronischen Bauelemente bei hohen Stromdichten bzw. hohe Leuchtdichten erreichen. Weiterhin sind die Synthesen einiger TADF-Materialien aufwendig.

Beschreibung

Die Erfindung betrifft in einem Aspekt die Bereitstellung von organischen Molekülen, die eine Struktur der Formel 1 aufweisen oder eine Struktur der Formel 1 haben:



Formel 1

wobei gilt:

m ist eine ganze Zahl von 1 bis 3;

n ist eine ganze Zahl von 1 bis 3;

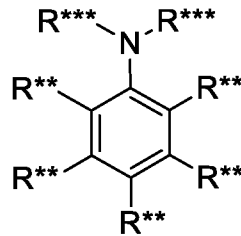
mit $m + n =$ ganze Zahl von 2 bis 4, insbesondere 2;

AF1 ist eine erste chemische Einheit, aufweisend ein konjugiertes System, insbesondere mindestens sechs in Konjugation stehende π-Elektronen (z. B. in Form mindestens eines aromatischen Systems);

AF2 ist eine zweite chemische Einheit, aufweisend ein konjugiertes System, insbesondere mindestens sechs in Konjugation stehende π-Elektronen (z. B. in Form mindestens eines aromatischen Systems);

wobei gilt AF1 ≠ AF2;

und wobei die enthaltene(n) Einheit(en) AF2 eine Struktur nach Formel 1a aufweist/aufweisen;



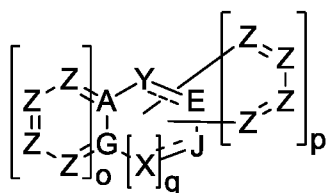
Formel 1a

wobei gilt:

R*** ist unabhängig voneinander ein Rest R*, kennzeichnet den Anknüpfungspunkt an eine chemische Einheit gemäß Formel 1b, kennzeichnet den Anknüpfungspunkt an eine weitere chemische Einheit gemäß Formel 1a, oder ist Naphtyl oder ein monozyklisches aromatisches System, wobei im Falle eines aromatischen R*** zwischen dem aromatischen Teil von R*** und dem zentralen N in Formel 1a nur genau eine direkte Anknüpfung besteht; und wobei jeder Rest R*** mit weiteren Resten R** funktionalisiert sein kann;

R** ist unabhängig voneinander ein Rest R* und kennzeichnet den Anknüpfungspunkt an eine chemische Einheit gemäß Formel 1b oder an eine chemische Einheit gemäß Formel 1a; wobei zwei oder mehrere Substituenten R** auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden können;

und wobei die enthaltene(n) Einheit(en) AF1 eine Struktur nach Formel 1b aufweist oder aufweisen;



Formel 1b

wobei gilt:

Z ist CR** oder N, wobei maximal 4 Einheiten Z gleichzeitig gleich N sind;




A ist C, wenn o = 1 oder ist N oder CR** wenn o = 0;




E ist C wenn p = 1 oder ist N oder CR** wenn p = 0 oder ist CR**₂ wenn J = H;

G ist C wenn o = 1 und q = 1; oder ist N oder CR** wenn o = 0 und q = 1; oder ist CR** wenn o = 1 und q = 1 und X gleich einer Element-Element-Bindung ist; oder ist N oder CR** wenn o = 1 und q = 0;



wobei A und G nicht gleichzeitig gleich N sind;

J ist H wenn q = 0 und p = 0 oder ist C, CR** oder N; oder ist C wenn p = 1 und gleichzeitig eine chemische Bindung zwischen J und Z besteht;

X ist N, CR**, , , , eine Element-Element-Bindung wenn q = 1; oder X ist NR**; wobei generell gilt, dass keine chemische Bindung zwischen X und Z besteht;

Y ist N, CR**, , , ; Y ist C wenn eine chemische Bindung zwischen Y und Z besteht und gleichzeitig p = 1 ist; und

wobei jede chemische Einheit gemäß Formel 1b mindestens eine der folgenden funktionellen

Gruppen enthält: , , N;

o ist 0 oder 1;

p ist 0 oder 1;

q ist 0 oder 1;

wobei o, p und q nicht gleichzeitig gleich 0 sind;

und wobei weiterhin gilt:

R* ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Deuterium, Phenyl, Naphthyl, N(R²)₂, -CN, -NC, -SCN, -CF₃, -NO₂, C(=O)OH, C(=O)OR³, C(=O)N(R³)₂, C(=O)SR³, C(=S)SR³, Si(R⁴)₃, B(OR⁵)₂, B(N(R⁶)₂)₂, C(=O)R³, P(=O)(R⁷)₂, As(=O)(R⁷)₂, P(=S)(R⁷)₂, As(=S)(R⁷)₂, S(=O)R³, S=NR³, S(=O)NR³, S(=O)₂NR³, S(=O)₂R³, O-S(=O)₂R³, SF₅, eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R⁹ substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere benachbarte CH₂-Gruppen durch -R⁹C=CR⁹-, -C≡C-, bzw. eine benachbarte CH₂-Gruppe durch -Si(R⁴)₂-, -Ge(R⁴)₂-, -Sn(R⁴)₂-, -C(=O)-, -C(=S)-, -C(=Se)-, -C=N-, -C(=O)O-, -C(=O)N(R³)-, -P(=O)(R⁷)-, -As(=O)(R⁷)-, -P(=S)(R⁷)-, -As(=S)(R⁷)-, -S(=O)-,

-S(=O)₂-, -NR²-, -O-, oder -S- ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF₃ oder NO₂ ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R² substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R⁹ substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R⁹ substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R* auch miteinander ein monozyklisches Ringsystem mit insgesamt fünf oder sechs Ringgliedern bilden;

R² ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Deuterium, Phenyl, Naphthyl, CF₃, C(=O)OR³, C(=O)N(R²)₂, Si(R⁴)₃, C(=O)R³, P(=O)(R⁷)₂, As(=O)(R⁷)₂, P(=S)(R⁷)₂, As(=S)(R⁷)₂, S(=O)R³, S(=O)₂R³, eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R⁹ substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere benachbarte CH₂-Gruppen durch -R⁹C=CR⁹-, -C≡C-, bzw. eine benachbarte CH₂-Gruppe durch -Si(R⁴)₂-, -Ge(R⁴)₂-, -Sn(R⁴)₂-, -C(=O)-, -C(=S)-, -C(=Se)-, -C=N-, -C(=O)O-, -C(=O)N(R³)-, -P(=O)(R⁷)-, -As(=O)(R⁷)-, -P(=S)(R⁷)-, -As(=S)(R⁷)-, -S(=O)-, -S(=O)₂-, -NR²-, -O-, oder -S- ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF₃ oder NO₂ ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R⁹ substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R⁹ substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R⁹ substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R² auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

R³ ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Deuterium, Phenyl, Naphthyl, CF₃ oder ein aliphatischer, aromatischer und/oder heteroaromatischer Kohlenwasserstoffrest mit 1 bis 20 C-Atomen, in dem auch ein oder mehrere H-Atome durch F oder CF₃ ersetzt sein können; dabei können zwei oder mehrere

Substituenten R^3 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden;

R^4 ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Deuterium, Phenyl, Naphthyl, $N(R^2)_2$, CN, CF_3 , OH, $C(=O)OR^3$, $C(=O)N(R^3)_2$, $C(=O)R^3$, $P(=O)(R^7)_2$, $As(=O)(R^7)_2$, $P(=S)(R^7)_2$, $As(=S)(R^7)_2$, eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^9 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere benachbarte CH_2 -Gruppen durch $-R^9C=CR^9-$, $-C\equiv C-$, bzw. eine benachbarte CH_2 -Gruppe durch $-Si(R^4)_2-$, $-Ge(R^4)_2-$, $-Sn(R^4)_2-$, $-C(=O)-$, $-C(=S)-$, $-C(=Se)-$, $-C=N-$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)N(R^3)-$, $-P(=O)(R^7)-$, $-As(=O)(R^7)-$, $-P(=S)(R^7)-$, $-As(=S)(R^7)-$, $-S(=O)-$, $-S(=O)_2-$, $-NR^2-$, $-O-$, oder $-S-$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^8 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R^4 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

R^5 ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Phenyl, Naphthyl, CF_3 , $C(=O)R^3$, $P(=O)(R^7)_2$, $As(=O)(R^7)_2$, eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^9 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere benachbarte CH_2 -Gruppen durch $-R^9C=CR^9-$, $-C\equiv C-$, bzw. eine benachbarte CH_2 -Gruppe durch $-Si(R^4)_2-$, $-Ge(R^4)_2-$, $-Sn(R^4)_2-$, $-C(=O)-$, $-C(=S)-$, $-C(=Se)-$, $-C=N-$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)N(R^3)-$, $-P(=O)(R^7)-$, $-As(=O)(R^7)-$, $-P(=S)(R^7)-$, $-As(=S)(R^7)-$, $-S(=O)-$, $-S(=O)_2-$, $-NR^2-$, $-O-$, oder $-S-$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe,

Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R^5 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

R^6 ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Phenyl, Naphthyl, CF_3 , $Si(R^4)_3$, $C(=O)R^3$, $P(=O)(R^7)_2$, eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^9 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere benachbarte CH_2 -Gruppen durch $-R^9C=CR^9-$, $-C\equiv C-$, bzw. eine benachbarte CH_2 -Gruppe durch $-Si(R^4)_2-$, $-Ge(R^4)_2-$, $-Sn(R^4)_2-$, $-C(=O)-$, $-C(=S)-$, $-C(=Se)-$, $-C=N-$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)N(R^3)-$, $-P(=O)(R^7)-$, $-As(=O)(R^7)-$, $-P(=S)(R^7)-$, $-As(=S)(R^7)-$, $-S(=O)-$, $-S(=O)_2-$, $-NR^2-$, $-O-$, oder $-S-$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^* substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R^6 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

R^7 ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus, Phenyl, Naphthyl, $N(R^2)_2$, CN, CF_3 , $C(=O)OR^3$, $C(=O)N(R^3)_2$, $Si(R^4)_3$, $C(=O)R^3$, eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^9 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere benachbarte CH_2 -Gruppen durch $-R^9C=CR^9-$, $-C\equiv C-$, bzw. eine benachbarte CH_2 -Gruppe durch $-Si(R^4)_2-$, $-Ge(R^4)_2-$, $-Sn(R^4)_2-$, $-C(=O)-$, $-C(=S)-$, $-C(=Se)-$, $-C=N-$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)N(R^3)-$, $-P(=O)(R^7)-$, $-As(=O)(R^7)-$, $-P(=S)(R^7)-$, $-As(=S)(R^7)-$, $-S(=O)-$, $-S(=O)_2-$, $-NR^2-$, $-O-$, oder $-S-$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder

heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^3 substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R^7 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

R^8 ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Deuterium, Phenyl, Naphthyl, F, CF_3 oder ein aliphatischer, aromatischer und/oder heteroaromatischer Kohlenwasserstoffrest mit 1 bis 20 C-Atomen, in dem auch ein oder mehrere H-Atome durch F oder CF_3 ersetzt sein können; dabei können zwei oder mehrere Substituenten R^8 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden;

R^9 ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Deuterium, Phenyl, Naphthyl, $N(R^2)_2$, CN, CF_3 , NO_2 , OH, COOH, $C(=O)OR^3$, $C(=O)N(R^3)_2$, $Si(R^4)_3$, $B(OR^5)_2$, $C(=O)R^3$, $P(=O)(R^7)_2$, $P(=S)(R^7)_2$, $As(=O)(R^7)_2$, $P(=S)(R^7)_2$, $S(=O)R^3$, $S(=O)_2R^3$, OSO_2R^3 , eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^8 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen durch $-R^3C=CR^3-$, $-C\equiv C-$, bzw. eine benachbarte CH_2 -Gruppe durch $-Si(R^4)_2-$, $-Ge(R^4)_2-$, $-Sn(R^4)_2$, $-C(=O)-$, $-C(=S)-$, $-C(=Se)-$, $-C=N-$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)N(R^3)-$, $-P(=O)(R^7)-$, $-As(=O)(R^7)-$, $-P(=S)(R^7)-$, $-As(=S)(R^7)-$, $-S(=O)-$, $-S(=O)_2-$, $-NR^2-$, $-O-$, oder $-S-$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^8 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^3 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^8 substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R^9 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

wobei in einer Ausführungsform die weiteren chemischen Einheiten AF auch an ein Atom gebunden sein können, das Bestandteil der Gruppen R^{***}, R^{**} oder R^{*} ist.

Eine Arylgruppe im Sinne dieser Erfindung enthält 6 bis 60 aromatische Ringatome; eine Heteroarylgruppe im Sinne dieser Erfindung enthält 5 bis 60 aromatische Ringatome, von denen mindestens eines ein Heteroatom darstellt. Die Heteroatome sind insbesondere N, O, und S. Dies stellt die grundlegende Definition dar. Werden in der Beschreibung der vorliegenden Erfindung andere Bevorzugungen angegeben, beispielsweise bezüglich der Zahl der aromatischen Ringatome oder der enthaltenen Heteroatome, so gelten diese.

Dabei wird unter einer Arylgruppe bzw. Heteroarylgruppe ein einfacher aromatischer Cyclus, also Benzol, bzw. ein einfacher heteroaromatischer Cyclus, beispielsweise Pyridin, Pyrimidin oder Thiophen, oder ein heteroaromatischer Polycyclus, beispielsweise Naphthalin, Phenanthren, Chinolin oder Carbazol verstanden. Ein kondensierter (annelierter) aromatischer bzw. heteroaromatischer Polycyclus besteht im Sinne der vorliegenden Anmeldung aus zwei oder mehr miteinander kondensierten einfachen aromatischen bzw. heteroaromatischen Cyclen.

Unter einer Aryl- oder Heteroarylgruppe, die jeweils mit den oben genannten Resten substituiert sein kann und die über beliebige Positionen am Aromaten bzw. Heteroaromaten verknüpft sein kann, werden insbesondere Gruppen verstanden, welche abgeleitet sind von Benzol, Naphthalin, Anthracen, Phenanthren, Pyren, Dihydropyren, Chrysen, Perylen, Fluoranthen, Benzanthracen, Benzphenanthren, Tetracen, Pentacen, Benzpyren, Furan, Benzofuran, Isobenzofuran, Dibenzofuran, Thiophen, Benzothiophen, Isobenzothiophen, Dibenzothiophen; Pyrrol, Indol, Isoindol, Carbazol, Pyridin, Chinolin, Isochinolin, Acridin, Phenanthridin, Benzo-5,6-chinolin, Isochinolin, Benzo-6,7-chinolin, Benzo-7,8-chinolin, Phenothiazin, Phenoxazin, Pyrazol, Indazol, Imidazol, Benzimidazol, Naphthimidazol, Phenanthrimidazol, Pyridimidazol, Pyrazinimidazol, Chinoxalinimidazol, Oxazol, Benzoxazol, Naphthoxazol, Anthroxazol, Phenanthroxazol, Isoxazol, 1,2-Thiazol, 1,3-Thiazol, Benzothiazol, Pyridazin, Benzopyridazin, Pyrimidin, Benzpyrimidin, Chinoxalin, Pyrazin, Phenazin, Naphthyridin, Azacarbazol, Benzocarbolin, Phenanthrolin, 1,2,3-Triazol, 1,2,4-Triazol, Benztriazol, 1,2,3-Oxadiazol, 1,2,4-Oxadiazol, 1,2,5-Oxadiazol, 1,2,3,4-Tetrazin, Purin, Pteridin, Indolizin und Benzothiadiazol.

Ein aromatisches Ringsystem im Sinne dieser Erfindung enthält 6 bis 60 C-Atome im Ringsystem. Ein heteroaromatisches Ringsystem im Sinne dieser Erfindung enthält 5 bis 60 aromatische Ringatome, von denen mindestens eines ein Heteroatom darstellt. Die

Heteroatome sind insbesondere ausgewählt aus, N, O und/oder S. Unter einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem im Sinne dieser Erfindung soll ein System verstanden werden, das nicht notwendigerweise nur Aryl- oder Heteroarylgruppen enthält, sondern in dem auch mehrere Aryl- oder Heteroarylgruppen durch eine nicht-aromatische Einheit (insbesondere weniger als 10 % der verschiedenen Atome), wie z. B. ein sp³-hybridisiertes C-, Si-, oder N-Atom, ein sp²-hybridisiertes C-, N- oder O-Atom oder ein sp-hybridisiertes C-Atom, verbunden sein können. So sollen beispielsweise auch Systeme wie 9,9'-Diarylfuoren, Triarylamin, Diarylether, Stilben etc. als aromatische Ringsysteme im Sinne dieser Erfindung verstanden werden, und ebenso Systeme, in denen zwei oder mehrere Arylgruppen beispielsweise durch eine lineare oder cyclische Alkyl-, Alkenyl- oder Alkynylgruppe oder durch eine Silylgruppe verbunden sind. Weiterhin werden auch Systeme, in denen zwei oder mehr Aryl- oder Heteroarylgruppen über Einfachbindungen miteinander verknüpft sind, als aromatische oder heteroaromatische Ringsysteme im Sinne dieser Erfindung verstanden, wie beispielsweise Systeme wie Biphenyl, Terphenyl oder Diphenyltriazin.

Unter einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, welches noch jeweils mit Resten wie oben definiert substituiert sein kann und welches über beliebige Positionen am Aromaten bzw. Heteroaromaten verknüpft sein kann, werden insbesondere Gruppen verstanden, die abgeleitet sind von Benzol, Naphthalin, Anthracen, Benzanthracen, Phenanthren, Benzphenanthren, Pyren, Chrysen, Perylen, Fluoranthren, Naphacen, Pentacen, Benzpyren, Biphenyl, Biphenylen, Terphenyl, Terphenylen, Quaterphenyl, Fluoren, Spirobifluoren, Dihydrophenanthren, Dihydropyren, Tetrahydropyren, cis- oder trans-Indenofluoren, Truxen, Isotruxen, Spirotruxen, Spiroisotruxen, Furan, Benzofuran, Isobenzofuran, Dibenzofuran, Thiophen, Benzothiophen, Isobenzothiophen, Dibenzothiophen, Pyrrol, Indol, Isoindol, Carbazol, Indolcarbazol, Indenocarbazol, Pyridin, Chinolin, Isochinolin, Acridin, Phenanthridin, Benzo-5,6-chinolin, Benzo-6,7-chinolin, Benzo-7,8-chinolin, Phenothiazin, Phenoxazin, Pyrazol, Indazol, Imidazol, Benzimidazol, Naphthimidazol, Phenanthrimidazol, Pyridimidazol, Pyrazinimidazol, Chinoxalinimidazol, Oxazol, Benzoxazol, Naphthoxazol, Anthroxazol, Phenanthroxazol, Isoxazol, 1,2-Thiazol, 1,3-Thiazol, Benzothiazol, Pyridazin, Benzopyridazin, Pyrimidin, Benzpyrimidin, Chinoxalin, 1,5-Diazaanthracen, 2,7-Diazapyren, 2,3-Diazapyren, 1,6-Diazapyren, 1,8-Diazapyren, 4,5-Diazapyren, 4,5,9,10-Tetraazaperylen, Pyrazin, Phenazin, Phenoxazin, Phenothiazin, Fluorubin, Naphthyridin, Azacarbazol, Benzocarbolin, Phenanthrolin, 1,2,3-Triazol, 1,2,4-Triazol, Benzotriazol, 1,2,3-Oxadiazol, 1,2,4-Oxadiazol, 1,2,5-Oxadiazol, 1,2,3 Oxadiazol, 1,2,3-Thiadiazol, 1,2,5-Thiadiazol, 1,3,4-Thiadiazol, 1,3,5-

Triazin, 1,2,4-Triazin, 1,2,3-Triazin, Tetrazol, 1,2,3,5-Tetrazin, 1,2,3,4-Tetrazin, Purin, Pteridin, Indolizin und Benzothiadiazol oder Kombinationen dieser Gruppen.

Definitionsgemäß weist AF2 im Vergleich zu AF1 immer einen betragsmäßig niedrigeren HOMO-Zahlenwert auf (und damit auch entsprechend einen betragsmäßig niedrigeren LUMO-Zahlenwert) als AF1 ($|E_{\text{HOMO}}(\text{AF2})| < |E_{\text{HOMO}}(\text{AF1})|$ und $|E_{\text{LUMO}}(\text{AF2})| < |E_{\text{LUMO}}(\text{AF1})|$);

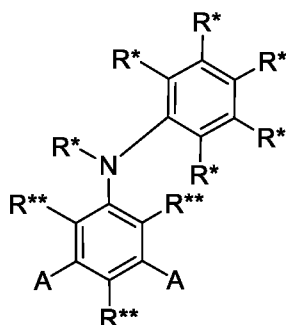
wobei die chemischen Einheiten AF2 der Formel 1a entsprechen und die chemischen Einheiten AF1 der Formel 1b entsprechen.

In einer Ausführungsform zeichnen sich die organischen Moleküle dadurch aus, dass

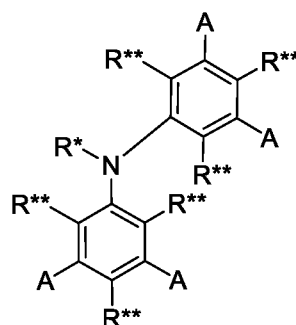
- die Differenz der Energie des HOMO der zweiten chemischen Einheit AF2 und der Energie des HOMO der ersten chemischen Einheit AF1 $> 0,8$ eV ist ($\Delta \text{HOMO} = \text{HOMO}(\text{AF2}) - \text{HOMO}(\text{AF1}) > 0,8$ eV);
- die Differenz der Energie des LUMO der zweiten chemischen Einheit AF2 und der Energie des LUMO der ersten chemischen Einheit AF1 $> 0,8$ eV ist ($\Delta \text{LUMO} = \text{LUMO}(\text{AF2}) - \text{LUMO}(\text{AF1}) > 0,8$ eV); und/oder
- die Differenz der Energie des LUMO der ersten chemischen Einheit AF1 und der Energie des HOMO der zweiten chemischen Einheit AF2 $> 0,9$ eV ist ($\Delta \text{Gap} = \text{LUMO}(\text{AF1}) - \text{HOMO}(\text{AF2}) > 0,9$ eV).

Dabei werden die Energiewerte HOMO(AF1), HOMO(AF2), LUMO(AF1), LUMO(AF2) mithilfe der Dichtefunktionaltheorie (DFT) berechnet, wobei die Anknüpfungspositionen der ambifunktionalen Einheiten und der Separatoren mit einem Wasserstoffatom entsprechend ihrer chemischen Valenzen abgesättigt werden. Die angegebenen Grenzen beziehen sich auf Orbitalenergien in der Einheit eV, die mit dem BP86-Funktional berechnet werden (Becke, A. D. Phys. Rev. A1988, 38, 3098–3100; Perdew, J. P. Phys. Rev. B1986, 33, 8822–8827).

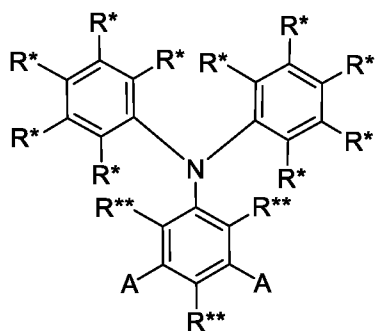
In einer weiteren Ausführungsform weist mindestens eine der chemischen Einheiten AF2 eine Struktur nach Formel 2a oder 2b oder 2c oder 2d oder 2e auf:



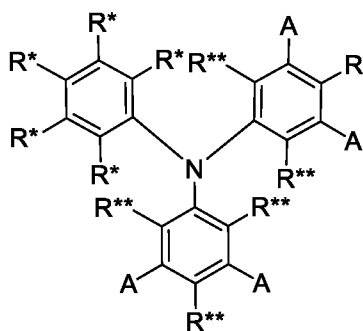
Formel 2a



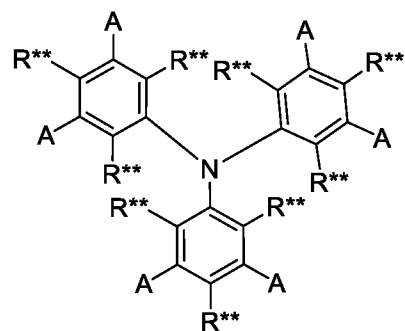
Formel 2b



Formel 2c



Formel 2d



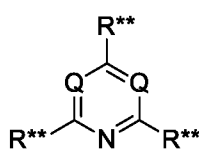
Formel 2e

wobei gilt:

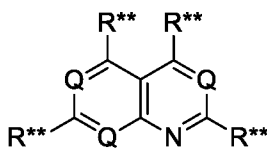
A ist ein Rest R* oder bezeichnet die Anknüpfung an eine Gruppe der Form AF1–AF2;

und wobei R** und R* wie bei Formel 1a und Formel 1b definiert sind;

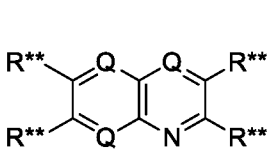
und wobei die jeweils andere(n) Einheit(en) AF1 eine Struktur nach den Formeln 2f bis 2z aufweist/aufweisen.



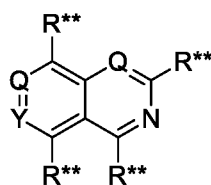
Formel 2f



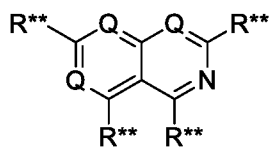
Formel 2g



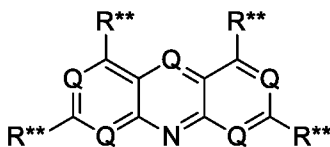
Formel 2h



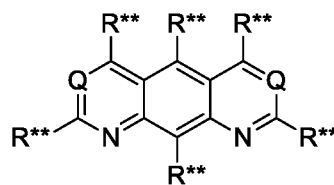
Formel 2i



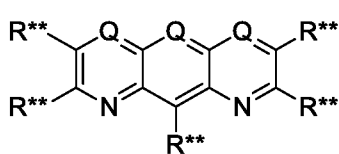
Formel 2j



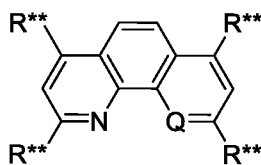
Formel 2k



Formel 2l



Formel 2m

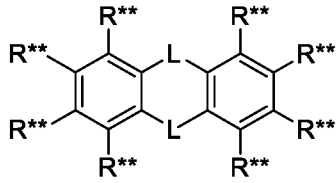


Formel 2n

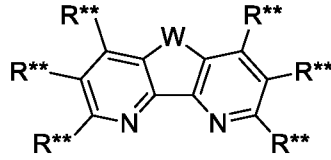
und wobei gilt:

Q ist N, CR**;

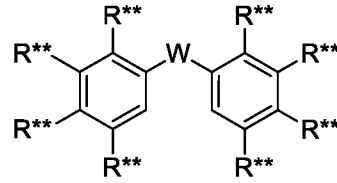
Y ist N, CR**, wobei Q und Y nicht gleichzeitig gleich N sind;



Formel 2o








Formel 2p

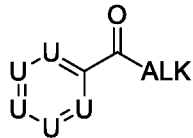


Formel 2q

und wobei gilt:

L ist , , , eine Element-Element-Einfachbindung, wobei nicht zwei Einheiten Y gleichzeitig eine Element-Element-Einfachbindung sind, oder ist NR**, wobei nicht zwei Einheiten Y gleichzeitig gleich NR** sind;

W ist , ;

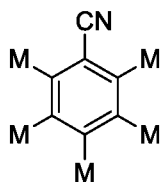


Formel 2r

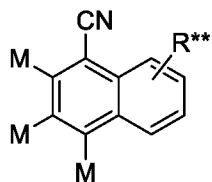
und wobei gilt:

U ist CR**, N, wobei maximal 3 Einheiten U gleichzeitig gleich N sind und wobei keine benachbarten Einheiten U gleichzeitig gleich N sind;

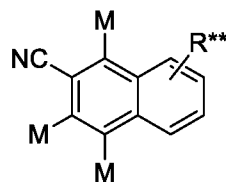
ALK ist Methyl, Ethyl, Propyl *iso*-Propyl, Butyl, *tert*-Butyl, Pentyl, Hexyl, Cyclohexyl, Heptyl, Octyl, Nonyl, Decyl, Undecyl oder Dodecyl;



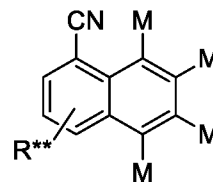
Formel 2s



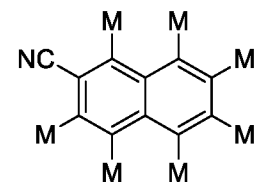
Formel 2t



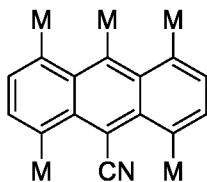
Formel 2u



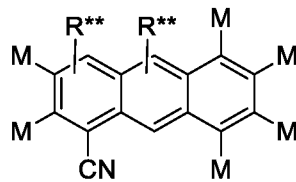
Formel 2v



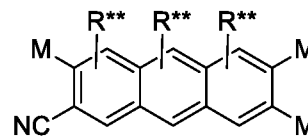
Formel 2w



Formel 2x



Formel 2y



Formel 2z

und wobei gilt:

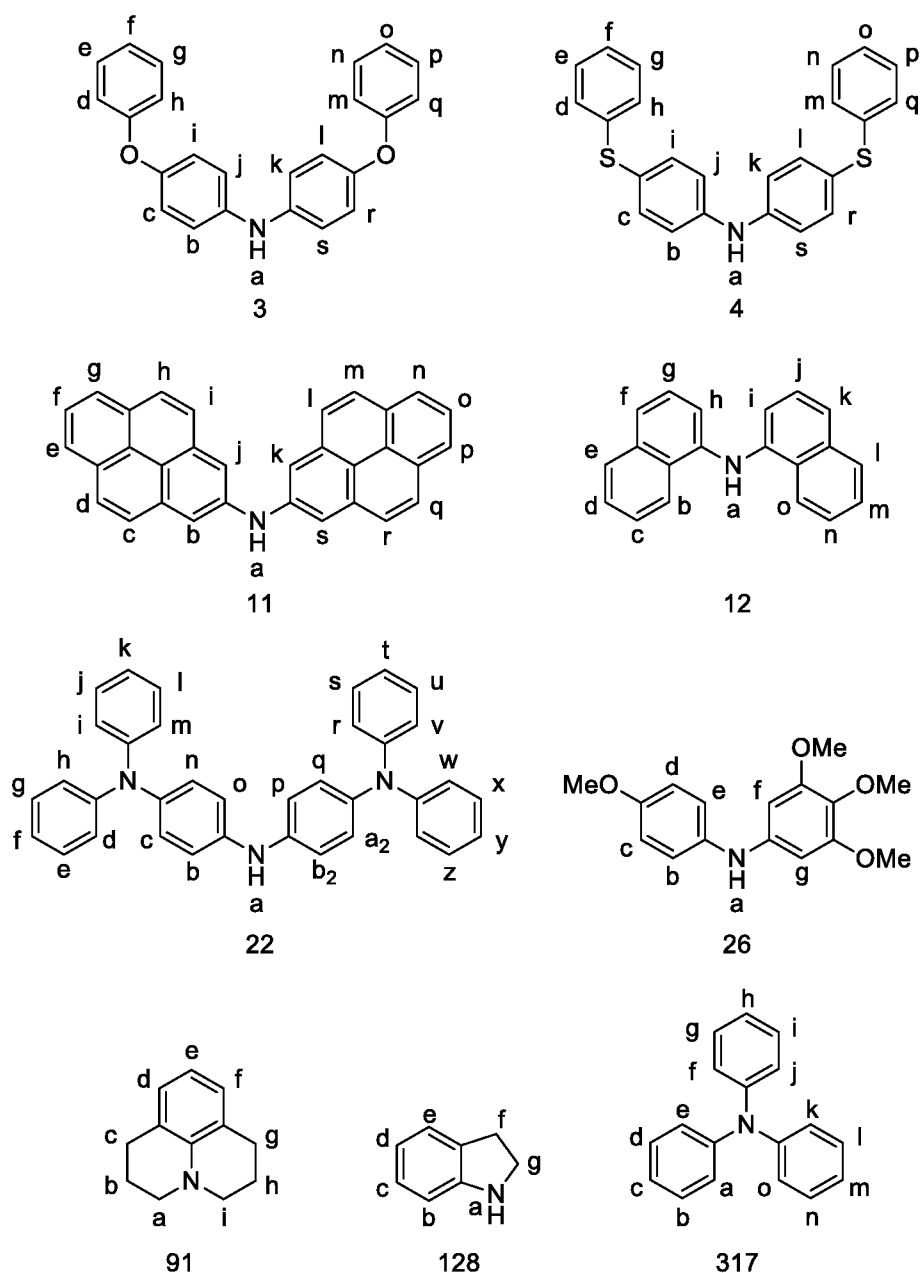
M ist H, D, ALK, Phenyl, Pyridyl, R**, CN, wobei maximal 4 Einheiten M gleichzeitig gleich CN sind;

und wobei R** und R* wie bei den Formeln 1a und 1b definiert sind.

In einer weiteren Ausführungsform hat/haben die Einheit(en) AF2 eine Struktur ausgewählt aus einer der in Tabelle 1 gezeigten Strukturen;

wobei die Anknüpfungspositionen für eine weitere chemische Einheit AF2 und/oder eine Einheit AF1 mit Kleinbuchstaben gekennzeichnet sind;

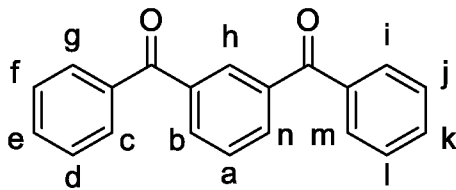
Tabelle 1: Beispiele für chemische Einheiten AF2.



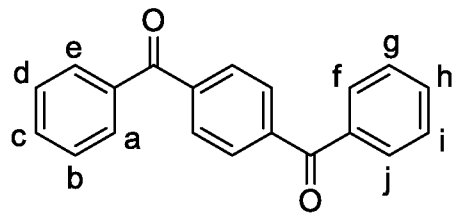
In einer weiteren Ausführungsform hat/haben die Einheit(en) AF1 eine Struktur ausgewählt aus den in Tabelle 2 gezeigten Strukturen;

und wobei die Anknüpfungspositionen für eine weitere chemische Einheit AF1 und/oder eine Einheit AF2 mit Kleinbuchstaben gekennzeichnet sind.

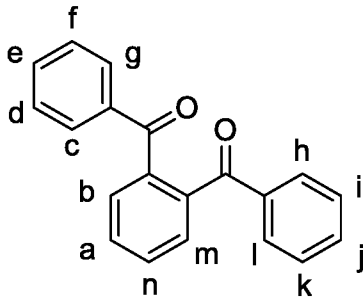
Tabelle 2: Einheiten AF1, die in erfindungsgemäßen Molekülen enthalten sein können.



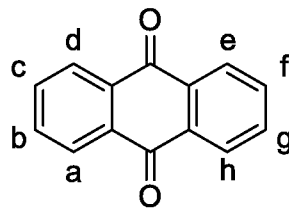
27



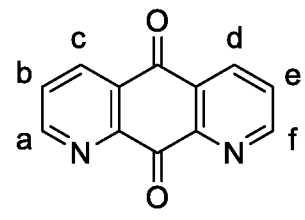
28



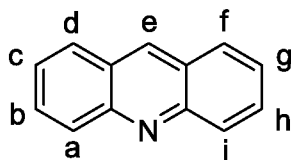
29



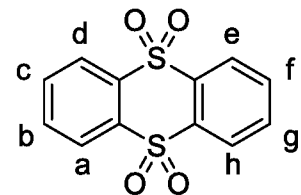
36



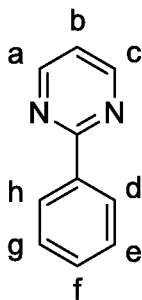
37



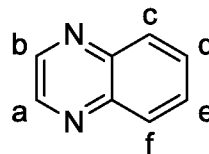
40



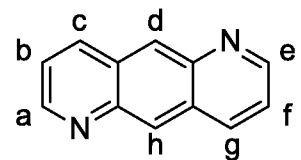
46



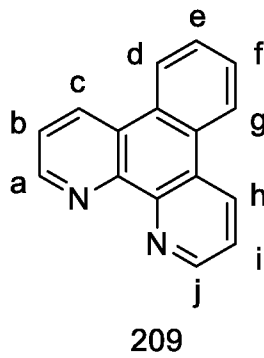
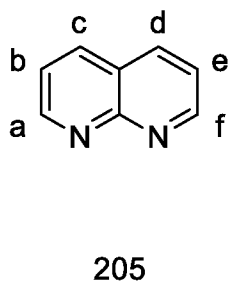
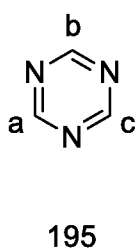
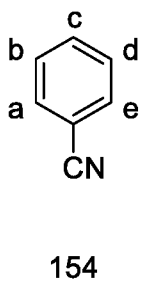
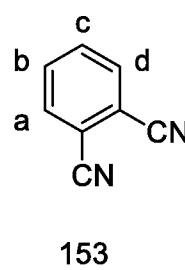
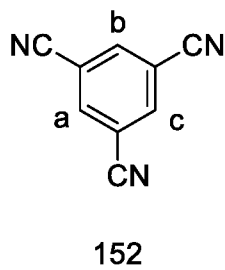
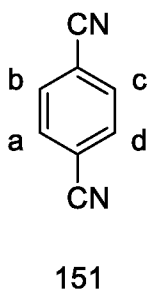
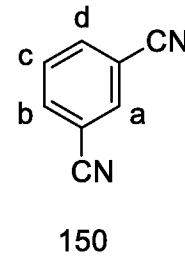
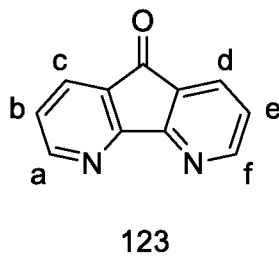
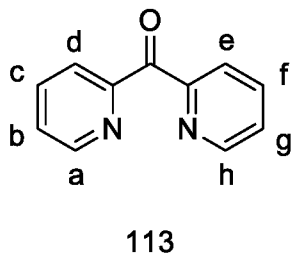
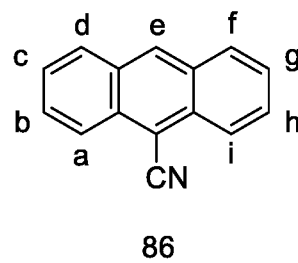
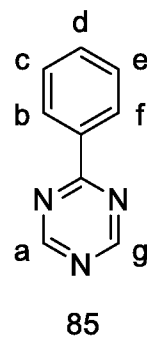
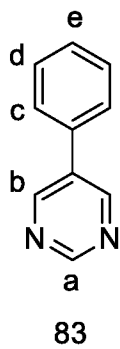
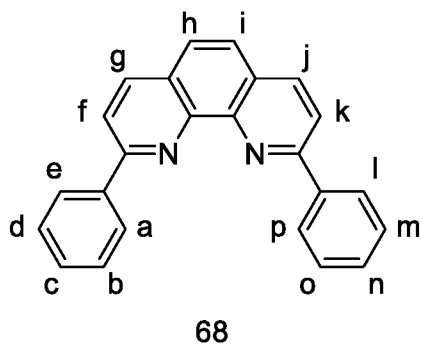
56

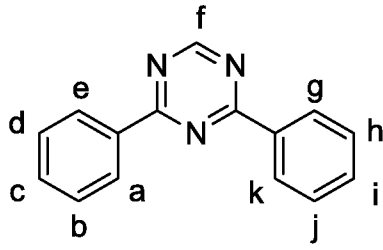


61

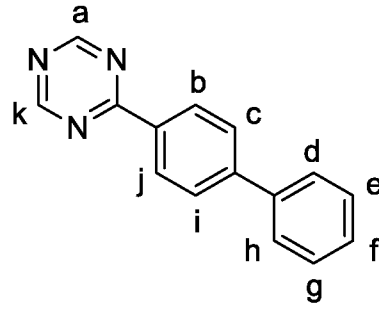


62

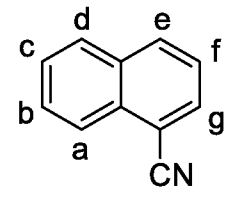




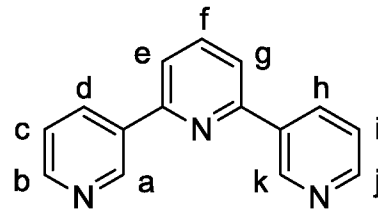
233



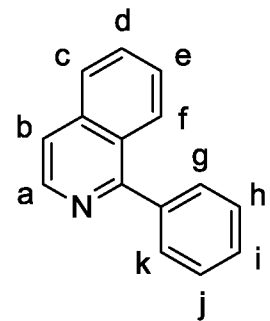
234



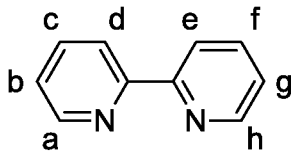
244



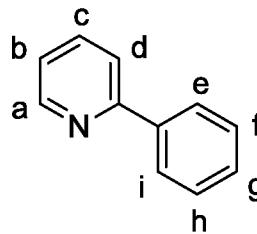
286



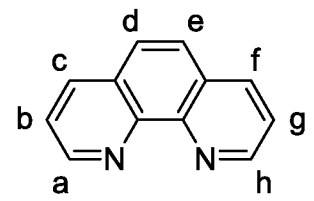
288



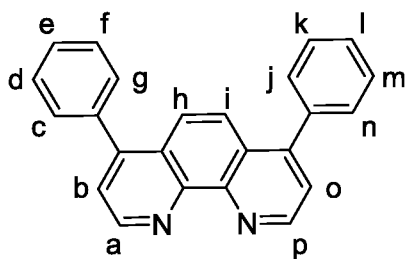
297



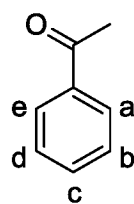
303



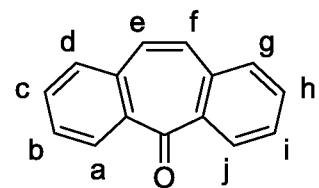
311



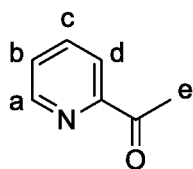
313



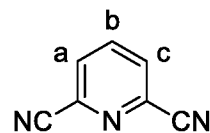
332



358

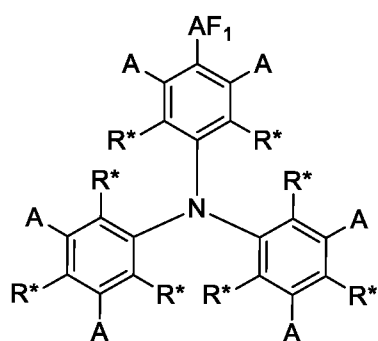


370

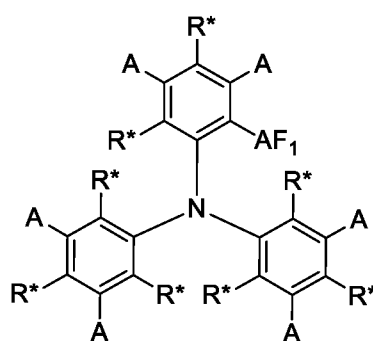


371

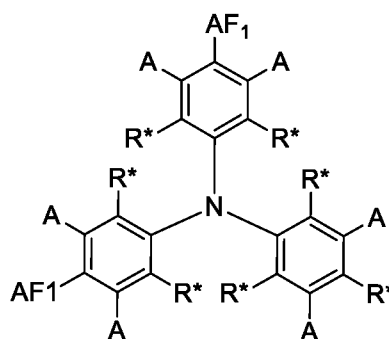
In einer Ausführungsform weisen die erfindungsgemäßen Moleküle eine Struktur der Formel 3a oder 3b oder 3c oder 3d oder 3e oder 3f oder 3g oder 3h auf oder haben eine Struktur der Formel 3a oder 3b oder 3c oder 3d oder 3e oder 3f oder 3g oder 3h;



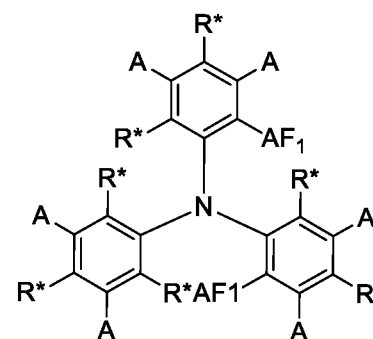
Formel 3a



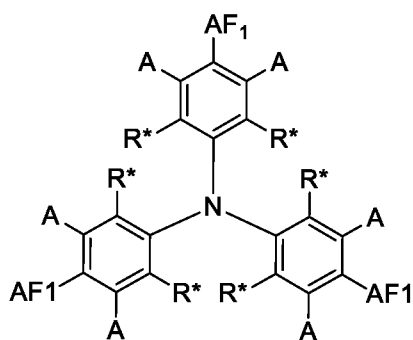
Formel 3b



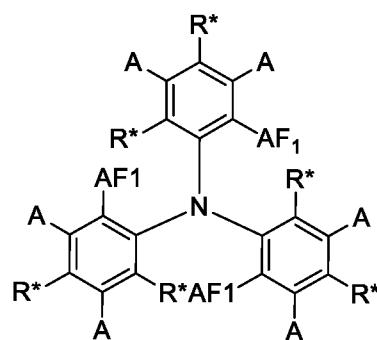
Formel 3c



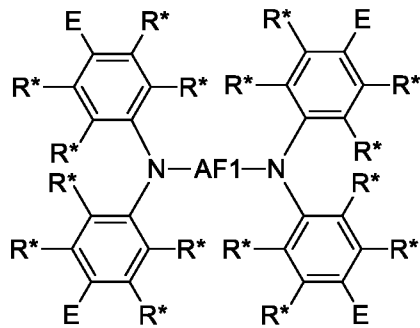
Formel 3d



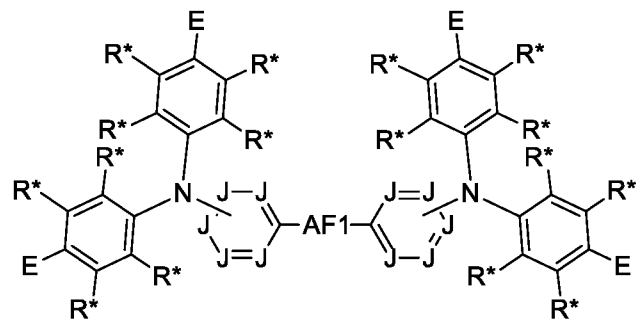
Formel 3e



Formel 3f



Formel 3g

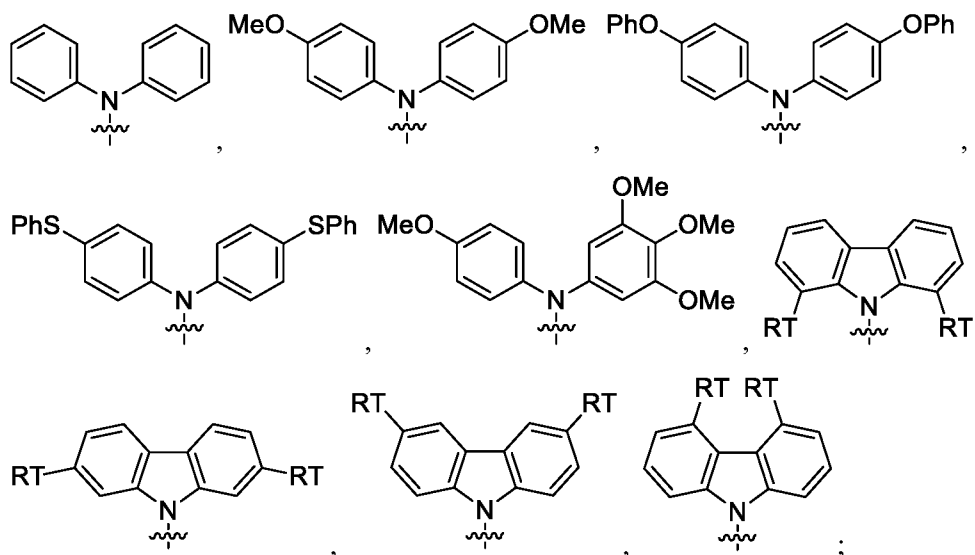


Formel 3h

wobei gilt:

J ist CR* oder ist C bei Anbindung an die Diarylamineinheit.

E ist R* oder ist ausgewählt aus:



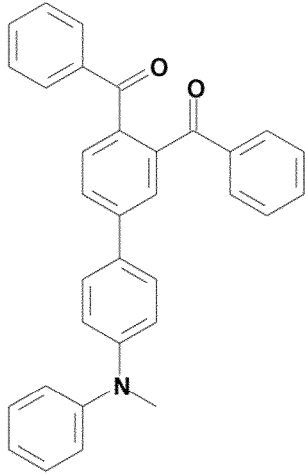
wobei gilt: RT ist ausgewählt aus H, CH₃, Ph, *t*-Bu, OMe, OPh;

und wobei im Übrigen die bei Formel 1, angegebenen Definitionen gelten und R** und R* wie bei Formel 1a und 1b definiert sind.

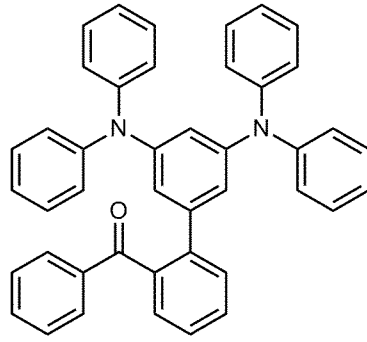
Durch Kombination der oben definierten Paare aus chemischen Einheiten AF1 und AF2 ergeben sich entsprechend die beispielhaften erfindungsgemäßen Moleküle der Tabelle 3. Weitere organische Moleküle können durch Kombination der genannten Moleküleinheiten analog erhalten werden.

Tabelle 3: Beispiele für erfindungsgemäße organische Moleküle (AF2)_n–(AF1)_m, die mindestens eine Einheit AF2 aus Tabelle 1 und mindestens eine Einheit AF1 aus Tabelle 2 enthalten und die optional einen oder mehrere der oben definierten Reste R* enthalten. Die

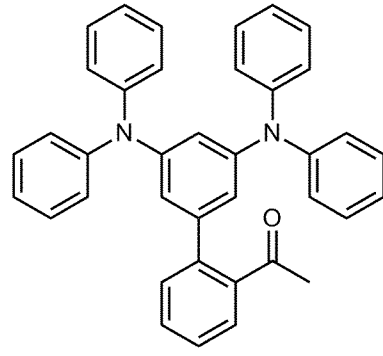
berechneten Werte für den Singulett-Triplett-Abstand in der Geometrie des S₀-Grundzustands sind in Klammern unter der entsprechenden Molekülstruktur vermerkt.



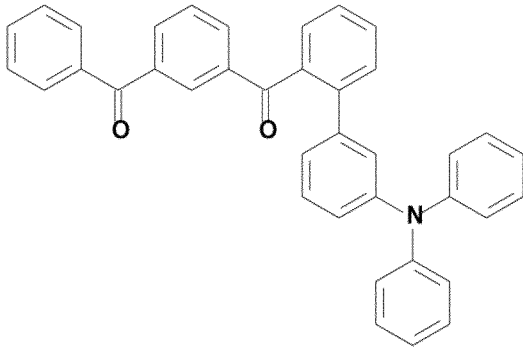
(0.302 eV)



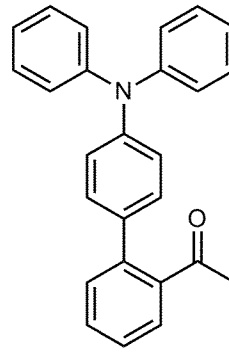
(0.017 eV)



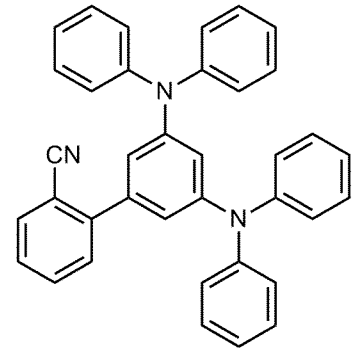
(0.066 eV)



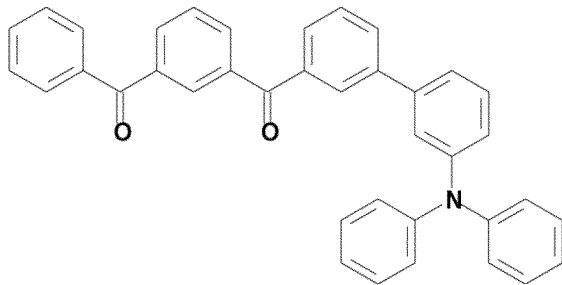
(0.012 eV)



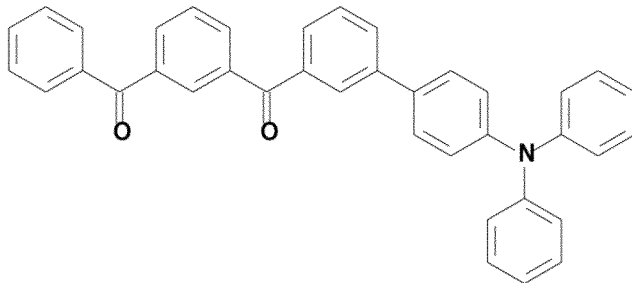
(0.285 eV)



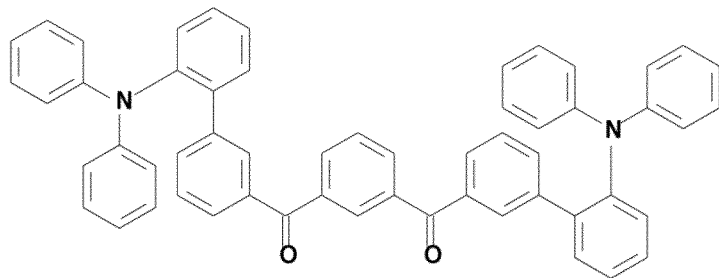
(0.186 eV)



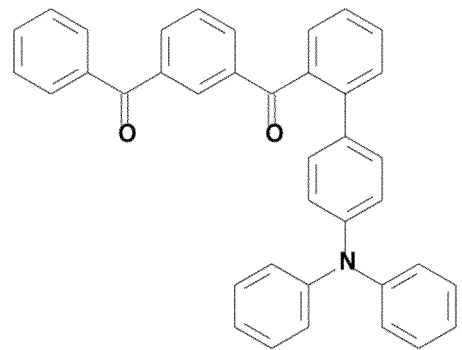
(0.018 eV)



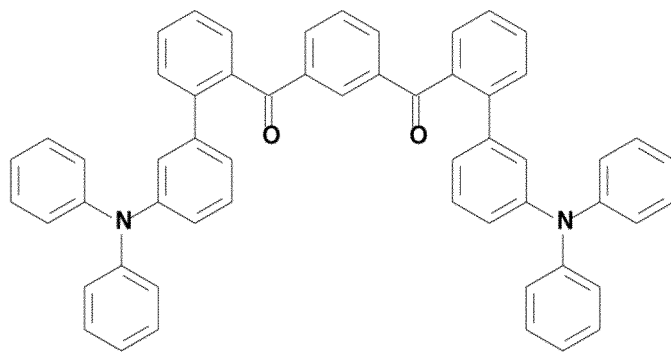
(0.151 eV)



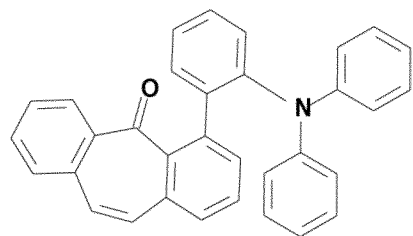
(0.014 eV)



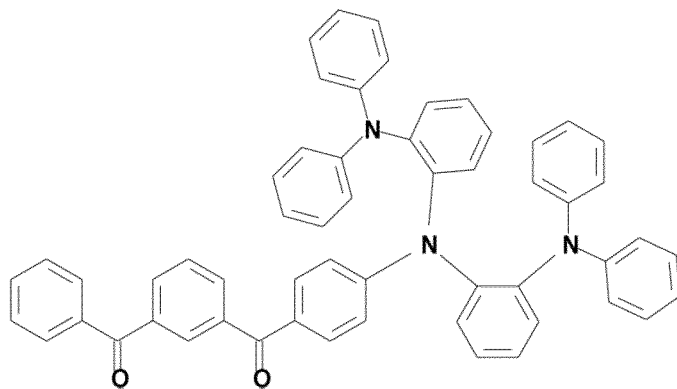
(0.056 eV)



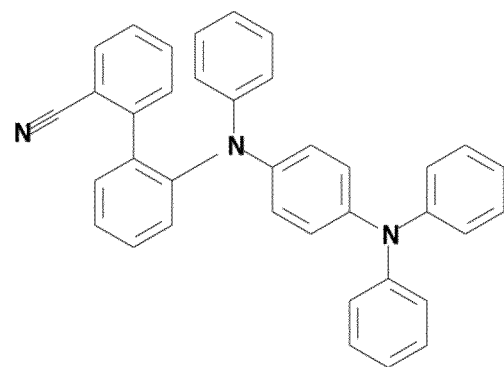
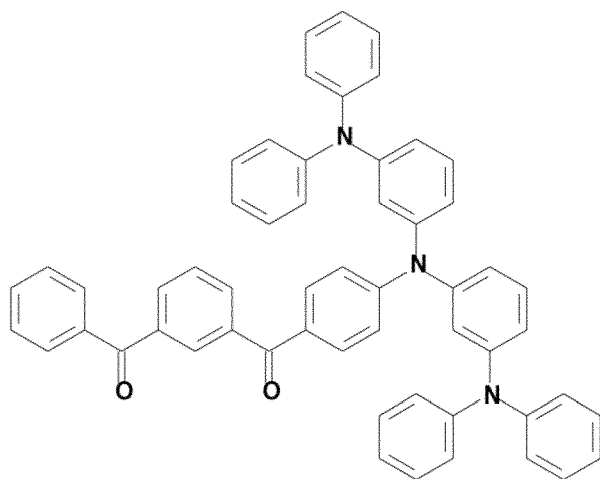
(0.017 eV)



(0.253 eV)

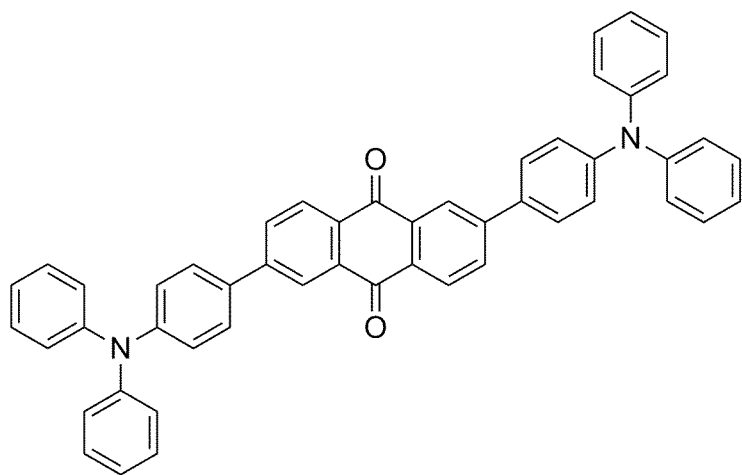


(0.095)

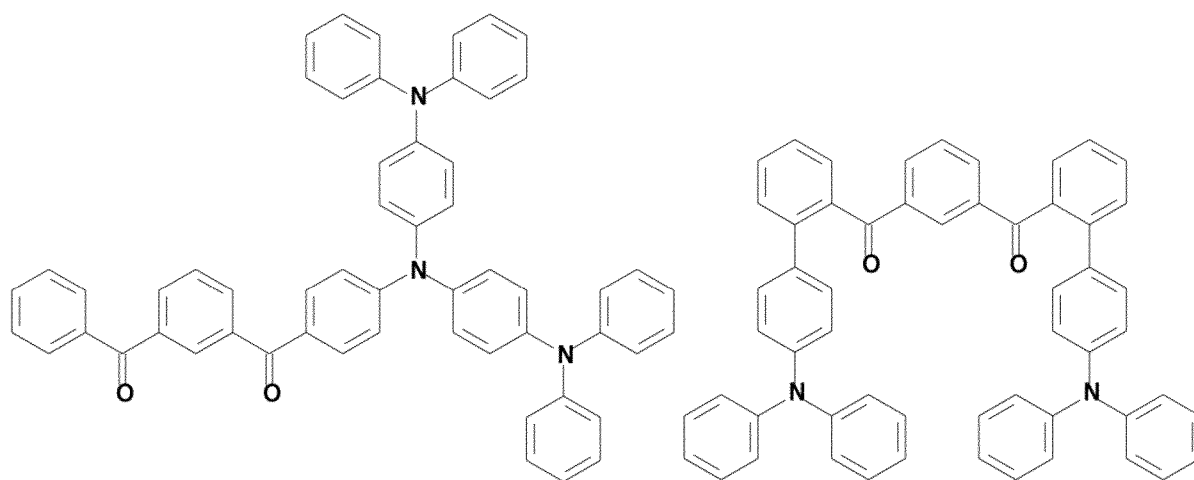


(0.064 eV)

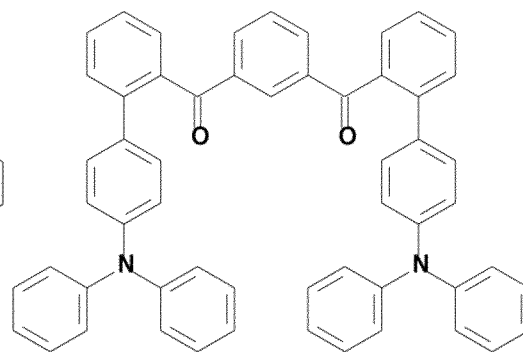
22



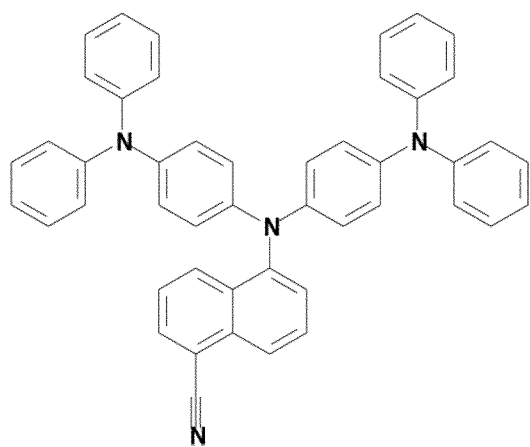
(0.249 eV)



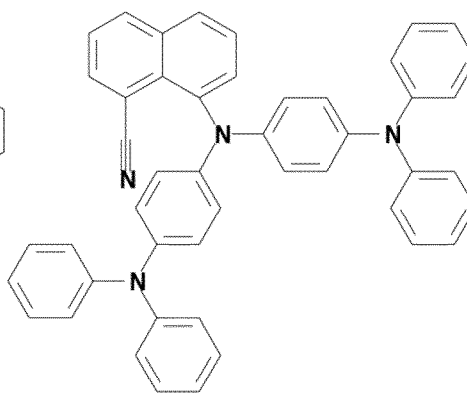
(0.267 eV)



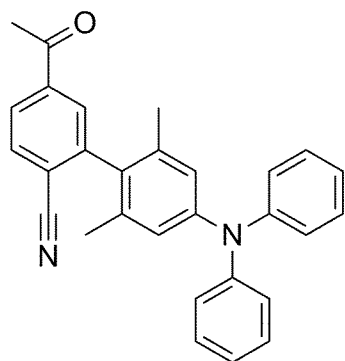
(0.091 eV)



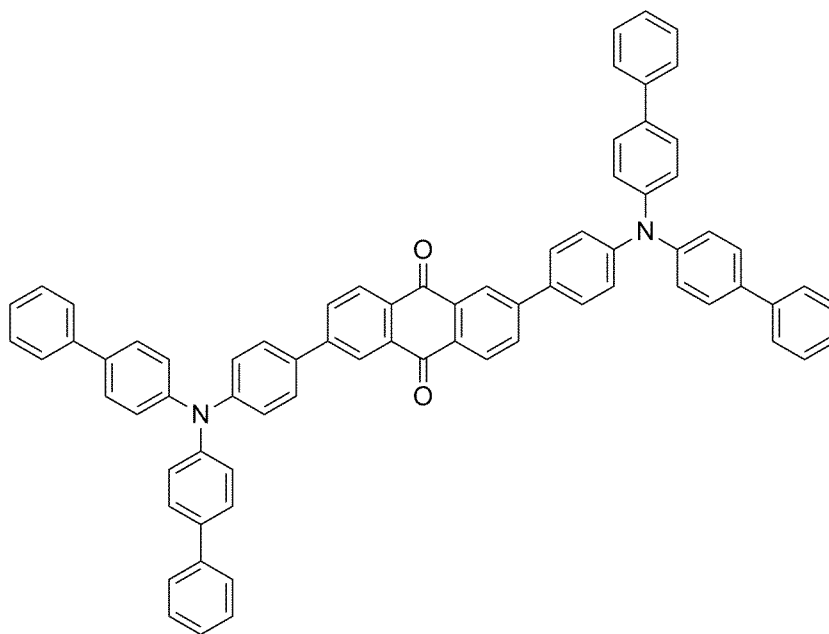
(0.265 eV)



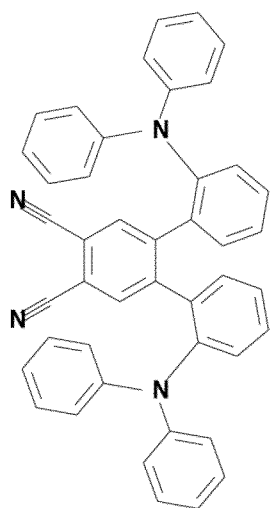
(0.201 eV)



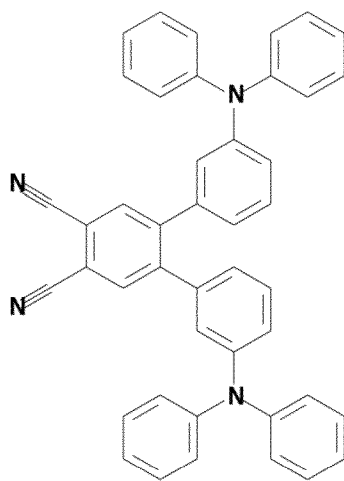
(0.009 eV)



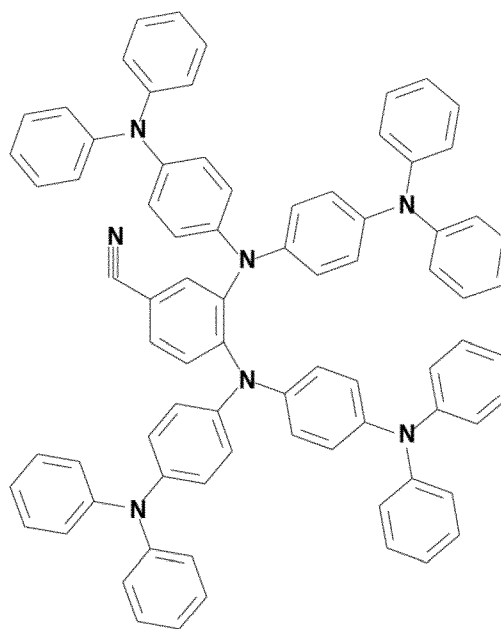
(0.194 eV)



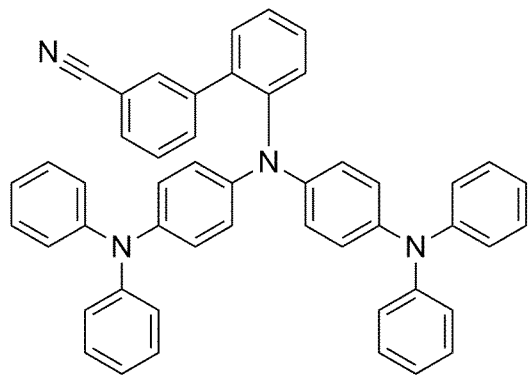
(0.137 eV)



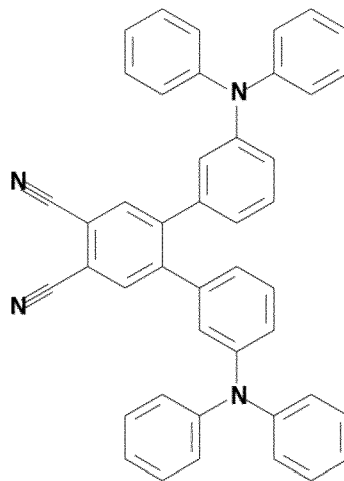
(0.118 eV)



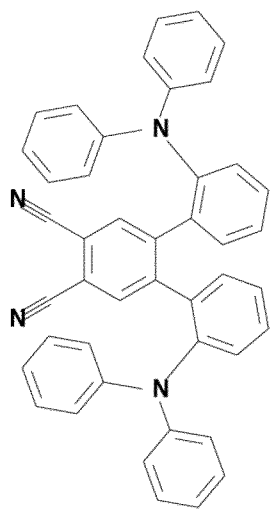
(0.224 eV)



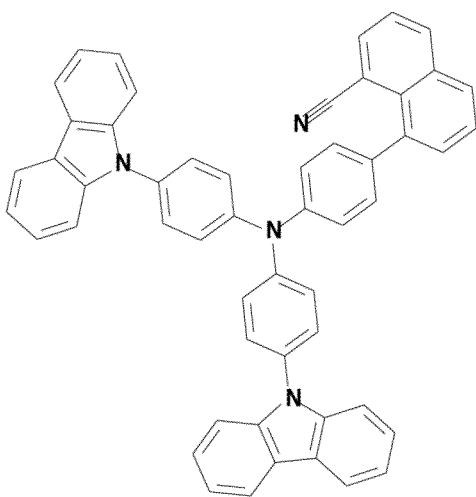
(0.095 eV)



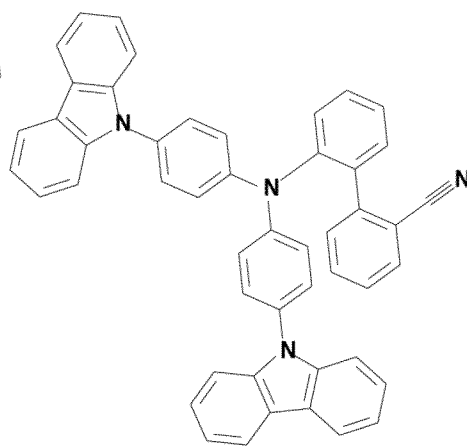
(0.118 eV)



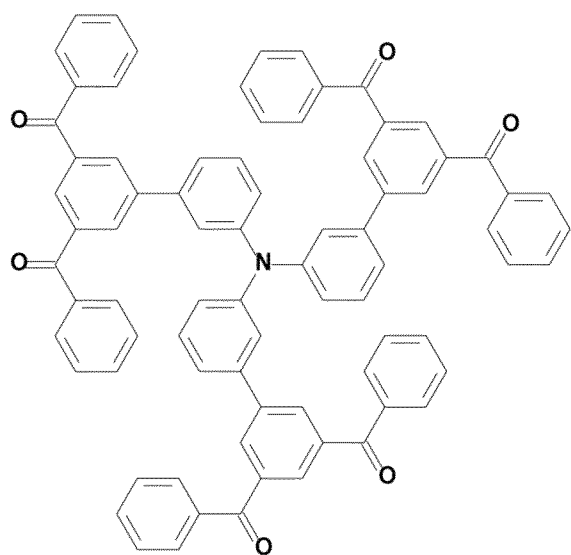
(0.137 eV)



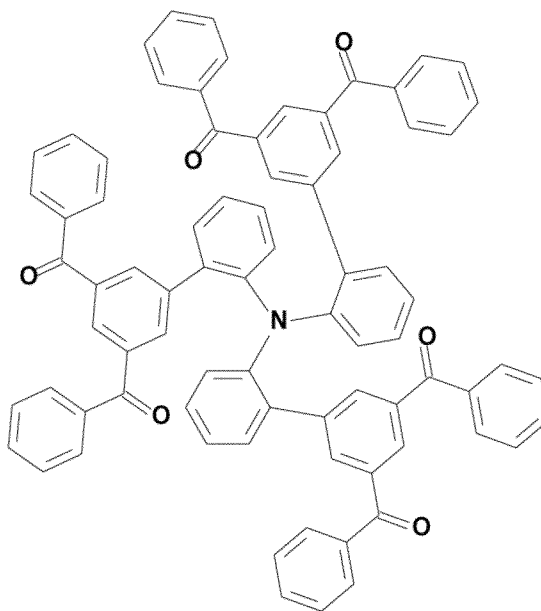
(0.166 eV)



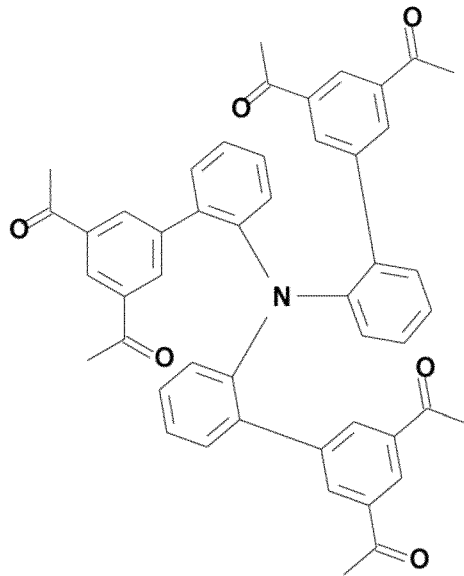
(0.109 eV)



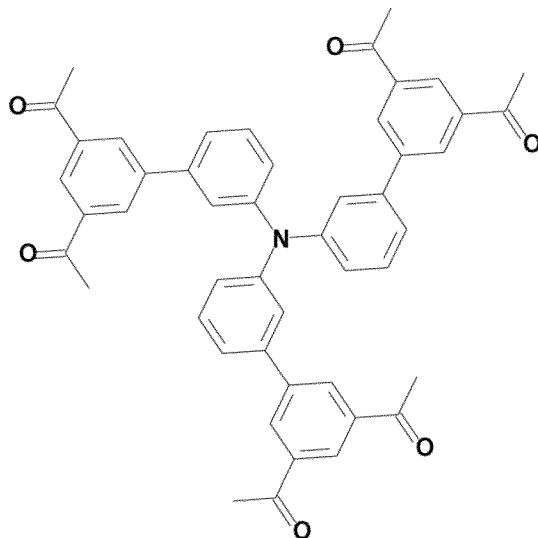
(0.074 eV)



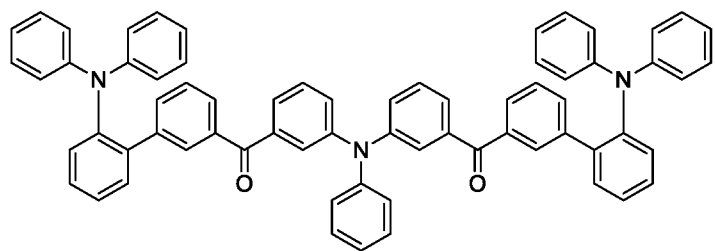
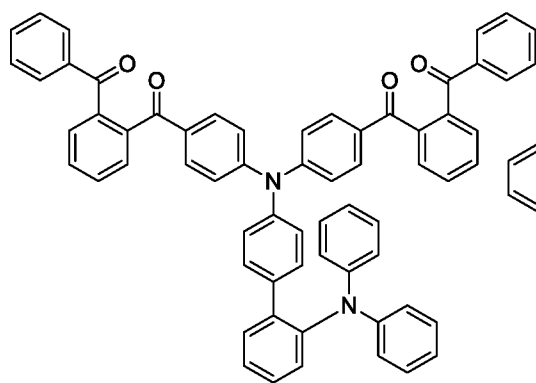
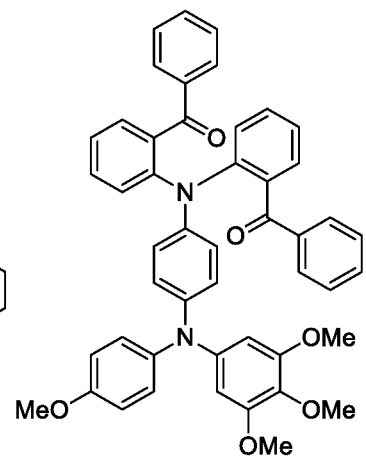
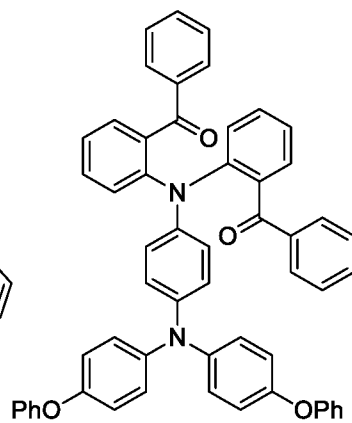
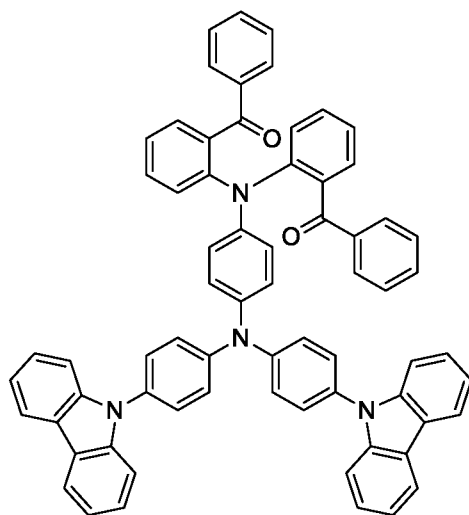
(0.036 eV)

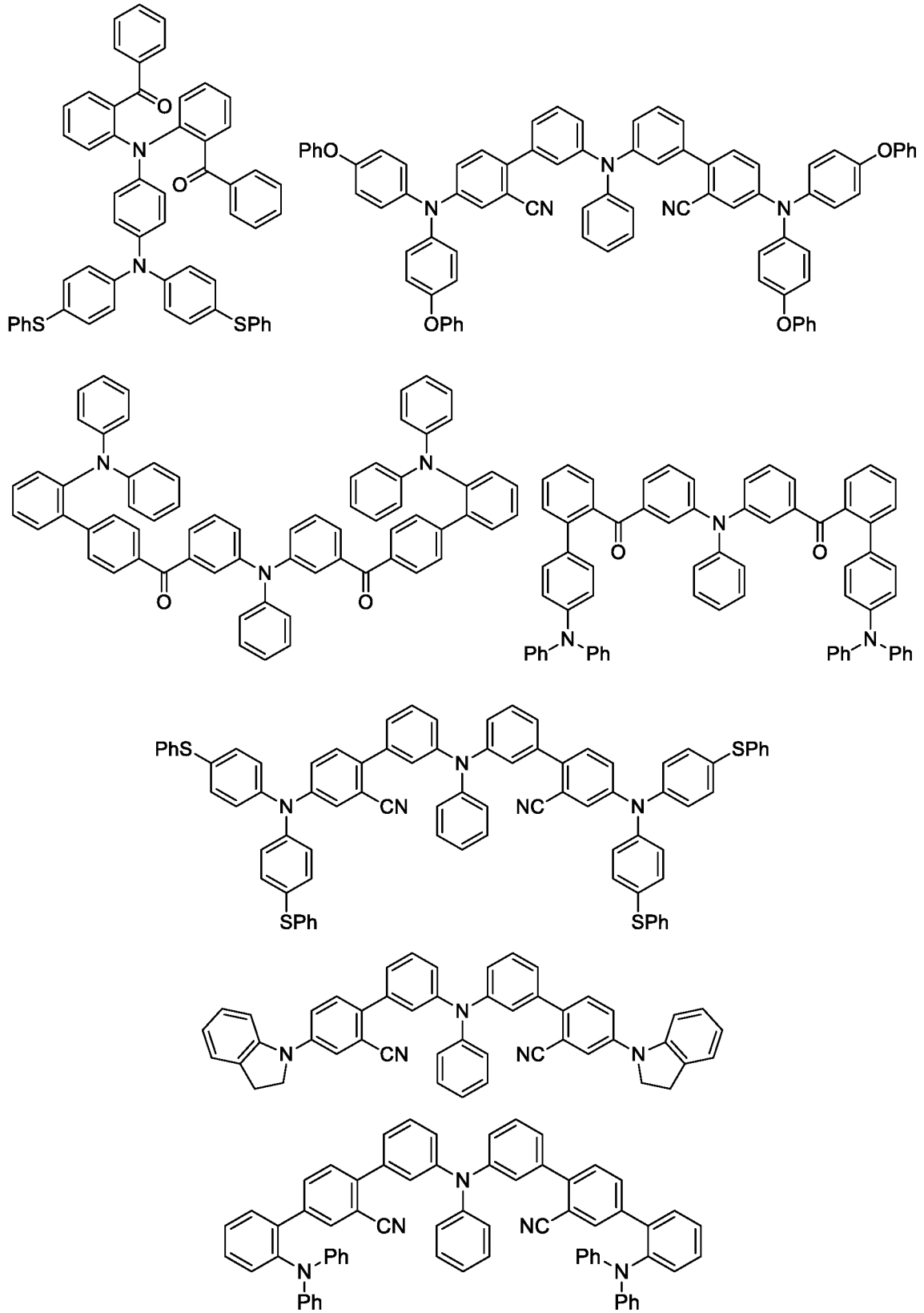


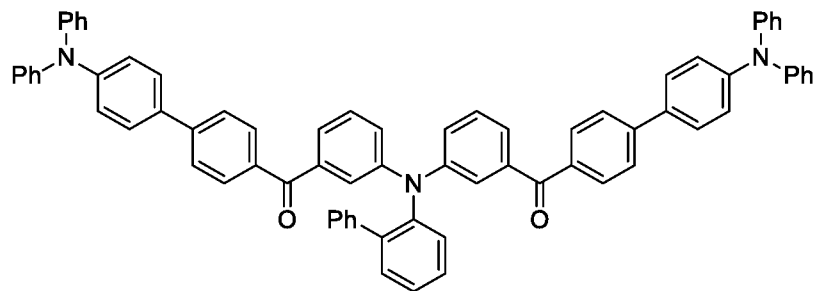
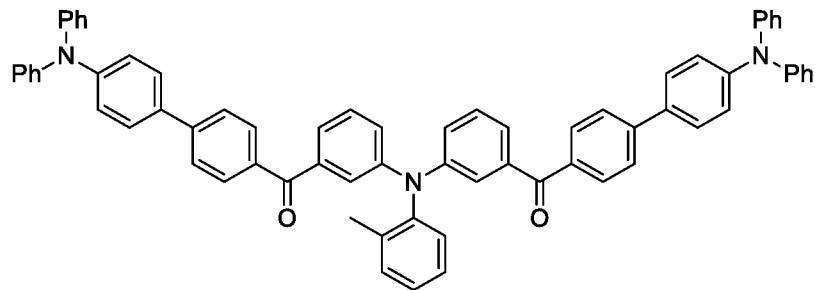
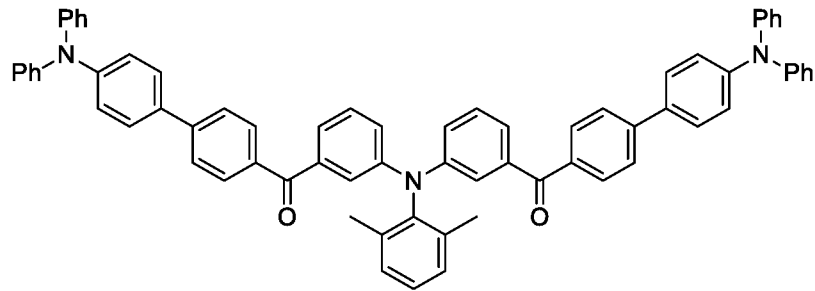
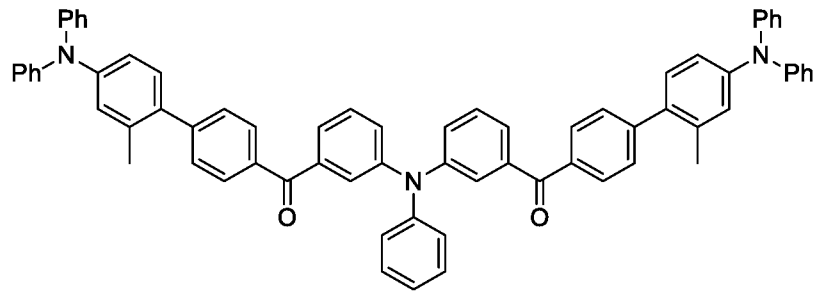
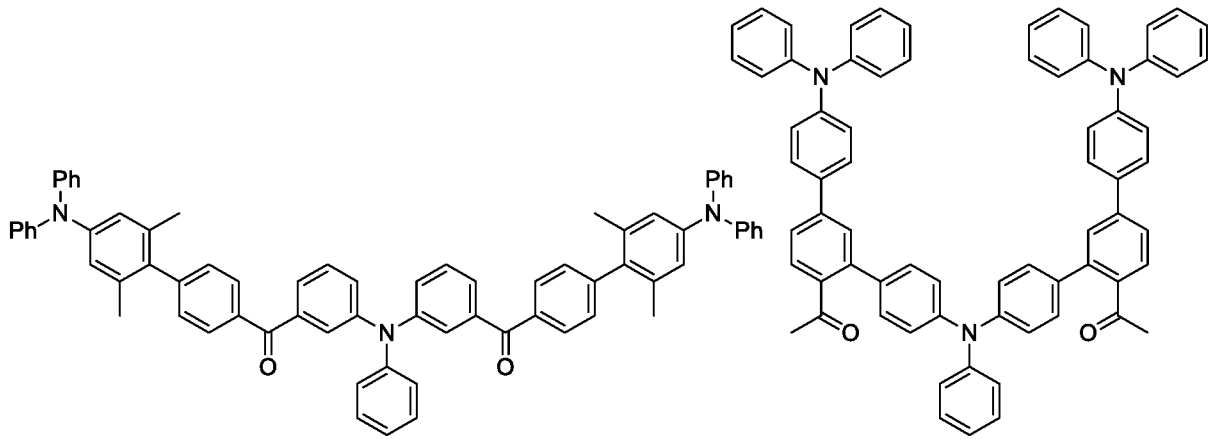
(0.077 eV)

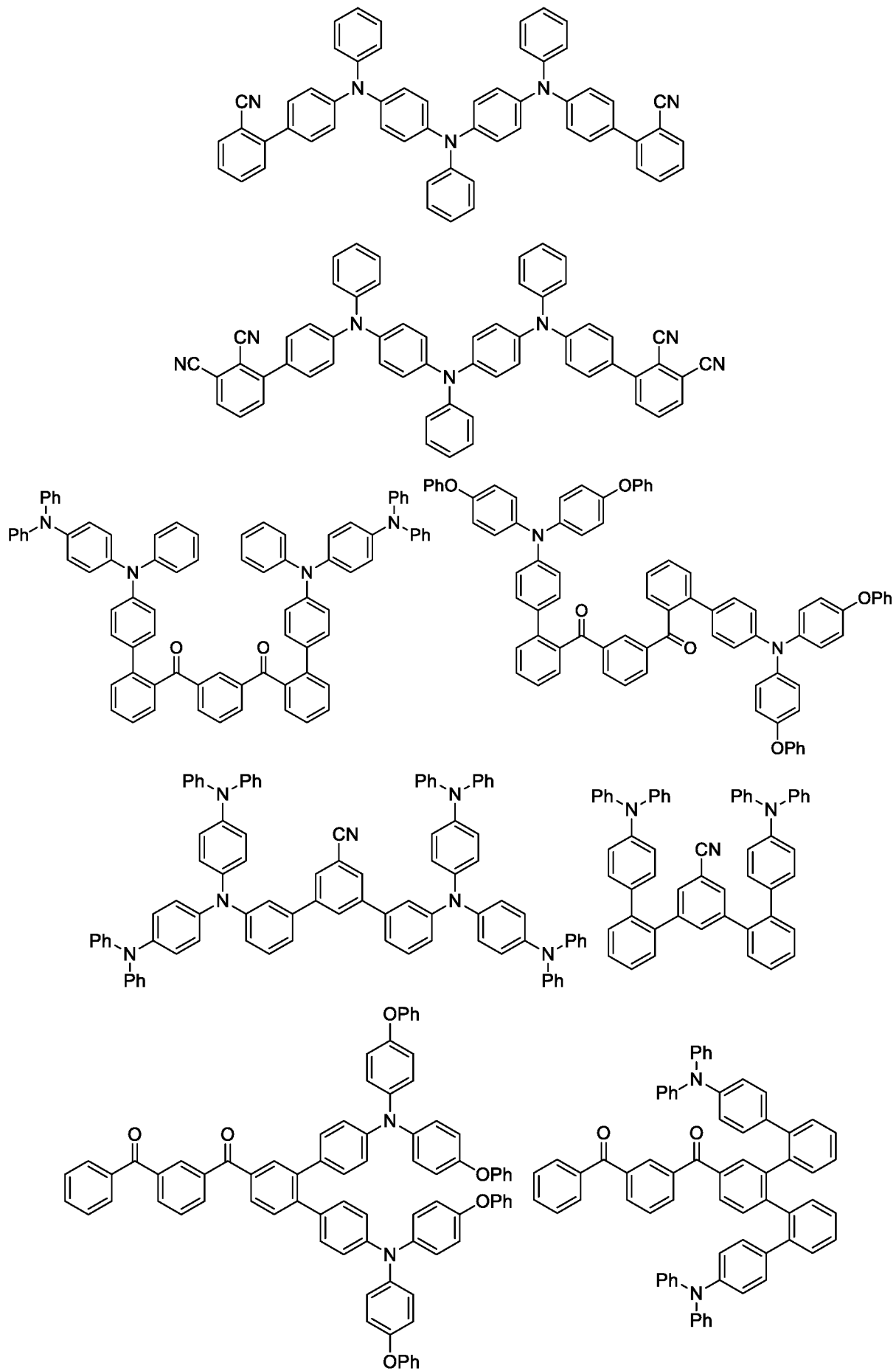


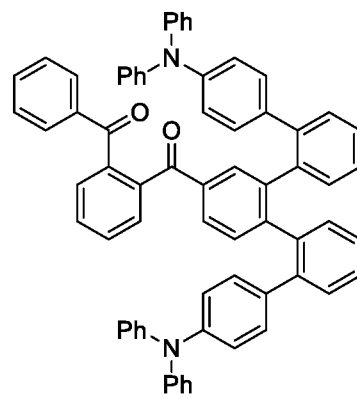
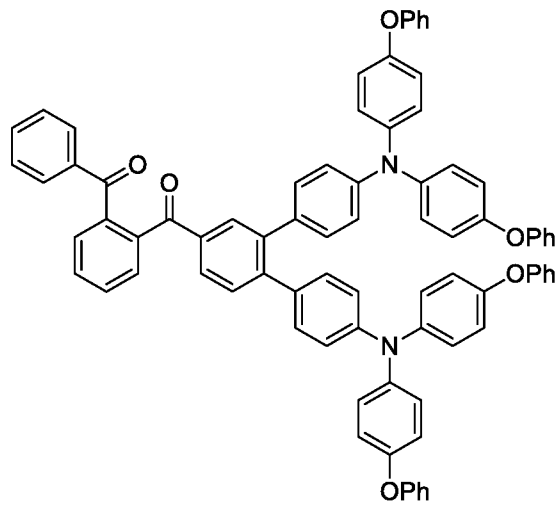
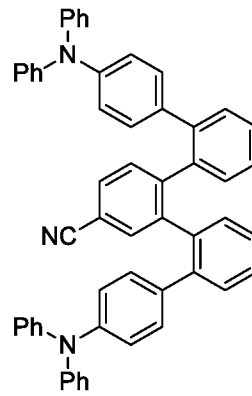
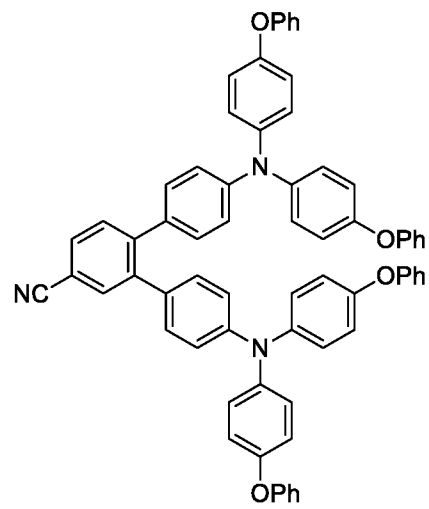
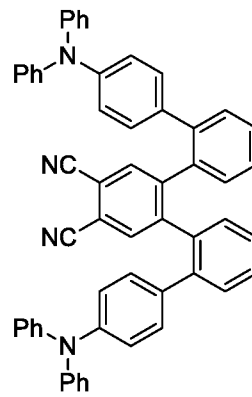
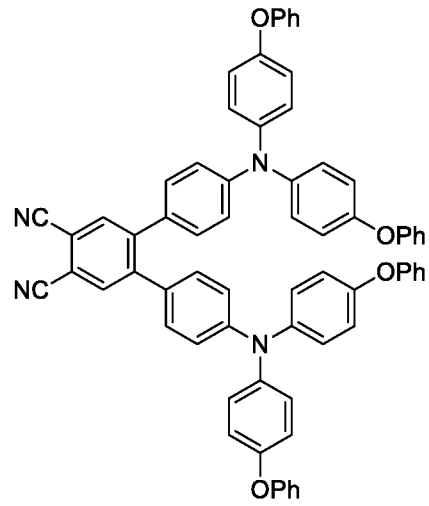
(0.119 eV)

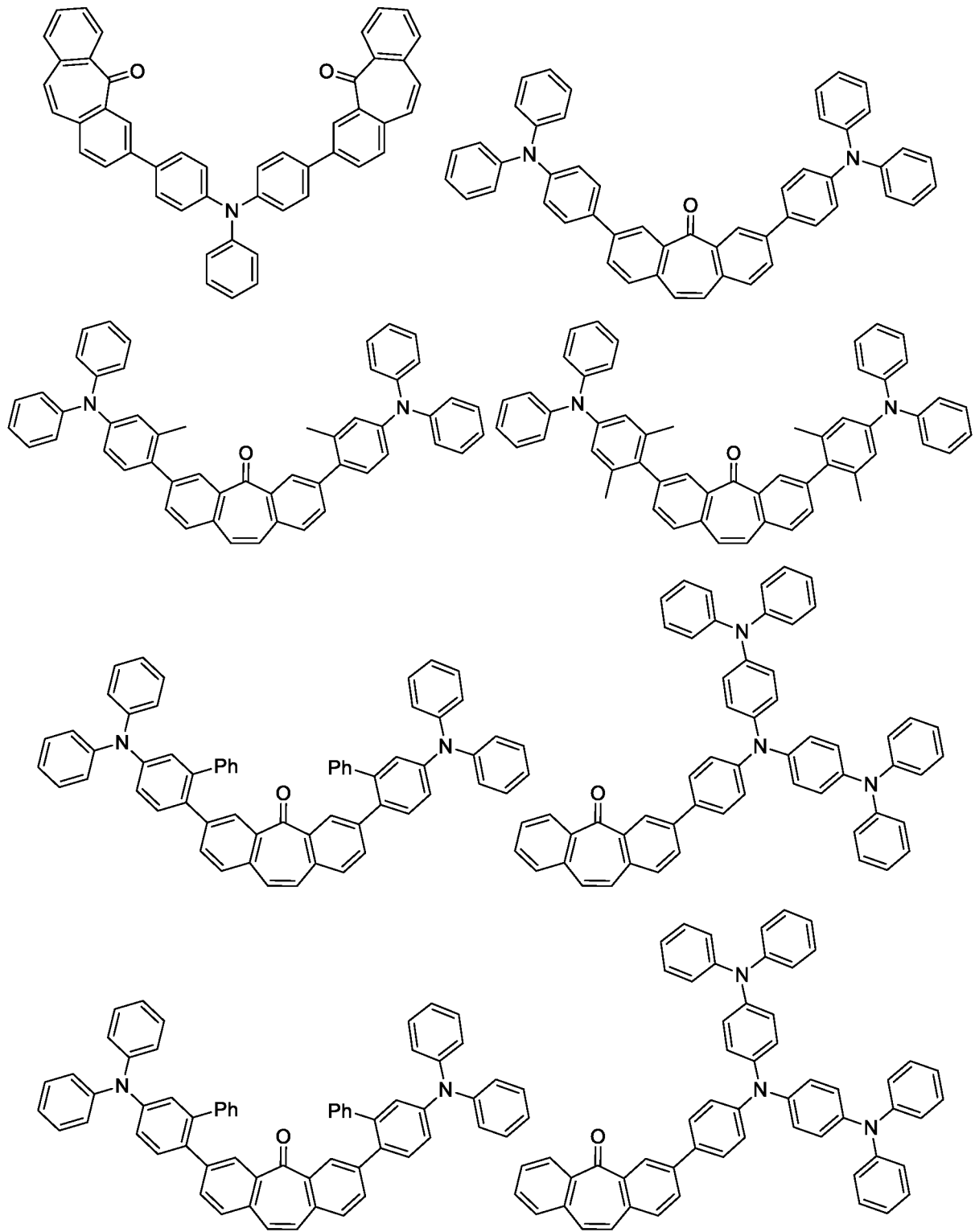


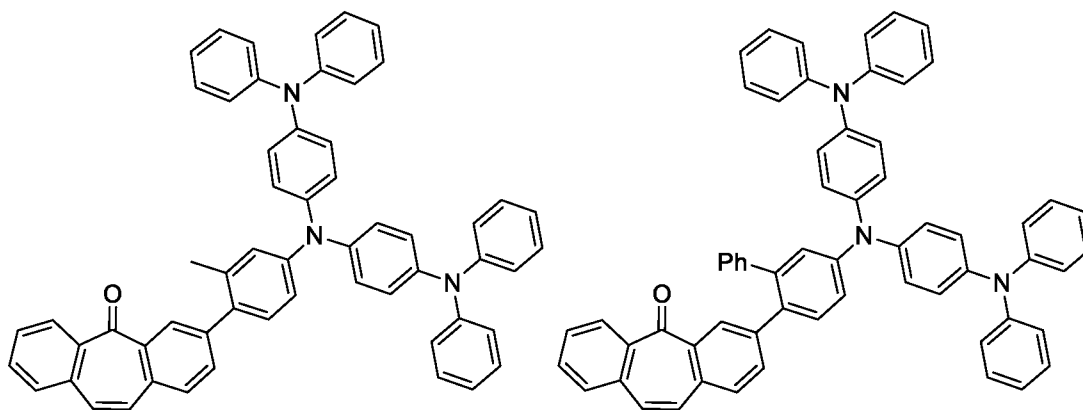












Beispiele weiterer erfindungsgemäßer organischer Moleküle, die durch Kombination der genannten Moleküleinheiten analog der obigen Beschreibung erhalten werden, sind in Tabelle 4 dargestellt. Die Benennung der Moleküle erfolgt nach dem Schema AF–S–AF, wobei die Benennung nach folgendem Schema erfolgte: Die Nummern rechts und links stehen für die chemischen Einheiten AF1 und AF2 aus Formel 1a, 2a oder 2b oder aus Tabelle 1 oder aus Tabelle 2; „S“ steht für eine direkte Bindung zwischen den chemischen Einheiten AF, wobei die Anknüpfung der einzelnen Einheiten AF über die in Tabelle 1 und Tabelle 2 mit Kleinbuchstaben definierten Positionen erfolgt.

Tabelle 4: Erfindungsgemäße organische Moleküle nach dem Schema AF1–S–AF2, wobei S die direkte Bindung zwischen AF1 und AF2 darstellt. In Klammern sind die Werte für Δ HOMO, Δ LUMO und Gap angegeben.

27 — S — 3 (1.14 1.51 1.61)	28 — S — 3 (1.20 1.78 1.34)	29 — S — 3 (0.96 1.50 1.61)	
46 — S — 3 (2.37 1.67 1.45)	56 — S — 3 (1.13 0.97 2.14)	61 — S — 3 (1.11 1.49 1.63)	62 — S — 3 (0.99 1.68 1.43)
68 — S — 3 (0.83 1.24 1.87)	83 — S — 3 (1.17 0.91 2.20)	85 — S — 3 (1.62 1.47 1.65)	86 — S — 3 (0.84 1.84 1.28)
			113 — S — 3 (1.28 2.21 0.91)
150 — S — 3 (2.70 1.79 1.32)	151 — S — 3 (2.61 2.05 1.06)	153 — S — 3 (2.64 1.89 1.22)	154 — S — 3 (2.17 1.02 2.09)
195 — S — 3 (1.88 1.23 1.88)		205 — S — 3 (1.11 1.35 1.76)	209 — S — 3 (0.82 0.90 2.21)
233 — S — 3 (1.49 1.44 1.67)	234 — S — 3 (1.31 1.53 1.59)	244 — S — 3 (1.37 1.44 1.68)	
286 — S — 3 (1.14 1.11 2.00)	288 — S — 3 (0.94 1.06 2.05)	297 — S — 3 (1.00 0.80 2.31)	311 — S — 3 (0.90 1.01 2.10)
332 — S — 3 (1.06 1.09 2.02)	358 — S — 3 (1.01 1.26 1.86)	370 — S — 3 (0.98 1.32 1.79)	371 — S — 3 (2.79 2.04 1.08)
28 — S — 4 (0.82 1.24 1.71)	36 — S — 4 (0.98 1.76 1.20)	37 — S — 4 (0.98 2.06 0.90)	
46 — S — 4 (1.99 1.13 1.83)	85 — S — 4 (1.24 0.93 2.02)	113 — S — 4 (0.90 1.68 1.28)	150 — S — 4 (2.33 1.26 1.70)
151 — S — 4 (2.23 1.52 1.44)	152 — S — 4 (2.88 1.82 1.14)	153 — S — 4 (2.26 1.36 1.60)	233 — S — 4 (1.11 0.91 2.05)
234 — S — 4 (0.93 0.99 1.97)	244 — S — 4 (1.00 0.90 2.06)	371 — S — 4 (2.42 1.50 1.45)	36 — S — 11 (1.13 1.25 1.05)
	113 — S — 11 (1.05 1.17 1.13)	151 — S — 11 (2.38 1.01 1.29)	152 — S — 11 (3.03 1.31 0.99)
153 — S — 11 (2.41 0.85 1.45)	371 — S — 11 (2.57 1.00 1.30)	28 — S — 12 (1.22 1.01 1.32)	
46 — S — 12 (2.39 0.90 1.43)	62 — S — 12 (1.01 0.92 1.41)	86 — S — 12 (0.86 1.07 1.26)	
150 — S — 12 (2.72 1.02 1.30)	151 — S — 12 (2.63 1.28 1.05)	153 — S — 12 (2.65 1.12 1.20)	371 — S — 12 (2.81 1.27 1.06)
27 — S — 22 (1.53 1.42 1.21)	28 — S — 22 (1.60 1.68 0.94)	29 — S — 22 (1.36 1.41 1.22)	40 — S — 22 (1.18 1.41 1.22)
46 — S — 22 (2.77 1.57 1.05)	56 — S — 22 (1.52 0.88 1.75)	61 — S — 22 (1.51 1.39 1.23)	62 — S — 22 (1.39 1.59 1.04)

68 — S — 22 (1.23 1.15 1.48)	83 — S — 22 (1.56 0.82 1.81)	85 — S — 22 (2.02 1.37 1.25)	
		123 — S — 22 (1.16 1.44 1.18)	150 — S — 22 (3.10 1.70 0.93)
154 — S — 22 (2.56 0.93 1.70)	195 — S — 22 (2.28 1.14 1.49)		205 — S — 22 (1.51 1.26 1.37)
209 — S — 22 (1.22 0.81 1.82)	233 — S — 22 (1.88 1.35 1.28)	234 — S — 22 (1.70 1.43 1.19)	244 — S — 22 (1.77 1.34 1.28)
	286 — S — 22 (1.54 1.02 1.61)	288 — S — 22 (1.33 0.97 1.66)	311 — S — 22 (1.29 0.92 1.71)
313 — S — 22 (1.17 0.96 1.67)	332 — S — 22 (1.46 1.00 1.63)	358 — S — 22 (1.40 1.16 1.46)	370 — S — 22 (1.37 1.23 1.40)
27 — S — 26 (1.53 1.88 1.22)	28 — S — 26 (1.59 2.14 0.95)	29 — S — 26 (1.35 1.87 1.23)	40 — S — 26 (1.17 1.87 1.23)
46 — S — 26 (2.76 2.03 1.06)	56 — S — 26 (1.51 1.34 1.76)	61 — S — 26 (1.50 1.85 1.24)	62 — S — 26 (1.38 2.05 1.04)
68 — S — 26 (1.22 1.61 1.48)	83 — S — 26 (1.55 1.28 1.82)	85 — S — 26 (2.01 1.83 1.26)	
		123 — S — 26 (1.16 1.90 1.19)	150 — S — 26 (3.09 2.16 0.93)
154 — S — 26 (2.56 1.39 1.70)		195 — S — 26 (2.27 1.60 1.50)	
205 — S — 26 (1.50 1.72 1.38)	209 — S — 26 (1.21 1.27 1.83)	233 — S — 26 (1.88 1.81 1.28)	234 — S — 26 (1.70 1.89 1.20)
244 — S — 26 (1.76 1.80 1.29)		286 — S — 26 (1.53 1.48 1.62)	288 — S — 26 (1.32 1.43 1.67)
297 — S — 26 (1.39 1.17 1.92)	303 — S — 26 (1.41 1.01 2.08)	311 — S — 26 (1.29 1.38 1.72)	313 — S — 26 (1.16 1.42 1.68)
332 — S — 26 (1.45 1.46 1.63)	358 — S — 26 (1.39 1.62 1.47)	370 — S — 26 (1.36 1.69 1.40)	27 — S — 91 (1.56 2.30 1.19)
28 — S — 91 (1.62 2.57 0.92)	29 — S — 91 (1.38 2.29 1.20)	40 — S — 91 (1.20 2.29 1.20)	46 — S — 91 (2.79 2.46 1.03)
56 — S — 91 (1.54 1.76 1.73)	61 — S — 91 (1.53 2.28 1.21)	62 — S — 91 (1.41 2.48 1.01)	68 — S — 91 (1.25 2.03 1.45)
83 — S — 91 (1.58 1.70 1.79)	85 — S — 91 (2.04 2.26 1.23)		
	123 — S — 91 (1.19 2.33 1.16)	150 — S — 91 (3.12 2.58 0.90)	154 — S — 91 (2.59 1.81 1.68)
	195 — S — 91 (2.30 2.02 1.47)		205 — S — 91 (1.53 2.14 1.35)
209 — S — 91 (1.24 1.69 1.80)	233 — S — 91 (1.91 2.23 1.25)	234 — S — 91 (1.73 2.32 1.17)	244 — S — 91 (1.79 2.23 1.26)
	286 — S — 91 (1.56 1.90 1.59)	288 — S — 91 (1.35 1.85 1.64)	297 — S — 91 (1.42 1.59 1.90)
303 — S — 91 (1.44 1.44 2.05)	311 — S — 91 (1.32 1.80 1.69)	313 — S — 91 (1.19 1.84 1.65)	332 — S — 91 (1.48 1.88 1.60)
358 — S — 91 (1.42 2.05 1.44)	370 — S — 91 (1.39 2.12 1.37)	27 — S — 128 (1.20 2.11 1.54)	28 — S — 128 (1.26 2.38 1.27)
29 — S — 128 (1.03 2.11 1.55)	40 — S — 128 (0.85 2.11 1.55)		46 — S — 128 (2.43 2.27 1.39)
56 — S — 128 (1.19 1.58 2.08)	61 — S — 128 (1.17 2.09 1.57)	62 — S — 128 (1.05 2.29 1.37)	68 — S — 128 (0.90 1.85 1.81)
83 — S — 128 (1.23 1.52 2.14)	85 — S — 128 (1.68 2.07 1.58)	86 — S — 128 (0.90 2.44 1.21)	
		123 — S — 128 (0.83 2.14 1.52)	150 — S — 128 (2.77 2.40 1.26)
151 — S — 128 (2.67 2.66 1.00)	153 — S — 128 (2.70 2.50 1.16)	154 — S — 128 (2.23 1.63 2.03)	
195 — S — 128 (1.95 1.83 1.82)		205 — S — 128 (1.18 1.95 1.70)	209 — S — 128 (0.89 1.50 2.15)
233 — S — 128 (1.55 2.05 1.61)	234 — S — 128 (1.37 2.13 1.53)	244 — S — 128 (1.44 2.04 1.62)	
286 — S — 128 (1.21 1.72 1.94)	288 — S — 128 (1.00 1.67 1.99)	297 — S — 128 (1.06 1.41 2.25)	303 — S — 128 (1.08 1.25 2.40)
311 — S — 128 (0.96 1.62 2.04)	313 — S — 128 (0.84 1.65 2.00)	332 — S — 128 (1.13 1.70 1.96)	358 — S — 128 (1.07 1.86 1.79)
370 — S — 128 (1.04 1.93 1.73)	371 — S — 128 (2.86 2.64 1.01)		
27 — S — 317 (1.13 1.52 1.61)	28 — S — 317 (1.20 1.78 1.34)	29 — S — 317 (0.96 1.51 1.62)	
46 — S — 317 (2.37 1.67 1.45)	56 — S — 317 (1.12 0.98 2.15)	61 — S — 317 (1.11 1.49 1.63)	62 — S — 317 (0.99 1.69 1.43)
68 — S — 317 (0.83 1.25 1.88)	83 — S — 317 (1.16 0.92 2.21)	85 — S — 317 (1.62 1.47 1.65)	86 — S — 317 (0.83 1.84 1.28)
	1		113 — S — 317 (1.27 2.22 0.91)
150 — S — 317 (2.70 1.80 1.33)	151 — S — 317 (2.61 2.06 1.07)	153 — S — 317 (2.63 1.90 1.22)	154 — S — 317 (2.16 1.03 2.10)
195 — S — 317 (1.88 1.24 1.89)		205 — S — 317 (1.11 1.36 1.77)	209 — S — 317 (0.82 0.91 2.22)
233 — S — 317 (1.48 1.45 1.68)	234 — S — 317 (1.30 1.53 1.59)	244 — S — 317 (1.37 1.44 1.68)	
286 — S — 317 (1.14 1.12 2.01)	288 — S — 317 (0.93 1.07 2.06)	297 — S — 317 (0.99 0.81 2.32)	311 — S — 317 (0.89 1.02 2.11)
332 — S — 317 (1.06 1.10 2.03)	358 — S — 317 (1.00 1.26 1.86)	370 — S — 317 (0.97 1.33 1.79)	371 — S — 317 (2.79 2.05 1.08)

In einer weiteren Ausführungsform weisen erfindungsgemäße organische Moleküle eine oder mehrere Einheit(en) AF1 auf, die ausgewählt sind aus den Strukturen 40, 61, 62, 68, 86, 113, 123, 150, 151, 152, 153, 154, 205, 209, 244, 286, 288, 297, 303, 311, 313, 332, 358, 370, 371 der Tabelle 2;

wobei die jeweils andere(n) Einheit(en) AF2 ausgewählt sind aus den Strukturen der Tabelle 1.

Insbesondere die Verwendung von Strukturen nach den Formeln 1a, 2a oder 2e oder aus Tabelle 1 und die Verwendung von Strukturen nach den Formeln 1b oder 2f bis 2z oder aus

Tabelle 2 unterscheidet die erfindungsgemäßen organischen Moleküle funktionell von Molekülen gemäß dem Stand der Technik. Durch die enthaltenen Anknüpfungsmuster stehen die beiden pi-Systeme von AF1 und AF2 nicht in Konjugation, sind aber dennoch in enger räumlicher Nähe fixiert.

Anhand spektroskopischer Auswahlregeln (symmetrische Moleküle) oder durch Messung des Extinktionskoeffizienten (UV/VIS-Spektroskopie) oder anhand quantenchemischer Berechnung der Oszillatorstärke kann vorhergesagt werden, ob ein quantenmechanischer Übergang erlaubt ist. Je größer die Oszillatorstärke, desto eher ist ein Übergang erlaubt und desto schneller ist der damit verbundene Prozess (Abklingdauer). Angestrebt sind Abklingdauern von $< 300 \mu\text{s}$, insbesondere $< 100 \mu\text{s}$ oder von $< 50 \mu\text{s}$. Bei einer langen Abklingdauer des (organischen) Emitters kommt es bei hohen Stromstärken schnell zu Sättigungseffekten, was die Bauteillebensdauer negativ beeinflusst und die Erreichung hoher Helligkeiten verhindert.

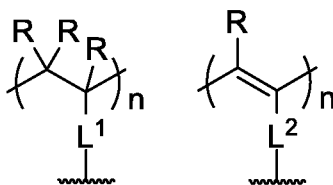
Ein Maß für die Abklingdauer ist der $\Delta E(S_1-T_1)$ -Abstand. Dieser wird durch die Überlappung von HOMO und LUMO beeinflusst. Die Größe des quantenmechanischen Überlappungsintegrals, welche nach oben genannter DFT-Methode berechenbar ist, kann gezielt gesteuert werden. Kommt es zur völligen Trennung von HOMO und LUMO hat dieses einen Wert von 0. Die Wahrscheinlichkeit einer effizienten Emission des organischen Moleküls sinkt drastisch. Bei einem Wert von 1 liegt nicht mehr verzögerte Fluoreszenz (TADF) sondern spontane Emission vor.

In einer Ausführungsform werden an die chemisch substituierbaren Positionen der so erhaltenen organischen Moleküle weitere Reste R angefügt, um die Löslichkeit der Emitter zu steigern und/oder die Polymerisierbarkeit zu ermöglichen ohne dabei die elektronischen Eigenschaften des Moleküls signifikant zu verändern, sodass auch bei Verwendung von R ein Emitter vorliegt, wobei

jedes R ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Deuterium, Phenyl, Naphthyl, F, Cl, Br, I, $N(R^2)_2$, -CN, -NC, -SCN, $-CF_3$, $-NO_2$, -OH, $C(=O)OH$, $C(=O)OR^3$, $C(=O)N(R^3)_2$, $C(=O)SR^3$, $C(=S)SR^3$, $Si(R^4)_3$, $B(OR^5)_2$, $B(N(R^6)_2)_2$, $C(=O)R^3$, $P(=O)(R^7)_2$, $As(=O)(R^7)_2$, $P(=S)(R^7)_2$, $As(=S)(R^7)_2$, $S(=O)R^3$, $S=NR^3$, $S(=O)NR^3$, $S(=O)_2NR^3$, $S(=O)_2R^3$, $O-S(=O)_2R^3$, SF_5 , eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^9 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere benachbarte CH_2 -Gruppen durch $-R^9C=CR^9-$, $-C\equiv C-$, bzw. eine benachbarte CH_2 -Gruppe durch $-Si(R^4)_2-$, $-Ge(R^4)_2-$, $-Sn(R^4)_2-$, -

C(=O)-, -C(=S)-, -C(=Se)-, -C=N-, -C(=O)O-, -C(=O)N(R³)-, -P(=O)(R⁷)-, -As(=O)(R⁷)-, -P(=S)(R⁷)-, -As(=S)(R⁷)-, -S(=O)-, -S(=O)₂-, -NR²-, -O-, oder -S- ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF₃ oder NO₂ ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R² substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R⁹ substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R⁹ substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R auch miteinander ein monozyklisches aliphatisches Ringsystem mit insgesamt fünf oder sechs Ringgliedern bilden. Für R² bis R⁹ gelten die bei Formel 1 angegebenen Definitionen.

Polymerisierbare Reste sind solche Reste, die polymerisierbare funktionelle Einheiten tragen, die mit sich selbst homopolymerisiert oder mit anderen Monomeren copolymerisiert werden können. Somit können die erfindungsgemäßen Moleküle als Polymer mit folgenden Wiederholungseinheiten der Formeln 4 und 5 erhalten werden, die als Polymere in der lichtemittierenden Schicht des optoelektronischen Bauelements Verwendung finden können.

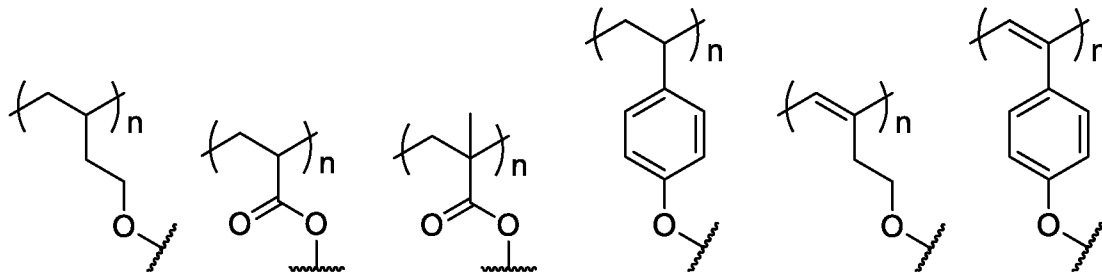


Formel 4

Formel 5

In Formel 4 und 5 stehen L1 und L2 für gleiche oder verschiedene Linkergruppen, die 0 bis 20, insbesondere 1 bis 15, oder 2 bis 10 Kohlenstoffatome aufweist, und wobei die gewellte Linie die Position kennzeichnet, über die die Linkergruppe an das organische Molekül der Formel 1 angebunden ist. In einer Ausführungsform weist die Linkergruppe L1 und/oder L2 eine Form -X-L3- auf, wobei X für O oder S steht und L3 für eine Linkergruppe ausgewählt aus der Gruppe aus einer substituierten und unsubstituierten Alkylengruppe (linear, verzweigt oder cyclisch) und einer substituierten und unsubstituierten Arylengruppe, insbesondere eine substituierte oder unsubstituierte Alkylengruppe mit 1 bis 10 Kohlenstoffatomen oder eine substituierte oder unsubstituierte Phenylengruppe, wobei auch Kombinationen möglich sind. In einer weiteren Ausführungsform weist die Linkergruppe L1 und/oder L2 eine Form -C(=O)O- auf.

Ausführungsformen der Wiederholungseinheiten sind Strukturen der Formeln 6 bis 11:



Formel 6

Formel 7

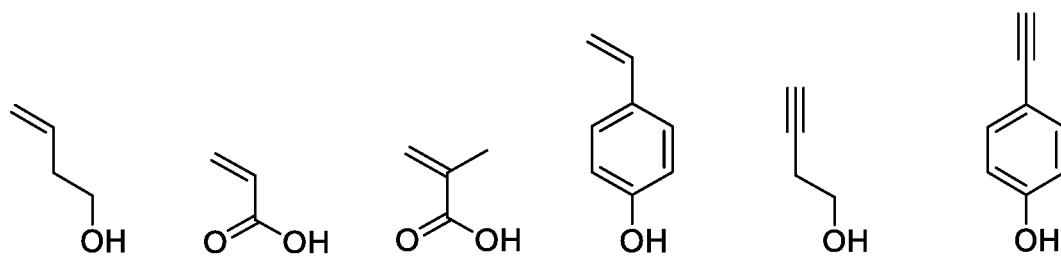
Formel 8

Formel 9

Formel 10

Formel 11

Zur Herstellung der Polymere, die die Wiederholungseinheiten gemäß Formel 6 bis 11 aufweisen, werden die polymerisierbaren funktionellen Einheiten über eine Linkergruppe der Formeln 12 bis 17, die eine Hydroxyleinheit aufweisen, an ein organisches Molekül der Formel 1 angebunden und die daraus resultierenden Verbindungen mit sich selbst homopolymerisiert oder mit anderen geeigneten Monomeren copolymerisiert.



Formel 12

Formel 13

Formel 14

Formel 15

Formel 16

Formel 17

Polymere, die eine Einheit gemäß Formel 4 oder Formel 5 aufweisen, können dabei entweder ausschließlich Wiederholungseinheiten mit einer Struktur der allgemeinen Formel 4 oder 5, oder Wiederholungseinheiten mit einer anderen Struktur aufweisen. Beispiele von Wiederholungseinheiten mit anderen Strukturen weisen Einheiten auf, die sich aus entsprechenden Monomeren ergeben, die typischerweise in Copolymerisationen eingesetzt oder verwendet werden. Beispiele für derartige Wiederholungseinheiten, die sich aus Monomeren ergeben, sind Wiederholungseinheiten, die ungesättigte Einheiten wie Ethylen oder Styrol aufweisen.

Eine Ausführungsform der Erfindung betrifft organischen Moleküle, welche

- einen $\Delta E(S_1-T_1)$ -Wert zwischen dem untersten angeregten Singulett (S_1)- und dem darunter liegenden Triplett (T_1)-Zustand von kleiner als 0,2 eV, insbesondere kleiner als 0,1 eV aufweisen und/oder
- eine Emissionslebensdauer von höchstens 50 μs aufweisen.

Die Erfindung betrifft in einem Aspekt die Verwendung eines erfindungsgemäßen organischen Moleküls als lumineszierender Emitter und/oder als Hostmaterial und/oder als Elektronentransportmaterial und/oder als Lochinjektionsmaterial und/oder als Lochblockiermaterial in einem optoelektronischen Bauelement, das insbesondere durch ein Vakuumverdampfungsverfahren oder aus Lösung hergestellt wird, wobei das optoelektronische Bauelement insbesondere ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus:

- organischen lichtemittierenden Dioden (OLEDs),
- lichtemittierenden elektrochemischen Zellen,
- OLED-Sensoren, insbesondere in nicht hermetisch nach außen abgeschirmten Gas- und Dampf-Sensoren,
- organischen Dioden
- organischen Solarzellen,
- organischen Transistoren,
- organischen Feldeffekttransistoren,
- organischen Lasern und
- Down-Konversions-Elementen.

Der Anteil des erfindungsgemäßen organischen Moleküls am lumineszierenden Emitter und/oder Hostmaterial und/oder Elektronentransportmaterial und/oder Lochinjektionsmaterial und/oder Lochblockiermaterial beträgt in einer Ausführungsform 1 % bis 99 % (Gew%), insbesondere beträgt der Anteil am Emitter in optischen Licht emittierenden Bauelementen, insbesondere in OLEDs, zwischen 5 % und 80 %.

Die Erfindung betrifft in einem weiteren Aspekt optoelektronische Bauelemente, aufweisend ein erfindungsgemäßes organisches Molekül, wobei das optoelektronische Bauelement insbesondere ausgeformt ist als ein Bauelement ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus organischer lichtemittierender Diode (OLED), Licht-emittierender elektrochemischer Zelle, OLED-Sensor, insbesondere in nicht hermetisch nach außen abgeschirmten Gas- und Dampf-Sensoren, organischer Diode, organischer Solarzelle, organischem Transistor, organischem Feldeffekttransistor, organischem Laser und Down-Konversion-Element.

Eine Ausführungsform betrifft das erfindungsgemäße optoelektronische Bauelement aufweisend ein Substrat, eine Anode und eine Kathode, wobei die Anode und die Kathode auf das Substrat aufgebracht sind, und mindestens eine lichtemittierende Schicht, welche zwischen Anode und Kathode angeordnet ist und die ein erfindungsgemäßes organisches Molekül enthält.

In einer weiteren Ausführungsform des Bauelements wird das organische Molekül als Emissionsmaterial in einer Emissionsschicht eingesetzt, wobei sie in Kombination mit mindestens einem Hostmaterial oder insbesondere als Reinschicht eingesetzt werden kann. In einer Ausführungsform beträgt dabei der Anteil des organischen Moleküls als Emissionsmaterial in einer Emissionsschicht in optischen Licht-emittierenden Bauelementen, insbesondere in OLEDs, zwischen 5 % und 80 % (Gew%).

In einer weiteren Ausführungsform des erfindungsgemäßen Bauelements ist die ein erfindungsgemäßes organisches Molekül aufweisende lichtemittierende Schicht auf ein Substrat aufgebracht.

In einer Ausführungsform betrifft die Erfindung ein optoelektronisches Bauelement, bei dem die lichtemittierende Schicht ausschließlich ein erfindungsgemäßes organisches Molekül in 100 % Konzentration aufweist, wobei die Anode und die Kathode auf das Substrat aufgebracht ist, und die lichtemittierende Schicht zwischen Anode und Kathode aufgebracht ist.

In einer weiteren Ausführungsform weist das optoelektronische Bauelement neben dem erfindungsgemäßen organischen Molekül mindestens ein Hostmaterial auf, wobei insbesondere der angeregte Singulettzustand (S_1) und/oder der angeregte Triplettzustand (T_1) des mindestens einen Hostmaterials höher ist als der angeregte Singulettzustand (S_1) und/oder der angeregte Triplettzustand (T_1) des organischen Moleküls, und wobei die Anode und die Kathode auf das Substrat aufgebracht ist, und die lichtemittierende Schicht zwischen Anode und Kathode aufgebracht ist.

In einer weiteren Ausführungsform weist das optoelektronische Bauelement ein Substrat, eine Anode, eine Kathode und mindestens je eine löcherinjizierende und eine elektroneninjizierende Schicht und mindestens eine lichtemittierende Schicht auf, wobei die mindestens eine lichtemittierende Schicht ein erfindungsgemäßes organisches Molekül und ein Hostmaterial aufweist, dessen Triplett (T_1)- und Singulett (S_1)-Energieniveaus energetisch höher liegen als die Triplett (T_1)- und Singulett (S_1)-Energieniveaus des organischen Moleküls, und wobei die Anode und die Kathode auf das Substrat aufgebracht ist, und die löcher- und elektroneninjizierende Schicht zwischen Anode und Kathode aufgebracht ist und die lichtemittierende Schicht zwischen löcher- und elektroneninjizierende Schicht aufgebracht ist.

In einer weiteren Ausführungsform weist das optoelektronische Bauelement ein Substrat, eine Anode, eine Kathode und mindestens je eine löcherinjizierende und eine elektroneninjizierende Schicht, und mindestens je eine löchertransportierende und eine elektronentransportierende Schicht, und mindestens eine lichtemittierende Schicht auf, wobei die mindestens eine lichtemittierende Schicht ein erfindungsgemäßes organisches Molekül sowie ein Hostmaterial aufweist, dessen Triplett (T_1)- und Singulett (S_1)-Energieniveaus energetisch höher liegen als die Triplett (T_1)- und Singulett (S_1)-Energieniveaus des organischen Moleküls, und wobei die Anode und die Kathode auf das Substrat aufgebracht ist, und die löcher- und elektroneninjizierende Schicht zwischen Anode und Kathode aufgebracht ist, und die löcher- und elektronentransportierende Schicht zwischen löcher- und elektroneninjizierende Schicht aufgebracht ist, und die lichtemittierende Schicht zwischen löcher- und elektronentransportierende Schicht aufgebracht ist.

In einer weiteren Ausführungsform weist das optoelektronische Bauelement mindestens ein Hostmaterial aus einem Material gemäß Formel 1 auf.

In einer weiteren Ausführungsform des optoelektronischen Bauelements beinhaltet die lichtemittierende Schicht fluoreszente oder phosphoreszente Materialien, welche eine Struktur der Formel 1 aufweisen.

In einer weiteren Ausführungsform des optoelektronischen Bauelements bilden ein organisches Molekül gemäß Formel 1 und ein funktionelles Material, beispielsweise in Form eines weiteren Emitter-Materials, eines Host-Materials, oder eines weiteren organischen Moleküls, welches zur Bildung eines Exciplex mit dem Molekül gemäß Formel 1 befähigt ist, einen Exciplex. Funktionelle Materialien sind beispielsweise Hostmaterialien wie MCP, Elektronentransportmaterialien wie TPBI und Lochtransportmaterialien wie NPD oder MTDATA. Exciplexe sind Addukte aus elektronisch angeregten Molekülen und solchen im elektronischen Grundzustand, die zur Lichtemission fähig sind.

In einer weiteren Ausführungsform des optoelektronischen Bauelements ist die Emission durch thermisch aktivierte verzögerte Fluoreszenz (TADF) charakterisiert.

In einer weiteren Ausführungsform des optoelektronischen Bauelements werden organische Moleküle gemäß Formel 1 als Ladungstransportschicht verwendet.

Die Erfindung betrifft in einem Aspekt ein lichtemittierendes Material, aufweisend ein erfindungsgemäßes organisches Molekül und ein Hostmaterial, wobei die Triplett (T_1)- und Singulett (S_1)-Energieniveaus des Hostmaterials energetisch höher liegen als die Triplett (T_1)- und Singulett (S_1)-Energieniveaus des organischen Moleküls, und wobei das

organische Molekül Fluoreszenz oder thermisch aktivierte verzögerte Fluoreszenz (TADF) emittiert, und einen $\Delta E(S_1-T_1)$ -Wert zwischen dem untersten angeregten Singulett (S_1)- und dem darunter liegenden Triplett (T_1)-Zustand von kleiner als 0,2 eV, insbesondere kleiner als 0,1 eV aufweist.

Ein Aspekt der Erfindung betrifft ein Verfahren zur Herstellung eines optoelektronischen Bauelements aufweisend ein erfindungsgemäßes organisches Molekül. In einer Ausführungsform weist das Verfahren die Verarbeitung des organischen Moleküls mittels eines Vakuumverdampfungsverfahrens oder aus einer Lösung auf.

In einer Ausführungsform weist das Verfahren den Schritt des Aufbringens des organischen Moleküls auf einen Träger auf, wobei das Aufbringen insbesondere nass-chemisch, mittels kolloidaler Suspension oder mittels Sublimation erfolgt.

In einer weiteren Ausführungsform des Verfahrens wird mindestens eine Schicht

- mit einem Sublimationsverfahren beschichtet
- mit einem OVPD (Organic Vapor Phase Deposition) Verfahren beschichtet
- mit Hilfe einer Trägergassublimation beschichtet oder
- aus Lösung oder mit einem beliebigen Druckverfahren hergestellt.

Ein Aspekt der Erfindung betrifft ein Verfahren zur Veränderung der Emissions- und/oder Absorptionseigenschaften eines elektronischen Bauelements, wobei ein erfindungsgemäßes organisches Molekül in ein Matrixmaterial zur Leitung von Elektronen oder Löchern in einem optoelektronischen Bauelement eingebracht wird.

Die Erfindung betrifft zudem in einem weiteren Aspekt die Verwendung eines erfindungsgemäßen Moleküls zur Umwandlung von UV-Strahlung oder von blauem Licht in sichtbares Licht, insbesondere in grünes, gelbes oder rotes Licht (Down-Konversion), insbesondere in einem optoelektronischen Bauelement der hier beschriebenen Art.

In einem weiteren Aspekt betrifft die Erfindung eine Anwendung, in der mindestens ein Material mit einer Struktur gemäß Formel 1 durch äußere energetische Anregung zum Leuchten angeregt wird. Die äußere Anregung kann elektronisch oder optisch oder radioaktiv sein.

Beispiele

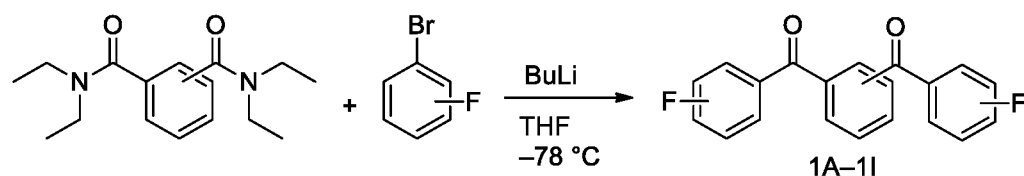
Berechnungen nach der Dichtefunktionaltheorie

Variante 1 (BP86)

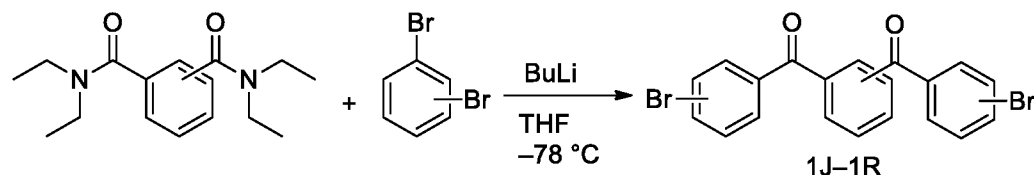
Für die DFT-Rechnungen (Dichtefunktionaltheorie) wurde das BP86-Funktional (Becke, A. D. Phys. Rev. A1988, 38, 3098–3100; Perdew, J. P. Phys. Rev. B1986, 33, 8822–8827) und def2-SV(P)-Basissätze (Weigend, F.; Ahlrichs, R. Phys. Chem. Chem. Phys. 2005, 7, 3297–3305; Rappoport, D.; Furche, F. J. Chem. Phys. 2010, 133, 134105/1–134105/11) verwendet. Zur numerischen Integration kam das m4-Grid zum Einsatz und die resolution-of-identity-Näherung (RI) (Häser, M.; Ahlrichs, R. J. Comput. Chem. 1989, 10, 104–111; Weigend, F.; Häser, M. Theor. Chem. Acc. 1997, 97, 331–340; Sierka, M.; Hogeckamp, A.; Ahlrichs, R. J. Chem. Phys. 2003, 118, 9136–9148) wurde in allen Rechnungen verwendet. Die DFT-Rechnungen wurden mit dem Turbomole-Programmpaket (Version 6.5) (TURBOMOLE V6.4 2012, University of Karlsruhe und Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 1989–2007, TURBOMOLE GmbH, seit 2007; <http://www.turbomole.com>) durchgeführt.

Variante 2 (TD-B3LYP)

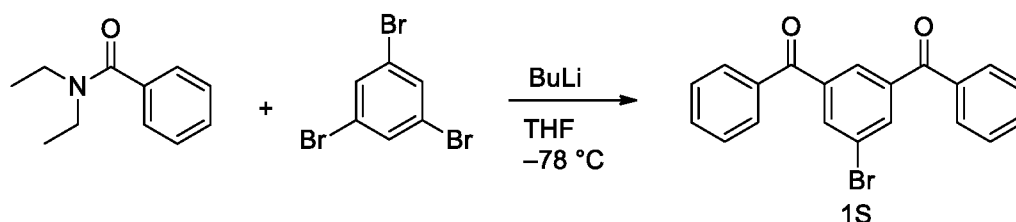
Für die Optimierung der Molekülstrukturen wurde das BP86-Funktional (Becke, A. D. Phys. Rev. A1988, 38, 3098–3100; Perdew, J. P. Phys. Rev. B1986, 33, 8822–8827) verwendet, wobei die resolution-of-identity-Näherung (RI) (Sierka, M.; Hogeckamp, A.; Ahlrichs, R. J. Chem. Phys. 2003, 118, 9136–9148; Becke, A.D. , J.Chem.Phys. 98 (1993) 5648-5652; Lee, C; Yang, W; Parr, R.G. Phys. Rev. B 37 (1988) 785-789) zum Einsatz kam. Anregungsenergien wurden bei der mit BP86 optimierten Struktur mit der Time-Dependent DFT-Methode (TD-DFT) unter Verwendung des B3LYP-Funktional (Becke, A.D. , J.Chem.Phys. 98 (1993) 5648-5652; Lee, C; Yang, W; Parr, R.G. Phys. Rev. B 37 (1988) 785-789; Vosko, S. H.; Wilk, L.; Nusair, M. Can. J. Phys. 58 (1980) 1200-1211; Stephens, P. J.; Devlin, F. J.; Chabalowski, C. F. ; Frisch, M. J. J.Phys.Chem. 98 (1994) 11623-11627) berechnet. In allen Rechnungen wurden def2-SV(P)-Basissätze (Weigend, F.; Ahlrichs, R. Phys. Chem. Chem. Phys. 2005, 7, 3297–3305; Rappoport, D.; Furche, F. J. Chem. Phys. 2010, 133, 134105/1–134105/11) und ein m4 -Grid zur numerischen Integration verwendet. Alle DFT-Rechnungen wurden mit dem Turbomole-Programmpaket (Version 6.5) (TURBOMOLE V6.4 2012, University of Karlsruhe und Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 1989–2007, TURBOMOLE GmbH, seit 2007; <http://www.turbomole.com>) durchgeführt.

Synthesevorschriften:*Fluorierte Diketon-Vorläufer 1A–1I:*

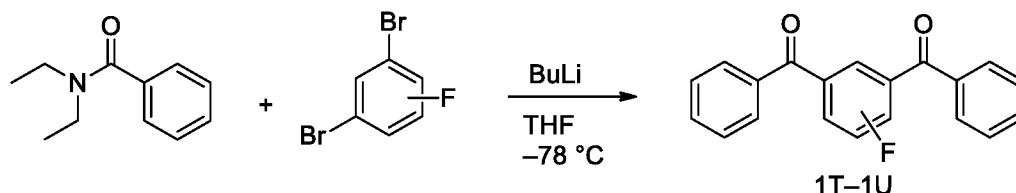
Eine Lösung des entsprechenden Bromfluorbenzolderivats (2,1 Äquiv.) in absolutem THF wird bei -78 °C mit BuLi (2,1 Äquiv.) versetzt und das resultierende Gemisch bei -78 °C gerührt. Nach 2 h wird eine Lösung des Biscarboxamids (1 Äquiv.) in absolutem THF bei -78 °C langsam zutropft. Das Kühlbad wird entfernt und der Reaktionsfortschritt per GC/MS verfolgt. Nach der Zugabe von Wasser und Ethylacetat werden die Phasen getrennt. Die wässrige Phase wird mit Ethylacetat extrahiert und die vereinigten organischen Phasen mit ges. NaCl-Lösung gewaschen. Die organische Phase wird über MgSO_4 getrocknet, filtriert und unter vermindertem Druck vom Lösungsmittel befreit. Die Reinigung erfolgt per MPLC oder Umkristallisation.

Bromierte Diketon-Vorläufer 1J–1R:

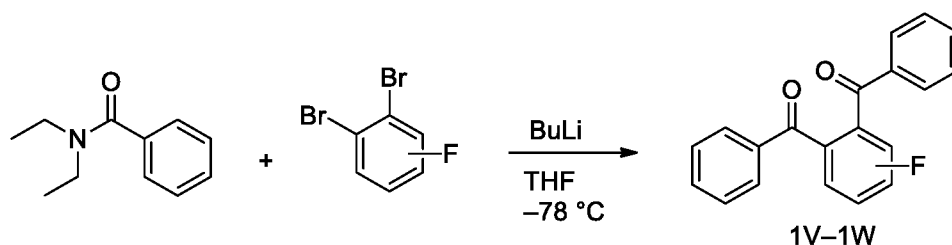
Eine Lösung des entsprechenden Dibrombenzolderivats (2,1 Äquiv.) in absolutem THF wird bei -78 °C mit BuLi (2,1 Äquiv.) versetzt und das resultierende Gemisch bei -78 °C gerührt. Nach 2 h wird eine Lösung des Biscarboxamids (1 Äquiv.) in absolutem THF bei -78 °C langsam zutropft. Das Kühlbad wird entfernt und der Reaktionsfortschritt per GC/MS verfolgt. Nach der Zugabe von Wasser und Ethylacetat werden die Phasen getrennt. Die wässrige Phase wird mit Ethylacetat extrahiert und die vereinigten organischen Phasen mit ges. NaCl-Lösung gewaschen. Die organische Phase wird über MgSO_4 getrocknet, filtriert und unter vermindertem Druck vom Lösungsmittel befreit. Die Reinigung erfolgt per MPLC oder Umkristallisation.

Diketon-Vorläufer 1S

Eine Lösung von 1,3,5-Tribrombenzol (1,0 Äquiv.) in absolutem THF wird bei -78 °C mit BuLi (2,0 Äquiv.) versetzt und das resultierende Gemisch bei -78 °C gerührt. Nach 2 h wird eine Lösung des Carboxamids (2,0 Äquiv.) in absolutem THF bei -78 °C langsam zugetropft. Das Kühlbad wird entfernt und der Reaktionsfortschritt per GC/MS verfolgt. Nach der Zugabe von Wasser und Ethylacetat werden die Phasen getrennt. Die wässrige Phase wird mit Ethylacetat extrahiert und die vereinigten organischen Phasen mit ges. NaCl-Lösung gewaschen. Die organische Phase wird über MgSO_4 getrocknet, filtriert und unter vermindertem Druck vom Lösungsmittel befreit. Die Reinigung erfolgt per MPLC oder Umkristallisation.

Diketon-Vorläufer 1T-1U

Eine Lösung des entsprechenden Dibromfluorbenzols (1,0 Äquiv.) in absolutem THF wird bei -78 °C mit BuLi (2,0 Äquiv.) versetzt und das resultierende Gemisch bei -78 °C gerührt. Nach 2 h wird eine Lösung des Carboxamids (2,0 Äquiv.) in absolutem THF bei -78 °C langsam zugetropft. Das Kühlbad wird entfernt und der Reaktionsfortschritt per GC/MS verfolgt. Nach der Zugabe von Wasser und Ethylacetat werden die Phasen getrennt. Die wässrige Phase wird mit Ethylacetat extrahiert und die vereinigten organischen Phasen mit ges. NaCl-Lösung gewaschen. Die organische Phase wird über MgSO_4 getrocknet, filtriert und unter vermindertem Druck vom Lösungsmittel befreit. Die Reinigung erfolgt per MPLC oder Umkristallisation.

Diketon-Vorläufer 1V–1W

Eine Lösung des entsprechenden Dibromfluorbenzols (1,0 Äquiv.) in absolutem THF wird bei -78 °C mit BuLi (2,0 Äquiv.) versetzt und das resultierende Gemisch bei -78 °C gerührt. Nach 2 h wird eine Lösung des Carboxamids (2,0 Äquiv.) in absolutem THF bei -78 °C langsam zutropft. Das Kühlbad wird entfernt und der Reaktionsfortschritt per GC/MS verfolgt. Nach der Zugabe von Wasser und Ethylacetat werden die Phasen getrennt. Die wässrige Phase wird mit Ethylacetat extrahiert und die vereinigten organischen Phasen mit ges. NaCl-Lösung gewaschen. Die organische Phase wird über MgSO_4 getrocknet, filtriert und unter vermindertem Druck vom Lösungsmittel befreit. Die Reinigung erfolgt per MPLC oder Umkristallisation.

AAV1: Allgemeine Synthesevorschrift für Nucleophile Aromatische Substitution

Unter Schutzgasatmosphäre werden das entsprechende Arylfluorid und das entsprechende Amin im gewünschten stöchiometrischen Verhältnis sowie K_3PO_4 (2 mmol pro mmol Amin) vorgelegt. Nach der Zugabe von absolutem DMSO wird das Gemisch bis zur vollständigen Umsetzung auf 120 °C erhitzt. Nach Abkühlen auf RT werden durch Zugabe von Wasser die organischen Komponenten ausgefällt und anschließend abfiltriert und mit Wasser gewaschen. Der Rückstand wird durch Umkristallisation gereinigt.

AAV2: Hartwig-Buchwald-Aminierung

Unter Schutzgasatmosphäre werden das entsprechende Arylbromid oder -Iodid und das entsprechende Amin im gewünschten stöchiometrischen Verhältnis sowie NaOtBu (1,5 mmol pro mmol Äquiv.), PdOAc_2 (0,05 Äquiv.) und $\text{P}(t\text{Bu})_3$ (0,1 Äquiv.) in absolutem Toluol suspendiert. Das Gemisch wird 24 h unter Rückfluss erhitzt. Nach dem Abkühlen auf RT wird das Reaktionsgemisch mit dem gleichen Volumen Ethylacetat versetzt und 3x mit Wasser extrahiert. Die organische Phase wird über MgSO_4 getrocknet und anschließend filtriert. Nach Entfernen des Lösungsmittels wird der Rückstand durch Umkristallisation oder per MPLC gereinigt.

AAV3: Suzuki-Kupplung

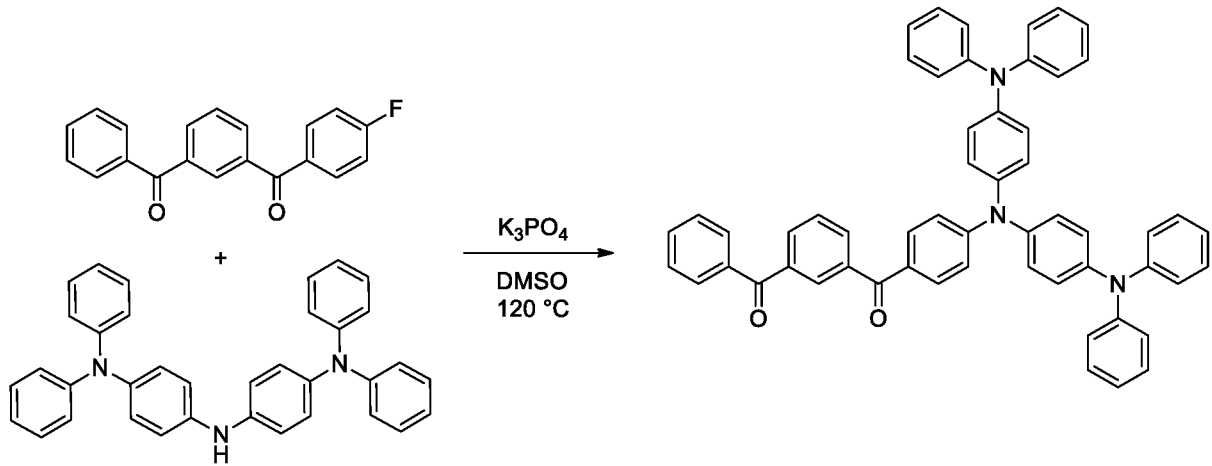
Unter Schutzgasatmosphäre werden das entsprechende Arylbromid und die entsprechende Arylboronsäure in gewünschtem stöchiometrischen Verhältnis sowie Na_2CO_3 (2,5 mmol pro mmol Boronsäure) und $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0,02 mmol pro mmol Arylbromid) in 1,2-Dimethoxyethan (10 mL pro mmol Arylbromid) suspendiert. Nach Zugabe von absolutem EtOH (0,3 mL pro mmol Arylbromid) und entgastem Wasser (0,3 mL pro mmol Arylbromid) wird das Gemisch 4–12 h auf 90 °C erhitzt. Nach Abkühlen auf RT werden dem Gemisch gleiche Volumen Wasser und Ethylacetat zugesetzt und die Phasen getrennt. Die wässrige Phase wird 3x mit Ethylacetat extrahiert und die organischen Phasen vereinigt. Die organische Phase wird mit ges. NaCl-Lösung gewaschen, über MgSO_4 getrocknet und filtriert. Unter vermindertem Druck wird das Lösungsmittel entfernt und der Rückstand durch Umkristallisation oder per MPLC gereinigt.

AAV4: Einführung von Cyanogruppen

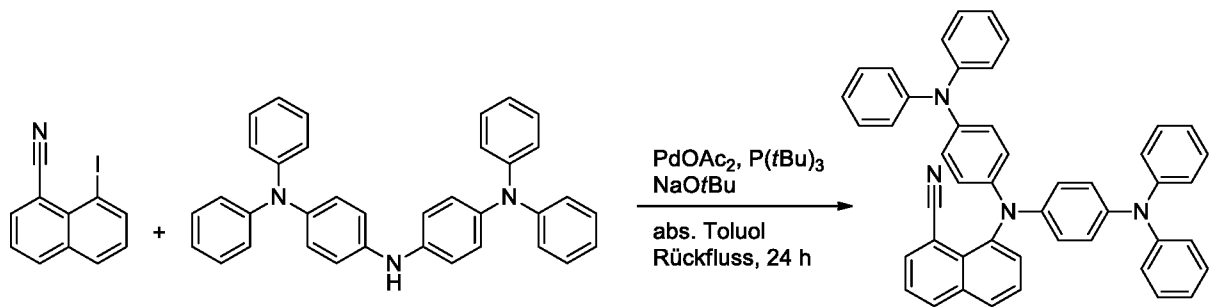
Unter Schutzgasatmosphäre werden das entsprechende Arylbromid oder -Iodid und CuCN im gewünschtem stöchiometrischen Verhältnis (1,25 mmol CuCN pro mmol zu substituierendem Halogenidatom) in absolutem DMF suspendiert. Das Gemisch wird bis zur vollständigen Umsetzung auf 150 °C erhitzt. Nach Abkühlen auf RT werden durch Zugabe von Dichlormethan die enthaltenen Kupfersalze ausgefällt und anschließend abfiltriert. Das Filtrat wird unter vermindertem Druck vom Lösungsmittel befreit und der Rückstand durch Umkristallisation oder per MPLC gereinigt.

Beispielmoleküle:

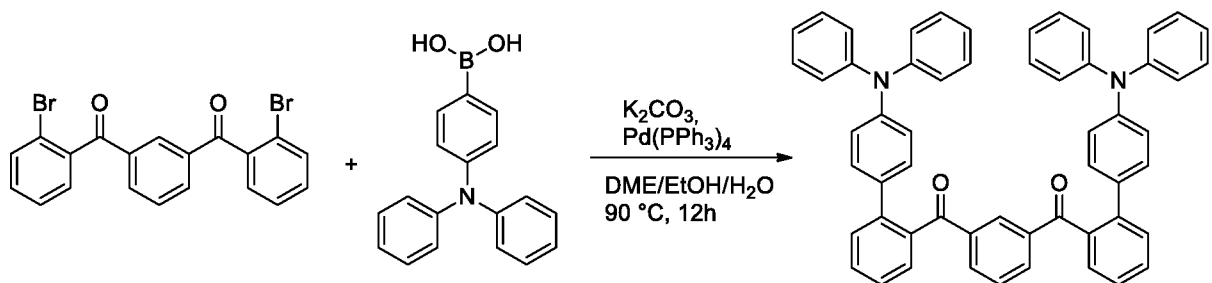
Synthese nach AAV1:



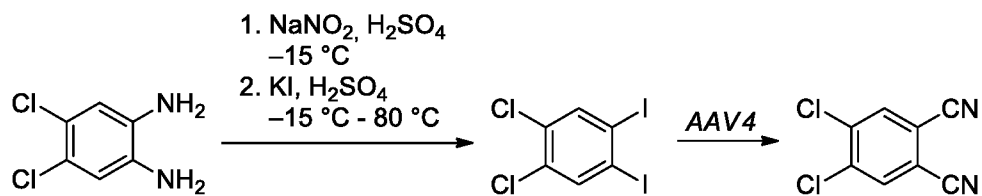
Synthese nach AAV2:

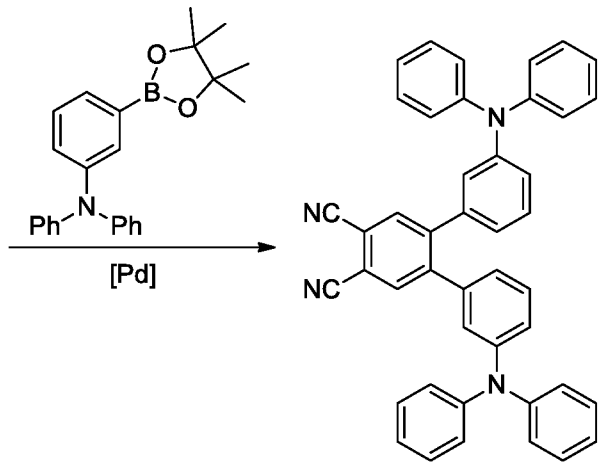


Synthese nach AAV3:

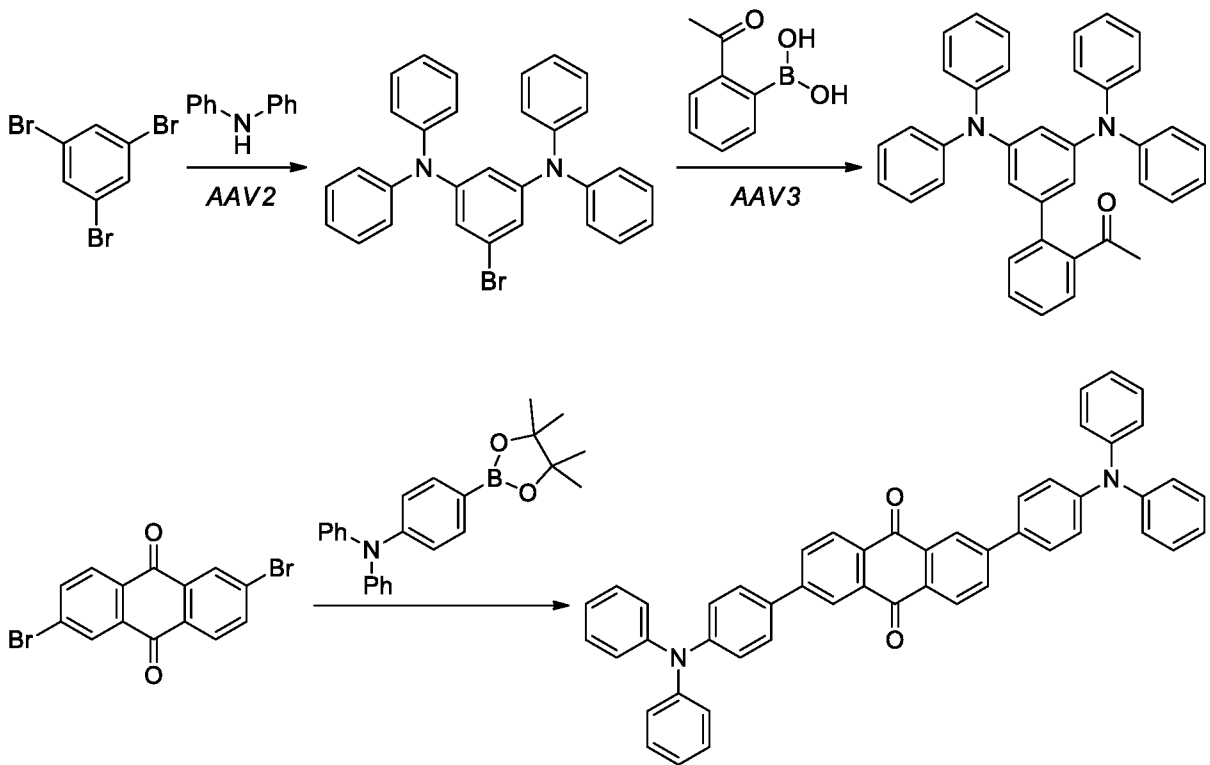


Synthese nach AAV4





Weitere Synthesen:



Figuren

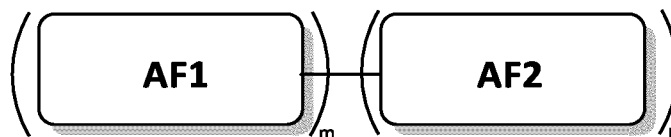
Es zeigen

Figur 1: Schematische Darstellung des Aufbaus einer organischen lichtemittierenden Diode (OLED).

Figur 2: Schematische Darstellung des Energieniveaudiagrammes (relative Energie in eV) eines erfindungsgemäßen Emittermoleküls (Lichtemission resultiert aus dem Übergang LUMO AF1 hin zu HOMO AF2).

Ansprüche

1. Organisches Molekül, aufweisend eine Struktur der Formel 1



Formel 1

wobei gilt:

m ist eine ganze Zahl von 1 bis 3;

n ist eine ganze Zahl von 1 bis 3;

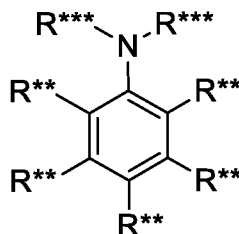
mit $m + n =$ ganze Zahl von 2 bis 4;

AF1 ist eine erste chemische Einheit, aufweisend ein konjugiertes System;

AF2 ist eine zweite chemische Einheit, aufweisend ein konjugiertes System;

AF1 \neq AF2;

und wobei die enthaltene(n) Einheit(en) AF2 eine Struktur nach Formel 1a aufweist/aufweisen



Formel 1a

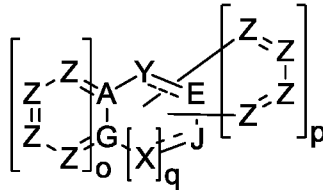
wobei gilt:

R*** ist unabhängig voneinander ein Rest R*, kennzeichnet den Anknüpfungspunkt an eine chemische Einheit gemäß Formel 1b, kennzeichnet den Anknüpfungspunkt an eine weitere chemische Einheit gemäß Formel 1a oder ist Naphtyl, oder ein monozyklisches aromatisches System, wobei im Falle eines aromatischen R*** zwischen dem aromatischen Teil von R*** und dem zentralen N in Formel 1a genau eine direkte Anknüpfung besteht; und wobei jeder Rest R*** mit weiteren Resten R** funktionalisiert sein kann;

R** ist unabhängig voneinander ein Rest R*, kennzeichnet den Anknüpfungspunkt an eine chemische Einheit gemäß Formel 1b oder an eine chemische Einheit gemäß Formel 1a;

wobei zwei oder mehrere Substituenten R** auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden können;

und wobei die enthaltene(n) Einheit(en) AF1 eine Struktur nach Formel 1b aufweist/aufweisen;



Formel 1b

wobei gilt:

Z ist CR** oder N, wobei maximal 4 Einheiten Z gleichzeitig gleich N sind;



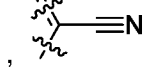
A ist C, wenn o = 1 oder ist N oder CR** wenn o = 0;



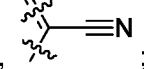
E ist C wenn p = 1 oder ist N oder CR** wenn p = 0 oder ist CR**₂ wenn J = H;

G ist C wenn o = 1 und q = 1; oder ist N, CR** wenn o = 0 und q = 1; oder ist CR** wenn o = 1 und q = 1 und X gleich einer Element-Element-Bindung ist; oder ist N, CR** wenn o = 1 und q = 0;


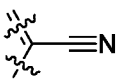
wobei A und G nicht gleichzeitig gleich N sind;

J ist H wenn q = 0 und p = 0 oder ist C, CR** oder N; oder C wenn p = 1 und gleichzeitig eine chemische Bindung zwischen J und Z besteht;

X ist N, CR**, , , , eine Element-Element-Bindung wenn q = 1; oder X ist NR**; wobei generell gilt, dass keine chemische Bindung zwischen X und Z besteht;

Y ist N, CR**, , , ; Y ist C wenn eine chemische Bindung zwischen Y und Z besteht und gleichzeitig p = 1 ist; und

wobei jede chemische Einheit gemäß Formel 1b mindestens eine der folgenden funktionellen

Gruppen enthält: , , N;

o ist 0 oder 1;

p ist 0 oder 1;

q ist 0 oder 1;

wobei o, p und q nicht gleichzeitig gleich 0 sind;

und wobei weiterhin gilt:

R* ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Deuterium, Phenyl, Naphthyl, N(R²)₂, -CN, -NC, -SCN, -CF₃, -NO₂, C(=O)OH, C(=O)OR³, C(=O)N(R³)₂, C(=O)SR³, C(=S)SR³, Si(R⁴)₃, B(OR⁵)₂, B(N(R⁶)₂)₂, C(=O)R³, P(=O)(R⁷)₂, As(=O)(R⁷)₂, P(=S)(R⁷)₂, As(=S)(R⁷)₂, S(=O)R³, S=NR³, S(=O)NR³, S(=O)₂NR³, S(=O)₂R³, O-S(=O)₂R³, SF₅, eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R⁹ substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere benachbarte CH₂-Gruppen durch -R⁹C=CR⁹-, -C≡C-, oder eine benachbarte CH₂-Gruppe durch -Si(R⁴)₂-, -Ge(R⁴)₂-, -Sn(R⁴)₂-, -C(=O)-, -C(=S)-, -C(=Se)-, -C=N-, -C(=O)O-, -C(=O)N(R³)-, -P(=O)(R⁷)-, -As(=O)(R⁷)-, -P(=S)(R⁷)-, -As(=S)(R⁷)-, -S(=O)-, -S(=O)₂-, -NR²-, -O-, oder -S- ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF₃ oder NO₂ ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R² substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R⁹ substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R⁹ substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R* auch miteinander ein monozyklisches Ringsystem mit insgesamt fünf oder sechs Ringgliedern bilden;

R² ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Deuterium, Phenyl, Naphthyl, CF₃, C(=O)OR³, C(=O)N(R²)₂, Si(R⁴)₃, C(=O)R³, P(=O)(R⁷)₂, As(=O)(R⁷)₂, P(=S)(R⁷)₂, As(=S)(R⁷)₂, S(=O)R³, S(=O)₂R³, eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R⁹ substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere benachbarte CH₂-Gruppen durch -R⁹C=CR⁹-, -C≡C-, oder eine benachbarte CH₂-Gruppe durch -Si(R⁴)₂-, -Ge(R⁴)₂-, -Sn(R⁴)₂-, -C(=O)-, -C(=S)-, -C(=Se)-, -C=N-, -C(=O)O-, -C(=O)N(R³)-, -P(=O)(R⁷)-, -As(=O)(R⁷)-, -P(=S)(R⁷)-, -As(=S)(R⁷)-, -S(=O)-, -S(=O)₂-, -NR²-, -O-, oder -S- ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF₃ oder NO₂ ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R⁹ substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen

Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R^2 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

R^3 ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Deuterium, Phenyl, Naphthyl, CF_3 oder ein aliphatischer, aromatischer und/oder heteroaromatischer Kohlenwasserstoffrest mit 1 bis 20 C-Atomen, in dem auch ein oder mehrere H-Atome durch F oder CF_3 ersetzt sein können; dabei können zwei oder mehrere Substituenten R^3 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden;

R^4 ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Deuterium, Phenyl, Naphthyl, $N(R^2)_2$, CN, CF_3 , OH, $C(=O)OR^3$, $C(=O)N(R^3)_2$, $C(=O)R^3$, $P(=O)(R^7)_2$, $As(=O)(R^7)_2$, $P(=S)(R^7)_2$, $As(=S)(R^7)_2$, eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^9 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere benachbarte CH_2 -Gruppen durch $-R^9C=CR^9-$, $-C\equiv C-$, oder eine benachbarte CH_2 -Gruppe durch $-Si(R^4)_2-$, $-Ge(R^4)_2-$, $-Sn(R^4)_2-$, $-C(=O)-$, $-C(=S)-$, $-C(=Se)-$, $-C=N-$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)N(R^3)-$, $-P(=O)(R^7)-$, $-As(=O)(R^7)-$, $-P(=S)(R^7)-$, $-As(=S)(R^7)-$, $-S(=O)-$, $-S(=O)_2-$, $-NR^2-$, $-O-$, oder $-S-$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^8 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R^4 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

R^5 ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Phenyl, Naphthyl, CF_3 , $C(=O)R^3$, $P(=O)(R^7)_2$, $As(=O)(R^7)_2$, eine lineare Alkyl-, Alkoxy-

oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^9 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere benachbarte CH_2 -Gruppen durch $-R^9C=CR^9-$, $-C\equiv C-$, oder eine benachbarte CH_2 -Gruppe durch $-Si(R^4)_2-$, $-Ge(R^4)_2-$, $-Sn(R^4)_2-$, $-C(=O)-$, $-C(=S)-$, $-C(=Se)-$, $-C=N-$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)N(R^3)-$, $-P(=O)(R^7)-$, $-As(=O)(R^7)-$, $-P(=S)(R^7)-$, $-As(=S)(R^7)-$, $-S(=O)-$, $-S(=O)_2-$, $-NR^2-$, $-O-$, oder $-S-$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R^5 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

R^6 ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Phenyl, Naphthyl, CF_3 , $Si(R^4)_3$, $C(=O)R^3$, $P(=O)(R^7)_2$, eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^9 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere benachbarte CH_2 -Gruppen durch $-R^9C=CR^9-$, $-C\equiv C-$, oder eine benachbarte CH_2 -Gruppe durch $-Si(R^4)_2-$, $-Ge(R^4)_2-$, $-Sn(R^4)_2-$, $-C(=O)-$, $-C(=S)-$, $-C(=Se)-$, $-C=N-$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)N(R^3)-$, $-P(=O)(R^7)-$, $-As(=O)(R^7)-$, $-P(=S)(R^7)-$, $-As(=S)(R^7)-$, $-S(=O)-$, $-S(=O)_2-$, $-NR^2-$, $-O-$, oder $-S-$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^* substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R^6 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

R^7 ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus, Phenyl, Naphthyl, $N(R^2)_2$, CN, CF_3 , $C(=O)OR^3$, $C(=O)N(R^3)_2$, $Si(R^4)_3$, $C(=O)R^3$, eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^9 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere benachbarte CH_2 -Gruppen durch $-R^9C=CR^9-$, $-C\equiv C-$, oder eine benachbarte CH_2 -Gruppe durch $-Si(R^4)_2-$, $-Ge(R^4)_2-$, $-Sn(R^4)_2$, $-C(=O)-$, $-C(=S)-$, $-C(=Se)-$, $-C=N-$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)N(R^3)-$, $-P(=O)(R^7)-$, $-As(=O)(R^7)-$, $-P(=S)(R^7)-$, $-As(=S)(R^7)-$, $-S(=O)-$, $-S(=O)_2-$, $-NR^2-$, $-O-$, oder $-S-$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^3 substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R^7 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

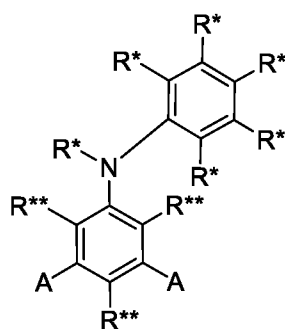
R^8 ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Deuterium, Phenyl, Naphthyl, F, CF_3 oder ein aliphatischer, aromatischer und/oder heteroaromatischer Kohlenwasserstoffrest mit 1 bis 20 C-Atomen, in dem auch ein oder mehrere H-Atome durch F oder CF_3 ersetzt sein können; dabei können zwei oder mehrere Substituenten R^8 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden;

R^9 ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Deuterium, Phenyl, Naphthyl, $N(R^2)_2$, CN, CF_3 , NO_2 , OH, COOH, $C(=O)OR^3$, $C(=O)N(R^3)_2$, $Si(R^4)_3$, $B(OR^5)_2$, $C(=O)R^3$, $P(=O)(R^7)_2$, $P(=S)(R^7)_2$, $As(=O)(R^7)_2$, $P(=S)(R^7)_2$, $S(=O)R^3$, $S(=O)_2R^3$, OSO_2R^3 , eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^8 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen durch $-R^3C=CR^3-$, $-C\equiv C-$, oder eine benachbarte CH_2 -Gruppe durch $-Si(R^4)_2-$, $-Ge(R^4)_2-$, $-Sn(R^4)_2$, $-C(=O)-$, $-C(=S)-$, $-C(=Se)-$, -

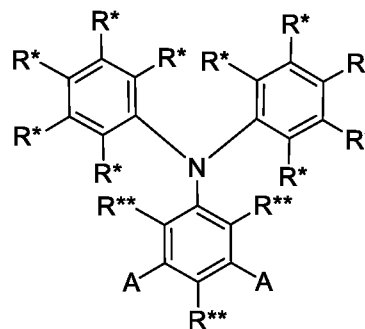
C=N-, -C(=O)O-, -C(=O)N(R³)-, -P(=O)(R⁷)-, -As(=O)(R⁷)-, -P(=S)(R⁷)-, -As(=S)(R⁷)-, -S(=O)-, -S(=O)₂-, -NR²-, -O-, oder -S- ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF₃ oder NO₂ ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R⁸ substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R³ substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R⁸ substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R⁹ auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

wobei die weiteren chemischen Einheiten AF auch an ein Atom gebunden sein können, dass Bestandteil der Gruppen R^{***}, R^{**} oder R^{*} ist;

2. Organisches Molekül nach Anspruch 1, wobei AF2 eine Struktur nach Formel 2a oder Formel 2c aufweist:



Formel 2a

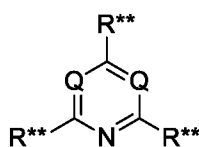


Formel 2c

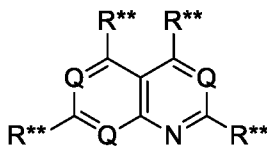
wobei gilt:

A ist ein Rest R^{*} oder bezeichnet die Anknüpfung an eine Gruppe der Form AF1–AF2;

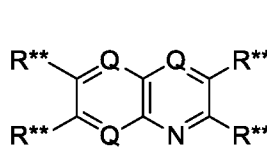
und AF1 eine Struktur nach den Formeln 2f bis 2z aufweist



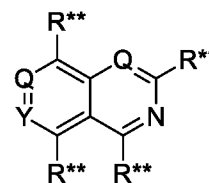
Formel 2f



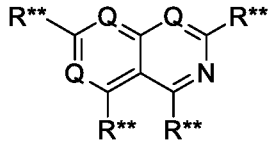
Formel 2g



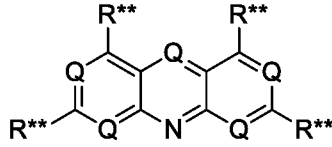
Formel 2h



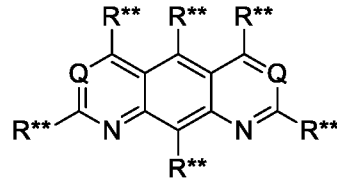
Formel 2i



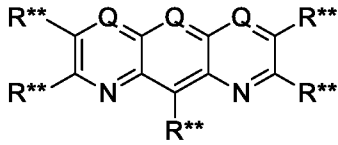
Formel 2j



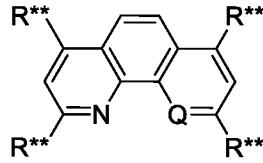
Formel 2k



Formel 2l



Formel 2m

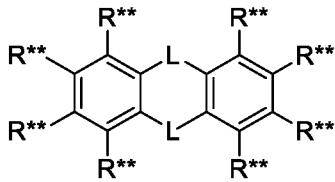


Formel 2n

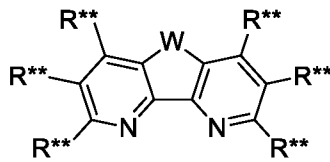
und wobei gilt:

Q ist N, CR**;

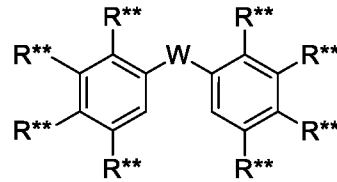
Y ist N, CR**, wobei Q und Y nicht gleichzeitig gleich N sind;



Formel 2o


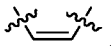





Formel 2p

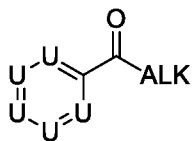


Formel 2q

und wobei gilt:

L ist , , , eine Element-Element-Einfachbindung, wobei nicht zwei Einheiten Y gleichzeitig eine Element-Element-Einfachbindung sind, oder NR**, wobei nicht zwei Einheiten Y gleichzeitig gleich NR** sind;

W ist  oder  ;

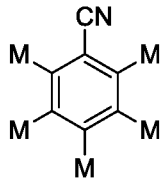


Formel 2r

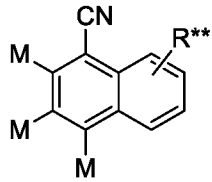
und wobei gilt:

U ist CR**, N, wobei maximal 3 Einheiten U gleichzeitig gleich N sind und wobei keine benachbarten Einheiten U gleichzeitig gleich N sind;

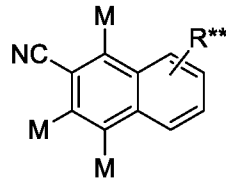
ALK ist, Ethyl, Propyl *iso*-Propyl, Butyl, *tert*-Butyl, Pentyl, Hexyl, Cyclohexyl, Heptyl Octyl, Nonyl, Decyl, Undecyl oder Dodecyl;



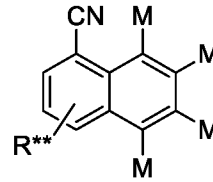
Formel 2s



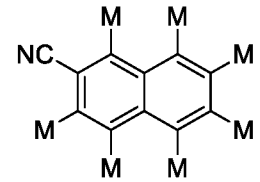
Formel 2t



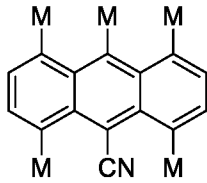
Formel 2u



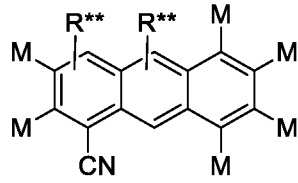
Formel 2v



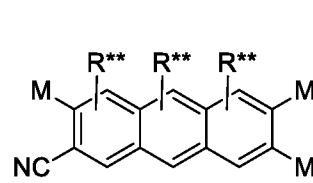
Formel 2w



Formel 2x



Formel 2y



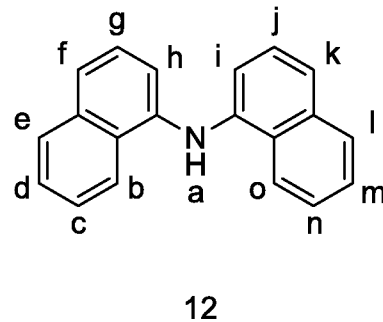
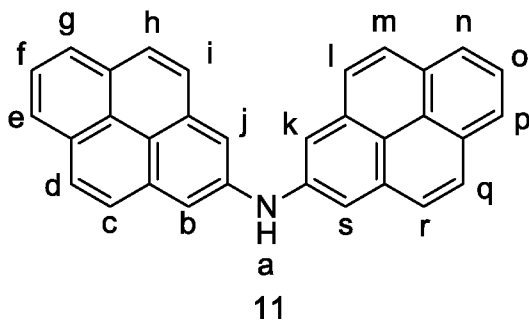
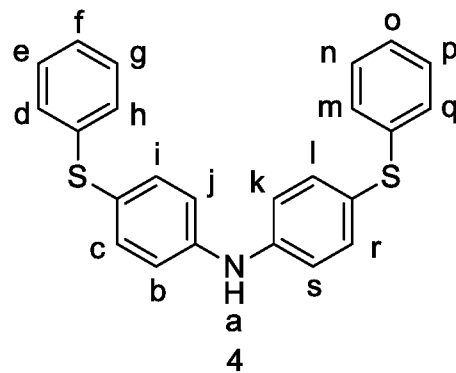
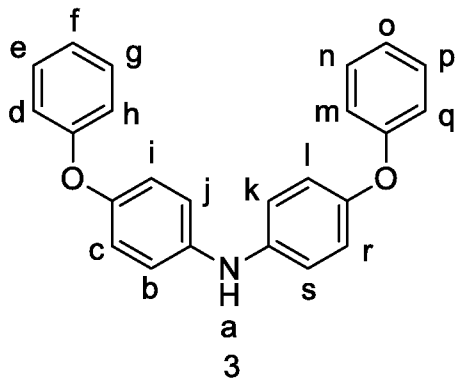
Formel 2z

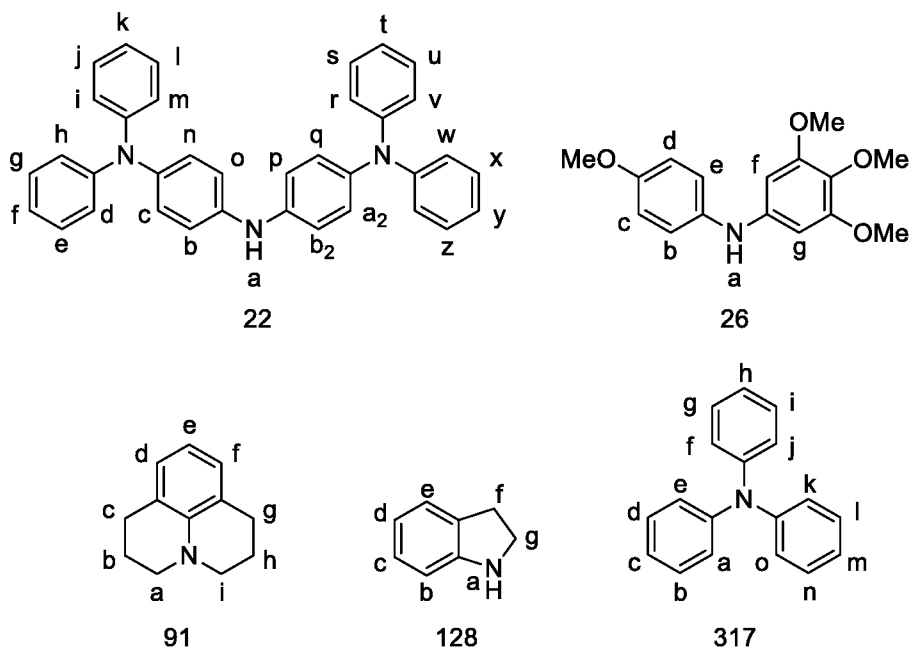
und wobei gilt:

M ist H, D, ALK, Phenyl, Pyridyl, R**, CN, wobei maximal 4 Einheiten M gleichzeitig gleich CN sind;

und wobei ansonsten die in Anspruch 1 genannten Definitionen gelten.

3. Organisches Molekül nach Anspruch 1 oder 2, wobei AF2 ausgewählt ist aus einer der folgenden Strukturen;





und wobei die Anknüpfungsposten für eine weitere chemische Einheit AF2 und/oder eine Einheit AF1 mit Kleinbuchstaben gekennzeichnet sind.

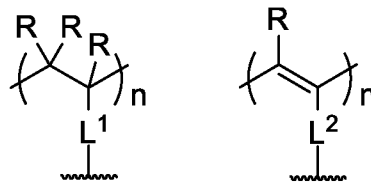
4. Organisches Molekül nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 3, wobei das organische Molekül an mindestens einer Position mindestens einen Rest R aufweist, wobei gilt:

R ist bei jedem Auftreten unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Deuterium, Phenyl, Naphthyl, F, Cl, Br, I, $N(R^2)_2$, -CN, -NC, -SCN, -CF₃, -NO₂, -OH, C(=O)OH, C(=O)OR³, C(=O)N(R³)₂, C(=O)SR³, C(=S)SR³, Si(R⁴)₃, B(OR⁵)₂, B(N(R⁶)₂)₂, C(=O)R³, P(=O)(R⁷)₂, As(=O)(R⁷)₂, P(=S)(R⁷)₂, As(=S)(R⁷)₂, S(=O)R³, S=NR³, S(=O)NR³, S(=O)₂NR³, S(=O)₂R³, O-S(=O)₂R³, SF₅, eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R⁹ substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere benachbarte CH₂-Gruppen durch -R⁹C=CR⁹-, -C≡C-, oder eine benachbarte CH₂-Gruppe durch -Si(R⁴)₂-, -Ge(R⁴)₂-, -Sn(R⁴)₂-, -C(=O)-, -C(=S)-, -C(=Se)-, -C=N-, -C(=O)O-, -C(=O)N(R³)-, -P(=O)(R⁷)-, -As(=O)(R⁷)-, -P(=S)(R⁷)-, -As(=S)(R⁷)-, -S(=O)-, -S(=O)₂-, -NR²-, -O-, oder -S- ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF₃ oder NO₂ ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R² substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R⁹ substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe,

Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^9 substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten R auch miteinander ein monozyklisches aliphatisches Ringsystem mit insgesamt fünf oder sechs Ringgliedern bilden; wobei R^2 bis R^9 definiert sind wie in Anspruch 1;

und wobei für polymerisierbare Reste gilt:

polymerisierbare Reste sind solche Reste, die polymerisierbare funktionelle Einheiten tragen, die mit sich selbst homopolymerisiert oder mit anderen Monomeren copolymerisiert werden können, wodurch das organische Molekül als Polymer mit Wiederholungseinheiten nach den Formeln 4 und/oder 5 erhalten werden



Formel 4

Formel 5

mit

gewellte Linie = Position, über die eine Linkergruppe L^1 oder L^2 an das organische Molekül gebunden ist;

L^1 und L^2 = gleiche oder verschiedene Linkergruppen, aufweisend zwischen 0 bis 20 Kohlenstoffatome; oder aufweisend eine Form $-C(=O)O$;

und wobei insbesondere L^1 und L^2 = $-X-L^3$ mit $X = O$ oder S ; wobei

L^3 = eine weitere Linkergruppe ist, die ausgewählt ist aus der Gruppe aus einer substituierten und unsubstituierten Alkylengruppe (linear, verzweigt oder cyclisch) und einer substituierten und unsubstituierten Arylengruppe, wobei auch Kombinationen möglich sind.

5. Verwendung eines organischen Moleküls nach Anspruch 1 bis 4 als lumineszierender Emitter und/oder als Hostmaterial und/oder als Elektronentransportmaterial und/oder als Lochinjektionsmaterial und/oder als Lochblockiermaterial in einem optoelektronischen Bauelement.

6. Verwendung nach Anspruch 5, wobei das optoelektronische Bauelement ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus:

- organischen lichtemittierenden Dioden (OLEDs),
- Licht-emittierenden elektrochemischen Zellen,

- OLED-Sensoren, insbesondere in nicht hermetisch nach außen abgeschirmten Gas- und Dampf-Sensoren,
- organischen Dioden,
- organischen Solarzellen,
- organischen Transistoren,
- organischen Feldeffekttransistoren,
- organischen Lasern und
- Down-Konversions-Elementen.

7. Verwendung nach Anspruch 5 oder 6, wobei der Anteil des organischen Moleküls an dem Emitter 1 % bis 99 % beträgt.

8. Verwendung nach Anspruch 5, 6 oder 7, wobei die Konzentration des organischen Moleküls als Emitter in optischen Licht emittierenden Bauelementen, insbesondere in OLEDs, zwischen 5 % und 80 % beträgt.

9. Optoelektronisches Bauelement, aufweisend ein organisches Molekül nach Anspruch 1 bis 4, insbesondere ausgeformt als ein Bauelement ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus organischer lichtemittierender Diode (OLED), Licht-emittierender elektrochemischer Zelle, OLED-Sensor, insbesondere in nicht hermetisch nach außen abgeschirmten Gas- und Dampf-Sensoren, organischer Diode, organischer Solarzelle, organischem Transistor, organischem Feldeffekttransistor, organischem Laser und Down-Konversion-Element.

10. Optoelektronisches Bauelement nach Anspruch 9, aufweisend

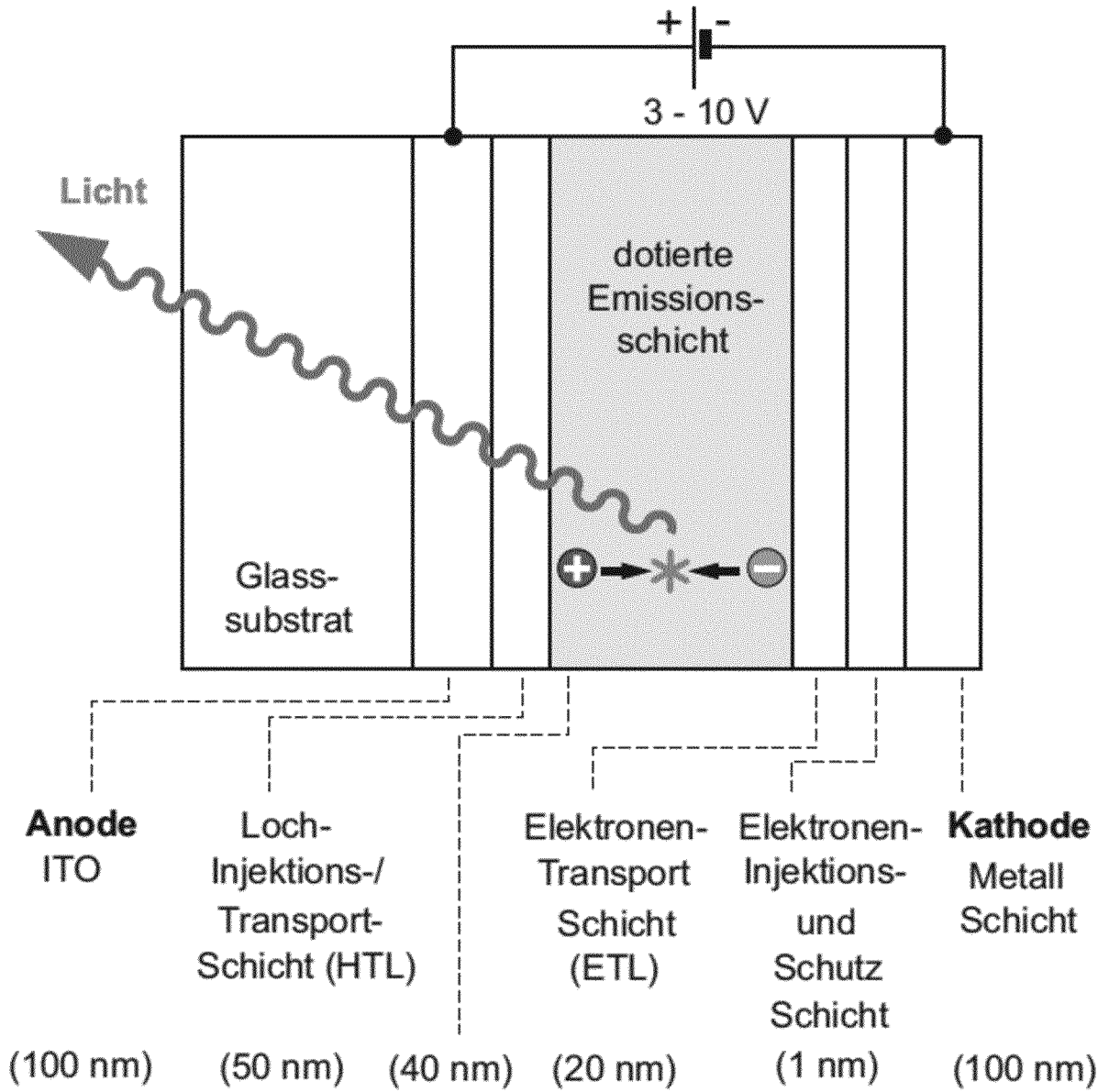
- ein Substrat,
- eine Anode und
- eine Kathode, wobei die Anode und die Kathode auf das Substrat aufgebracht sind, und
- mindestens eine lichtemittierende Schicht, die zwischen Anode und Kathode angeordnet ist und die ein organisches Molekül nach Anspruch 1 bis 4 enthält.

11. Optoelektronisches Bauelement nach Anspruch 9 oder 10, in dem die lichtemittierende Schicht mindestens ein Hostmaterial aufweist, wobei der angeregte Singulettzustand (S_1) und/oder der angeregte Triplettzustand (T_1) des mindestens einen Hostmaterials höher ist als der angeregte Singulettzustand (S_1) und/oder der angeregte Triplettzustand (T_1) des organischen Moleküls nach Anspruch 1 bis 4.

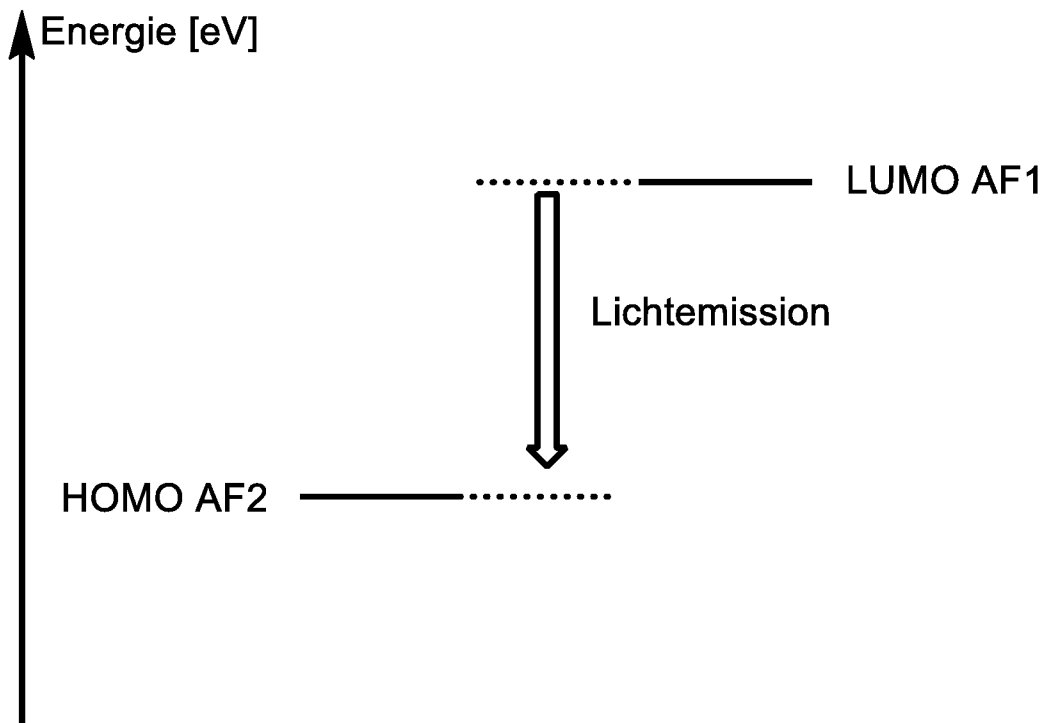
12. Optoelektronisches Bauelement nach Anspruch 9 bis 11, aufweisend mindestens ein Hostmaterial bestehend aus einem Material gemäß Anspruch 1 bis 4.
13. Optoelektronisches Bauelement nach Anspruch 9 bis 12, wobei die lichtemittierende Schicht fluoreszente oder phosphoreszente Materialien beinhaltet und wobei es sich bei den Materialien der lichtemittierenden Schicht um organische Moleküle nach Anspruch 1 bis 4 handelt.
14. Optoelektronisches Bauelement nach Anspruch 13, in dem ein organisches Molekül gemäß Anspruch 1 bis 4 zusammen mit einem funktionellen Material einen Exciplex bilden.
15. Optoelektronisches Bauelement nach Anspruch 9 bis 14, in dem ein organisches Molekül nach Anspruch 1 bis 4 als Ladungstransportschicht verwendet wird.
16. Verfahren zur Herstellung eines optoelektronischen Bauelements, wobei ein organisches Molekül nach Anspruch 1 bis 4 verwendet wird.
17. Verfahren nach Anspruch 16, wobei die Verarbeitung des organischen Moleküls mittels eines Vakuumverdampfungsverfahrens oder aus einer Lösung erfolgt.

Figuren

Figur 1



Figur 2



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2016/051165A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
INV. H01L51/50 C09K11/06
ADD.

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)
H01L C09K

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 practicable, search terms used)

EPO-Internal, WPI Data

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	IBRAHIM MUSTAFA EL-DEEB ET AL: "A New Efficient Convergent Synthesis of Conjugated Aryl-containing Dendrimers", BULLETIN OF THE KOREAN CHEMICAL SOCIETY, vol. 31, no. 6, 20 June 2010 (2010-06-20), pages 1757-1760, XP055270937, KR ISSN: 0253-2964, DOI: 10.5012/bkcs.2010.31.6.1757 compound 1 ----- -/--	1-4



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 application or patent 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

6 May 2016

Date of mailing of the international search report

17/05/2016

Name and mailing address of the ISA/

European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel. (+31-70) 340-2040,
Fax: (+31-70) 340-3016

Authorized officer

Ziegler, Jan

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2016/051165

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	ZUJIN ZHAO ET AL: "High hole mobility of 1,2-bis[4'-(diphenylamino)biphenyl-4-yl]-1,2-diphenylethene in field effect transistor", CHEMICAL COMMUNICATIONS - CHEMCOM, vol. 47, no. 24, 1 January 2011 (2011-01-01), page 6924, XP055270912, GB ISSN: 1359-7345, DOI: 10.1039/c1cc12011e Scheme 1; compound 1	1-4
X	----- ZUJIN ZHAO ET AL: "Stereoselective Synthesis, Efficient Light Emission, and High Bipolar Charge Mobility of Chiasmatic Luminogens", ADVANCED MATERIALS, vol. 23, no. 45, 1 December 2011 (2011-12-01), pages 5430-5435, XP055270939, DE ISSN: 0935-9648, DOI: 10.1002/adma.201102804 Schema 2	1-4
X	----- WO 2014/057874 A1 (TORAY IND INC) 17 April 2014 (2014-04-17) page 36	1-4
X,P	----- XUEJUN ZHAN ET AL: "Polyphenylbenzene as a Platform for Deep-Blue OLEDs: Aggregation Enhanced Emission and High External Quantum Efficiency of 3.98%", CHEMISTRY OF MATERIALS, vol. 27, no. 5, 10 March 2015 (2015-03-10), pages 1847-1854, XP055267611, US ISSN: 0897-4756, DOI: 10.1021/acs.chemmater.5b00094 Scheme 1; compounds 10-14	1-4
X	----- US 2013/228752 A1 (SHIN DONG-WOO [KR] ET AL) 5 September 2013 (2013-09-05) compounds 5-8,12 ----- -/--	1-4

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2016/051165

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	<p>QISHENG ZHANG ET AL: "Anthraquinone-Based Intramolecular Charge-Transfer Compounds: Computational Molecular Design, Thermally Activated Delayed Fluorescence, and Highly Efficient Red Electroluminescence", JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, vol. 136, no. 52, 3 December 2014 (2014-12-03), pages 18070-18081, XP055270946, US ISSN: 0002-7863, DOI: 10.1021/ja510144h scheme 3; compounds 1-4</p> <p style="text-align: center;">-----</p>	1-17
X	<p>WO 2014/011753 A2 (UNIV GEORGIA STATE RES FOUND [US]; UNIV EMORY [US]; CHILDRENS HEALTHCA) 16 January 2014 (2014-01-16) table 1 claim 1 the whole document</p> <p style="text-align: center;">-----</p>	1-4

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No

PCT/EP2016/051165

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 2014057874 A1	17-04-2014	CN 104768926 A	08-07-2015
		EP 2907803 A1	19-08-2015
		KR 20150065175 A	12-06-2015
		TW 201420566 A	01-06-2014
		US 2015280139 A1	01-10-2015
		WO 2014057874 A1	17-04-2014

US 2013228752 A1	05-09-2013	CN 103288656 A	11-09-2013
		KR 20130100633 A	11-09-2013
		TW 201339124 A	01-10-2013
		US 2013228752 A1	05-09-2013

WO 2014011753 A2	16-01-2014	AU 2013290277 A1	22-01-2015
		CA 2878837 A1	16-01-2014
		CN 104507902 A	08-04-2015
		EP 2872474 A2	20-05-2015
		HK 1210460 A1	22-04-2016
		JP 2015527322 A	17-09-2015
		US 2015203442 A1	23-07-2015
		WO 2014011753 A2	16-01-2014

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES
 INV. H01L51/50 C09K11/06
 ADD.

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

B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)
 H01L C09K

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, WPI Data

C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	IBRAHIM MUSTAFA EL-DEEB ET AL: "A New Efficient Convergent Synthesis of Conjugated Aryl-containing Dendrimers", BULLETIN OF THE KOREAN CHEMICAL SOCIETY, Bd. 31, Nr. 6, 20. Juni 2010 (2010-06-20), Seiten 1757-1760, XP055270937, KR ISSN: 0253-2964, DOI: 10.5012/bkcs.2010.31.6.1757 Verbindung 1 ----- -/--	1-4



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" frühere Anmeldung oder Patent, die bzw. 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 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

6. Mai 2016

Absendedatum des internationalen Recherchenberichts

17/05/2016

Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde

Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2
 NL - 2280 HV Rijswijk
 Tel. (+31-70) 340-2040,
 Fax: (+31-70) 340-3016

Bevollmächtigter Bediensteter

Ziegler, Jan

C. (Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	ZUJIN ZHAO ET AL: "High hole mobility of 1,2-bis[4'-(diphenylamino)biphenyl-4-yl]-1,2-diphenylethene in field effect transistor", CHEMICAL COMMUNICATIONS - CHEMCOM, Bd. 47, Nr. 24, 1. Januar 2011 (2011-01-01), Seite 6924, XP055270912, GB ISSN: 1359-7345, DOI: 10.1039/clcc12011e Scheme 1; Verbindung 1	1-4
X	ZUJIN ZHAO ET AL: "Stereoselective Synthesis, Efficient Light Emission, and High Bipolar Charge Mobility of Chiasmatic Luminogens", ADVANCED MATERIALS, Bd. 23, Nr. 45, 1. Dezember 2011 (2011-12-01), Seiten 5430-5435, XP055270939, DE ISSN: 0935-9648, DOI: 10.1002/adma.201102804 Schema 2	1-4
X	WO 2014/057874 A1 (TORAY IND INC) 17. April 2014 (2014-04-17) Seite 36	1-4
X,P	XUEJUN ZHAN ET AL: "Polyphenylbenzene as a Platform for Deep-Blue OLEDs: Aggregation Enhanced Emission and High External Quantum Efficiency of 3.98%", CHEMISTRY OF MATERIALS, Bd. 27, Nr. 5, 10. März 2015 (2015-03-10), Seiten 1847-1854, XP055267611, US ISSN: 0897-4756, DOI: 10.1021/acs.chemmater.5b00094 Scheme 1; Verbindungen 10-14	1-4
X	US 2013/228752 A1 (SHIN DONG-WOO [KR] ET AL) 5. September 2013 (2013-09-05) Verbindungen 5-8,12	1-4
	----- -/--	

C. (Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	<p>QISHENG ZHANG ET AL: "Anthraquinone-Based Intramolecular Charge-Transfer Compounds: Computational Molecular Design, Thermally Activated Delayed Fluorescence, and Highly Efficient Red Electroluminescence", JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, Bd. 136, Nr. 52, 3. Dezember 2014 (2014-12-03), Seiten 18070-18081, XP055270946, US ISSN: 0002-7863, DOI: 10.1021/ja510144h scheme 3; Verbindungen 1-4</p> <p style="text-align: center;">-----</p>	1-17
X	<p>WO 2014/011753 A2 (UNIV GEORGIA STATE RES FOUND [US]; UNIV EMORY [US]; CHILDRENS HEALTHCA) 16. Januar 2014 (2014-01-16) Tabelle 1 Anspruch 1 das ganze Dokument</p> <p style="text-align: center;">-----</p>	1-4

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2016/051165

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 2014057874 A1	17-04-2014	CN 104768926 A	08-07-2015
		EP 2907803 A1	19-08-2015
		KR 20150065175 A	12-06-2015
		TW 201420566 A	01-06-2014
		US 2015280139 A1	01-10-2015
		WO 2014057874 A1	17-04-2014

US 2013228752 A1	05-09-2013	CN 103288656 A	11-09-2013
		KR 20130100633 A	11-09-2013
		TW 201339124 A	01-10-2013
		US 2013228752 A1	05-09-2013

WO 2014011753 A2	16-01-2014	AU 2013290277 A1	22-01-2015
		CA 2878837 A1	16-01-2014
		CN 104507902 A	08-04-2015
		EP 2872474 A2	20-05-2015
		HK 1210460 A1	22-04-2016
		JP 2015527322 A	17-09-2015
		US 2015203442 A1	23-07-2015
		WO 2014011753 A2	16-01-2014
