

(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
09. November 2017 (09.11.2017)

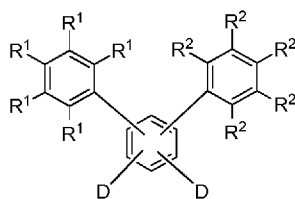


(10) Internationale Veröffentlichungsnummer
WO 2017/190885 A1

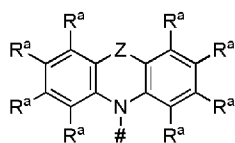
(51) Internationale Patentklassifikation:	10 2016 108 335.6	
C07D 403/10 (2006.01)	H01L 51/50 (2006.01)	04. Mai 2016 (04.05.2016) DE
C07D 209/82 (2006.01)		10 2016 110 004.8
		31. Mai 2016 (31.05.2016) DE
(21) Internationales Aktenzeichen:	PCT/EP2017/057047	
(22) Internationales Anmeldedatum:	24. März 2017 (24.03.2017)	
(25) Einreichungssprache:	Deutsch	(71) Anmelder: CYNORA GMBH [DE/DE]; Werner-von-Siemens-Str. 2 - 6, 76646 Bruchsal (DE).
(26) Veröffentlichungssprache:	Deutsch	(72) Erfinder: ZINK, Daniel; Reserveweg 9, 76646 Bruchsal (DE). SEIFERMANN, Stefan; Hardkopfweg 3, 77815 Bühl (DE).
(30) Angaben zur Priorität:		(74) Anwalt: HOPPE, Georg J.; Beuckestr. 20, 14163 Berlin (DE).
10 2016 108 325.9	04. Mai 2016 (04.05.2016) 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, DJ, 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, KH, KN, KP, KR, KW, 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.
10 2016 108 327.5	04. Mai 2016 (04.05.2016) DE	
10 2016 108 329.1	04. Mai 2016 (04.05.2016) DE	
10 2016 108 332.1	04. Mai 2016 (04.05.2016) DE	
10 2016 108 331.3	04. Mai 2016 (04.05.2016) DE	
10 2016 108 330.5	04. Mai 2016 (04.05.2016) DE	
10 2016 108 334.8	04. Mai 2016 (04.05.2016) DE	

(54) Title: ORGANIC MOLECULES, ESPECIALLY FOR USE IN OPTOELECTRONIC DEVICES

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



Formel A1



(57) Abstract: The invention relates to an organic molecule, especially for use in optoelectronic components. According to the invention, the organic molecule has a structure of the formula A1 with D = where # is the attachment point of the D unit to the central phenyl ring of the structure of formula A1; Z is a direct bond or is selected from the group consisting of CR³R⁴, C=CR³R⁴, C=NR³, NR³, O, SiR³R⁴, S, S(O), S(O)₂; R¹ and R₂ are the same or different at each instance and are H, deuterium, a linear alkyl group having 1 to 5 carbon atoms, a linear alkenyl or alkynyl group having 2 to 8 carbon atoms, a branched or cyclic alkyl, alkenyl or alkynyl group having 3 to 10 carbon atoms, where one or more hydrogen atoms may be replaced by deuterium, CN, CF₃ or NO₂, or an aromatic or heteroaromatic ring system which has 5 to 15 aromatic ring atoms and may be substituted in each case by one or more R⁶ radicals, CF₃ or CN, and where, independently of one another, exactly one R¹ and exactly one R² is CF₃ or CN.

(57) Zusammenfassung: Die Erfindung betrifft ein organisches Molekül, insbesondere zur Verwendung in optoelektronischen Bauelementen. Erfindungsgemäß hat das organische Molekül, eine Struktur der Formel A1 mit D = wobei # ist Anknüpfungspunkt der Einheit D an den zentralen Phenylring der Struktur gemäß Formel A1; Z ist eine direkte Bindung oder ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus CR³R⁴, C=CR³R⁴, C=NR³, NR³, O, SiR³R⁴, S, S(O), S(O)₂; R¹ und R₂ sind bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, Deuterium, eine lineare Alkylgruppe mit 1 bis 5 C-Atomen, eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 8 C- Atomen, eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 3 bis 10 C- Atomen, wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN, CF₃ oder NO₂ ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 15 aromatischen Ringatomen, das jeweils mit einem oder mehreren Resten R⁶ substituiert sein kann, CF₃ oder CN ist und wobei unabhängig voneinander genau ein R¹ und genau ein R² gleich CF₃ oder CN ist.

WO 2017/190885 A1

(84) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare regionale Schutzrechtsart): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, 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).

Veröffentlicht:

— mit internationalem Recherchenbericht (Artikel 21 Absatz 3)

Organische Moleküle, insbesondere zur Verwendung in organischen optoelektronischen Vorrichtungen

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

Beschreibung

Der vorliegenden Erfindung lag die Aufgabe zu Grunde, Moleküle bereitzustellen, die sich zur Verwendung in optoelektronischen Vorrichtungen eignen.

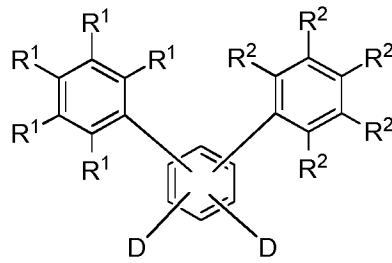
Die Erfindung stellt eine neue Klasse von organischen Molekülen bereit, die sich zur Verwendung in organischen optoelektronischen Vorrichtungen eignen.

Die erfindungsgemäßen organischen Moleküle sind rein organische Moleküle, weisen also keine Metallionen auf und grenzen sich so von den zur Verwendung in organischen optoelektronischen Vorrichtungen bekannten Metallkomplexverbindungen ab.

Die erfindungsgemäßen organischen Moleküle zeichnen sich durch Emissionen im blauen, himmelblauen oder grünen Spektralbereich aus. Die Photolumineszenzquantenausbeuten der erfindungsgemäßen organischen Moleküle betragen insbesondere 20 % und mehr. Die erfindungsgemäßen Moleküle zeigen insbesondere thermisch aktivierte verzögerte Fluoreszenz (TADF). Die Verwendung der erfindungsgemäßen Moleküle in einer optoelektronischen Vorrichtung, beispielsweise einer organischen lichtemittierenden Diode (OLED), führt zu höheren Effizienzen der Vorrichtung. Entsprechende OLEDs weisen eine höhere Stabilität auf als OLEDs mit bekannten Emittiermaterialien und vergleichbarer Farbe.

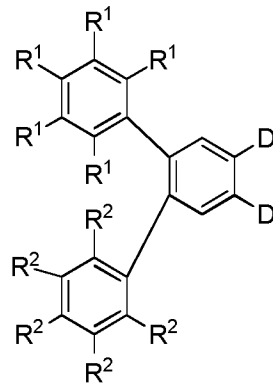
Unter dem blauen Spektralbereich wird hier der sichtbare Bereich von kleiner als 470 nm verstanden. Unter dem himmelblauen Spektralbereich wird hier der Bereich von 470 nm bis 499 nm verstanden. Unter dem grünen Spektralbereich wird hier der Bereich von 500 nm bis 599 nm verstanden. Dabei liegt das Emissionsmaximum im jeweiligen Bereich.

Die organischen Moleküle weisen eine Struktur der Formel A1 auf oder bestehen aus einer Struktur gemäß Formel A1:



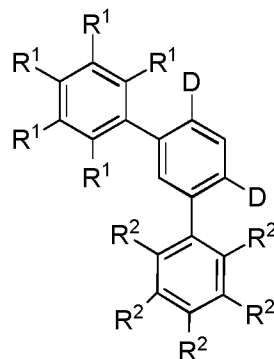
Formel A1

In einer Ausführungsform weisen die organischen Moleküle eine Struktur der Formel Ia auf oder bestehen aus einer Struktur gemäß Formel Ia:



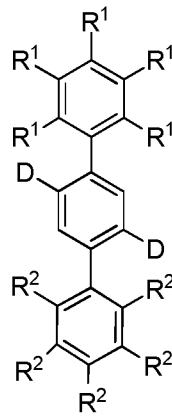
Formel Ia

In einer weiteren Ausführungsform weisen die organischen Moleküle eine Struktur der Formel Ib auf oder bestehen aus einer Struktur gemäß Formel Ib:



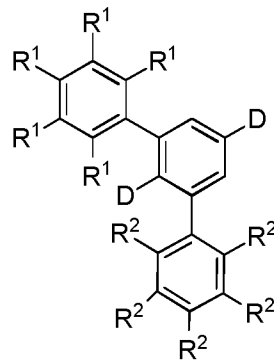
Formel Ib

In einer weiteren Ausführungsform weisen die organischen Moleküle eine Struktur der Formel Ic auf oder bestehen aus einer Struktur gemäß Formel Ic:



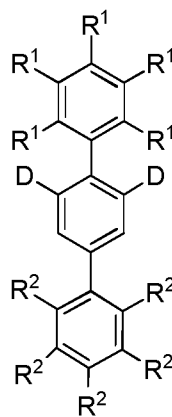
Formel Ic

In einer weiteren Ausführungsform weisen die organischen Moleküle eine Struktur der Formel Id auf oder bestehen aus einer Struktur gemäß Formel Id:



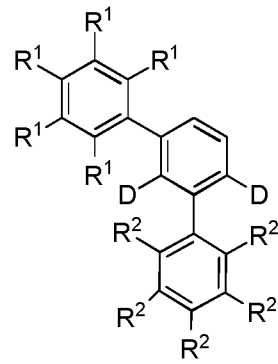
Formel Id

In einer weiteren Ausführungsform weisen die organischen Moleküle eine Struktur der Formel Ie auf oder bestehen aus einer Struktur gemäß Formel Ie:



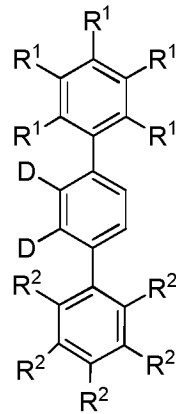
Formel Ie

In einer weiteren Ausführungsform weisen die organischen Moleküle eine Struktur der Formel If auf oder bestehen aus einer Struktur gemäß Formel If:



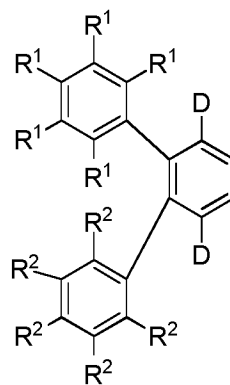
Formel If

In einer weiteren Ausführungsform weisen die organischen Moleküle eine Struktur der Formel Ig auf oder bestehen aus einer Struktur gemäß Formel Ig:



Formel Ig

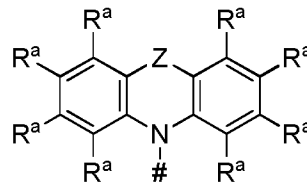
In einer weiteren Ausführungsform weisen die organischen Moleküle eine Struktur der Formel Ih auf oder bestehen aus einer Struktur gemäß Formel Ih:



Formel Ih

In den oben genannten Formeln gilt für die verwendeten Symbole Folgendes:

D =



Formel I-1

Darin gilt:

ist jeweils der Anknüpfungspunkt der Einheit D an den zentralen (mittleren) Phenylring in den Strukturen der Formeln A1 und Ia bis Ih;

Z ist eine direkte Bindung oder ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus CR^3R^4 , $C=CR^3R^4$, $C=O$, $C=NR^3$, NR^3 , O , SiR^3R^4 , S , $S(O)$ und $S(O)_2$.

R^1 und R^2 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden Deuterium, eine lineare Alkylgruppe mit 1 bis 5 C-Atomen, eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 8 C-Atomen, eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 3 bis 10 C-Atomen, wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 15 aromatischen Ringatomen, das jeweils mit einem oder mehreren Resten R^6 substituiert sein kann, CF_3 oder CN.

R^a , R^3 und R^4 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, Deuterium, $N(R^5)_2$, OH, $Si(R^5)_3$, $B(OR^5)_2$, OSO_2R^5 , CF_3 , CN, F, Br, I, 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^5 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen durch $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO, SO_2 , NR^5 , O, S oder $CONR^5$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können; oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils mit einem oder mehreren Resten R^5 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die mit einem oder mehreren Resten R^5 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe

oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche mit einem oder mehreren Resten R^5 substituiert sein kann.

R^5 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, Deuterium, $N(R^6)_2$, OH, $Si(R^6)_3$, $B(OR^6)_2$, OSO_2R^6 , CF_3 , CN, F, Br, I, 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^6 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen durch $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S oder CONR⁶ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können; oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils mit einem oder mehreren Resten R^6 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die mit einem oder mehreren Resten R^6 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^6 substituiert sein kann.

R^6 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, Deuterium, OH, CF_3 , CN, F, Br, I, eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 5 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 5 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 5 C-Atomen, wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können; oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen.

Dabei kann jeder der Reste R^a , R^3 , R^4 oder R^5 auch mit einem oder mehreren weiteren Resten R^a , R^3 , R^4 oder R^5 ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden.

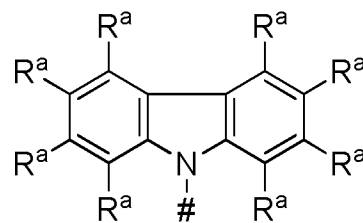
Erfindungsgemäß sind hierbei genau ein R^1 und genau ein R^2 gleich CF_3 oder CN. In einer Ausführungsform der Erfindung sind genau ein R^1 und ein R^2 CN.

In einer weiteren Ausführungsform sind genau ein R^1 und ein R^2 CN und die weiteren R^1 und R^2 sind gewählt aus der Gruppe bestehend aus H und Alkyl, insbesondere sind die

weiteren R^1 und R^2 gewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Methyl und t-Butyl ($C(CH_3)_3$); in einer Ausführungsform sind genau ein weiterer Rest R^1 und genau ein weiterer Rest R^2 Methyl und die weiteren R^1 und R^2 H. In einer Ausführungsform sind genau ein R^1 und genau ein R^2 gleich CN und die weiteren R^1 und R^2 sind H.

In einer Ausführungsform ist Z gleich einer direkten Bindung oder ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus CR^3R^4 , $C=CR^3R^4$, $C=NR^3$, NR^3 , O, SiR^3R^4 , S, $S(O)$ und $S(O)_2$.

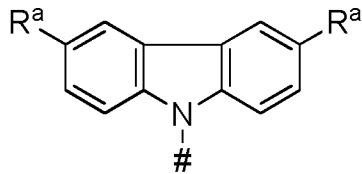
In einer weiteren Ausführungsform der organischen Moleküle weist die Gruppe D eine Struktur der Formel II auf bzw. besteht aus einer Struktur der Formel II:



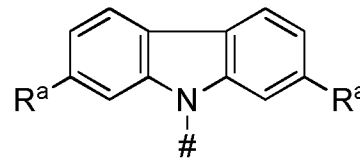
Formel II

wobei für # und R^a die oben genannten Definitionen gelten.

In einer weiteren Ausführungsform der erfindungsgemäßen organischen Moleküle weist die Gruppe D eine der Formel IIa oder der Formel IIb auf oder besteht daraus:



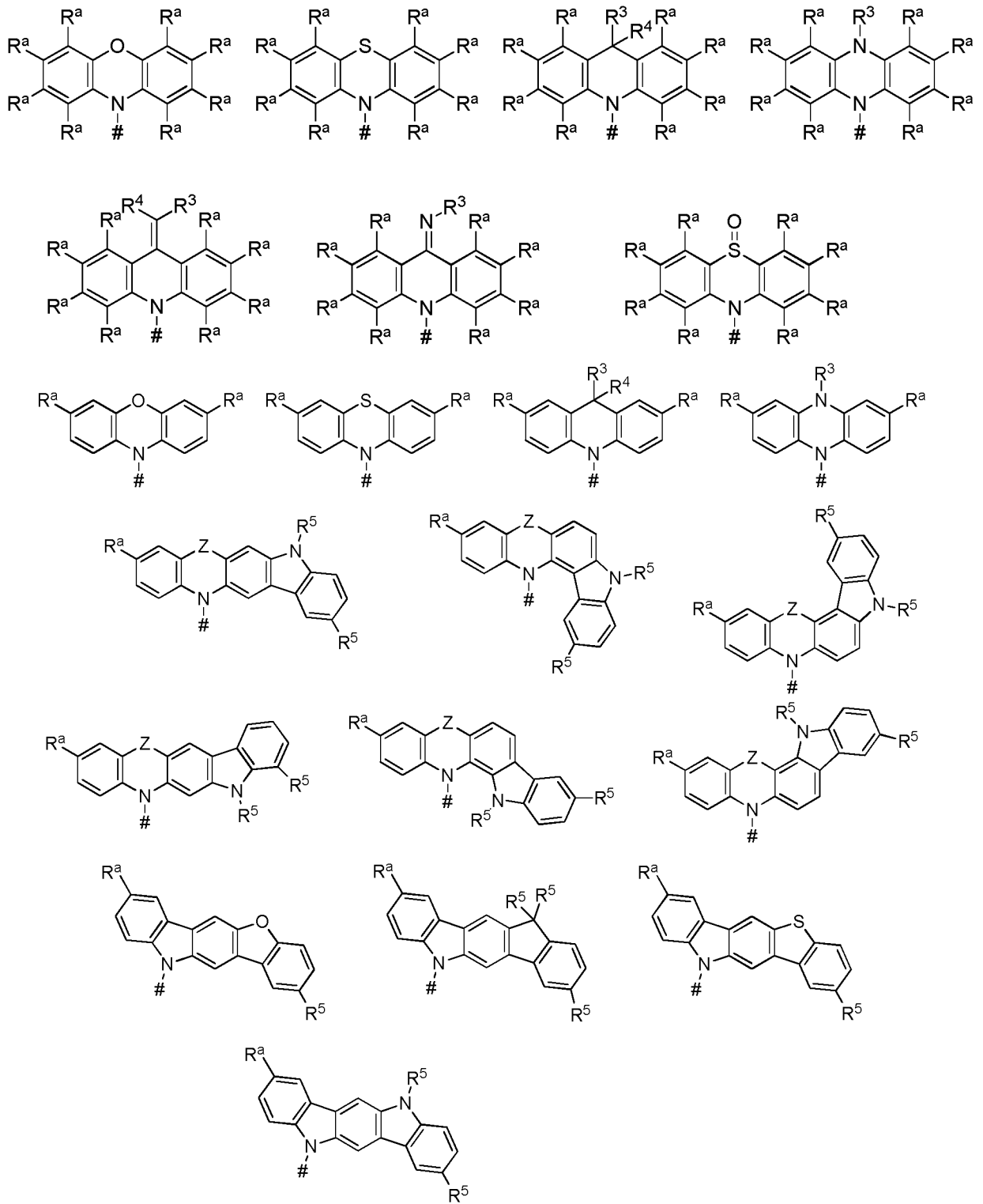
Formel IIa

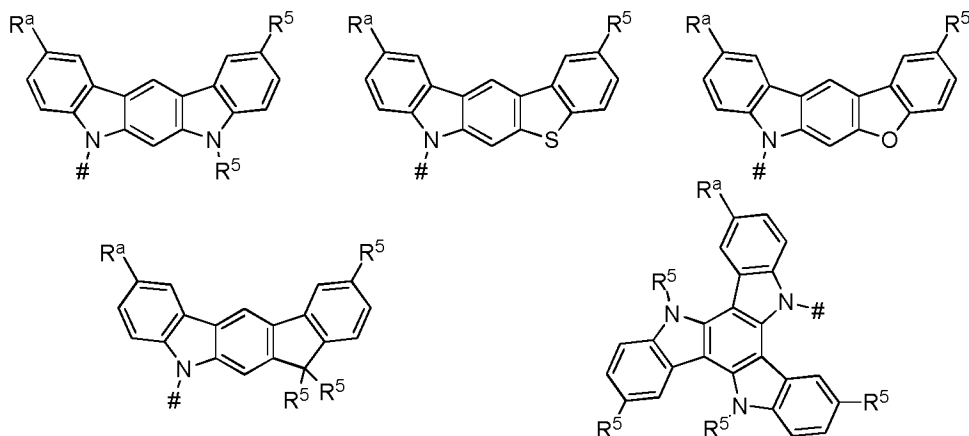


Formel IIb

wobei für #, und R^a die oben genannten Definitionen gelten.

Im Folgenden sind beispielhaft Ausführungsformen der Gruppe D gezeigt:





wobei für #, R^a und R^5 die oben genannten Definitionen gelten. In einer Ausführungsform ist der Rest R^5 bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Methyl, Ethyl, Phenyl und Mesityl. In einer Ausführungsform ist R^a bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, Methyl (Me), i-Propyl ($\text{CH}(\text{CH}_3)_2$) (iPr), t-Butyl ($t\text{Bu}$), Phenyl (Ph) und Diphenylamin (NPh_2).

Im Sinne dieser Erfindung enthält eine Arylgruppe 6 bis 60 aromatische Ringatome; eine Heteroarylgruppe enthält 5 bis 60 aromatische Ringatome, von denen mindestens eines ein Heteroatom darstellt. Die Heteroatome sind insbesondere N, O und/oder S. Werden in der Beschreibung bestimmter Ausführungsformen der Erfindung andere, von der genannten Definition abweichende Definitionen angegeben, beispielsweise bezüglich der Zahl der aromatischen Ringatome oder der enthaltenen Heteroatome, so gelten diese.

Unter einer Arylgruppe bzw. Heteroarylgruppe wird ein einfacher aromatischer Cyclus, also Benzol, bzw. ein einfacher heteroaromatischer Cyclus, beispielsweise Pyridin, Pyrimidin oder Thiophen, oder ein heteroaromatischer Polycyclus, beispielsweise 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 oder Kombinationen der genannten Gruppen.

Unter einer cyclischen Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe wird hier eine monocyclische, eine bicyclische oder eine polycyclische Gruppe verstanden.

Im Rahmen der vorliegenden Erfindung werden unter einer C₁- bis C₄₀-Alkylgruppe, in der auch einzelne H-Atome oder CH₂-Gruppen durch die oben genannten Gruppen substituiert sein können, beispielsweise die Reste Methyl, Ethyl, n-Propyl, i-Propyl, Cyclopropyl, n-Butyl, i-Butyl, s-Butyl, t-Butyl, Cyclobutyl, 2-Methylbutyl, n-Pentyl, s-Pentyl, t-Pentyl, 2-Pentyl, neo-Pentyl, Cyclopentyl, n-Hexyl, s-Hexyl, t-Hexyl, 2-Hexyl, 3-Hexyl, neo-Hexyl, Cyclohexyl, 1-Methylcyclopentyl, 2-Methylpentyl, n-Heptyl, 2-Heptyl, 3-Heptyl, 4-Heptyl, Cycloheptyl, 1-Methylcyclohexyl, n-Octyl, 2-Ethylhexyl, Cyclooctyl, 1-Bicyclo[2,2,2]octyl, 2-Bicyclo[2,2,2]octyl, 2-(2,6-Dimethyl)octyl, 3-(3,7-Dimethyl)octyl, Adamantyl, Trifluor-methyl, Pentafluorethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, 1,1-Dimethyl-n-hex-1-yl-, 1,1-Dimethyl-n-hept-1-yl-, 1,1-Dimethyl-n-oct-1-yl-, 1,1-Dimethyl-n-dec-1-yl-, 1,1-Dimethyl-n-dodec-1-yl-, 1,1-Dimethyl-n-tetradec-1-yl-, 1,1-Dimethyl-n-hexadec-1-yl-, 1,1-Dimethyl-n-octadec-1-yl-, 1,1-Diethyl-n-hex-1-yl-, 1,1-Diethyl-n-hept-1-yl-, 1,1-Diethyl-n-oct-1-yl-, 1,1-Diethyl-n-dec-1-yl-, 1,1-Diethyl-n-dodec-1-yl-, 1,1-Diethyl-n-tetradec-1-yl-, 1,1-Diethyl-n-hexadec-1-yl-, 1,1-Diethyl-n-octadec-1-yl-, 1-(n-Propyl)-cyclohex-1-yl-, 1-(n-Butyl)-cyclohex-1-yl-, 1-(n-Hexyl)-cyclohex-1-yl-, 1-(n-Octyl)-cyclohex-1-yl- und 1-(n-Decyl)-cyclohex-1-yl verstanden. Unter einer Alkenylgruppe werden beispielsweise Ethenyl, Propenyl, Butenyl, Pentenyl, Cyclopentenyl, Hexenyl, Cyclohexenyl, Heptenyl, Cycloheptenyl, Octenyl, Cyclooctenyl oder Cyclooctadienyl verstanden. Unter einer Alkynylgruppe werden beispielsweise Ethinyl, Propinyl, Butinyl, Pentinyl, Hexinyl, Heptinyl oder Octinyl verstanden. Unter einer C₁- bis C₄₀-Alkoxygruppe werden beispielsweise Methoxy, Trifluormethoxy, Ethoxy, n-Propoxy, i-Propoxy, n-Butoxy, i-Butoxy, s-Butoxy, t-Butoxy oder 2-Methylbutoxy verstanden.

Eine Ausführungsform der Erfindung betrifft organische Moleküle, welche einen $\Delta E(S_1-T_1)$ -Wert zwischen dem untersten angeregten Singulett (S₁)- und dem darunter liegenden Triplett (T₁)-Zustand von nicht höher als 5000 cm⁻¹, insbesondere nicht höher als 3000 cm⁻¹, oder nicht

höher als 1500 cm^{-1} oder 1000 cm^{-1} aufweisen und/oder eine Emissionslebensdauer von höchstens $150\text{ }\mu\text{s}$, insbesondere von höchstens $100\text{ }\mu\text{s}$, von höchstens $50\text{ }\mu\text{s}$, oder von höchstens $10\text{ }\mu\text{s}$ aufweisen und/oder eine Hauptemissionsbande mit einer Halbwertsbreite kleiner als 120 nm , insbesondere kleiner als 100 nm , kleiner als 80 nm , oder kleiner als 60 nm aufweisen.

Die Bestimmung des $\Delta E(S_1-T_1)$ -Wertes kann sowohl durch quantenmechanische Berechnungen mittels im Stand der Technik bekannten Computerprogrammen durchgeführt werden (z. B. mittels Turbomole-Programmen unter Ausführung von TD-DFT- und unter Berücksichtigung von CC2-Rechnungen) oder – wie weiter unten erläutert wird - experimentell bestimmt werden.

Die Energiedifferenz $\Delta E(S_1-T_1)$ lässt sich näherungsweise quantenmechanisch durch das mit dem Faktor 2 multiplizierte sogenannte Austauschintegral beschreiben. Dessen Wert hängt direkt ab von der Überlappung der Molekülorbitale. Diese Molekülorbitale sind über unterschiedliche Raumbereiche verteilt (teil-delokalisiert über π - bzw. π^* -Molekülorbitale). Das heißt, ein elektronischer Übergang zwischen den verschiedenen Molekülorbitalen repräsentiert einen sogenannten Charge-Transfer (CT)-Übergang. Je geringer die Überlappung der oben beschriebenen Molekülorbitale ist, desto ausgeprägter ist der elektronische Charge-Transfer Charakter. Das ist dann mit einer Abnahme des Austausch-Integrals und somit einer Abnahme der Energiedifferenz $\Delta E(S_1-T_1)$ verbunden.

Die Bestimmung des $\Delta E(S_1-T_1)$ -Wertes kann experimentell folgendermaßen erfolgen:

Für ein vorgegebenes organisches Molekül lässt sich der Energieabstand $\Delta E(S_1-T_1) = \Delta E$ unter Verwendung der oben angegebenen Gleichung (1) einfach bestimmen. Eine Umformung ergibt:

$$\ln\{\text{Int}(S_1 \rightarrow S_0)/\text{Int}(T_1 \rightarrow S_0)\} = \ln\{k(S_1)/k(T_1)\} - (\Delta E/k_B)(1/T) \quad (3)$$

Für die Messung der Intensitäten $\text{Int}(S_1 \rightarrow S_0)$ und $\text{Int}(T_1 \rightarrow S_0)$ kann jedes handelsübliche Spektralphotometer verwendet werden. Eine graphische Auftragung der bei verschiedenen Temperaturen gemessenen (logarithmierten) Intensitätsverhältnisse $\ln\{\text{Int}(S_1 \rightarrow S_0)/\text{Int}(T_1 \rightarrow S_0)\}$ gegen den Kehrwert der absoluten Temperatur T ergibt in der Regel eine Gerade. Die Messung wird in einem Temperaturbereich von Raumtemperatur (300 K) bis 77 K oder bis $4,2\text{ K}$ durchgeführt, wobei die Temperatur mittels eines Kryostaten eingestellt wird. Die Intensitäten werden aus den (korrigierten) Spektren bestimmt, wobei $\text{Int}(S_1 \rightarrow S_0)$ bzw. $\text{Int}(T_1 \rightarrow S_0)$ die integrierten Fluoreszenz- bzw. Phosphoreszenz-Bandenintensitäten

repräsentieren, welche sich mittels der zum Spektralphotometer gehörenden Programme bestimmen lassen. Die jeweiligen Übergänge (Bandenintensitäten) lassen sich leicht identifizieren, da die Triplett-Bande bei niedrigerer Energie liegt als die Singulett-Bande und mit sinkender Temperatur an Intensität gewinnt. Dabei werden die Messungen in sauerstofffreien verdünnten Lösungen (ca. 10^{-2} mol/L) oder an dünnen Filmen aus den entsprechenden Molekülen oder an mit den entsprechenden Molekülen dotierten Filmen durchgeführt. Verwendet man als Probe eine Lösung, so empfiehlt es sich, ein Lösemittel bzw. Lösemittelgemisch zu verwenden, das bei tiefen Temperaturen Gläser bildet, wie 2-Methyl-THF, THF (Tetrahydrofuran) oder aliphatische Kohlenwasserstoffe. Verwendet man als Probe einen Film, so eignet sich die Verwendung einer Matrix mit einer deutlich größeren Singulett- sowie Triplett-Energie als die der organischen Emittermoleküle, z. B. PMMA (Polymethylmethacrylat). Dieser Film kann aus Lösung aufgebracht werden.

Die Geradensteigung beträgt $-\Delta E/k_B$. Mit $k_B = 1,380 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1} = 0,695 \text{ cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ lässt sich der Energieabstand direkt bestimmen.

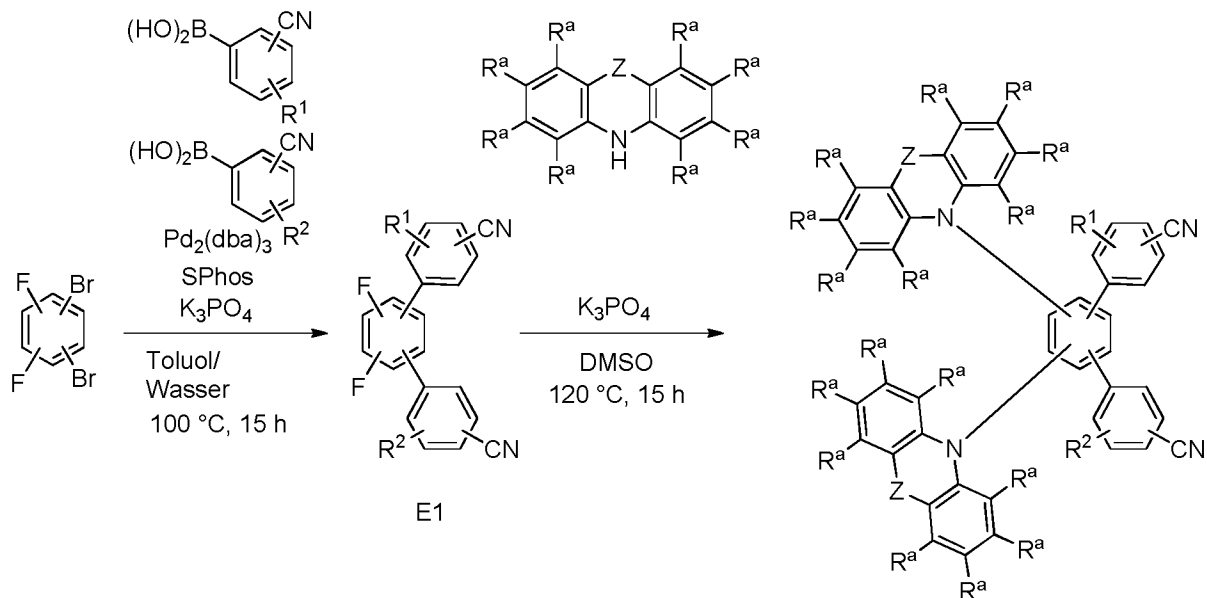
Eine äquivalente Betrachtungsweise zeigt, dass mittels der Messung der Temperaturabhängigkeit der Emissionsabklingzeit der $\Delta E(S_1-T_1)$ -Wert auch bestimmt werden kann.

Eine einfache, näherungsweise Abschätzung des $\Delta E(S_1-T_1)$ -Wertes kann auch dadurch vorgenommen werden, dass bei tiefer Temperatur (z. B. 77 K oder 4,2 K unter Verwendung eines Kryostaten) die Fluoreszenz- und Phosphoreszenz-Spektren registriert werden. Der $\Delta E(S_1-T_1)$ -Wert entspricht dann in Näherung der Energiedifferenz zwischen den hochenergetischen Anstiegsflanken der Fluoreszenz- bzw. Phosphoreszenz-Bande.

Je ausgeprägter der CT-Charakter eines organischen Moleküls ist, desto stärker verändern sich die elektronischen Übergangsenergien als Funktion der Lösungsmittelpolarität. So gibt bereits eine ausgeprägte Polaritätsabhängigkeit der Emissionsenergien einen Hinweis auf das Vorliegen kleiner $\Delta E(S_1-T_1)$ -Werte.

In einem weiteren Aspekt betrifft die Erfindung ein Verfahren zur Herstellung eines erfindungsgemäßen organischen Moleküls der hier beschriebenen Art (mit einer eventuellen Folgeumsetzung), wobei ein Dibromdifluorbenzol als Edukt eingesetzt wird. Erfindungsgemäße Dibromdifluorbenzole sind 1,2-Dibrom-4,5-difluorbenzol, 1,3-Dibrom-4,6-difluorbenzol, 1,5-Dibrom-2,4-difluorbenzol, 1,4-Dibrom-2,5-difluorbenzol, 1,3-Dibrom-2,5-

difluorbenzol, 1,4-Dibrom-2,6-difluorbenzol, 1,3-Dibrom-2,4-difluorbenzol, 1,4-Dibrom-2,3-difluorbenzol oder 1,2-Dibrom-3,6-difluorbenzol.



In einer Ausführungsform wird das Dibromdifluorbenzol mit einer Benzonitrilboronsäure in einer Palladium-katalysierten Kreuzkupplungsreaktion umgesetzt. Das Produkt wird durch Deprotonierung des der Formel I-1 entsprechenden Amins und anschließender nukleophiler Substitution der Fluorgruppen erhalten. Hierbei wird ein Stickstoffheterozyklus im Sinne einer nukleophilen aromatischen Substitution mit einem Edukt E1 umgesetzt. Typische Bedingungen beinhalten die Verwendung einer Base wie beispielweise tribasisches Kaliumphosphat oder Natriumhydrid in einem aprotisch polarem Lösungsmittel wie beispielweise Dimethylsulfoxid (DMSO) oder N,N-Dimethylformamid (DMF). Durch Wahl des Dibromdifluorbenzol und der relativen Position der Boronsäure- und der Cyanogruppe und des Restes R^1 am Phenylring können unterschiedliche Substitutionsmuster erhalten werden.

In einem weiteren Aspekt betrifft die Erfindung die Verwendung der organischen Moleküle als lumineszierender Emitter oder als Hostmaterial in einer organischen optoelektronischen Vorrichtung, insbesondere wobei die organische optoelektronische Vorrichtung 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.

In einem weiteren Aspekt betrifft die Erfindung eine Zusammensetzung aufweisend oder bestehend aus:

- (a) mindestens einem erfindungsgemäßen organischen Molekül, insbesondere als Emitter und/oder Host, und
- (b) mindestens ein, d. h. ein oder mehrere Emitter- und/oder Hostmaterialien, die von dem erfindungsgemäßen organischen Molekül verschiedenen ist bzw. sind und
- (c) optional eine oder mehreren Farbstoffen und/ oder einem oder mehreren organischen Lösungsmitteln.

In einer Ausführungsform besteht die erfindungsgemäße Zusammensetzung aus einem erfindungsgemäßen organischen Molekül und einem oder mehreren Hostmaterialien. Das oder die Hostmaterialien weisen insbesondere Triplet (T1)- und Singulett (S1)- Energieniveaus auf, die energetisch höher liegen als die Triplet (T1)- und Singulett (S1)- Energieniveaus des erfindungsgemäßen organischen Moleküls. In einer Ausführungsform weist die Zusammensetzung neben dem erfindungsgemäßen organischen Molekül ein elektronendominantes und ein lochdominantes Hostmaterial auf. Das höchste besetzte Orbital (HOMO) und das niedrigste unbesetzte Orbital (LUMO) des lochdominanten Hostmaterials liegen energetisch insbesondere höher als das des elektronendominanten Hostmaterials. Das HOMO des lochdominanten Hostmaterials liegt energetisch unter dem HOMO des erfindungsgemäßen organischen Moleküls, während das LUMO des elektronendominanten Hostmaterials energetisch über dem LUMO des erfindungsgemäßen organischen Moleküls liegt. Um Exciplex-Formation zwischen Emitter und Hostmaterial oder Hostmaterialien zu vermeiden, sollten die Materialien so gewählt sein, dass die Energieabstände zwischen den jeweiligen Orbitalen gering sind. Der Abstand zwischen dem LUMO des elektronendominanten Hostmaterials und dem LUMO des erfindungsgemäßen organischen Moleküls beträgt insbesondere weniger als 0,5 eV, bevorzugt weniger als 0,3 eV, noch bevorzugter weniger als 0,2 eV. Der Abstand zwischen dem HOMO des lochdominanten Hostmaterials und dem HOMO des erfindungsgemäßen organischen Moleküls beträgt insbesondere weniger als 0,5 eV, bevorzugt weniger als 0,3 eV, noch bevorzugter weniger als 0,2 eV.

In einem weiteren Aspekt betrifft die Erfindung eine organische optoelektronische Vorrichtung, die ein erfindungsgemäßes organisches Molekül oder eine erfindungsgemäße Zusammensetzung aufweist. Die organische optoelektronische Vorrichtung ist insbesondere

ausgeformt als eine Vorrichtung ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus organischer lichtemittierender Diode (OLED); lichtemittierender elektrochemischer Zelle; OLED-Sensor, insbesondere nicht hermetisch nach außen abgeschirmten Gas- und Dampf-Sensoren; organischer Diode; organischer Solarzelle; organischem Transistor; organischem Feldeffekttransistor; organischem Laser und Down-Konversion-Element.

Eine organische optoelektronische Vorrichtung aufweisend

- ein Substrat,
- eine Anode und
- eine Kathode, wobei die Anode oder die Kathode auf das Substrat aufgebracht sind, und
- mindestens eine lichtemittierende Schicht, die zwischen Anode und Kathode angeordnet ist und die ein erfindungsgemäßes organisches Molekül aufweist, stellt einen weitere Ausführungsform der Erfindung dar.

In einer Ausführungsform handelt es sich bei der optoelektronischen Vorrichtung um eine OLED. Eine typische OLED weist beispielsweise folgenden Schichtaufbau auf:

1. Substrat (Trägermaterial)
2. Anode
3. Lochinjektionsschicht (hole injection layer, HIL)
4. Lochtransportschicht (hole transport layer, HTL)
5. Elektronenblockierschicht (electron blocking layer, EBL)
6. Emitterschicht (emitting layer, EML)
7. Lochblockierschicht (hole blocking layer, HBL)
8. Elektronenleitschicht (electron transport layer, ETL)
9. Elektroneninjektionsschicht (electron injection layer, EIL)
10. Kathode.

Dabei sind einzelne Schichten lediglich in optionaler Weise vorhanden. Weiterhin können mehrere dieser Schichten zusammenfallen. Und es können einzelne Schichten mehrfach im Bauteil vorhanden sein.

Gemäß einer Ausführungsform ist mindestens eine Elektrode des organischen Bauelements transluzent ausgebildet. Hier wird mit "transluzent" eine Schicht bezeichnet, die durchlässig für sichtbares Licht ist. Dabei kann die transluzente Schicht klar durchscheinend, also transparent, oder zumindest teilweise Licht absorbierend und/oder teilweise Licht streuend sein, so dass die transluzente Schicht beispielsweise auch diffus oder milchig durchscheinend sein kann. Insbesondere ist eine hier als transluzent bezeichnete Schicht möglichst

transparent ausgebildet, so dass insbesondere die Absorption von Licht so gering wie möglich ist.

Gemäß einer weiteren Ausführungsform weist das organische Bauelement, insbesondere eine OLED, einen dem Fachmann bekannten invertierten Aufbau auf.

Gemäß einer weiteren Ausführungsform weist das organische Bauelement, insbesondere eine OLED, einen dem Fachmann bekannten gestapelten Aufbau auf. Hierdurch kann die Erzeugung von Mischlicht ermöglicht werden. Weiterhin können bei praktisch gleicher Effizienz und identischer Leuchtdichte signifikant längere Lebensdauern im Vergleich zu üblichen OLEDs erzielt werden.

Über den Elektroden und den organischen Schichten kann weiterhin noch eine Verkapselung angeordnet sein. Die Verkapselung kann beispielsweise in Form eines Glasdeckels oder in Form einer Dünnschichtverkapselung ausgeführt sein.

Als Trägermaterial der optoelektronischen Vorrichtung kann beispielsweise Glas, Quarz, Kunststoff, Metall, ein Siliziumwafer oder jedes andere geeignete feste oder flexible, optional durchsichtige Material dienen. Das Trägermaterial kann beispielsweise ein oder mehrere Materialien in Form einer Schicht, einer Folie, einer Platte oder einem Laminat aufweisen.

Als Anode der optoelektronischen Vorrichtung können beispielsweise transparente leitende Metalloxide wie beispielsweise ITO (Indium-Zinn-Oxid), Zinkoxid, Zinnoxid, Cadmiumoxid, Titanoxid, Indiumoxid oder Aluminiumzinkoxid (AZO), Zn_2SnO_4 , $CdSnO_3$, $ZnSnO_3$, $MgIn_2O_4$, $GaInO_3$, $Zn_2In_2O_5$ oder $In_4Sn_3O_{12}$ oder Mischungen unterschiedlicher transparenter leitender Oxide dienen.

Als Materialien einer HIL können beispielsweise PEDOT:PSS (Poly-3,4-ethylendioxythiophen:Polystyrolsulfonsäure), PEDOT (Poly-3,4-ethylendioxythiophen), m-MTDATA (4,4',4''-Tris[phenyl(m-tolyl)amino]triphenylamin), Spiro-TAD (2,2',7,7'-Tetrakis(N,N-diphenylamino)-9,9-spirobifluoren), DNTPD (4,4'-Bis[N-[4-{N,N-bis(3-methylphenyl)amino}phenyl]-N-phenylamino]biphenyl), NPB (N,N'-Bis-(1-naphthalenyl)-N,N'-bisphenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamin), NPNPB (N,N'-Diphenyl-N,N'-di-[4-(N,N-diphenylamino)phenyl]benzol), MeO-TPD (N,N,N',N'-Tetrakis(4-methoxyphenyl)benzol), HAT-CN (1,4,5,8,9,11-Hexaazatriphenylen-hexacarbonitril) oder Spiro-NPD (N,N'-diphenyl-N,N'-Bis-(1-naphthyl)-9,9'-spirobifluorene-2,7-diamin) dienen. Beispielhaft ist die Schichtdicke 10-80 nm.

Desweiteren können kleine Moleküle verwendet werden (z. B. Kupfer-Phthalocyanin (CuPc z. B. 10 nm dick)) oder Metalloxide wie beispielhaft MoO_3 , V_2O_5 .

Als Materialien einer HTL können tertiäre Amine, Carbazolderivate, mit Polystyrolsulfonsäure dotiertes Polyethylendioxythiophen, mit Camphersulfonsäure dotiertes Polyanilin poly-TPD (Poly(4-butylphenyl-diphenyl-amin)), $[\alpha]$ -NPD (Poly(4-butylphenyl-diphenyl-amin)), TAPC (4,4'-Cyclohexyliden-bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamin]), TCTA (Tris(4-carbazoyl-9-ylphenyl)amin), 2-TNATA (4,4',4''-Tris[2-naphthyl(phenyl)amino]triphenylamin), Spiro-TAD, DNTPD, NPB, NPNPB, MeO-TPD, HAT-CN oder TrisPcz (9,9'-Diphenyl-6-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)-9H,9'H-3,3'-bicarbazol) dienen. Beispielhaft ist die Schichtdicke 10-100 nm.

Die HTL kann eine p-dotierte Schicht aufweisen, die einen anorganischen oder organischen Dotierstoff in einer organischen löcherleitenden Matrix aufweist. Als anorganischer Dotierstoff können beispielsweise Übergangsmetalloxide wie etwa Vanadiumoxid, Molybdänoxid oder Wolframoxid genutzt werden. Als organische Dotierstoffe können beispielsweise Tetrafluorotetracyanoquinodimethan (F4-TCNQ), Kupfer-Pentafluorobenzoat (Cu(I)pFBz) oder Übergangsmetallkomplexe verwendet werden. Beispielhaft ist die Schichtdicke 10 nm bis 100 nm.

Als Materialien einer Elektronenblockierschicht können beispielsweise mCP (1,3-Bis(carbazol-9-yl)benzol), TCTA, 2-TNATA, mCBP (3,3-Di(9H-carbazol-9-yl)biphenyl), tris-Pcz (9,9'-Diphenyl-6-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)-9H,9'H-3,3'-bicarbazol), CzSi (9-(4-tert-Butylphenyl)-3,6-bis(triphenylsilyl)-9H-carbazol) oder DCB (N,N'-Dicarbazoyl-1,4-dimethylbenzol) dienen. Beispielhaft ist die Schichtdicke 10nm bis 50 nm.

Die Emitter-Schicht EML oder Emissionsschicht besteht aus oder enthält Emittermaterial oder eine Mischung aufweisend mindestens zwei Emittermaterialien und optional ein oder mehreren Hostmaterialien. Geeignete Hostmaterialien sind beispielsweise mCP, TCTA, 2-TNATA, mCBP, CBP (4,4'-Bis-(N-carbazoyl)-biphenyl), Sif87 (Dibenzo[b,d]thiophen-2-yltriphenylsilan), Sif88 (Dibenzo[b,d]thiophen-2-yl)diphenylsilan) oder DPEPO (Bis[2-((oxo)diphenylphosphino)phenyl]ether). Für im Grünen oder im Roten emittierendes Emittermaterial oder einer Mischung aufweisend mindestens zwei Emittermaterialien eignen sich die gängigen Matrixmaterialien wie CBP. Für im Blauen emittierendes Emittermaterial oder einer Mischung aufweisend mindestens zwei Emittermaterialien können UHG-Matrixmaterialien (Ultra-High energy Gap Materialien) (siehe z. B. M.E. Thompson et al., Chem. Mater. 2004, 16, 4743) oder andere sogenannten Wide-Gap-Matrixmaterialien eingesetzt werden. Beispielhaft ist die Schichtdicke 10 nm bis 250 nm.

Die Lochblockierschicht HBL kann beispielsweise BCP (2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthrolin = Bathocuproin), Bis-(2-methyl-8-hydroxychinolinato)-(4-phenylphenolato)-aluminium(III) (BALq), Nbphen (2,9-Bis(naphthalen-2-yl)-4,7-diphenyl-1,10-phenanthrolin), Alq3 (Aluminium-tris(8-hydroxychinolin)), TSPO1 (Diphenyl-4-triphenylsilylphenylphosphinoxid) oder TCB/TCP (1,3,5-Tris(N-carbazolyl)benzol/ 1,3,5-tris(carbazol-9-yl)benzol) aufweisen. Beispielhaft ist die Schichtdicke 10 nm bis 50 nm.

Die Elektronentransportschicht ETL kann beispielsweise Materialien auf Basis von AlQ₃, TSPO1, BPyTP2 (2,7-Di(2,2'-bipyridin-5-yl)triphenyl), Sif87, Sif88, BmPyPhB (1,3-Bis[3,5-di(pyridin-3-yl)phenyl]benzol) oder BTB (4,4'-Bis-[2-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazinyl)]-1,1'-biphenyl) aufweisen. Beispielhaft ist die Schichtdicke 10 nm bis 200 nm.

Als Materialien einer dünnen Elektroneninjektionsschicht EIL können beispielsweise CsF, LiF, 8-Hydroxyquinolinolatolithium (Liq), Li₂O, BaF₂, MgO oder NaF verwendet werden.

Als Materialien der Kathodenschicht können Metalle oder Legierungen dienen, beispielsweise Al, Al > AlF, Ag, Pt, Au, Mg, Ag:Mg. Typische Schichtdicken betragen 100 nm bis 200 nm. Insbesondere werden ein oder mehrere Metalle verwendet, die stabil an der Luft sind und/oder die selbstpassivierend, beispielsweise durch Ausbildung einer dünnen schützenden Oxidschicht, sind.

Als Materialien zu Verkapselung sind beispielsweise Aluminiumoxid, Vanadiumoxid, Zinkoxid, Zirkoniumoxid, Titanoxid, Hafniumoxid, Lanthanoxid, Tantaloxid geeignet.

Dem Fachmann ist hierbei bekannt, welche Kombinationen der Materialien für eine optoelektronische Vorrichtung enthaltend ein erfindungsgemäßes organisches Molekül zu nutzen sind.

In einer Ausführungsform der erfindungsgemäßen organischen optoelektronischen Vorrichtung ist das erfindungsgemäße organische Molekül als Emissionsmaterial in einer lichtemittierenden Schicht EML eingesetzt, wobei es entweder als Reinschicht oder in Kombination mit einem oder mehreren Hostmaterialien eingesetzt ist.

Der Massenanteil des erfindungsgemäßen organischen Moleküls an der Emitter-Schicht EML beträgt in einer weiteren Ausführungsform in einer lichtemittierenden Schicht in optischen Licht emittierenden Vorrichtungen, insbesondere in OLEDs, zwischen 1 % und 80 %. In einer Ausführungsform der erfindungsgemäßen organischen optoelektronischen Vorrichtung ist die

lichtemittierende Schicht auf ein Substrat aufgebracht, wobei bevorzugt eine Anode und eine Kathode auf das Substrat aufgebracht sind und die lichtemittierende Schicht zwischen Anode und Kathode aufgebracht ist.

Die lichtemittierende Schicht kann ausschließlich ein erfindungsgemäßes organisches Molekül in 100 % Konzentration aufweisen, wobei die Anode und die Kathode auf das Substrat aufgebracht sind, und die lichtemittierende Schicht zwischen Anode und Kathode aufgebracht ist.

In einer Ausführungsform der erfindungsgemäßen organischen optoelektronischen Vorrichtung sind eine löcher- und elektroneninjizierende Schicht zwischen Anode und Kathode, und eine löcher- und elektronentransportierende Schicht zwischen löcher- und elektroneninjizierender Schicht, und die lichtemittierende Schicht zwischen löcher- und elektronentransportierender Schicht aufgebracht.

Die organische optoelektronische Vorrichtung weist in einer weiteren Ausführungsform der Erfindung auf: ein Substrat, eine Anode, eine Kathode und mindestens je eine löcher- und elektroneninjizierende Schicht, und mindestens je eine löcher- und elektronentransportierende Schicht, und mindestens eine lichtemittierende Schicht, die erfindungsgemäßes organisches Molekül und ein oder mehrere Hostmaterialien aufweist, deren Triplett (T1)- und Singulett (S1)-Energieniveaus energetisch höher liegen als die Triplett (T1)- und Singulett (S1)-Energieniveaus des organischen Moleküls, 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 elektroneninjizierender Schicht aufgebracht ist, und die lichtemittierende Schicht zwischen löcher- und elektronentransportierender Schicht aufgebracht ist.

In einem weiteren Aspekt betrifft die Erfindung ein Verfahren zur Herstellung eines optoelektronischen Bauelements. Dabei wird ein erfindungsgemäßes organisches Molekül verwendet.

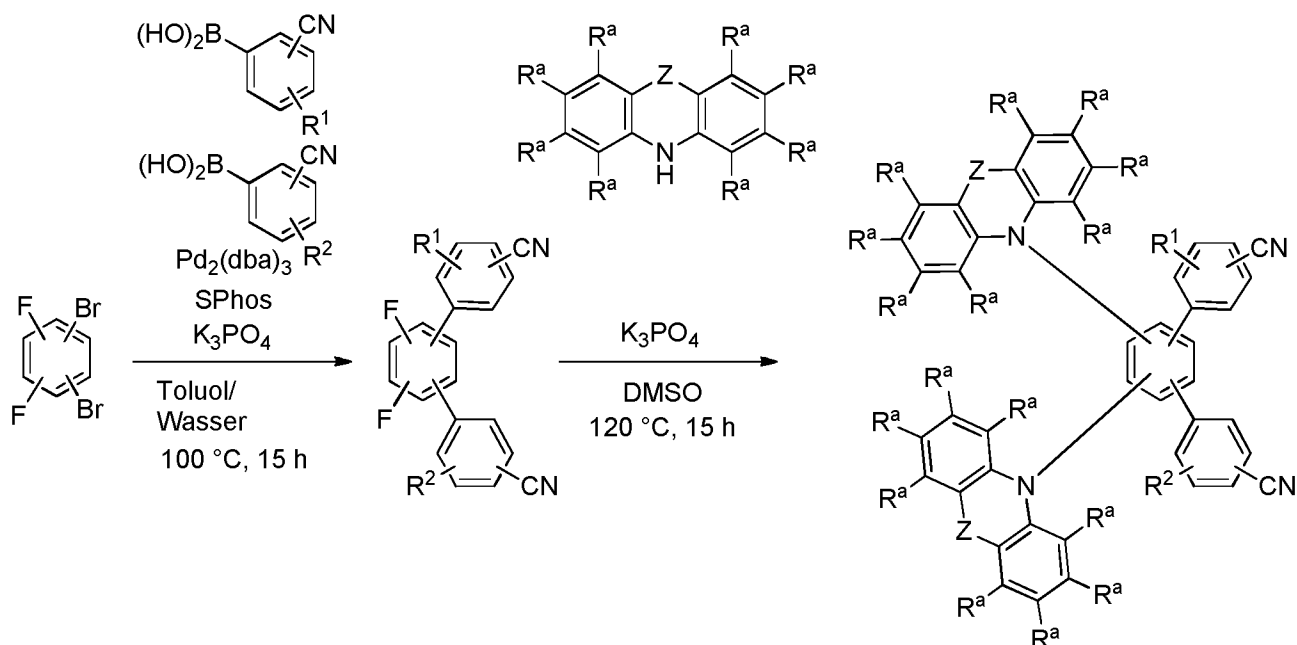
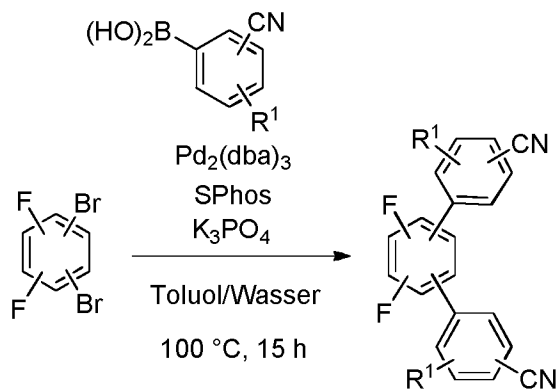
In einer Ausführungsform umfasst das Herstellungsverfahren die Verarbeitung des erfindungsgemäßen organischen Moleküls mittels eines Vakuumverdampfungsverfahrens oder aus einer Lösung.

Erfindungsgemäß ist auch ein Verfahren zur Herstellung einer erfindungsgemäßen optoelektronischen Vorrichtung, bei dem mindestens eine Schicht der optoelektronischen Vorrichtung

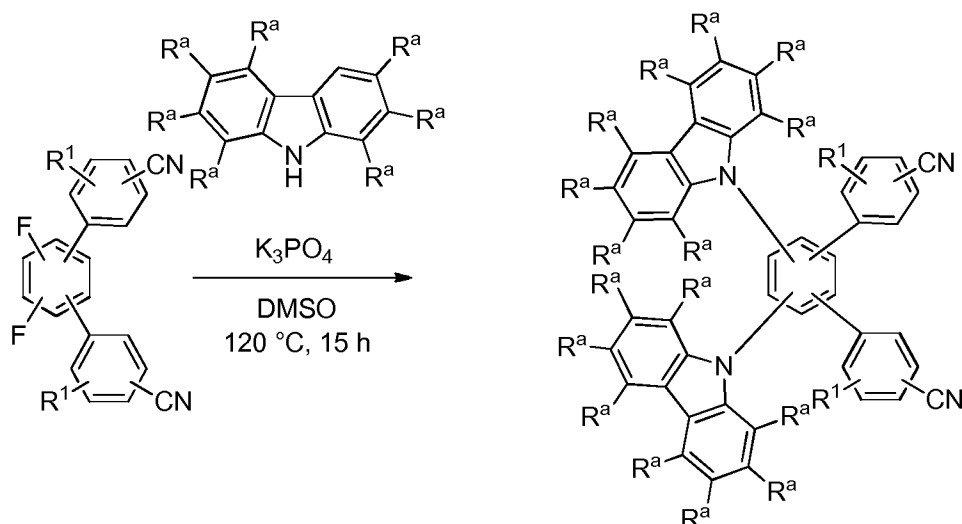
- mit einem Sublimationsverfahren beschichtet wird,
- mit einem OVPD (Organic Vapor Phase Deposition) Verfahren beschichtet wird,
- mit einer Trägergassublimation beschichtet wird, und/oder
- aus Lösung oder mit einem Druckverfahren hergestellt wird.

Beispiele

Allgemeines Syntheschema

Allgemeine Synthesevorschrift **AAV1**:

Das entsprechende Difluor-dibrom-benzol (2,00 mmol, 1,00 Äquiv.), die Boronsäure (7,20 mmol, 3,6 Äquiv.), Tris(dibenzylideneacetone)dipalladium (0,09 mmol, 0,04 Äquiv.), 2-Dicyclohexylphosphino-2',6'-dimethoxybiphenyl (0,35 mmol, 0,16 Äquiv.) und tribasisches Kaliumphosphat (11,0 mmol, 5 Äquiv.) werden unter Stickstoff in Toluol (40 mL) und Wasser (8 mL) für 12 – 24 h bei $100\text{ }^\circ\text{C}$ gerührt. Anschließend wird die Reaktionsmischung auf 400 mL gesättigte NaCl-Lösung gegeben und mit Essigsäureethylester extrahiert (2 x 200 mL). Die vereinigten organischen Phasen werden mit gesättigter NaCl-Lösung (200 mL) gewaschen, getrocknet über $MgSO_4$ und das Lösemittel im Vakuum entfernt. Das erhaltene Rohprodukt wird durch Flash-Chromatographie oder durch Umkristallisation gereinigt.

Allgemeine Synthesevorschrift **AAV2**:

Das entsprechende Difluor- -dibenzonitril-benzol (10,0 mmol, 1,00 Äquiv.), ein entsprechendes Carbazolderivat (20,0 mmol, 2,00 Äquiv.) und tribasisches Kaliumphosphat (40,0 mmol, 4,00 Äquiv.) werden unter Stickstoff in DMSO (30 mL) suspendiert und bei $120\text{ }^\circ\text{C}$ für 12 bis 24 h gerührt. Anschließend wird die Reaktionsmischung auf 400 mL gesättigte NaCl-Lösung gegeben und mit Essigsäureethylester extrahiert (2 x 200 mL). Die vereinigten organischen Phasen werden mit gesättigter NaCl-Lösung (200 mL) gewaschen, getrocknet über $MgSO_4$ und das Lösemittel im Vakuum entfernt. Das erhaltene Rohprodukt wird durch Flash-Chromatographie oder durch Umkristallisation gereinigt.

Photophysikalische Messungen

Vorbehandlung von optischen Gläsern

Alle Gläser (Küvetten und Substrate aus Quarzglas, Durchmesser: 1 cm) wurden nach jeder Benutzung gereinigt: Je dreimaliges Spülen mit Dichlormethan, Aceton, Ethanol, demineralisiertem Wasser, Einlegen in 5 % Hellmanex-Lösung für 24 h, gründliches Ausspülen mit demineralisiertem Wasser. Zum Trocknen wurden die optischen Gläser mit Stickstoff abgeblasen.

Probenvorbereitung, Film: Spin-Coating

Gerät: Spin150, SPS euro.

Die Probenkonzentration entsprach 10 mg/ml, angesetzt in Toluol oder Chlorbenzol.

Programm: 1) 3 s bei 400 U/min; 2) 20 s bei 1000 U/min bei 1000 Upm/ s. 3) 10 s bei 4000 U/min bei 1000 Upm/s. Die Filme wurden nach dem Beschichten für 1 min bei $70\text{ }^\circ\text{C}$ an Luft auf einer Präzisionsheizplatte von LHG getrocknet.

Photolumineszenzspektroskopie und TCSPC

Steady-state Emissionsspektroskopie wurde mit einem Fluoreszenzspektrometer der Horiba Scientific, Modell FluoroMax-4 durchgeführt, ausgestattet mit einer 150 W Xenon-Arc Lampe, Anregungs- und Emissionsmonochromatoren und einer Hamamatsu R928 Photomultiplier-Röhre, sowie einer „zeit-korrelierten Einphotonzähl“ (*Time-correlated single-photon counting*, TCSPC)-Option. Emissions- und Anregungsspektren wurden korrigiert durch Standardkorrekturkurven.

Die Emissionsabklingzeiten wurden ebenfalls auf diesem System gemessen unter Verwendung der TCSPC-Methode mit dem FM-2013 Zubehör und einem TCSPC-Hub von Horiba Yvon Jobin. Anregungsquellen:

NanoLED 370 (Wellenlänge: 371 nm, Pulsdauer: 1,1 ns)

NanoLED 290 (Wellenlänge: 294 nm, Pulsdauer: <1 ns)

SpectraLED 310 (Wellenlänge: 314 nm)

SpectraLED 355 (Wellenlänge: 355 nm).

Die Auswertung (exponentielles Fitten) erfolgte mit dem Softwarepaket DataStation und der DAS 6 Auswertungssoftware. Der Fit wurde über die Chi-Quadrat-Methode angegeben

$$\chi^2 = \sum_{k=1}^i \frac{(e_i - o_i)^2}{e_i}$$

mit e_i : Durch den Fit vorhergesagte Größe und o_i : gemessenen Größe.

Quanteneffizienzbestimmung

Die Messung der Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) erfolgte mittels eines *Absolute PL Quantum Yield Measurement C9920-03G*-Systems der *Hamamatsu Photonics*. Dieses besteht aus einer 150 W Xenon-Gasentladungslampe, automatisch justierbaren Czerny-Turner Monochromatoren (250 – 950 nm) und einer Ulbricht-Kugel mit hochreflektierender Spektral-Beschichtung (einem Teflon-Derivat), die über ein Glasfaserkabel mit einem PMA-12 Vielkanaldetektor mit BT- (*back thinned*-) CCD-Chip mit 1024 x 122 Pixeln (Größe 24 x 24 μm) verbunden ist. Die Auswertung der Quanteneffizienz und der CIE-Koordinaten erfolgte mit Hilfe der Software U6039-05 Version 3.6.0.

Das Emissionsmaximum wird in nm, die Quantenausbeute Φ in % und die CIE-Farbkoordinaten als x,y-Werte angegeben.

Die Photolumineszenzquantenausbeute wurde nach folgendem Protokoll bestimmt:

1) Durchführung der Qualitätssicherung: Als Referenzmaterial dient Anthracene in Ethanol mit bekannter Konzentration.

2) Ermitteln der Anregungswellenlänge: Es wurde zuerst das Absorptionsmaximum des organischen Moleküls bestimmt und mit diesem angeregt.

3) Durchführung der Probenmessung:

Es wurde von entgasten Lösungen und Filmen unter Stickstoff-Atmosphäre die absolute Quantenausbeute bestimmt.

Die Berechnung erfolgte systemintern nach folgender Gleichung:

$$\Phi_{PL} = \frac{n_{\text{photon, emittiert}}}{n_{\text{photon, absorbiert}}} = \frac{\int \frac{\lambda}{hc} [Int_{\text{emittiert}}^{\text{Probe}}(\lambda) - Int_{\text{absorbiert}}^{\text{Probe}}(\lambda)] d\lambda}{\int \frac{\lambda}{hc} [Int_{\text{emittiert}}^{\text{Referenz}}(\lambda) - Int_{\text{absorbiert}}^{\text{Referenz}}(\lambda)] d\lambda}$$

mit der Photonenzahl n_{photon} und der Intensität Int .

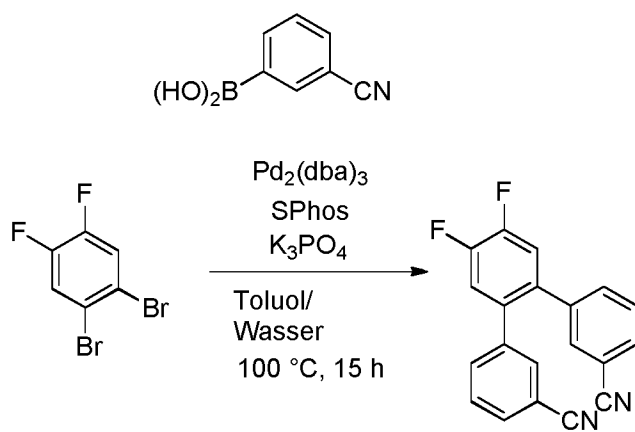
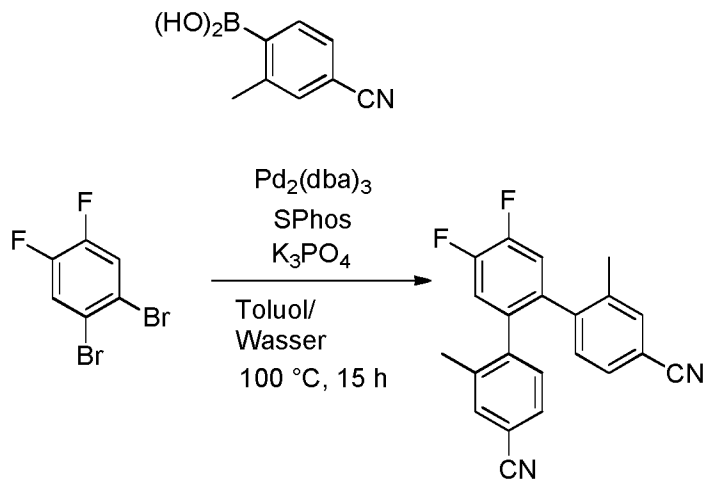
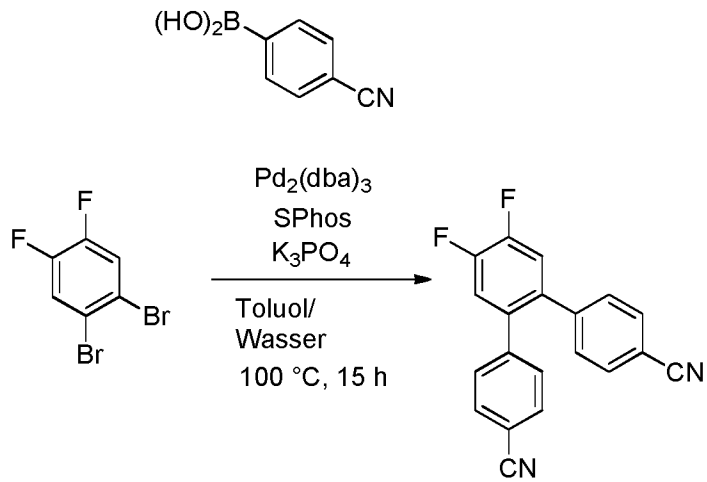
Herstellung und Charakterisierung von organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen aus der Gasphase

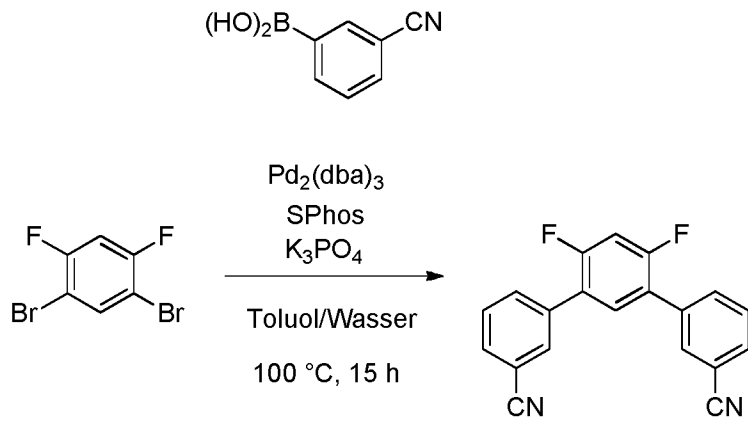
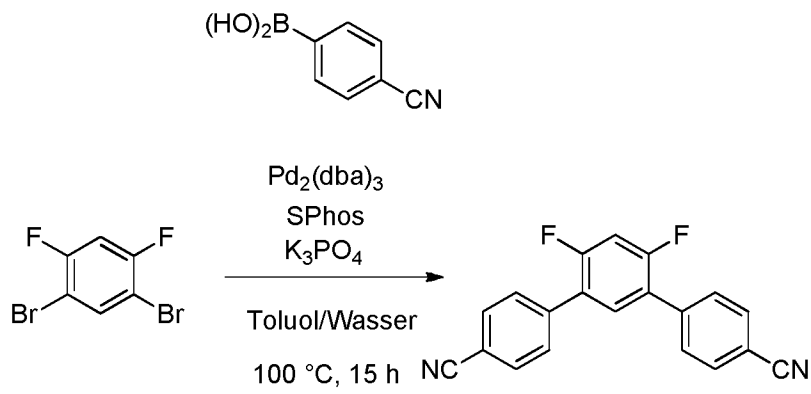
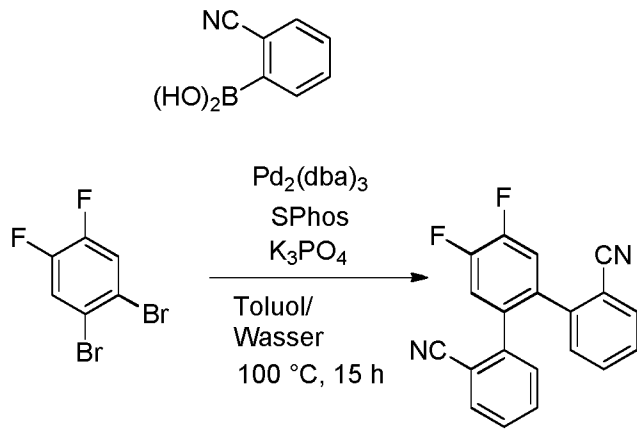
Mit den erfindungsgemäßen organischen Molekülen können OLED-Devices mittels Vakuum-Sublimationstechnik erstellt werden.

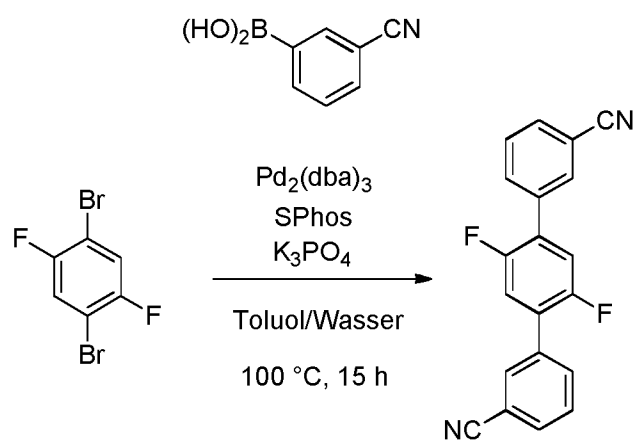
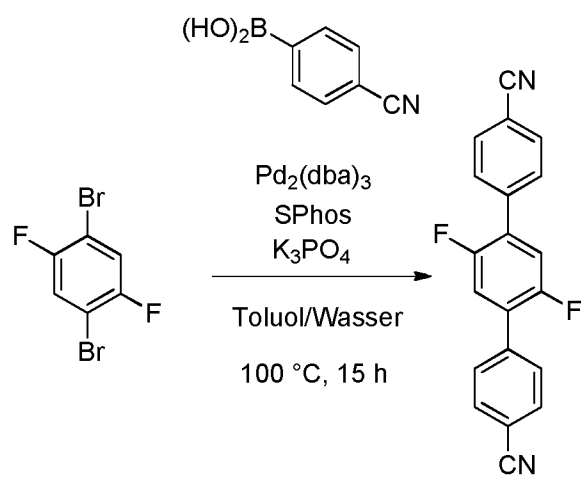
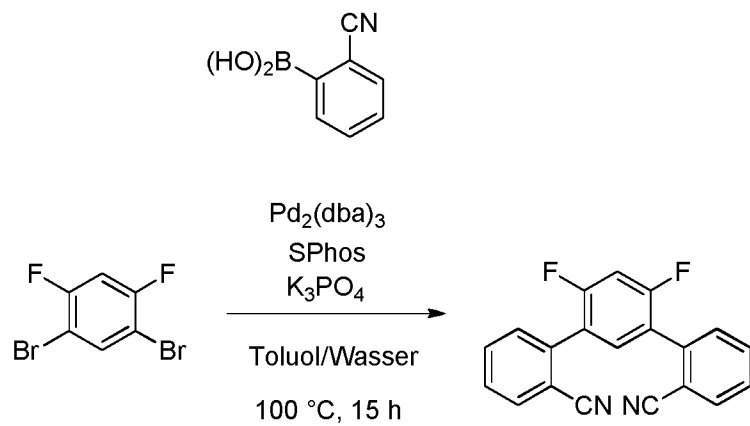
Diese noch nicht optimierten OLEDs können standardmäßig charakterisiert werden; hierfür werden die Elektrolumineszenzspektren, die externe Quanteneffizienz (gemessen in %) in Abhängigkeit von der Helligkeit, berechnet aus dem von der Fotodiode detektiertem Licht, den Elektrolumineszenzspektren und dem Strom aufgenommen.

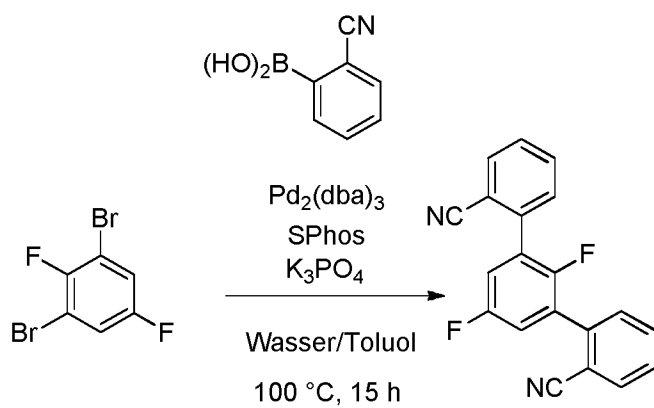
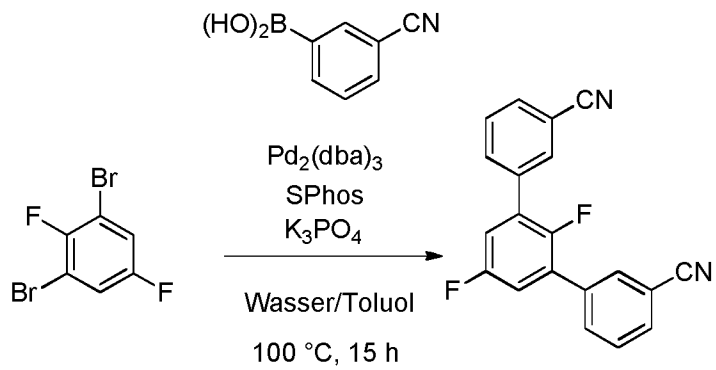
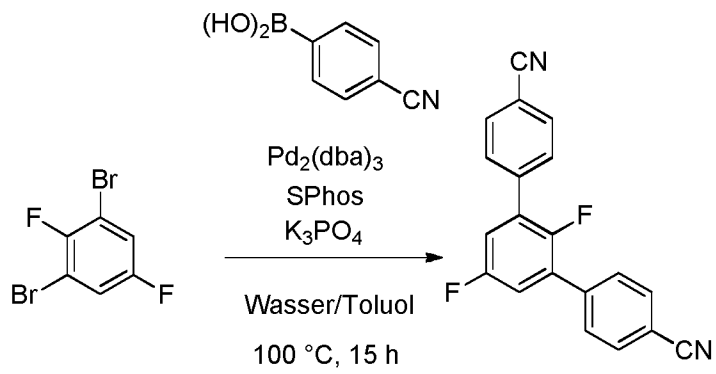
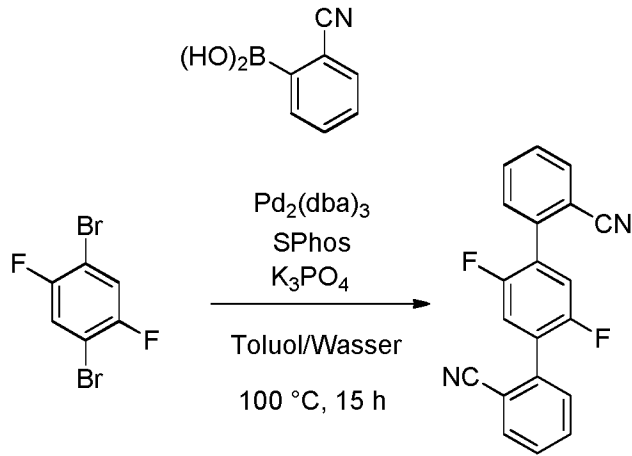
Die am Device anliegende Spannung beträgt z. B. 2,5 V bis 15 V.

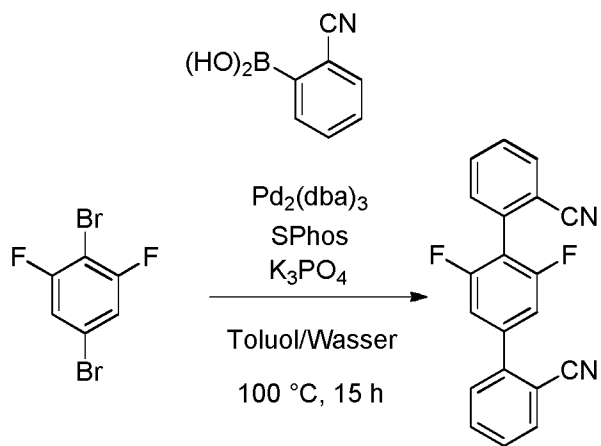
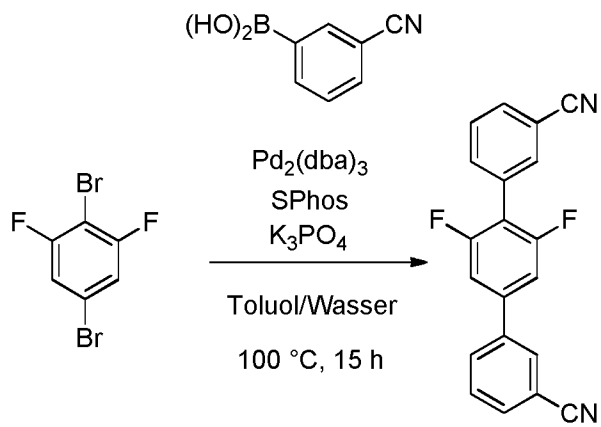
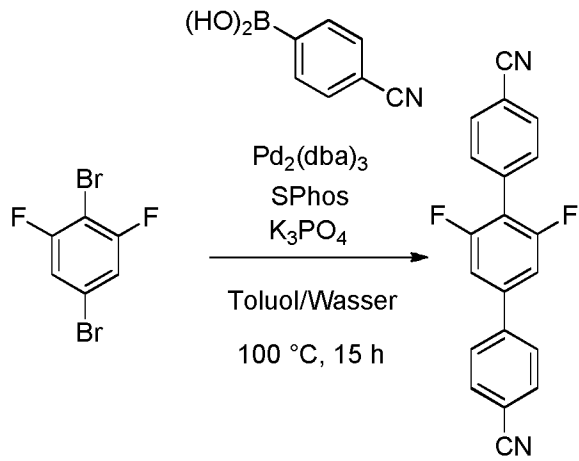
Synthese von Vorstufen nach AAV1 zur Darstellung der erfindungsgemäßen Moleküle ausgehend von kommerziell erhältlichen Verbindungen

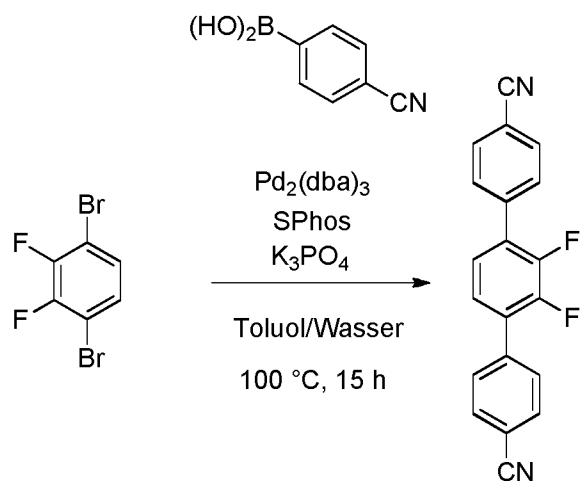
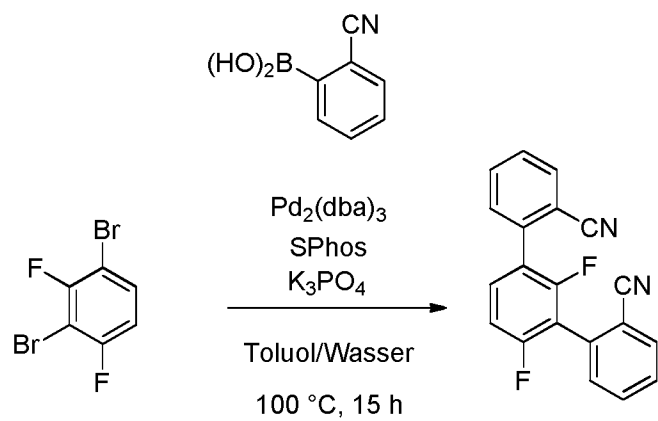
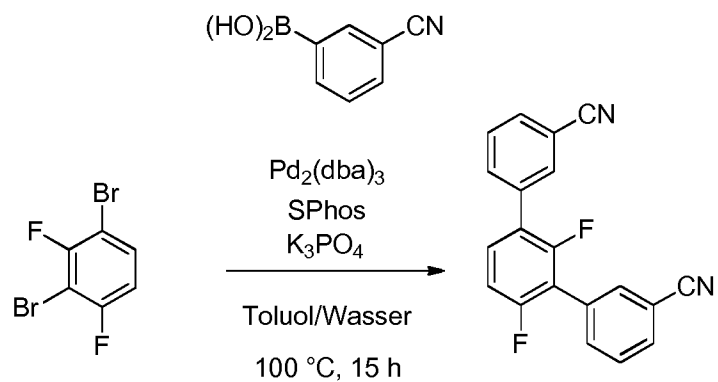
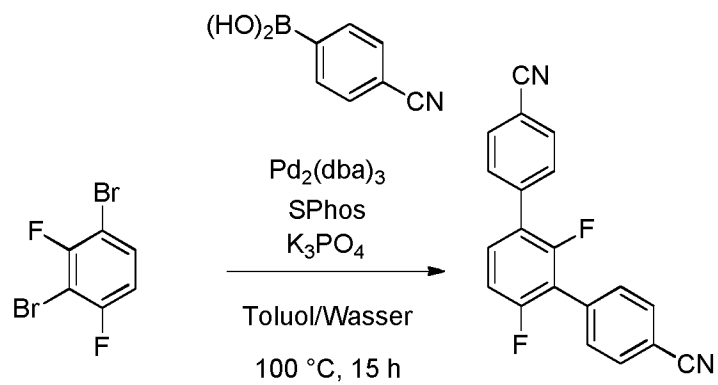


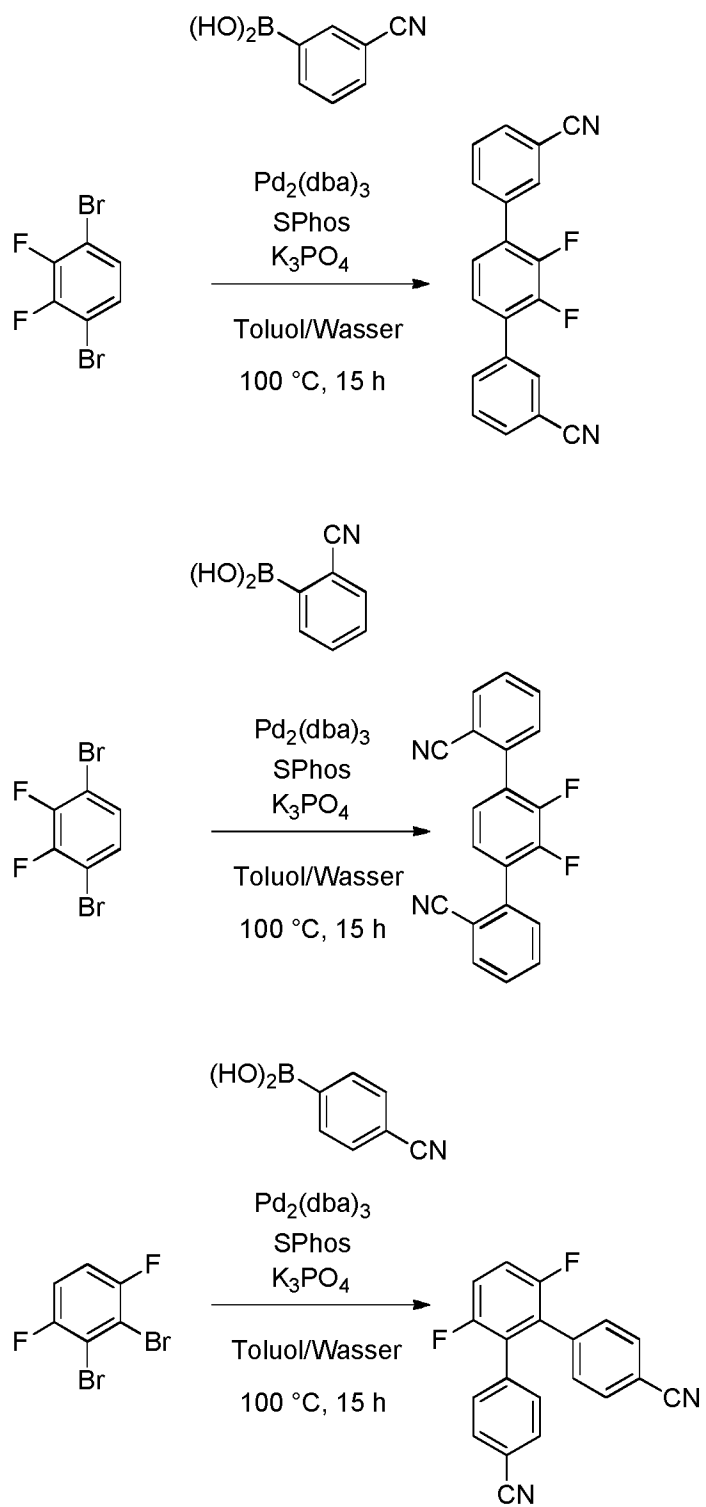


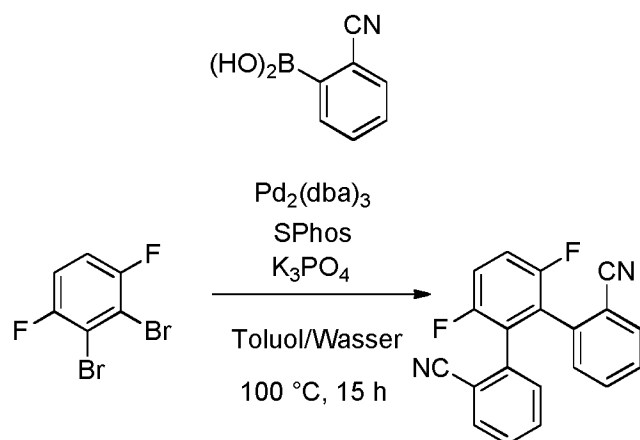
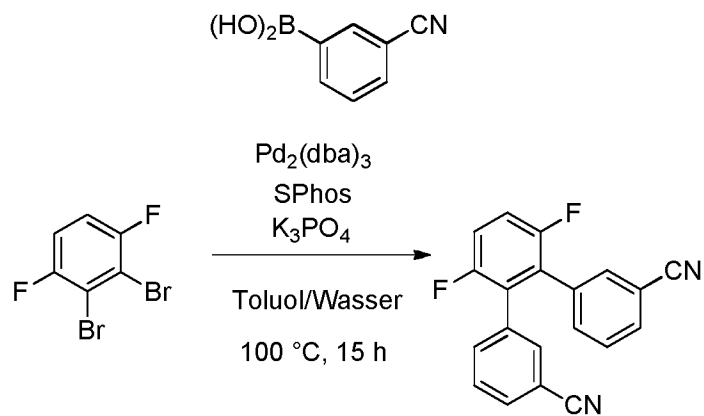




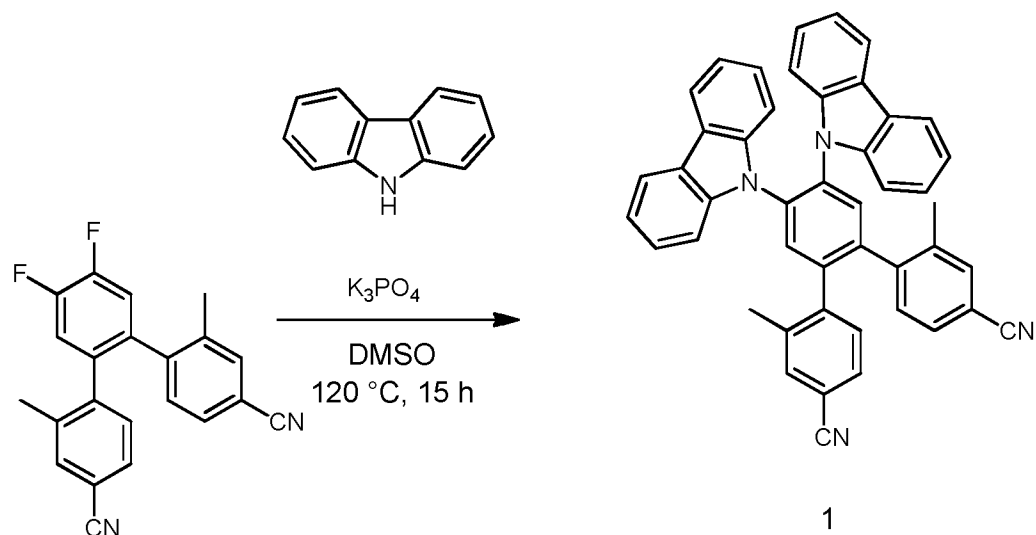








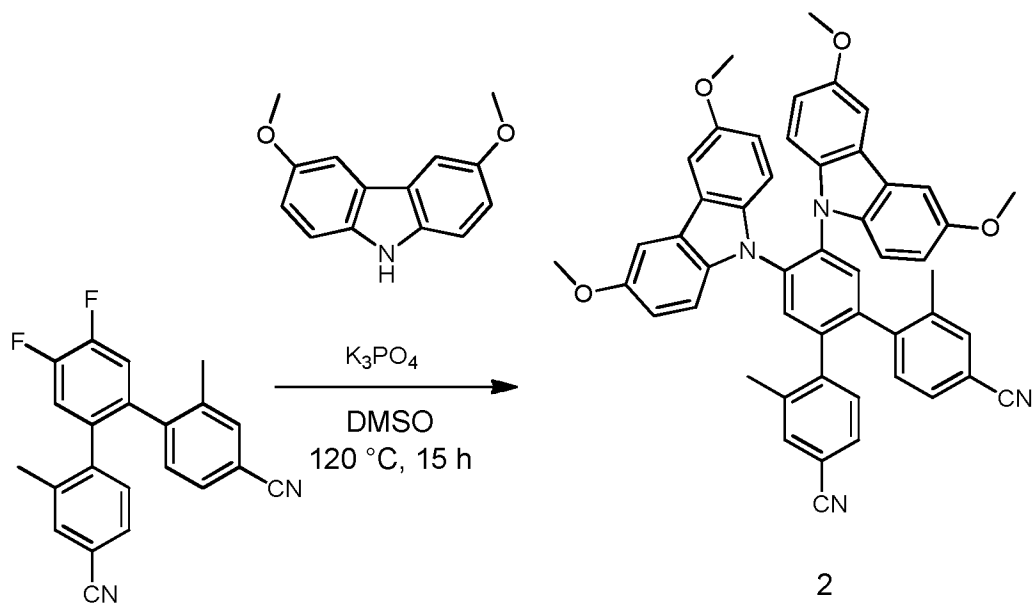
Beispiel 1



Beispiel 1 wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,3$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

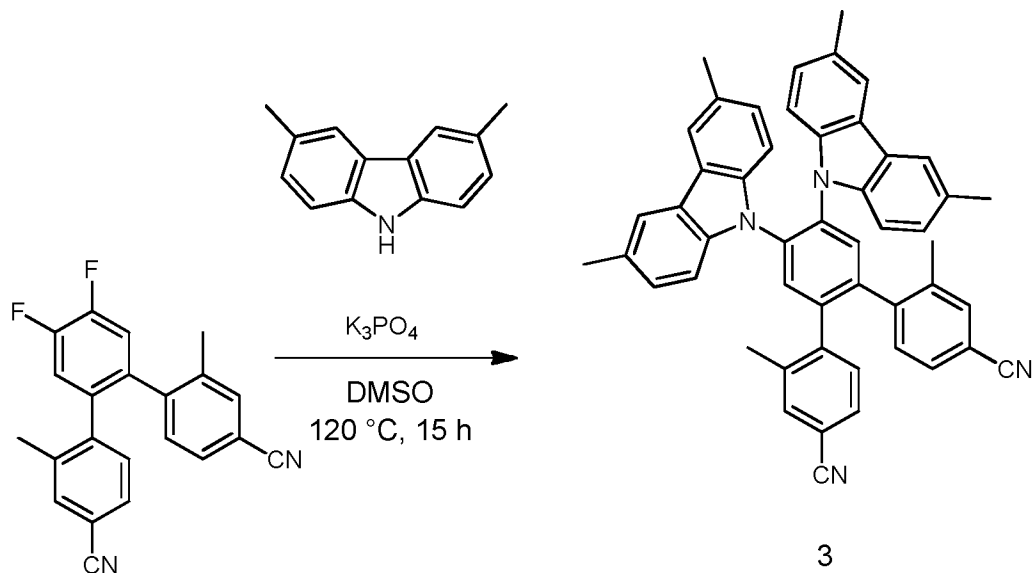
Figur 1 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel 1 (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 392 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 34 %.

Beispiel 2

Beispiel **2** wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,3$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

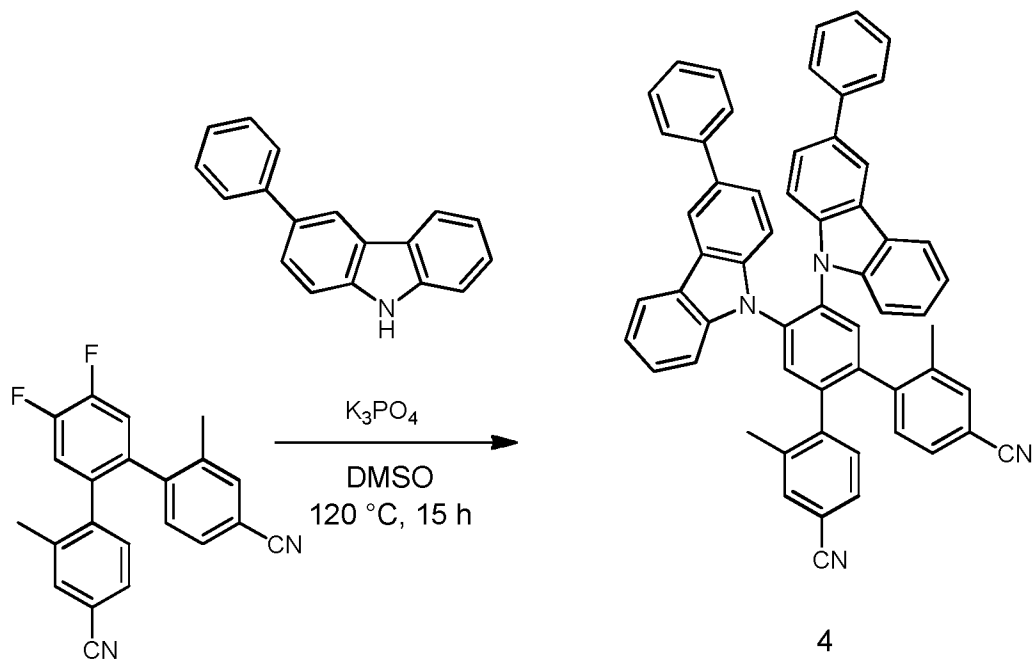
Figur **2** zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel **2** (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 451 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 52 %.

Beispiel 3

Beispiel **3** wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,5$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

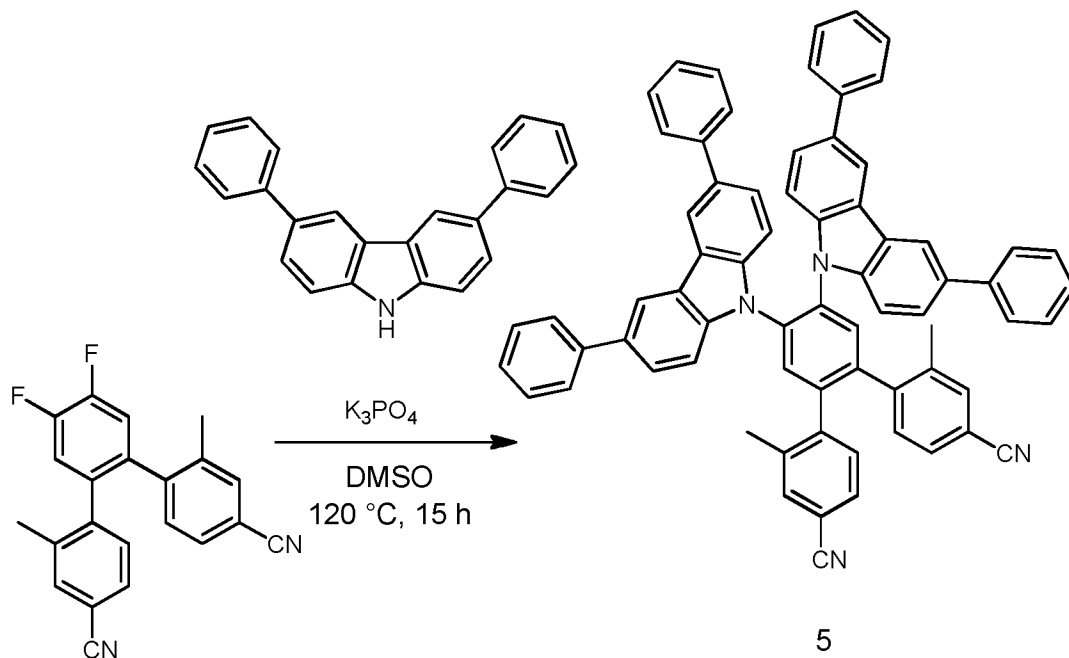
Figur **3** zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel **3** (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 416 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 35 %.

Beispiel 4

Beispiel **4** wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,3$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

Figur 4 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel **4** (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 406 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 32 %.

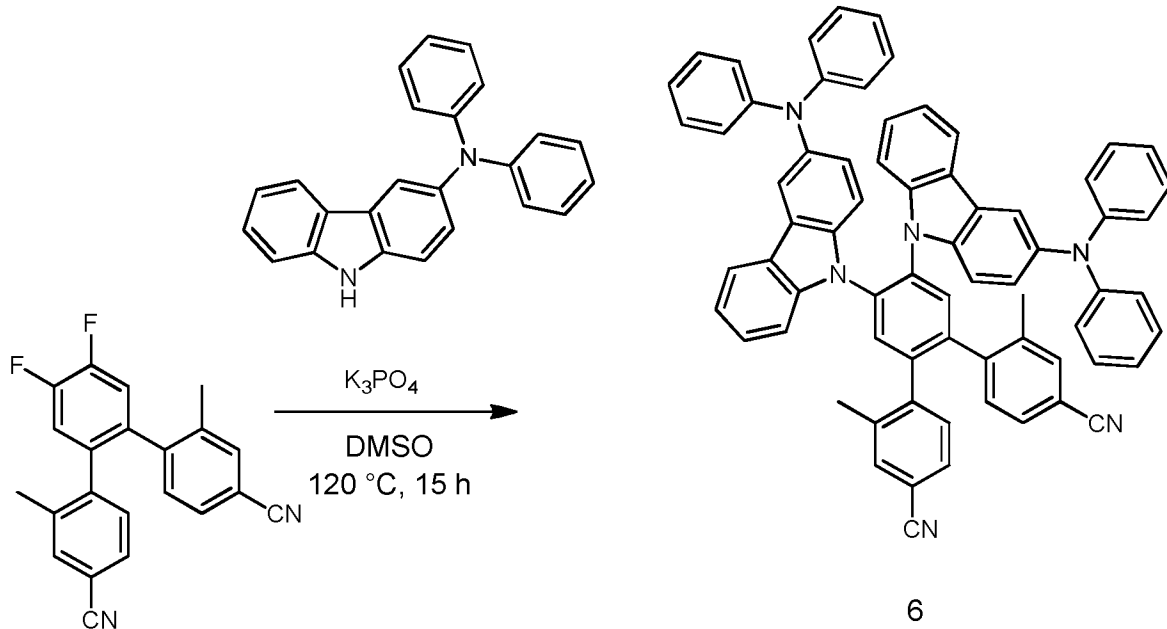
Beispiel 5

Beispiel **5** wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,1$ (Cyclohexan/Ethylacetat 10:1)

Figur 5 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel 5 (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 407 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 31 %.

Beispiel 6

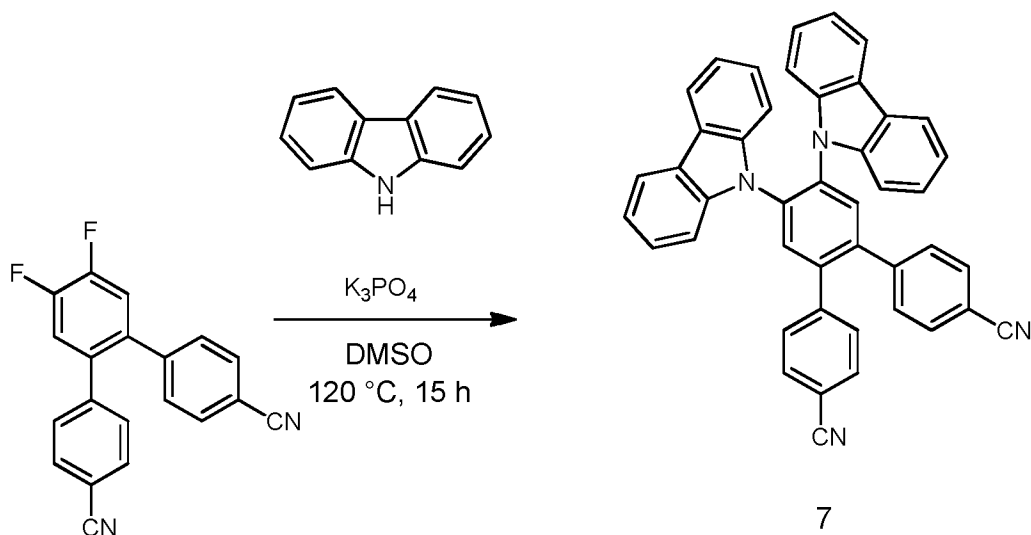


Beispiel 6 wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,3$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

Figur 6 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel 6 (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 478 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 41 % und die Emissionslebensdauer beträgt 103 μs .

Beispiel 7

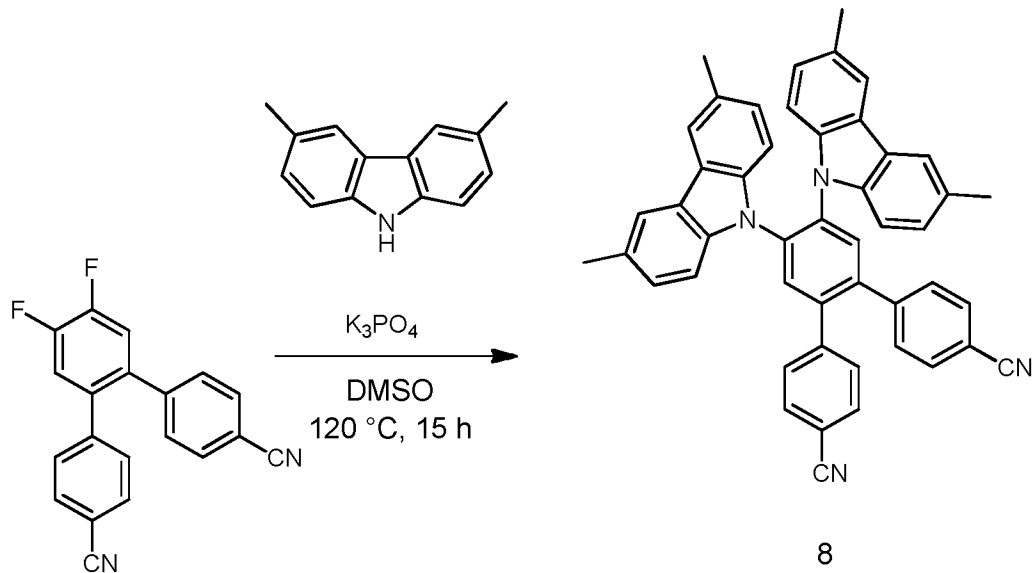


Beispiel 7 wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,3$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

Figur 7 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel 7 (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 422 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 45 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 66 nm.

Beispiel 8

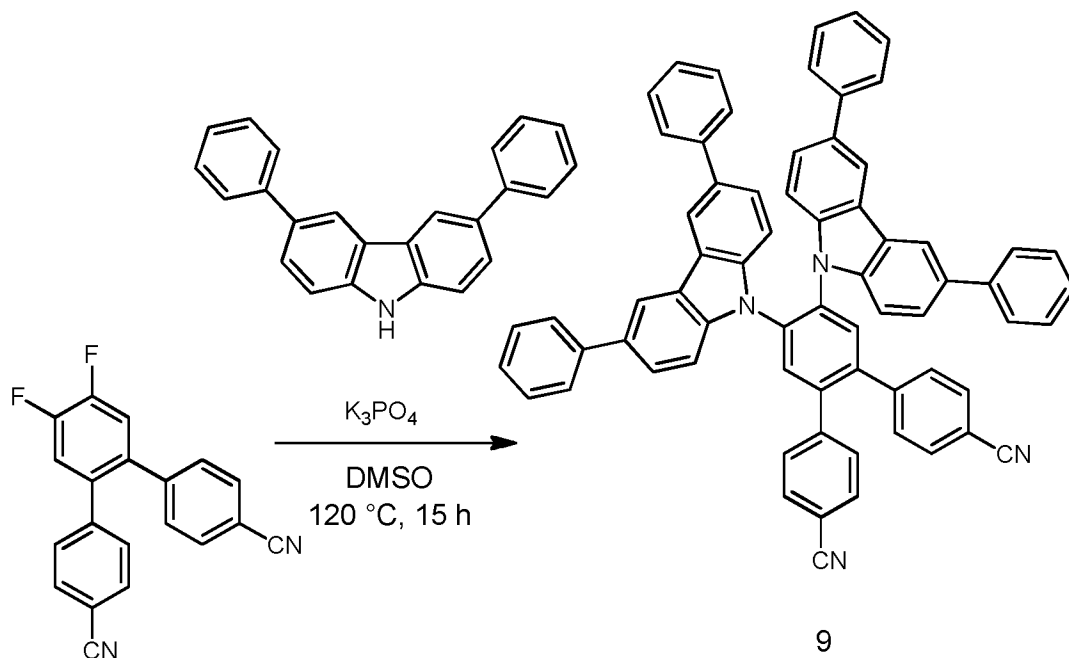


Beispiel 8 wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,6$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

Figur 8 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel 8 (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 446 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 42 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 77 nm.

Beispiel 9

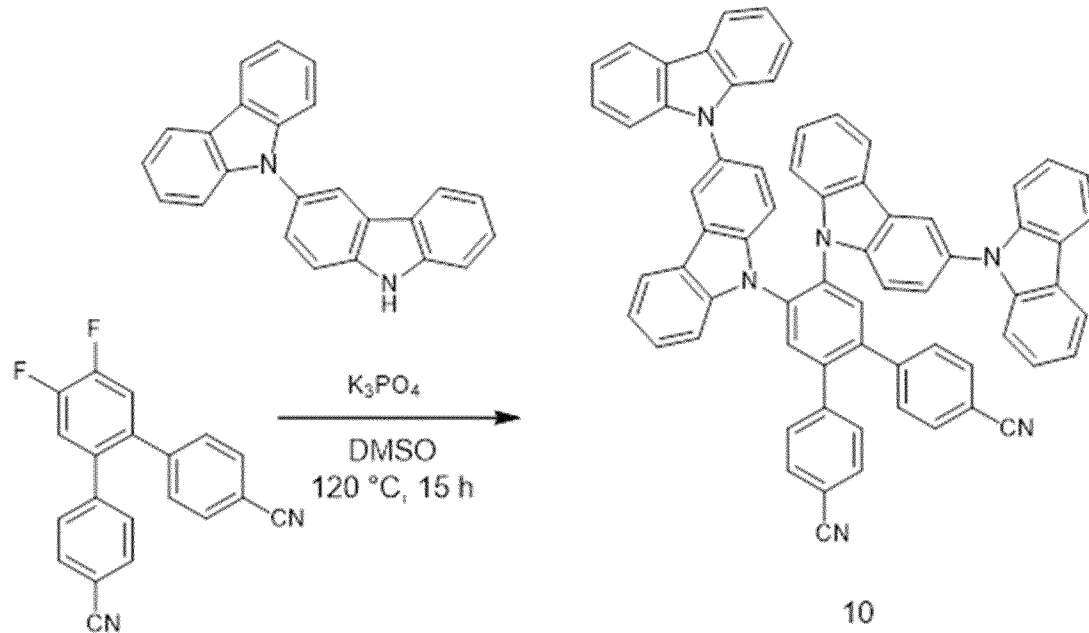


Beispiel **9** wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,4$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

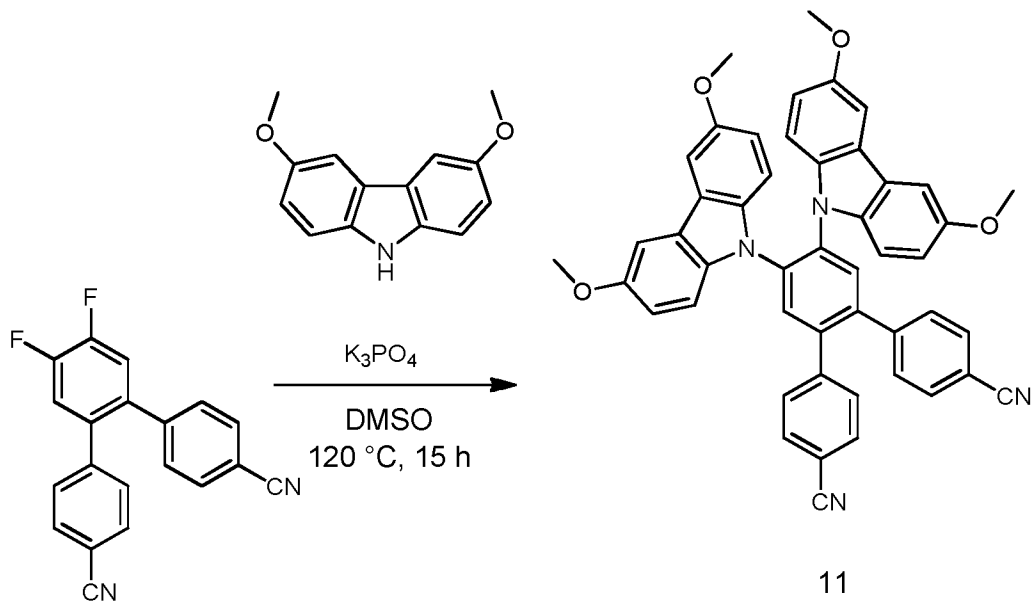
Figur 9 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel **9** (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 442 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 40 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 75 nm.

Beispiel 10



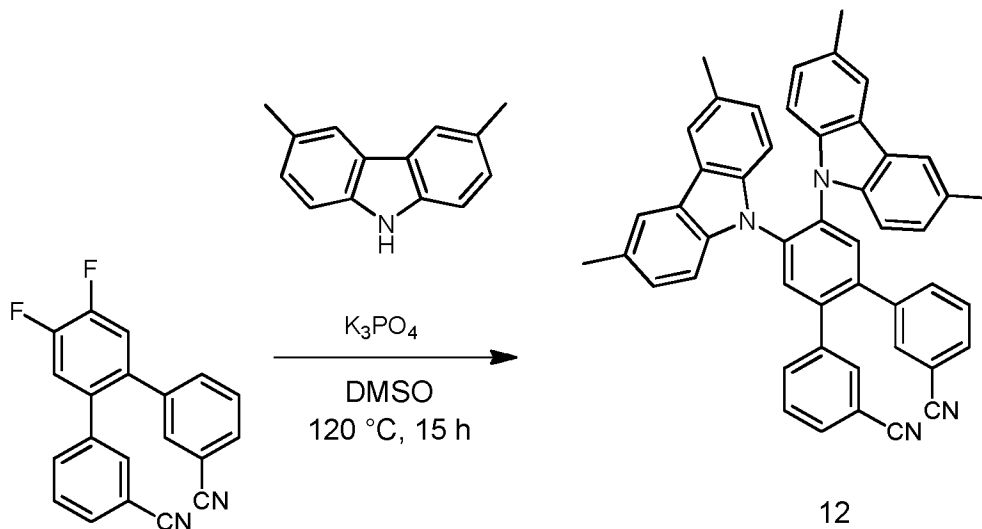
Beispiel **10** wurde nach AAV2 hergestellt.

Figur 10 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel **10** (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 441 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 39 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 86 nm.

Beispiel 11

Beispiel **11** wurde nach AAV2.

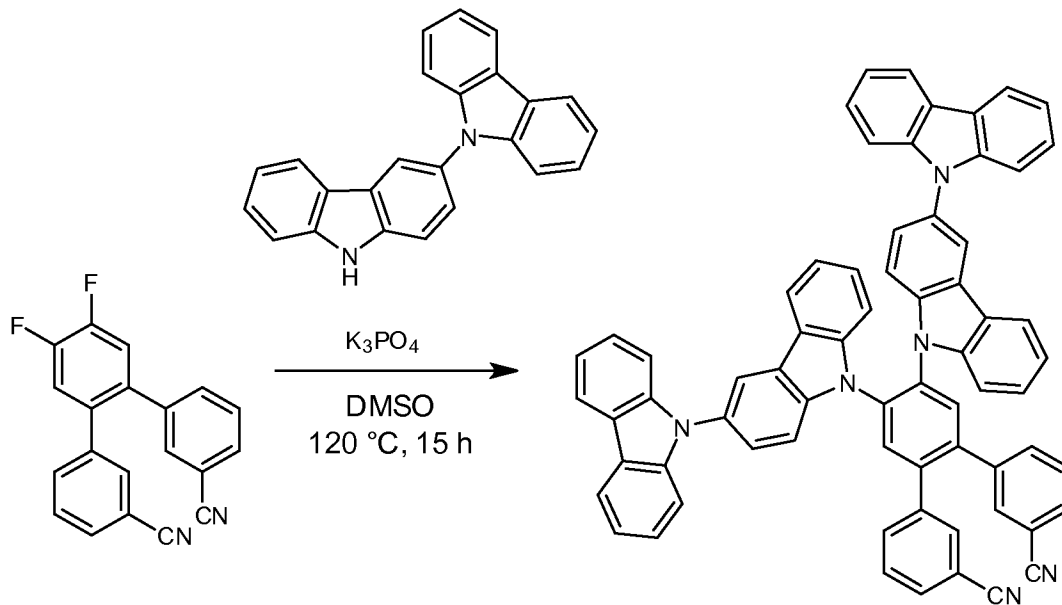
Figur 11 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel **11** (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 480 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 62 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 98 nm.

Beispiel 12

Beispiel **12** wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,3$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

Figur 12 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel **12** (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 411 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 22 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 66 nm.

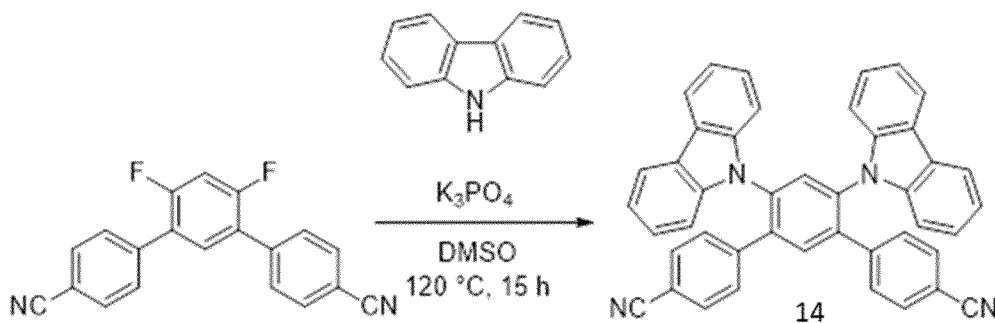
Beispiel 13

13

Beispiel **13** wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,3$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

Figur 13 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel **13** (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 415 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 40 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 75 nm.

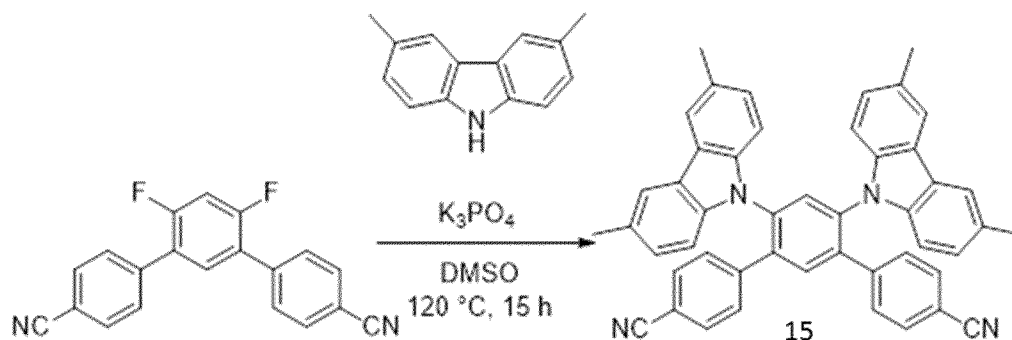
Beispiel 14

14

Beispiel **14** wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,3$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

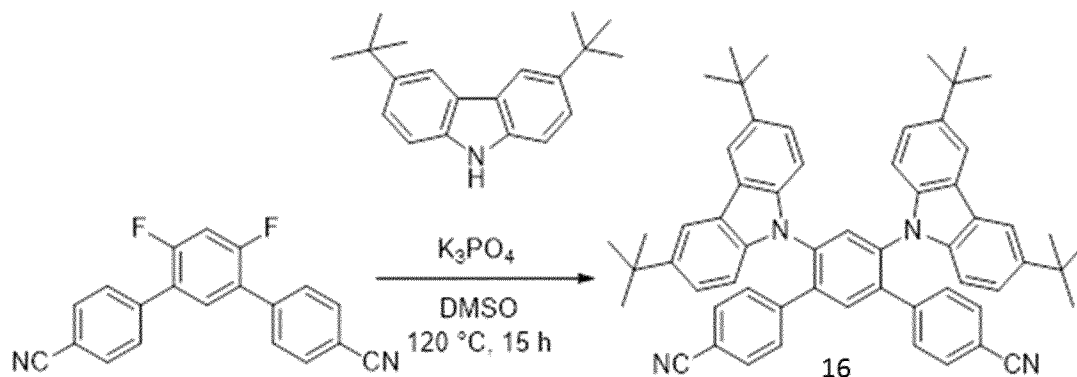
Figur 14 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel **14** (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 412 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 28 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 57 nm.

Beispiel 15

Beispiel 15 wurde nach AAV1 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,3$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

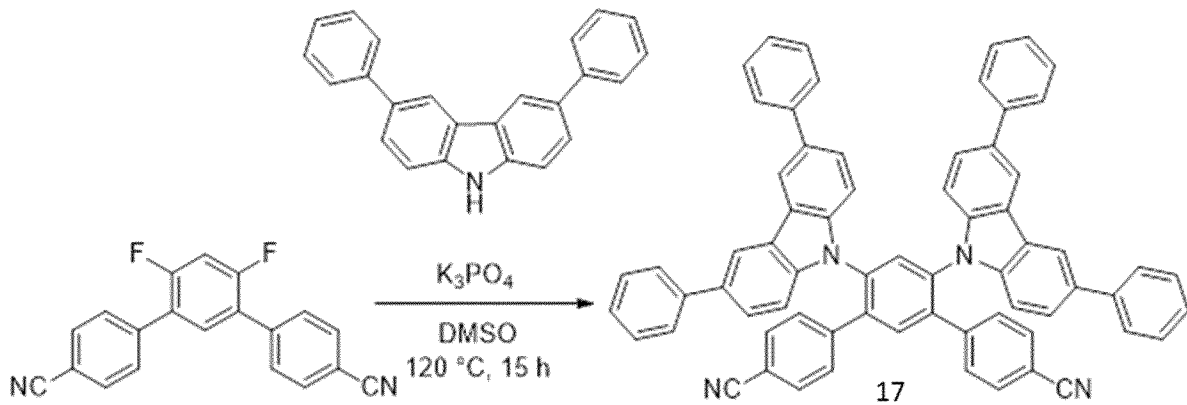
Figur 15 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel 15 (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 436 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 31 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 69 nm.

Beispiel 16

Beispiel 16 wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,5$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

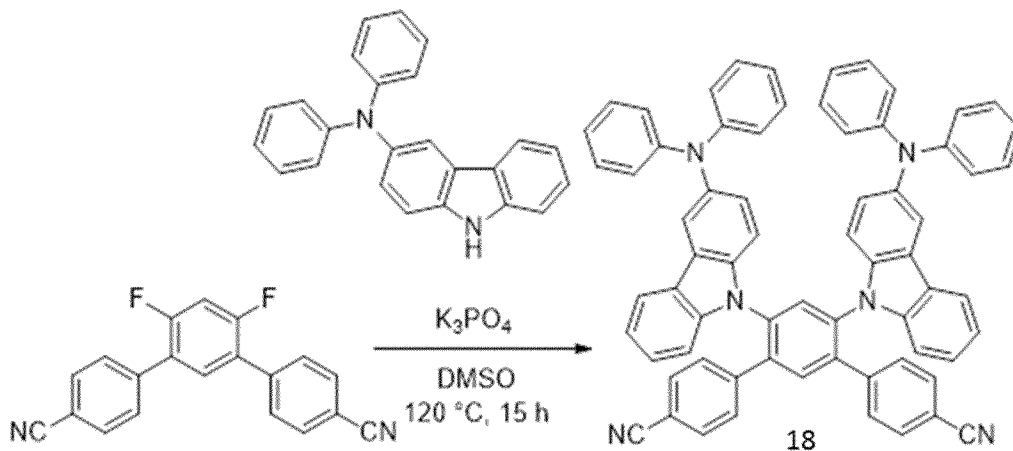
Figur 16 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel 16 (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 429 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 34 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 65 nm.

Beispiel 17

Beispiel 17 wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,3$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

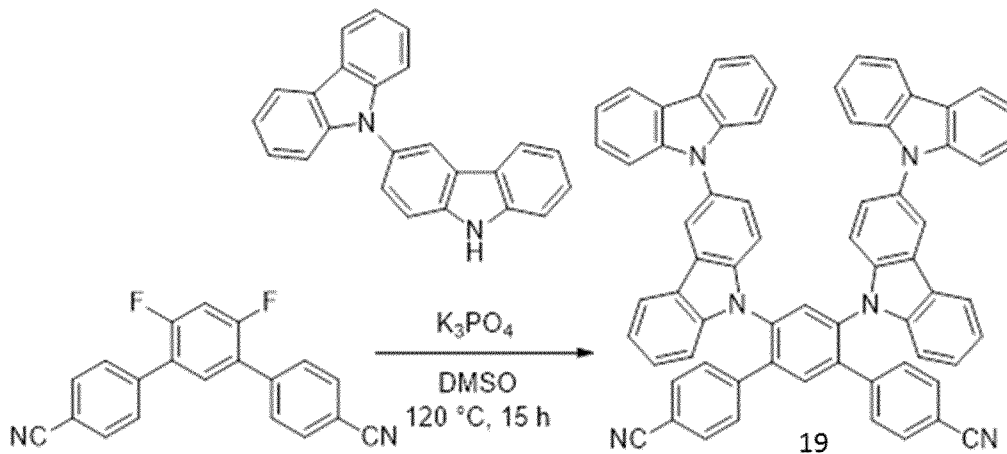
Figur 17 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel 17 (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 437 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 30 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 69 nm.

Beispiel 18

Beispiel 18 wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,4$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

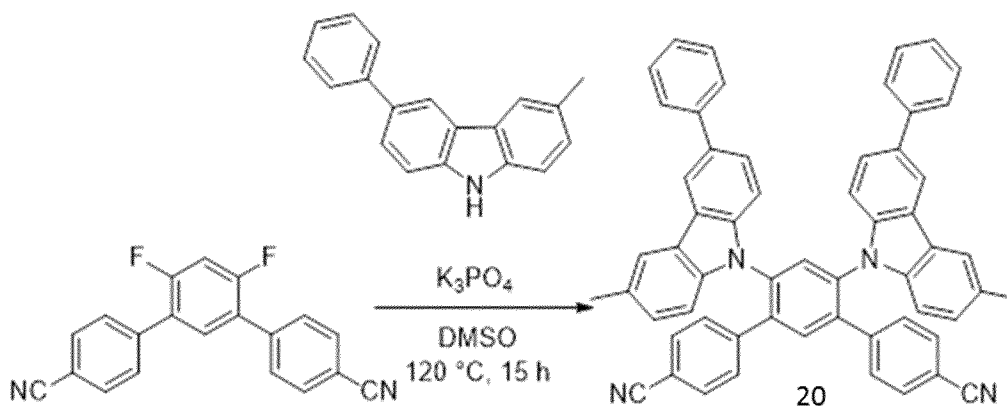
Figur 18 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel 18 (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 507 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 54 %.

Beispiel 19

Beispiel **19** wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,4$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

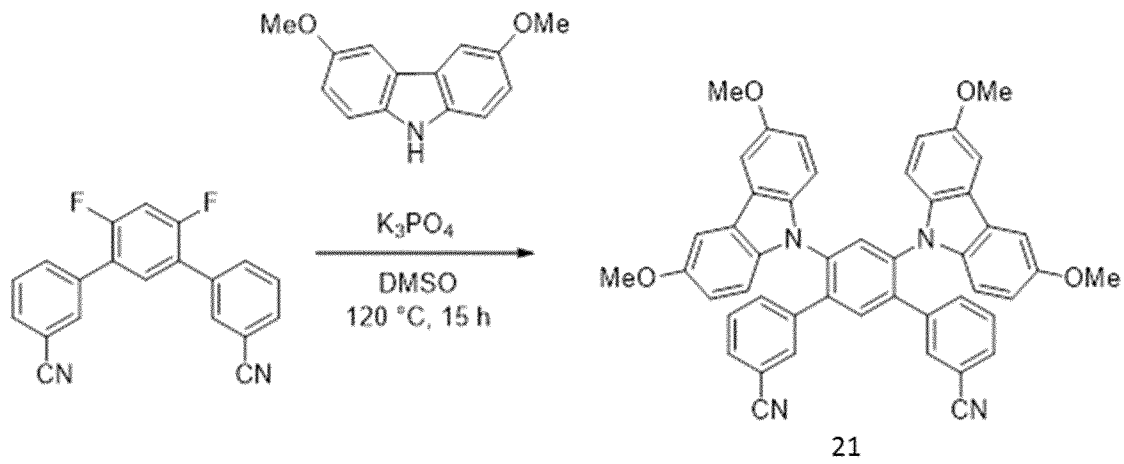
Figur 19 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel **19** (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 443 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 33 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 86 nm.

Beispiel 20

Beispiel **20** wurde nach AAV2 hergestellt.

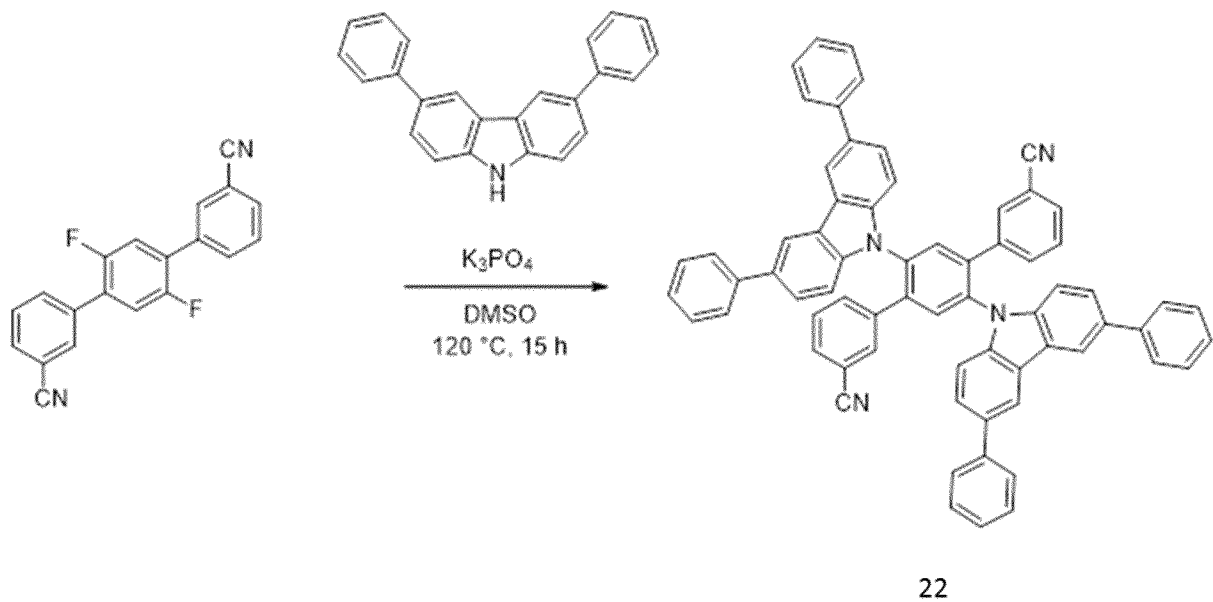
Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,3$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

Figur 20 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel **20** (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 437 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 30 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 69 nm.

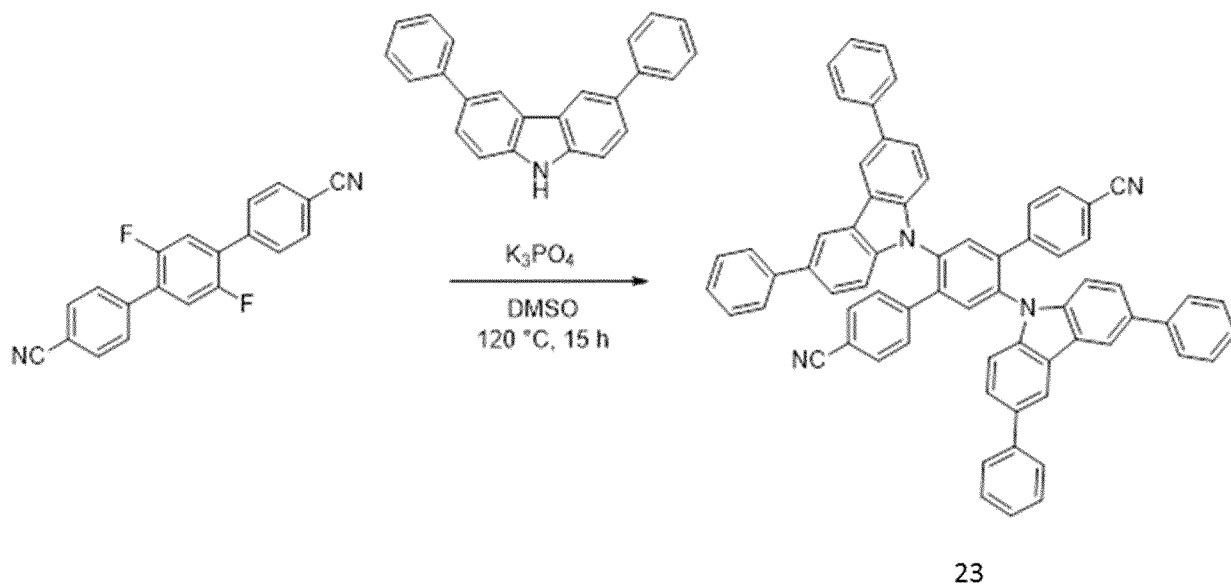
Beispiel 21

Beispiel 21 wurde nach AAV2 hergestellt.

Dünnschichtchromatografie: $R_f = 0,2$ (Cyclohexan/Ethylacetat 5:1)

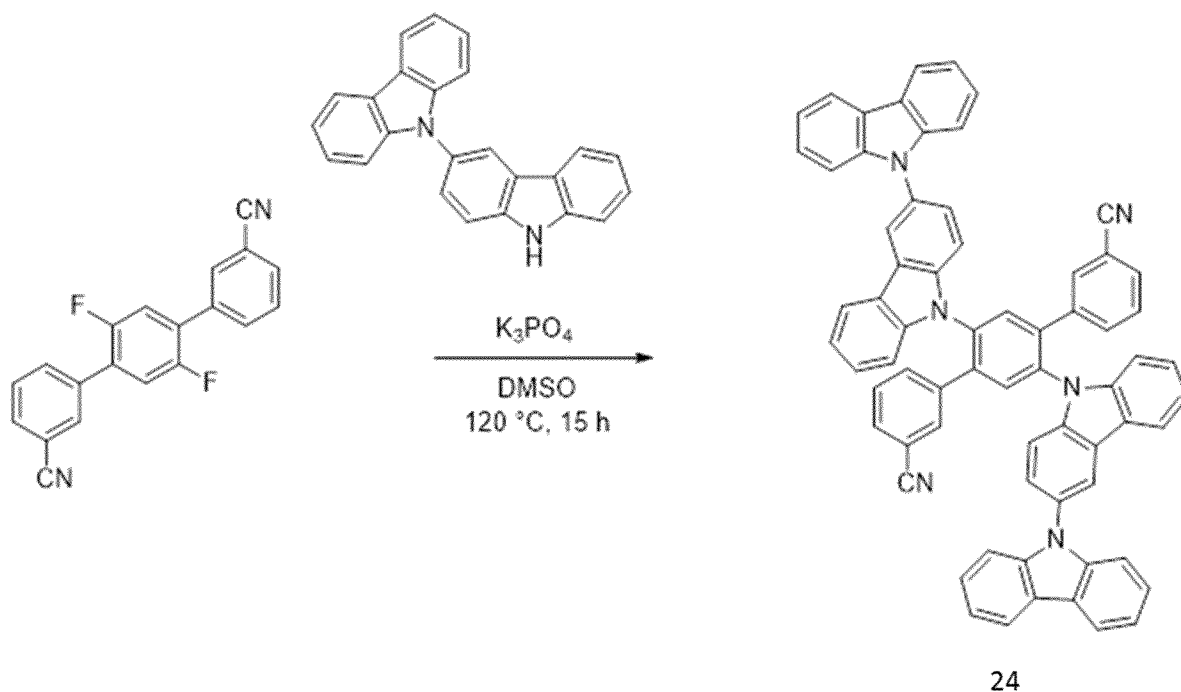
Beispiel 22

Beispiel 22 wurde nach AAV2 hergestellt.

Beispiel 23

Beispiel 23 wurde nach AAV2 hergestellt.

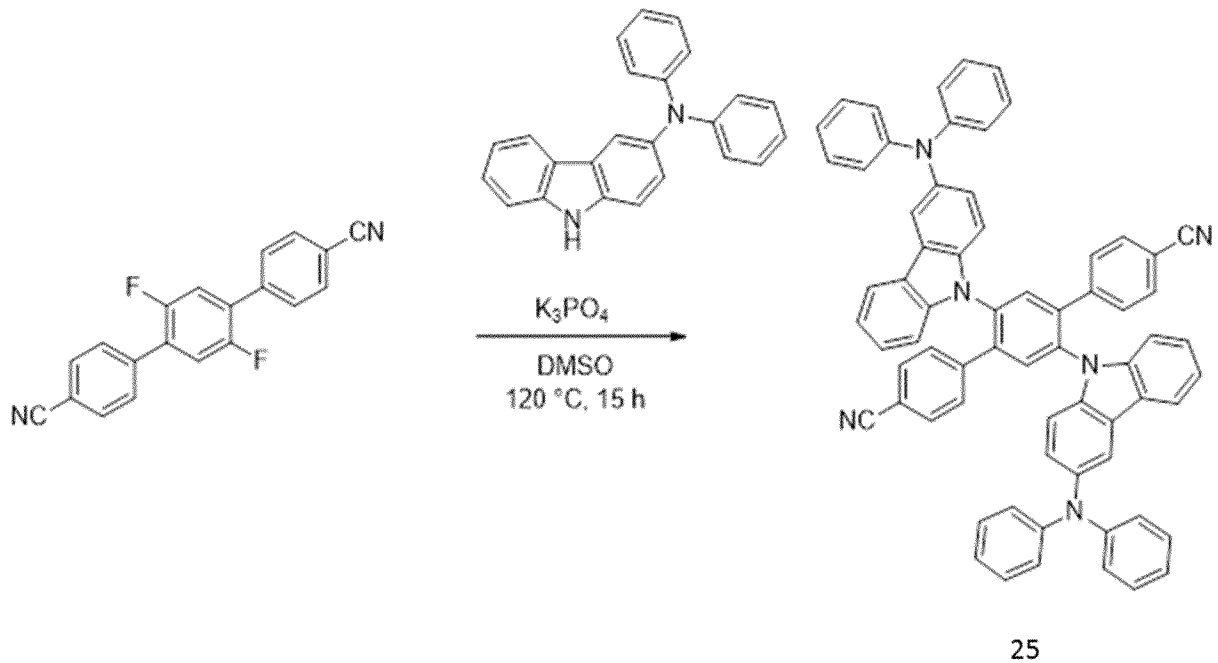
Figur 21 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel 23 (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 455 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 60 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 73 nm.

Beispiel 24

Beispiel 24 wurde nach AAV2 hergestellt.

Figur 22 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel **24** (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 423 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 32 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 77 nm.

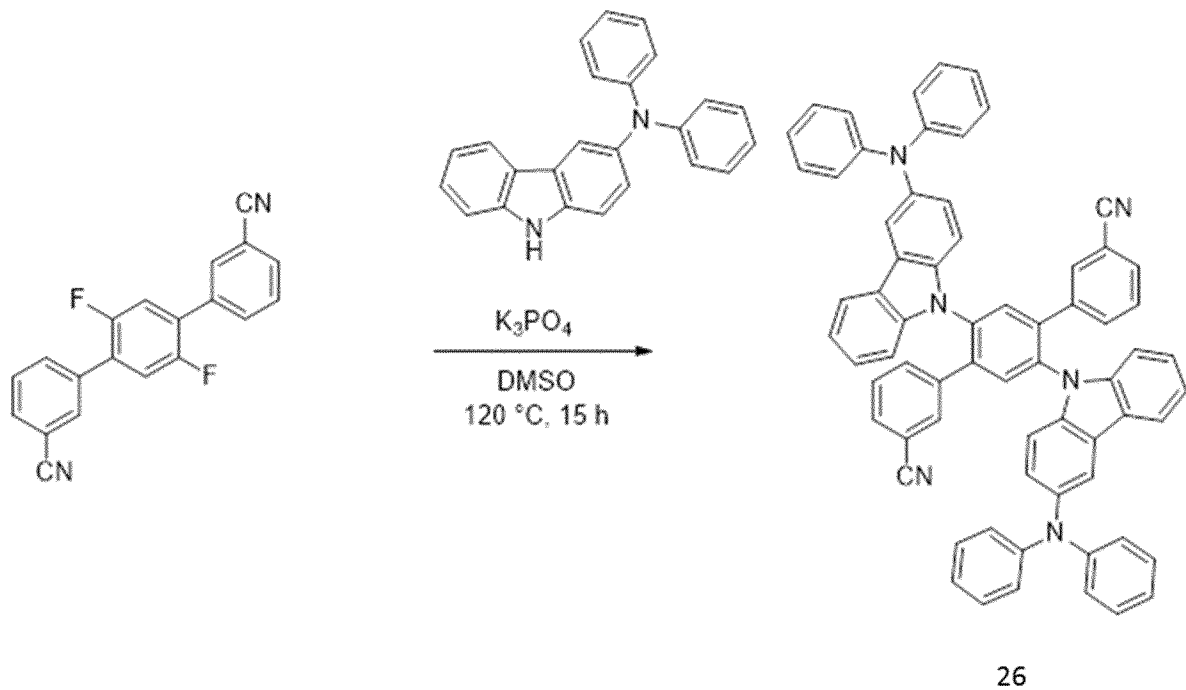
Beispiel 25



Beispiel **25** wurde nach AAV2 hergestellt.

Figur 23 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel **25** (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 524 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 44 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 111 nm.

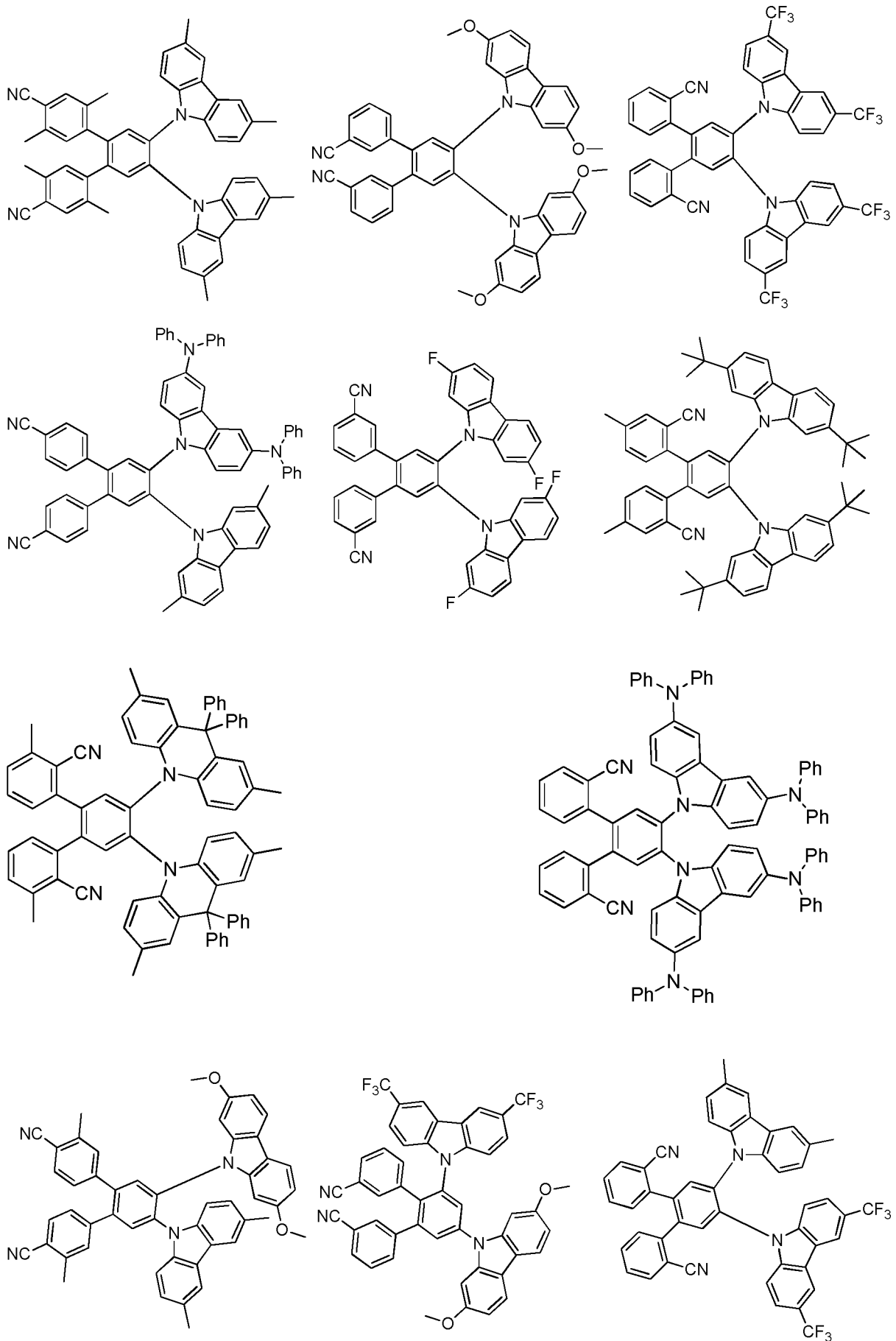
Beispiel 26

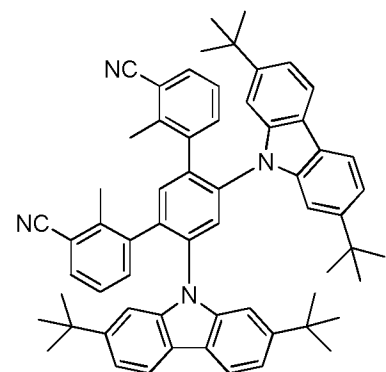
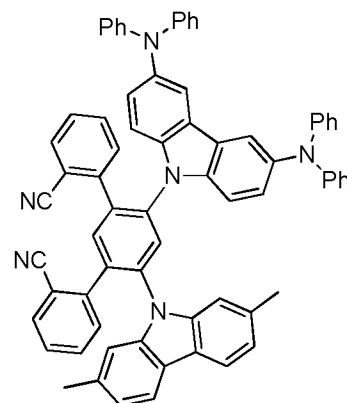
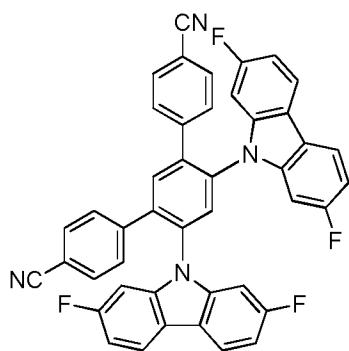
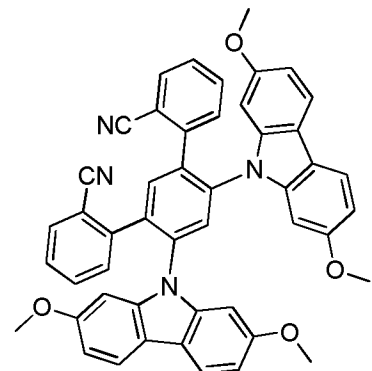
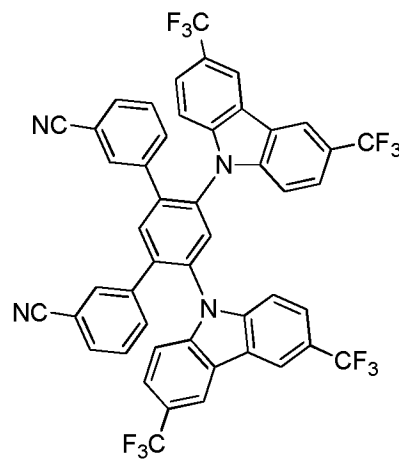
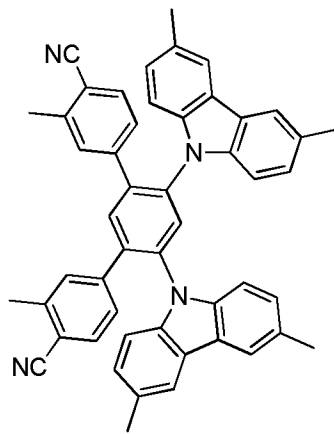
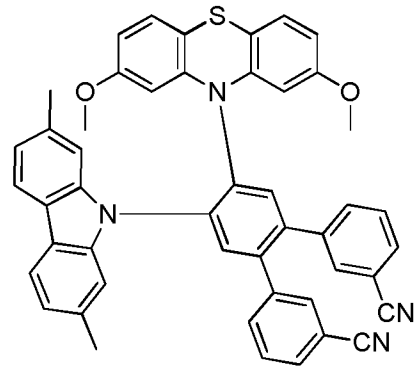
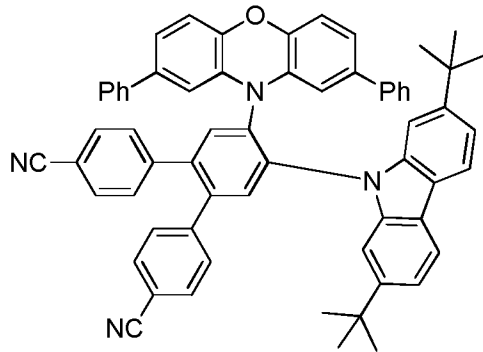
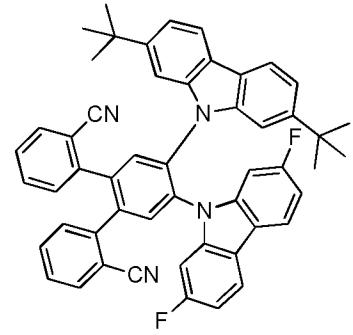
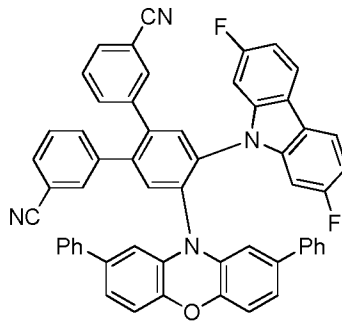
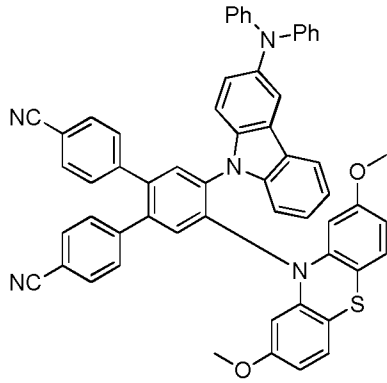


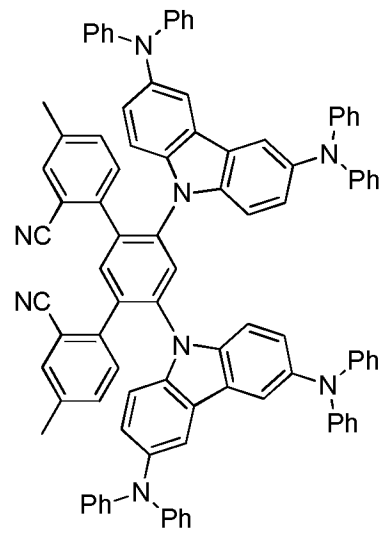
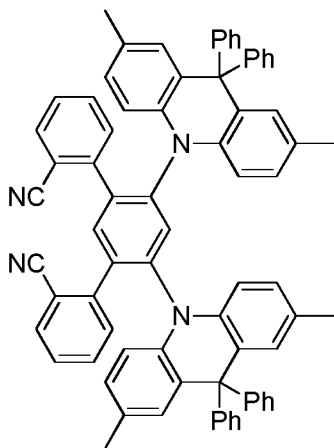
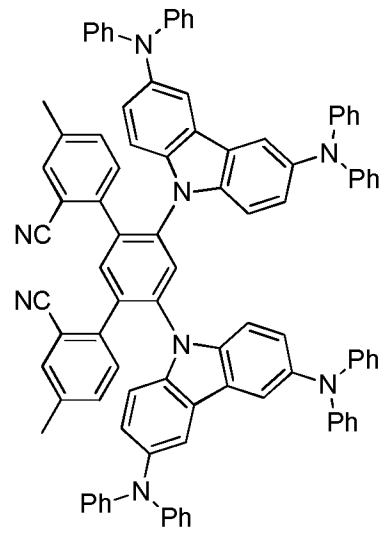
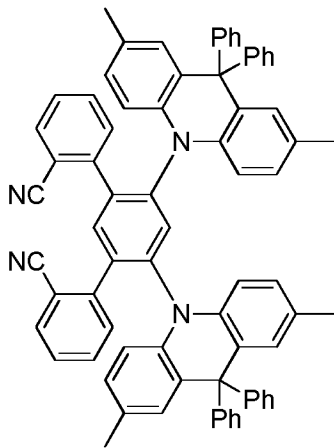
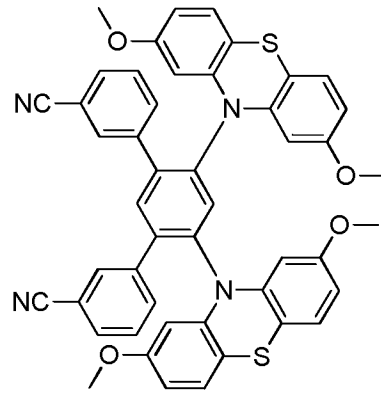
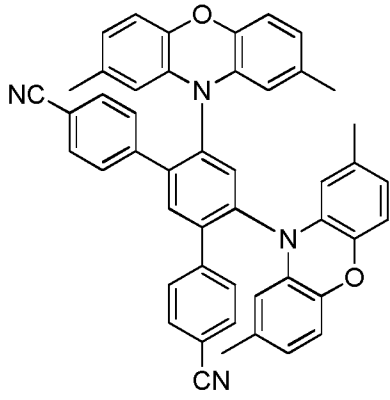
Beispiel **26** wurde nach AAV2 hergestellt.

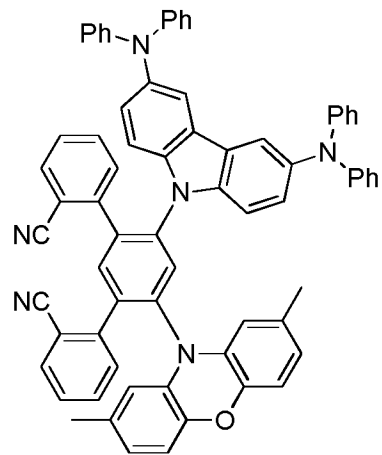
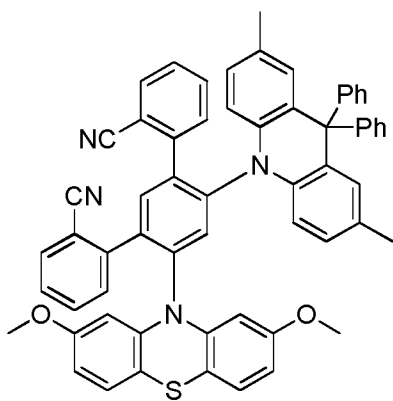
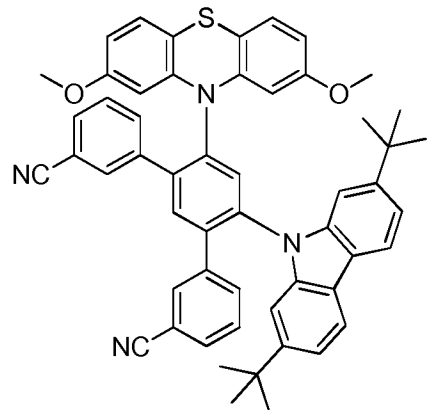
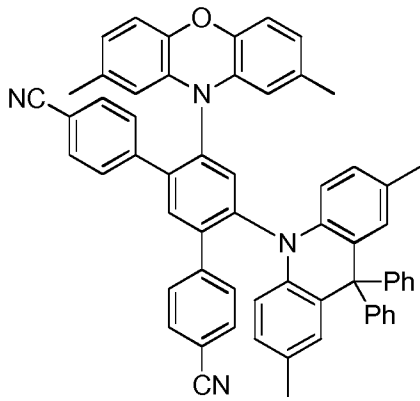
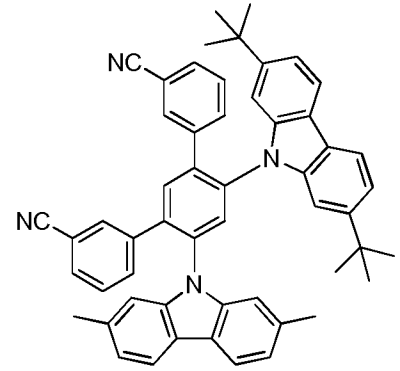
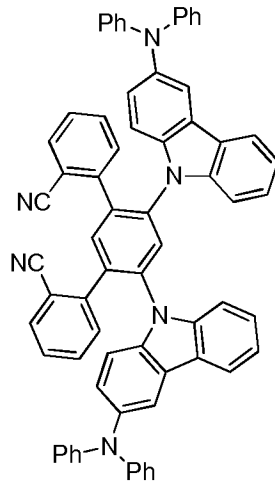
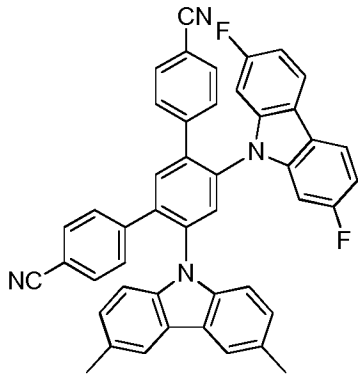
Figur 24 zeigt das Emissionsspektrum von Beispiel **26** (10 % in PMMA). Das Emissionsmaximum liegt bei 495 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 38 % und die Halbwertsbreite (FWHM) 104 nm.

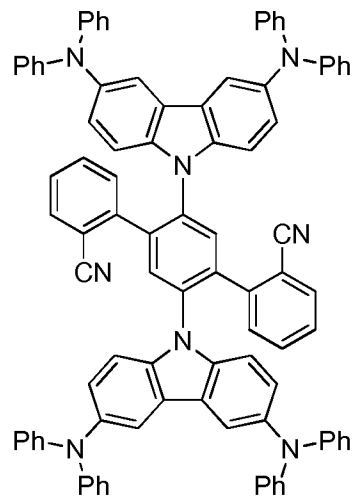
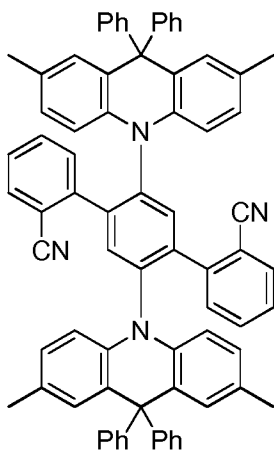
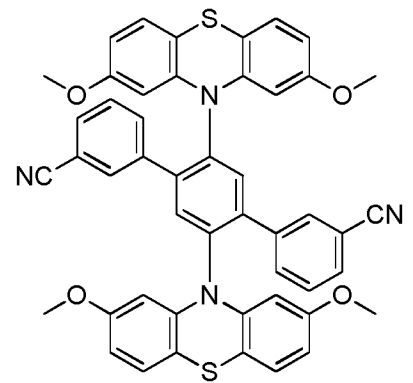
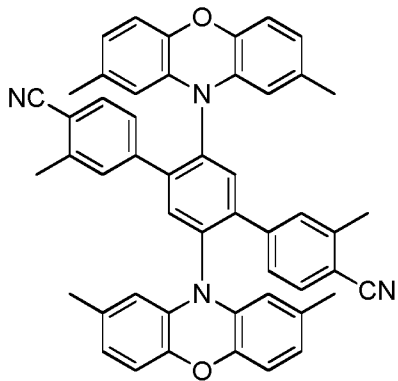
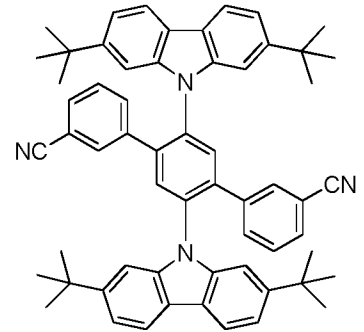
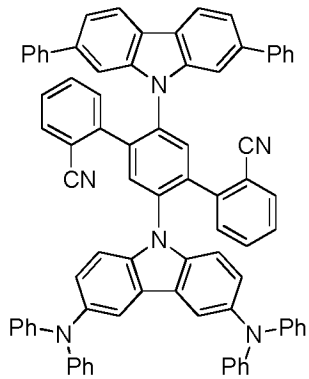
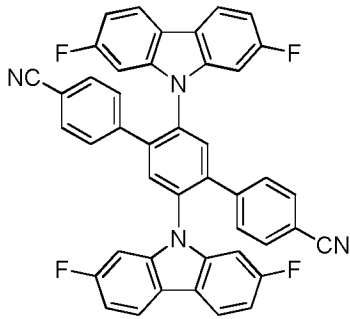
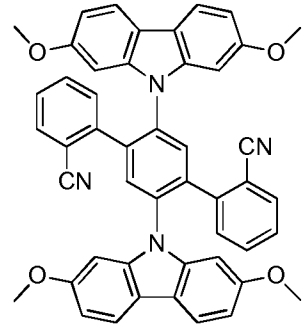
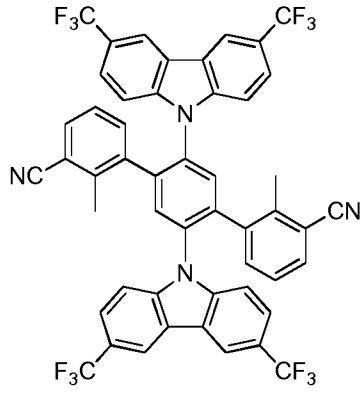
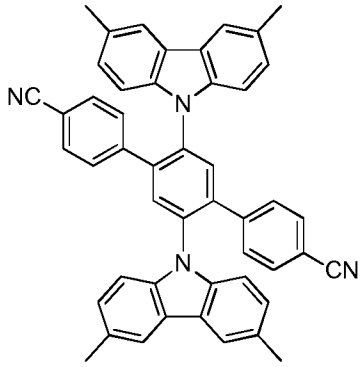
Weitere Beispiele organischer Moleküle mit einer Struktur gemäß der Formeln Ia bis Ih:

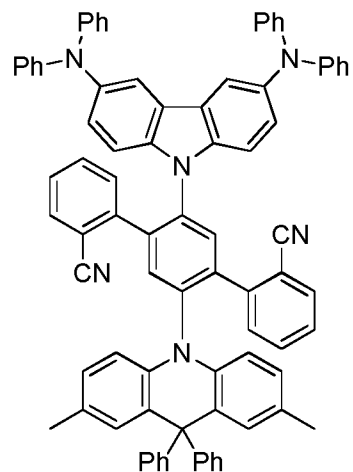
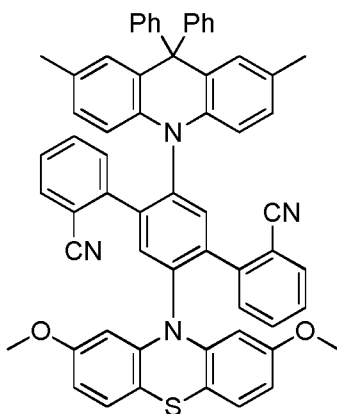
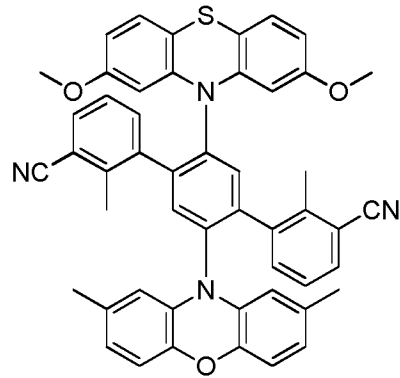
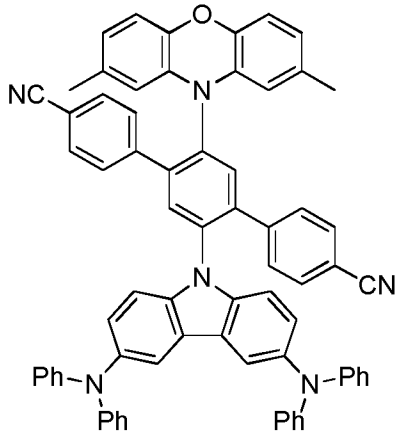
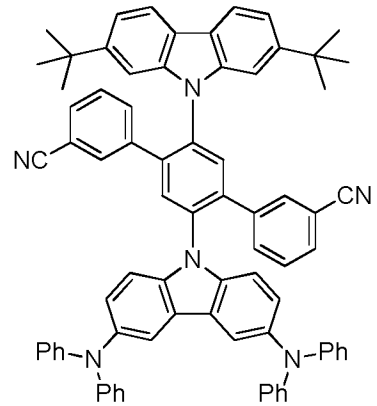
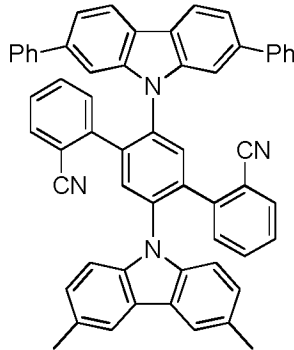
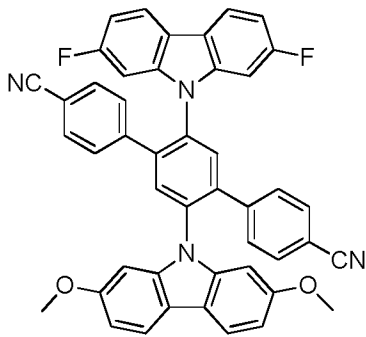
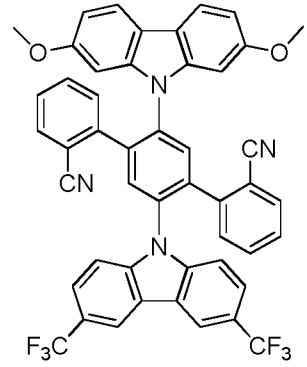
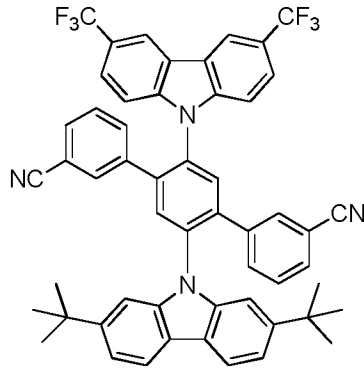
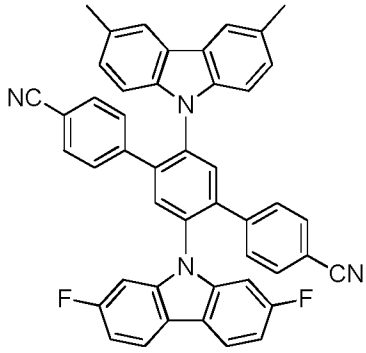


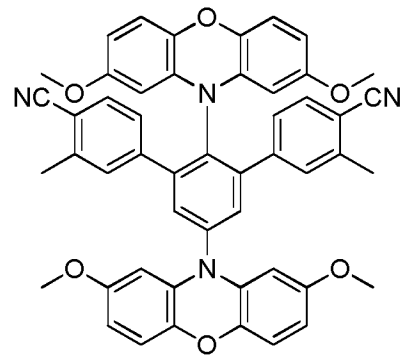
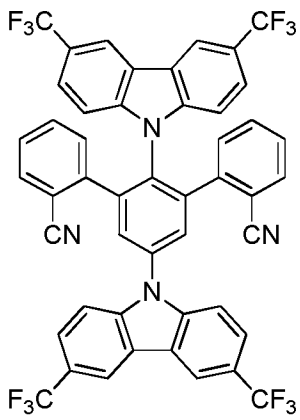
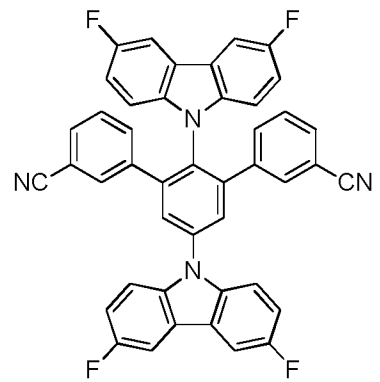
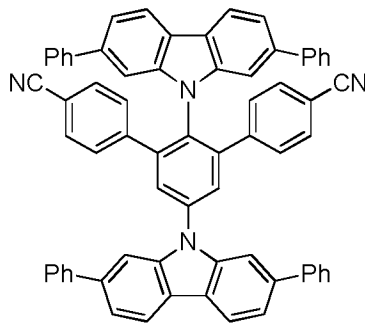
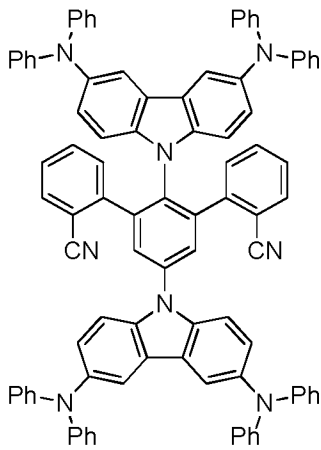
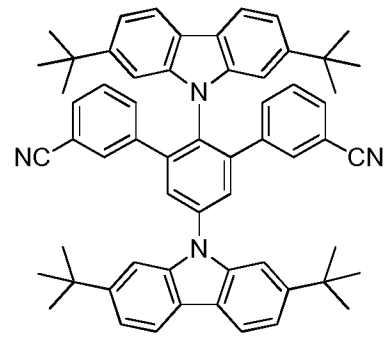
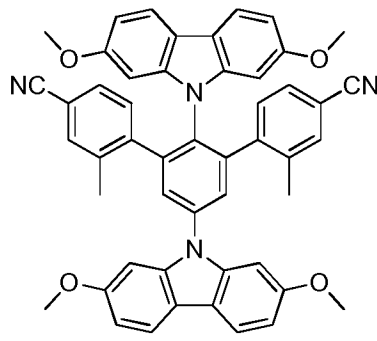
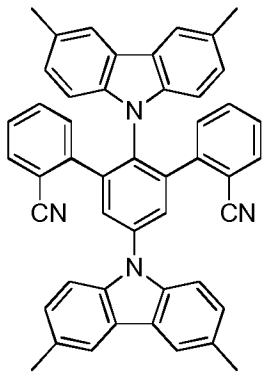


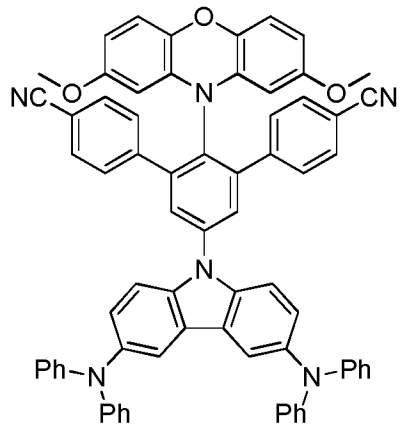
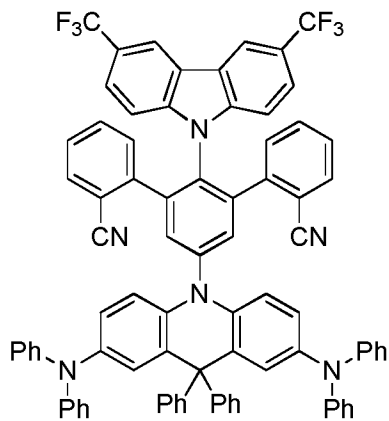
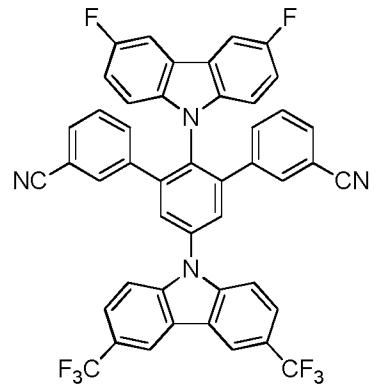
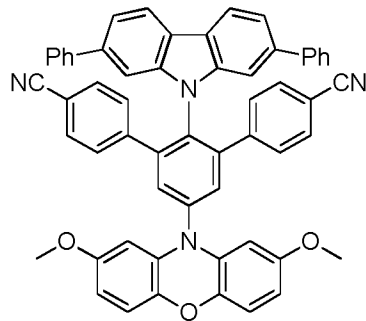
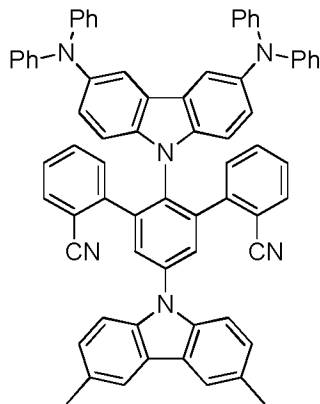
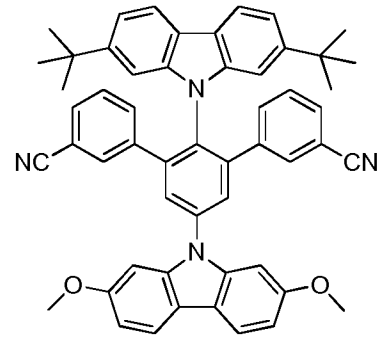
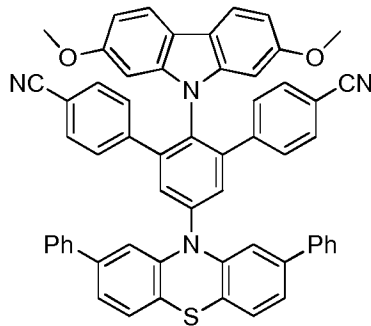
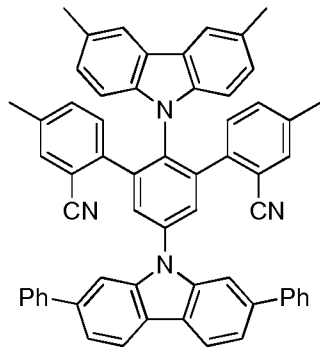
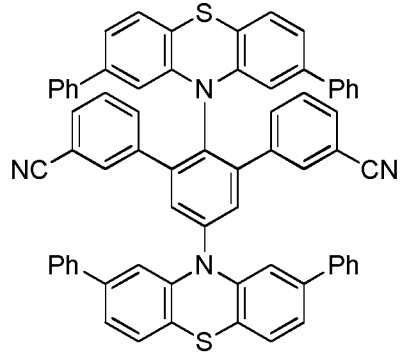
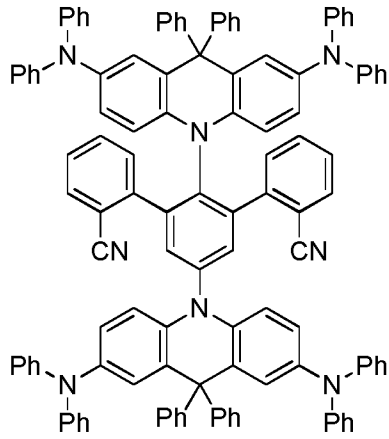


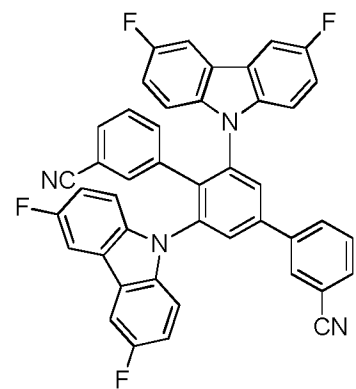
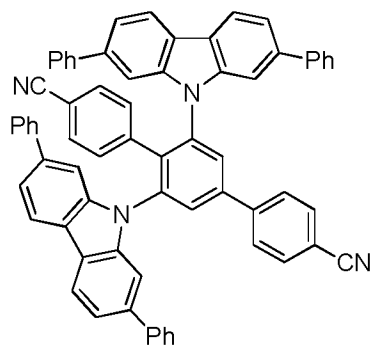
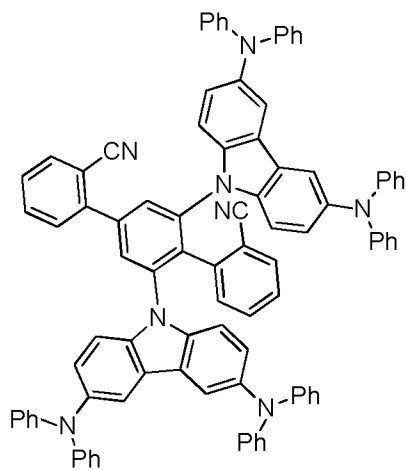
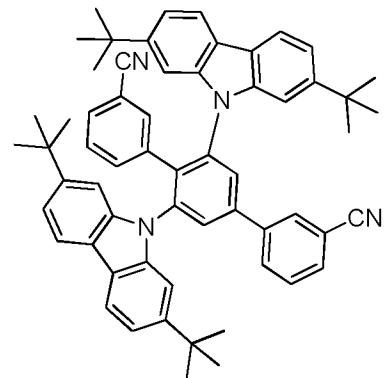
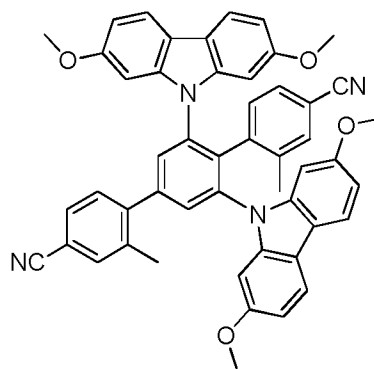
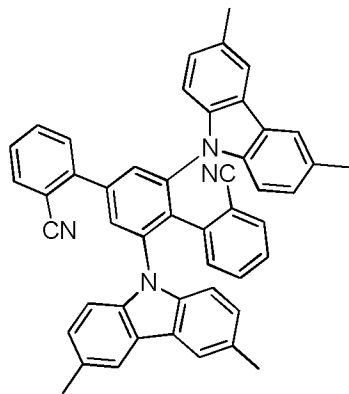
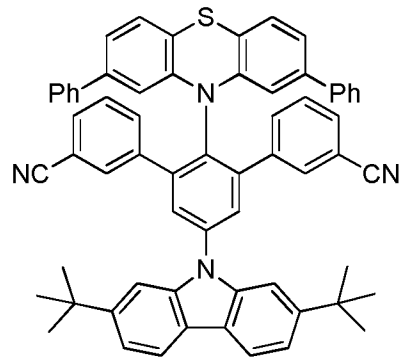
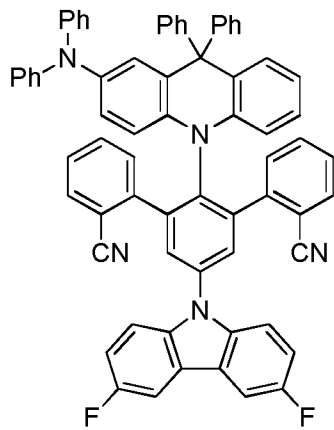


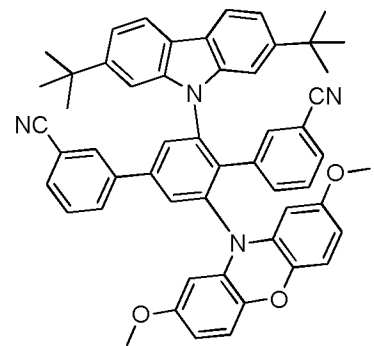
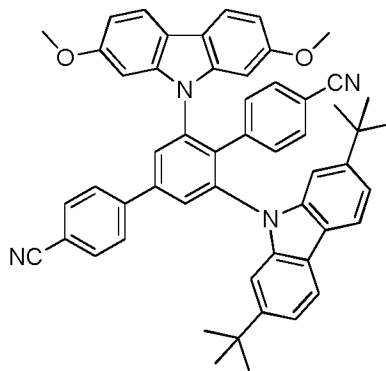
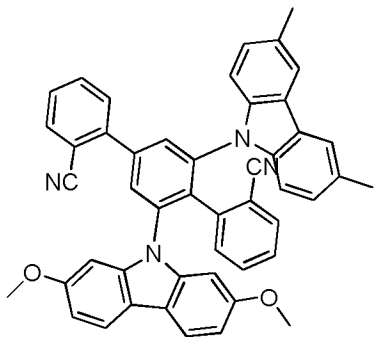
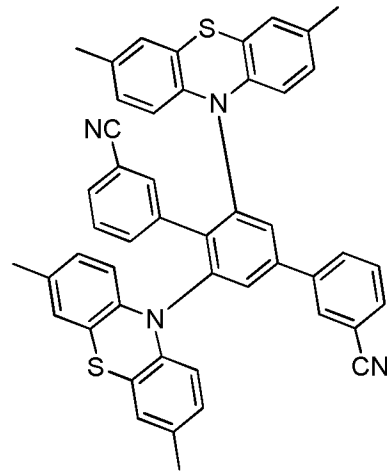
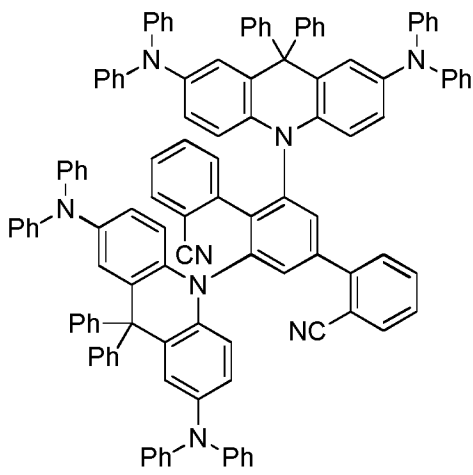
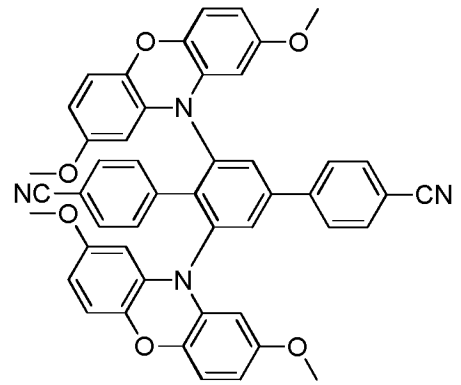
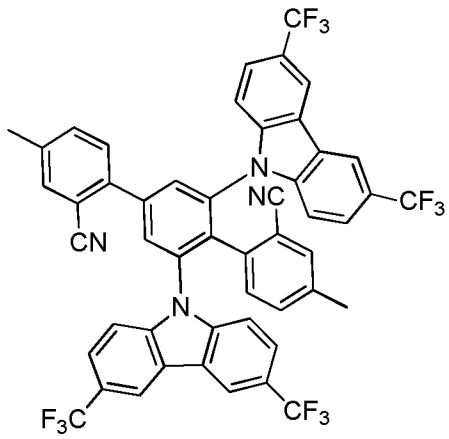


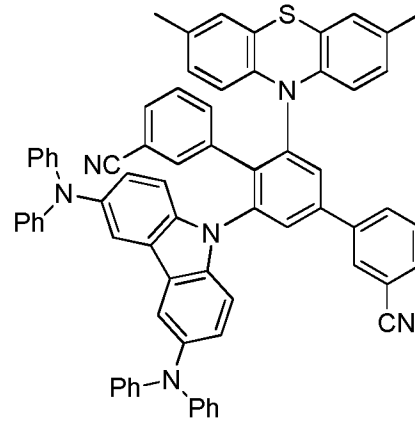
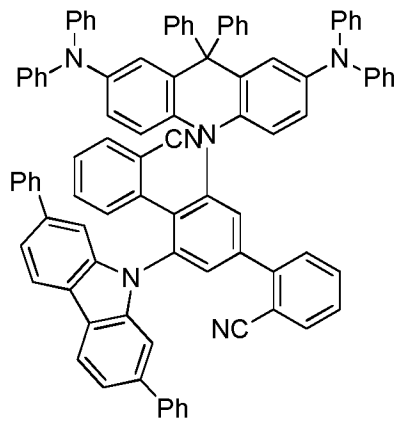
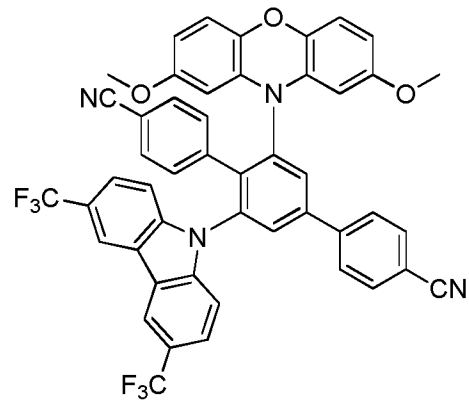
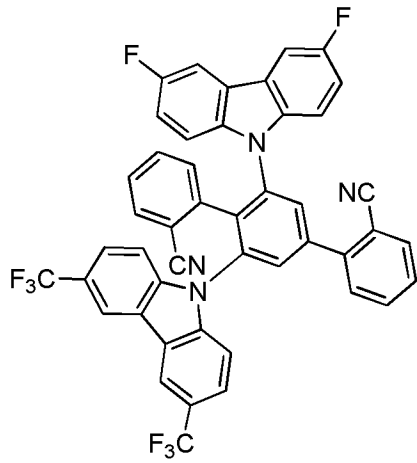
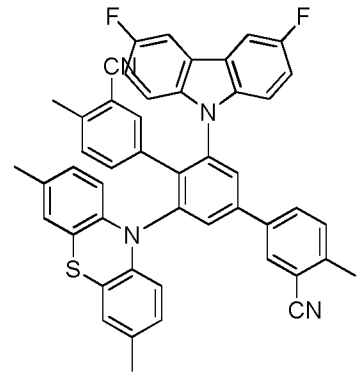
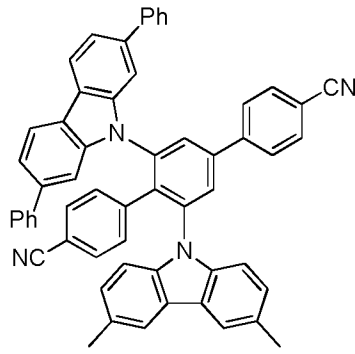
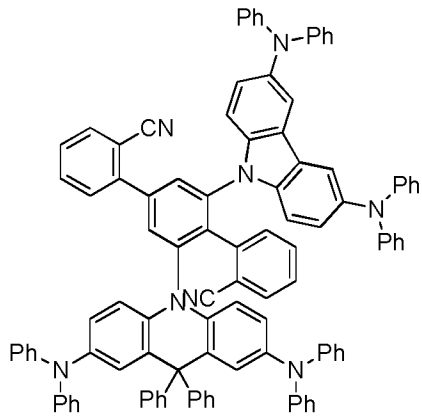


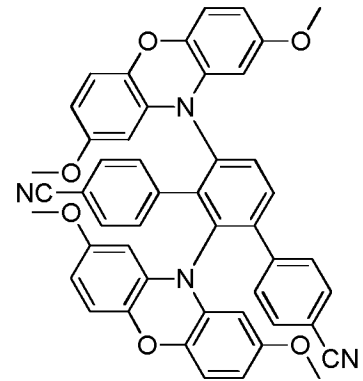
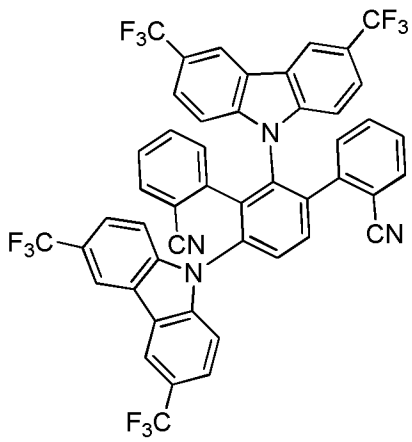
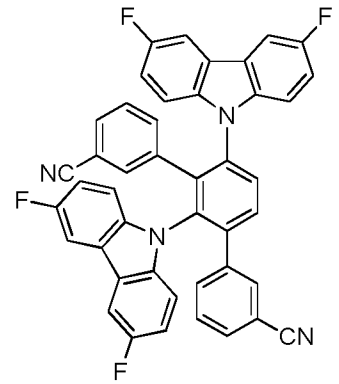
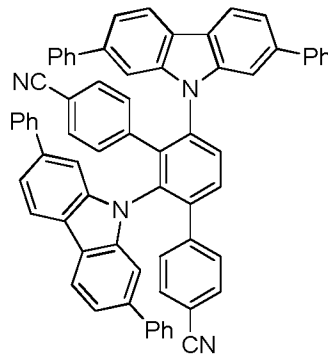
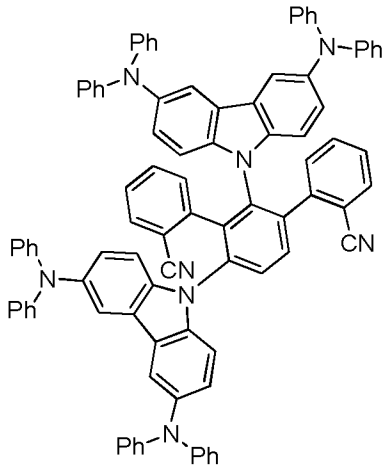
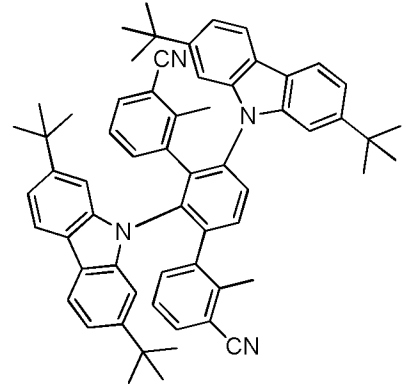
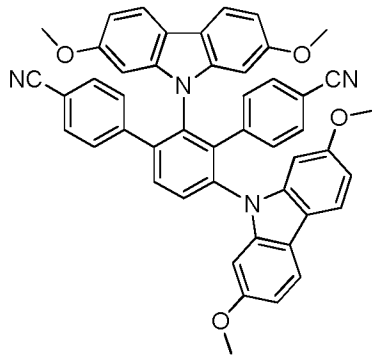
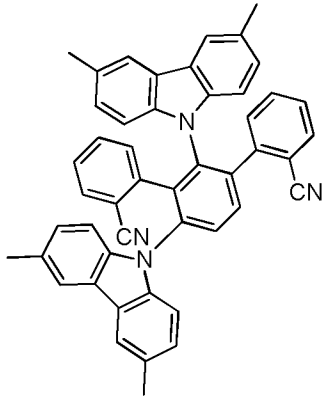


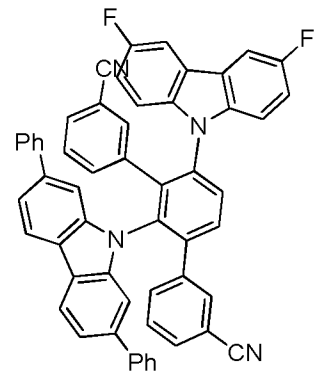
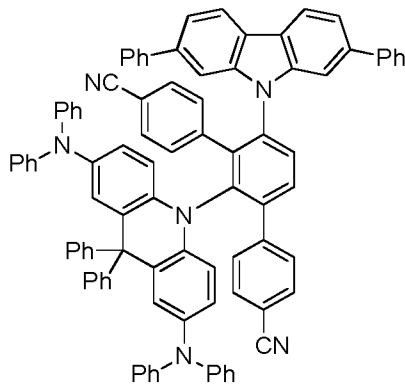
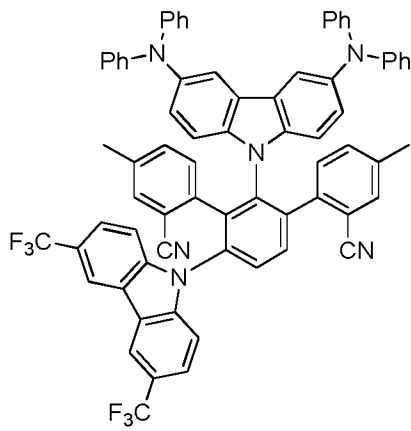
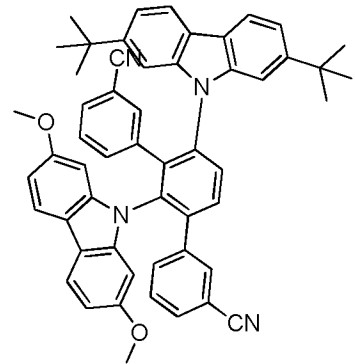
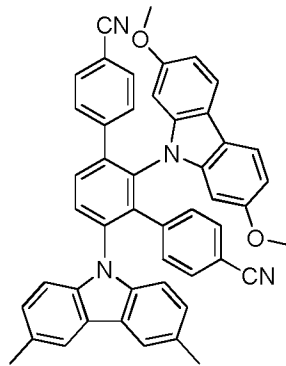
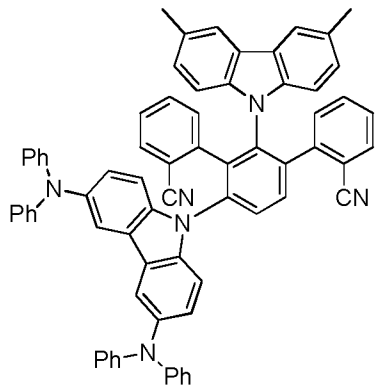
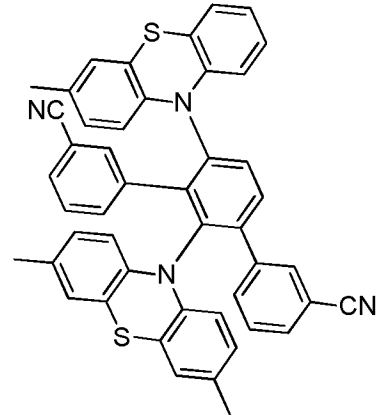
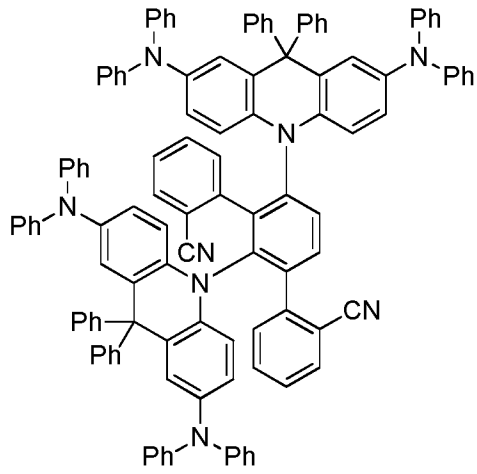


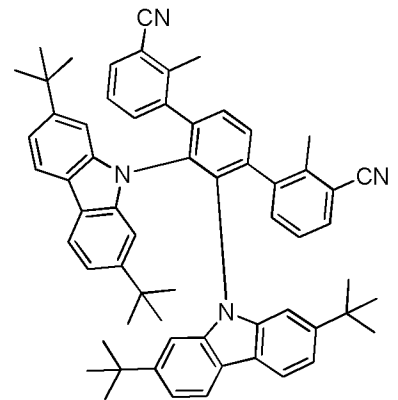
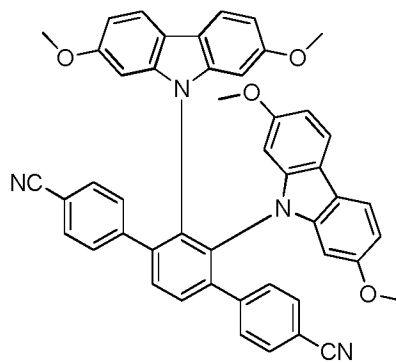
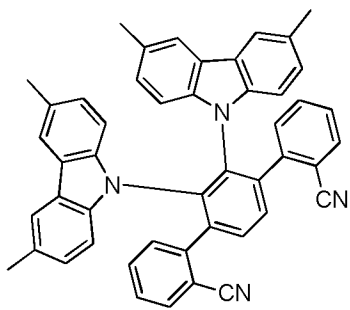
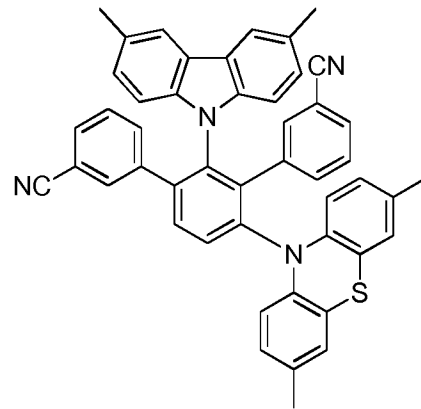
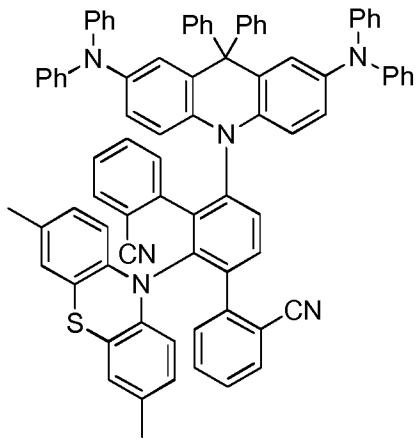
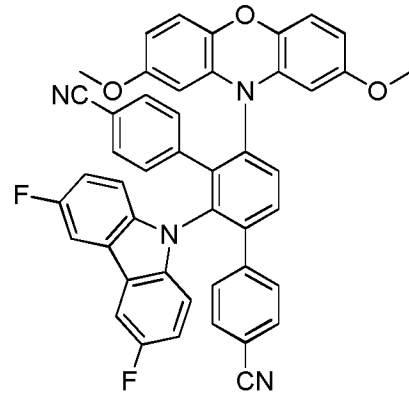
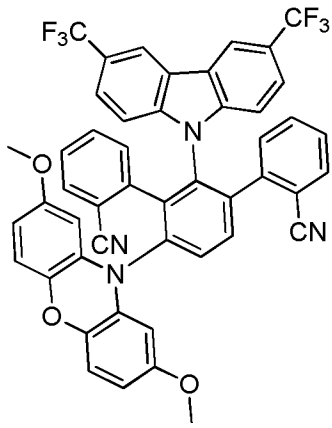


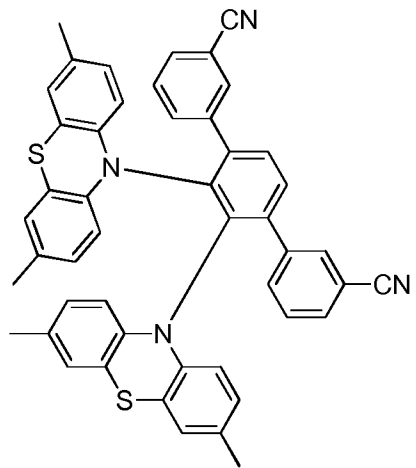
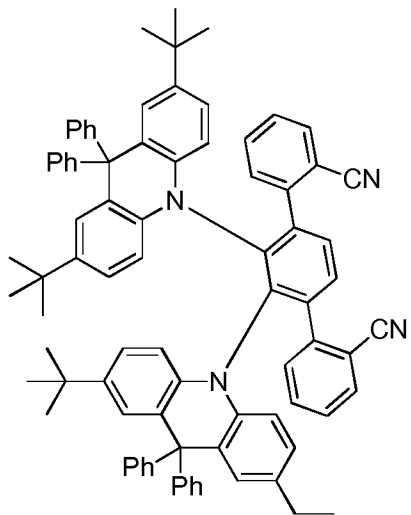
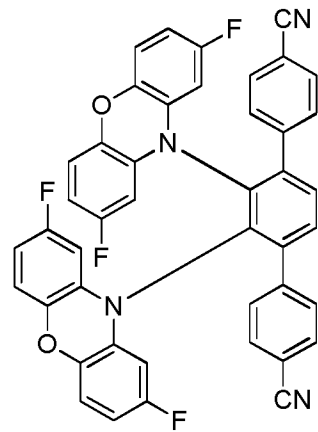
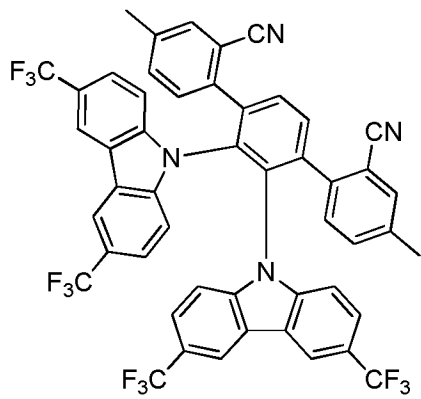
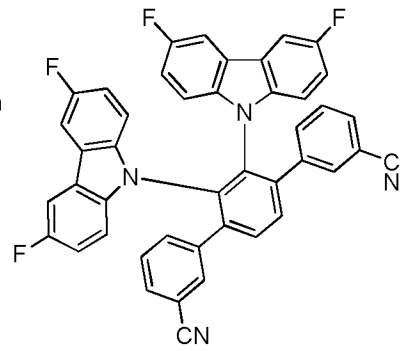
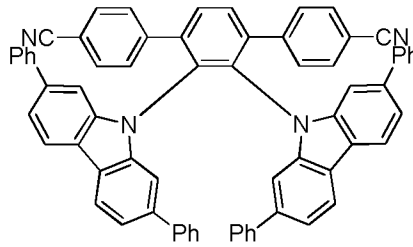
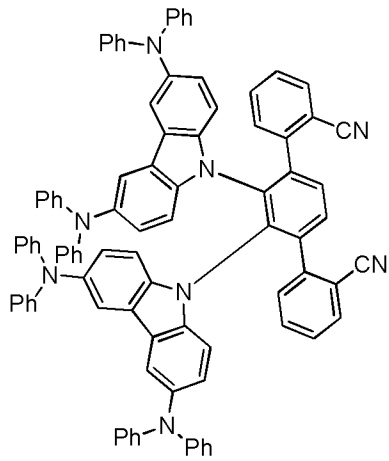


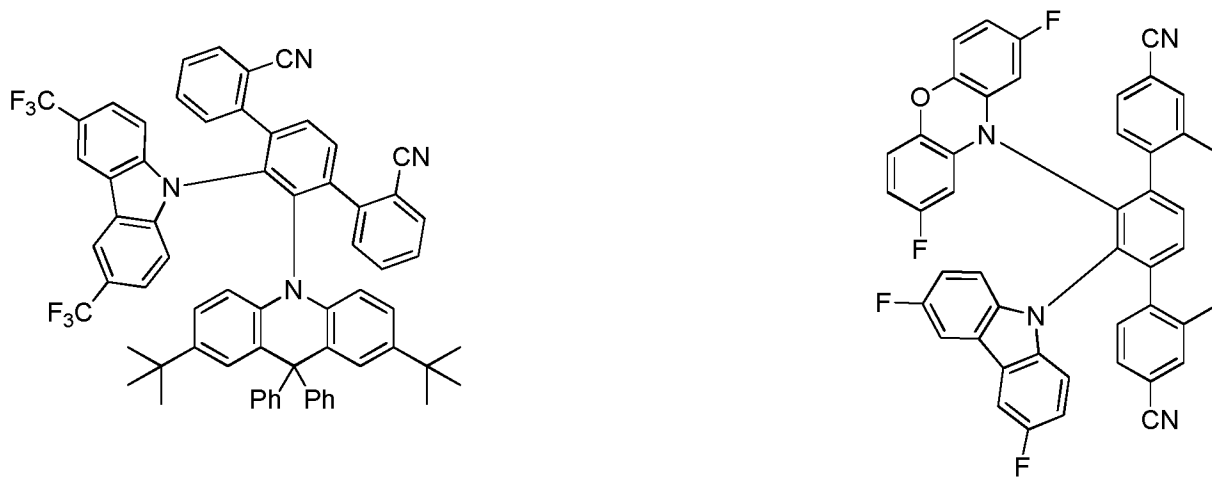
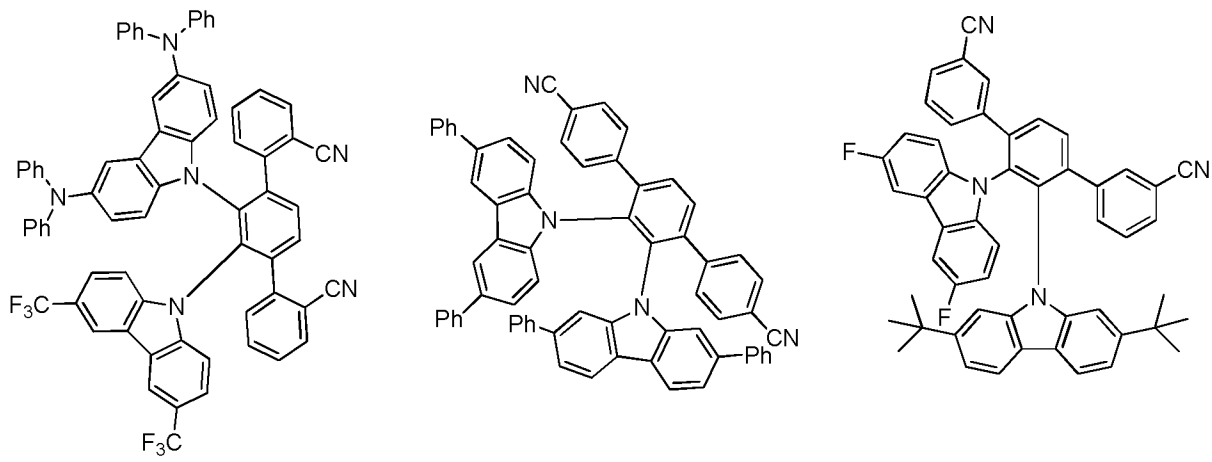
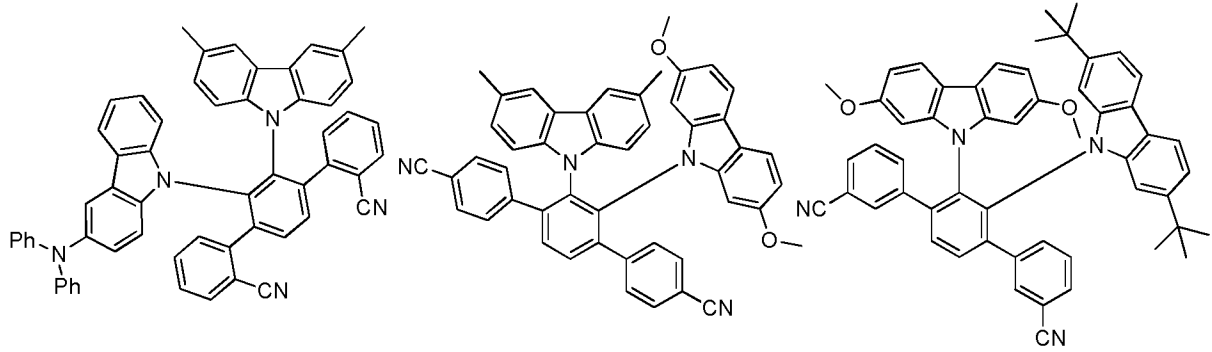


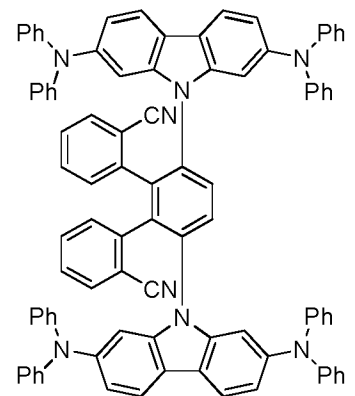
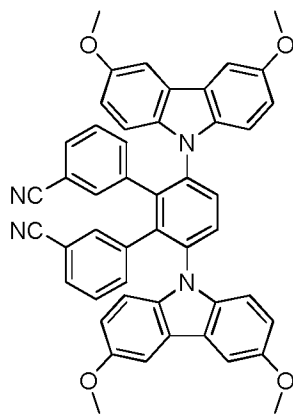
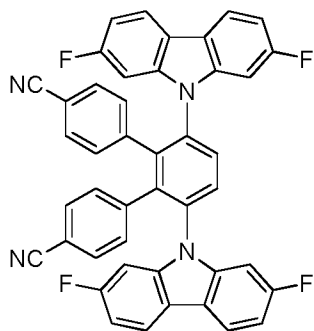
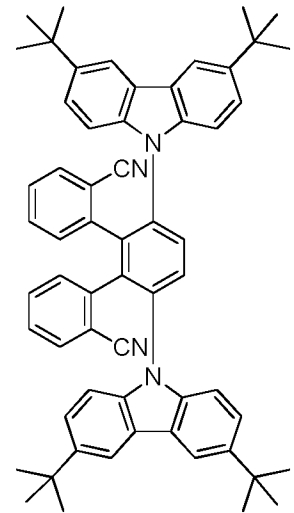
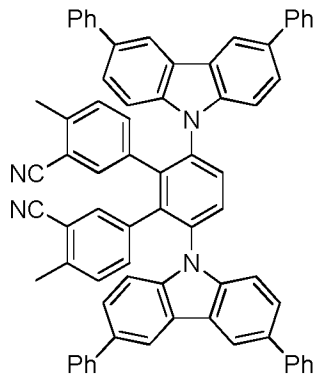
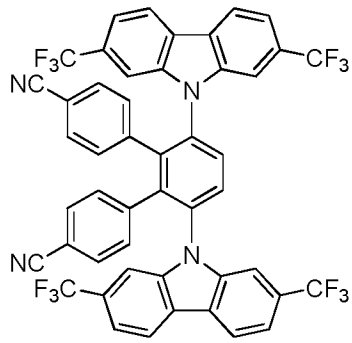
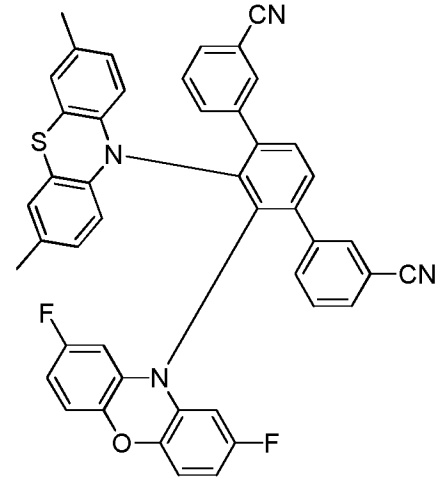
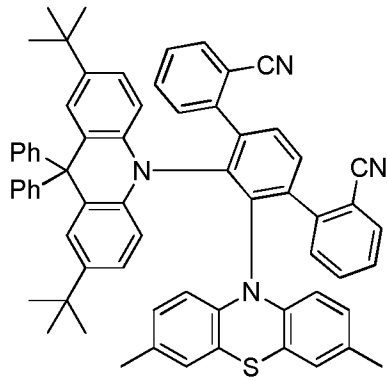


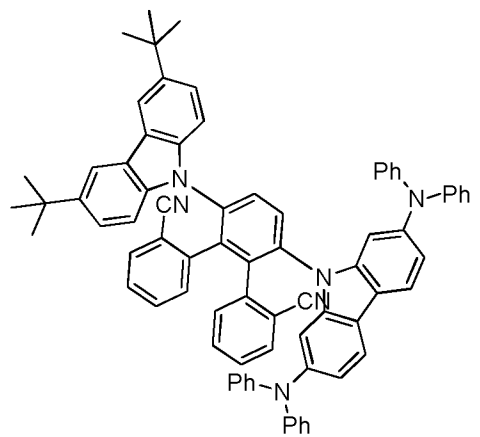
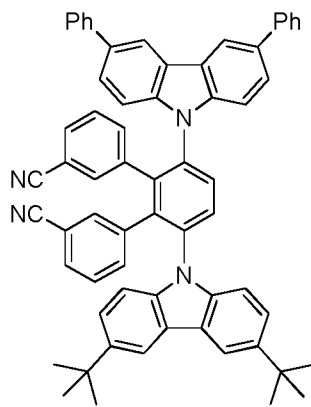
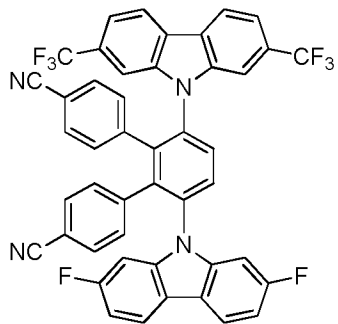
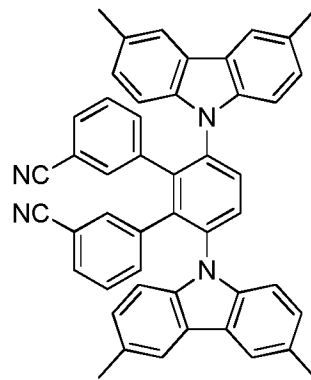
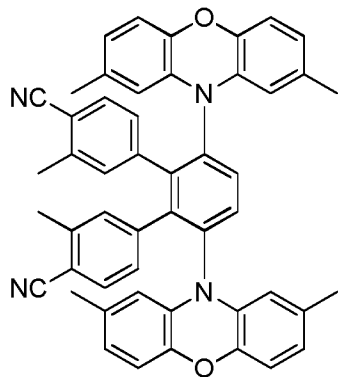
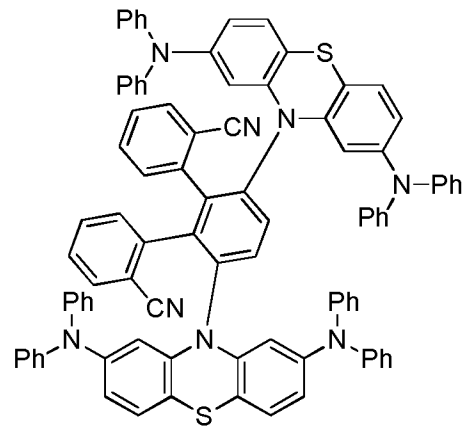
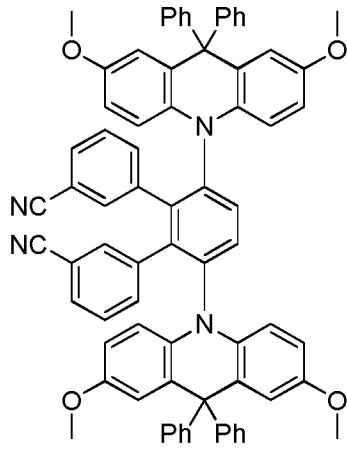


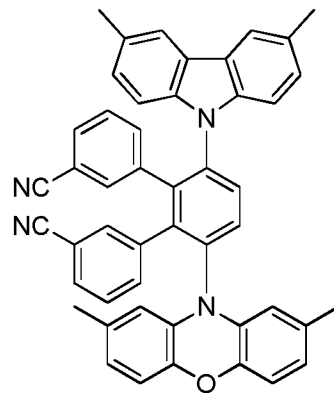
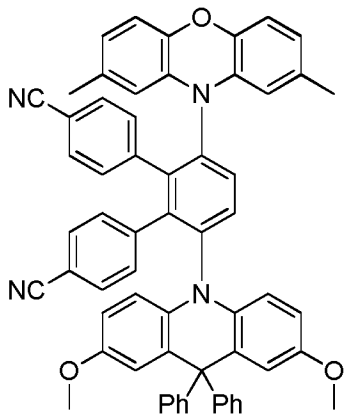
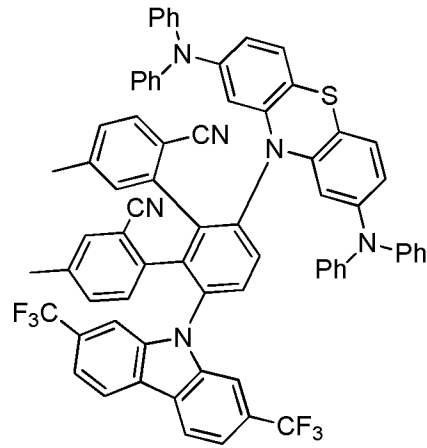
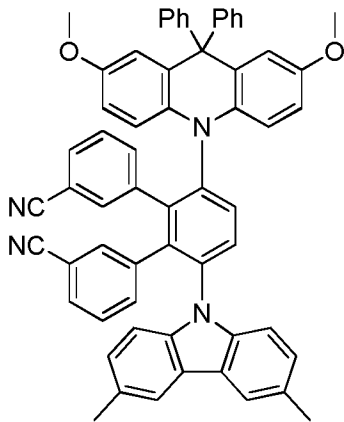
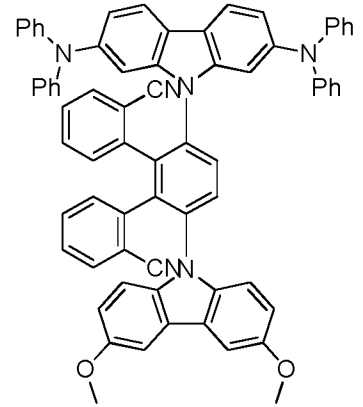
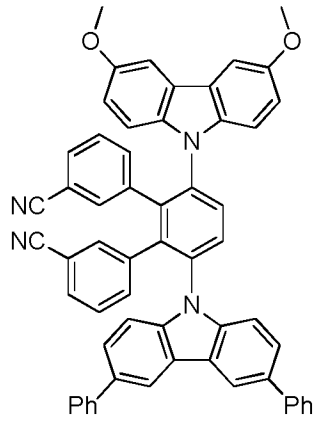
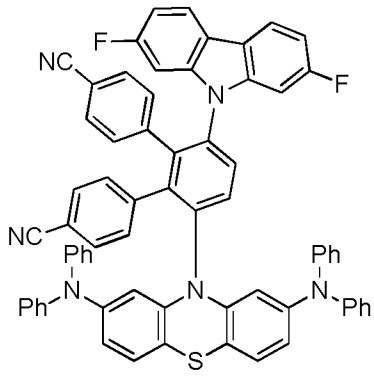












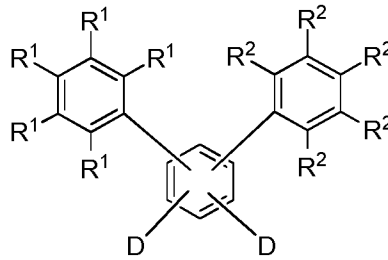
Figuren

Es zeigen:

- Figur 1 Emissionsspektrum von **1** in 10 % PMMA.
- Figur 2 Emissionsspektrum von **2** in 10 % PMMA.
- Figur 3 Emissionsspektrum von **3** in 10 % PMMA.
- Figur 4 Emissionsspektrum von **4** in 10 % PMMA.
- Figur 5 Emissionsspektrum von **5** in 10 % PMMA.
- Figur 6 Emissionsspektrum von **6** in 10 % PMMA.
- Figur 7 Emissionsspektrum von **7** in 10 % PMMA.
- Figur 8 Emissionsspektrum von **8** in 10 % PMMA.
- Figur 9 Emissionsspektrum von **9** in 10 % PMMA.
- Figur 10 Emissionsspektrum von **10** in 10 % PMMA.
- Figur 11 Emissionsspektrum von **11** in 10 % PMMA.
- Figur 12 Emissionsspektrum von **12** in 10 % PMMA.
- Figur 13 Emissionsspektrum von **13** in 10 % PMMA.
- Figur 14 Emissionsspektrum von **14** in 10 % PMMA.
- Figur 15 Emissionsspektrum von **15** in 10 % PMMA.
- Figur 16 Emissionsspektrum von **16** in 10 % PMMA.
- Figur 17 Emissionsspektrum von **17** in 10 % PMMA.
- Figur 18 Emissionsspektrum von **18** in 10 % PMMA.
- Figur 19 Emissionsspektrum von **19** in 10 % PMMA.
- Figur 20 Emissionsspektrum von **20** in 10 % PMMA.
- Figur 21 Emissionsspektrum von **23** in 10 % PMMA.
- Figur 22 Emissionsspektrum von **24** in 10 % PMMA.
- Figur 23 Emissionsspektrum von **25** in 10 % PMMA.
- Figur 24 Emissionsspektrum von **26** in 10 % PMMA.

Ansprüche

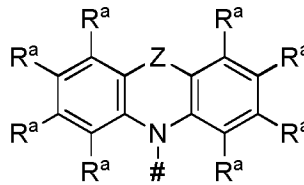
1. Organisches Molekül, aufweisend eine Struktur der Formel I



Formel A1

mit

D =



wobei

ist Anknüpfungspunkt der Einheit D an den zentralen Phenylring der Struktur gemäß Formel A1;

Z ist eine direkte Bindung oder ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus CR^3R^4 , $C=CR^3R^4$, $C=NR^3$, NR^3 , O, SiR^3R^4 , S, $S(O)$ und $S(O)_2$;

R^1 und R^2 bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus

- H, Deuterium;
- einer linearen Alkylgruppe mit 1 bis 5 C-Atomen, wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können;
- einer linearen Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 8 C-Atomen, wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können;
- einer verzweigten oder cyclischen Alkyl-, Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 3 bis 10 C-Atomen, wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN, CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können;
- einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem mit 5 bis 15 aromatischen Ringatomen, das jeweils mit einem oder mehreren Resten R^6 substituiert sein kann;
- CF_3 und
- CN;

R^a , R^3 und R^4 bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus

- H, Deuterium, $N(R^5)_2$, OH, $Si(R^5)_3$, $B(OR^5)_2$, OSO_2R^5 , CF_3 , CN, F, Br, I;

- einer linearen Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^5 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen durch $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S oder $CONR^5$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN , CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können;
- einer linearen Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^5 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen durch $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S oder $CONR^5$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN , CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können;
- einer verzweigten oder cyclischen Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^5 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen durch $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S oder $CONR^5$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN , CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können;
- einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils mit einem oder mehreren Resten R^5 substituiert sein kann;
- einer Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die mit einem oder mehreren Resten R^5 substituiert sein kann; und
- einer Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche mit einem oder mehreren Resten R^5 substituiert sein kann;

R^5 bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus

- H , Deuterium, $N(R^6)_2$, OH , $Si(R^6)_3$, $B(OR^6)_2$, OSO_2R^6 , CF_3 , CN , F , Br , I ;
- einer linearen Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^6 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen durch $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$, $P(=O)(R^6)$, SO , SO_2 , NR^6 , O , S oder $CONR^6$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN , CF_3 oder NO_2 ersetzt sein können;
- einer linearen Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^6 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen durch $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$,

C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S oder CONR⁶ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN, CF₃ oder NO₂ ersetzt sein können;

- einer verzweigten oder cyclischen Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R⁶ substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH₂-Gruppen durch R⁶C=CR⁶, C≡C, Si(R⁶)₂, Ge(R⁶)₂, Sn(R⁶)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S oder CONR⁶ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN, CF₃ oder NO₂ ersetzt sein können;
- einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils mit einem oder mehreren Resten R⁶ substituiert sein kann;
- einer Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die mit einem oder mehreren Resten R⁶ substituiert sein kann; und
- einer Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche mit einem oder mehreren Resten R⁶ substituiert sein kann;

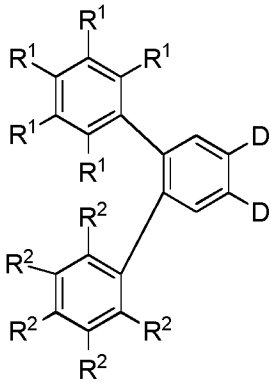
R⁶ bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus

- H, Deuterium, OH, CF₃, CN, F, Br, I;
- einer linearen Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 5 C-Atomen, wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN, CF₃ oder NO₂ ersetzt sein können;
- einer linearen Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 5 C-Atomen, wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN, CF₃ oder NO₂ ersetzt sein können;
- einer verzweigten oder cyclischen Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 5 C-Atomen, wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, CN, CF₃ oder NO₂ ersetzt sein können;
- einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen;
- einer Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen; und
- einer Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen;

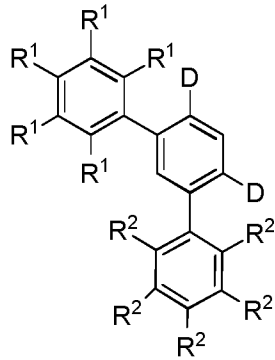
wobei jeder der Reste R^a, R³, R⁴ oder R⁵ auch mit einem oder mehreren weiteren Resten R^a, R³, R⁴ oder R⁵ ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden kann; und

wobei unabhängig voneinander genau ein R¹ und genau ein R² gleich CF₃ oder CN ist.

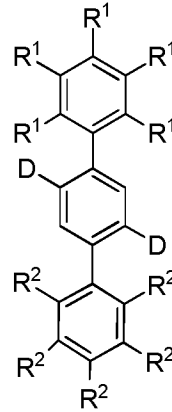
2. Organisches Molekül nach Anspruch 1, aufweisend eine Struktur der Formel Ia, Ib, Ic, Id, Ie, If, Ig oder Ih



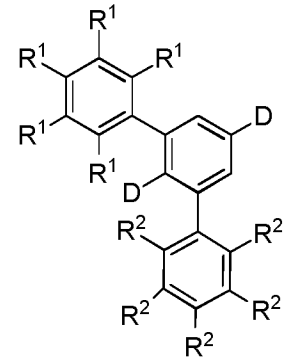
Formel Ia



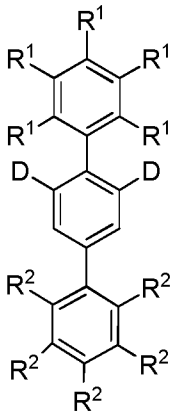
Formel Ib



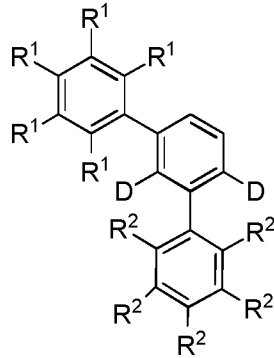
Formel Ic



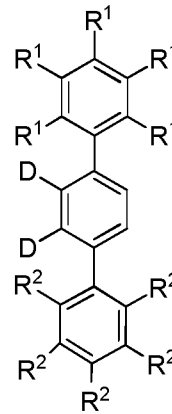
Formel Id



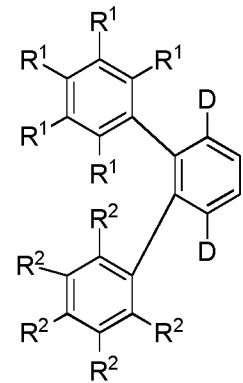
Formel Ie



Formel If



Formel Ig



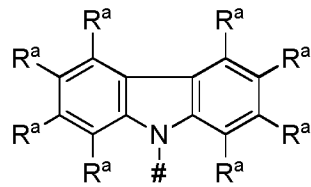
Formel Ih

wobei die in Anspruch 1 angegebenen Definitionen gelten.

3. Organisches Molekül nach Anspruch 1 bis 2, wobei genau ein R¹ und genau ein R² gleich CN sind und optional die übrigen Reste R¹ und R² bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H oder Methyl sind.

4. Organisches Molekül nach Anspruch 1 bis 3, wobei genau zwei R¹ oder zwei R² gleich Methyl und die übrigen R¹ und ein R² gleich H sind.

5. Organisches Molekül nach Anspruch 1 bis 4, wobei D eine Struktur der Formel II aufweist:



Formel II

wobei

jeweils der Anknüpfungspunkt der Einheit D an den zentralen Phenylring in den Strukturen der Formeln A1 und Ia bis Ih ist;

und wobei R^a wie in Anspruch 1 definiert ist.

6. Verfahren zur Herstellung eines Organischen Moleküls nach Anspruch 1 bis 5, wobei ein 1,2-Dibrom-4,5-difluorbenzol als Edukt eingesetzt wird.

7. Verwendung eines organischen Moleküls nach Anspruch 1 bis 5 als lumineszierender Emitter und/oder als Hostmaterial und/oder als Elektronentransportmaterial und/oder als Lochinjektionsmaterial und/oder als Lochblockiermaterial in einer organischen optoelektronischen Vorrichtung.

8. Verwendung nach Anspruch 7, wobei die organische optoelektronische Vorrichtung 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.

9. Zusammensetzung aufweisend oder bestehend aus:

(a) mindestens einem organischen Molekül nach einem der Ansprüche 1 bis 5, insbesondere als Emitter und/oder Host, und

(b) ein oder mehrere von dem Molekül nach einem der Ansprüche 1 bis 5 verschiedenen Emitter- und/oder Hostmaterialien

(c) optional einem oder mehreren Farbstoffen und/ oder einem oder mehreren Lösungsmitteln.

10. Organische optoelektronische Vorrichtung, aufweisend ein organisches Molekül nach Anspruch 1 bis 5 oder eine Zusammensetzung nach Anspruch 9, insbesondere ausgeformt als eine Vorrichtung ausgewählt aus der Gruppe bestehend ausorganischer lichtemittierender Diode (OLED), lichtemittierender elektrochemischer Zelle, OLED-Sensor, insbesondere nicht hermetisch nach außen abgeschirmten Gas- und Dampf-Sensoren, organischer Diode, organischer Solarzelle, organischem Transistor, organischem Feldeffekttransistor, organischem Laser und Down-Konversion-Element.

11. Organische optoelektronische Vorrichtung nach Anspruch 10, aufweisend

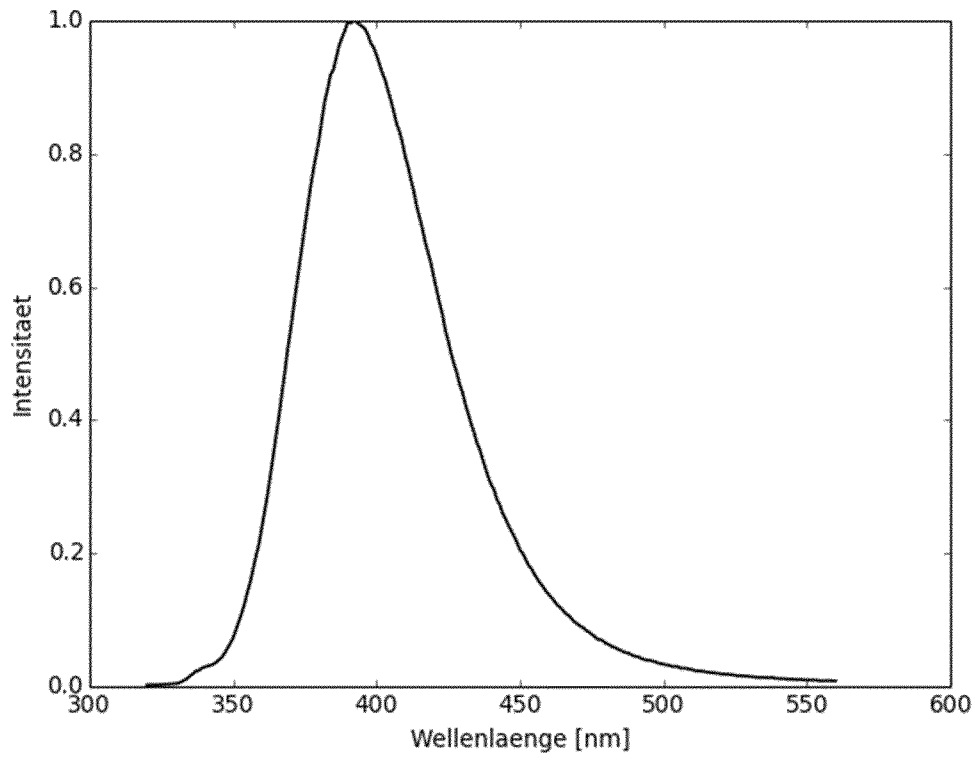
- ein Substrat,
- eine Anode und
- eine Kathode, wobei die Anode oder die Kathode auf das Substrat aufgebracht sind, und
- mindestens eine lichtemittierende Schicht, die zwischen Anode und Kathode angeordnet ist und die das organische Molekül nach Anspruch 1 bis 5 aufweist.

12. Verfahren zur Herstellung eines optoelektronischen Bauelements, wobei ein organisches Molekül nach Anspruch 1 bis 5 verwendet wird.

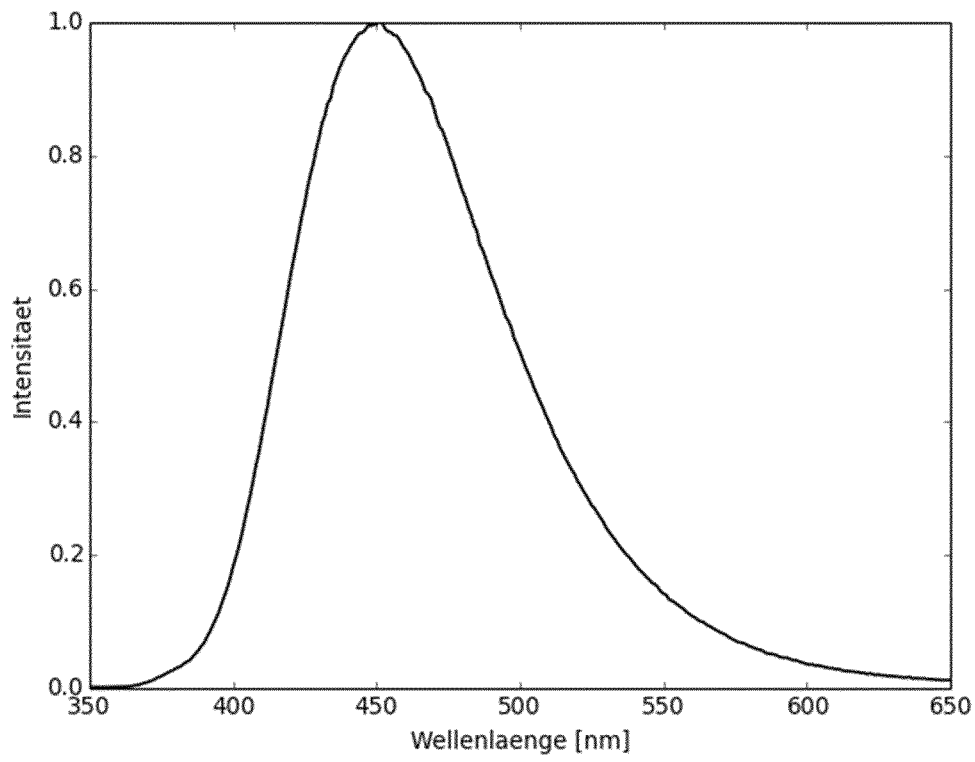
13. Verfahren nach Anspruch 12, umfassend die Verarbeitung des organischen Moleküls mittels eines Vakuumverdampfungsverfahrens oder aus einer Lösung.

Figuren

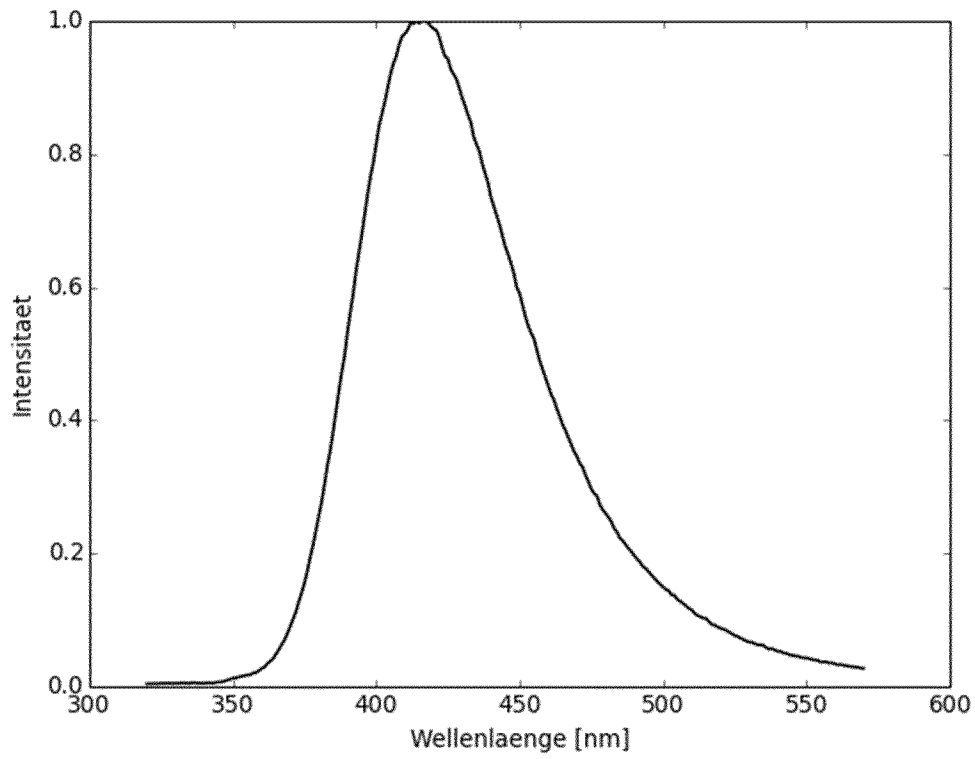
Figur 1



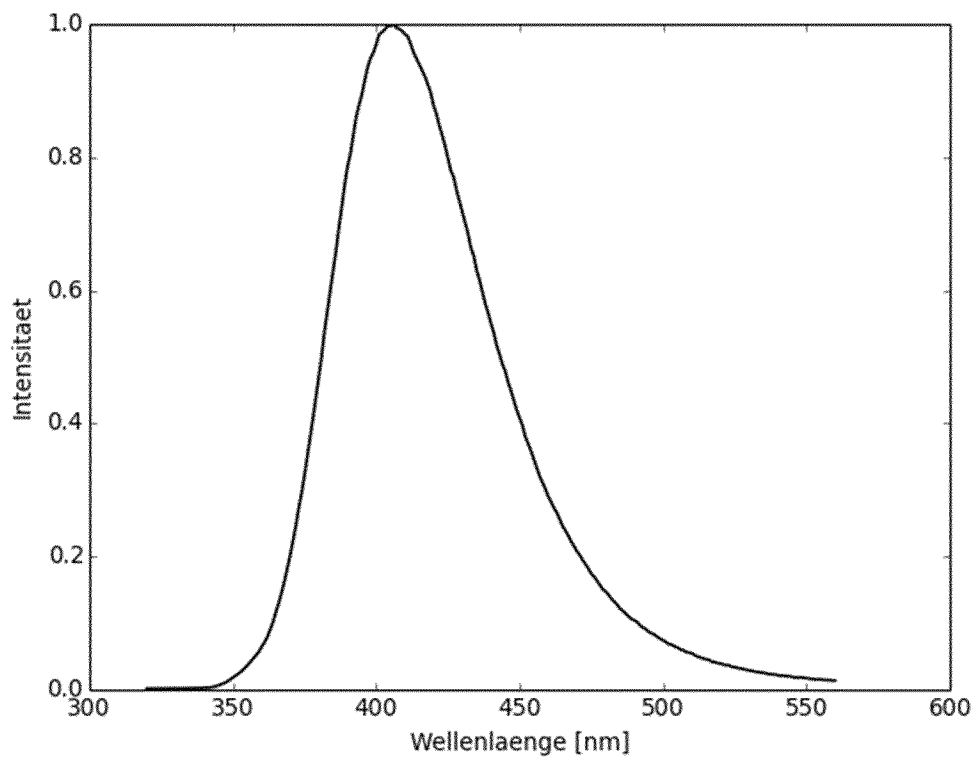
Figur 2



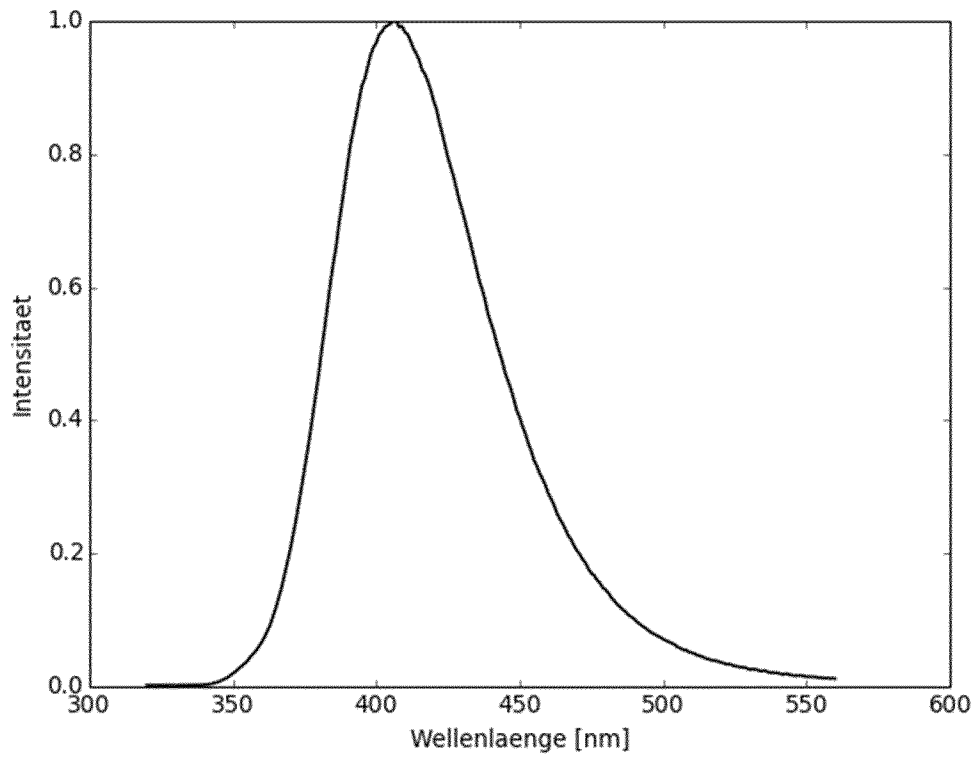
Figur 3



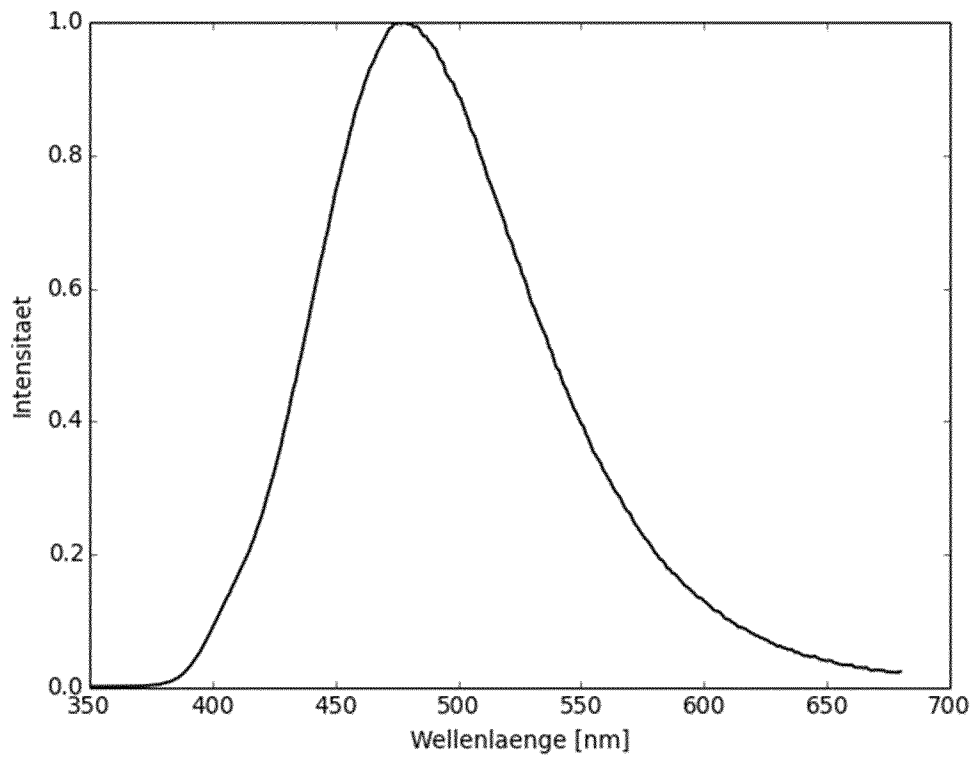
Figur 4



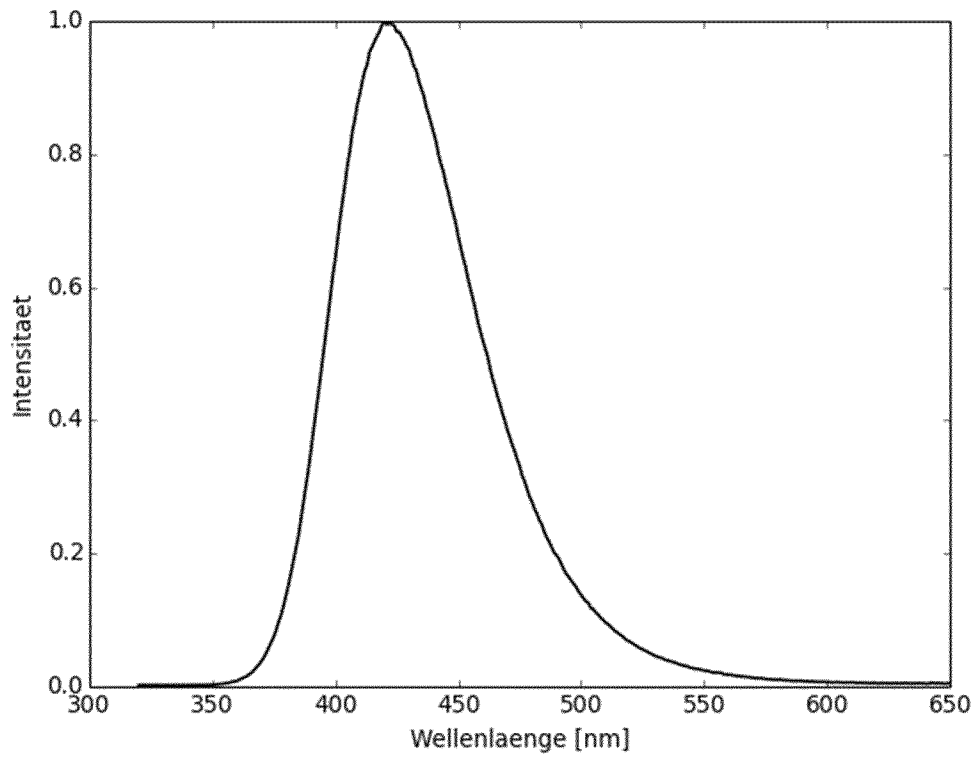
Figur 5



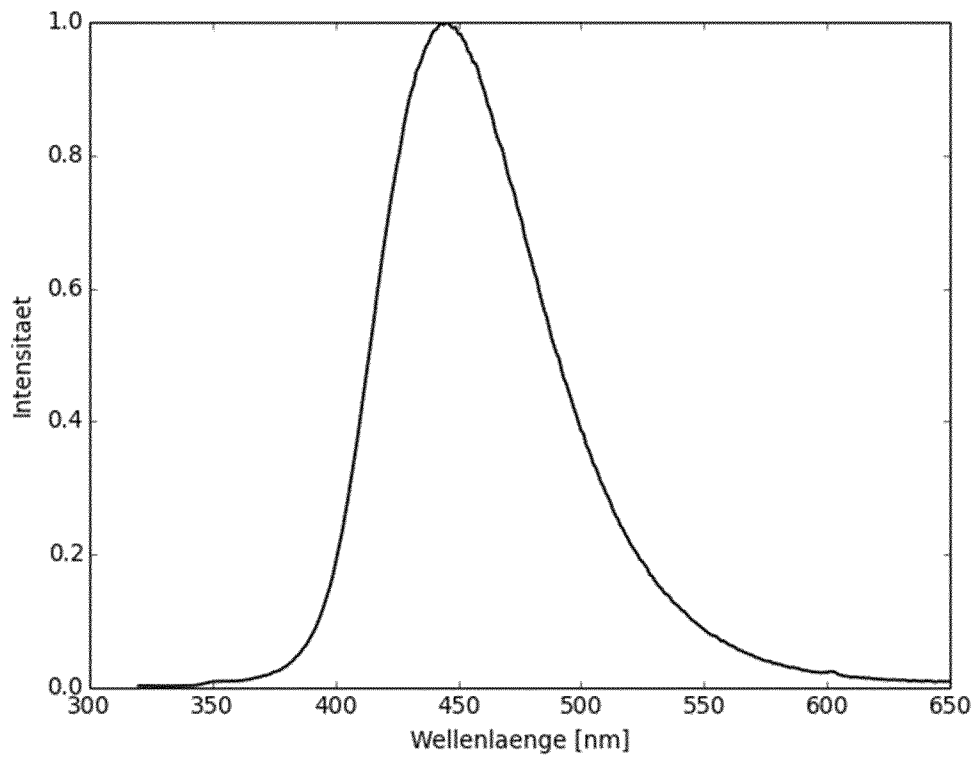
Figur 6



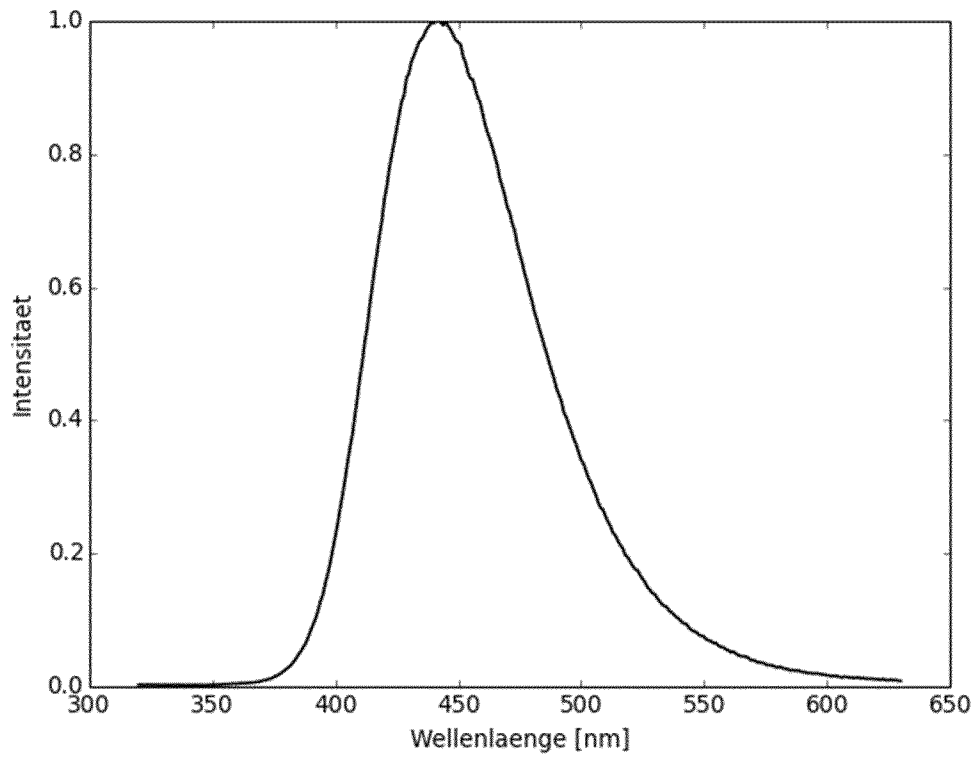
Figur 7



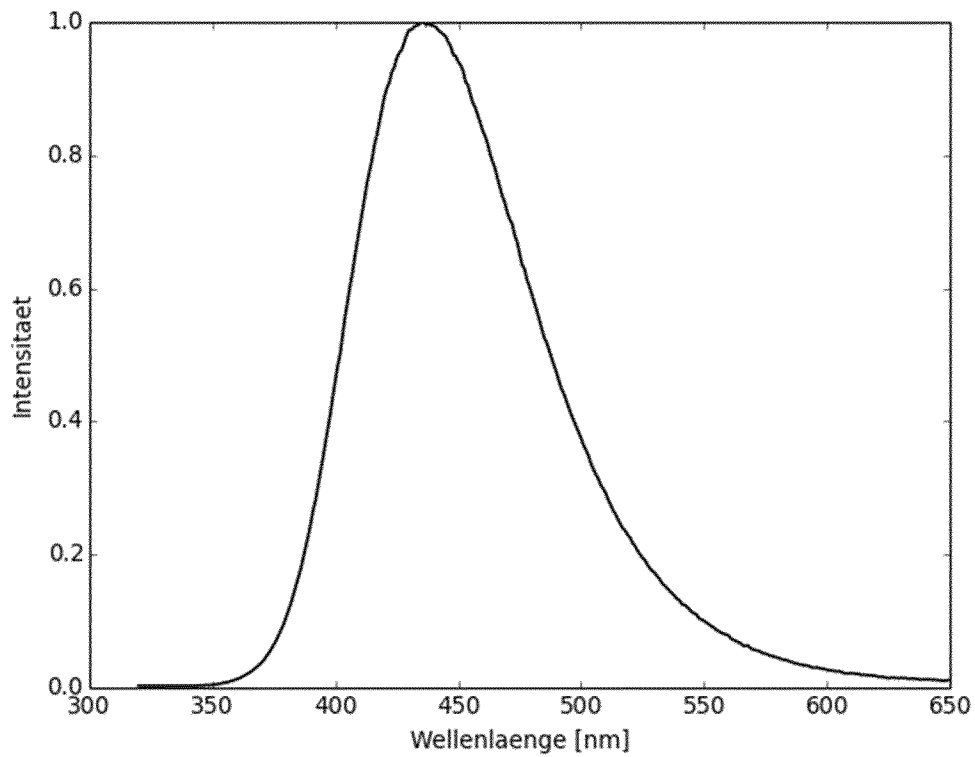
Figur 8



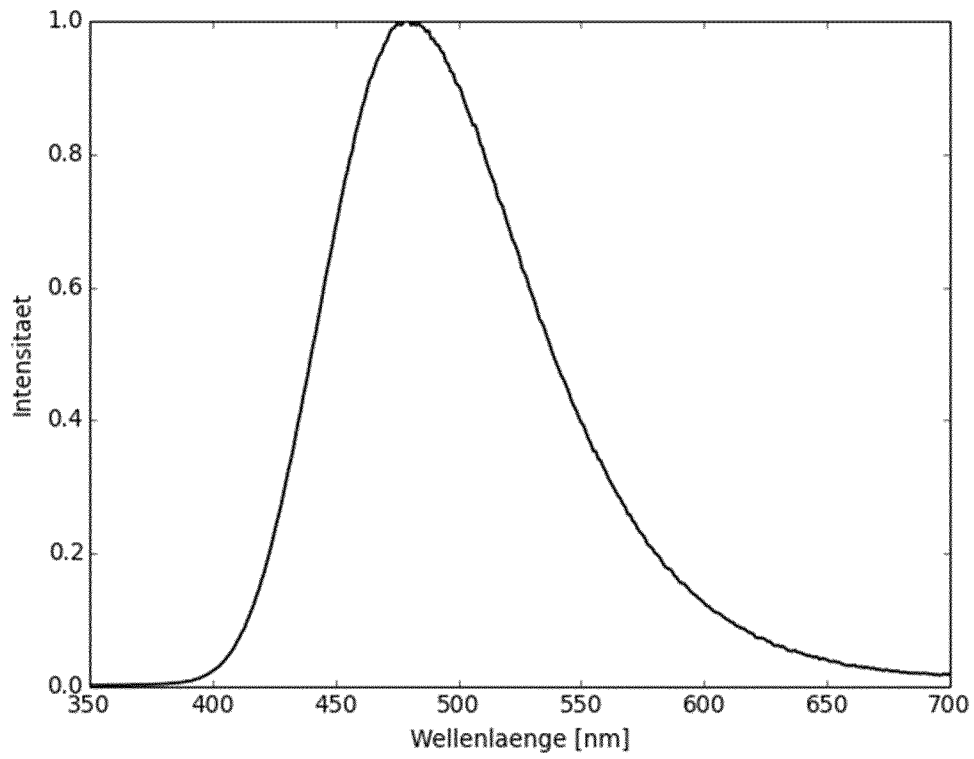
Figur 9



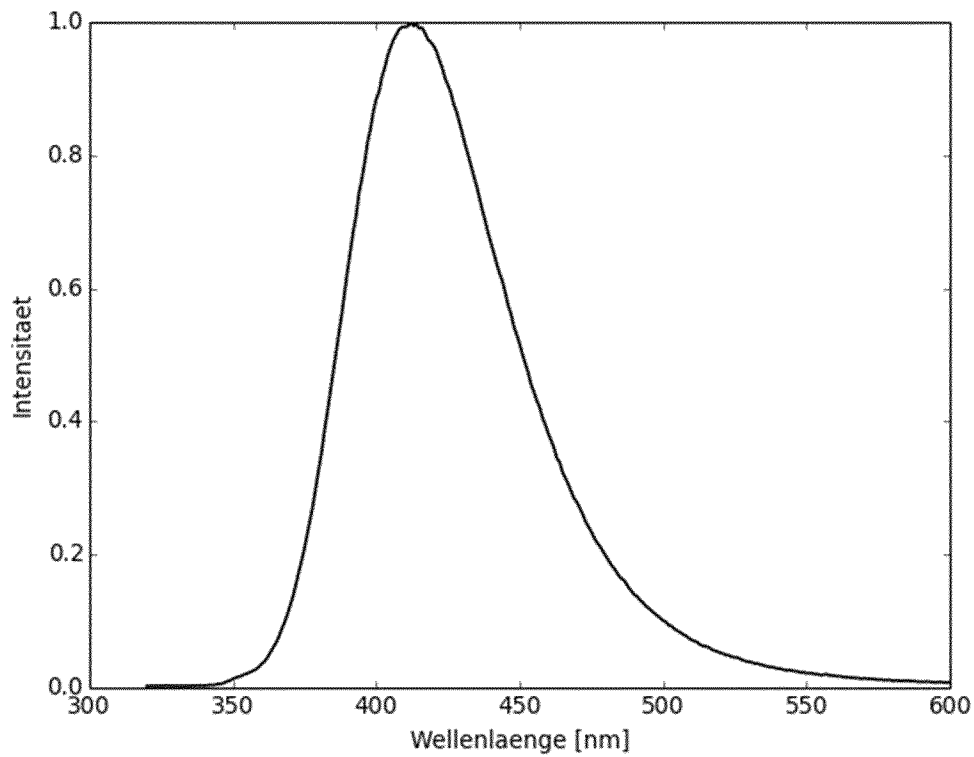
Figur 10



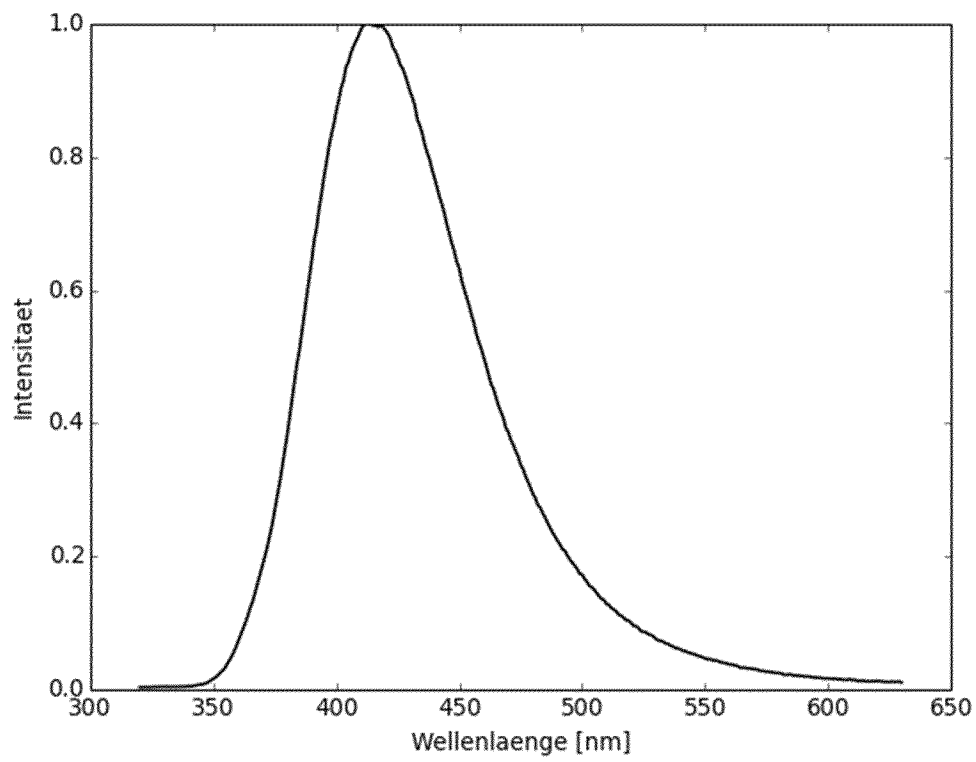
Figur 11



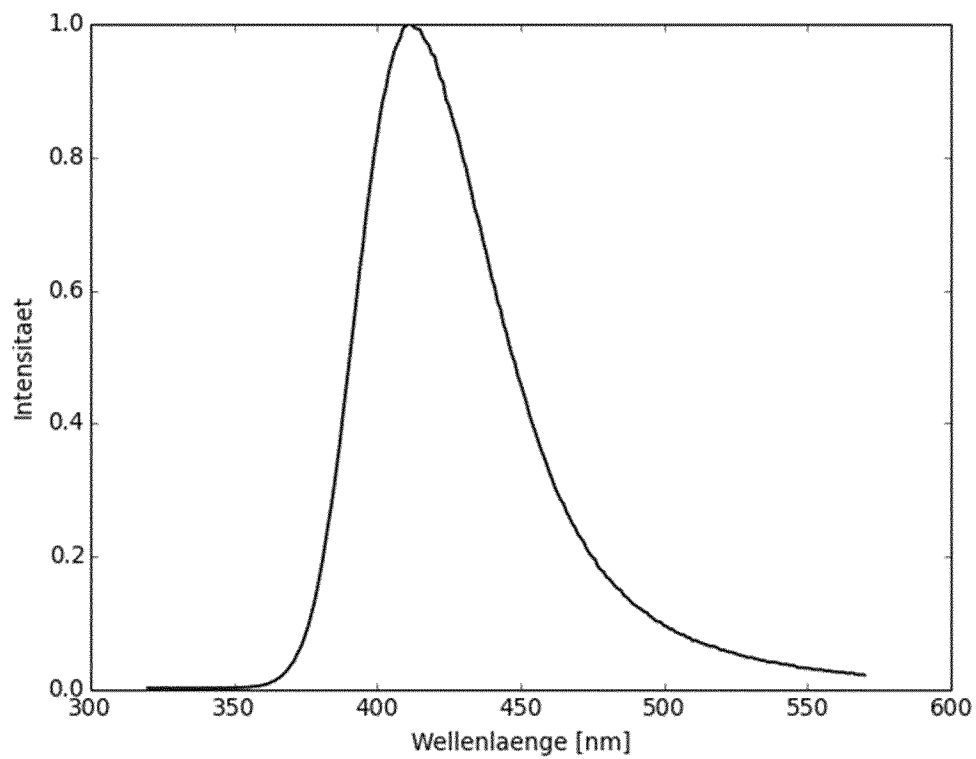
Figur 12



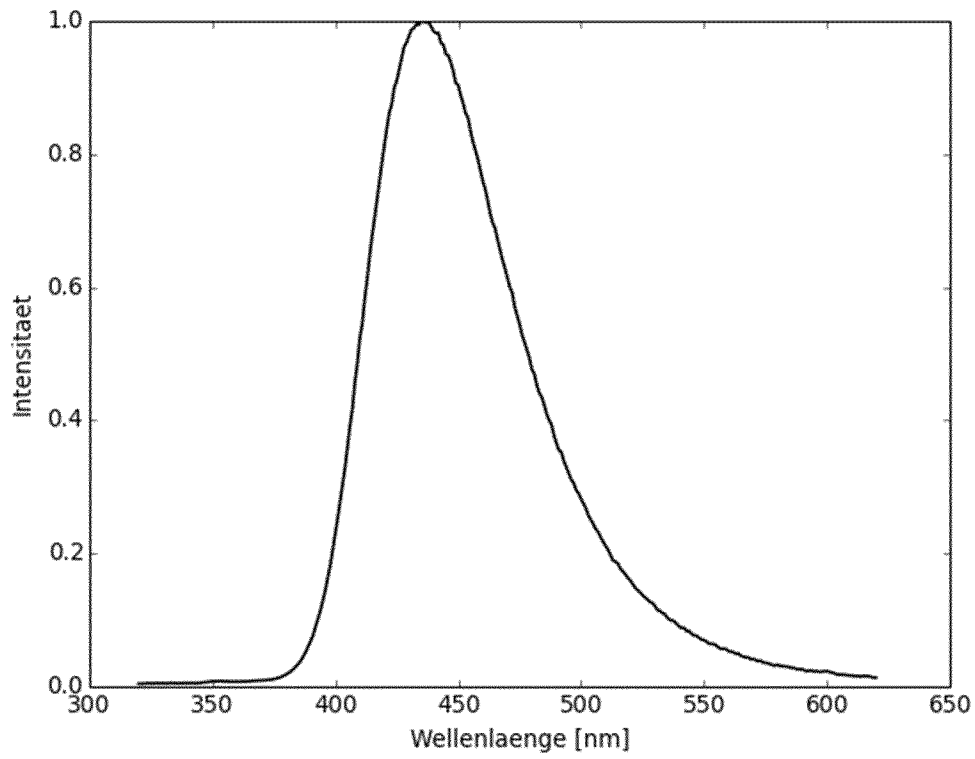
Figur 13



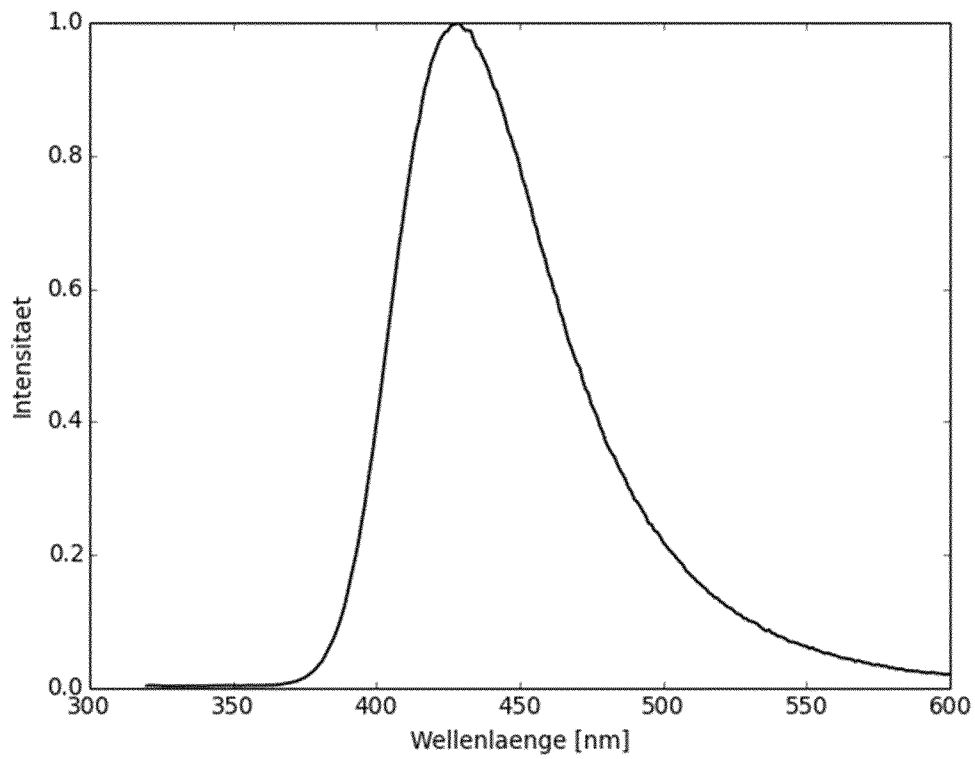
Figur 14



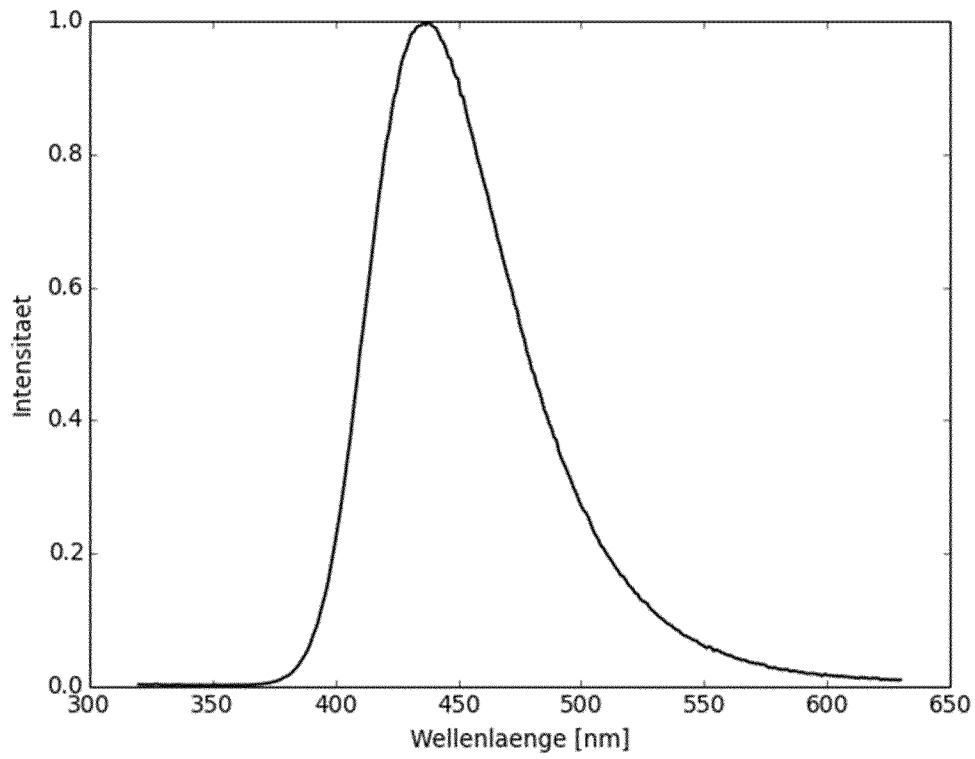
Figur 15



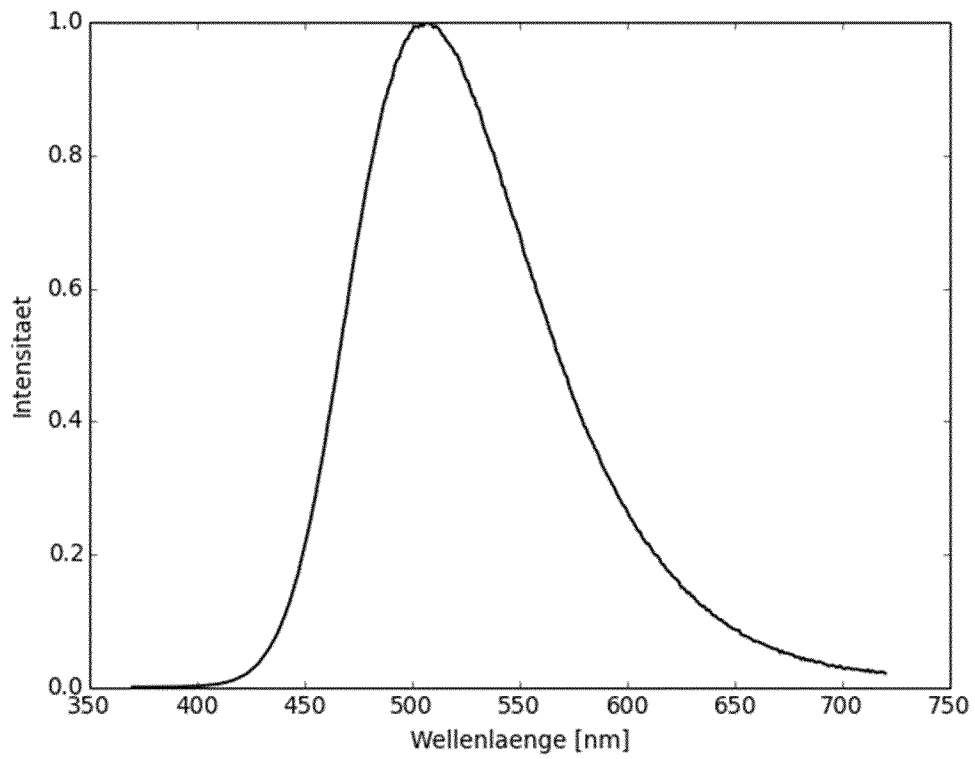
Figur 16



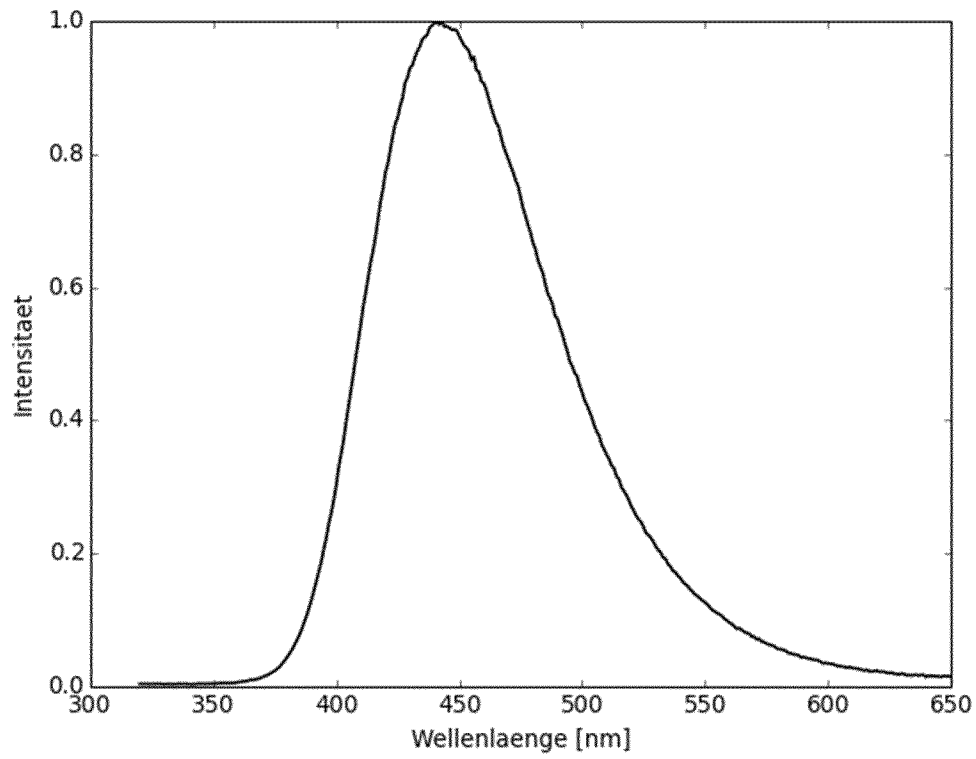
Figur 17



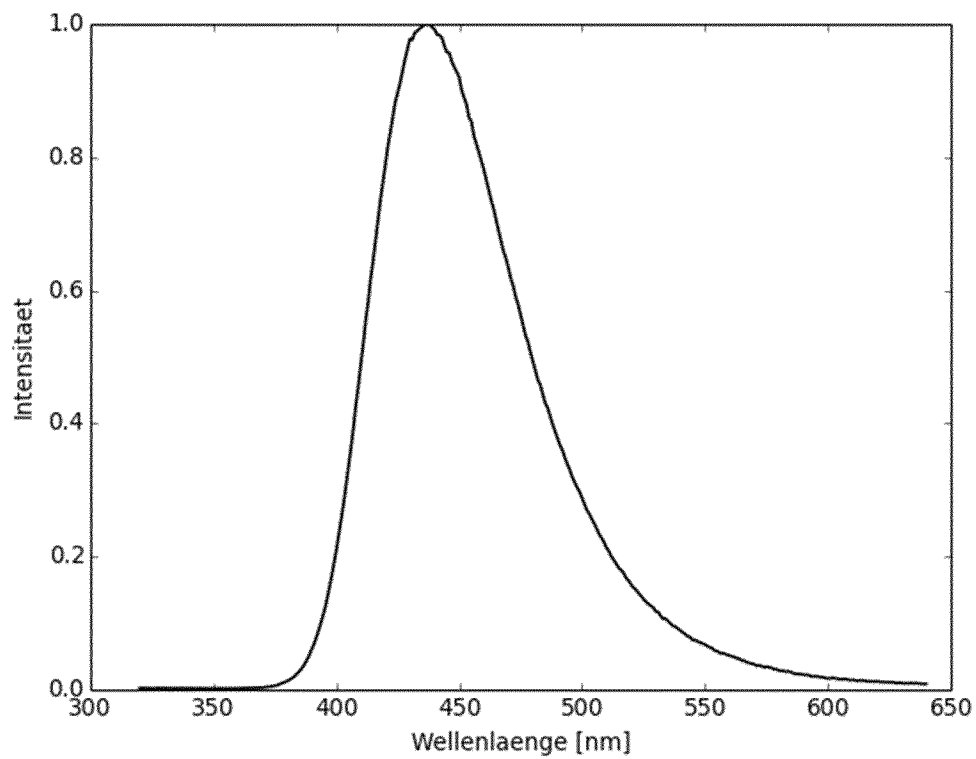
Figur 18



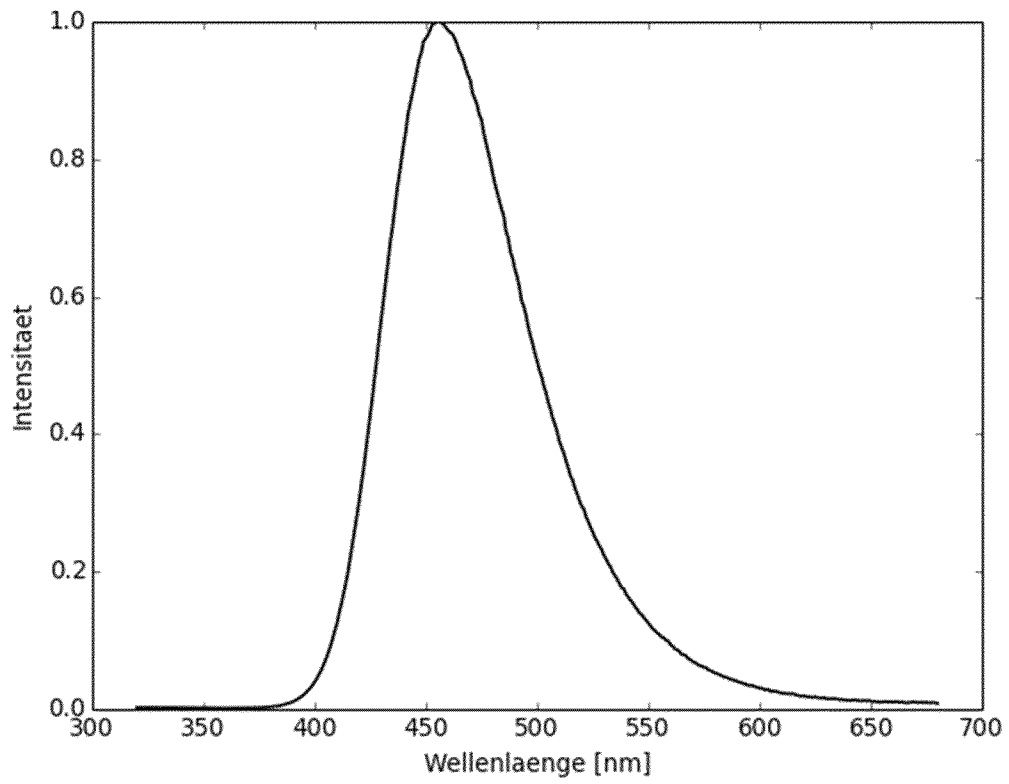
Figur 19



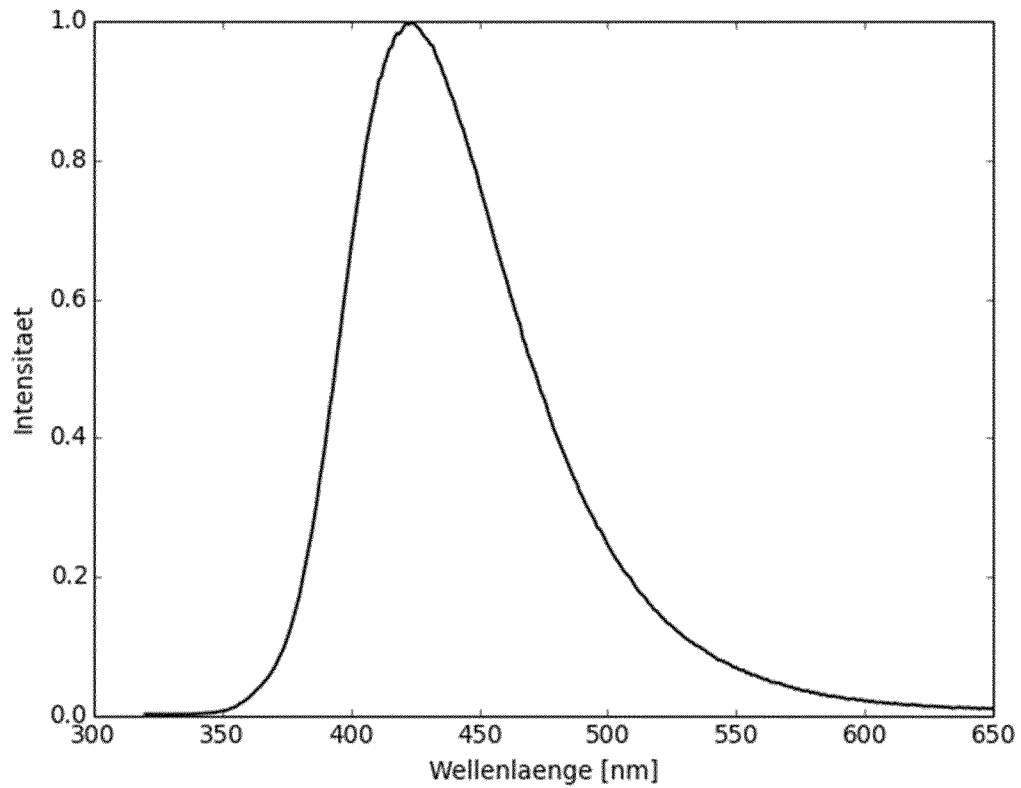
Figur 20



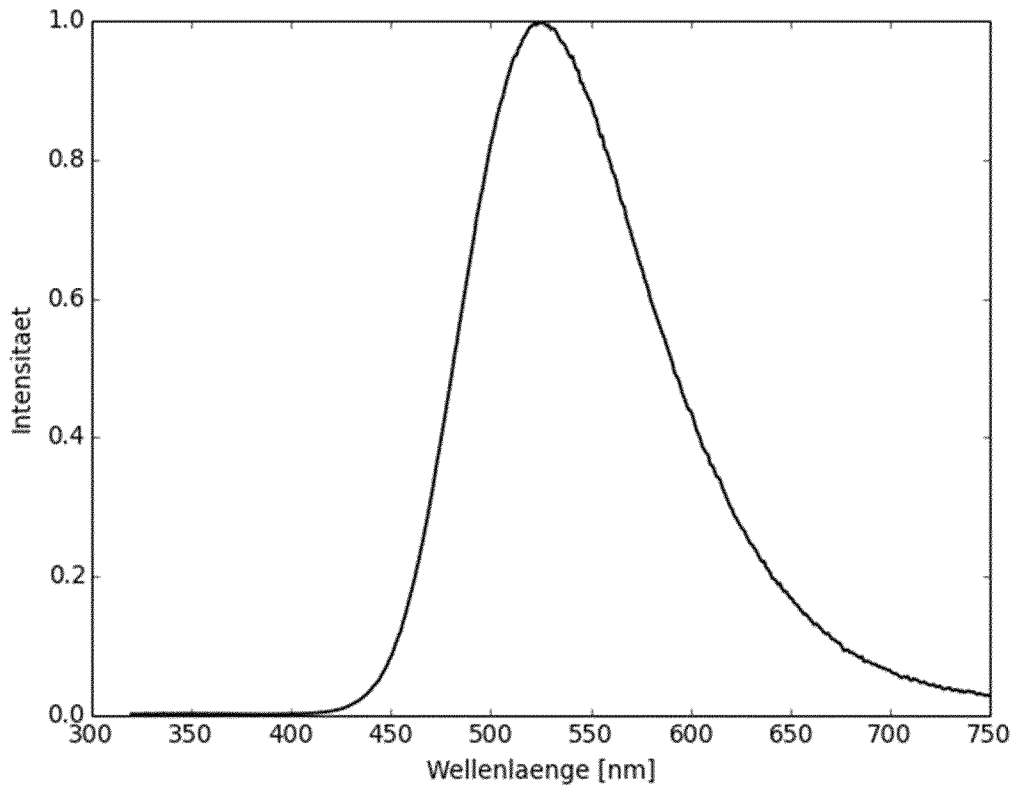
Figur 21



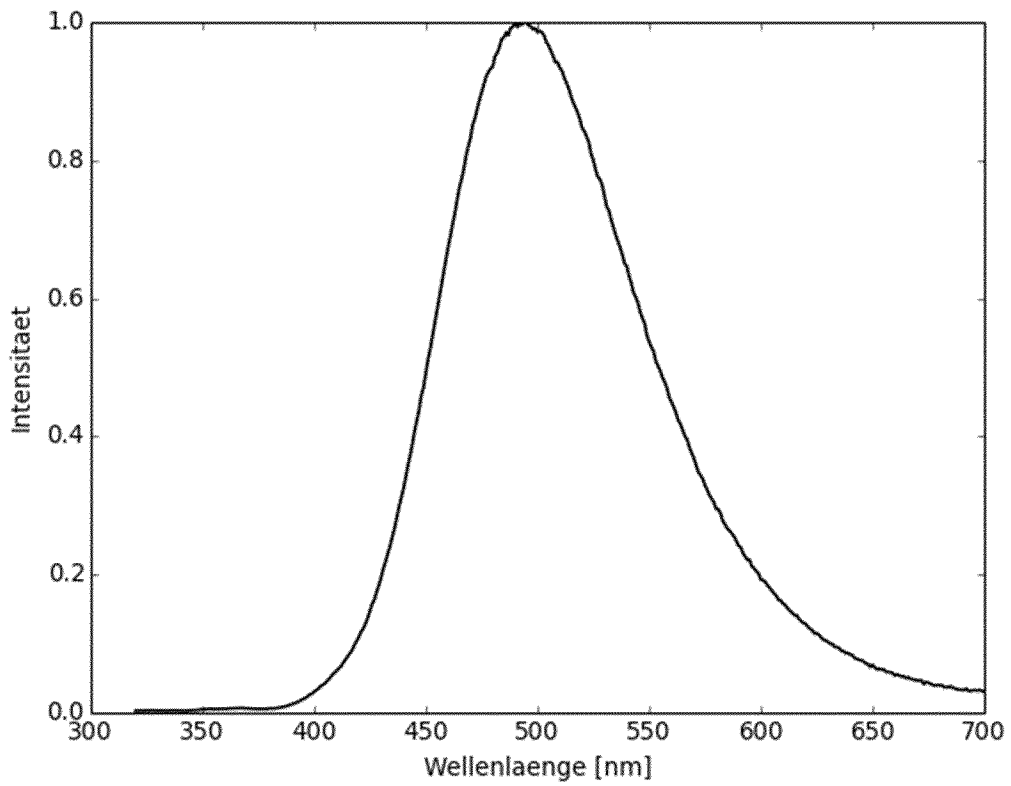
Figur 22



Figur 23



Figur 24



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2017/057047

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
INV. C07D403/10 C07D209/82 H01L51/50
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)
C07D H01L
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
EPO-Internal, CHEM ABS Data

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2015/111864 A1 (DOOSAN CORP [KR]) 30 July 2015 (2015-07-30)	1-5,7-13
A	abstract; claims 1-7	6
A	----- US 2013/056720 A1 (KIM HYUNG-SUN [KR] ET AL) 7 March 2013 (2013-03-07) claims 1-20	1-13
	----- -/--	

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	"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
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date	"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
"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)	"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
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means	"&" document member of the same patent family
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	

Date of the actual completion of the international search 14 June 2017	Date of mailing of the international search report 28/06/2017
---	--

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 Kleidernigg, Oliver
--	---

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2017/057047

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	<p>DONG RYUN LEE ET AL: "Design Strategy for 25% External Quantum Efficiency in Green and Blue Thermally Activated Delayed Fluorescent Devices", ADVANCED MATERIALS, vol. 27, no. 39, 26 October 2015 (2015-10-26), pages 5861-5867, XP055328577, DE ISSN: 0935-9648, DOI: 10.1002/adma.201502053 Schema 1</p> <p style="text-align: center;">-----</p>	1-13

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No

PCT/EP2017/057047

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 2015111864 A1	30-07-2015	KR 20150087045 A WO 2015111864 A1	29-07-2015 30-07-2015

US 2013056720 A1	07-03-2013	CN 102971395 A EP 2568030 A2 JP 5938397 B2 JP 2013533604 A KR 20110122051 A US 2013056720 A1 WO 2011139055 A2	13-03-2013 13-03-2013 22-06-2016 22-08-2013 09-11-2011 07-03-2013 10-11-2011

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES
 INV. C07D403/10 C07D209/82 H01L51/50
 ADD.

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

B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)
 C07D H01L

Recherchierte, aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen

Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe)

EPO-Internal, CHEM ABS Data

C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	WO 2015/111864 A1 (DOOSAN CORP [KR]) 30. Juli 2015 (2015-07-30)	1-5,7-13
A	Zusammenfassung; Ansprüche 1-7 -----	6
A	US 2013/056720 A1 (KIM HYUNG-SUN [KR] ET AL) 7. März 2013 (2013-03-07) Ansprüche 1-20 -----	1-13
	-/--	



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

14. Juni 2017

Absendedatum des internationalen Recherchenberichts

28/06/2017

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

Kleidernigg, Oliver

C. (Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
A	<p>DONG RYUN LEE ET AL: "Design Strategy for 25% External Quantum Efficiency in Green and Blue Thermally Activated Delayed Fluorescent Devices", ADVANCED MATERIALS, Bd. 27, Nr. 39, 26. Oktober 2015 (2015-10-26), Seiten 5861-5867, XP055328577, DE ISSN: 0935-9648, DOI: 10.1002/adma.201502053 Schema 1</p> <p style="text-align: center;">-----</p>	1-13

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2017/057047

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 2015111864 A1	30-07-2015	KR 20150087045 A WO 2015111864 A1	29-07-2015 30-07-2015

US 2013056720 A1	07-03-2013	CN 102971395 A EP 2568030 A2 JP 5938397 B2 JP 2013533604 A KR 20110122051 A US 2013056720 A1 WO 2011139055 A2	13-03-2013 13-03-2013 22-06-2016 22-08-2013 09-11-2011 07-03-2013 10-11-2011
