

(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  
12. Januar 2017 (12.01.2017)



(10) Internationale Veröffentlichungsnummer  
**WO 2017/005698 A1**

(51) Internationale Patentklassifikation:

H01L 51/30 (2006.01) H01L 51/46 (2006.01)  
C07D 209/82 (2006.01) H01L 51/54 (2006.01)

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2016/065723

(22) Internationales Anmeldedatum:  
4. Juli 2016 (04.07.2016)

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:  
15175358.9 3. Juli 2015 (03.07.2015) EP  
15200813.2 17. Dezember 2015 (17.12.2015) EP  
16168821.3 9. Mai 2016 (09.05.2016) EP

(71) Anmelder: CYNORA GMBH [DE/DE]; Werner-von-Siemens-Str. 2 - 6, 76646 Bruchsal (DE).

(72) Erfinder: DANZ, Michael; Nagoldstraße 7g, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen (DE). ZINK, Daniel; Kleinbachstr. 2, 76227 Karlsruhe (DE).

(74) Anwalt: HOPPE, Georg J.; Beuckestr. 20, 14163 Berlin (DE).

(81) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare nationale Schutzrechtsart): AE, AG, AL,

AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

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

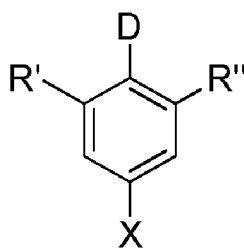
Veröffentlicht:

— mit internationalem Recherchenbericht (Artikel 21 Absatz 3)

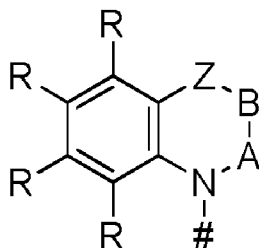
[Fortsetzung auf der nächsten Seite]

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

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



I



I-1

(57) Abstract: The invention relates to an organic molecule having a structure of formula I, where X = CN or CF<sub>3</sub>; D = a chemical unit having a structure of formula I-1: wherein # = the link point of the unit according to formula I-1 to the central phenyl ring in the structure according to formula I; A and B = independently of one another are selected from the group consisting of CRR<sup>1</sup>, CR, NR, N, wherein there is a single or double bond between A and B and there is a single or double bond between B and Z; Z = a direct bond or a divalent organic bridge which is a substituted or unsubstituted C1-C9-alkylene, C2-C8-alkenylene, C2-C8-alkynylene or arylene group or a combination thereof, -CRR<sup>1</sup>, -C=NR, -NR-, -O-, -SiRR<sup>1</sup>-, -S-, -S(O)-, -S(O)<sub>2</sub>-, a substituted or unsubstituted C1-C9-alkylene-, C2-C8-alkenylene-, C2-C8-alkynylene- or arylene group interrupted by O, phenyl- or substituted phenyl units.

(57) Zusammenfassung: Die Erfindung betrifft ein organisches Molekül, aufweisend eine Struktur der Formel I mit X = CN oder CF<sub>3</sub>; D = chemische Einheit aufweisend eine Struktur der Formel I-1: wobei # = Anknüpfungspunkt der Einheit gemäß Formel I-1 an den zentralen Phenylring in der Struktur gemäß Formel I; A und B = unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus CRR<sup>1</sup>, CR, NR, N, wobei zwischen A und B eine Einfach- oder Doppelbindung vorliegt und zwischen B und Z eine Einfach- oder Doppelbindung vorliegt; Z = eine direkte Bindung oder eine divalente organische Brücke, die eine substituierte oder unsubstituierte C1-C9-Alkylen-, C2-C8-Alkenylen-, C2-C8-Alkinylen- oder Arylen-Gruppe oder eine Kombination dieser, -CRR<sup>1</sup>, -C=NR, -NR-, -O-, -SiRR<sup>1</sup>-, -S-, -S(O)-, -S(O)<sub>2</sub>-, durch O unterbrochene

substituierte oder unsubstituierte C1 -C9-Alkylen-, C2-C8-Alkenylen-, C2-C8-Alkinylen- oder Arylen-Gruppe, Phenyl- oder substituierte Phenyleinheiten ist.



WO 2017/005698 A1



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

## Organische Moleküle 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.

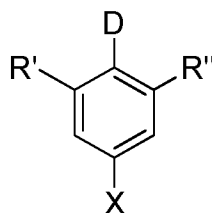
### Hintergrund

Organische optoelektronische Vorrichtungen zeichnen sich dadurch aus, dass entweder elektrische Energie in Photonen umgewandelt werden (Organische Lichtemittierende Dioden, OLED oder Lichtemittierende Elektrochemische Zellen, LEEC) oder der umgekehrte Prozess abläuft (Organische Photovoltaik, OPV). Dabei ist es wichtig, dass diese Prozesse möglichst effizient ablaufen. Für den Bereich von OLEDs müssen daher idealerweise Materialien mit möglichst hoher photolumineszenter Quantenausbeute verwendet werden. Begrenzte Effizienzen von OLED-Materialien können durch Verwendung effizienter Materialien, die thermisch aktivierte verzögerte Fluoreszenz (TADF) zeigen, verbessert werden, da im Gegensatz zu rein fluoreszenten Materialien statt 25 % der in einer OLED gebildeten Exzitonen bis zu 100 % der Exzitonen genutzt werden können. Hierbei können auch die entstandenen Triplett-Exzitonen in Singulett-Exzitonen überführt werden, aus welchem Zustand dann Photonen emittiert werden können. Voraussetzung für eine solche thermische Rückbesetzung ist dabei ein geringer energetischer Abstand zwischen dem niedrigsten angeregten Singulett- ( $S_1$ ) und Triplett-Niveau ( $T_1$ ). Dies kann beispielweise durch Verwendung von Kupfer-(I)-Komplexen (siehe hierzu z. B.: H. Yersin, U. Monkowius, T. Fischer, T. Hofbeck, WO 2010/149748 A1) aber auch durch rein organische Materialien (siehe hierzu z. B.: Q. Zhang *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* 2012, 134, 14706, WO 2013161437 A1) erreicht werden.

Es gibt weiterhin einen großen Bedarf an neuen Materialien gibt, zum Beispiel an tiefblauen TADF-OLEDs. Bestehende blaue TADF-Materialien zeigen oft hohe Exzitonenlebensdauern, welche schlecht für effiziente und langlebige OLEDs sind. Neben den erwähnten Eigenschaften der Materialien ist für eine Kommerzialisierung ebenso die Zugänglichkeit relevant. Dies schließt die Verfügbarkeit von Synthesebausteinen, als auch den Aufwand für die eigentliche Synthese des funktionellen Materials, insbesondere dessen Aufreinigung mit ein.

**Beschreibung**

Die Erfindung stellt eine neue Klasse von Molekülen bereit, die eine Struktur der Formel I aufweisen oder eine Struktur der Formel I haben:

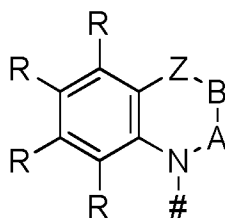


Formel I

mit

X = eine elektronenziehende Einheit, insbesondere CN oder CF<sub>3</sub>;

D = chemische Einheit aufweisend eine Struktur der Formel I-1:



Formel I-1

wobei

# = Anknüpfungspunkt der Einheit gemäß Formel I-1 an den zentralen Phenylring in der Struktur gemäß Formel I;

A und B = unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus CRR<sup>1</sup>, CR, NR, N, wobei zwischen A und B eine Einfach- oder Doppelbindung vorliegt und zwischen B und Z eine Einfach- oder Doppelbindung vorliegt;

Z = eine direkte Bindung oder eine divalente organische Brücke, die eine substituierte oder unsubstituierte C1-C9-Alkylen-, C2-C8-Alkenylen-, C2-C8-Alkinylen- oder Arylen-Gruppe oder eine Kombination dieser, -CRR<sup>1</sup>, -C=CRR<sup>1</sup>, -C=NR, -NR-, -O-, -SiRR<sup>1</sup>-, -S-, -S(O)-, -S(O)<sub>2</sub>-, durch O unterbrochene substituierte oder unsubstituierte C1-C9-Alkylen-, C2-C8-Alkenylen-, C2-C8-Alkinylen- oder Arylen-Gruppe, Phenyl- oder substituierte Phenyleinheiten ist;

wobei jedes R und R<sup>1</sup> bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ist H, Deuterium, Azid (N<sub>3</sub><sup>-</sup>), F, Cl, Br, I, N(R<sup>2</sup>)<sub>2</sub>, CN, CF<sub>3</sub>, NO<sub>2</sub>, OH, COOH, COOR<sup>2</sup>, CO(NR<sup>2</sup>)<sub>2</sub>, Si(R<sup>2</sup>)<sub>3</sub>, B(OR<sup>2</sup>)<sub>2</sub>, C(=O)R<sup>2</sup>, P(=O)(R<sup>2</sup>)<sub>2</sub>, S(=O)R<sup>2</sup>, S(=O)<sub>2</sub>R<sup>2</sup>, OSO<sub>2</sub>R<sup>2</sup>, 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  $R^2$  substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $CH_2$ -Gruppen durch  $R^2C=CR^2$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^2)_2$ ,  $Ge(R^2)_2$ ,  $Sn(R^2)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^2$ ,  $P(=O)(R^2)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^2$ ,  $O$ ,  $S$  oder  $CONR^2$  ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium,  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$ ,  $I$ ,  $CN$ ,  $CF_3$  oder  $NO_2$  ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^2$  substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste  $R^2$  substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste  $R^2$  substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme, oder eine quervernetzbar Einheit  $QE$  ist, die durch säurekatalytische, thermische oder UV-Quervernetzungsverfahren in Anwesenheit oder Abwesenheit eines Photoinitiators oder durch Mikrowellenstrahlung quervernetzt werden kann; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten  $R$  und  $R^1$  auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

$R^2$  bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ist  $H$ , Deuterium,  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$ ,  $I$ ,  $N(R^3)_2$ ,  $CN$ ,  $CF_3$ ,  $NO_2$ ,  $OH$ ,  $COOH$ ,  $COOR^3$ ,  $CO(NR^3)_2$ ,  $Si(R^3)_3$ ,  $B(OR^3)_2$ ,  $C(=O)R^3$ ,  $P(=O)(R^3)_2$ ,  $S(=O)R^3$ ,  $S(=O)_2R^3$ ,  $OSO_2R^3$ , eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^3$  substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $CH_2$ -Gruppen durch  $R^3C=CR^3$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^3)_2$ ,  $Ge(R^3)_2$ ,  $Sn(R^3)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^3$ ,  $P(=O)(R^3)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^3$ ,  $O$ ,  $S$  oder  $CONR^3$  ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium,  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$ ,  $I$ ,  $CN$ ,  $CF_3$  oder  $NO_2$  ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^3$  substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste  $R^3$  substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste  $R^3$  substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten  $R^2$  auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

$R^3$  bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ist  $H$ , Deuterium,  $F$ ,  $CF_3$  oder ein aliphatischer, aromatischer und/oder heteroaromatischer Kohlenwasserstoffrest mit 1 bis 20 C-Atomen, in dem auch ein oder mehrere H-Atome durch  $F$  oder  $CF_3$  ersetzt sein können; dabei können

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

$R'$  = ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H,  $N(R^4)_2$ ,  $OR^4$ , einer linearen Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder einer verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^4$  substituiert sein kann, und einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^4$  substituiert sein kann;

$R''$  = ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus  $N(R^4)_2$ ,  $OR^4$ , einer linearen Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder einer verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^4$  substituiert sein kann, und einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^4$  substituiert sein kann;

$R^4$  bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ist H, Deuterium,  $N(R^5)_2$ ,  $Si(R^5)_3$ , eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^5$  substituiert sein kann, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^5$  substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste  $R^5$  substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste  $R^5$  substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; dabei können zwei oder mehrere dieser Substituenten  $R^5$  auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

$R^5$  bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ist H, Deuterium, oder ein aliphatischer, aromatischer und/oder heteroaromatischer Kohlenwasserstoffrest mit 1 bis 20 C-Atomen; dabei können zwei oder mehrere Substituenten  $R^5$  auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden.

In einer Ausführungsform ist  $R'$  ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H,  $N(R^4)_2$ ,  $OR^4$ , Thiophen, einer linearen Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder einer

verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^4$  substituiert sein kann, und einem aromatischen Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das durch einen oder mehrere Reste  $R^4$  substituiert sein kann, und  $R^4$  ist ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus  $N(R^4)_2$ ,  $OR^4$ , Thiophen, einer linearen Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder einer verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^4$  substituiert sein kann, und einem aromatischen Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das durch einen oder mehrere Reste  $R^4$  substituiert sein kann.

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

Dabei wird unter einer Arylgruppe bzw. Heteroarylgruppe ein einfacher aromatischer Cyclus, also Benzol, bzw. ein einfacher heteroaromatischer Cyclus, beispielsweise Pyridin, Pyrimidin oder Thiophen, oder ein heteroaromatischer Polycyclus, beispielsweise 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,

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

Unter einer cyclischen Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe im Sinne dieser Erfindung wird eine monocyclische, eine bicyclische oder eine polycyclische Gruppe verstanden.

Im Rahmen der vorliegenden Erfindung werden unter einer C<sub>1</sub>- bis C<sub>40</sub>-Alkylgruppe, in der auch einzelne H-Atome oder CH<sub>2</sub>-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 C<sub>1</sub> bis C<sub>40</sub>-Alkoxygruppe werden beispielsweise Methoxy, Trifluormethoxy, Ethoxy, n-Propoxy, i-Propoxy, n-Butoxy, i-Butoxy, s-Butoxy, t-Butoxy oder 2-Methylbutoxy verstanden.

Die chemische Einheit D der erfindungsgemäßen Moleküle weist Donoreigenschaften auf. Was unter Donor- bzw. Akzeptoreigenschaften verstanden wird, ist dem Fachmann prinzipiell bekannt. Die chemische Einheit D ist in einer Ausführungsform elektronenschiebend. Sie weist einen +M-Effekt (positiven mesomeren Effekt) auf. Insbesondere weisen geeignete Donorsubstituenten ein Atom mit einem freien Elektronenpaar auf, wie zum Beispiel ein N-, O- oder S-Atom. Hierbei sind 5-Ring-Heteroarylgruppen mit genau einem Heteroringatom bevorzugt. An diese können auch weitere Arylgruppen ankondensiert sein. Hierbei sind insbesondere Carbazolgruppen bzw. Carbazolderivate bevorzugt. Weitere geeignete Donorsubstituenten sind Phenoxazingruppen bzw. Phenoxazinderivate. Bei Letzteren kann der Sauerstoff des Phenoxazins beispielsweise durch -CRR<sup>1</sup>, -C=CRR<sup>1</sup>, -C=NR, -NR-, -SiRR<sup>1</sup>-

, -S-, -S(O)-, -S(O)<sub>2</sub>-, durch O unterbrochene substituierte oder unsubstituierte C1-C9-Alkylen-, C2-C8-Alkenylen-, C2-C8-Alkinylen- oder Arylen-Gruppe, Phenyl- oder substituierte Phenyleinheiten ersetzt sein.

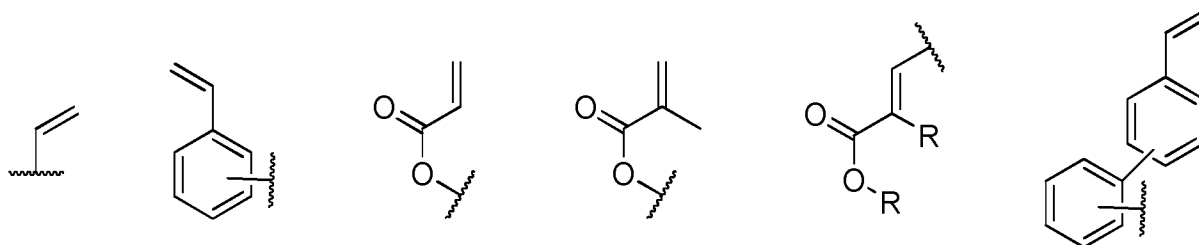
In einer Ausführungsform übt der elektronenziehende Rest X einen -M-Effekt (negativen mesomeren Effekt) oder einen -I-Effekt (negativen induktiven Effekt) aus. Der Rest X ist entsprechend ein Akzeptorsubstituent. Geeignete Akzeptorsubstituenten sind insbesondere Cyanogruppen oder CF<sub>3</sub>.

Die erfindungsgemäßen Moleküle weisen in ortho-Stellung zum Donor am Aromaten einen Substituenten auf. Dies ermöglicht eine effektive Trennung von HOMO und LUMO des organischen Moleküls.

Die erfindungsgemäßen Moleküle zeigen thermisch aktivierte verzögerte Fluoreszenz und emittieren insbesondere im tiefblauen Bereich des sichtbaren Spektrums.

Die Verwendung der erfindungsgemäßen Moleküle in einer optoelektronischen Vorrichtung, beispielsweise einer OLED, führt zu höheren Effizienzen der Vorrichtung. Weiterhin lassen sich OLEDs im tiefblauen Farbspektrum realisieren. Entsprechende OLEDs weisen eine höhere Stabilität als OLEDs mit bekannten Emittermaterialien und vergleichbarer Farbe.

Bei den quervernetzbaaren Einheiten QE handelt es sich in einer Ausführungsform um eine Verbindung ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Oxetanen, Alkinen und Aziden, insbesondere für eine Clickreaktion, sowie folgenden Alkenderivaten:

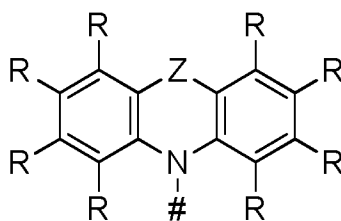


In einer alternativen Ausführungsform handelt es sich bei Z um eine kovalente Einfachbindung oder eine divalente organische Brücke ausgewählt aus substituierten und unsubstituierten Alkylen- (auch verzweigt oder zyklisch), Alkenylen-, Alkinylen-, Arylen- und Heteroarylen-Gruppen, O, NR, C=CR<sub>2</sub>, C=NR, SiR<sub>2</sub>, S, S(O), S(O)<sub>2</sub>, BR, PR, P(O)R, wobei auch Kombinationen dieser Einheiten möglich sind (z.B. durch O unterbrochene Alkylen- (auch verzweigt oder zyklisch), Alkenylen-, Alkinylen-, Arylen- und Heteroarylen-Gruppen).

In einer Ausführungsform ist D unabhängig voneinander jeweils eine Donorgruppe mit elektronenschiebenden Eigenschaften, die ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus

substituierten und unsubstituierten Carbazol, substituierten und unsubstituierten Indol, substituierten und unsubstituierten Indolin, substituierten und unsubstituierten Dihydroacridin, substituierten und unsubstituierten Benzimidazol, substituierten und unsubstituierten 2,3,4,9-Tetrahydrocarbazol, substituierten und unsubstituierten 1,2,3,4-Tetrahydrochinolin, substituierten und unsubstituierten Phenothiazin, substituierten und unsubstituierten Phenoxazin, substituierten und unsubstituierten Dihydrophenazin, substituierten und unsubstituierten Spiroverbindungen.

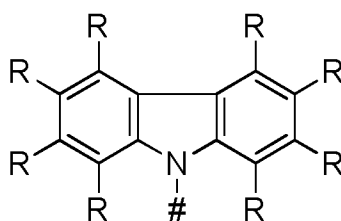
In einer Ausführungsform des organischen Moleküls weist die Donorgruppe mit elektronenschiebenden Eigenschaften der Formel I-1 eine Struktur der Formel II auf:



Formel II

wobei für #, Z und R die oben in Verbindung mit Formel I genannten Definitionen gelten.

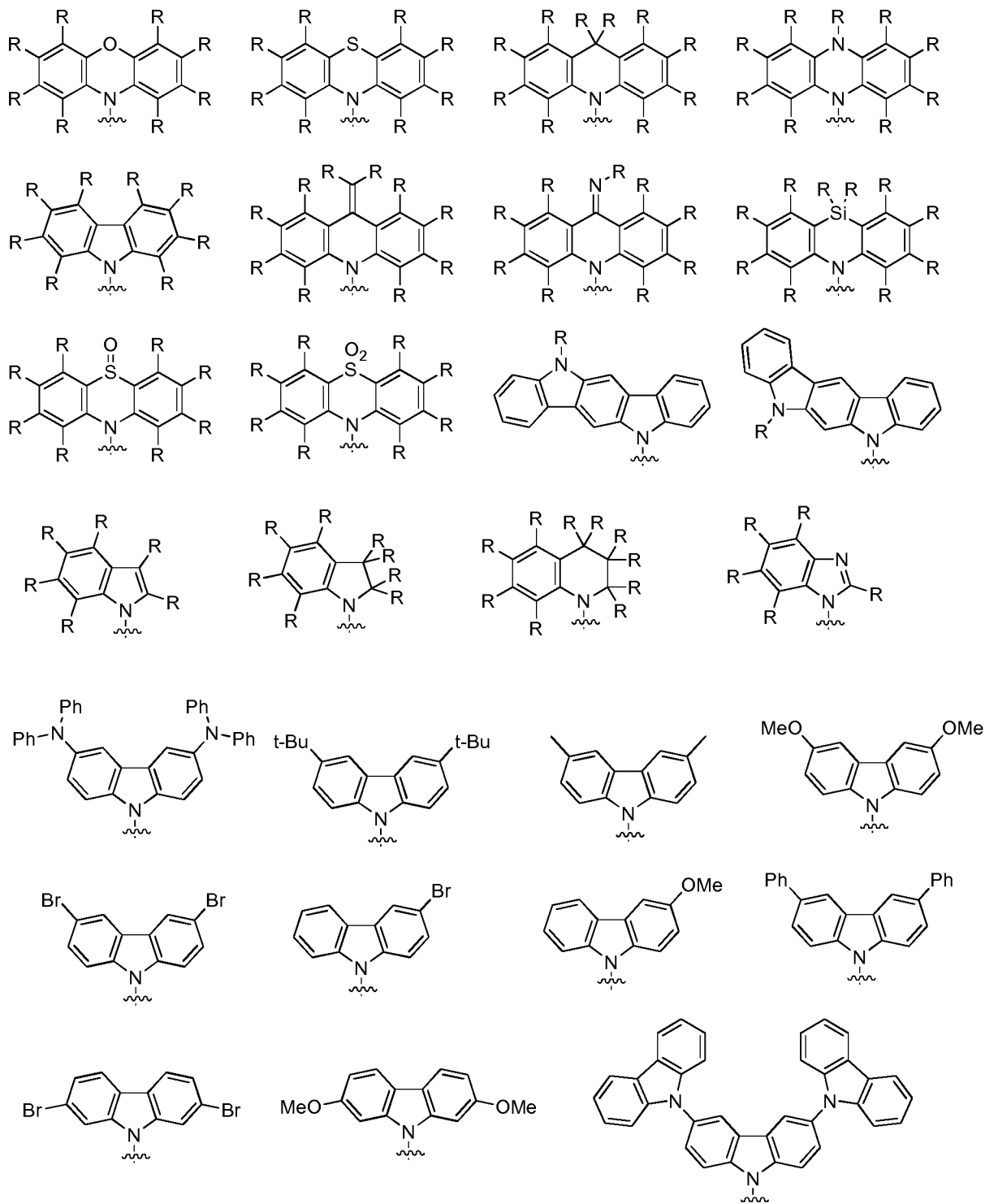
Die Donorgruppe mit elektronenschiebenden Eigenschaften der Formel I-1 kann in einer Ausführungsform eine Struktur der Formel III aufweisen:



Formel III

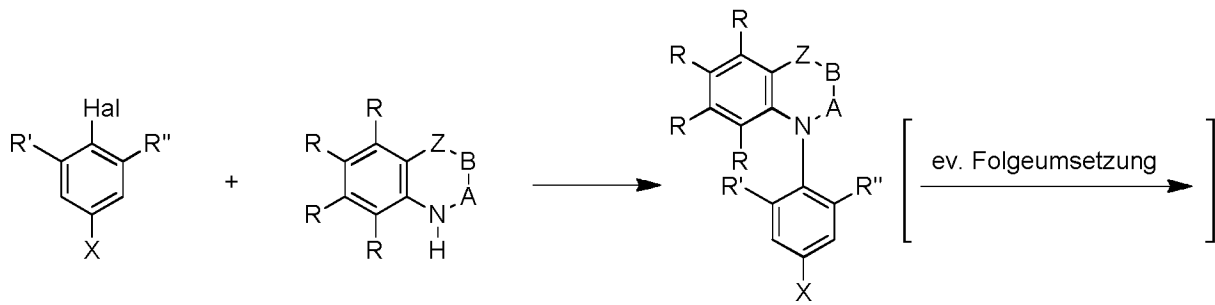
wobei für # und R die oben in Verbindung mit Formel I genannten Definitionen gelten.

Beispiele für erfindungsgemäße Donoren:



Die akzeptierende Einheit X der Formel I ist in einer Ausführungsform gleich CN, in einer weiteren Ausführungsform gleich CF<sub>3</sub>. In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung ist der Rest R' der Formel I ein Wasserstoffatom, also H.

In einem weiteren Aspekt betrifft die Erfindung ein Verfahren zur Herstellung eines erfindungsgemäßen organischen Moleküls der hier beschriebenen Art (mit einer eventuellen Folgeumsetzung).



Hierbei wird ein Stickstoffheterozyklus im Sinne einer nukleophilen aromatischen Substitution mit einem Arylhalogenid, insbesondere einem Arylfluorid 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).

Eine alternative Syntheseroute beinhaltet die Einführung eines Stickstoffheterozyklus über eine Kupfer- oder Palladiumkatalysierte Kupplung mit einem Arylhalogenid oder Arylpseudohalogenid, insbesondere ein Arylbromid, ein Aryliodid, Aryltriflat oder ein Aryltosylat.

Die beschriebenen Herstellungsverfahren können dabei sowohl die letzte synthetische Umsetzung darstellen als auch ein Vorläufermolekül liefern, welches durch Folgeumsetzungen, beispielsweise durch Änderung der Reste R, R' bzw. R'', zum erfindungsgemäßen Molekül umgesetzt werden kann.

Ein weiterer Aspekt der Erfindung betrifft die Verwendung eines organischen Moleküls der hier beschriebenen Art als lumineszierender Emitter oder als Absorber, und/oder als Hostmaterial und/oder als Elektronentransportmaterial, und/oder als Lochinjektionsmaterial, und/oder als Lochblockiermaterial in einer organischen optoelektronischen Vorrichtung.

Im Rahmen einer derartigen Verwendung ist die organische optoelektronische Vorrichtung insbesondere ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus:

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

- Down-Konversions-Elementen.

Bei der Verwendung beträgt der Anteil des organischen Moleküls an der Emissionsschicht in einer organischen optoelektronischen Vorrichtung, insbesondere in OLEDs, 1 % bis 99 %, insbesondere 5 % bis 80 % (Gew%). In einer alternativen Ausführungsform beträgt der Anteil des organischen Moleküls an der Emissionsschicht 100%.

In einer Ausführungsform weist die lichtemittierende Schicht neben dem erfindungsgemäßen organischen Molekül ein Hostmaterial auf, dessen Triplett (T1)- und Singulett (S1)-Energieniveaus energetisch höher liegen als die Triplett (T1)- und Singulett (S1)-Energieniveaus des organischen Moleküls.

In einem weiteren Aspekt betrifft die Erfindung eine organische optoelektronische Vorrichtung, aufweisend ein organisches Molekül der hier beschriebenen Art, 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 derartige organische optoelektronische Vorrichtung weist in einer Ausführungsform auf:

- ein Substrat,
- eine Anode und
- eine Kathode, wobei insbesondere die Anode oder die Kathode unmittelbar auf das Substrat aufgebracht sind, und
- mindestens eine lichtemittierende Schicht, die zwischen Anode und Kathode angeordnet ist und die das erfindungsgemäße organische Molekül aufweist.

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 und im Folgenden 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 invertierten Aufbau auf. Der invertierte Aufbau zeichnet sich dadurch aus, dass sich die Kathode auf dem Substrat befindet und die anderen Schichten entsprechend invertiert aufgebracht werden:

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

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.

In einer Ausführungsform wird bei der invertierten OLED die Anodenschicht des typischen Aufbaus, z.B. eine ITO-Schicht (Indium-Zinn-Oxid), als Kathode geschaltet.

Gemäß einer weiteren Ausführungsform weist das organische Bauelement, insbesondere eine OLED, einen gestapelten Aufbau auf. Hierbei werden die einzelnen OLEDs übereinander und nicht wie üblich nebeneinander angeordnet. Durch einen gestapelten Aufbau kann die Erzeugung von Mischlicht ermöglicht werden. Beispielsweise kann dieser Aufbau bei der Erzeugung von weißem Licht eingesetzt werden, für dessen Erzeugung das gesamte sichtbare Spektrum typischerweise durch die Kombination des emittierten Lichts von blauen, grünen und roten Emittern abgebildet wird. Weiterhin können bei praktisch gleicher Effizienz und identischer Leuchtdichte signifikant längere Lebensdauern im Vergleich zu üblichen OLEDs erzielt werden. Für den gestapelten Aufbau wird optional eine sogenannte Ladungserzeugungsschicht (charge generation layer, CGL) zwischen zwei OLEDs eingesetzt. Diese besteht aus einer n-dotierten und einer p-dotierten Schicht, wobei die n-dotierte Schicht typischerweise näher an der Anode aufgebracht wird.

In einer Ausführungsform - einer sogenannten Tandem-OLED - treten zwei oder mehr Emissionsschichten zwischen Anode und Kathode auf. In einer Ausführungsform sind drei Emissionsschichten übereinander angeordnet, wobei eine Emissionsschicht rotes Licht emittiert, eine Emissionsschicht grünes Licht emittiert und eine Emissionsschicht blaues Licht emittiert und optional weitere Ladungserzeugungs-, Blockier- oder Transportschichten zwischen den einzelnen Emissionsschichten aufgebracht sind. In einer weiteren Ausführungsform werden die jeweiligen Emissionsschichten direkt angrenzend aufgebracht. In einer weiteren Ausführungsform befindet sich jeweils eine Ladungserzeugungsschicht zwischen den Emissionsschichten. Weiterhin können in einer OLED direkt angrenzende und durch Ladungserzeugungsschichten getrennte Emissionsschichten kombiniert werden.

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

Als Trägermaterial der optoelektronischen Vorrichtung kann beispielsweise Glas, Quarz, Kunststoff, Metall, 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), NPNPB (N,N'-Diphenyl-N,N'-di-[4-(N,N-diphenyl-amino)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.

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, NPNPB, MeO-TPD, HAT-CN oder TrisPcz (9,9'-Diphenyl-6-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)-9H,9'H-3,3'-bicarbazol) dienen.

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.

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.

Die Emitter-Schicht EML enthält oder besteht aus Emittermaterial oder einer Mischung aufweisend mindestens zwei Emittermaterialien und optional aus einem oder mehreren Hostmaterialien. Geeignete Hostmaterialien sind beispielsweise mCP, TCTA, 2-TNATA, mCBP, Sif87 (Dibenzo[b,d]thiophen-2-yltriphenylsilan), Sif88 (Dibenzo[b,d]thiophen-2-yl)diphenylsilan), CBP (4,4'-Bis-(N-carbazolyl)-biphenyl) 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.

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.

Die Elektronentransportschicht ETL kann beispielsweise Materialien auf Basis von AlQ<sub>3</sub>, TSPO1, BPyTP2 (2,7-Di(2,2'-bipyridin-5-yl)triphenyl) oder BTB (4,4'-Bis-[2-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazinyl)]-1,1'-biphenyl) aufweisen.

Als Materialien einer dünnen Elektroneninjektionsschicht EIL können beispielsweise CsF, LiF, 8-Hydroxyquinolinolatolithium (Liq), Li<sub>2</sub>O, BaF<sub>2</sub>, 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 eingesetzt, wobei es entweder als Reinschicht oder in Kombination mit einem Matrixmaterial eingesetzt ist.

Der Anteil des erfindungsgemäßen organischen Moleküls an der Emissionsschicht beträgt in einer weiteren Ausführungsform in einer lichtemittierenden Schicht in optischen Licht emittierenden Vorrichtungen, insbesondere in OLEDs, zwischen 5 % und 80 %. In einer Ausführungsform der erfindungsgemäßen organischen optoelektronischen Vorrichtung ist die lichtemittierende Schicht auf ein Substrat aufgebracht, wobei insbesondere 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 elektroneninjizierende Schicht, und die lichtemittierende Schicht zwischen löcher- und elektronentransportierende 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 Hostmaterial aufweist, dessen 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

elektroneninjizierende Schicht aufgebracht ist, und die lichtemittierende Schicht zwischen löcher- und elektronentransportierende Schicht aufgebracht ist.

Erfindungsgemäß ist auch ein lichtemittierendes Material, aufweisend ein erfindungsgemäßes organisches Molekül und ein Hostmaterial, wobei die Triplett (T1)- und Singulett (S1)-Energieniveaus des Hostmaterials energetisch höher liegen als die Triplett (T1)- und Singulett (S1)-Energieniveaus des organischen Moleküls, und wobei das lichtemittierende Material Fluoreszenz oder thermisch aktivierte verzögerte Fluoreszenz emittiert, und einen  $\Delta E(S1-T1)$ -Wert zwischen dem untersten angeregten Singulett (S1)- und dem darunter liegenden Triplett (T1)-Zustand von kleiner als  $3000 \text{ cm}^{-1}$  aufweist.

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 Trägerrassublimation beschichtet wird, und/oder
- aus Lösung oder mit einem Druckverfahren hergestellt wird.

## Beispiele

### **Allgemeine Arbeitsvorschriften: Photophysikalische Messungen**

#### ***Vorbehandlung von optischen Gläsern***

Nach jeder Benutzung wurden die optischen Gläser (Küvetten und Substrate aus Quarzglas, Durchmesser: 1 cm) 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: Lösungen***

1-2 mg der Probe wurden in 100 ml des jeweiligen Lösemittels gelöst, Konzentration  $10^{-5}$  mol/L. Die Küvette wurde luftdicht verschlossen und 10 min. entgast.

#### ***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 (Umdrehungen pro Minute/Sekunde). 3) 10 s bei 4000 U/min bei 1000 Upm/s. Die Filme wurden nach dem Beschichten für 1 min bei 70 °C an Luft auf einer Präzisionsheizplatte von LHG getrocknet.

#### ***Absorptionsspektroskopie***

##### Lösungen:

UV-VIS-Spektren wurden auf einem Gerät der Thermo Scientific, Modell Evolution 201 aufgenommen. (Siehe Probenvorbereitung: Lösungen)

#### ***Photolumineszenzspektroskopie und TCSPC***

Steady-state Emissionsspektroskopie wurde mit einem Fluoreszenzspektrometer der Firma 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 TCSPC-Option. Emissions- und Anregungsspektren wurden korrigiert durch Standardkorrekturkurven.

#### ***Quanteneffizienzbestimmung***

Die Messung der Photolumineszenzquantenausbeute erfolgte mittels eines *Absolute PL Quantum Yield Measurement C9920-03G*-Systems der Firma *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  $\Phi$  in % und die CIE-Farbkoordinaten als x,y-Werte angegeben.

PLQY wurde für Polymerfilme, Lösungen und Pulverproben nach folgendem Protokoll bestimmt:

Als Referenzmaterial dient Anthracene in Ethanol mit bekannter Konzentration. Es wurde zuerst das Absorptionsmaximum der Probe bestimmt und mit diesem angeregt. Anschließend wurde von entgasten Lösungen und Filmen unter Stickstoff-Atmosphäre die absolute Quantenausbeute bestimmt.

Die Berechnung erfolgte systemintern nach folgender Gleichung:

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

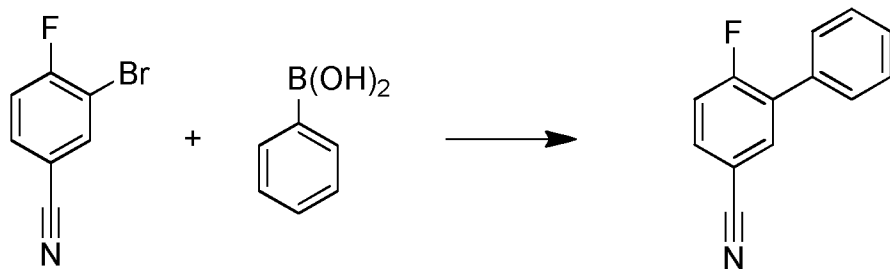
mit der Photonenzahl  $n_{\text{photon}}$  und der Intensität  $Int$ .

### Berechnungen nach der Dichtefunktionaltheorie

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

**Beispiel 1**

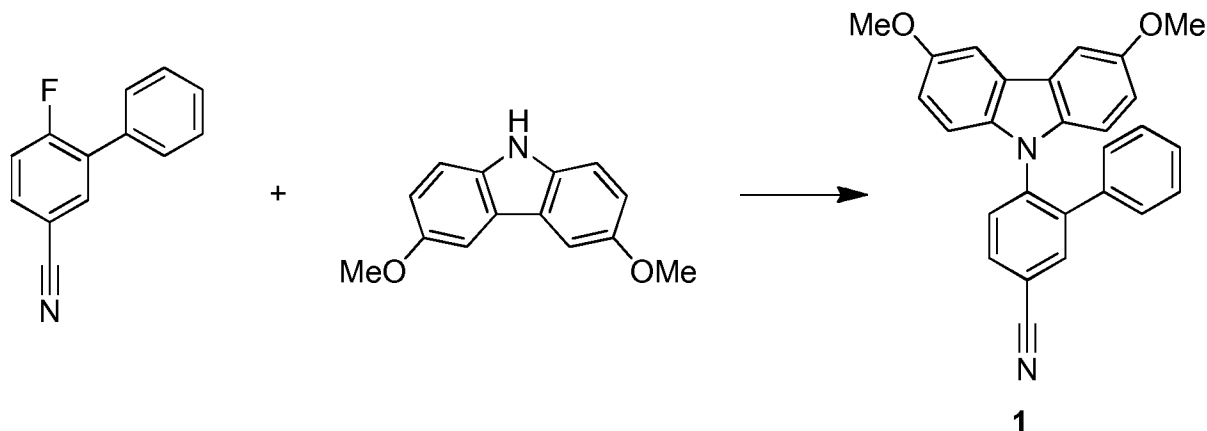
Synthese (Stufe 1):



3-Brom-4-fluorbenzonitril (125 mmol), Phenylboronsäure (188 mmol), Palladiumacetat (2.5 mmol), 2-Dicyclohexylphosphino-2',6'-dimethoxy-1,1'biphenyl (SPhos; 5 mmol) und tribasisches Kaliumphosphat (250 mmol) werden unter Stickstoff in 200 mL Toluol suspendiert. Nach Zugabe von 10 mL entgastem Wasser wird die Reaktionsmischung 20 min mit Stickstoff gespült. Nach Rühren für 18 h bei 110 °C und abkühlen auf Raumtemperatur wird die Reaktionslösung filtriert und der Feststoff mit Essigsäureethylester gewaschen. Das Filtrat wird über MgSO<sub>4</sub> getrocknet. Nach Entfernen des Lösungsmittels wird das Rohprodukt aus n-Hexan umkristallisiert. 3-Phenyl-4-fluorobenzonitril (15,9 g, 80,6 mmol, 64 %) wird als weißer Feststoff erhalten.

<sup>1</sup>H NMR (500 MHz, Chloroform-*d*) δ 7.77 (dd, *J* = 7.1, 2.2 Hz, 1H), 7.64 (ddd, *J* = 8.5, 4.5, 2.2 Hz, 1H), 7.54 – 7.42 (m, 5H), 7.27 (dd, *J* = 9.9, 8.5 Hz, 1H).

Stufe 2:



3-Phenyl-4-fluorobenzonitril (65,9 mmol), 3,6-Dimethoxycarbazol (65,9 mmol) und tribasisches Kaliumphosphat (132 mmol) werden unter Stickstoff in DMSO (120 mL) suspendiert und bei 110 °C gerührt (16 h). Anschließend wird die Reaktionsmischung in 700 mL Wasser gegeben und 1 h gerührt. Der Feststoff wird abfiltriert und mit Wasser (1 L) gewaschen. Anschließend wird der Feststoff im Vakuum bei 50 °C getrocknet. Das Rohprodukt wird durch Umkristallisation aus Toluol gereinigt. Das Produkt **1** (23,1 g, 57,1 mmol, 87 %) wird als weißer Feststoff erhalten.

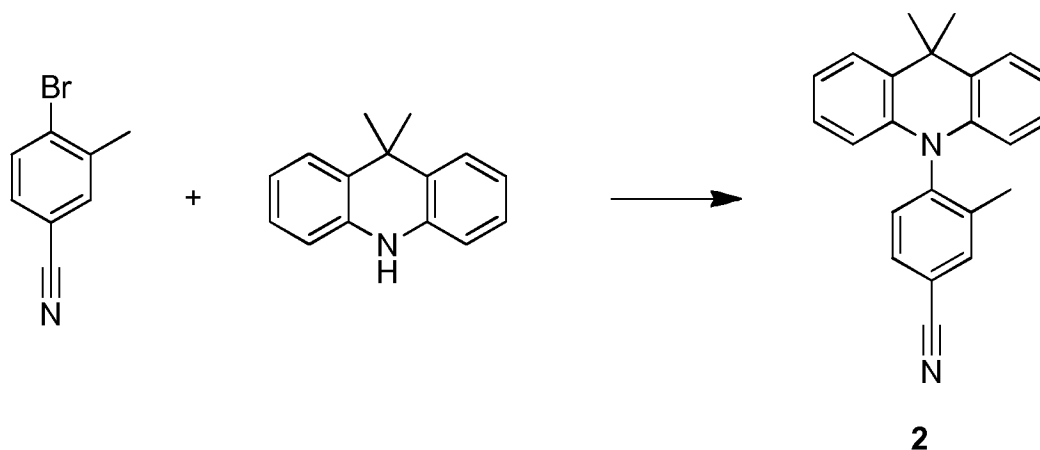
$^1\text{H}$  NMR (500 MHz, Chloroform-*d*)  $\delta$  7.95 (d,  $J = 1.9$  Hz, 1H), 7.80 (dd,  $J = 8.2, 2.0$  Hz, 1H), 7.64 (d,  $J = 8.1$  Hz, 1H), 7.45 (d,  $J = 2.4$  Hz, 2H), 7.10 – 7.02 (m, 3H), 7.02 – 6.98 (m, 2H), 6.92 (dd,  $J = 8.9, 0.7$  Hz, 2H), 6.89 (dd,  $J = 8.9, 2.3$  Hz, 2H), 3.90 (s, 6H).

Das Absorptionsspektrum von **1** als Lösung in 2-Methyltetrahydrofuran ist in Figur 1 gezeigt. Die Filmemission von **1** (10 % in PMMA) ist Figur 2 zu entnehmen. Das Emissionsmaximum liegt bei 443 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 56%.

Die Dichtefunktionaltheorie-Rechnungen ergeben eine Singulett(S1)-Energie von 2,86 eV und eine Triplett(T1)-Energie von 2,59 eV.

Die berechneten Grenzorbitale des Grundzustands von **1** sind in Figur 3 gezeigt.

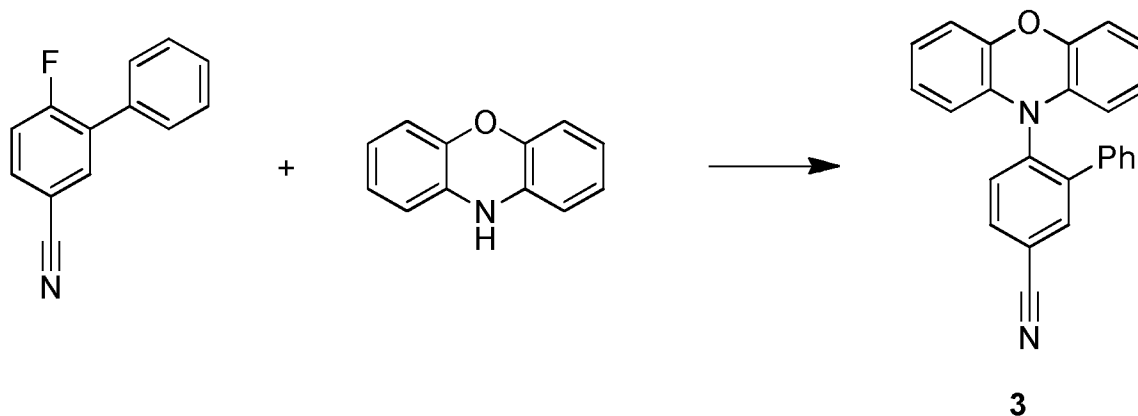
## Beispiel 2



9,10-Dihydro-9,9-dimethylacridin (10 mmol), 4-Brom-3-methylbenzonitril (15 mmol) und Palladiumacetat (0.5 mmol) werden unter Stickstoff in 50 mL Toluol suspendiert. Nachdem 30 min Stickstoff durch die Reaktionsmischung geleitet wurde werden Tri-*tert.*-butylphosphin (0.75 mmol) und Natrium-*tert.*-butylat (15 mmol) zugegeben und 2,5 h unter Rühren refluxiert. Nachdem im Anschluss 16 h bei RT gerührt wurde, werden 50 mL Wasser zugegeben und zweimal mit je 50 mL Essigsäureethylester extrahiert, Die vereinigten organischen Phasen werden mit gesättigter NaCl-Lösung gewaschen und über  $\text{MgSO}_4$  getrocknet. Nach Entfernen des Lösungsmittels wird der Rückstand aus Ethanol umkristallisiert. Es werden 1,6 g (4,9 mmol, 49%) des Produktes **2** erhalten.

$^1\text{H}$  NMR (500 MHz, Chloroform-*d*)  $\delta$  7.81 (d,  $J = 1.9$  Hz, 1H), 7.75 (dd,  $J = 8.1, 1.9$  Hz, 1H), 7.53 – 7.46 (m, 2H), 7.38 (d,  $J = 8.0$  Hz, 1H), 7.04 – 6.91 (m, 4H), 6.07 – 5.97 (m, 2H), 2.14 (s, 3H), 1.74 (s, 3H), 1.68 (s, 3H).

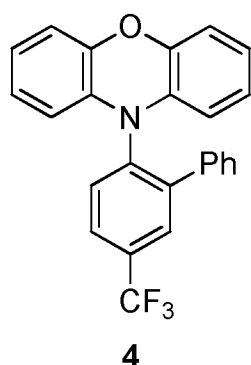
Das Absorptionsspektrum von **2** als Lösung in 2-Methyltetrahydrofuran ist in Figur 4 gezeigt. Die Filmemission von **2** (10 % in PMMA) ist Figur 5 zu entnehmen. Das Emissionsmaximum liegt bei 441 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 55%.

**Beispiel 3**

3-Phenyl-4-fluorobenzonitril (10 mmol), 2,3:5,6-Dibenzo-1,4-oxazin (10 mmol) und tribasisches Kaliumphosphat (20 mmol) werden unter Stickstoff in DMSO (20 mL) suspendiert und bei 125 °C gerührt (14 h). Anschließend wird die Reaktionsmischung in 400 mL ges. Natriumchlorid-Lösung gegeben und mit Dichlormethan (3 x 150 mL) extrahiert. Die vereinigten organischen Phasen werden mit ges. Natriumchlorid-Lösung gewaschen (2 x 150 mL), getrocknet über Magnesiumsulfat und das Lösemittel anschließend entfernt. Das Rohprodukt wurde schließlich durch Umkristallisation aus Toluol gereinigt. Das Produkt **3** wurde als gelber Feststoff erhalten.

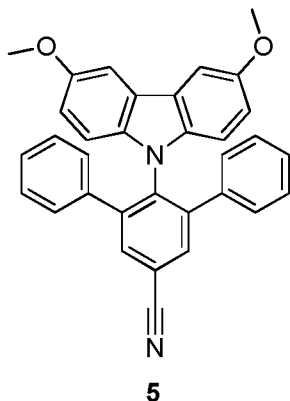
$^1\text{H NMR}$  (500 MHz, Chloroform-*d*)  $\delta$  7.91 (d,  $J = 1.9$  Hz, 1H), 7.85 (dd,  $J = 8.1, 2.0$  Hz, 1H), 7.57 (d,  $J = 8.1$  Hz, 1H), 7.35-7.2.9 (m, 5H), 6.65 – 6.59 (m, 4H), 6.59-6.54 (m, 2H), 5.90 – 5.83 (m, 2H).

Die Filmemission von **3** (10 % in PMMA) ist Figur 6 zu entnehmen. Das Emissionsmaximum liegt bei 494 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 65%.

**Beispiel 4**

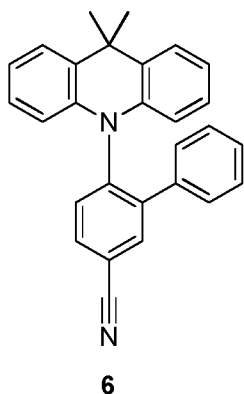
$^1\text{H NMR}$  (500 MHz, Chloroform-*d*)  $\delta$  7.88 (s, 1H), 7.83 (d,  $J = 7.6$  Hz, 1H), 7.57 (d,  $J = 8.2$  Hz, 1H), 7.39 – 7.27 (m, 5H), 6.69 – 6.51 (m, 6H), 5.89 (d,  $J = 7.6$  Hz, 2H).

Die Filmemission von **4** (10 % in PMMA) ist Figur 7 zu entnehmen. Das Emissionsmaximum liegt bei 466 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 31%. Die Emissionslebensdauer beträgt 51  $\mu\text{s}$ .

**Beispiel 5**

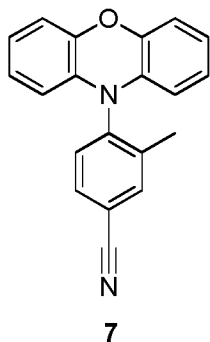
$^1\text{H}$  NMR (500 MHz, Chloroform-*d*)  $\delta$  7.87 (s, 2H), 7.30 (d,  $J$  = 2.4 Hz, 2H), 7.05 – 7.00 (m, 2H), 6.99 – 6.94 (m, 4H), 6.94 – 6.89 (m, 4H), 6.77 (dd,  $J$  = 8.8, 2.4 Hz, 2H), 6.72 (d,  $J$  = 8.8 Hz, 2H), 3.84 (s, 6H).

Die Filmemission von **5** (10 % in PMMA) ist Figur 8 zu entnehmen. Das Emissionsmaximum liegt bei 449 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 65 %.

**Beispiel 6**

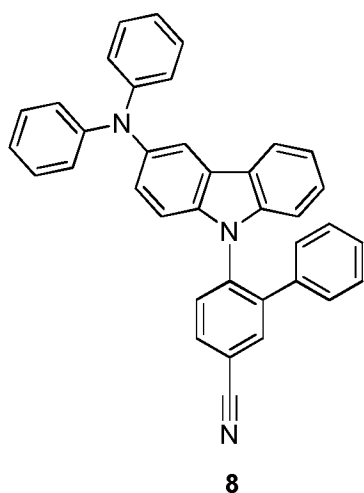
$^1\text{H}$  NMR (500 MHz, Chloroform-*d*)  $\delta$  = 7.93 (d, 1H), 7.90 (dd, 1H), 7.48 (d, 1H), 7.38 (dd, 2H), 7.21 – 7.13 (m, 5H), 6.97 (dt, 2H), 6.91 (dt, 2H), 6.15 (dd, 2H), 1.80 (s, 3H), 1.04 (s, 3H) ppm.

Die Filmemission von **6** (10 % in PMMA) ist Figur 9 zu entnehmen. Das Emissionsmaximum liegt bei 456 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 60 %.

**Beispiel 7**

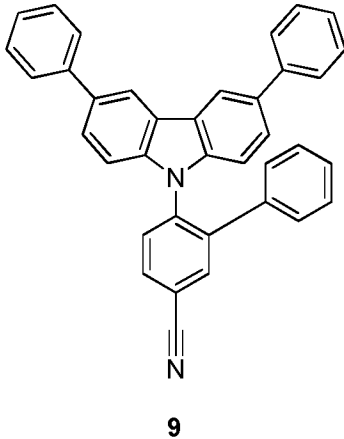
$^1\text{H}$  NMR (500 MHz, Chloroform-*d*)  $\delta$  7.77 (d,  $J$  = 1.8 Hz, 1H), 7.72 (dd,  $J$  = 8.0, 1.9 Hz, 1H), 7.43 (d,  $J$  = 8.0 Hz, 1H), 6.76 – 6.65 (m, 4H), 6.60 (td,  $J$  = 7.6, 1.7 Hz, 2H), 5.71 (dd,  $J$  = 7.9, 1.4 Hz, 2H), 2.29 (s, 3H).

Die Filmemission von **7** (10 % in PMMA) ist Figur 10 zu entnehmen. Das Emissionsmaximum liegt bei 477 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 71%.

**Beispiel 8**

$^1\text{H}$  NMR (500 MHz, Chloroform-*d*)  $\delta$  = 7.98 (d, 1H), 7.89 (d, 1H), 7.85 (dd, 1H), 7.77 (d, 1H), 7.72 (d, 1H), 7.31 – 7.27 (m, 1H), 7.23 – 7.16 (m, 5H), 7.14 – 7.11 (m, 1H), 7.08 – 7.01 (8H), 6.98 – 6.94 (m, 4H), 6.88 (d, 1H) ppm.

Die Filmemission von **8** (10 % in PMMA) ist Figur 11 zu entnehmen. Das Emissionsmaximum liegt bei 462 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 40%.

**Beispiel 9**

$^1\text{H}$  NMR (500 MHz, Chloroform-*d*)  $\delta$  = 8.30 (d, 2H), 8.02 (d, 1H), 7.87 (d, 1H), 7.72 (d, 1H), 7.68 (dd, 4H), 7.55 (dd, 2H), 7.47 (t, 4H), 7.35 (t, 2H), 7.11 – 7.04 (m, 7H) ppm.

Die Filmemission von **9** (10 % in PMMA) ist Figur 12 zu entnehmen. Das Emissionsmaximum liegt bei 404 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 28 %.

**Beispiel 10 - OLED-Bauteil A**

Molekül **1** wurde in einem OLED-Bauteil mit folgendem Aufbau getestet: ITO/m-MTDATA/HAT-CN/tris-Pcz/ **1**:DPEPO (20%)/TSPO1/BPyTP2/Liq/Al

Tabelle 1: Bauteildaten für das Bauteil A.

Leistungseffizienz	7,5 lm/W
Stromeffizienz	9,7 cd/A
CIE	CIE <sub>x</sub> : 0,16 CIE <sub>y</sub> : 0,176 @ 13 V
Externe Quantenausbeute (EQE)	6,8%

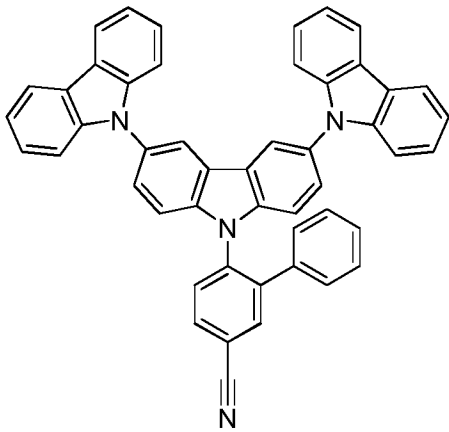
Die Stromdichte und Leuchtdichte über der Spannung sind in Figur 13 dargestellt. Die Leistungseffizienz und Stromeffizienz über der Spannung sind in Figur 14 dargestellt. Die externe Quanteneffizienz über der Stromdichte ist in Figur 15 dargestellt. Das Elektrolumineszenzspektrum betrieben bei 10 V der OLED ist in Figur 16 dargestellt.

**Beispiel 11 - OLED-Bauteil B**

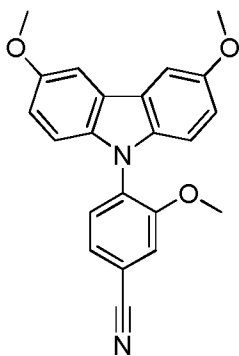
Molekül **1** wurde in einem OLED-Bauteil mit folgendem Aufbau getestet: ITO/m-MTDATA/ $\alpha$ -NPD/TCTA/CzSi/**1**(10%):DPEPO/DPEPO/TPBi/Liq/Al

Tabelle 2: Bauteildaten für das Bauteil B.

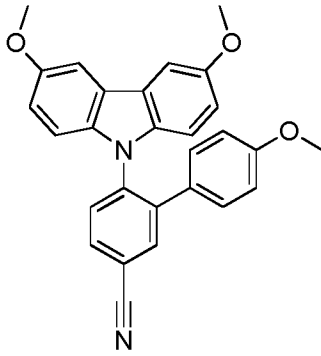
Leistungseffizienz	7,7 lm/W
Stromeffizienz	13,8 cd/A
CIE	CIE <sub>x</sub> : 0,16 CIE <sub>y</sub> : 0,17 @ 14 V
Externe Quantenausbeute (EQE)	10,1%

**Beispiel 12****19**

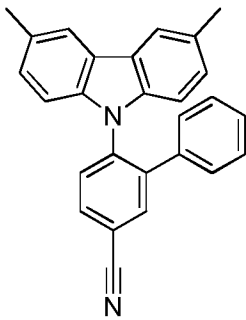
Die Filmemission von **19** (10 % in PMMA) wurde gemessen. Das Emissionsmaximum liegt bei 407 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 30 %.

**Beispiel 13****20**

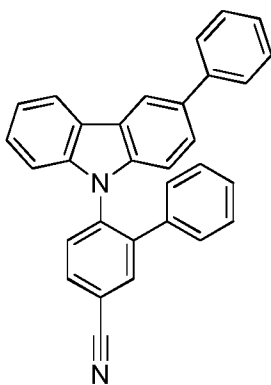
Die Filmemission von **20** (10 % in PMMA) wurde gemessen. Das Emissionsmaximum liegt bei 440 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 50 %.

**Beispiel 14****21**

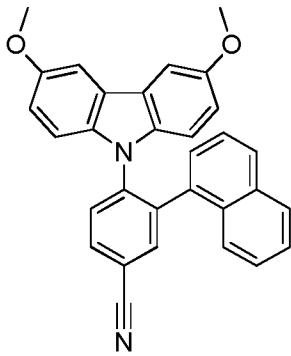
Die Filmemission von **20** (10 % in PMMA) wurde gemessen. Das Emissionsmaximum liegt bei 442 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 52 %.

**Beispiel 15****22**

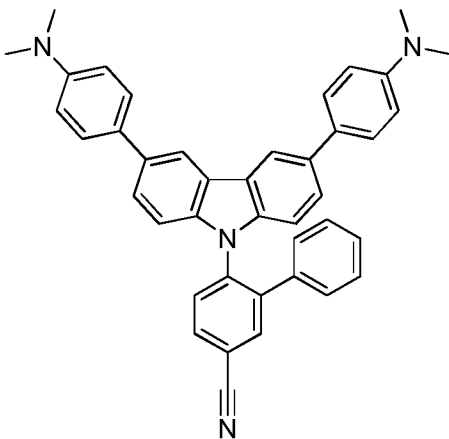
Die Filmemission von **22** (10 % in PMMA) wurde gemessen. Das Emissionsmaximum liegt bei 408 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 41 %.

**Beispiel 16****23**

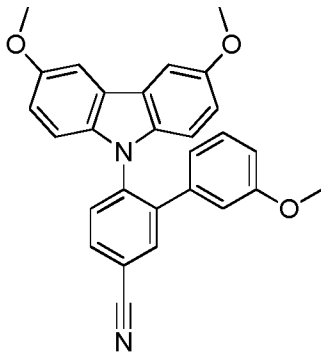
Die Filmemission von **23** (10 % in PMMA) wurde gemessen. Das Emissionsmaximum liegt bei 399 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 31 %.

**Beispiel 17****24**

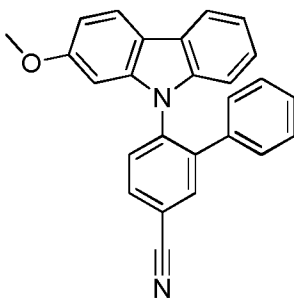
Die Filmemission von **24** (10 % in PMMA) wurde gemessen. Das Emissionsmaximum liegt bei 441 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 32 %.

**Beispiel 18****25**

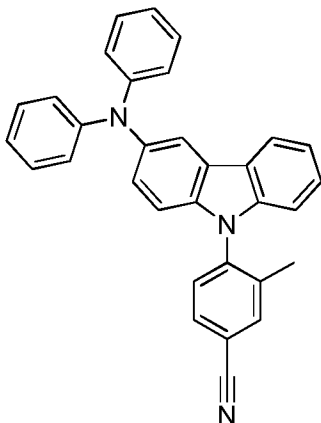
Die Filmemission von **25** (10 % in PMMA) ist Figur F9 zu entnehmen. Das Emissionsmaximum liegt bei 474 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 52 %.

**Beispiel 19****26**

Die Filmemission von **26** (10 % in PMMA) wurde gemessen. Das Emissionsmaximum liegt bei 448 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 53 %.

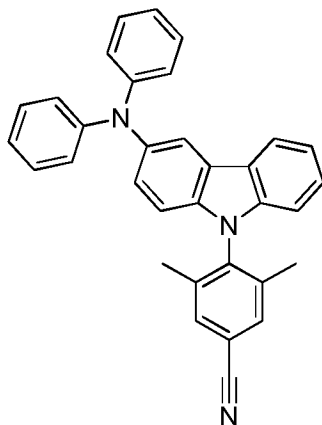
**Beispiel 20****27**

Die Filmemission von **27** (10 % in PMMA) wurde gemessen. Das Emissionsmaximum liegt bei 392 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 30 %.

**Beispiel 21****28**

Die Filmemission von **28** (10 % in PMMA) wurde gemessen. Das Emissionsmaximum liegt bei 425 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 16 %.

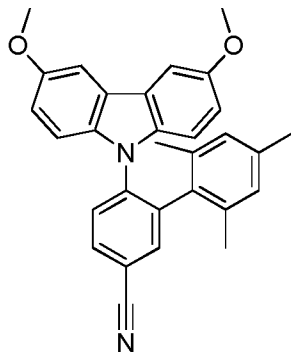
### Beispiel 22



**29**

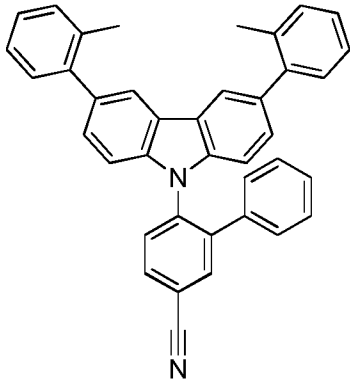
Die Filmemission von **29** (10 % in PMMA) wurde gemessen. Das Emissionsmaximum liegt bei 416 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 13 %.

### Beispiel 23

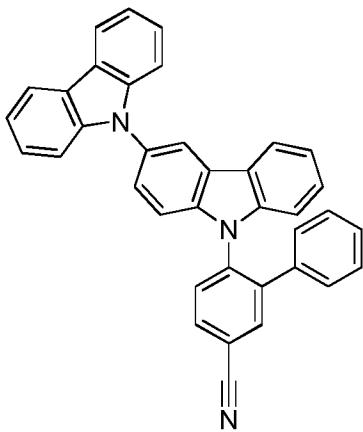


**30**

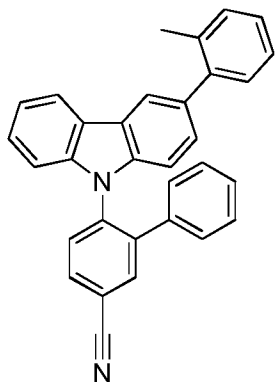
Die Filmemission von **30** (10 % in PMMA) wurde gemessen. Das Emissionsmaximum liegt bei 433 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 34 %.

**Beispiel 24****31**

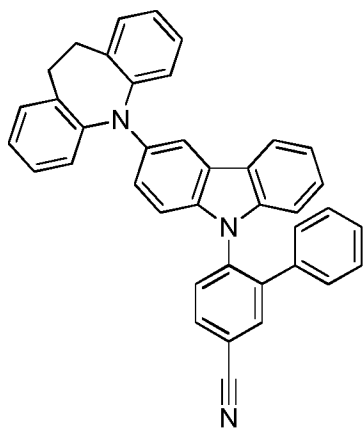
Die Filmemission von **31** (10 % in PMMA) wurde gemessen. Das Emissionsmaximum liegt bei 397 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 33 %.

**Beispiel 25****32**

Die Filmemission von **32** (10 % in PMMA) wurde gemessen. Das Emissionsmaximum liegt bei 405 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 37 %.

**Beispiel 26****33**

Die Filmemission von **33** (10 % in PMMA) wurde gemessen. Das Emissionsmaximum liegt bei 394 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 37 %.

**Beispiel 27****34**

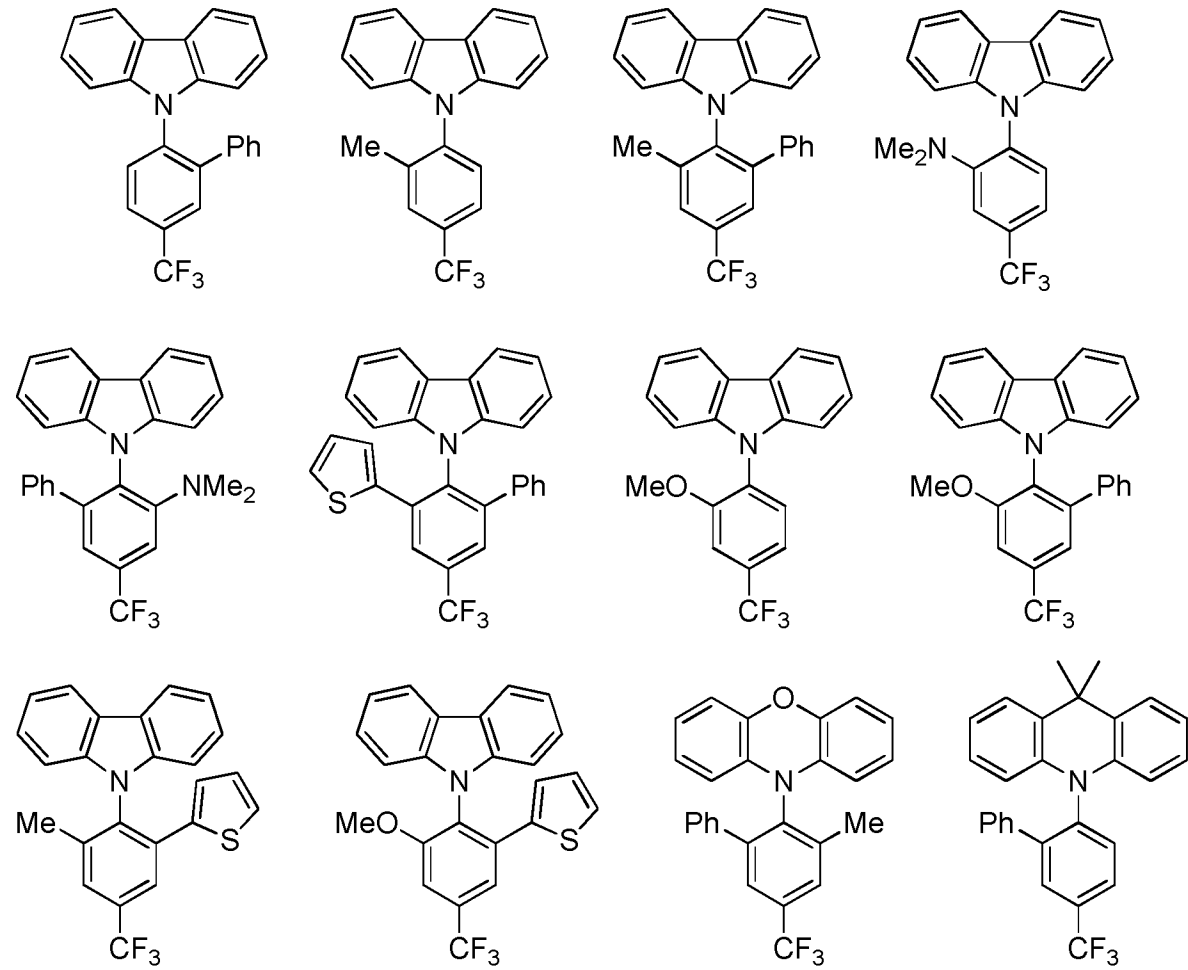
Die Filmemission von **34** (10 % in PMMA) wurde gemessen. Das Emissionsmaximum liegt bei 477 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 33 % und die Halbwertsbreite beträgt 99 nm.

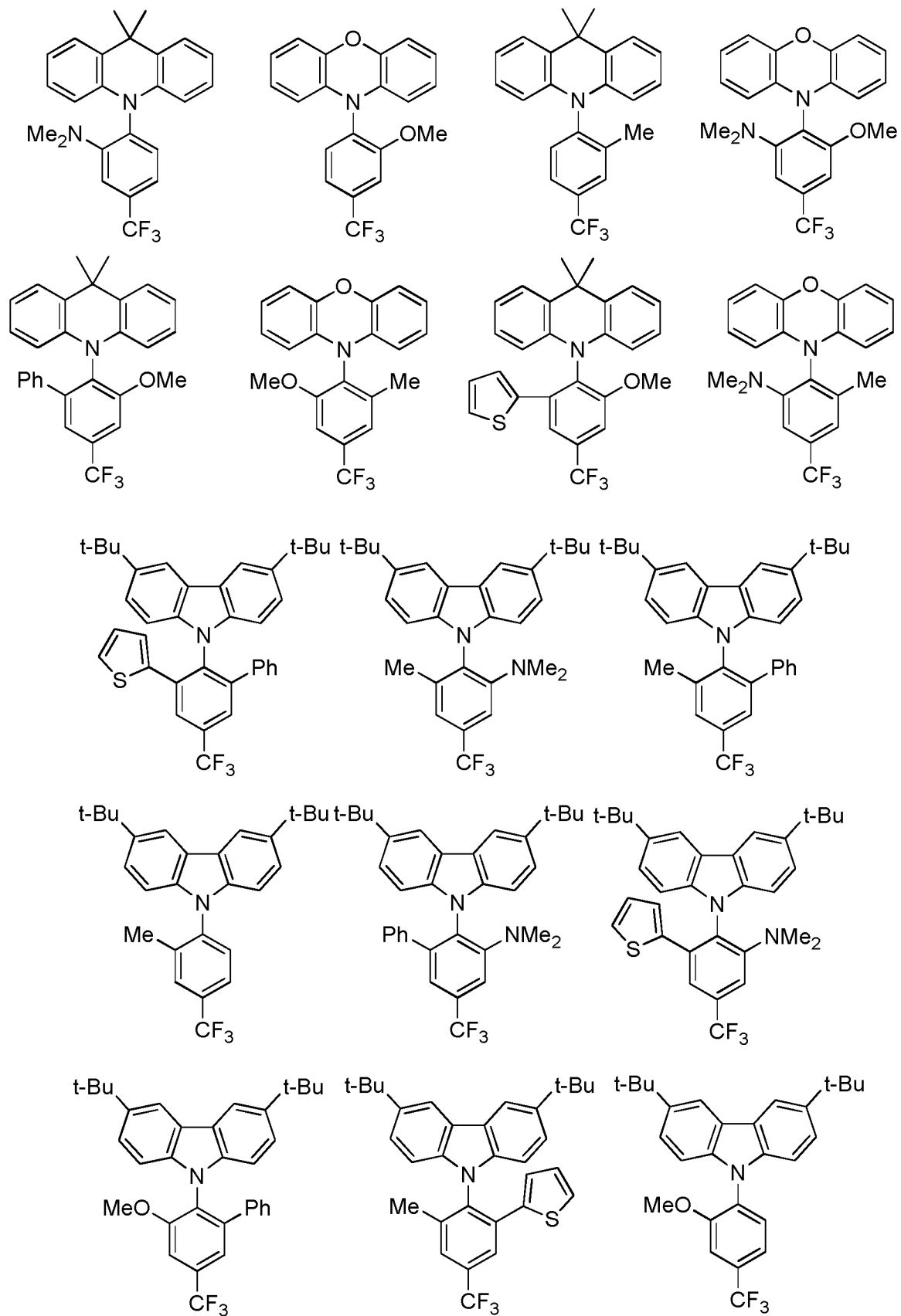
Molekül **5** wurde in einem OLED-Bauteil („Bauteil X2) mit folgendem Aufbau getestet (Anteil des erfindungsgemäßen Moleküls an der Emissionsschicht ist in Massenprozent angegeben):

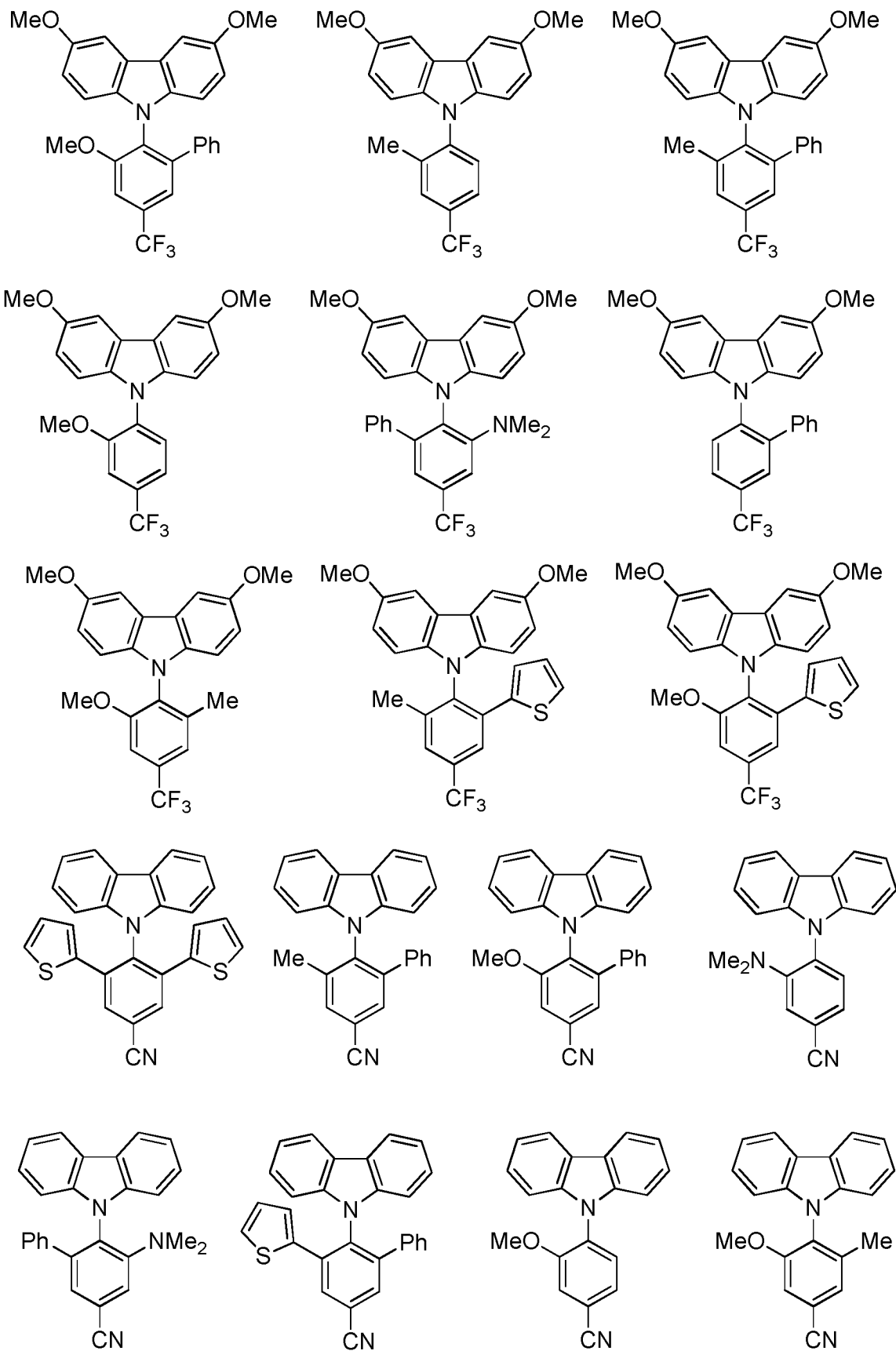
Schicht	Dicke	
10	100 nm	Al
9	2 nm	Liq
8	30 nm	TPBi
7	10 nm	DPEPO
6	20 nm	<b>5</b> (20%):DPEPO
5	10 nm	CzSi
4	20 nm	TCTA
3	70 nm	NPB
2	20 nm	m-MTDATA
1	120 nm	ITO

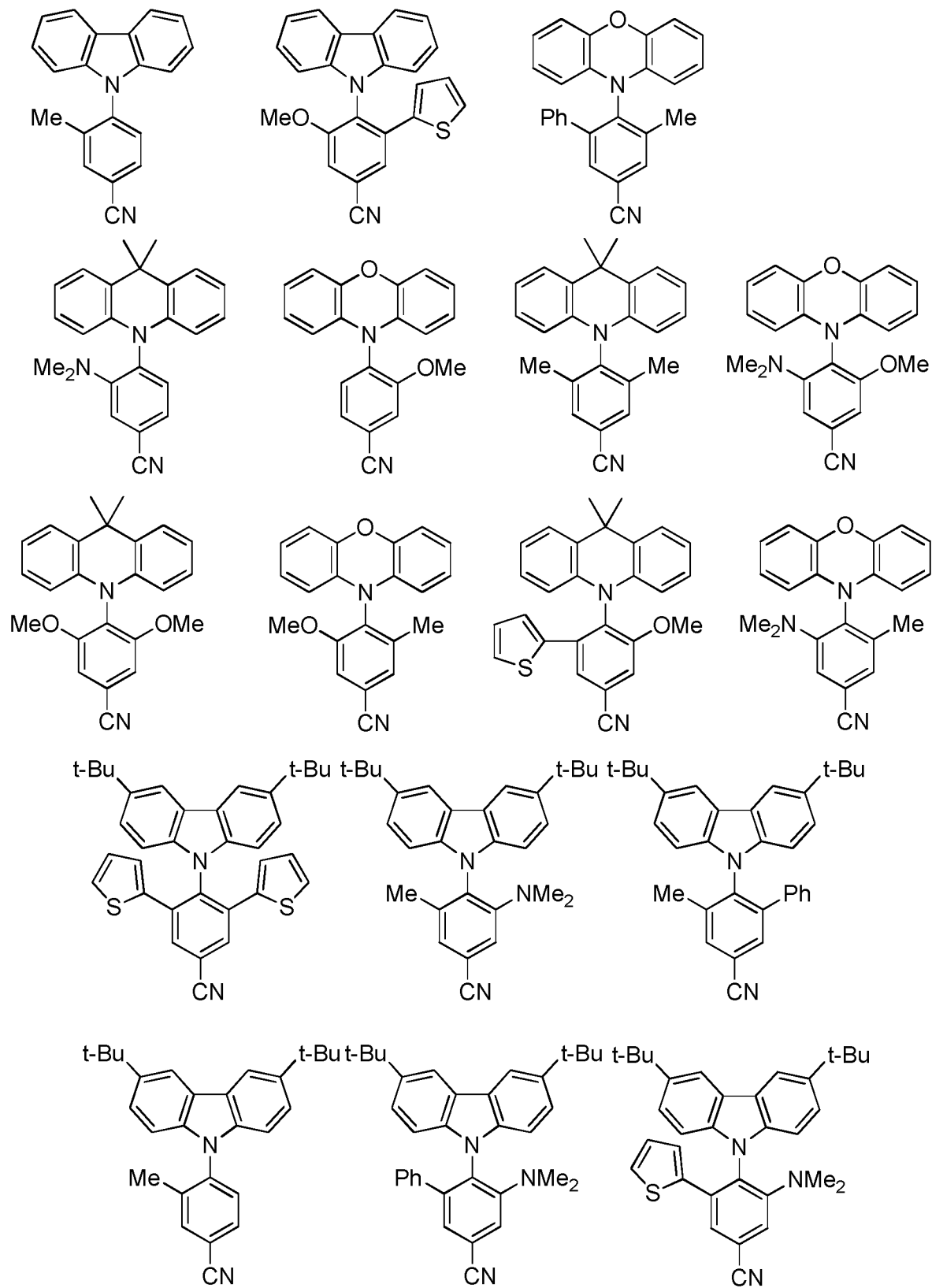
Leistungseffizienz:	12,9 lm/W
Stromeffizienz:	27,5 cd/A
CIE:	CIEx: 0,165 CIEy: 0,169 at 14 V
Maximale externe Quantenausbeute (EQE):	20,3%

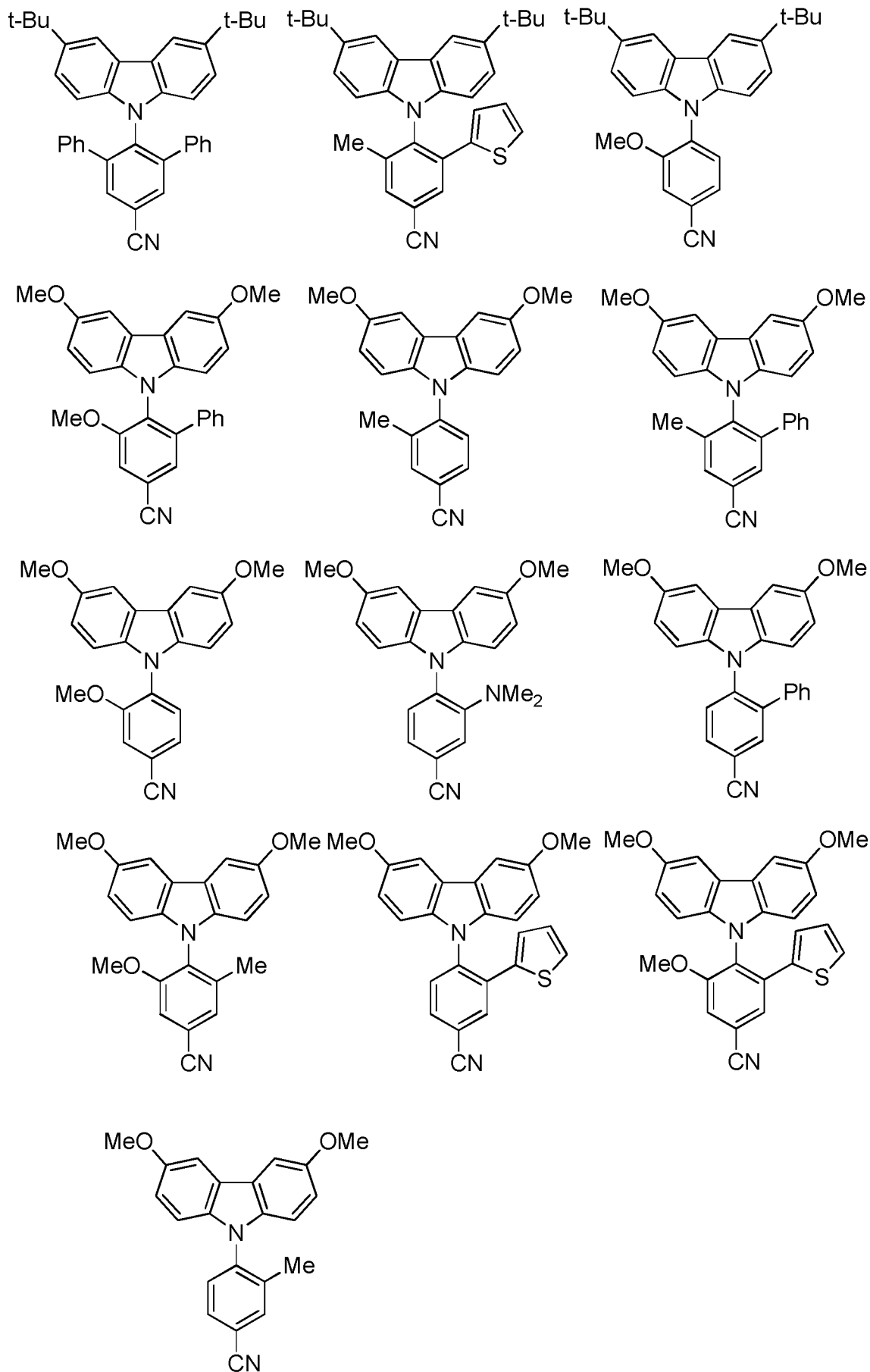
Weitere Beispiele organischer Moleküle mit einer Struktur gemäß Formel I:

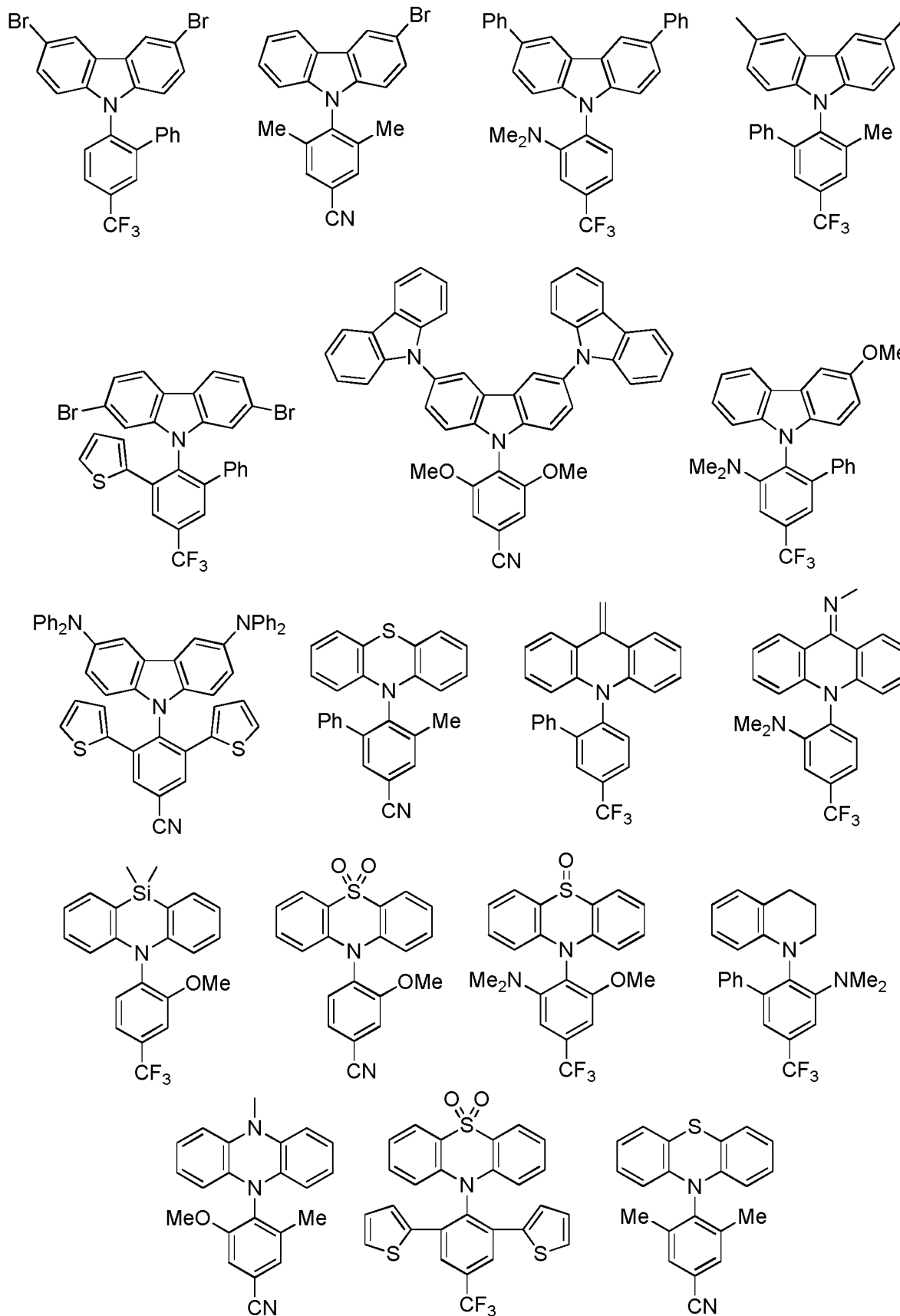










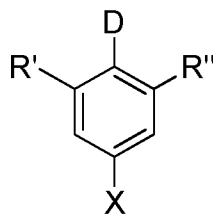


**Figuren**

- Figur 1: Absorptionsspektrum von **1** als Lösung in 2-Methyltetrahydrofuran.
- Figur 2: Filmemission von **1** (10 % in PMMA).
- Figur 3: Berechnete Grenzorbitale des Grundzustands von **1**.
- Figur 4: Absorptionsspektrum von **2** als Lösung in 2-Methyltetrahydrofuran.
- Figur 5: Filmemission von **2** (10 % in PMMA).
- Figur 6: Filmemission von **3** (10 % in PMMA).
- Figur 7: Filmemission von **4** (10 % in PMMA).
- Figur 8: Filmemission von **5** (10 % in PMMA).
- Figur 9: Filmemission von **6** (10 % in PMMA).
- Figur 10: Filmemission von **7** (10 % in PMMA).
- Figur 11: Filmemission von **8** (10 % in PMMA).
- Figur 12: Filmemission von **9** (10 % in PMMA).
- Figur 13: Stromdichte und Leuchtdichte des OLED-Bauteils ITO/m-MTDATA/HAT-CN/tris-Pcz/ **1**:DPEPO (20 %)/TSP01/BPyTP2/Liq/Al.
- Figur 14: Leistungseffizienz und Stromeffizienz über der Spannung des OLED-Bauteils ITO/m-MTDATA/HAT-CN/tris-Pcz/ **1**:DPEPO (20 %)/TSP01/BPyTP2/Liq/Al.
- Figur 15: Externe Quanteneffizienz über der Stromdichte des OLED-Bauteils ITO/m-MTDATA/HAT-CN/tris-Pcz/ **1**:DPEPO (20 %)/TSP01/BPyTP2/Liq/Al.
- Figur 16: Elektrolumineszenzspektrum betrieben bei 10 V des OLED-Bauteils ITO/m-MTDATA/HAT-CN/tris-Pcz/ **1**:DPEPO (20 %)/TSP01/BPyTP2/Liq/Al.
- Figur 17: Stromdichte und Leuchtdichte des OLED-Bauteils X2.
- Figur 18: Leistungseffizienz des OLED-Bauteils X2.
- Figur 19: Stromeffizienz des OLED-Bauteils X2.
- Figur 20: Externe Quanteneffizienz des OLED-Bauteils X2.
- Figur 21: Elektrolumineszenzspektrum des OLED-Bauteils X2, betrieben bei 14 V.

## Ansprüche

1. Organisches Molekül, aufweisend eine Struktur der Formel I

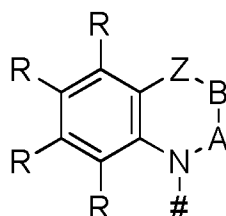


Formel I

mit

X = CN oder CF<sub>3</sub>;

D = chemische Einheit aufweisend eine Struktur der Formel I-1:



Formel I-1

wobei

# = Anknüpfungspunkt der Einheit gemäß Formel I-1 an den zentralen Phenylring der Struktur gemäß Formel I;

A und B = unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus CRR<sup>1</sup>, CR, NR, N, wobei zwischen A und B eine Einfach- oder Doppelbindung vorliegt und zwischen B und Z eine Einfach- oder Doppelbindung vorliegt;

Z = eine direkte Bindung oder eine divalente organische Brücke, die eine substituierte oder unsubstituierte C1-C9-Alkyl-, C2-C8-Alkenyl-, C2-C8-Alkyl-, oder Aryl-Gruppe oder eine Kombination dieser, -CRR<sup>1</sup>, -C=CRR<sup>1</sup>, -C=NR, -NR-, -O-, -SiR<sup>1</sup>, -S-, -S(O)-, -S(O)<sub>2</sub>-, durch O unterbrochene substituierte oder unsubstituierte C1-C9-Alkyl-, C2-C8-Alkenyl-, C2-C8-Alkyl-, oder Aryl-Gruppe, Phenyl- oder substituierte Phenyleinheiten ist;

wobei jedes R und R<sup>1</sup> bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ist H, Deuterium, Azid (N<sub>3</sub><sup>-</sup>), F, Cl, Br, I, N(R<sup>2</sup>)<sub>2</sub>, CN, CF<sub>3</sub>, NO<sub>2</sub>, OH, COOH, COOR<sup>2</sup>, CO(NR<sup>2</sup>)<sub>2</sub>, Si(R<sup>2</sup>)<sub>3</sub>, B(OR<sup>2</sup>)<sub>2</sub>, C(=O)R<sup>2</sup>, P(=O)(R<sup>2</sup>)<sub>2</sub>, S(=O)R<sup>2</sup>, S(=O)<sub>2</sub>R<sup>2</sup>, OSO<sub>2</sub>R<sup>2</sup>, eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine lineare Alkenyl- oder Alkylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R<sup>2</sup> substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen durch R<sup>2</sup>C=CR<sup>2</sup>, C≡C, Si(R<sup>2</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>2</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>2</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>2</sup>, P(=O)(R<sup>2</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>2</sup>, O, S oder CONR<sup>2</sup>

ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF<sub>3</sub> oder NO<sub>2</sub> ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R<sup>2</sup> substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R<sup>2</sup> substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R<sup>2</sup> substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme, oder eine quervernetzbar Einheit QE ist, die durch säurekatalytische, thermische oder UV-Quervernetzungsverfahren in Anwesenheit oder Abwesenheit eines Photoinitiators oder durch Mikrowellenstrahlung quervernetzt werden kann; wobei optional zwei oder mehrere dieser Substituenten R und R<sup>1</sup> miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

R<sup>2</sup> bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ist H, Deuterium, F, Cl, Br, I, N(R<sup>3</sup>)<sub>2</sub>, CN, CF<sub>3</sub>, NO<sub>2</sub>, OH, COOH, COOR<sup>3</sup>, CO(NR<sup>3</sup>)<sub>2</sub>, Si(R<sup>3</sup>)<sub>3</sub>, B(OR<sup>3</sup>)<sub>2</sub>, C(=O)R<sup>3</sup>, P(=O)(R<sup>3</sup>)<sub>2</sub>, S(=O)R<sup>3</sup>, S(=O)<sub>2</sub>R<sup>3</sup>, OSO<sub>2</sub>R<sup>3</sup>, 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<sup>3</sup> substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen durch R<sup>3</sup>C=CR<sup>3</sup>, C≡C, Si(R<sup>3</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>3</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>3</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>3</sup>, P(=O)(R<sup>3</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>3</sup>, O, S oder CONR<sup>3</sup> ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch Deuterium, F, Cl, Br, I, CN, CF<sub>3</sub> oder NO<sub>2</sub> ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R<sup>3</sup> substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R<sup>3</sup> substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R<sup>3</sup> substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; wobei optional zwei oder mehrere dieser Substituenten R<sup>2</sup> miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

R<sup>3</sup> bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ist H, Deuterium, F, CF<sub>3</sub> oder ein aliphatischer, aromatischer und/oder heteroaromatischer Kohlenwasserstoffrest mit 1 bis 20 C-Atomen, in dem auch ein oder mehrere H-Atome durch F oder CF<sub>3</sub> ersetzt sein können; wobei optional zwei oder mehrere Substituenten R<sup>3</sup> miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden;

$R^4$  = ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H,  $N(R^4)_2$ ,  $OR^4$ , einer linearen Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder einer verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^4$  substituiert sein kann, und einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^4$  substituiert sein kann;

$R^{4'}$  = ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus  $N(R^4)_2$ ,  $OR^4$ , einer linearen Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder einer verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^4$  substituiert sein kann, und einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^4$  substituiert sein kann;

$R^4$  bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ist H, Deuterium,  $N(R^5)_2$ ,  $Si(R^5)_3$ , eine lineare Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^5$  substituiert sein kann, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^5$  substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste  $R^5$  substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste  $R^5$  substituiert sein kann, oder eine Kombination dieser Systeme; wobei optional zwei oder mehrere dieser Substituenten  $R^5$  auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

$R^5$  bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ist H, Deuterium, oder ein aliphatischer, aromatischer und/oder heteroaromatischer Kohlenwasserstoffrest mit 1 bis 20 C-Atomen; wobei optional zwei oder mehrere Substituenten  $R^5$  auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden.

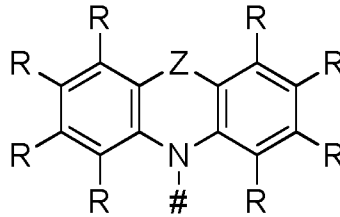
2. Organische Molekül nach Anspruch 1, wobei

$R^4$  = ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H,  $N(R^4)_2$ ,  $OR^4$ , Thiophen, einer linearen Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen, einer verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^4$  substituiert sein kann, und einem aromatischen Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das durch einen oder mehrere Reste  $R^4$  substituiert sein kann;

$R^{4'}$  = ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus  $N(R^4)_2$ ,  $OR^4$ , Thiophen, einer linearen Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder einer verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder

Alkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^4$  substituiert sein kann, oder einem aromatischen Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das durch einen oder mehrere Reste  $R^4$  substituiert sein kann.

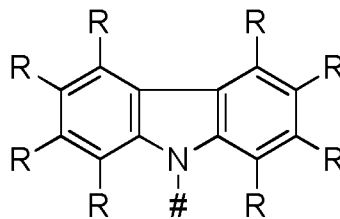
3. Organisches Molekül nach Anspruch 1 oder 2, wobei die Donorgruppe mit elektronenschiebenden Eigenschaften der Formel I-1 eine Struktur der Formel II aufweist:



Formel II

wobei für #, Z und R die in Anspruch 1 genannten Definitionen gelten.

4. Organisches Molekül nach Anspruch 1 bis 3, wobei die Donorgruppe mit elektronenschiebenden Eigenschaften der Formel I-1 eine Struktur der Formel III aufweist:



Formel III

wobei für # und R die in Anspruch 1 genannten Definitionen gelten.

5. Organisches Molekül nach Anspruch 1 bis 4, wobei die akzeptierende Einheit X der Formel I gleich CN ist.

6. Organisches Molekül nach Anspruch 1 bis 4, wobei die akzeptierende Einheit X der Formel I gleich  $CF_3$  ist.

7. Organisches Molekül nach Anspruch 1 bis 5, wobei der Rest  $R'$  der Formel I ein Wasserstoffatom H ist.

8. Verfahren zur Herstellung eines Organischen Moleküls nach Anspruch 1 bis 7.

9. Verwendung eines organischen Moleküls nach Anspruch 1 bis 7 als lumineszierender Emitter oder als Absorber und/oder als Hostmaterial und/oder als Elektronentransportmaterial

und/oder als Lochinjektionsmaterial und/oder als Lochblockiermaterial in einer organischen optoelektronischen Vorrichtung.

10. Verwendung nach Anspruch 9, 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.

11. Verwendung nach Anspruch 9 oder 10, wobei der Anteil des organischen Moleküls an der Emissionsschicht in einer organischen optoelektronischen Vorrichtung, insbesondere in OLEDs, 1 % bis 99 %, insbesondere 5 % bis 80 % beträgt.

12. Organische optoelektronische Vorrichtung, aufweisend ein organisches Molekül nach Anspruch 1 bis 7, 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.

13. Organische optoelektronische Vorrichtung nach Anspruch 12, aufweisend

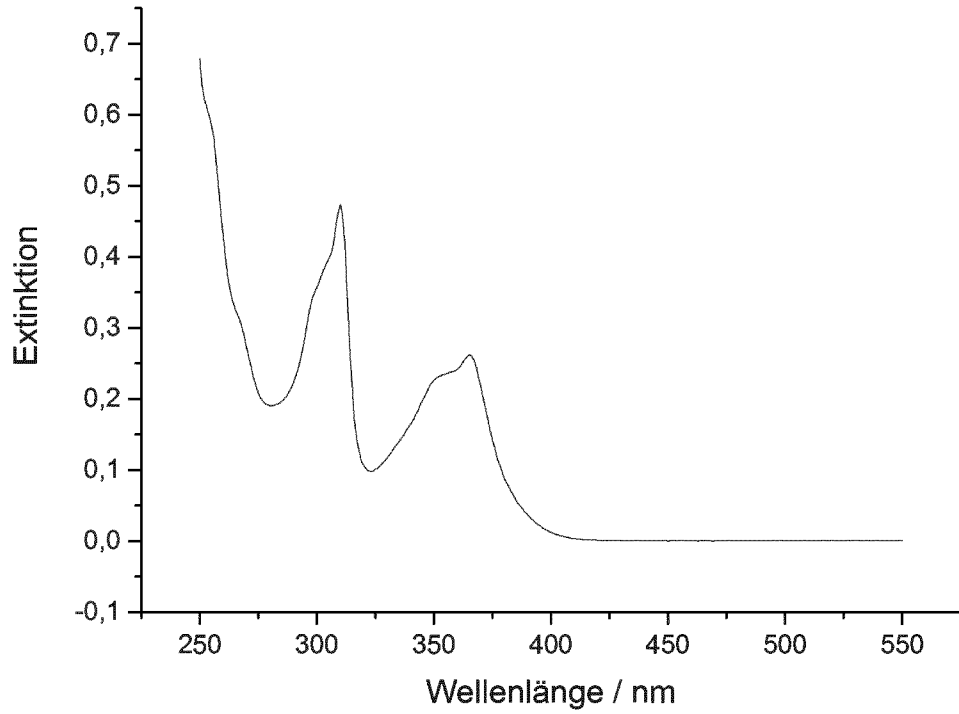
- ein Substrat,
- eine Anode und
- eine Kathode, wobei die Anode oder die Kathode auf das Substrat aufgebracht sind, und
- mindestens eine lichtemittierende Schicht, die zwischen Anode und Kathode angeordnet ist und die das organische Molekül nach Anspruch 1 bis 7 aufweist.

14. Verfahren zur Herstellung eines optoelektronischen Bauelements, wobei ein organisches Molekül nach Anspruch 1 bis 7 verwendet wird.

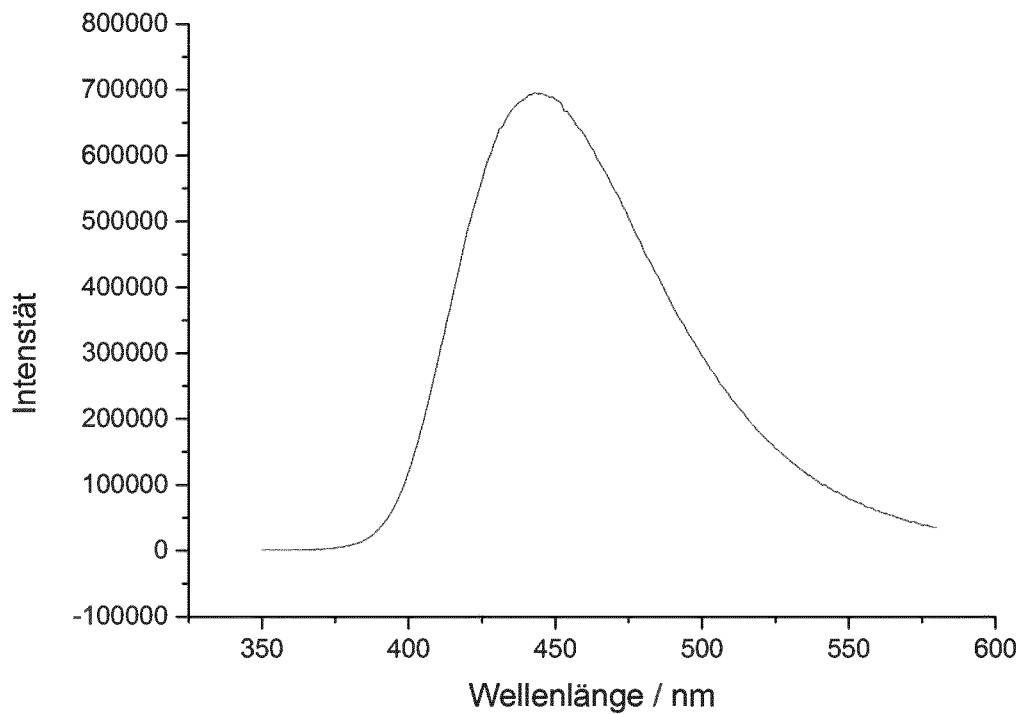
15. Verfahren nach Anspruch 14, umfassend die Verarbeitung des organischen Moleküls mittels eines Vakuumverdampfungsverfahrens oder aus einer Lösung.

## Figuren

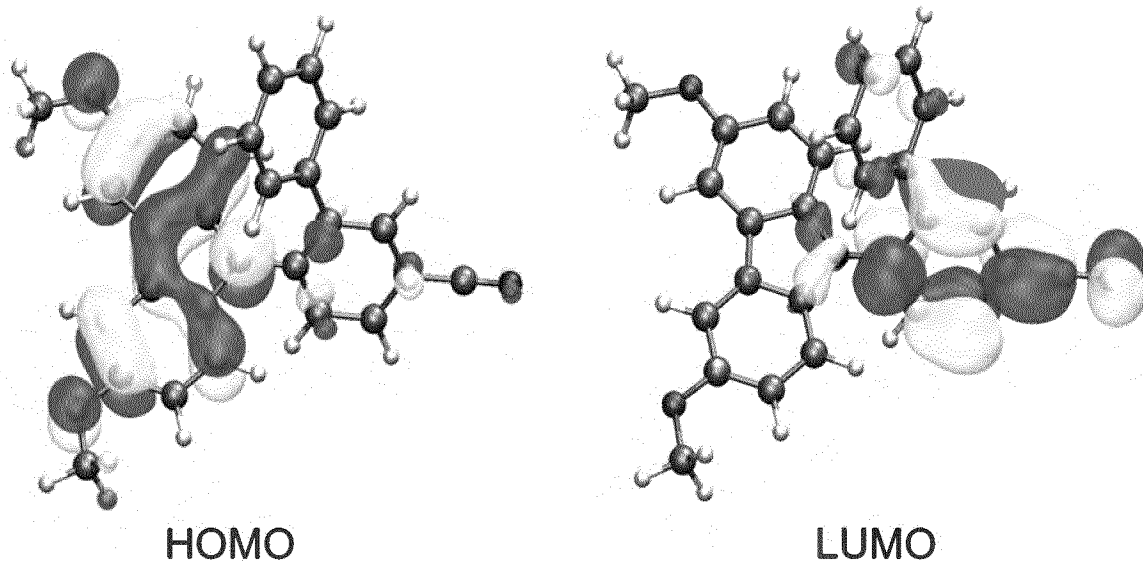
Figur 1



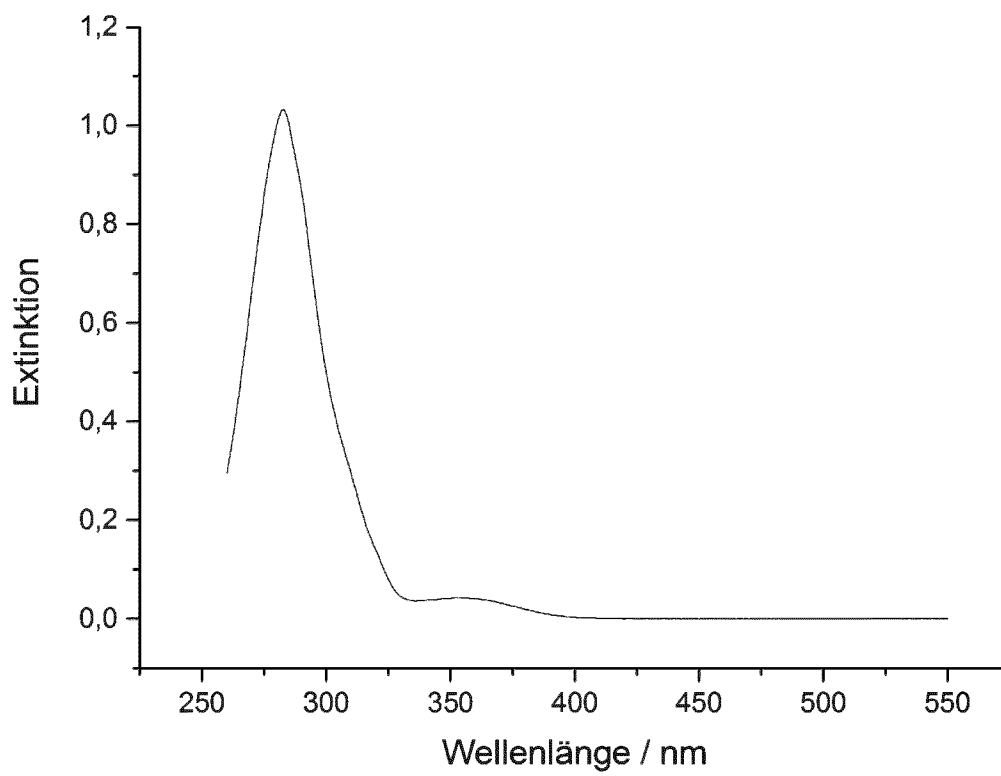
Figur 2



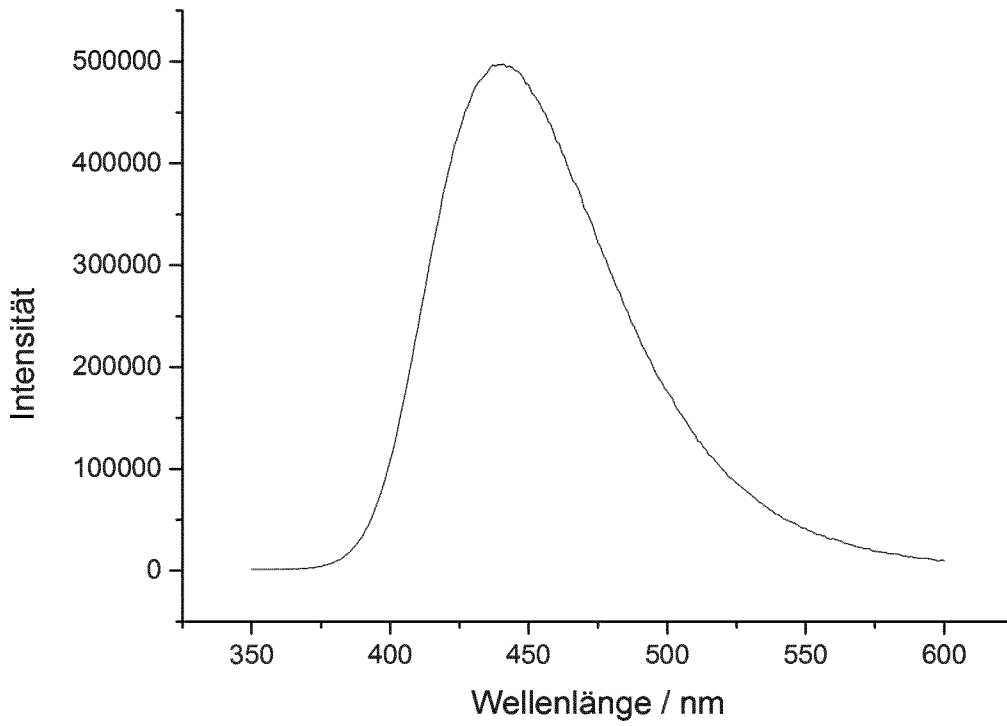
Figur 3



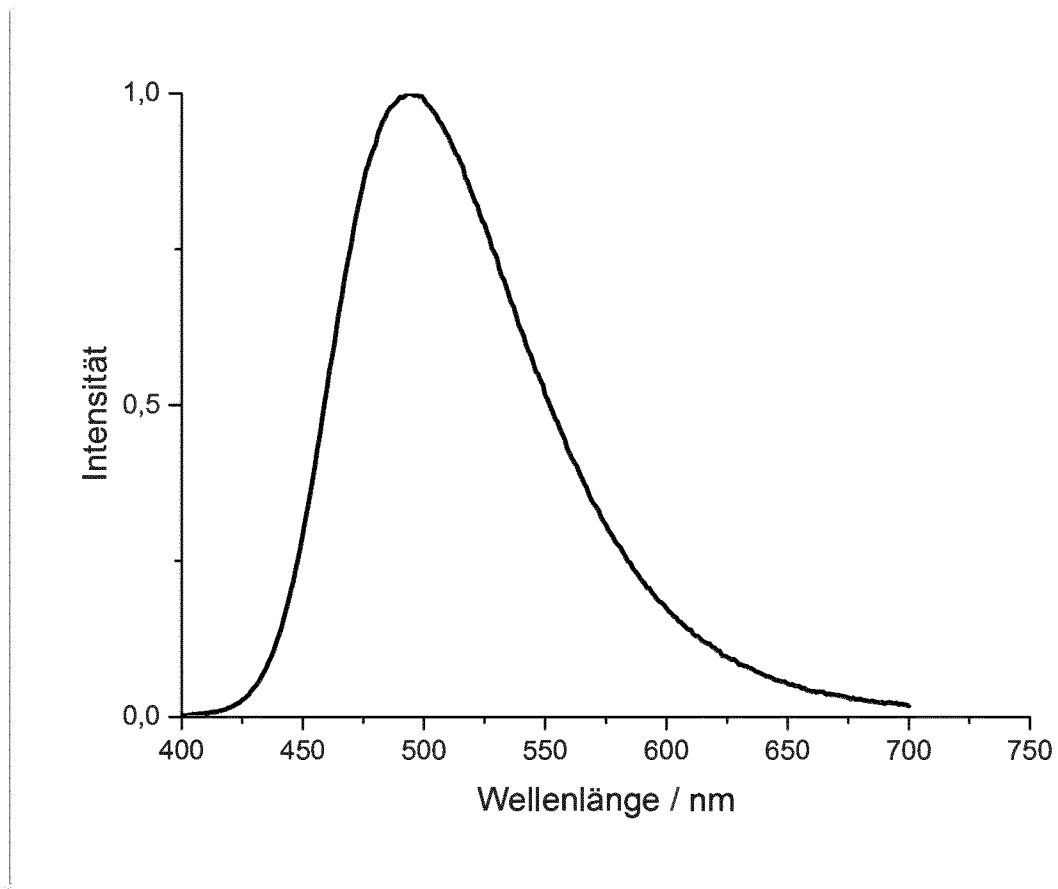
Figur 4



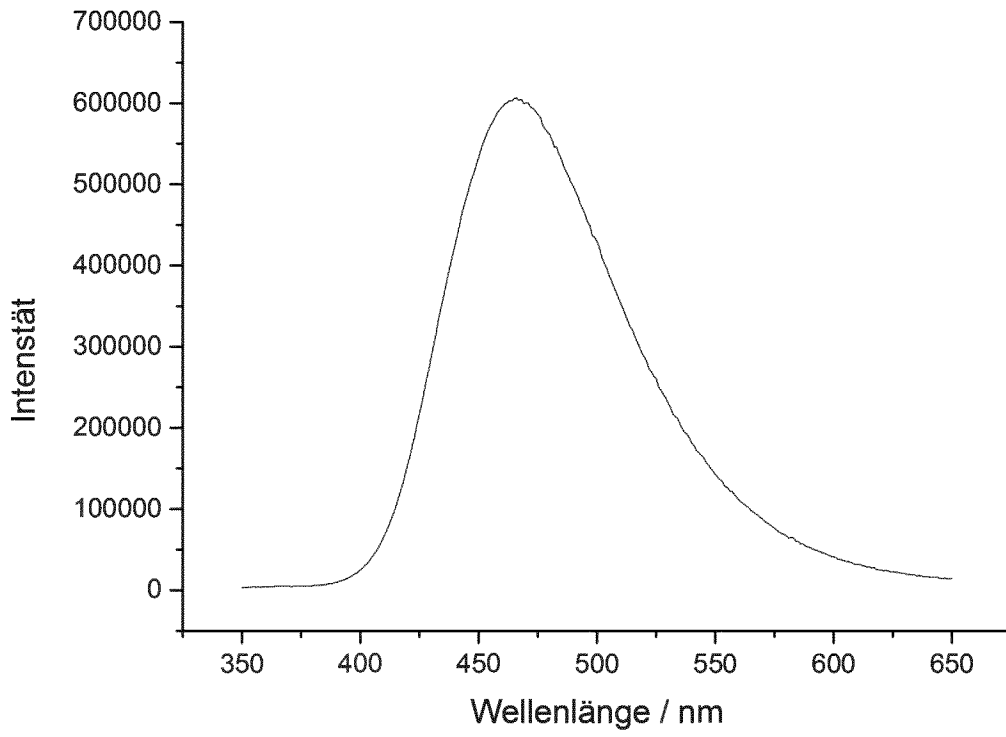
Figur 5



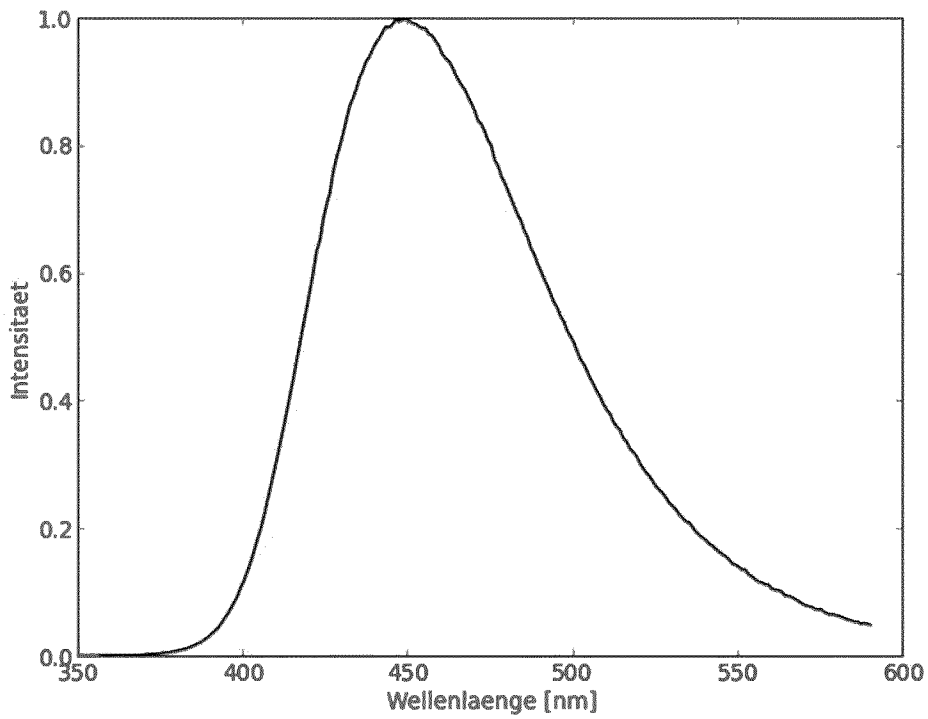
Figur 6



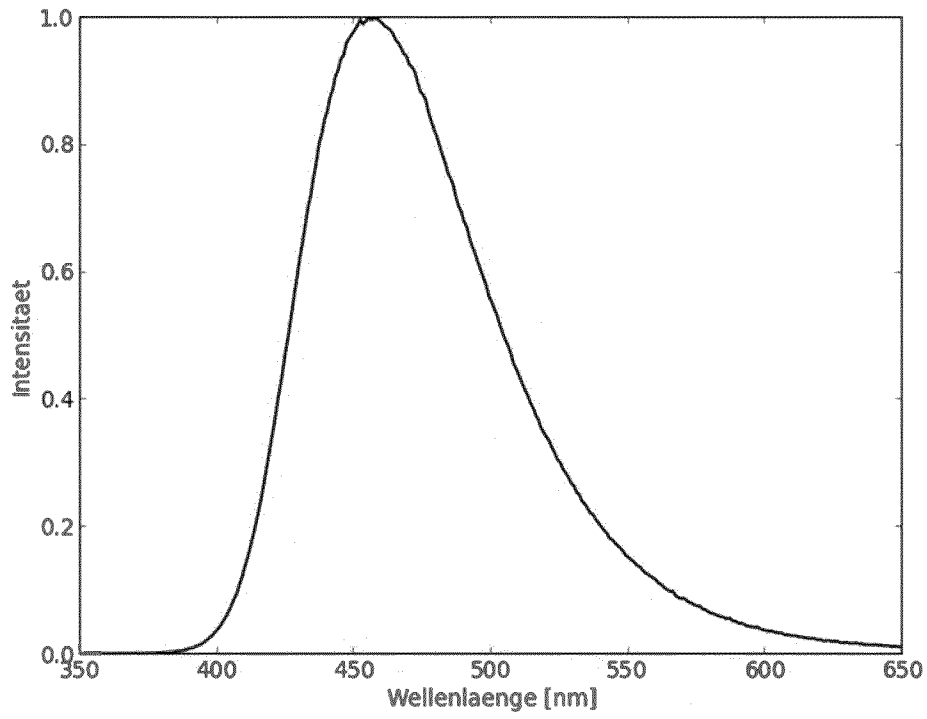
Figur 7



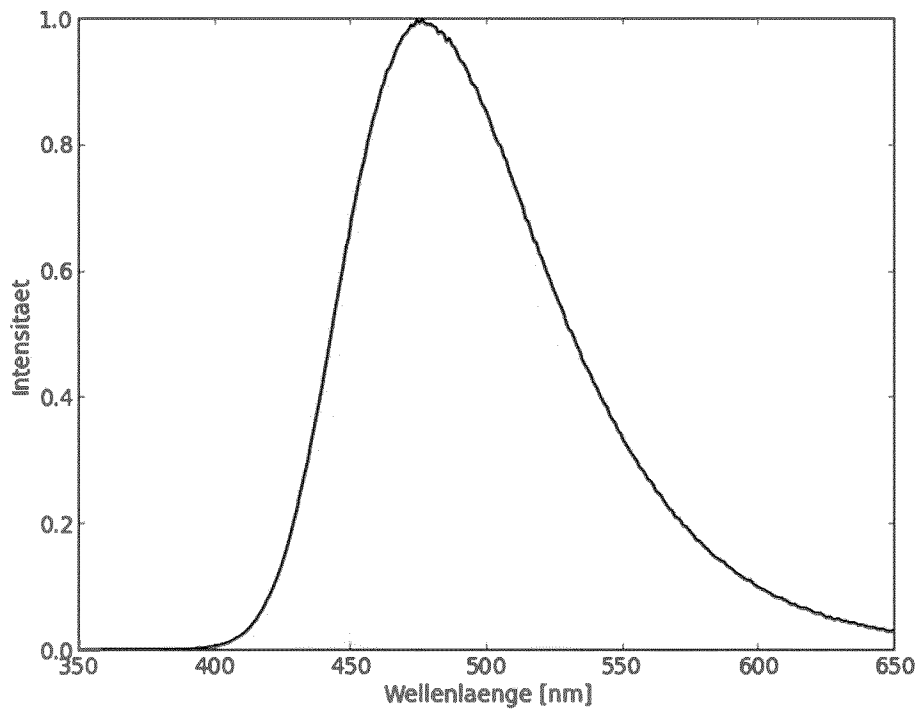
Figur 8



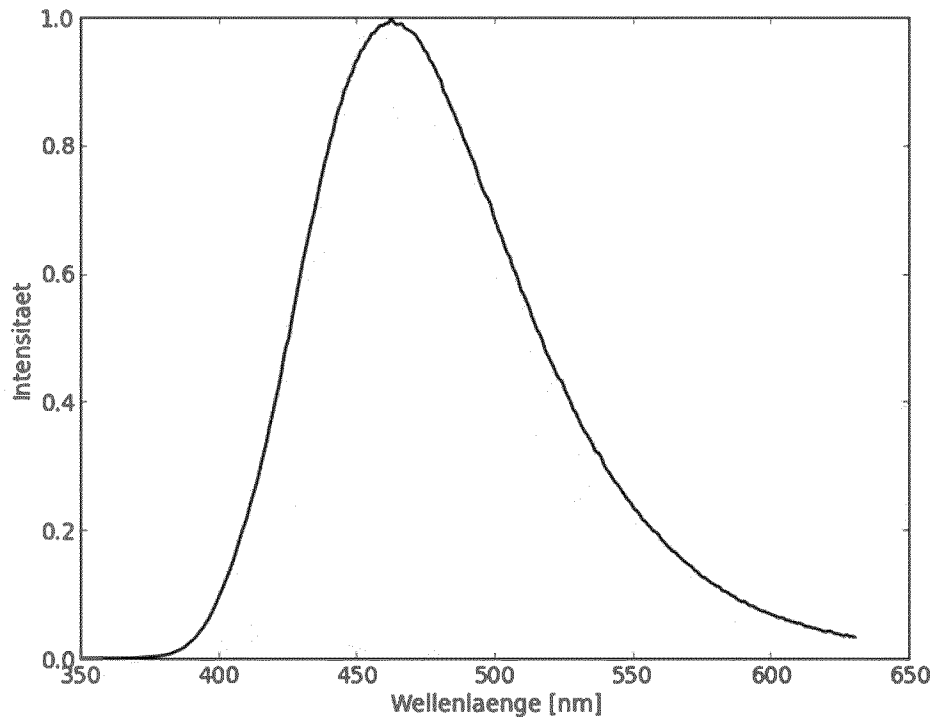
Figur 9



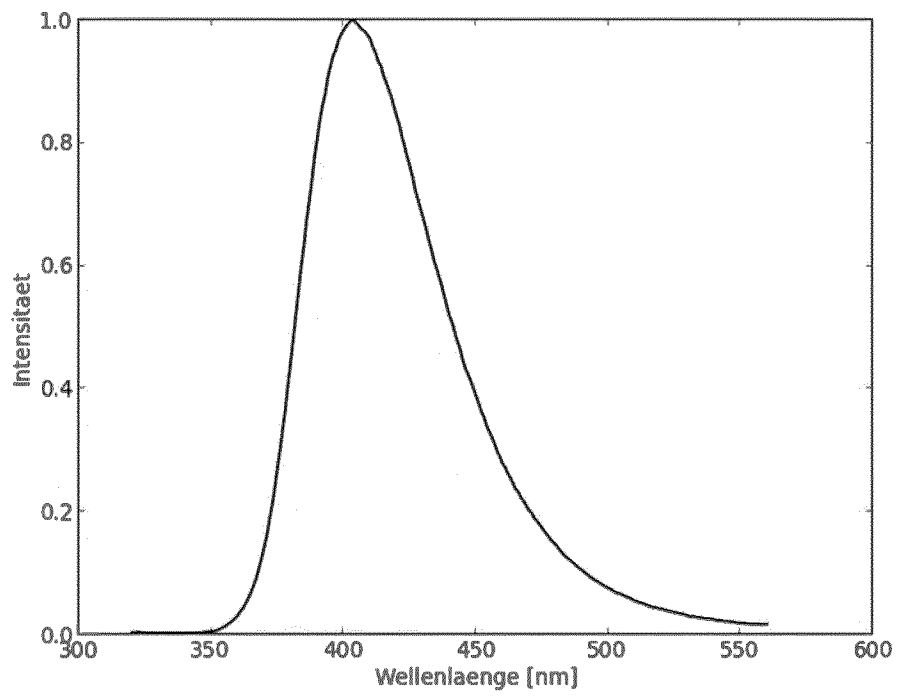
Figur 10



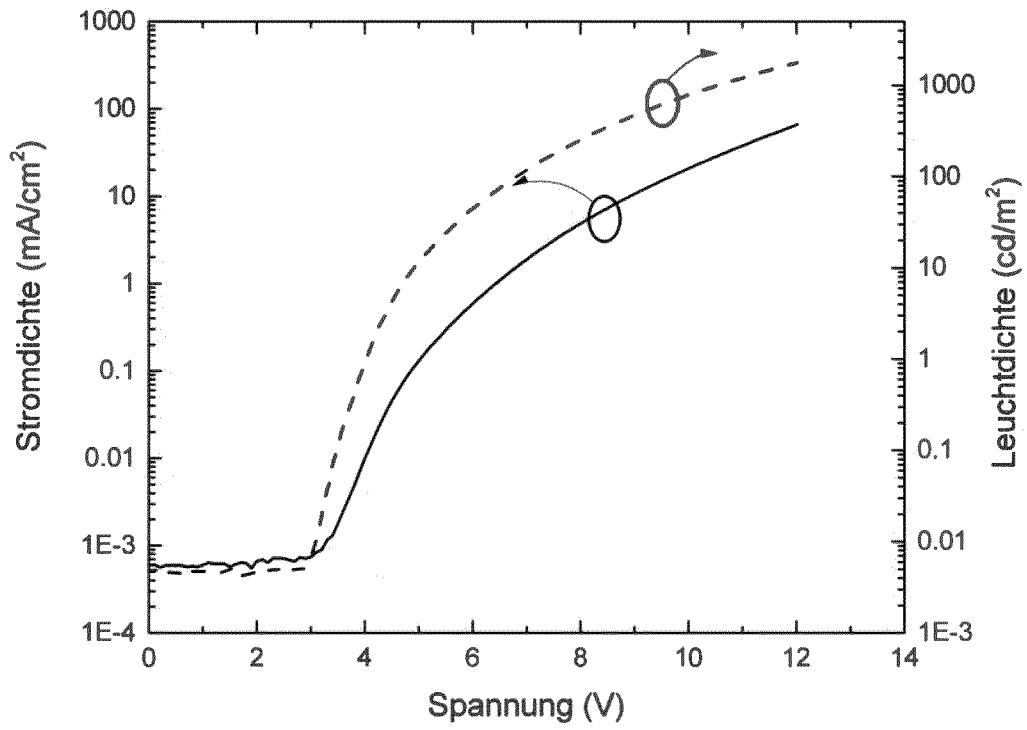
Figur 11



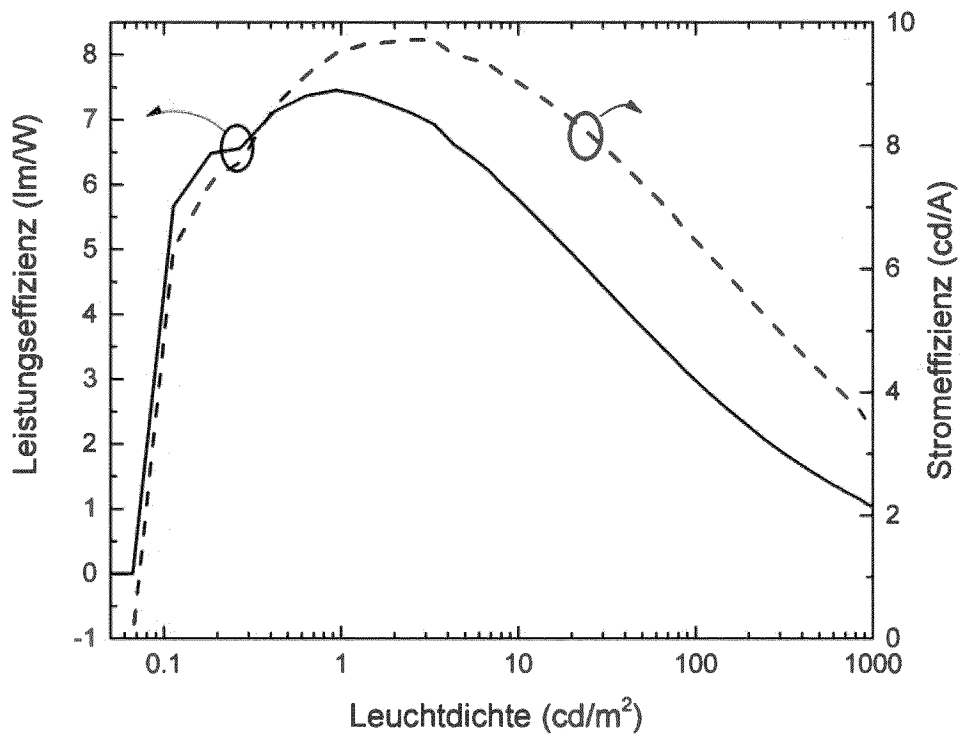
Figur 12



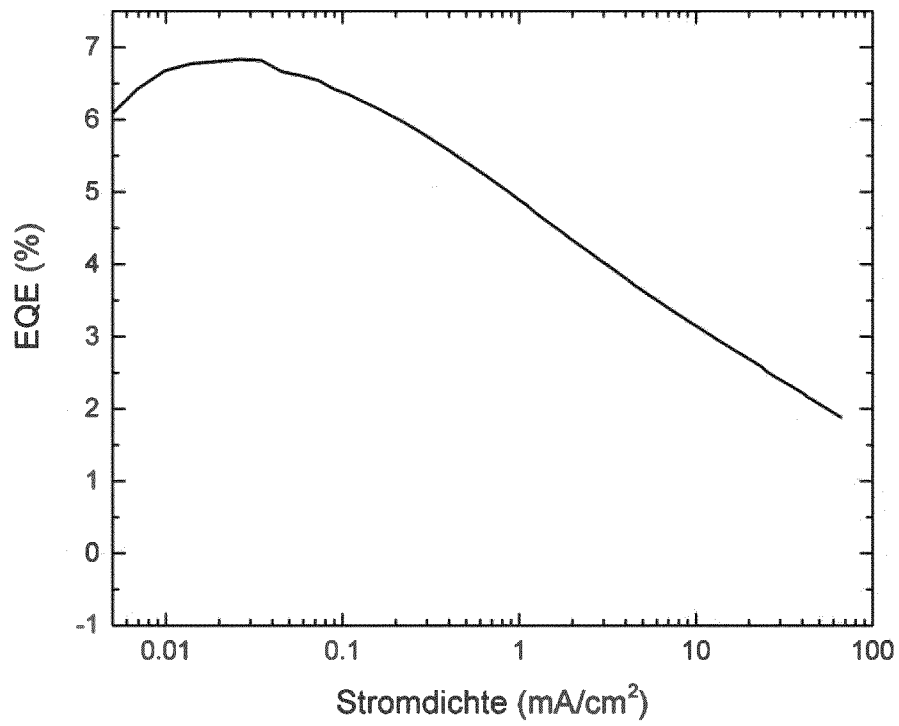
Figur 13



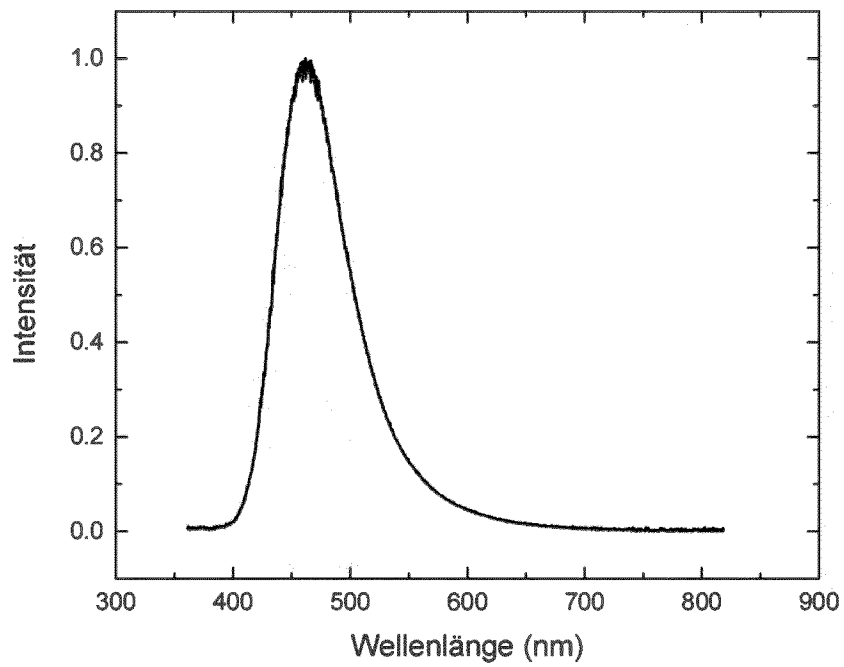
Figur 14



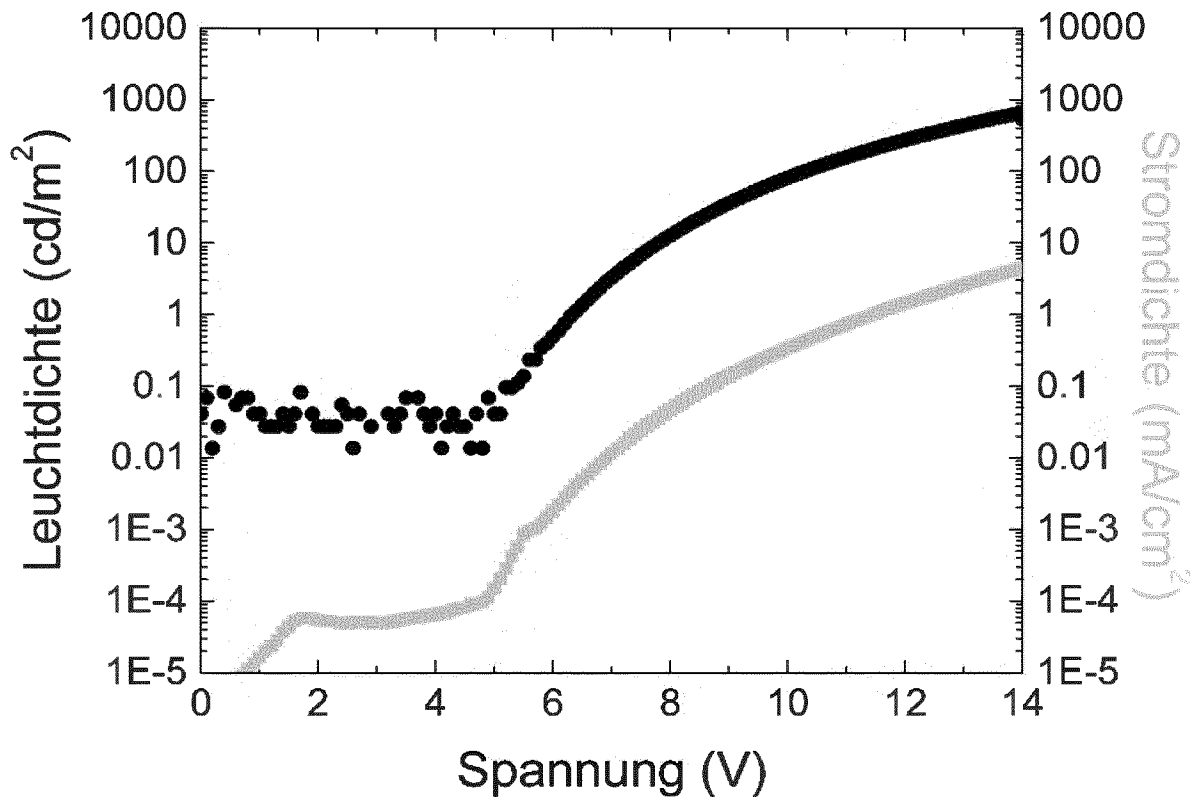
Figur 15



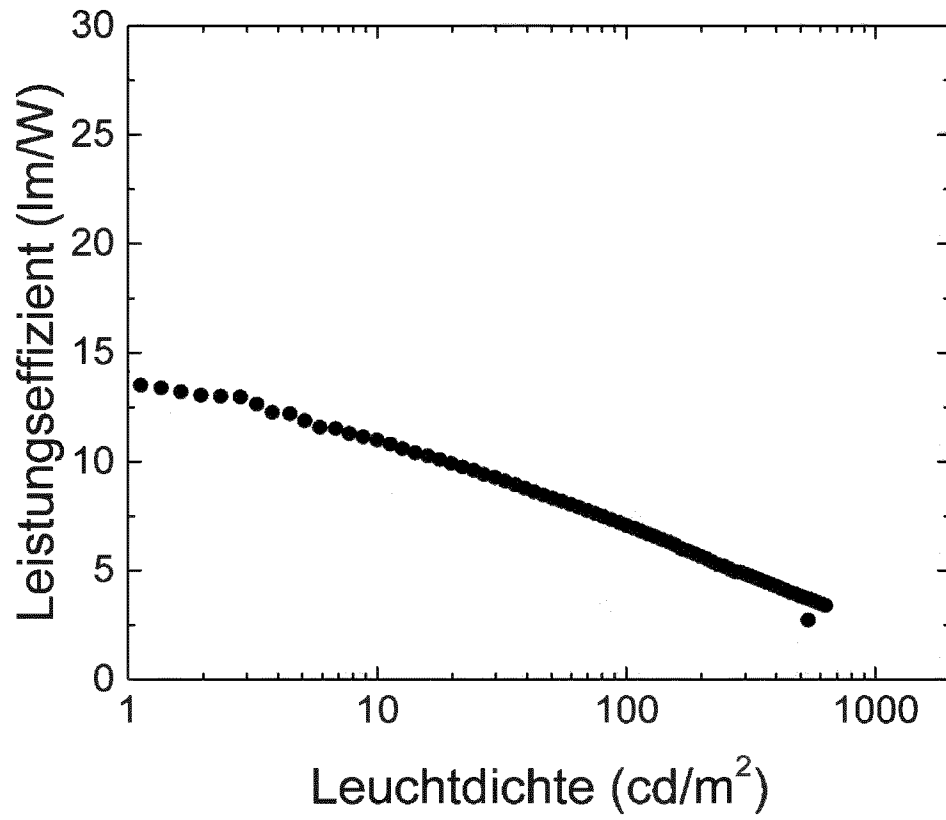
Figur 16



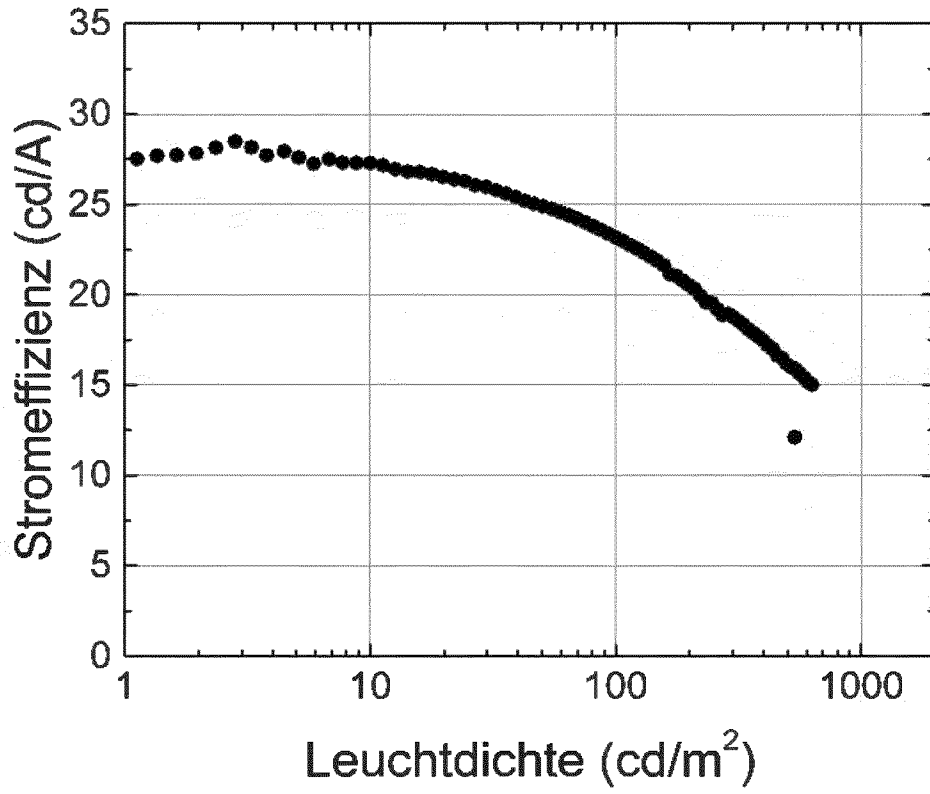
Figur 17



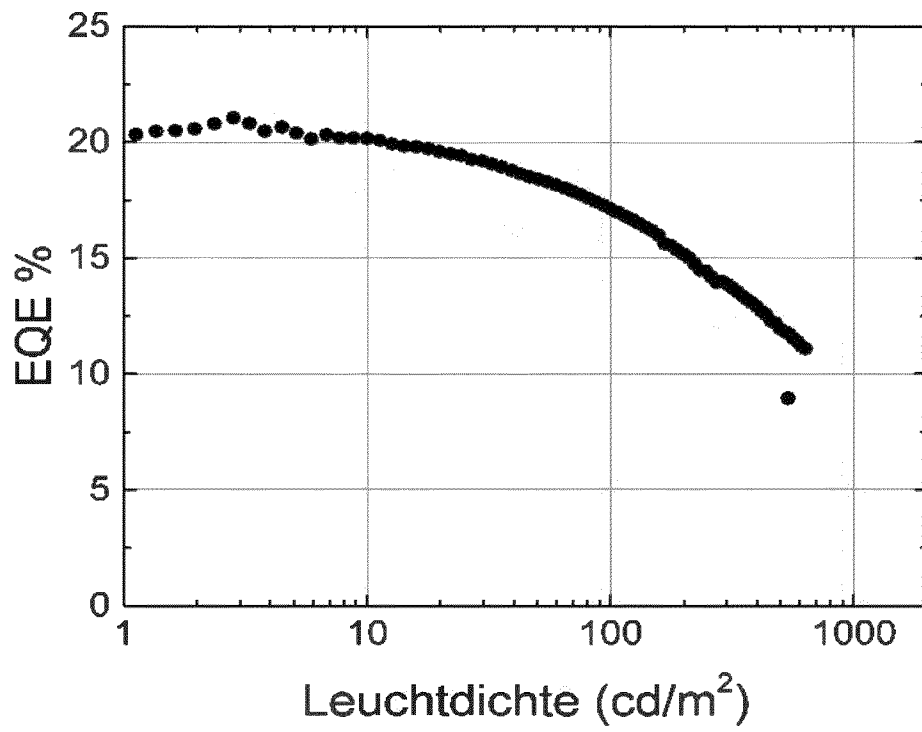
Figur 18



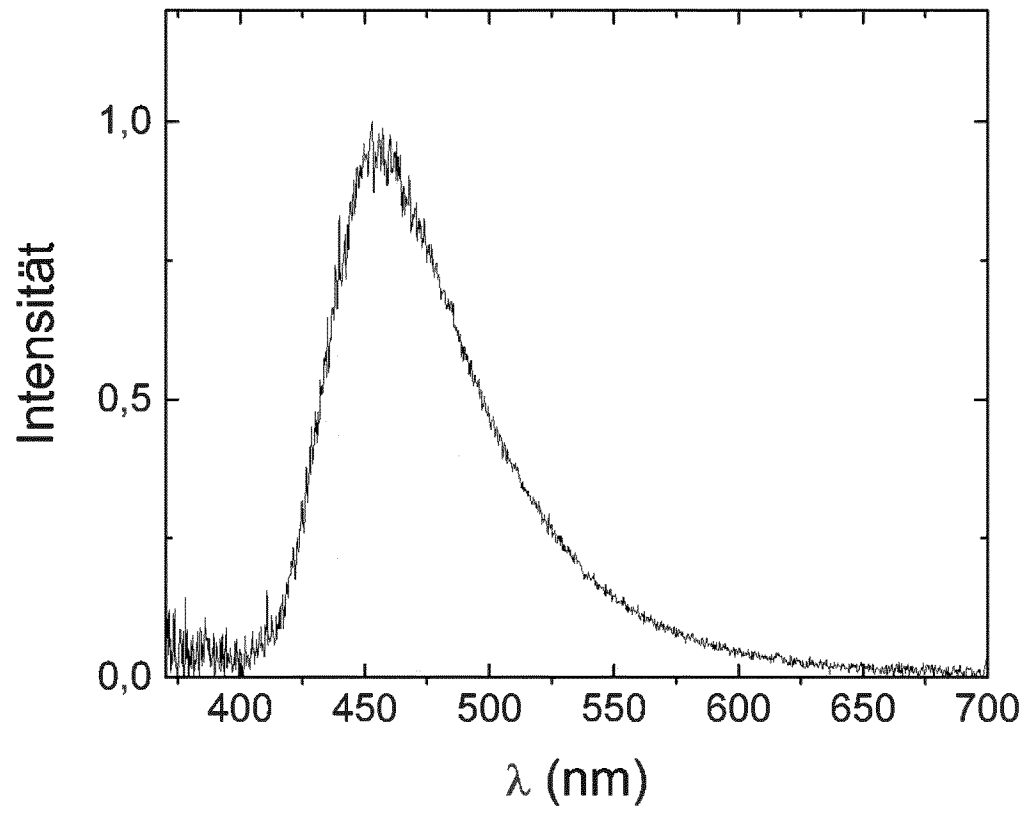
Figur 19



Figur 20



Figur 21



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No  
PCT/EP2016/065723

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER INV. H01L51/30 C07D209/82 ADD. H01L51/46 H01L51/54		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) H01L C07D		
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 2014/146752 A1 (MERCK PATENT GMBH [DE]) 25 September 2014 (2014-09-25) abstract; compound S97 -----	1,3,5,6, 8-15
X	WO 2014/146750 A1 (MERCK PATENT GMBH [DE]) 25 September 2014 (2014-09-25) abstract; compounds 96,97,100,103,123,124 -----	1,3,8-15
A	SHAOLONG GONG ET AL: "Simple CBP isomers with high triplet energies for highly efficient blue electrophosphorescence", JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY, ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY, GB, vol. 22, no. 7, 1 January 2012 (2012-01-01), pages 2894-2899, XP002734092, ISSN: 0959-9428, DOI: 10.1039/C1JM14903B [retrieved on 2011-12-21] the whole document -----	1-15
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents :		
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance	"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  22 November 2016	Date of mailing of the international search report  05/12/2016	
Name and mailing address of the ISA/ European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016	Authorized officer  Königstein, C	

# INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No PCT/EP2016/065723
---

Patent document cited in search report		Publication date		Patent family member(s)	Publication date
WO 2014146752	A1	25-09-2014	CN	105051014 A	11-11-2015
			EP	2976329 A1	27-01-2016
			JP	2016516085 A	02-06-2016
			KR	20150132872 A	26-11-2015
			US	2016072076 A1	10-03-2016
			WO	2014146752 A1	25-09-2014
-----					
WO 2014146750	A1	25-09-2014	CN	105073709 A	18-11-2015
			EP	2976322 A1	27-01-2016
			JP	2016516084 A	02-06-2016
			KR	20150132873 A	26-11-2015
			US	2016046563 A1	18-02-2016
			WO	2014146750 A1	25-09-2014
-----					

<b>A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES</b> INV. H01L51/30 C07D209/82 ADD. H01L51/46 H01L51/54		
Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPC) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPC		
<b>B. RECHERCHIERTE GEBIETE</b>		
Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole ) H01L C07D		
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		
<b>C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN</b>		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	WO 2014/146752 A1 (MERCK PATENT GMBH [DE]) 25. September 2014 (2014-09-25) Zusammenfassung; Verbindung S97 -----	1,3,5,6, 8-15
X	WO 2014/146750 A1 (MERCK PATENT GMBH [DE]) 25. September 2014 (2014-09-25) Zusammenfassung; Verbindungen 96,97,100,103,123,124 -----	1,3,8-15
A	SHAOLONG GONG ET AL: "Simple CBP isomers with high triplet energies for highly efficient blue electrophosphorescence", JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY, ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY, GB, Bd. 22, Nr. 7, 1. Januar 2012 (2012-01-01) , Seiten 2894-2899, XP002734092, ISSN: 0959-9428, DOI: 10.1039/C1JM14903B [gefunden am 2011-12-21] das ganze Dokument -----	1-15
<input type="checkbox"/> Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen <input checked="" type="checkbox"/> Siehe Anhang Patentfamilie		
* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen : "A" Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist "E" 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 er- scheinen 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		Absenddatum des internationalen Recherchenberichts
22. November 2016		05/12/2016
Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016		Bevollmächtigter Bediensteter  Königstein, C

**INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT**

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2016/065723

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 2014146752 A1	25-09-2014	CN 105051014 A	11-11-2015
		EP 2976329 A1	27-01-2016
		JP 2016516085 A	02-06-2016
		KR 20150132872 A	26-11-2015
		US 2016072076 A1	10-03-2016
		WO 2014146752 A1	25-09-2014
-----			
WO 2014146750 A1	25-09-2014	CN 105073709 A	18-11-2015
		EP 2976322 A1	27-01-2016
		JP 2016516084 A	02-06-2016
		KR 20150132873 A	26-11-2015
		US 2016046563 A1	18-02-2016
		WO 2014146750 A1	25-09-2014
-----			