

(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  
5. August 2010 (05.08.2010)

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer  
**WO 2010/086089 A1**

(51) Internationale Patentklassifikation:

*C07F 1/00* (2006.01)    *H05B 33/14* (2006.01)  
*C07F 1/08* (2006.01)    *H01L 51/50* (2006.01)  
*C07F 15/00* (2006.01)    *C07D 471/04* (2006.01)  
*C07F 19/00* (2006.01)    *C07D 471/14* (2006.01)  
*C09K 11/06* (2006.01)    *C07D 487/14* (2006.01)

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2010/000177

(22) Internationales Anmeldedatum:  
14. Januar 2010 (14.01.2010)

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:  
10 2009 007 038.9  
2. Februar 2009 (02.02.2009) DE

(71) Anmelder (für alle Bestimmungsstaaten mit Ausnahme von US): **MERCK PATENT GMBH** [DE/DE]; Frankfurter Strasse 250, 64293 Darmstadt (DE).

(72) Erfinder; und

(75) Erfinder/Anmelder (nur für US): **STOESSEL, Philipp** [DE/DE]; Sophienstrasse 30, 60487 Frankfurt am Main (DE). **HEIL, Holger** [DE/DE]; Hallgartenstrasse 61, 60389 Frankfurt am Main (DE). **JOOSETEN, Dominik** [DE/DE]; Am Weingarten 7, 60487 Frankfurt am Main (DE). **PFLUMM, Christof** [DE/DE]; Merianstrasse 23, 60316 Frankfurt am Main (DE). **GERHARD, Anja** [DE/DE]; Im Bruehl 101, 63329 Egelsbach (DE). **BRE-**

**UNING, Esther** [DE/DE]; Potsdamer Strasse 64, 64372 Ober-Ramstadt (DE).

(81) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare nationale Schutzrechtsart): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, RO, RS, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, 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, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

Veröffentlicht:

- mit internationalem Recherchenbericht (Artikel 21 Absatz 3)
- vor Ablauf der für Änderungen der Ansprüche geltenden Frist; Veröffentlichung wird wiederholt, falls Änderungen eingehen (Regel 48 Absatz 2 Buchstabe h)

(54) Title: METAL COMPLEXES

(54) Bezeichnung : METALLKOMPLEXE

(57) Abstract: The present invention relates to metal complexes and electronic devices, in particular organic electroluminescent devices comprising said metal complexes.

(57) Zusammenfassung: Die vorliegende Erfindung betrifft Metallkomplexe sowie elektronische Vorrichtungen, insbesondere organische Elektrolumineszenzvorrichtungen, enthaltend diese Metallkomplexe.



WO 2010/086089 A1

## Metallkomplexe

Der Aufbau organischer Elektrolumineszenzvorrichtungen (OLEDs), in denen organische Halbleiter als funktionelle Materialien eingesetzt werden, ist beispielsweise in US 4539507, US 5151629, EP 0676461 und  
5 WO 98/27136 beschrieben. Dabei werden als emittierende Materialien zunehmend metallorganische Komplexe eingesetzt, die Phosphoreszenz statt Fluoreszenz zeigen (M. A. Baldo *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **1999**, *75*, 4-6). Aus quantenmechanischen Gründen ist unter Verwendung metallorganischer Verbindungen als Phosphoreszenzemitter eine bis zu vier-  
10 fache Energie- und Leistungseffizienz möglich. Generell gibt es bei OLEDs, die Triplettmission zeigen, jedoch immer noch Verbesserungsbedarf, insbesondere im Hinblick auf Effizienz, Betriebsspannung und Lebensdauer. Dies gilt insbesondere für OLEDs, welche im kürzerwelligen Bereich, also grün und insbesondere blau, emittieren. So sind bislang  
15 keine blau emittierenden Triplettmitter bekannt, welche die technischen Anforderungen für eine industrielle Anwendung erfüllen.

Gemäß dem Stand der Technik werden in phosphoreszierenden OLEDs als Triplettmitter insbesondere Iridiumkomplexe eingesetzt. Eine  
20 Verbesserung dieser OLEDs konnte dadurch erzielt werden, dass Metallkomplexe mit polyodalem Liganden bzw. Kryptate eingesetzt wurden, wodurch die Komplexe eine höhere thermische Stabilität aufweisen, was zu einer höheren Lebensdauer der OLEDs führt (WO 04/081017, WO 05/113563, WO 06/008069). Für blaue Emission, insbesondere für  
25 gesättigte tiefblaue Emission, sind diese Komplexe jedoch nicht geeignet.

Aus dem Stand der Technik sind weiterhin Iridiumkomplexe bekannt, welche als Liganden Imidazophenanthridin-Derivate bzw. Diimidazochinazolin-Derivate enthalten (WO 07/095118). Diese Komplexe können  
30 bei Anwendung in organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen, je nach genauer Struktur des Liganden, zu blauer Phosphoreszenz führen. Auch hier sind noch weitere Verbesserungen hinsichtlich Effizienz, Betriebsspannung und Lebensdauer, wünschenswert. Insbesondere besteht hier auch noch Verbesserungsbedarf in Bezug auf die Farbkoordinaten, um  
35 tiefblaue Emission erzielen zu können.

Aufgabe der vorliegenden Erfindung ist daher die Bereitstellung neuer Metallkomplexe, welche sich als Emitter für die Verwendung in OLEDs eignen. Insbesondere ist die Aufgabe, Emitter bereitzustellen, welche sich für blau phosphoreszierende OLEDs eignen.

5

Überraschend wurde gefunden, dass bestimmte, unten näher beschriebene Metallchelate diese Aufgabe lösen und zu Verbesserungen der organischen Elektrolumineszenzvorrichtung führen, insbesondere hinsichtlich der Betriebsspannung, der Effizienz und der Emissionsfarbe. Diese Metallkomplexe und organische Elektrolumineszenzvorrichtungen, welche diese Komplexe enthalten, sind daher der Gegenstand der vorliegenden Erfindung.

10

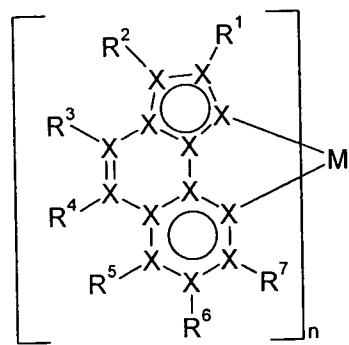
Gegenstand der Erfindung ist somit eine Verbindung gemäß Formel (1),

15



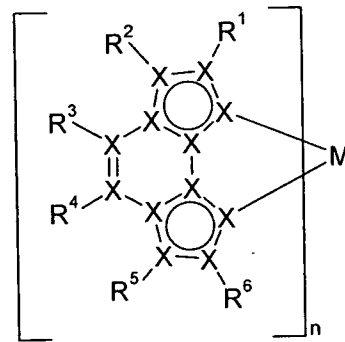
wobei die Verbindung der allgemeinen Formel (1) eine Teilstruktur  $M(L)_n$  der Formel (2) oder Formel (3) enthält:

20



25

Formel (2)



Formel (3)

30

wobei für die verwendeten Symbole und Indizes gilt:

M ist ein Metall;

35

X ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus der Gruppe bestehend aus C, N und B; und alle X gemeinsam stellen ein 14  $\pi$ -Elektronensystem dar;

5 R<sup>1</sup> bis R<sup>7</sup> ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, D, F, Cl, Br, I, N(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, CN, NO<sub>2</sub>, Si(R<sup>8</sup>)<sub>3</sub>, B(OR<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, C(=O)R<sup>8</sup>, P(=O)(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, S(=O)R<sup>8</sup>, S(=O)<sub>2</sub>R<sup>8</sup>, OSO<sub>2</sub>R<sup>8</sup>, eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 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<sup>8</sup> substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen durch R<sup>8</sup>C=CR<sup>8</sup>, C $\equiv$ C, Si(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>8</sup>, P(=O)(R<sup>8</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>8</sup>, O, S oder CONR<sup>8</sup> ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch D, F, Cl, Br, I, CN 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>8</sup> substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R<sup>8</sup> substituiert sein kann, oder eine Aralkyl- oder Heteroaralkylgruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R<sup>8</sup> substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R<sup>8</sup> substituiert sein kann; dabei können R<sup>1</sup> und R<sup>2</sup> und/oder R<sup>2</sup> und R<sup>3</sup> und/oder R<sup>4</sup> und R<sup>5</sup> und/oder R<sup>5</sup> und R<sup>6</sup> und/oder R<sup>6</sup> und R<sup>7</sup> auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden; weiterhin können R<sup>3</sup> und R<sup>4</sup> miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden; mit der Maßgabe, dass R<sup>1</sup> bis R<sup>7</sup> ein freies Elektronenpaar darstellt, wenn die Gruppe X, an welche dieser Rest R<sup>1</sup> bis R<sup>7</sup> gebunden ist, ein Stickstoffatom mit abgesättigter Valenz ist;

35

- 5  $R^8$  ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, D, F, Cl, Br, I,  $N(R^9)_2$ , CN,  $NO_2$ ,  $Si(R^9)_3$ ,  $B(OR^9)_2$ ,  $C(=O)R^9$ ,  $P(=O)(R^9)_2$ ,  $S(=O)R^9$ ,  $S(=O)_2R^9$ ,  $OSO_2R^9$ , eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 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  $R^9$  substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $CH_2$ -Gruppen durch  $R^9C=CR^9$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^9)_2$ ,  $Ge(R^9)_2$ ,  $Sn(R^9)_2$ , C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>9</sup>, P(=O)(R<sup>9</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>9</sup>, O, S oder CONR<sup>9</sup> ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch D, F, Cl, Br, I, CN 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  $R^9$  substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste  $R^9$  substituiert sein kann, oder eine Aralkyl- oder Heteroaralkylgruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste  $R^9$  substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste  $R^9$  substituiert sein kann; dabei können zwei oder mehrere benachbarte Reste  $R^8$  miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden;
- 10
- 15
- 20
- 25  $R^9$  ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, D, F oder ein aliphatischer, aromatischer und/oder heteroaromatischer Kohlenwasserstoffrest mit 1 bis 20 C-Atomen, in dem auch ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können; dabei können zwei oder mehrere Substituenten  $R^9$  auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden;
- 30
- $L'$  ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten ein beliebiger Coligand;
- 35 n ist 1, 2, 3 oder 4;

m ist 0, 1, 2, 3, 4, 5 oder 6;

dabei können auch mehrere Liganden L miteinander oder L mit L' über eine beliebige Brücke V verknüpft sein und so ein tridentates, tetra-  
5 dentates, pentadentates oder hexadentates Ligandensystem aufspannen.

Sowohl der Ligand L als ganzes wie auch einzelne Atome X im Liganden L können dabei auch geladen sein.

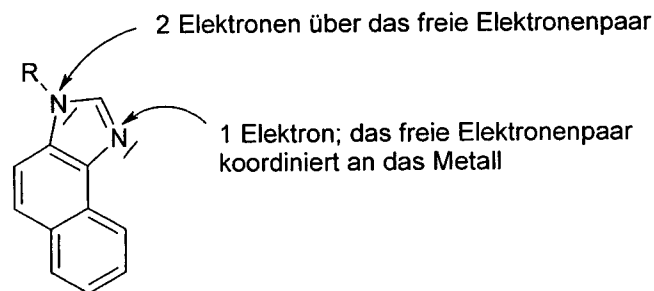
10 Dabei werden die Indizes n und m so gewählt, dass die Koordinationszahl am Metall M insgesamt, je nach Metall, der für dieses Metall üblichen Koordinationszahl entspricht. Dies ist für Übergangsmetalle je nach Metall  
üblicherweise die Koordinationszahl 4, 5 oder 6. Es ist generell bekannt, dass Metallkoordinationsverbindungen abhängig vom Metall und von der  
15 Oxidationsstufe des Metalls unterschiedliche Koordinationszahlen aufweisen, also eine unterschiedliche Anzahl von Liganden binden. Da die bevorzugten Koordinationszahlen von Metallen bzw. Metallionen in verschiedenen Oxidationsstufen zum allgemeinen Fachwissen des Fachmanns auf dem Gebiet der metallorganischen Chemie bzw. der Koordinationschemie gehören, ist es für den Fachmann ein Leichtes, je nach Metall  
20 und dessen Oxidationsstufe und je nach genauer Struktur des Liganden L eine geeignete Anzahl Liganden zu verwenden und somit die Indizes n und m geeignet zu wählen.

25 Die Liganden L sind bidentate Liganden, welche über ein Kohlenstoffatom und ein Stickstoffatom oder über zwei Kohlenstoffatome oder über zwei Stickstoffatome an das Metall M binden. Wenn der Ligand über zwei Kohlenstoffatome an das Metall bindet, enthält der Ligand bevorzugt in dem koordinierenden Carben-Ring genau zwei Stickstoffatome. In einer  
30 bevorzugten Ausführungsform der Erfindung bindet der Ligand L über ein Kohlenstoffatom und ein Stickstoffatom an das Metall M.

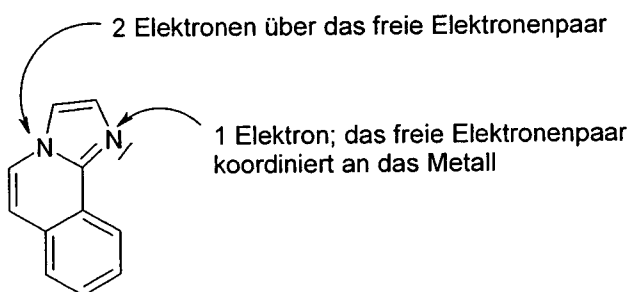
Alle Atome X bilden zusammen ein 14  $\pi$ -Elektronensystem. Dabei trägt jedes Kohlenstoffatom 1  $\pi$ -Elektron zum gesamten Elektronensystem bei.  
35 Jedes Stickstoffatom, welches nur in einem 6-Ring gebunden ist, trägt

ebenfalls 1  $\pi$ -Elektron zum gesamten Elektronensystem bei. Jedes Stickstoffatom, welches gleichzeitig in einem 5-Ring und einem 6-Ring gebunden ist, trägt 2  $\pi$ -Elektronen zum gesamten Elektronensystem bei. Jedes Stickstoffatom, welches nur in einem 5-Ring gebunden ist, trägt 1 oder 2  $\pi$ -Elektronen zum gesamten Elektronensystem bei. Dabei hängt es von der Bindung des Stickstoffs im 5-Ring ab, ob dieses Stickstoffatom 1 oder 2  $\pi$ -Elektronen zum gesamten Elektronensystem beiträgt. Jedes Boratom trägt 0 oder 1  $\pi$ -Elektron zum gesamten Elektronensystem bei, je nachdem, ob das Boratom neutral oder negativ geladen ist. Dabei stellt der Kreis in einem Cyclus in Formel (2) und (3) ein 6  $\pi$ -Elektronensystem dar, wie es üblicherweise für die Darstellung aromatischer oder heteroaromatischer Strukturen in der organischen Chemie verwendet wird. Die folgenden Strukturen erläutern nochmals, wann der Stickstoff 1 bzw. 2  $\pi$ -Elektronen (in dem Schema nur als Elektronen bezeichnet) zum gesamten  $\pi$ -Elektronensystem beiträgt:

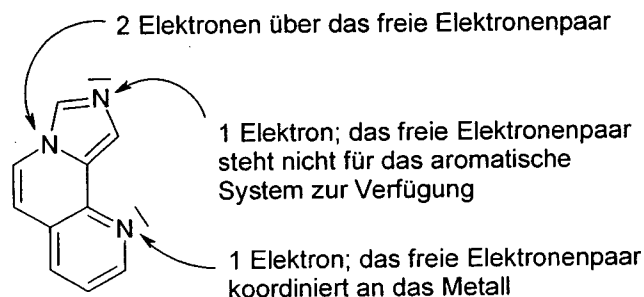
15



20



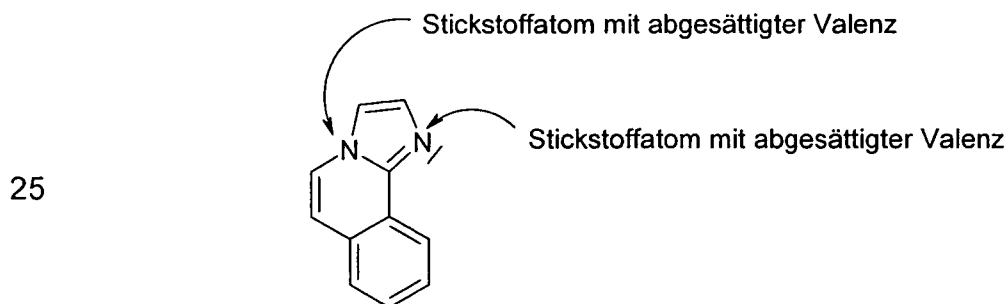
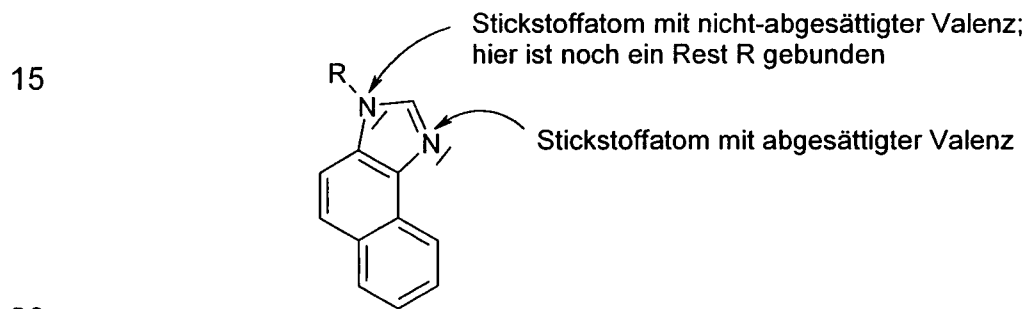
25



30

35

Unter einem Stickstoffatom mit abgesättigter Valenz im Sinne dieser Erfindung wird ein Stickstoffatom verstanden, welches innerhalb des aromatischen Grundgerüsts entweder formal eine Einfachbindung und eine Doppelbindung oder drei Einfachbindungen eingeht. In diesen Fällen stellt der Rest  $R^1$  bis  $R^7$ , welcher an dieses Stickstoffatom gebunden ist, ein freies Elektronenpaar dar. Unter einem Stickstoffatom mit nicht abgesättigter Valenz im Sinne dieser Erfindung wird dagegen ein Stickstoffatom verstanden, welches innerhalb des aromatischen Grundgerüsts formal nur zwei Einfachbindungen eingeht. In diesen Fällen stellt der Rest  $R^1$  bis  $R^7$ , welcher an dieses Stickstoffatom gebunden ist, einen Rest dar, wie er oben definiert ist, und kein freies Elektronenpaar. Die folgenden Strukturen erläutern nochmals, was unter einem Stickstoffatom mit abgesättigter Valenz verstanden wird:



30 Eine Arylgruppe im Sinne dieser Erfindung enthält 6 bis 40 C-Atome; eine Heteroarylgruppe im Sinne dieser Erfindung enthält 2 bis 40 C-Atome und mindestens ein Heteroatom, mit der Maßgabe, dass die Summe aus C-Atomen und Heteroatomen mindestens 5 ergibt. Die Heteroatome sind bevorzugt ausgewählt aus N, O und/oder S. Dabei wird unter einer Arylgruppe bzw. Heteroarylgruppe entweder ein einfacher aromatischer

35 Cyclus, also Benzol, bzw. ein einfacher heteroaromatischer Cyclus,



beispielsweise Pyridin, Pyrimidin, Thiophen, etc., oder eine kondensierte Aryl- oder Heteroarylgruppe, beispielsweise Naphthalin, Anthracen, Phenanthren, Chinolin, Isochinolin, etc., verstanden.

5 Die Liganden können auch über ein Carben-Kohlenstoffatom an das Metall binden. Ein cyclisches Carben im Sinne dieser Erfindung ist eine cyclische Gruppe, welche über ein neutrales C-Atom an das Metall bindet. Bevorzugt sind hierbei Arduengo-Carbene, also solche Carbene, bei welchen an das Carben-C-Atom zwei Stickstoffatome gebunden sind. Dabei wird ein Fünfring-Arduengo-Carben bzw. ein anderes ungesättigtes Fünfring-  
10 Carben ebenfalls als eine Arylgruppe im Sinne dieser Erfindung angesehen. In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung enthält das cyclische Carben, welches an das Metall koordiniert, genau zwei Stickstoffatome, die an das Carben-C-Atom binden, aber keine weiteren Stickstoffatome.

15 Ein aromatisches Ringsystem im Sinne dieser Erfindung enthält 6 bis 60 C-Atome im Ringsystem. Ein heteroaromatisches Ringsystem im Sinne dieser Erfindung enthält 1 bis 60 C-Atome und mindestens ein Heteroatom im Ringsystem, mit der Maßgabe, dass die Summe aus C-Atomen und  
20 Heteroatomen mindestens 5 ergibt. Die Heteroatome sind bevorzugt ausgewählt aus N, O und/oder S. Unter einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem im Sinne dieser Erfindung soll ein System verstanden werden, das nicht notwendigerweise nur Aryl- oder Heteroarylgruppen enthält, sondern in dem auch mehrere Aryl- oder Heteroarylgruppen durch eine nicht-aromatische Einheit (bevorzugt weniger als 10 %  
25 der von H verschiedenen Atome), wie z. B. ein  $sp^3$ -hybridisiertes C-, N- oder O-Atom oder eine Carbonylgruppe, unterbrochen sein können. So sollen beispielsweise auch Systeme wie 9,9'-Spirobifluoren, 9,9-Diarylfuoren, Triarylammin, Diarylether, Stilben, etc. als aromatische Ringsysteme  
30 im Sinne dieser Erfindung verstanden werden, und ebenso Systeme, in denen zwei oder mehrere Arylgruppen beispielsweise durch eine lineare oder cyclische Alkylgruppe oder durch eine Silylgruppe unterbrochen sind.

35

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

5 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, n-Butyl, i-Butyl, s-Butyl, t-Butyl, 2-Methylbutyl, n-Pentyl, s-Pentyl, tert-Pentyl, 2-Pentyl, Cyclopentyl, n-Hexyl, s-Hexyl, tert-Hexyl, 2-Hexyl, 3-Hexyl, Cyclohexyl, 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, Trifluormethyl, Pentafluorethyl oder 2,2,2-Trifluorethyl 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. Unter einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem mit 5 - 60 aromatischen Ringatomen, welches noch jeweils mit den oben genannten Resten R substituiert sein kann und welches über beliebige Positionen am Aromaten bzw. Heteroaromaten verknüpft sein kann, werden beispielsweise Gruppen verstanden, die abgeleitet sind von Benzol, Naphthalin, Anthracen, Benzanthracen, Phenanthren, Benzophenanthren, Pyren, Chrysen, Perylen, Fluoranthren, Benzfluoranthren, Naphthacen, Pentacen, Benzpyren, Biphenyl, Biphenylen, Terphenyl, Terphenylen, Fluoren, Spirobifluoren, Dihydrophenanthren, Dihdropyren, Tetrahydropyren, cis- oder trans-Indenofluoren, cis- oder trans-Monobenzoidenofluoren, cis- oder trans-Dibenzoidenofluoren, Truxen, Isotruxen, Spirotruxen, Spiroisotruxen, Furan, Benzofuran, Isobenzofuran, Dibenzofuran, Thiophen, Benzothiophen, Isobenzothiophen, Dibenzothiophen, Pyrrol, Indol, Isoindol, Carbazol, Pyridin, Chinolin, Isochinolin, Acridin, Phenanthridin, Benzo-5,6-chinolin, Benzo-6,7-chinolin, Benzo-7,8-chinolin, Phenothiazin,

10  
15  
20  
25  
30  
35

Phenoxazin, Pyrazol, Indazol, Imidazol, Benzimidazol, Naphthimidazol, Phenanthrimidazol, Pyridimidazol, Pyrazinimidazol, Chinoxalinimidazol, Oxazol, Benzoxazol, Naphthoxazol, Anthroxazol, Phenanthroxazol, Isoxazol, 1,2-Thiazol, 1,3-Thiazol, Benzothiazol, Pyridazin, Benzopyridazin, Pyrimidin, Benzpyrimidin, Chinoxalin, 1,5-Diazaanthracen, 2,7-Diazapyren, 2,3-Diazapyren, 1,6-Diazapyren, 1,8-Diazapyren, 4,5-Diazapyren, 4,5,9,10-Tetraazaperylen, Pyrazin, Phenazin, Phenoxazin, Phenothiazin, Fluorubin, Naphthyridin, Azacarbazol, Benzocarbolin, Phenanthrolin, 1,2,3-Triazol, 1,2,4-Triazol, Benzotriazol, 1,2,3-Oxadiazol, 1,2,4-Oxadiazol, 1,2,5-Oxadiazol, 1,3,4-Oxadiazol, 1,2,3-Thiadiazol, 1,2,4-Thiadiazol, 1,2,5-Thiadiazol, 1,3,4-Thiadiazol, 1,3,5-Triazin, 1,2,4-Triazin, 1,2,3-Triazin, Tetrazol, 1,2,4,5-Tetrazin, 1,2,3,4-Tetrazin, 1,2,3,5-Tetrazin, Purin, Pteridin, Indolizin und Benzothiadiazol.

Bevorzugt sind Verbindungen gemäß Formel (1), dadurch gekennzeichnet, dass diese nicht geladen, d. h. elektrisch neutral, sind. Dies wird auf einfache Weise dadurch erreicht, dass die Ladung der Liganden L und L' so gewählt werden, dass sie die Ladung des komplexierten Metallatoms M kompensieren.

Bevorzugt sind weiterhin Verbindungen gemäß Formel (1), dadurch gekennzeichnet, dass die Summe der Valenzelektronen um das Metallatom in vierfach koordinierten Komplexen 16 und in fünffach koordinierten Komplexen 16 oder 18 und in sechsfach koordinierten Komplexen 18 beträgt. Diese Bevorzugung ist durch die besondere Stabilität dieser Metallkomplexe begründet.

In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung steht M für ein Übergangsmetall oder für ein Hauptgruppenmetall. Wenn M für ein Hauptgruppenmetall steht, dann steht es bevorzugt für ein Metall der dritten, vierten oder fünften Hauptgruppe, insbesondere für Zinn.

Bevorzugt sind Verbindungen gemäß Formel (1), in denen M für ein Übergangsmetall, insbesondere für ein tetrakoordiniertes, ein pentakoordiniertes oder ein hexakoordiniertes Übergangsmetall steht, besonders bevorzugt ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Chrom, Molybdän,

Wolfram, Rhenium, Ruthenium, Osmium, Rhodium, Iridium, Nickel, Palladium, Platin, Kupfer, Silber und Gold, insbesondere Molybdän, Wolfram, Rhenium, Ruthenium, Osmium, Iridium, Kupfer, Platin und Gold. Ganz besonders bevorzugt sind Iridium und Platin. Die Metalle können dabei in verschiedenen Oxidationsstufen vorliegen. Bevorzugt sind dabei

5 die oben genannten Metalle in den Oxidationsstufen Cr(0), Cr(II), Cr(III), Cr(IV), Cr(VI), Mo(0), Mo(II), Mo(III), Mo(IV), Mo(VI), W(0), W(II), W(III), W(IV), W(VI), Re(I), Re(II), Re(III), Re(IV), Ru(II), Ru(III), Os(II), Os(III), Os(IV), Rh(I), Rh(III), Ir(I), Ir(III), Ir(IV); Ni(0), Ni(II), Ni(IV), Pd(II), Pt(II), Pt(IV), Cu(I), Cu(II), Cu(III), Ag(I), Ag(II), Au(I), Au(III) und Au(V);

10 besonders bevorzugt sind Mo(0), W(0), Re(I), Ru(II), Os(II), Rh(III), Cu(I), Ir(III) und Pt(II).

In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung ist M ein tetrakoordiniertes Metall, und der Index n steht für 1 oder 2. Wenn der Index n = 1 ist,

15 sind noch ein bidentater oder zwei monodentate Liganden L', bevorzugt ein bidentater Ligand L', an das Metall M koordiniert. Wenn der Index n = 2 ist, ist der Index m = 0.

In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform der Erfindung ist M ein hexakoordiniertes Metall, und der Index n steht für 1, 2 oder 3, bevorzugt für 2 oder 3. Wenn der Index n = 1 ist, sind noch vier monodentate oder zwei bidentate oder ein bidentater und zwei monodentate oder ein tri-

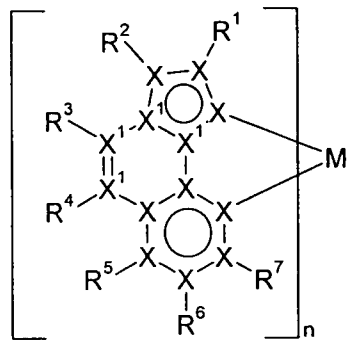
20 dentater und ein monodentater oder ein tetradentater Ligand L', bevorzugt zwei bidentate Liganden L', an das Metall koordiniert. Wenn der Index

25 n = 2 ist, sind noch ein bidentater oder zwei monodentate Liganden L', bevorzugt ein bidentater Ligand L', an das Metall koordiniert. Wenn der Index n = 3 ist, ist der Index m = 0.

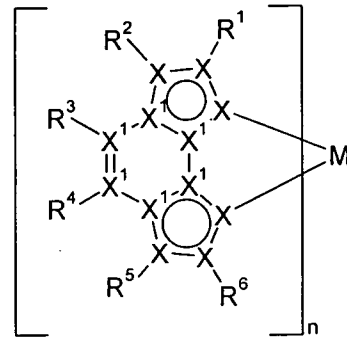
In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung enthält der mittlere

30 Ring des Liganden L mindestens ein Stickstoffatom. Bevorzugte Teilstrukturen der Formel (2) und der Formel (3) sind also die Strukturen der folgenden Formeln (2a) und (3a),

5



Formel (2a)



Formel (3a)

10

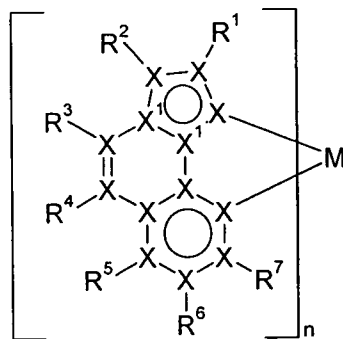
wobei die verwendeten Symbole und Indizes die oben genannten Bedeutungen aufweisen und weiterhin gilt:

X<sup>1</sup> ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten C oder N, mit der Maßgabe, dass mindestens eine Gruppe X<sup>1</sup> für N steht.

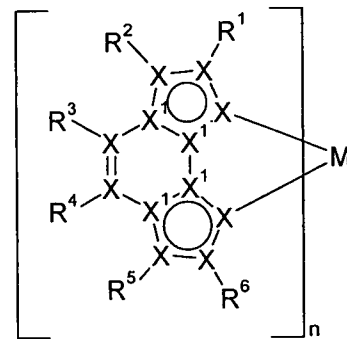
15

In einer besonders bevorzugten Ausführungsform der Erfindung enthält der mittlere Ring des Liganden L mindestens ein Stickstoffatom, welches in zwei Ringen gebunden ist. Bevorzugte Teilstrukturen der Formel (2a) und der Formel (3a) sind also die Strukturen der folgenden Formeln (2b) und (3b),

20



Formel (2b)



Formel (3b)

30

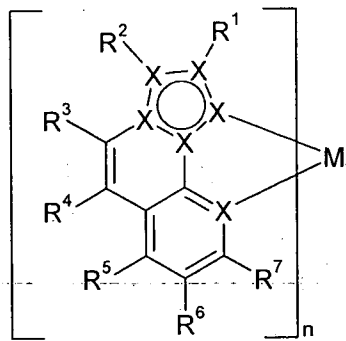
wobei die verwendeten Symbole und Indizes die oben genannten Bedeutungen aufweisen.

35

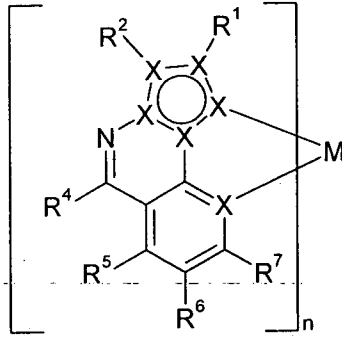
In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung sind die Teilstrukturen der Formel (2) gewählt aus den Strukturen der folgenden Formeln (4), (5) und (6) und die Teilstrukturen der Formel (3) aus den Strukturen der folgenden Formel (7) und (8),

5

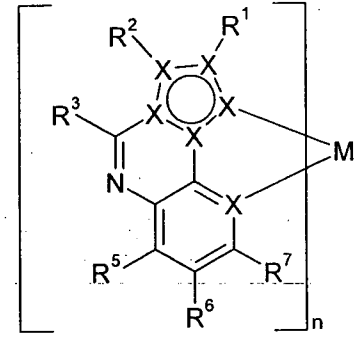
10



Formel (4)



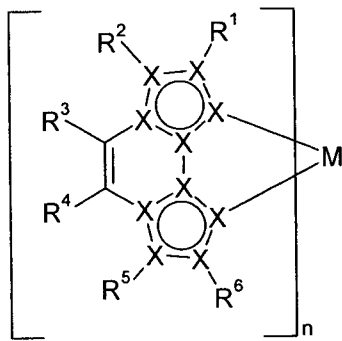
Formel (5)



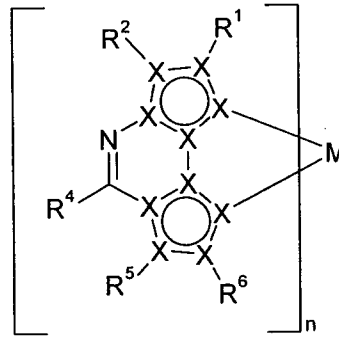
Formel (6)

15

20



Formel (7)



Formel (8)

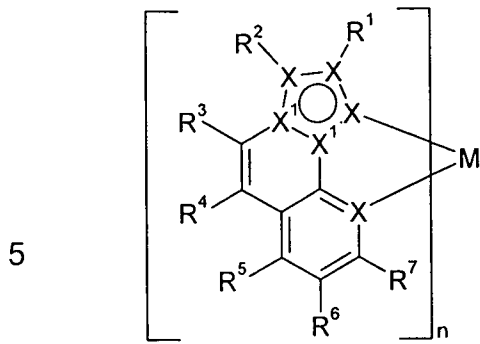
25

wobei die Symbole und Indizes die oben angegebenen Bedeutungen haben.

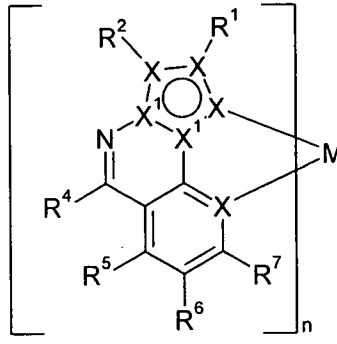
30

In einer besonders bevorzugten Ausführungsform der Erfindung sind die Teilstrukturen der Formeln (4) bis (8) gewählt aus den Strukturen der folgenden Formeln (4a) bis (8a), in denen der mittlere Ring des Liganden mindestens ein Stickstoffatom aufweist, welches in zwei Ringen gebunden ist:

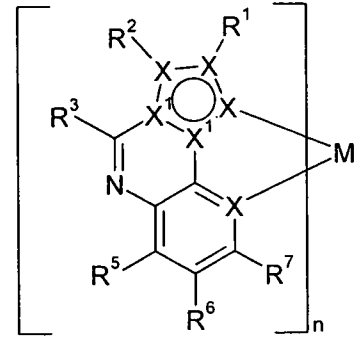
35



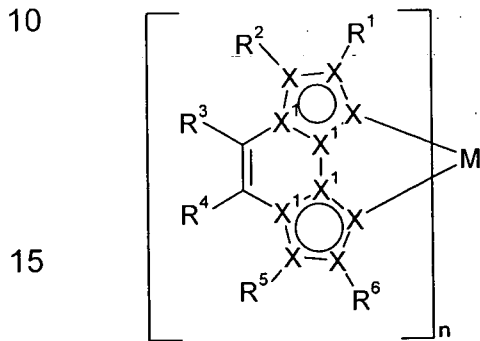
Formel (4a)



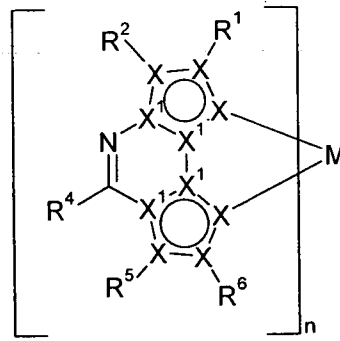
Formel (5a)



Formel (6a)



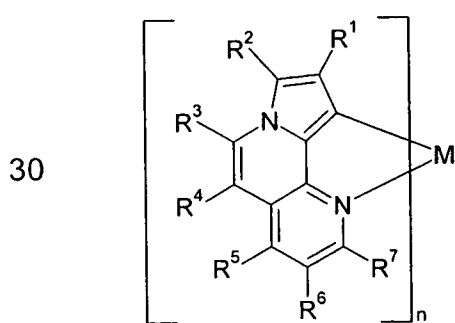
Formel (7a)



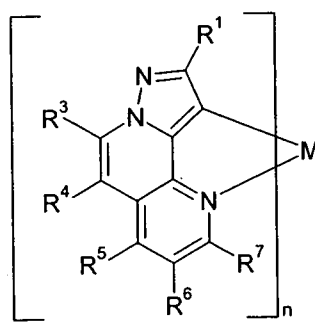
Formel (8a)

20 wobei die Symbole und Indizes die oben angegebenen Bedeutungen haben.

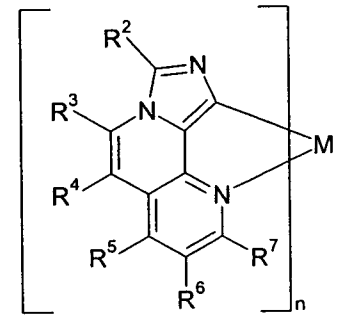
Eine besonders bevorzugte Ausführungsform der Teilstrukturen gemäß den Formeln (4) bis (8) und (4a) bis (8a) sind die Strukturen gemäß den  
25 folgenden Formeln (9) bis (77),



Formel (9)



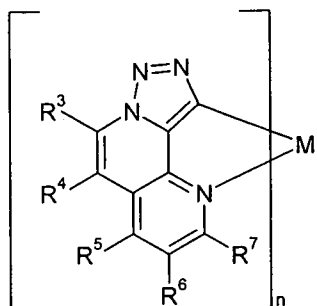
Formel (10)



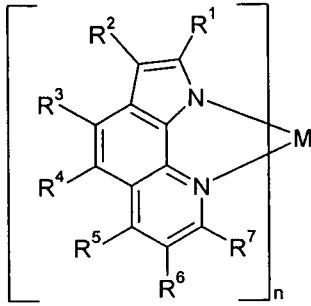
Formel (11)

35

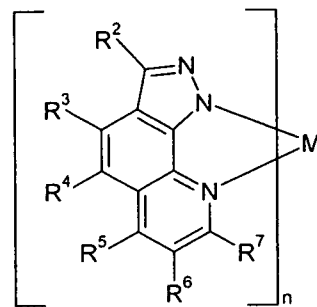
5



Formel (12)

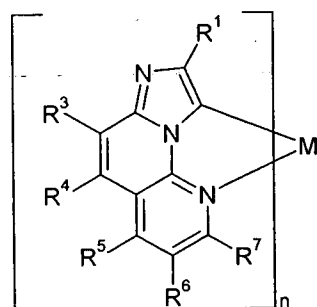


Formel (13)

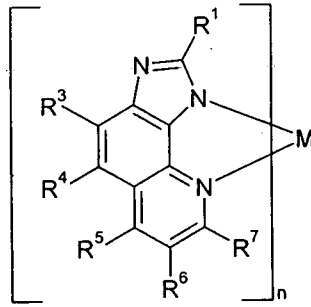


Formel (14)

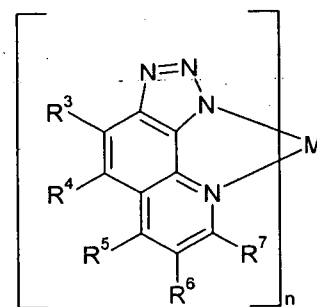
10



Formel (15)



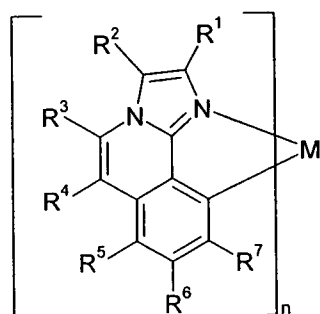
Formel (16)



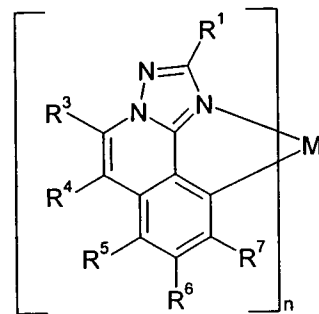
Formel (17)

15

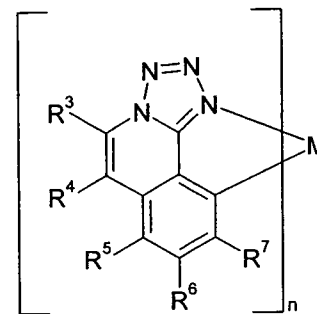
20



Formel (18)



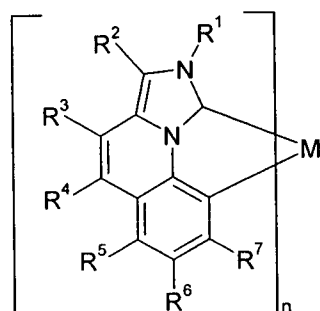
Formel (19)



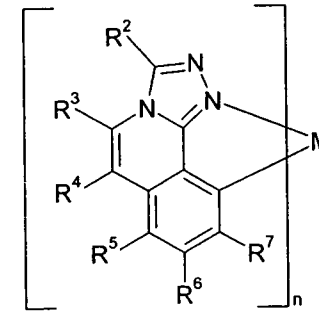
Formel (20)

25

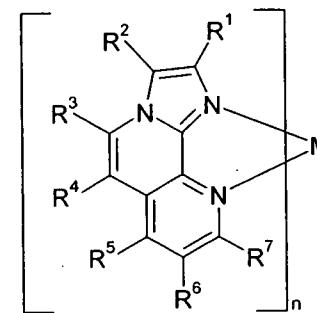
30



Formel (21)



Formel (22)

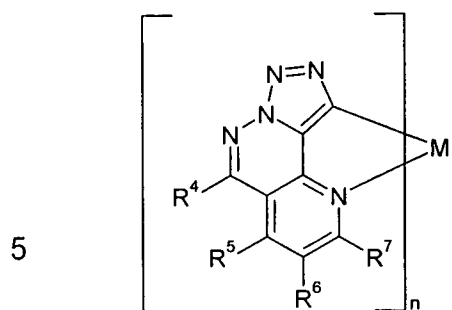


Formel (23)

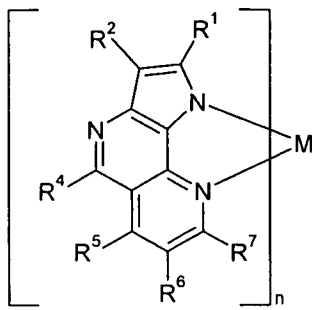
35



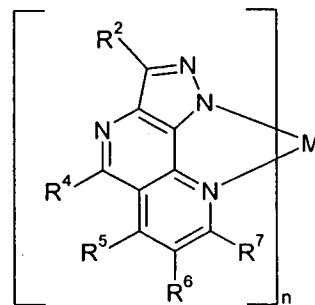




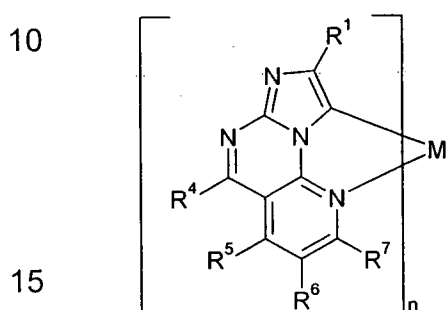
Formel (35)



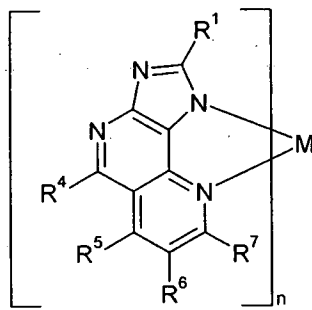
Formel (36)



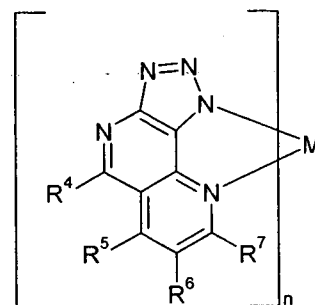
Formel (37)



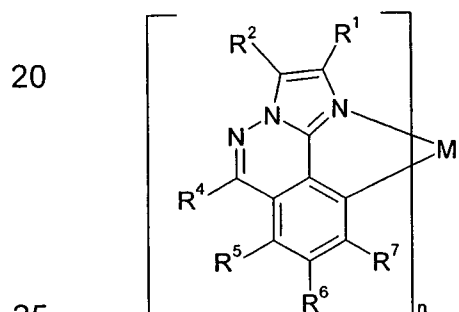
Formel (38)



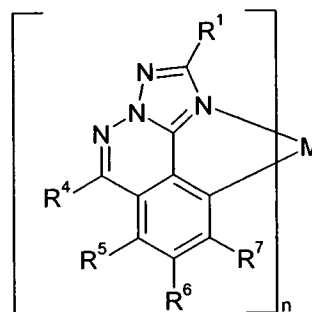
Formel (39)



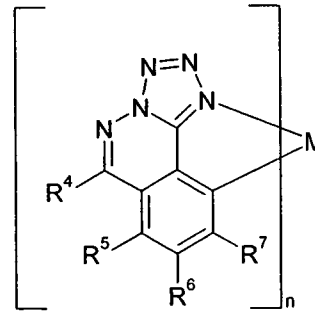
Formel (40)



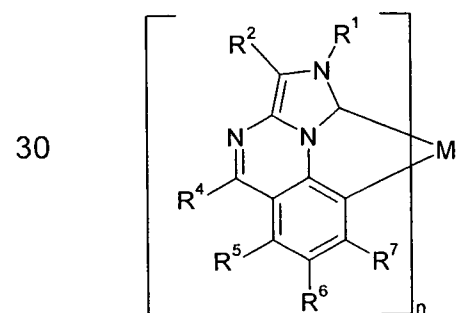
Formel (41)



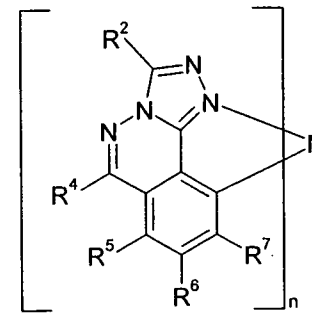
Formel (42)



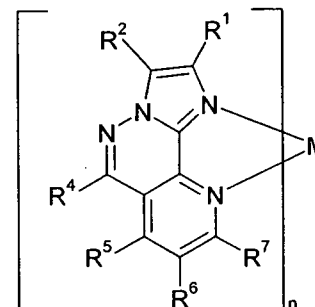
Formel (43)



Formel (44)



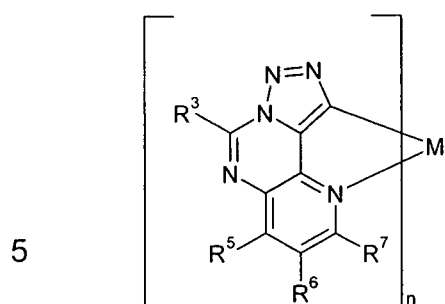
Formel (45)



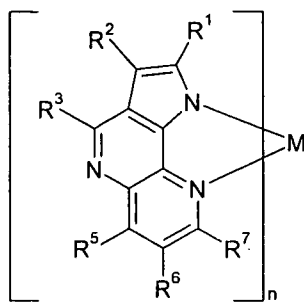
Formel (46)

35

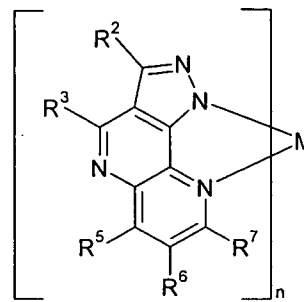




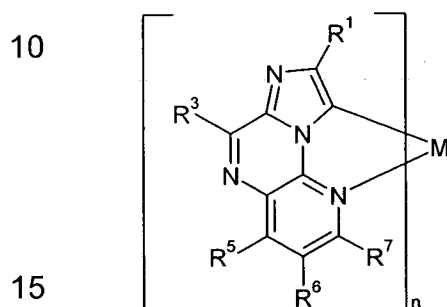
Formel (58)



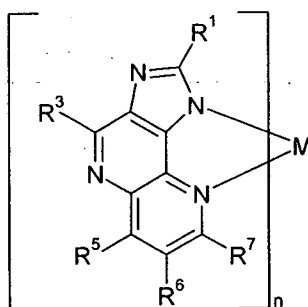
Formel (59)



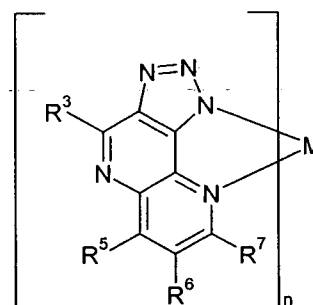
Formel (60)



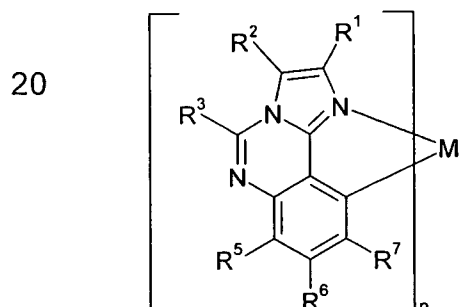
Formel (61)



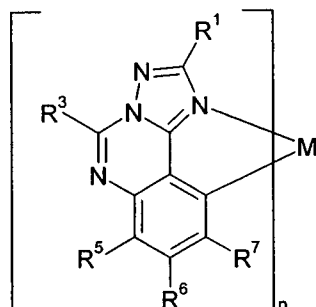
Formel (62)



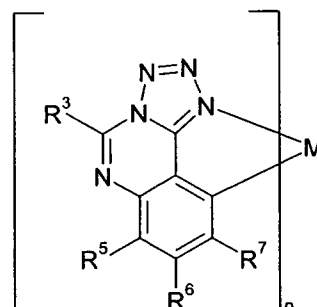
Formel (63)



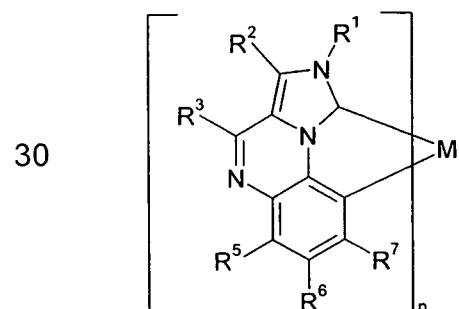
Formel (64)



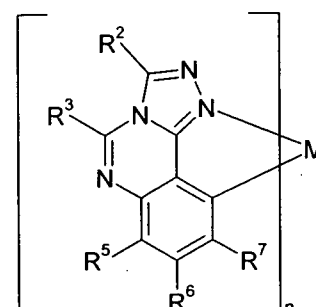
Formel (65)



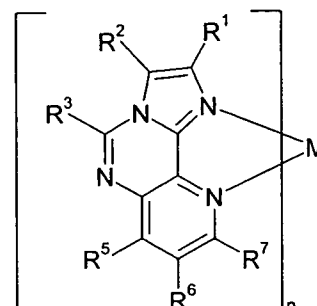
Formel (66)



Formel (67)

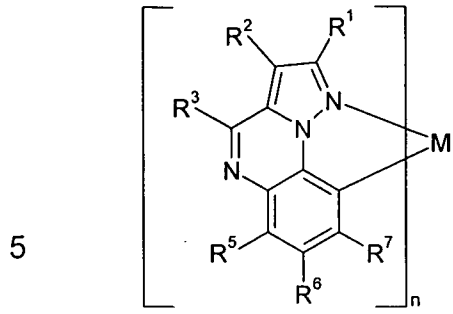


Formel (68)

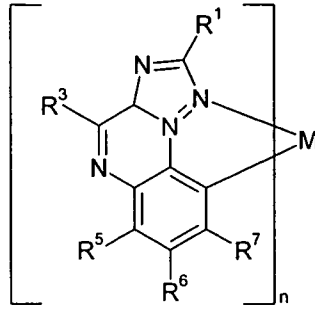


Formel (69)

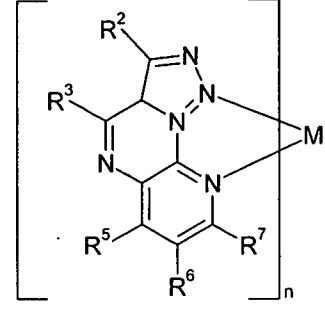
35



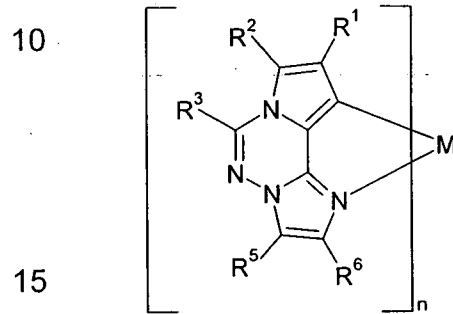
Formel (70)



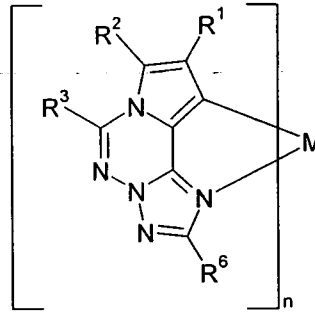
Formel (71)



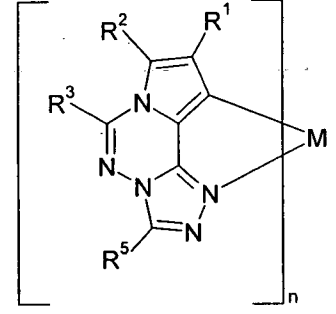
Formel (72)



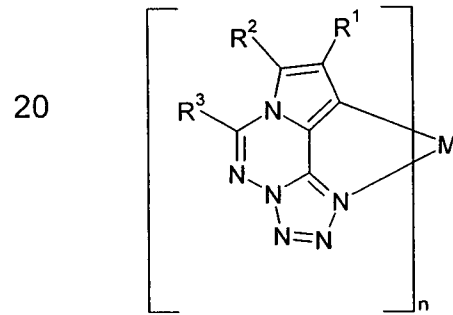
Formel (73)



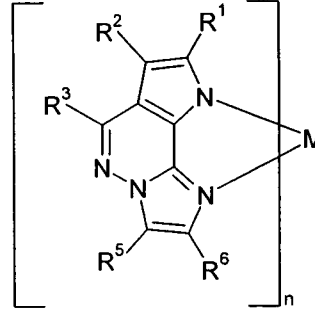
Formel (74)



Formel (75)



Formel (76)



Formel (77)

wobei die verwendeten Symbole und Indizes die oben angegebenen Bedeutungen haben.

30

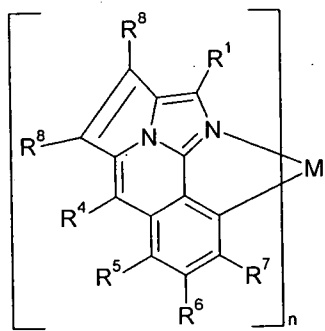
In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung ist mindestens einer der Substituenten R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> und/oder R<sup>4</sup>, besonders bevorzugt R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> und/oder R<sup>4</sup>, ungleich Wasserstoff oder Deuterium. Ganz besonders bevorzugt ist der Substituent R<sup>2</sup> ungleich Wasserstoff oder Deuterium. In einer ganz besonders bevorzugten Ausführungsform der Erfindung ist daher der Substituent R<sup>2</sup> ungleich Wasserstoff oder Deuterium und die

35

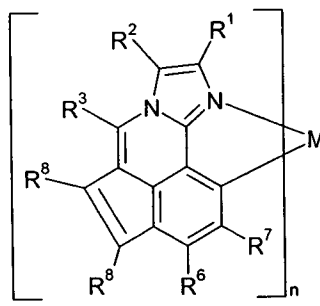
Substituenten  $R^3$  und  $R^4$  sind gleich Wasserstoff oder Deuterium oder der Substituent  $R^3$  ist gleich Wasserstoff oder Deuterium und der Substituent  $R^4$  ist ungleich Wasserstoff oder Deuterium oder der Substituent  $R^3$  ist ungleich Wasserstoff oder Deuterium und der Substituent  $R^4$  ist gleich Wasserstoff oder Deuterium. Diese Bevorzugung wird mit der höheren Stabilität der entsprechenden Metallkomplexe begründet.

Weiterhin sind größere kondensierte Strukturen durch Ringbildung der Substituenten möglich. Dadurch sind beispielsweise Strukturen der folgenden Formeln (78) bis (89) erhältlich,

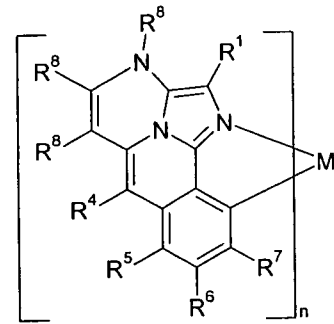
10



Formel (78)



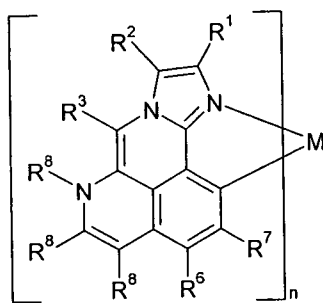
Formel (79)



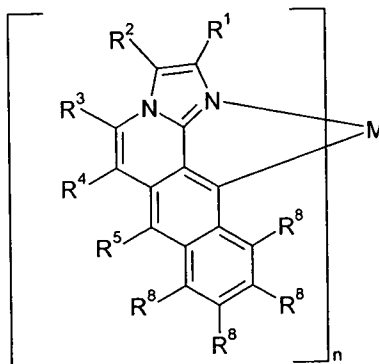
Formel (80)

15

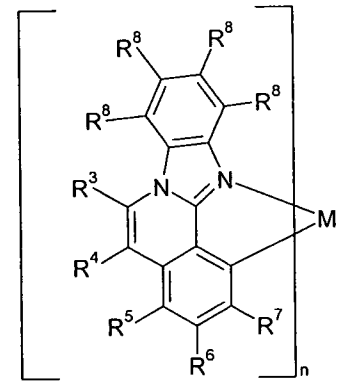
20



Formel (81)



Formel (82)

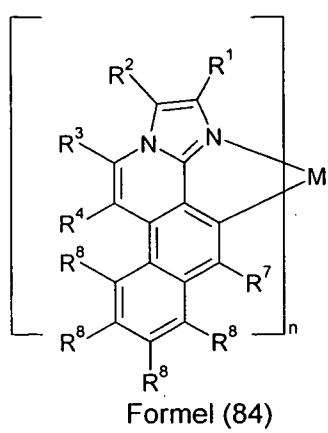


Formel (83)

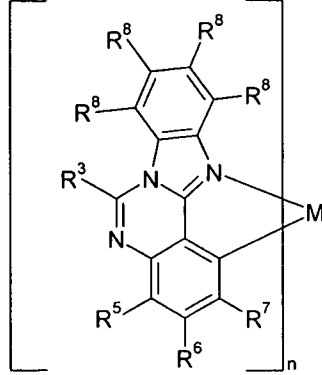
30

35

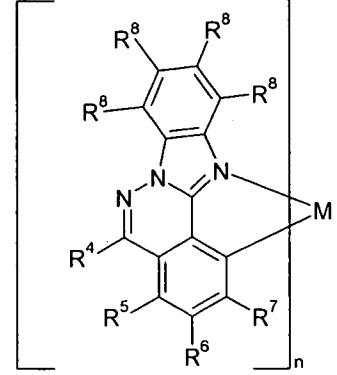
5



Formel (84)

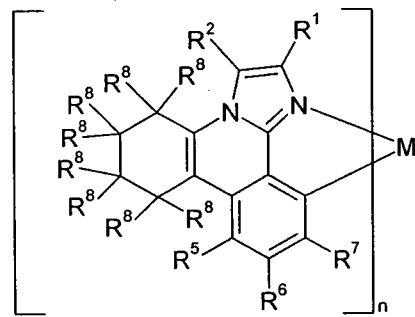


Formel (85)

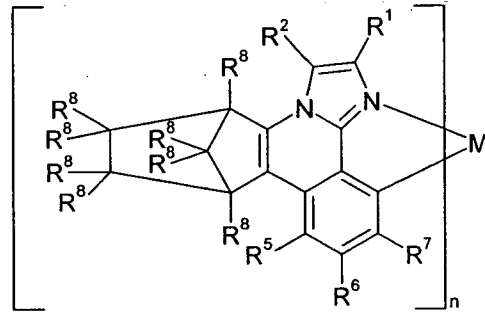


Formel (86)

10

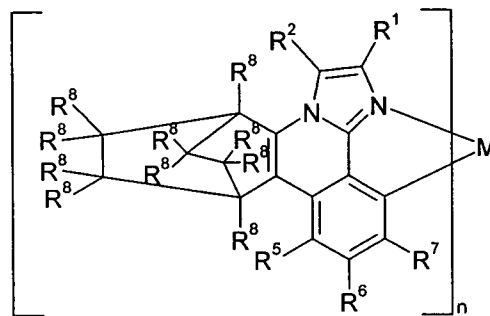


Formel (87)



Formel (88)

20



Formel (89)

25

wobei die verwendeten Symbole und Indizes die oben genannten  
 Bedeutungen haben. Dabei steht R<sup>8</sup> in den Formeln (78) bis (89) bevor-  
 zugt für H oder eine Alkylgruppe mit 1 bis 5 C-Atomen, insbesondere für H  
 oder Methyl.

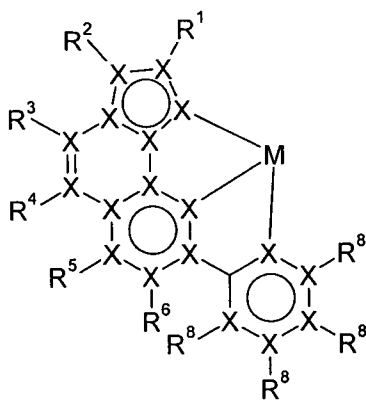
Die Formeln (78) bis (89) zeigen nur exemplarisch an einem spezifischen  
 Liganden, wie durch die Ringbildung entsprechende größere kondensierte

35

Ringsysteme zugänglich sind. Ganz analog ist ohne weiteres erfinderisches Zutun die Ringbildung mit den anderen erfindungsgemäßen Strukturen möglich, beispielsweise mit den Strukturen der Formeln (9) bis (77).

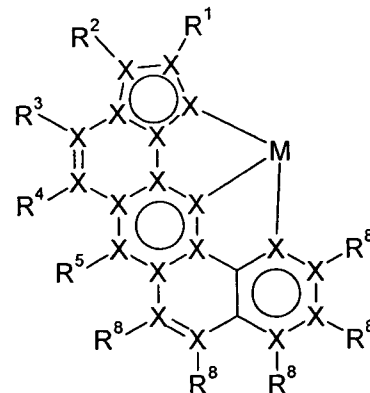
- 5 Weiterhin ist es möglich, dass der Substituent  $R^6$  bzw.  $R^7$ , der in ortho-Position zur Metallkoordination steht, eine koordinierende Gruppe darstellt, die ebenfalls an das Metall M koordiniert. Bevorzugte koordinierende Gruppen  $R^7$  sind Aryl- bzw. Heteroarylgruppen, beispielsweise Phenyl oder Pyridyl, Aryl- oder Alkylcyanide, Aryl- oder Alkylisocyanide, Amine oder
- 10 Amide, Alkohole oder Alkoholate, Thioalkohole oder Thioalkoholate, Phosphine, Phosphite, Carbonylfunktionen, Carboxylate, Carbamide oder Aryl- oder Alkylacetylide. Hier sind beispielsweise die Teilstrukturen ML der folgenden Formeln (90) bis (97) zugänglich:

15



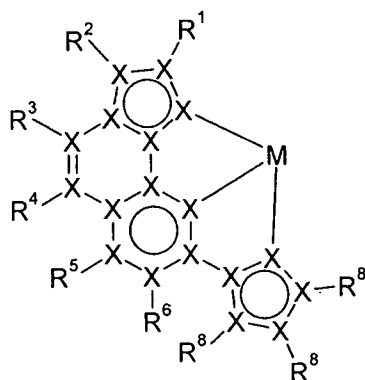
Formel (90)

20



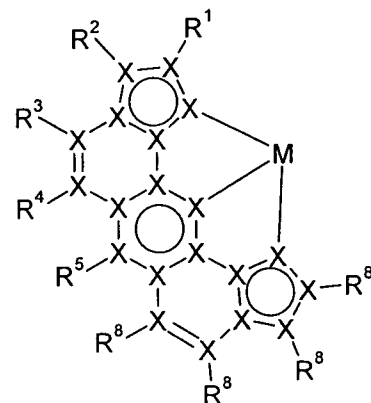
Formel (91)

25



Formel (92)

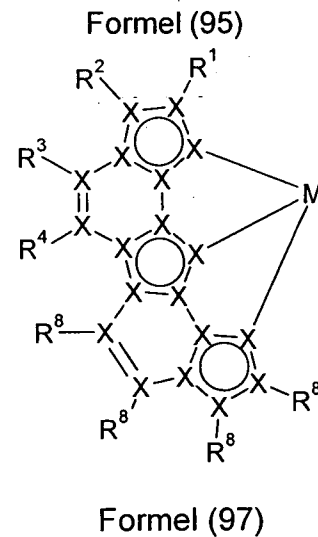
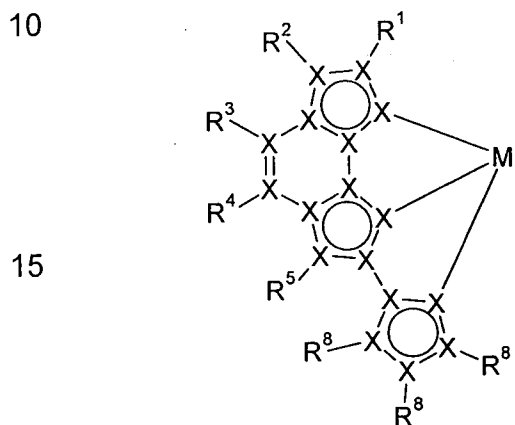
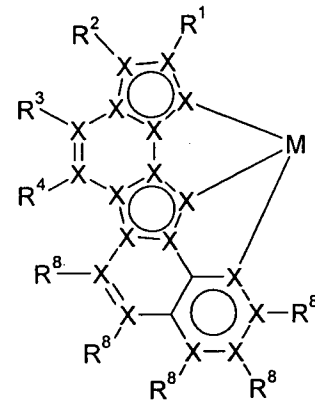
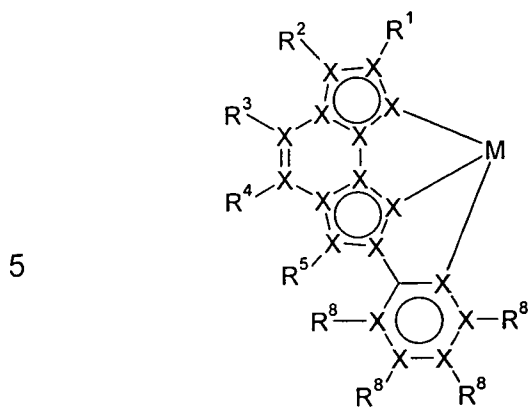
30



Formel (93)

35





20

wobei die verwendeten Symbole die oben genannten Bedeutungen haben. Dabei gelten für die Liganden die oben genannten Bevorzugungen.

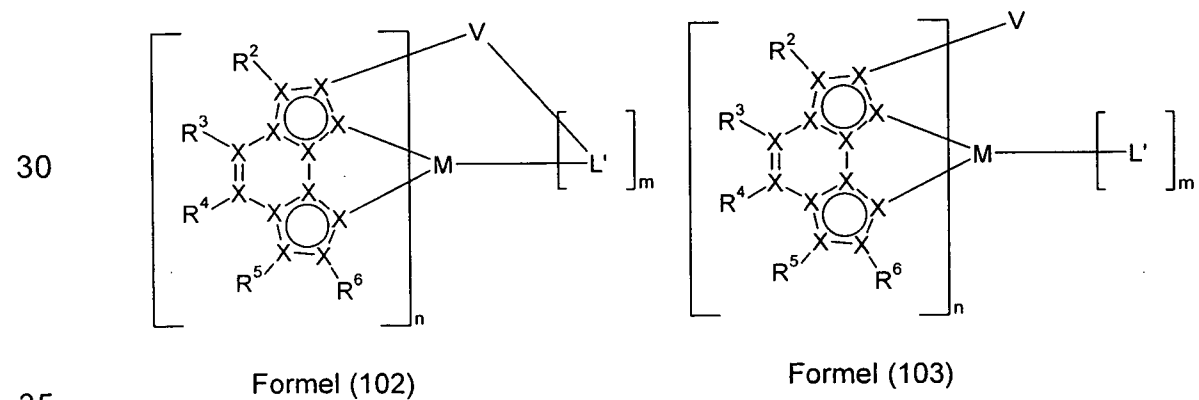
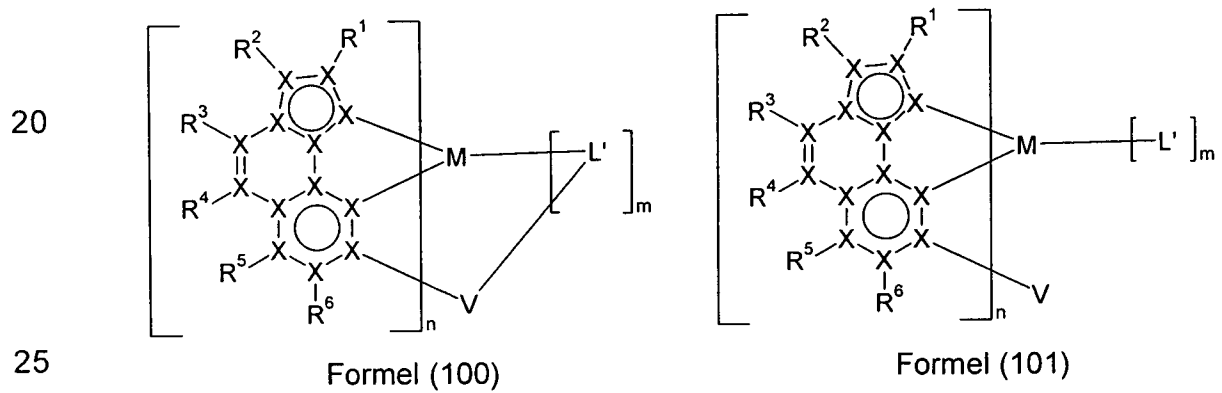
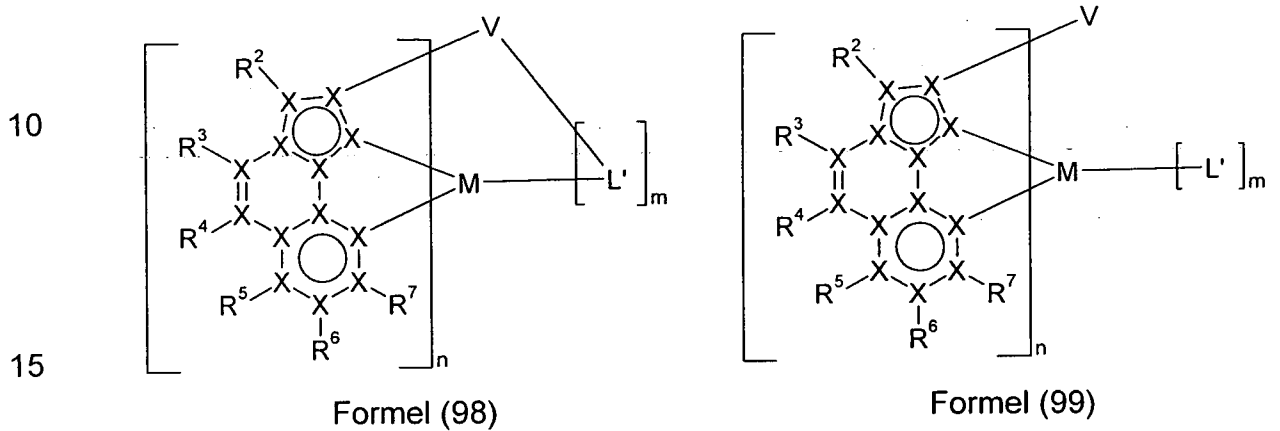
25 Die Formeln (90) bis (97) zeigen nur exemplarisch, wie der Substituent  $R^6$  bzw.  $R^7$  zusätzlich an das Metall koordinieren kann. Ganz analog sind ohne weiteres erfindarisches Zutun auch andere an das Metall koordinierende Gruppen  $R^6$  bzw.  $R^7$  möglich.

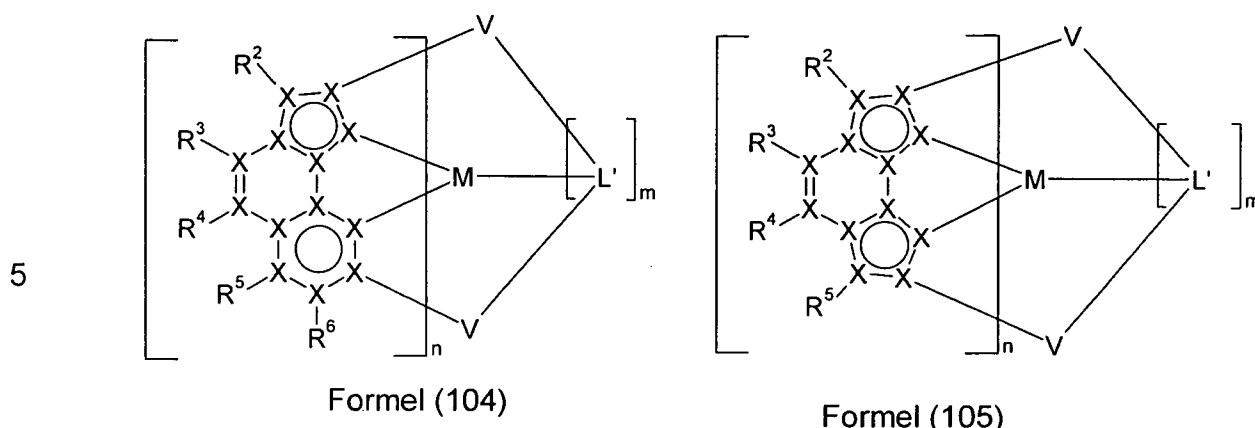
30 Wie oben beschrieben, kann auch statt einem der Reste  $R^1$  bis  $R^7$  eine verbrückende Einheit V vorhanden sein, die diesen Liganden L mit einem oder mehreren weiteren Liganden L bzw. L' verknüpft. In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung ist statt einem der Reste  $R^1$  bis  $R^7$ , insbesondere statt  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^6$  oder  $R^7$ , eine verbrückende Einheit V vorhanden, so dass die Liganden dreizähligen oder mehrzähligen oder polypodalen Charakter aufweisen. Dabei enthält Formel (2) bevorzugt statt

35

R<sup>1</sup> bzw. R<sup>7</sup> eine verbrückende Einheit V und Formel (3) enthält bevorzugt statt R<sup>1</sup> bzw. R<sup>6</sup> eine verbrückende Einheit V. Es können auch zwei solcher verbrückenden Einheiten V vorhanden sein. Dies führt zur Bildung makrocyclischer Liganden bzw. zur Bildung von Kryptaten.

5 Bevorzugte Strukturen mit mehrzähligen Liganden bzw. mit polydentaten Liganden sind die Metallkomplexe der folgenden Formeln (98) bis (105),





10 wobei die verwendeten Symbole die oben genannten Bedeutungen aufweisen und V bevorzugt eine verbrückende Einheit darstellt, enthaltend 1 bis 80 Atome aus der dritten, vierten, fünften und/oder sechsten Hauptgruppe (Gruppe 13, 14, 15 oder 16 gemäß IUPAC) oder einen 3- bis 6-

15 gliedrigen Homo- oder Heterocyclus, die die Teilliganden L miteinander oder L mit L' miteinander kovalent verbindet. Dabei kann die verbrückende Einheit V auch unsymmetrisch aufgebaut sein, d. h. die Verknüpfung von V zu L bzw. L' muss nicht identisch sein. Die verbrückende Einheit V kann neutral, einfach, zweifach oder dreifach negativ oder einfach, zweifach oder dreifach positiv geladen sein. Bevorzugt ist V neutral oder einfach negativ oder einfach positiv geladen. Dabei wird die Ladung von V

20 bevorzugt so gewählt, dass insgesamt ein neutraler Komplex entsteht. Dabei gelten für die Liganden die oben für die Teilstruktur  $ML_n$  genannten Bevorzugungen.

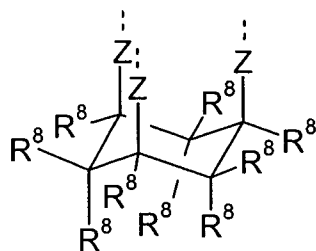
25 Die genaue Struktur und chemische Zusammensetzung der Gruppe V hat keinen wesentlichen Einfluss auf die elektronischen Eigenschaften des Komplexes, da es insbesondere die Aufgabe dieser Gruppe ist, durch die Verbrückung von L miteinander bzw. mit L' die chemische und thermische Stabilität der Komplexe zu erhöhen.

30 Wenn V eine trivalente Gruppe ist, also drei Liganden L miteinander bzw. zwei Liganden L mit L' oder einen Liganden L mit zwei Liganden L' verbrückt, ist V bevorzugt gleich oder verschieden bei jedem Auftreten gewählt aus der Gruppe bestehend aus  $B$ ,  $B(R^8)^-$ ,  $B(C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)B(C(R^8)_2)_3^-$ ,  $B(O)_3$ ,  $(R^8)B(O)_3^-$ ,  $B(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)B(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^-$ ,

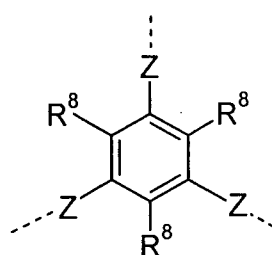
35

$B(C(R^8)_2O)_3$ ,  $(R^8)B(C(R^8)_2O)_3^-$ ,  $B(OC(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)B(OC(R^8)_2)_3^-$ ,  $C(R^8)$ ,  $CO^-$ ,  
 $CN(R^8)_2$ ,  $(R^8)C(C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(O)_3$ ,  $(R^8)C(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(C(R^8)_2O)_3$ ,  
 $(R^8)C(OC(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(Si(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(Si(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  
 $(R^8)C(C(R^8)_2Si(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(Si(R^8)_2Si(R^8)_2)_3$ ,  $Si(R^8)$ ,  $(R^8)Si(C(R^8)_2)_3$ ,  
 $(R^8)Si(O)_3$ ,  $(R^8)Si(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(OC(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(C(R^8)_2O)_3$ ,  
5  $(R^8)Si(Si(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(Si(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(C(R^8)_2Si(R^8)_2)_3$ ,  
 $(R^8)Si(Si(R^8)_2Si(R^8)_2)_3$ ,  $N$ ,  $NO$ ,  $N(R^8)^+$ ,  $N(C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)N(C(R^8)_2)_3^+$ ,  
 $N(C=O)_3$ ,  $N(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)N(C(R^8)_2C(R^8)_2)^+$ ,  $P$ ,  $P(R^8)^+$ ,  $PO$ ,  $PS$ ,  $PSe$ ,  
 $PTe$ ,  $P(O)_3$ ,  $PO(O)_3$ ,  $P(OC(R^8)_2)_3$ ,  $PO(OC(R^8)_2)_3$ ,  $P(C(R^8)_2)_3$ ,  
 $P(R^8)(C(R^8)_2)_3^+$ ,  $PO(C(R^8)_2)_3$ ,  $P(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $P(R^8)(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^+$ ,  
10  $PO(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $As$ ,  $As(R^8)^+$ ,  $AsO$ ,  $AsS$ ,  $AsSe$ ,  $AsTe$ ,  $As(O)_3$ ,  $AsO(O)_3$ ,  
 $As(OC(R^8)_2)_3$ ,  $AsO(OC(R^8)_2)_3$ ,  $As(C(R^8)_2)_3$ ,  $As(R^8)(C(R^8)_2)_3^+$ ,  $AsO(C(R^8)_2)_3$ ,  
 $As(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $As(R^8)(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^+$ ,  $AsO(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $Sb$ ,  
 $Sb(R^8)^+$ ,  $SbO$ ,  $SbS$ ,  $SbSe$ ,  $SbTe$ ,  $Sb(O)_3$ ,  $SbO(O)_3$ ,  $Sb(OC(R^8)_2)_3$ ,  
 $SbO(OC(R^8)_2)_3$ ,  $Sb(C(R^8)_2)_3$ ,  $Sb(R^8)(C(R^8)_2)_3^+$ ,  $SbO(C(R^8)_2)_3$ ,  
15  $Sb(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $Sb(R^8)(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^+$ ,  $SbO(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $Bi$ ,  $Bi(R^8)^+$ ,  
 $BiO$ ,  $BiS$ ,  $BiSe$ ,  $BiTe$ ,  $Bi(O)_3$ ,  $BiO(O)_3$ ,  $Bi(OC(R^8)_2)_3$ ,  $BiO(OC(R^8)_2)_3$ ,  
 $Bi(C(R^8)_2)_3$ ,  $Bi(R^8)(C(R^8)_2)_3^+$ ,  $BiO(C(R^8)_2)_3$ ,  $Bi(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  
 $Bi(R^8)(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^+$ ,  $BiO(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $S^+$ ,  $S(C(R^8)_2)_3^+$ ,  
 $S(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^+$ ,  $Se^+$ ,  $Se(C(R^8)_2)_3^+$ ,  $Se(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^+$ ,  $Te^+$ ,  $Te(C(R^8)_2)_3^+$ ,  
20  $Te(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^+$ ,  
oder eine Einheit gemäß Formel (106), (107), (108) oder (109),

25

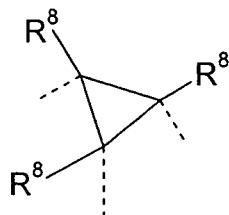


Formel (106)

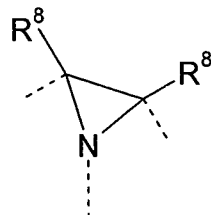


Formel (107)

30



Formel (108)

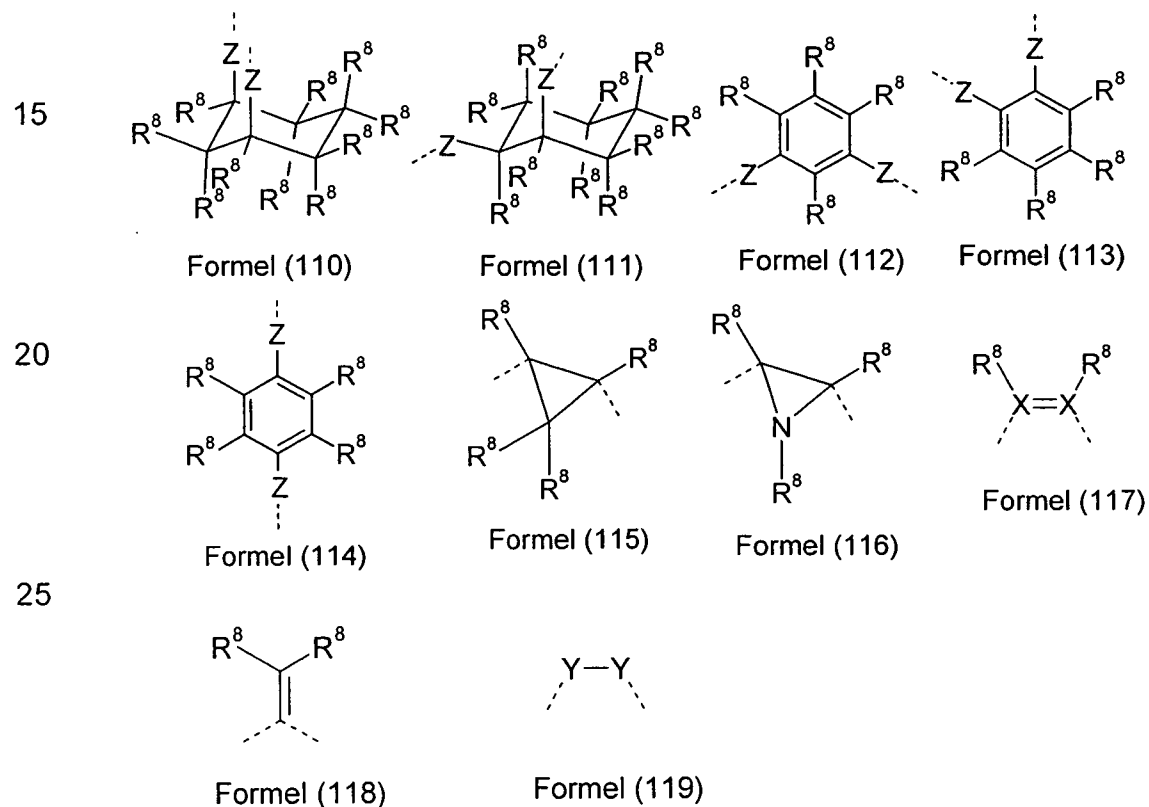


Formel (109)

35

wobei die gestrichelten Bindungen jeweils die Bindung zu den Teilliganden L bzw. L' andeuten und Z gleich oder verschieden bei jedem Auftreten ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus einer Einfachbindung, O, S, S(=O), S(=O)<sub>2</sub>, NR<sup>8</sup>, PR<sup>8</sup>, P(=O)R<sup>8</sup>, P(=NR<sup>8</sup>), C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, C(=O), C(=NR<sup>8</sup>), C=C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, Si(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub> oder BR<sup>8</sup>. Die weiteren verwendeten Symbole haben die oben genannten Bedeutungen.

Wenn V eine bivalente Gruppe ist, also zwei Liganden L miteinander bzw. einen Liganden L mit L' verbrückt, ist V bevorzugt gleich oder verschieden bei jedem Auftreten gewählt aus der Gruppe bestehend aus BR<sup>8</sup>, B(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub><sup>-</sup>, C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, C(=O), Si(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, NR<sup>8</sup>, PR<sup>8</sup>, P(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub><sup>+</sup>, P(=O)(R<sup>8</sup>), P(=S)(R<sup>8</sup>), AsR<sup>8</sup>, As(=O)(R<sup>8</sup>), As(=S)(R<sup>8</sup>), O, S, Se, oder eine Einheit gemäß Formel (110) bis (119),



wobei die gestrichelten Bindungen jeweils die Bindung zu den Teilliganden L bzw. L' andeuten, Y bei jedem Auftreten gleich oder verschieden für C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, N(R<sup>8</sup>), O oder S steht und die weiteren verwendeten Symbole jeweils die oben aufgeführten Bedeutungen haben.

Im Folgenden werden bevorzugte Liganden L' beschrieben, wie sie in Formel (1) vorkommen. Entsprechend können auch die Ligandengruppen L' gewählt sein, wenn diese über eine verbrückende Einheit V an L gebunden sind, wie in Formeln (98) bis (105) angedeutet.

- 5 Die Liganden L' sind bevorzugt neutrale, monoanionische, dianionische oder trianionische Liganden, besonders bevorzugt neutrale oder monoanionische Liganden. Sie können monodentat, bidentat, tridentat oder tetradentat sein und sind bevorzugt bidentat, weisen also bevorzugt zwei  
10 auch über eine verbrückende Gruppe V an L gebunden sein.

Bevorzugte neutrale, monodentate Liganden L' sind ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Kohlenmonoxid, Stickstoffmonoxid, Alkylcyaniden, wie z. B. Acetonitril, Arylcyaniden, wie z. B. Benzonitril, Alkylisocyaniden, wie z. B. Methylisonitril, Arylisocyaniden, wie z. B. Benzoisonitril, Aminen, wie z. B. Trimethylamin, Triethylamin, Morpholin, Phosphinen, insbesondere Halogenphosphine, Trialkylphosphine, Triarylphosphine oder Alkylarylphosphine, wie z. B. Trifluorphosphin, Trimethylphosphin, Tricyclohexylphosphin, Tri-*tert*-butylphosphin, Triphenylphosphin, Tris(pentafluorphenyl)phosphin, Dimethylphenylphosphin, Methyldiphenylphosphin, Bis(*tert*-butyl)phenylphosphin, Phosphiten, wie z. B. Trimethylphosphit, Triethylphosphit, Arsinen, wie z. B. Trifluorarsin, Trimethylarsin, Tricyclohexylarsin, Tri-*tert*-butylarsin, Triphenylarsin, Tris(pentafluorphenyl)arsin, Stibinen, wie z. B. Trifluorstibin, Trimethylstibin, Tricyclohexylstibin, Tri-*tert*-butylstibin, Triphenylstibin, Tris(pentafluorphenyl)stibin, stickstoffhaltigen Heterocyclen, wie z. B. Pyridin, Pyridazin, Pyrazin, Pyrimidin, Triazin, und Carbenen, insbesondere Arduengo-Carbenen.

Bevorzugte monoanionische, monodentate Liganden L' sind ausgewählt aus Hydrid, Deuterid, den Halogeniden F<sup>-</sup>, Cl<sup>-</sup>, Br<sup>-</sup> und I<sup>-</sup>, Alkylacetyliden, wie z. B. Methyl-C≡C<sup>-</sup>, *tert*-Butyl-C≡C<sup>-</sup>, Arylacetyliden, wie z. B. Phenyl-C≡C<sup>-</sup>, Cyanid, Cyanat, Isocyanat, Thiocyanat, Isothiocyanat, aliphatischen oder aromatischen Alkoholaten, wie z. B. Methanolat, Ethanolat, Propanolat, *iso*-Propanolat, *tert*-Butylat, Phenolat, aliphatischen oder aromatischen Thioalkoholaten, wie z. B. Methanthiolat, Ethanthiolat,

- Propanthiolat, *iso*-Propanthiolat, *tert*-Thiobutylat, Thiophenolat, Amiden, wie z. B. Dimethylamid, Diethylamid, Di-*iso*-propylamid, Morpholid, Carboxylaten, wie z. B. Acetat, Trifluoracetat, Propionat, Benzoat, Arylgruppen, wie z. B. Phenyl, Naphthyl, und anionischen, stickstoffhaltigen Heterocyclen, wie Pyrrolid, Imidazolid, Pyrazolid. Dabei sind die Alkylgruppen in diesen Gruppen bevorzugt C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>-Alkylgruppen, besonders bevorzugt C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>-Alkylgruppen, ganz besonders bevorzugt C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-Alkylgruppen. Unter einer Arylgruppe werden auch Heteroarylgruppen verstanden. Diese Gruppen sind wie oben definiert.
- Bevorzugte di- bzw. trianionische Liganden sind O<sup>2-</sup>, S<sup>2-</sup>, Carbide, welche zu einer Koordination der Form R-C≡M führen, und Nitrene, welche zu einer Koordination der Form R-N=M führen, wobei R allgemein für einen Substituenten steht, oder N<sup>3-</sup>.
- Bevorzugte neutrale oder mono- oder dianionische, bidentate oder höherdentate Liganden L' sind ausgewählt aus Diaminen, wie z. B. Ethylen-diamin, N,N,N',N'-Tetramethylethyldiamin, Propylendiamin, N,N,N',N'-Tetramethylpropylendiamin, cis- oder trans-Diaminocyclohexan, cis- oder trans-N,N,N',N'-Tetramethyldiaminocyclohexan, Iminen, wie z. B. 2-[1-(Phenylimino)ethyl]pyridin, 2-[1-(2-Methylphenylimino)ethyl]pyridin, 2-[1-(2,6-Di-*iso*-propylphenylimino)ethyl]pyridin, 2-[1-(Methylimino)ethyl]pyridin, 2-[1-(ethylimino)ethyl]pyridin, 2-[1-(*iso*-Propylimino)ethyl]pyridin, 2-[1-(*Tert*-Butylimino)ethyl]pyridin, Diiminen, wie z. B. 1,2-Bis(methylimino)ethan, 1,2-Bis(ethylimino)ethan, 1,2-Bis(*iso*-propylimino)ethan, 1,2-Bis(*tert*-butylimino)ethan, 2,3-Bis(methylimino)butan, 2,3-Bis(ethylimino)butan, 2,3-Bis(*iso*-propylimino)butan, 2,3-Bis(*tert*-butylimino)butan, 1,2-Bis(phenylimino)ethan, 1,2-Bis(2-methylphenylimino)ethan, 1,2-Bis(2,6-di-*iso*-propylphenylimino)ethan, 1,2-Bis(2,6-di-*tert*-butylphenylimino)ethan, 2,3-Bis(phenylimino)butan, 2,3-Bis(2-methylphenylimino)butan, 2,3-Bis(2,6-di-*iso*-propylphenylimino)butan, 2,3-Bis(2,6-di-*tert*-butylphenylimino)butan, Heterocyclen enthaltend zwei Stickstoffatome, wie z. B. 2,2'-Bipyridin, o-Phenanthrolin, Diphosphinen, wie z. B. Bis(diphenylphosphino)methan, Bis(diphenylphosphino)ethan, Bis(diphenylphosphino)propan, Bis(diphenylphosphino)butan, Bis(dimethylphosphino)ethan, Bis(dimethylphosphino)propan, Bis(diethylphosphino)-

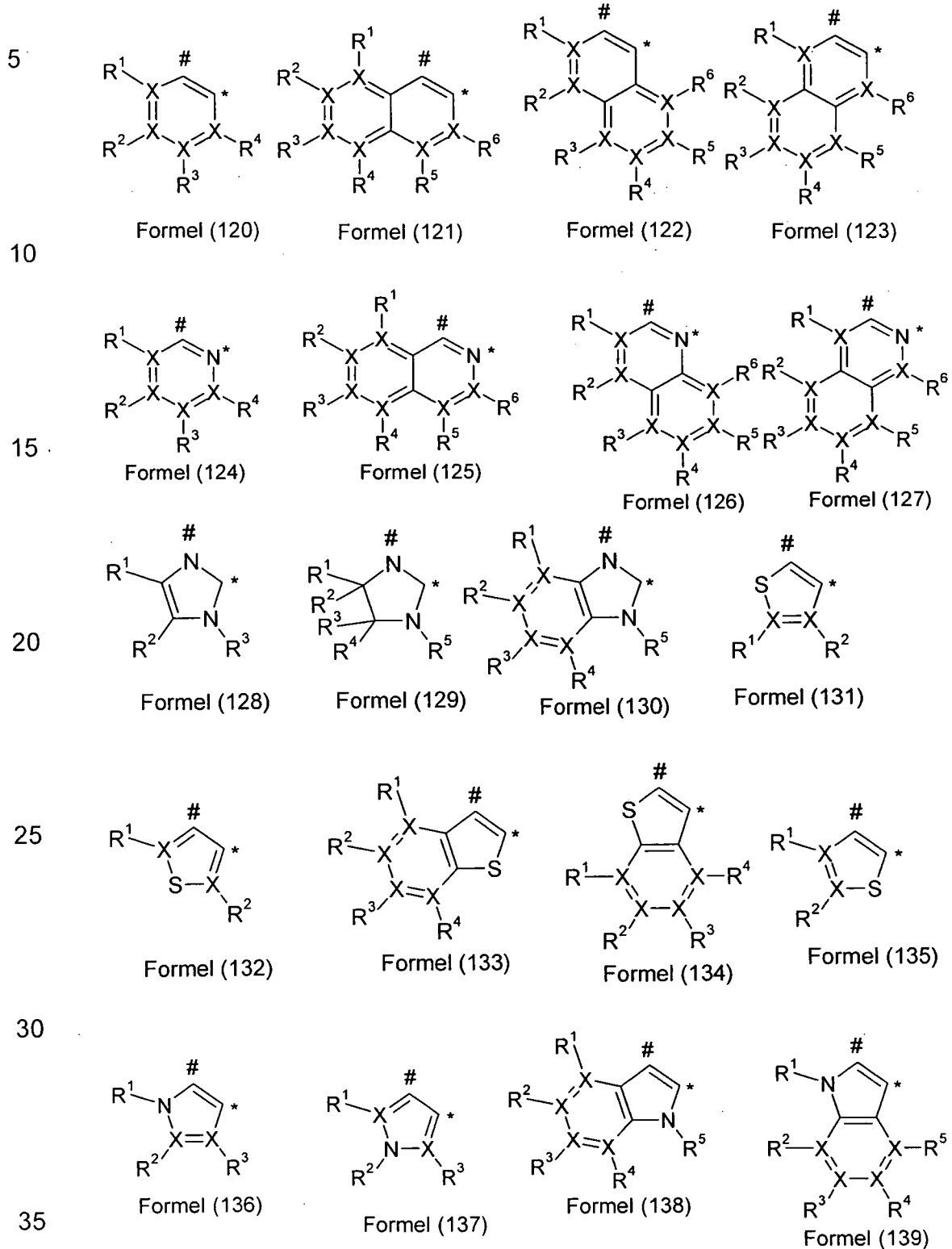
methan, Bis(diethylphosphino)ethan, Bis(diethylphosphino)propan, Bis(di-  
*tert*-butylphosphino)methan, Bis(di-*tert*-butylphosphino)ethan, Bis(*tert*-  
butylphosphino)propan, 1,3-Diketonaten abgeleitet von 1,3-Diketonen, wie  
z. B. Acetylaceton, Benzoylaceton, 1,5-Diphenylacetylaceton, Dibenzoyl-  
methan, Bis(1,1,1-trifluoracetyl)methan, 3-Ketonaten abgeleitet von  
5 3-Ketoestern, wie z. B. Acetessigsäureethylester, Carboxylate, abgeleitet  
von Aminocarbonsäuren, wie z. B. Pyridin-2-carbonsäure, Chinolin-2-  
carbonsäure, Glycin, N,N-Dimethylglycin, Alanin, N,N-Dimethylamino-  
alanin, Salicyliminaten abgeleitet von Salicyliminen, wie z. B. Methylsalicyl-  
imin, Ethylsalicylimin, Phenylsalicylimin, Dialkoholaten abgeleitet von  
10 Dialkoholen, wie z. B. Ethylenglykol, 1,3-Propylenglykol und Dithiolaten  
abgeleitet von Dithiolen, wie z. B. 1,2-Ethylendithiol, 1,3-Propylendithiol.

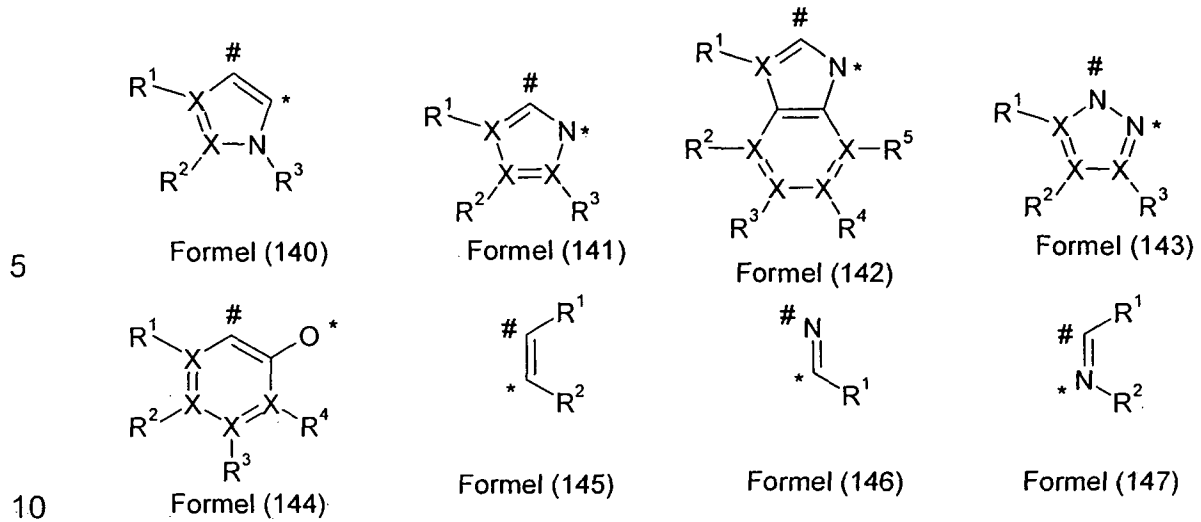
Bevorzugte tridentate Liganden sind Borate stickstoffhaltiger Heterocyclen,  
wie z. B. Tetrakis(1-imidazolyl)borat und Tetrakis(1-pyrazolyl)borat.

15 Bevorzugt sind weiterhin bidentate monoanionische, neutrale oder  
dianionische Liganden L', insbesondere monoanionische Liganden,  
welche mit dem Metall einen cyclometallierten Fünfring oder Sechsring mit  
mindestens einer Metall-Kohlenstoff-Bindung aufweisen, insbesondere  
20 einen cyclometallierten Fünfring. Dies sind insbesondere Liganden, wie sie  
allgemein im Gebiet der phosphoreszierenden Metallkomplexe für orga-  
nische Elektrolumineszenzvorrichtungen verwendet werden, also Liganden  
vom Typ Phenylpyridin, Naphthylpyridin, Phenylchinolin, Phenylisochinolin,  
etc., welche jeweils durch einen oder mehrere Reste R<sup>1</sup> bis R<sup>6</sup> substituiert  
25 sein können. Dem Fachmann auf dem Gebiet der phosphoreszierenden  
Elektrolumineszenzvorrichtungen ist eine Vielzahl derartiger Liganden  
bekannt, und er kann ohne erfinderisches Zutun weitere derartige  
Liganden als Ligand L' für Verbindungen gemäß Formel (1) auswählen.  
Generell eignet sich dafür besonders die Kombination aus zwei Gruppen,  
30 wie sie durch die folgenden Formeln (120) bis (147) dargestellt sind, wobei  
eine Gruppe bevorzugt über ein neutrales Stickstoffatom oder ein Carben-  
atom bindet und die andere Gruppe bevorzugt über ein negativ geladenes  
Kohlenstoffatom oder ein negativ geladenes Stickstoffatom bindet. Der  
Ligand L' kann dann aus den Gruppen der Formeln (120) bis (147)  
35 gebildet werden, indem diese Gruppen jeweils an der durch # gekenn-



zeichneten Position aneinander binden. Die Position, an der die Gruppen an das Metall koordinieren, sind durch \* gekennzeichnet. Diese Gruppen können auch über eine oder zwei verbrückende Einheiten V an den Liganden L gebunden sein.

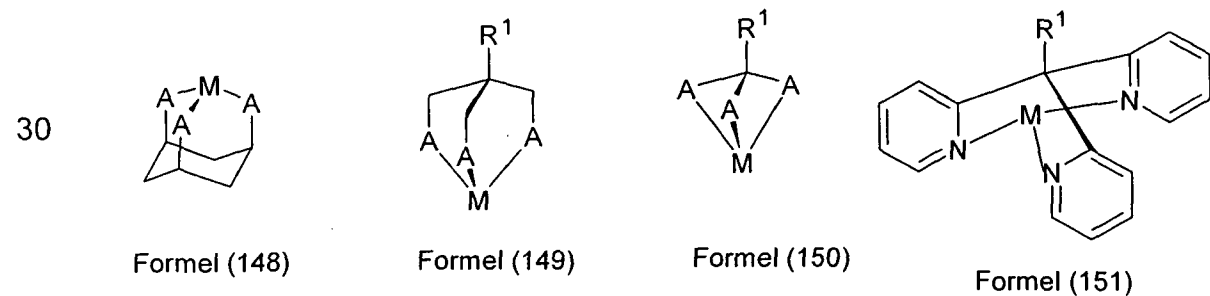




Dabei haben die verwendeten Symbole dieselbe Bedeutung wie oben beschrieben, und bevorzugt stehen maximal drei Symbole X in jeder Gruppe für N, besonders bevorzugt stehen maximal zwei Symbole X in jeder Gruppe für N, ganz besonders bevorzugt steht maximal ein Symbol X in jeder Gruppe für N. Insbesondere bevorzugt stehen alle Symbole X für C.

Ebenfalls bevorzugte Liganden L' sind  $\eta^5$ -Cyclopentadienyl,  $\eta^5$ -Pentamethylcyclopentadienyl,  $\eta^6$ -Benzol oder  $\eta^7$ -Cycloheptatrienyl, welche jeweils durch einen oder mehrere Reste R<sup>1</sup> substituiert sein können.

Ebenfalls bevorzugte Liganden L' sind 1,3,5-cis,cis-Cyclohexanderivate, insbesondere der Formel (148), 1,1,1-Tri(methylen)methanderivate, insbesondere der Formel (149) und 1,1,1-trisubstituierte Methane, insbesondere der Formel (150) und (151),



35

- 34 -

wobei in den Formeln jeweils die Koordination an das Metall M dargestellt ist,  $R^1$  die oben genannte Bedeutung hat und A, gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für  $O^-$ ,  $S^-$ ,  $COO^-$ ,  $P(R^1)_2$  oder  $N(R^1)_2$  steht.

5 Bevorzugte Reste  $R^1$  bis  $R^7$  in den oben aufgeführten Strukturen sind bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, D, F, Br,  $N(R^8)_2$ , CN,  $B(OR^8)_2$ ,  $C(=O)R^8$ ,  $P(=O)(R^8)_2$ , einer geradkettigen Alkylgruppe mit 1 bis 10 C-Atomen oder einer Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 10 C-Atomen oder einer verzweigten oder cyclischen Alkylgruppe mit 3 bis 10 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^8$  substituiert sein kann, wobei ein oder mehrere H-Atome durch D oder F ersetzt sein können, oder einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem mit 5 bis 14 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^8$  substituiert sein kann; dabei können  $R^1$  und  $R^2$  und/oder  $R^2$  und  $R^3$  und/oder  $R^4$  und  $R^5$  und/oder  $R^5$  und  $R^6$  und/oder  $R^6$  und  $R^7$  auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden; weiterhin können  $R^3$  und  $R^4$  miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden. Besonders bevorzugte Reste  $R^1$  bis  $R^7$  sind bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, D, F, Br, CN,  $B(OR^8)_2$ , einer geradkettigen Alkylgruppe mit 1 bis 5 C-Atomen, insbesondere Methyl, oder einer verzweigten oder cyclischen Alkylgruppe mit 3 bis 5 C-Atomen, insbesondere iso-Propyl oder tert-Butyl, wobei ein oder mehrere H-Atome durch D oder F ersetzt sein können, oder einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem mit 5 bis 12 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^8$  substituiert sein kann; dabei können  $R^1$  und  $R^2$  und/oder  $R^2$  und  $R^3$  und/oder  $R^4$  und  $R^5$  und/oder  $R^5$  und  $R^6$  und/oder  $R^6$  und  $R^7$  auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden; weiterhin können  $R^3$  und  $R^4$  miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden.

Die erfindungsgemäßen Komplexe können facial bzw. pseudofacial sein oder sie können meridional bzw. pseudomeridional sein.

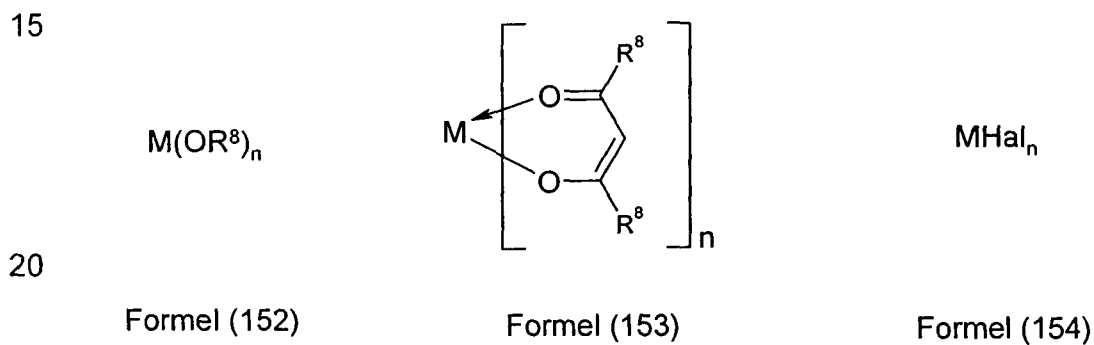
35

- 35 -

Die oben genannten bevorzugten Ausführungsformen sind beliebig miteinander kombinierbar. In einer besonders bevorzugten Ausführungsform der Erfindung gelten die oben genannten bevorzugten Ausführungsformen gleichzeitig.

5 Die erfindungsgemäßen Metallkomplexe sind prinzipiell durch verschiedene Verfahren darstellbar. Es haben sich jedoch die im Folgenden beschriebenen Verfahren als besonders geeignet herausgestellt.

10 Daher ist ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ein Verfahren zur Herstellung der Metallkomplex-Verbindungen gemäß Formel (1) durch Umsetzung der entsprechenden freien Liganden mit Metallalkoholaten der Formel (152), mit Metallketoketonaten der Formel (153) oder mit Metallhalogeniden der Formel (154),



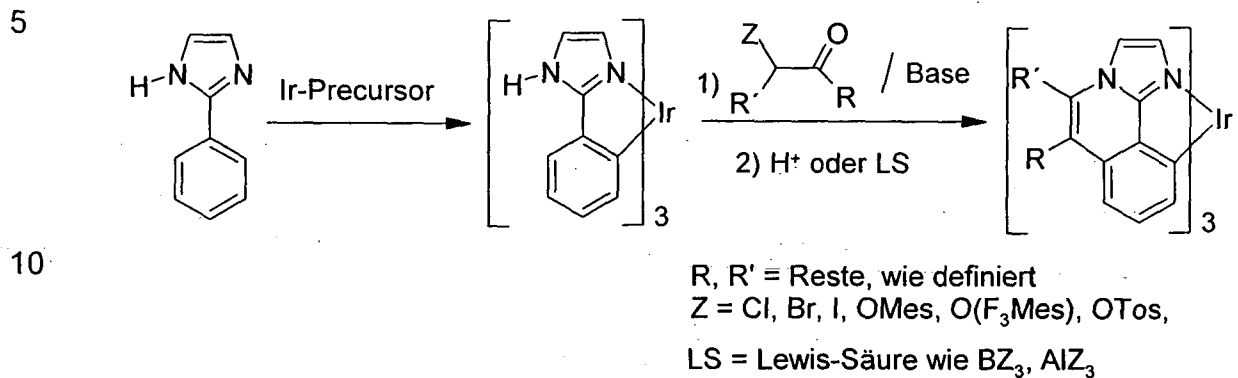
25 wobei die Symbole M, n und  $R^8$  die oben angegebenen Bedeutungen haben und Hal = F, Cl, Br oder I ist.

30 Es können ebenfalls Metallverbindungen, insbesondere Iridiumverbindungen, die sowohl Alkoholat- und/oder Halogenid- und/oder Hydroxy- wie auch Ketoketonatreste tragen, verwendet werden. Diese Verbindungen können auch geladen sein. Entsprechende Iridiumverbindungen, die als Edukte besonders geeignet sind, sind in WO 04/085449 offenbart. Besonders geeignet ist  $[IrCl_2(acac)_2]^-$ , beispielsweise  $Na[IrCl_2(acac)_2]$ . Ein besonders bevorzugtes Edukt ist weiterhin  $Ir(acac)_3$ .

35 Geeignete Platin-Edukte sind beispielsweise  $PtCl_2$ ,  $K_2[PtCl_4]$ ,  $PtCl_2(DMSO)_2$ ,  $Pt(Me)_2(DMSO)_2$  oder  $PtCl_2(Benzonitril)_2$ .

- 36 -

Weiterhin ist es möglich, zunächst eine Vorstufe des Metallkomplexes darzustellen und in einem weiteren Schritt die Brücke zwischen den beiden koordinierenden Aryl- bzw. Heteroarylringen einzuführen. Dies ist exemplarisch für einen Komplex im folgenden Schema gezeigt:

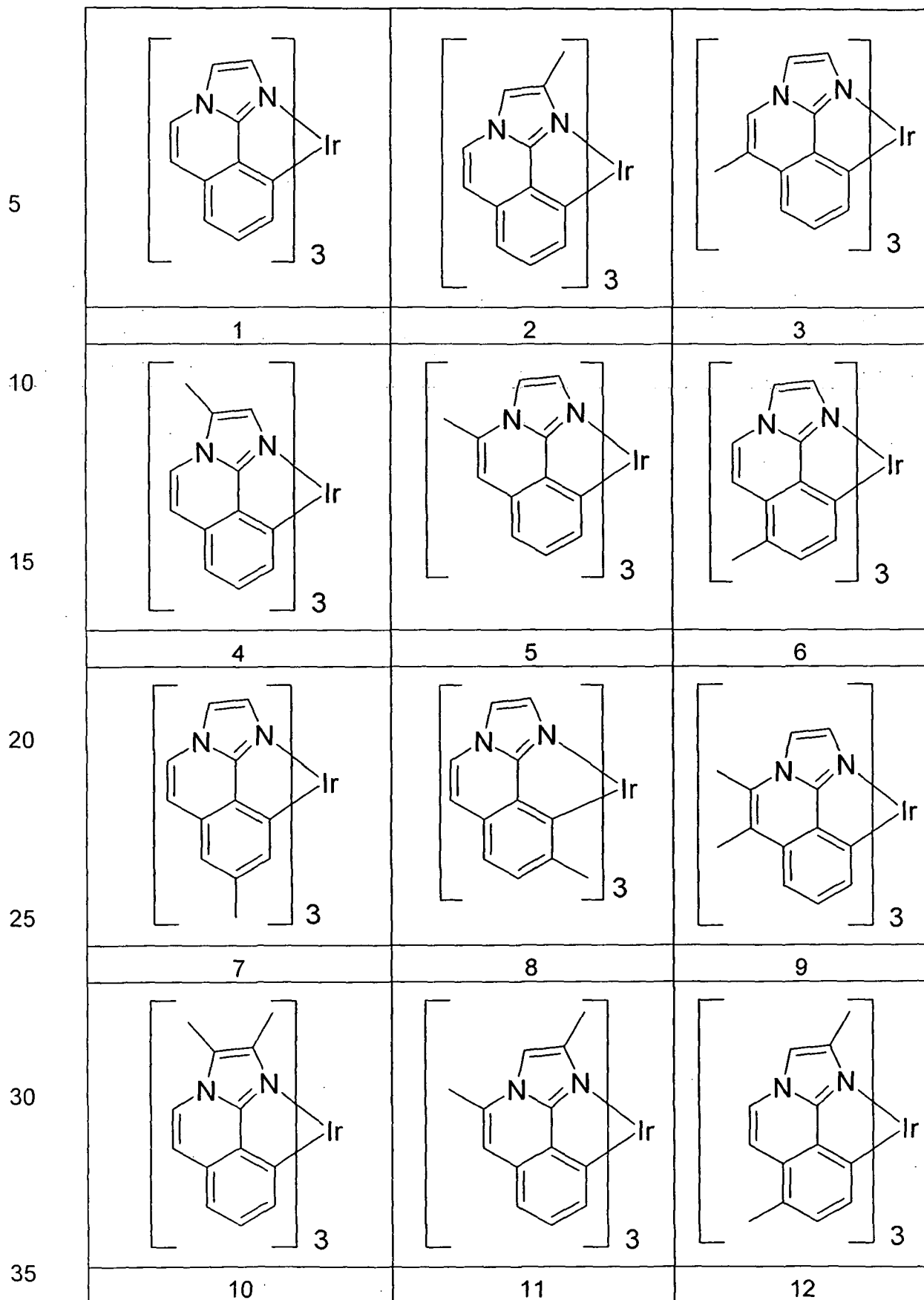


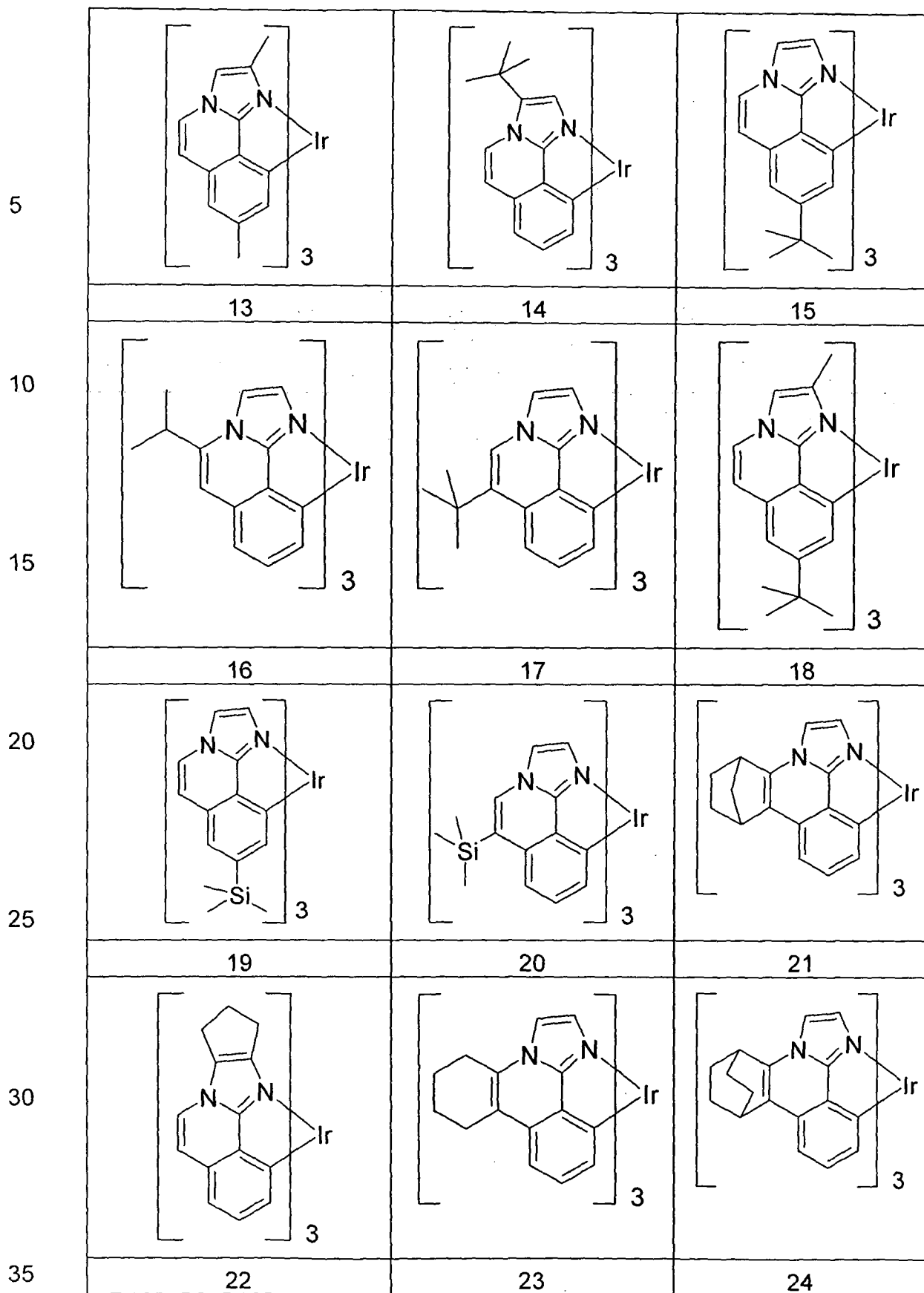
Die Synthese der Komplexe wird bevorzugt durchgeführt wie in WO  
15 02/060910 und in WO 04/085449 beschrieben. Heteroleptische Komplexe können beispielsweise auch gemäß WO 05/042548 synthetisiert werden. Dabei kann die Synthese beispielsweise auch thermisch, photochemisch und/oder durch Mikrowellenstrahlung aktiviert werden. In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung wird die Reaktion ohne die  
20 Verwendung eines zusätzlichen Lösemittels in der Schmelze durchgeführt. Dabei bedeutet „Schmelze“, dass der Ligand geschmolzen vorliegt und die Metall-Vorstufe in dieser Schmelze gelöst oder suspendiert ist.

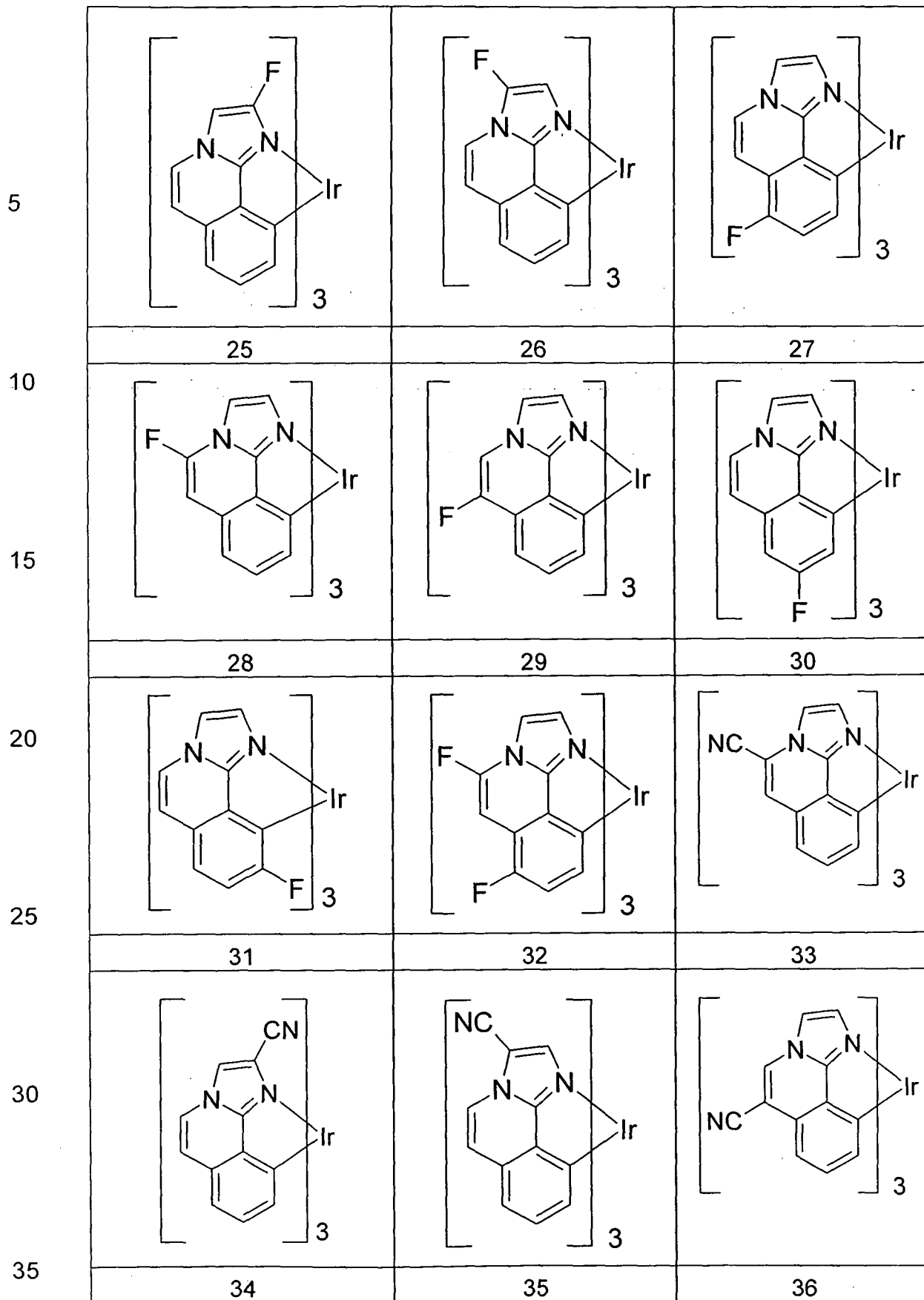
Durch diese Verfahren lassen sich die erfindungsgemäßen Verbindungen  
25 gemäß Formel (1) in hoher Reinheit, bevorzugt mehr als 99 % (bestimmt mittels <sup>1</sup>H-NMR und/oder HPLC) erhalten.

Mit den hier erläuterten Synthesemethoden lassen sich unter anderem die  
30 im Folgenden dargestellten erfindungsgemäßen Strukturen 1 bis 357 herstellen.

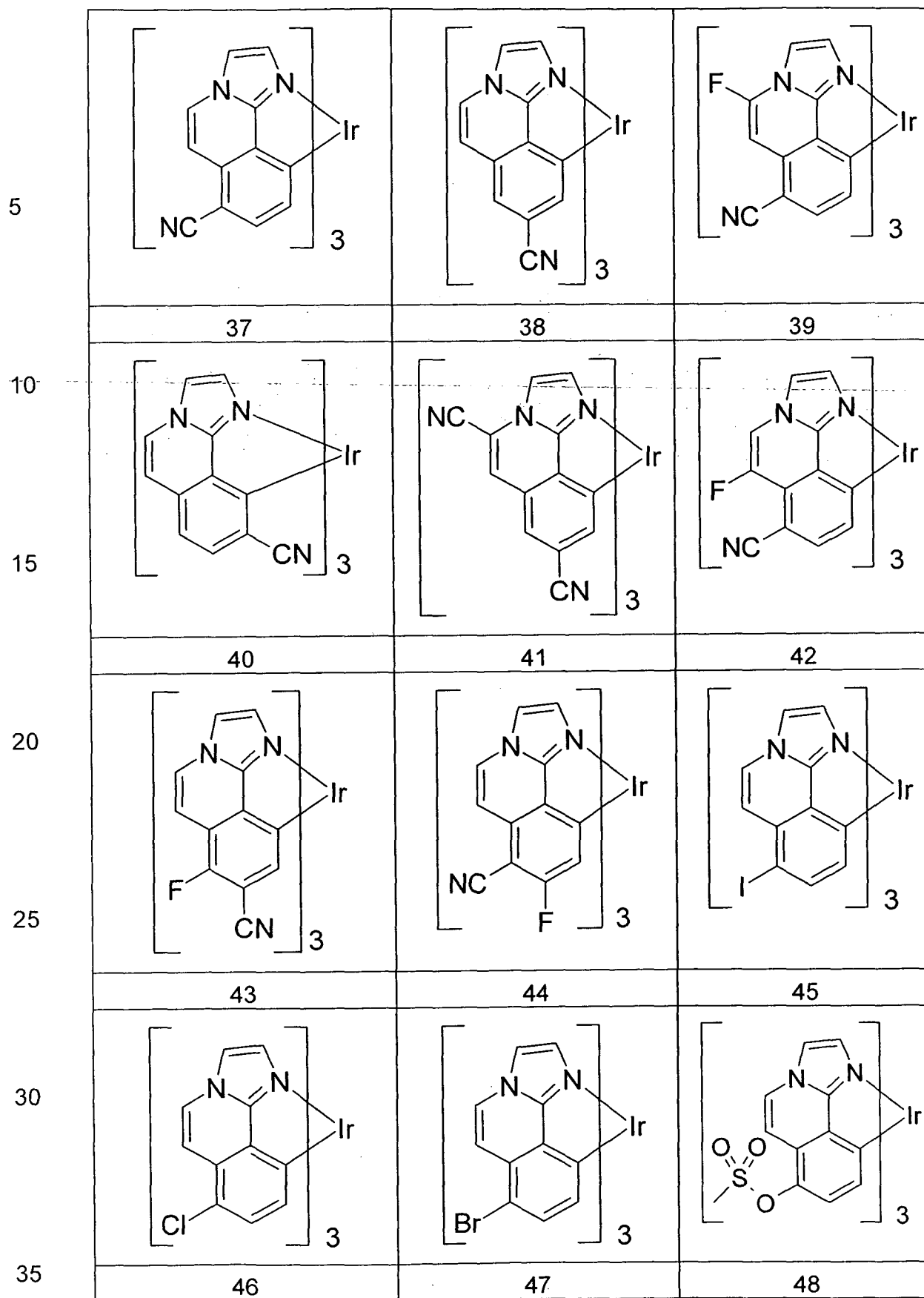
35

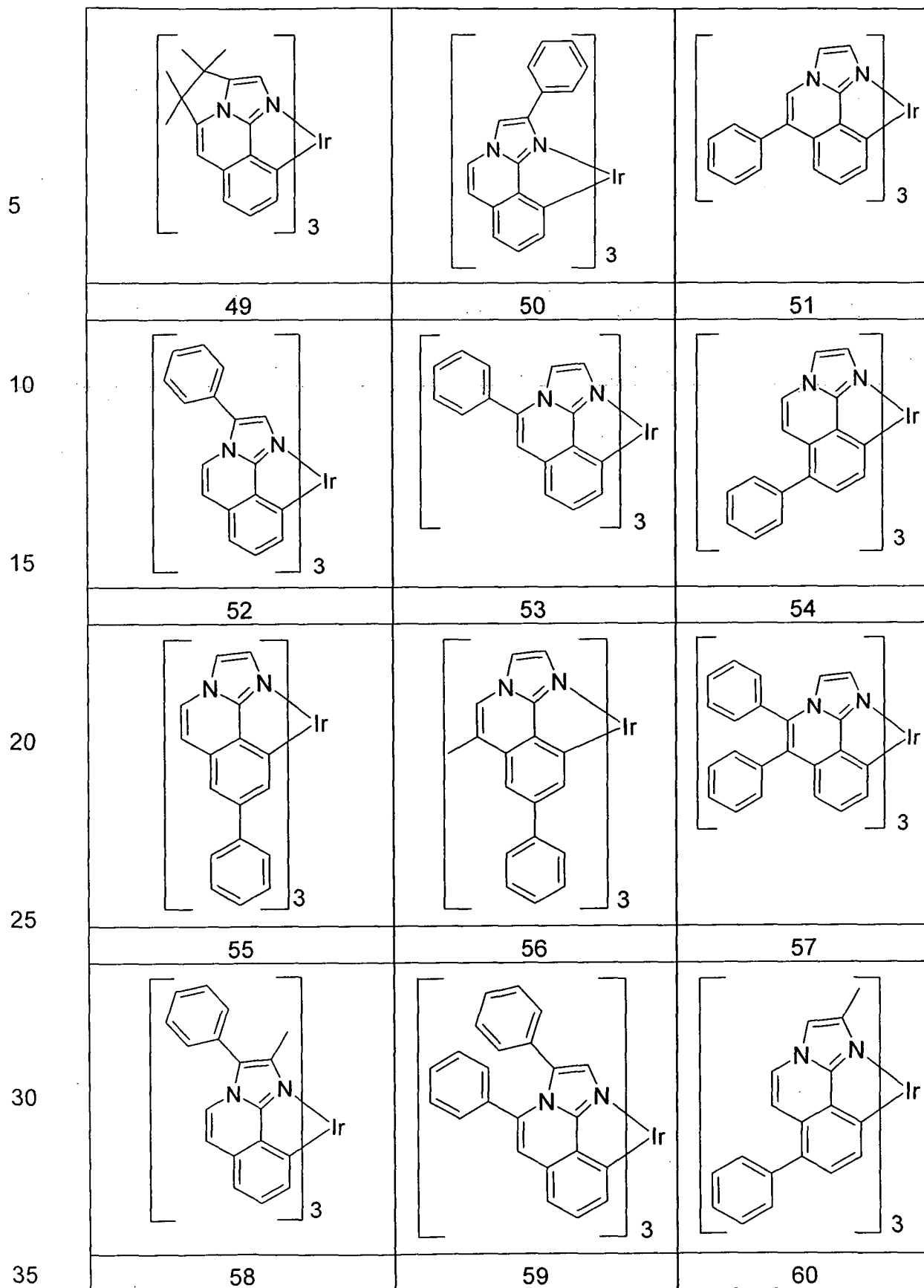


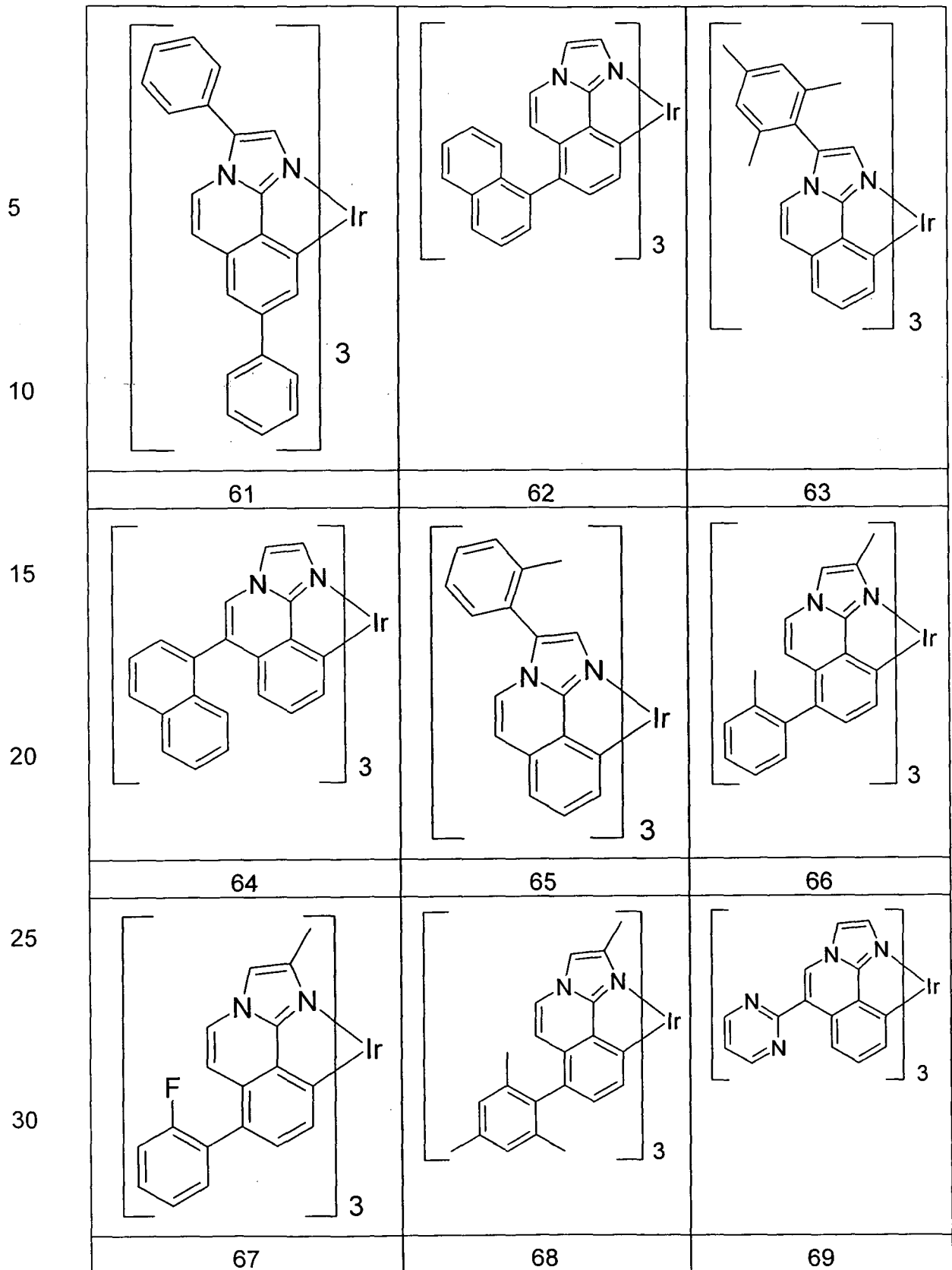


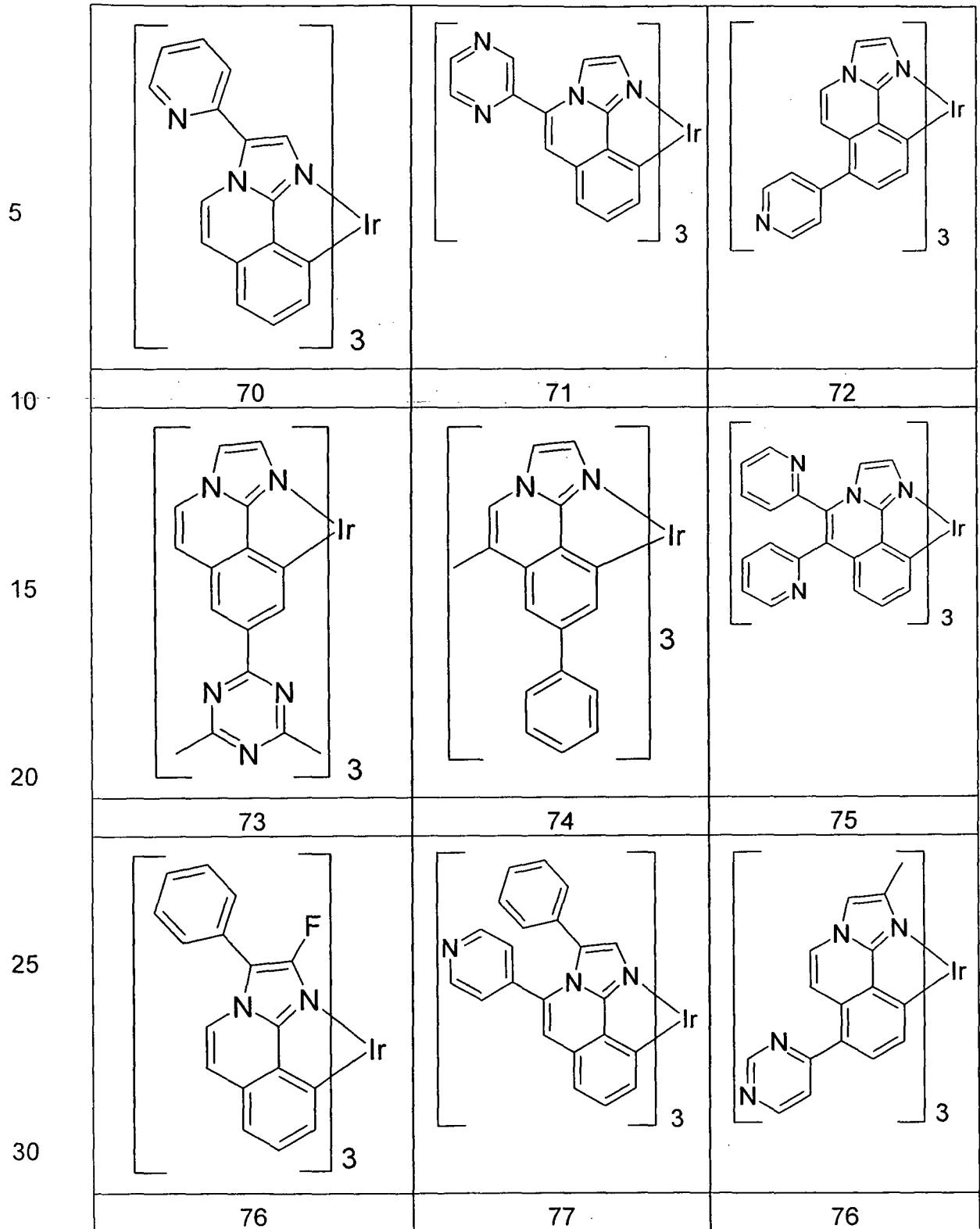


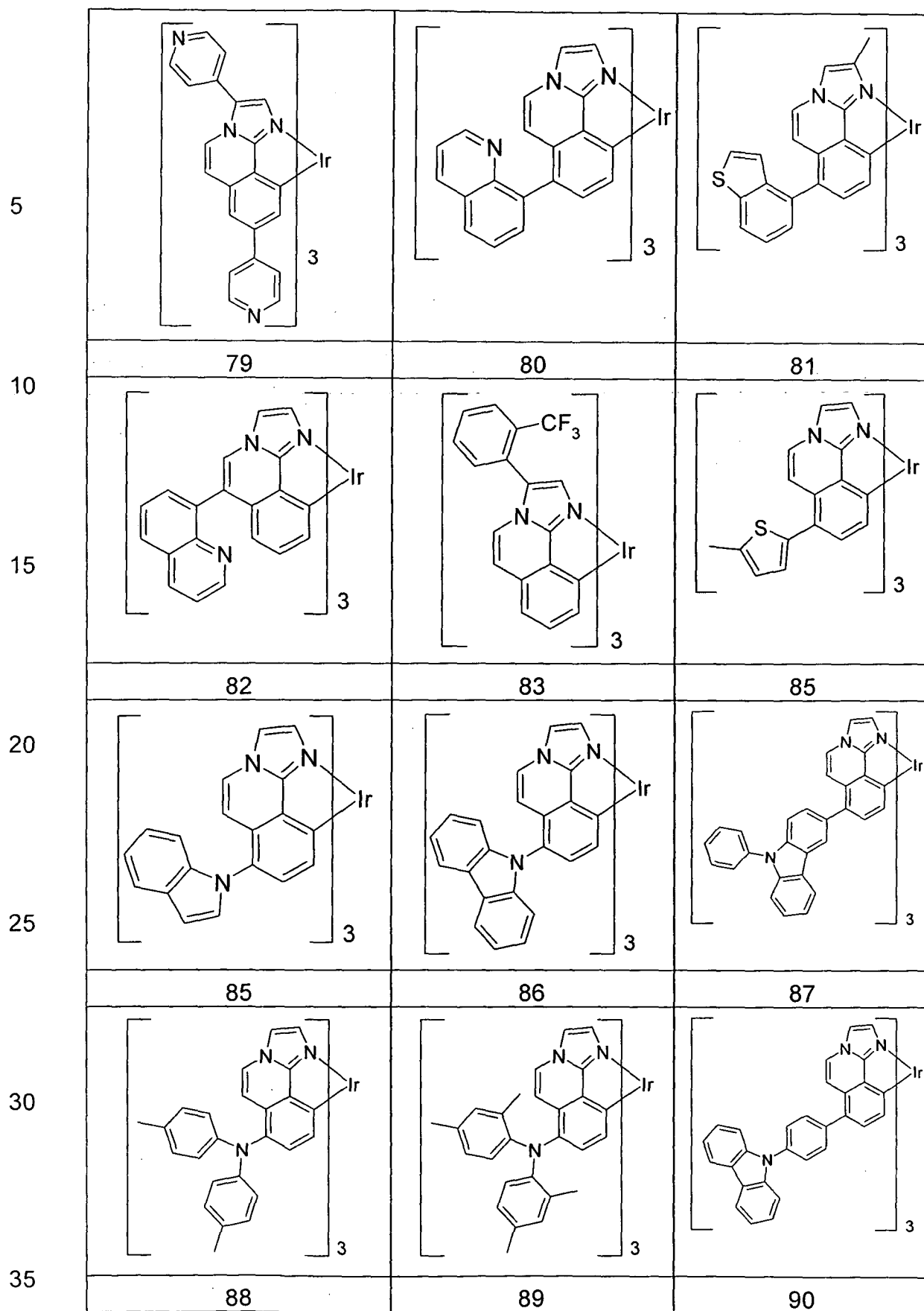


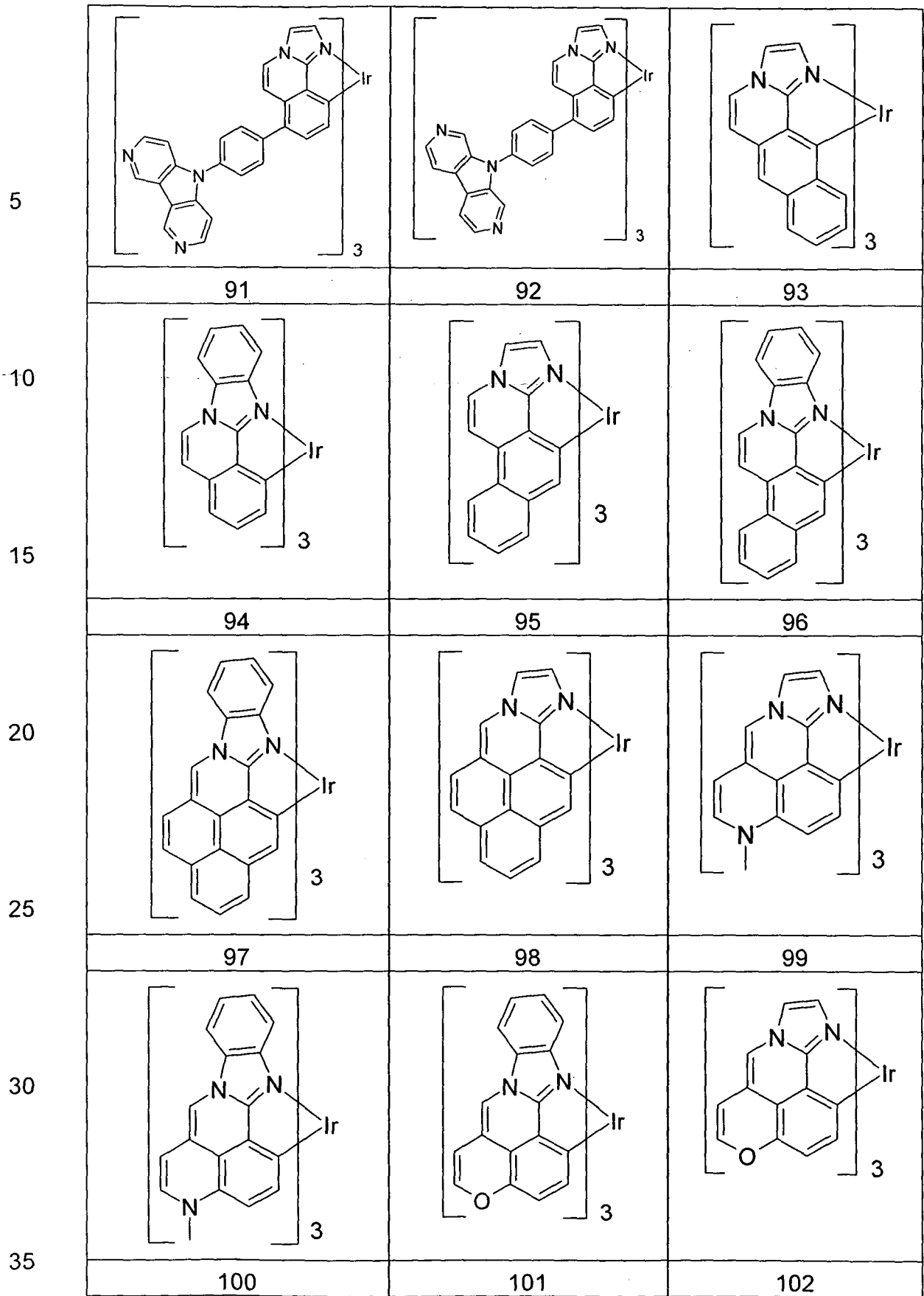


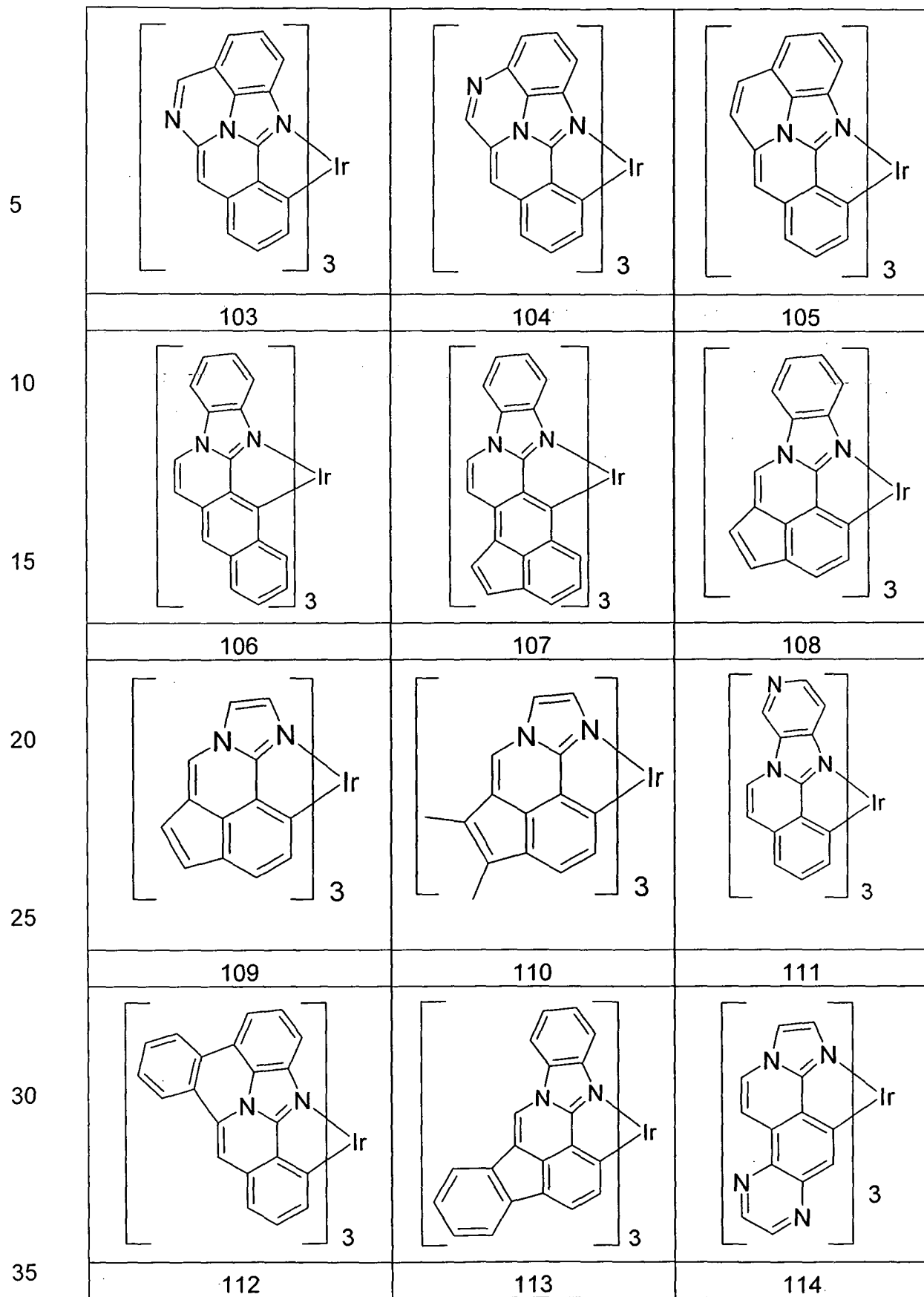


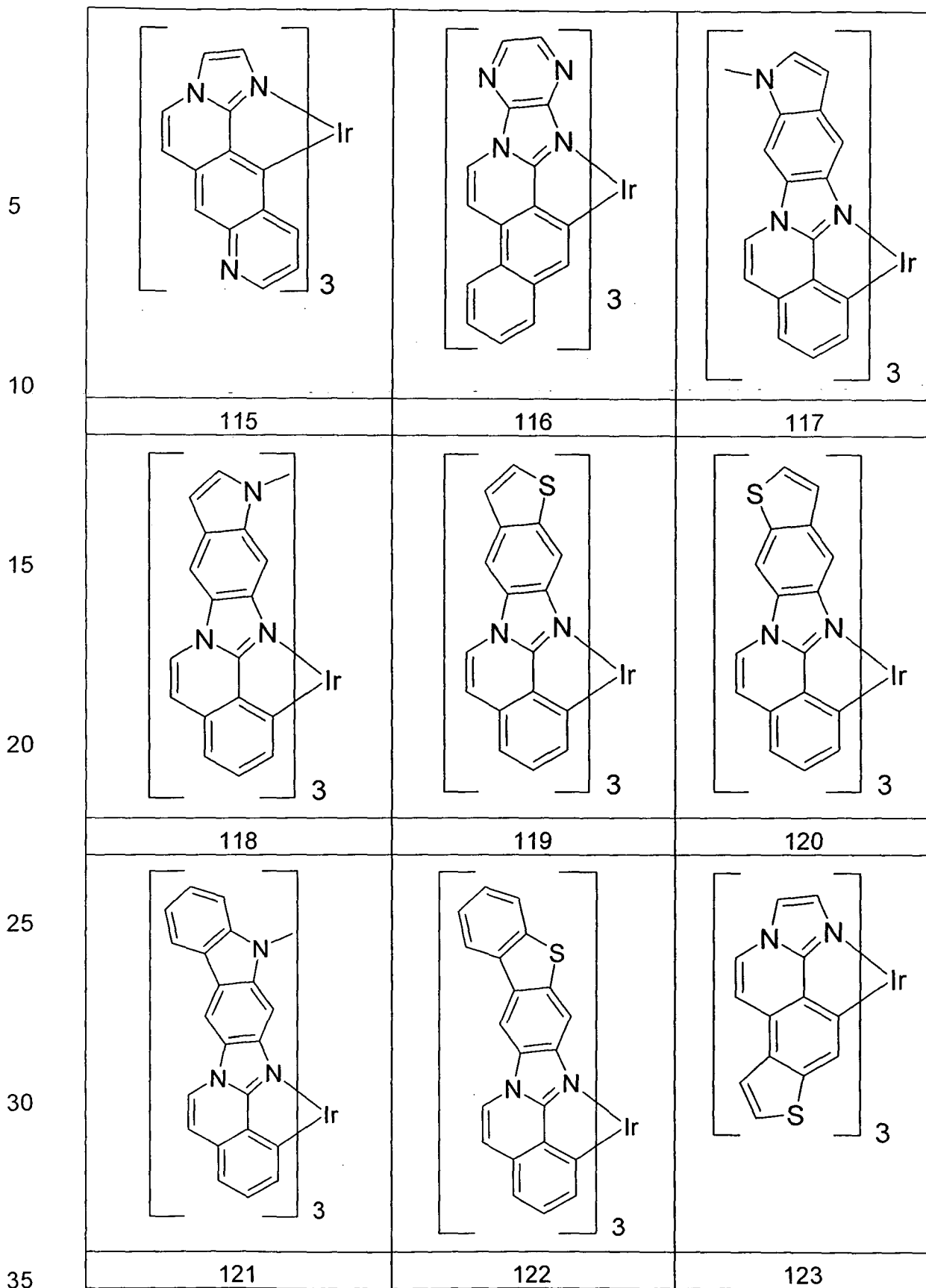




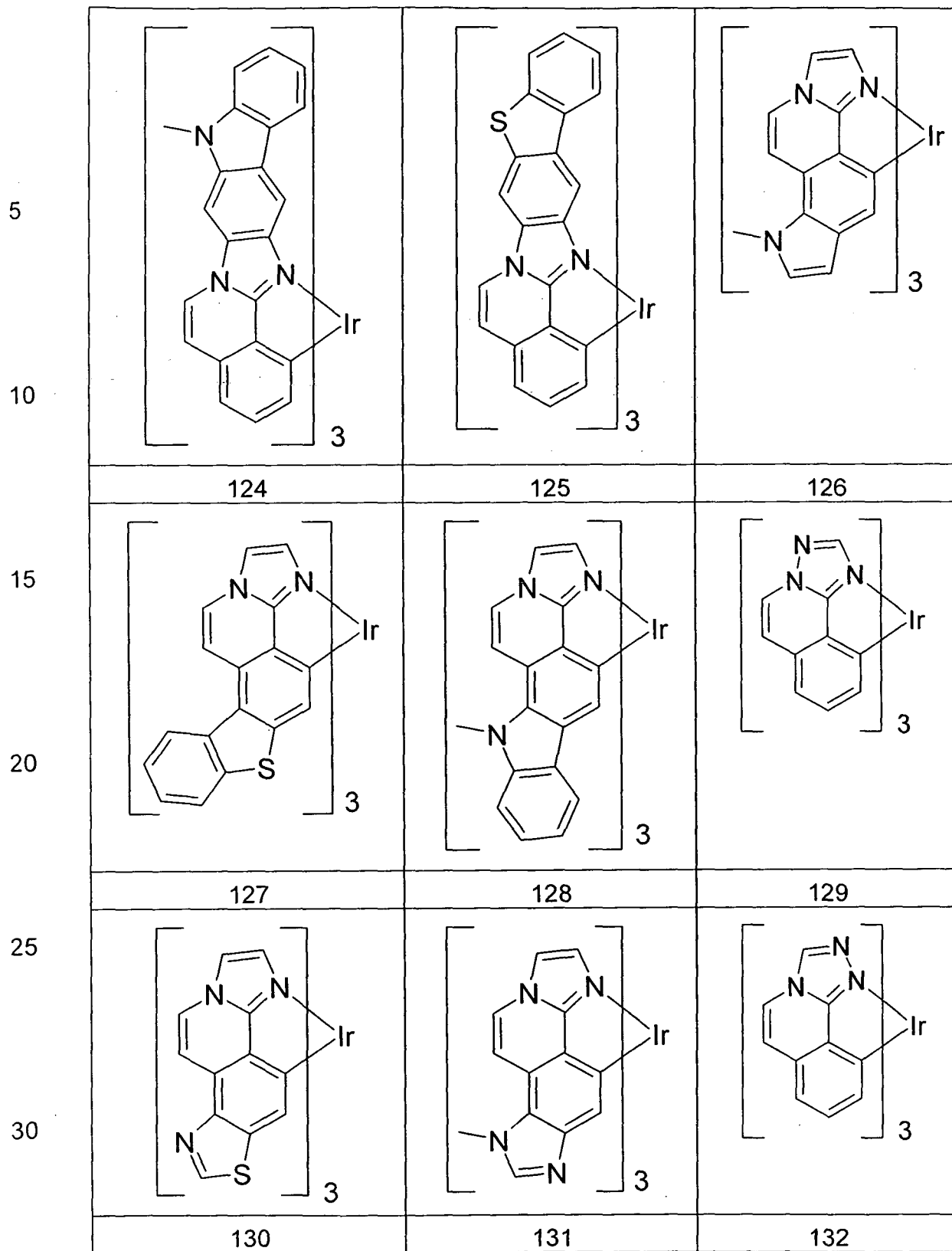


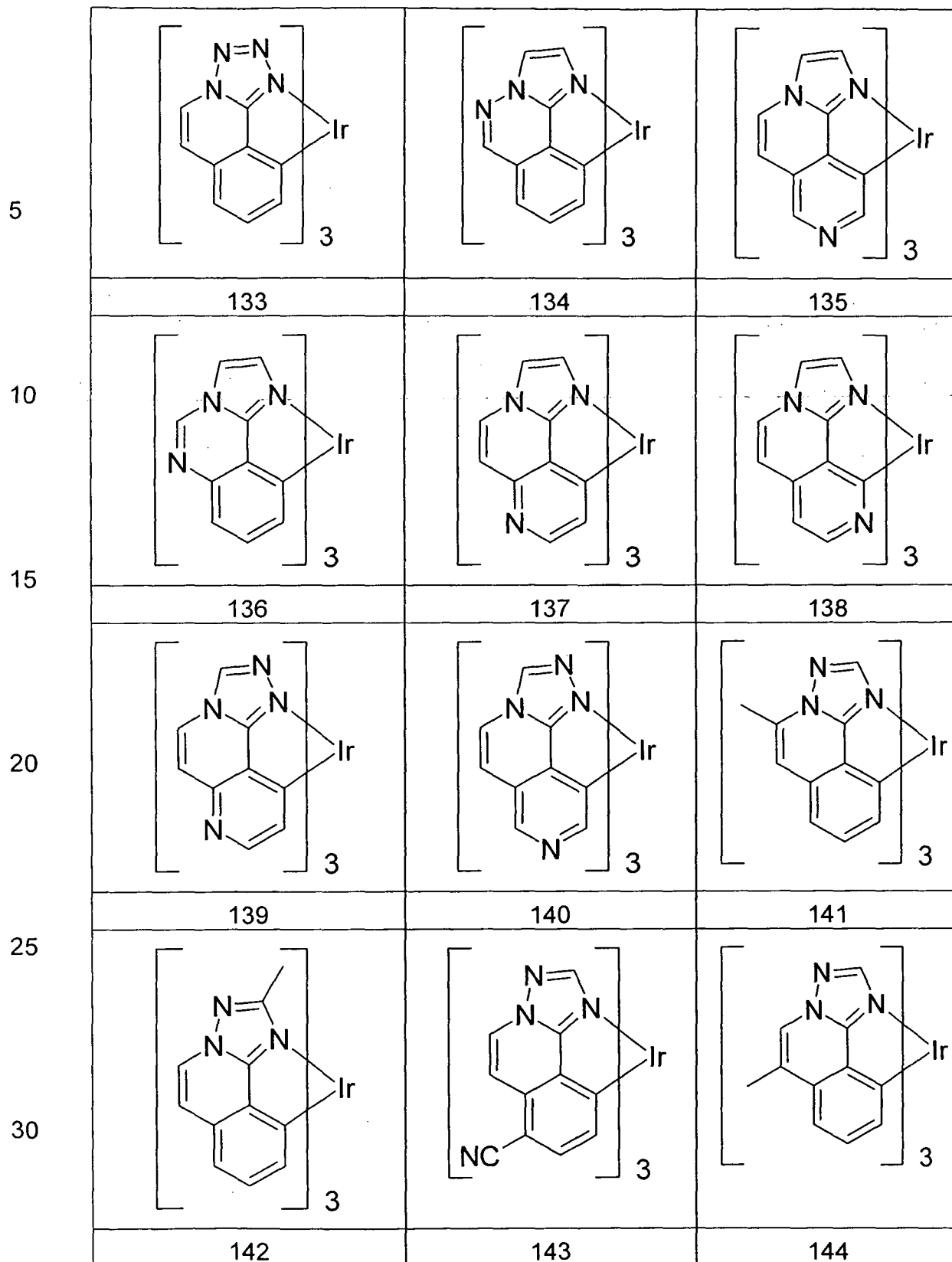


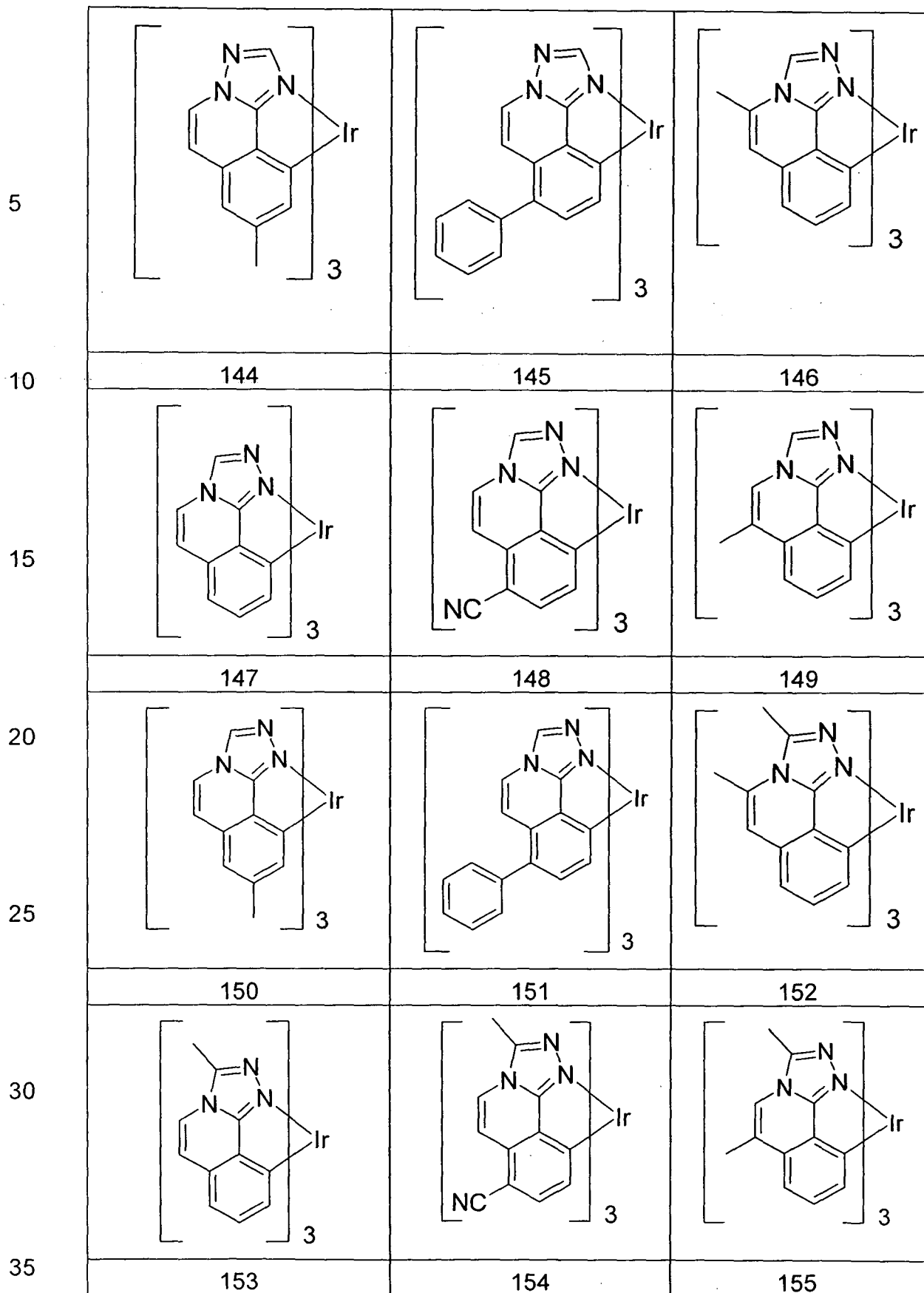


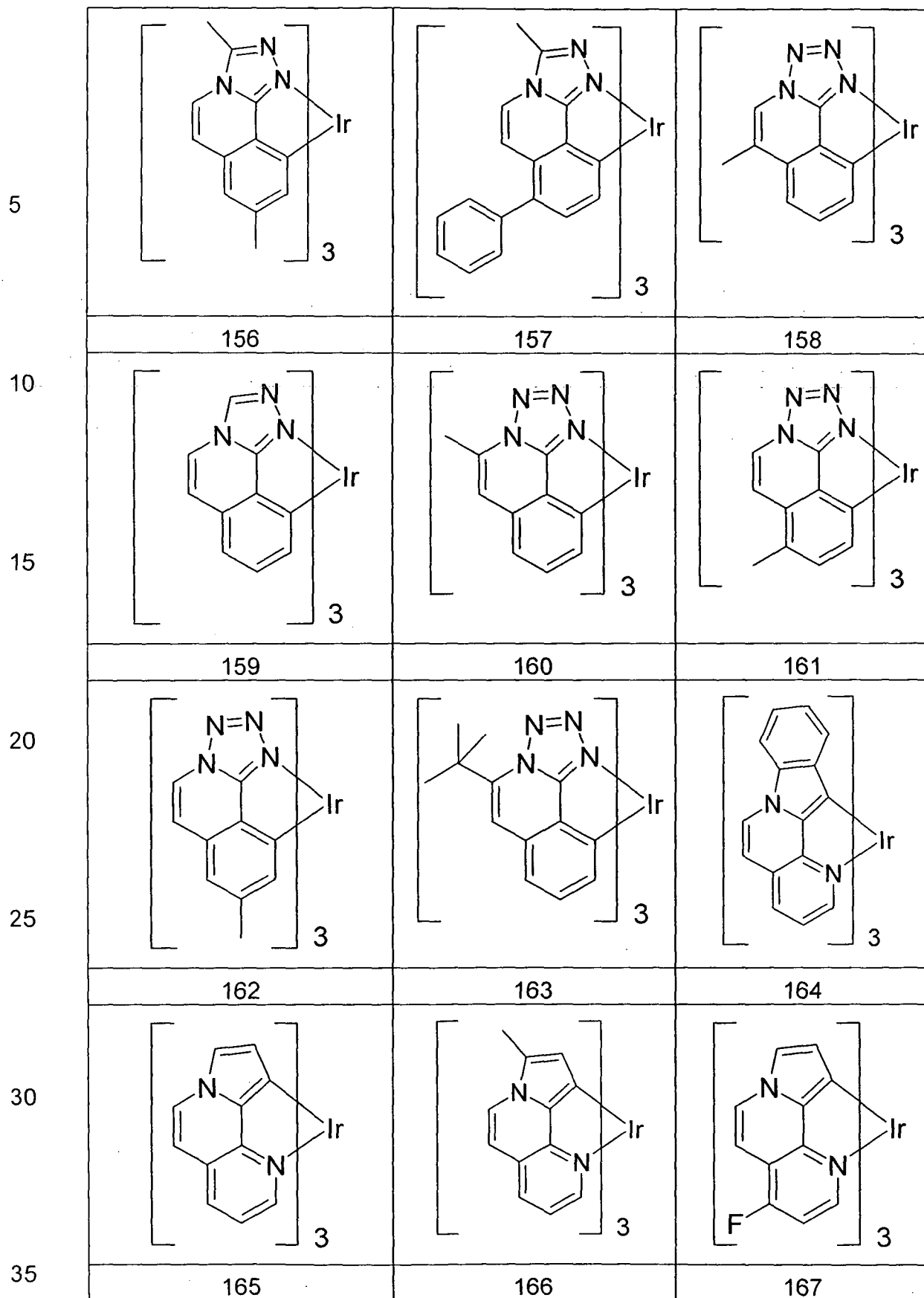


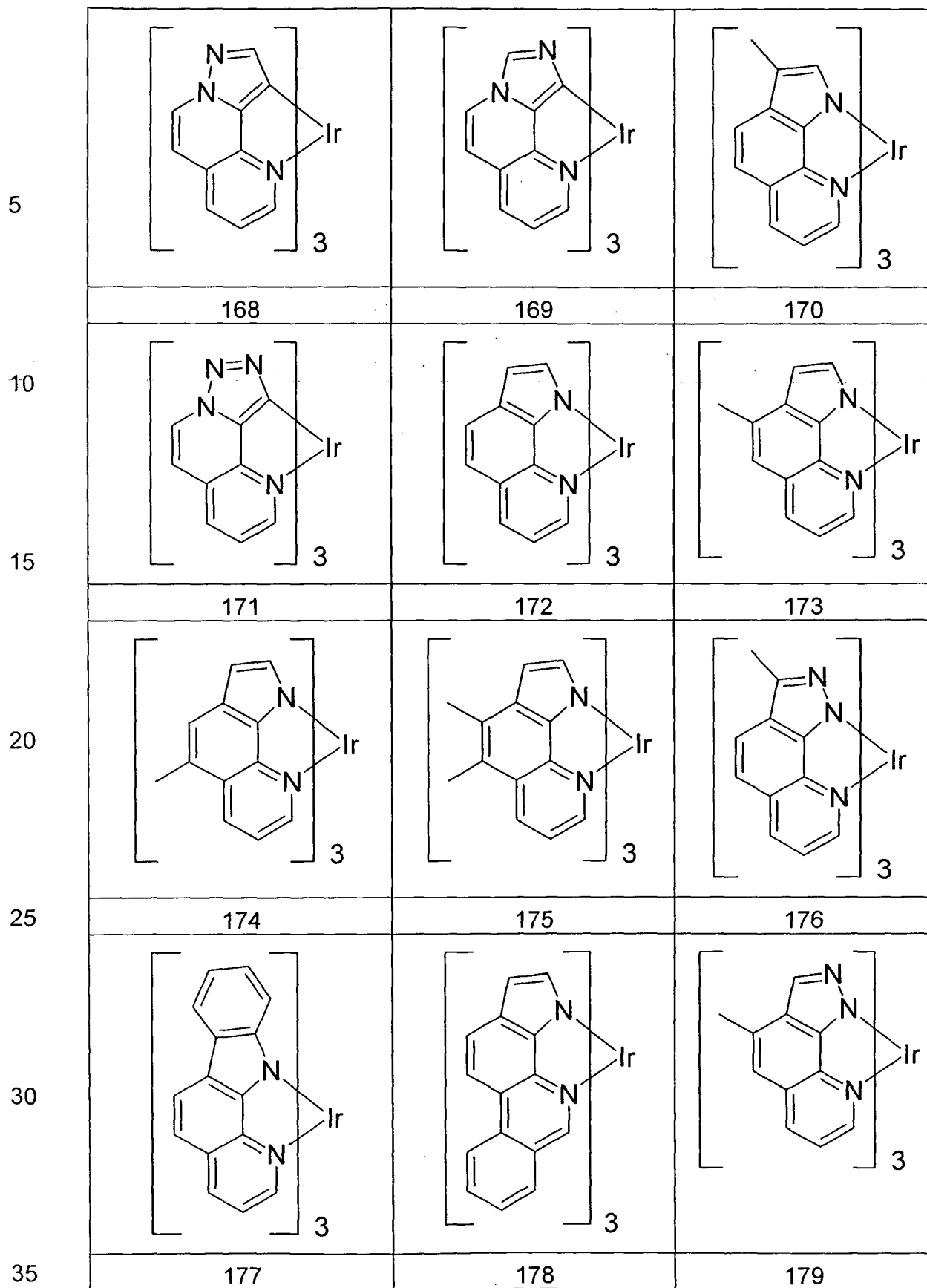


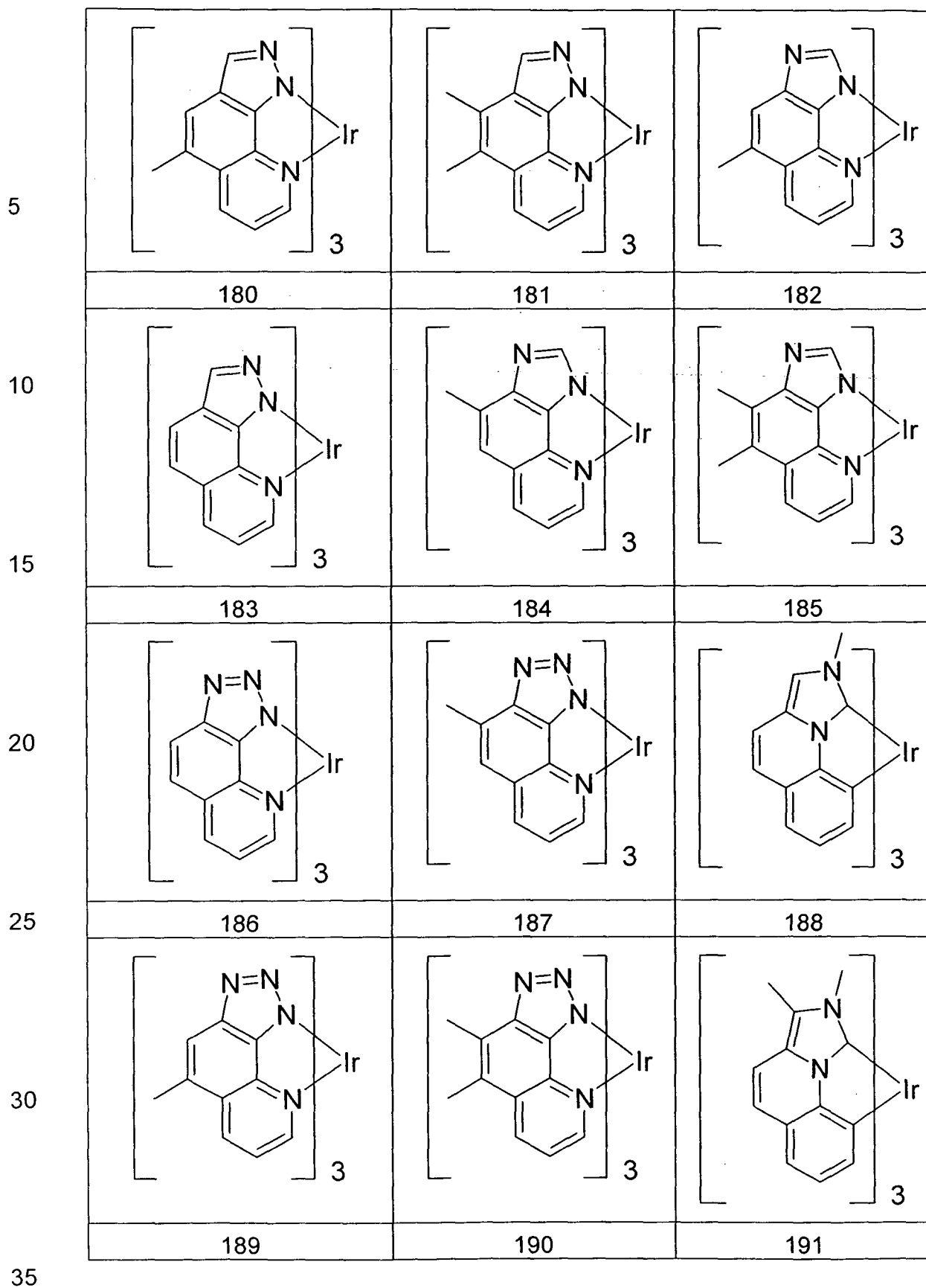


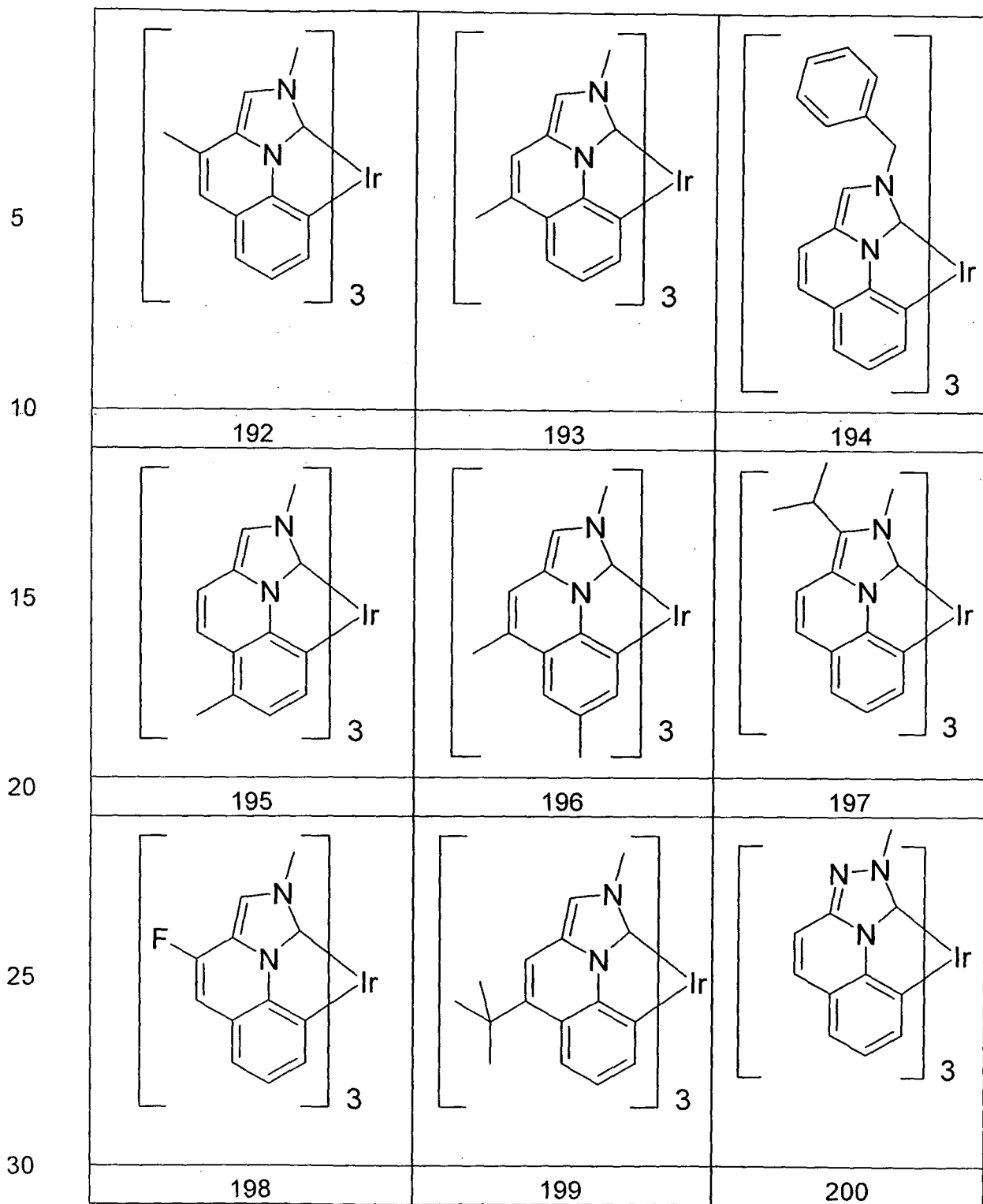


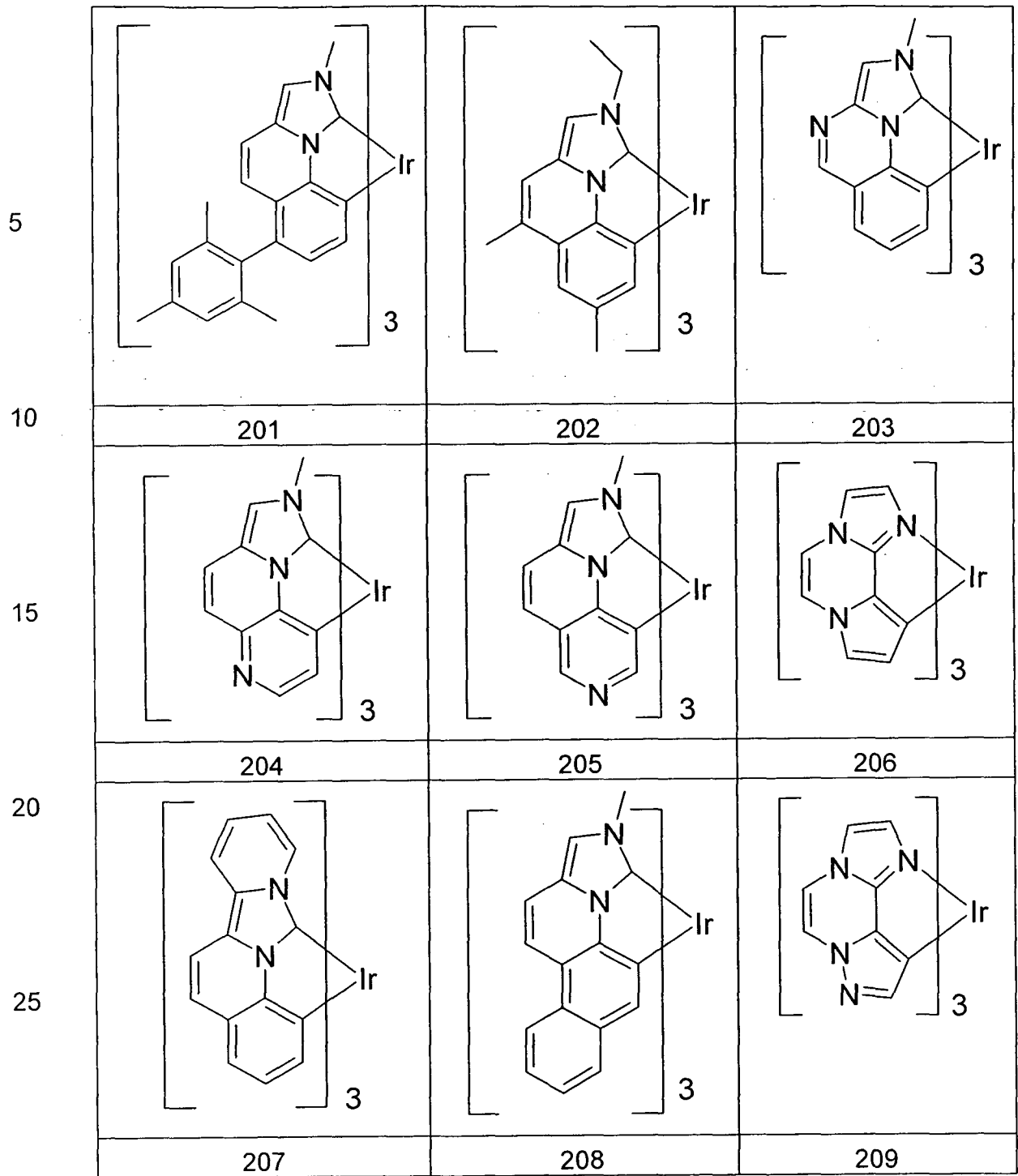




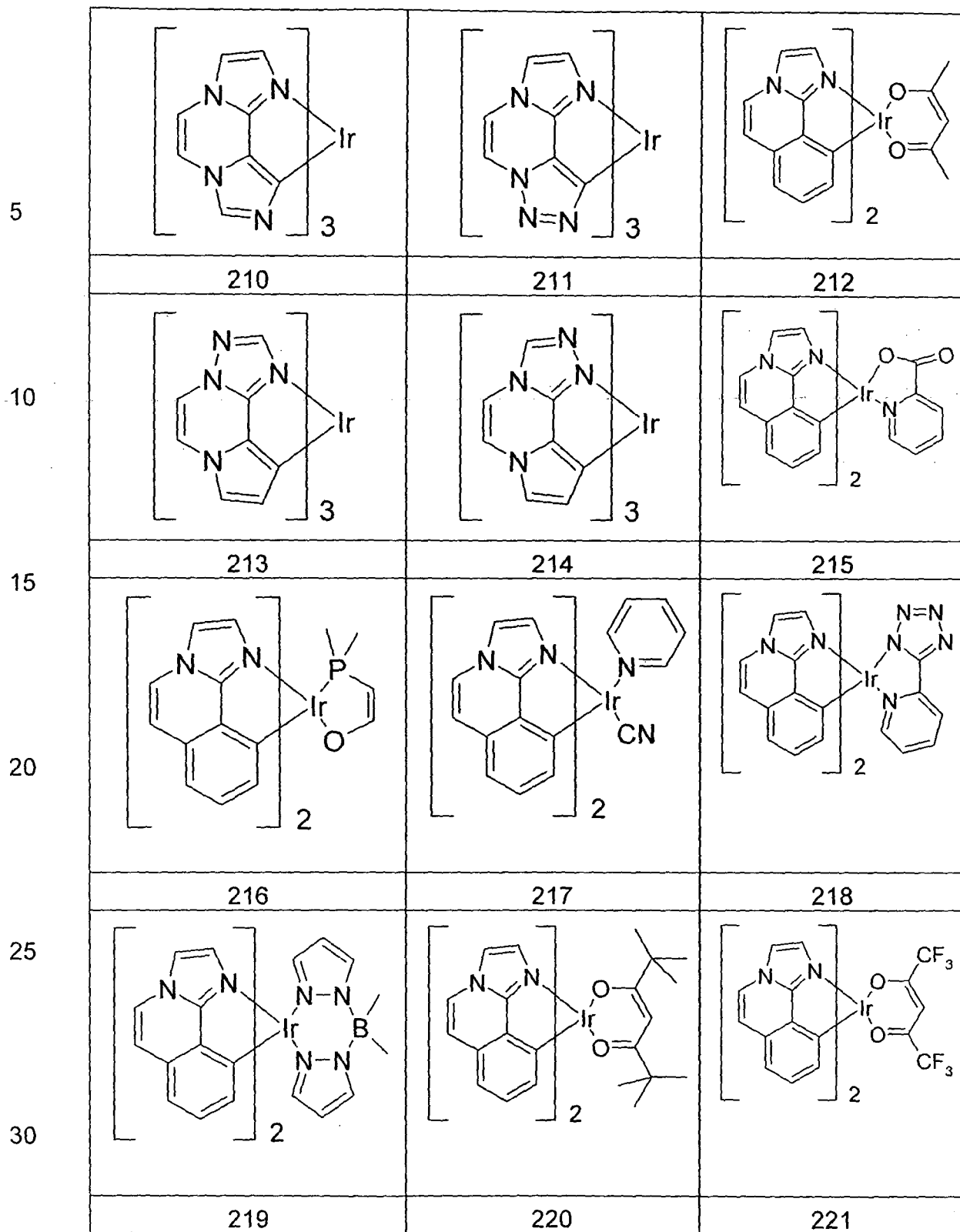


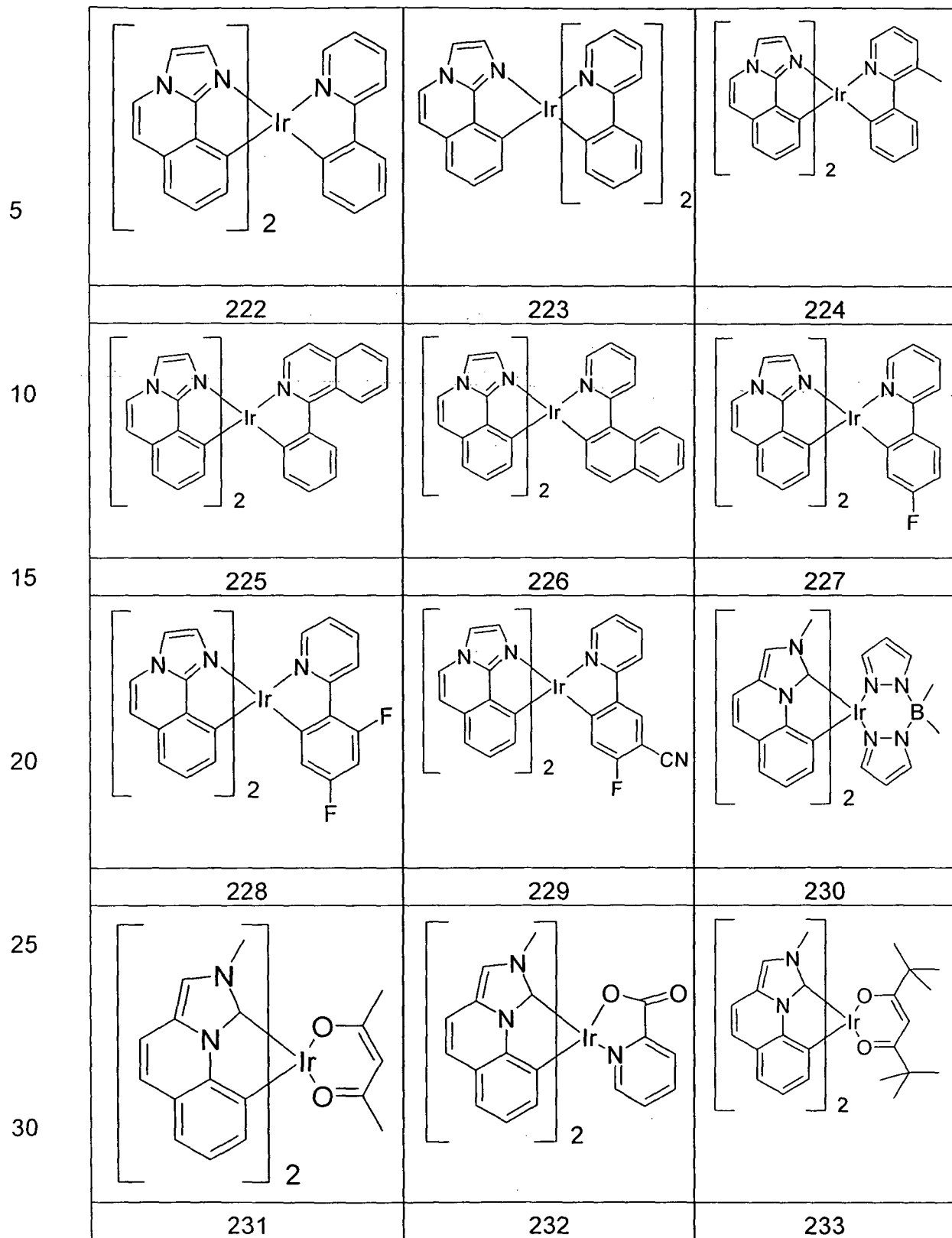


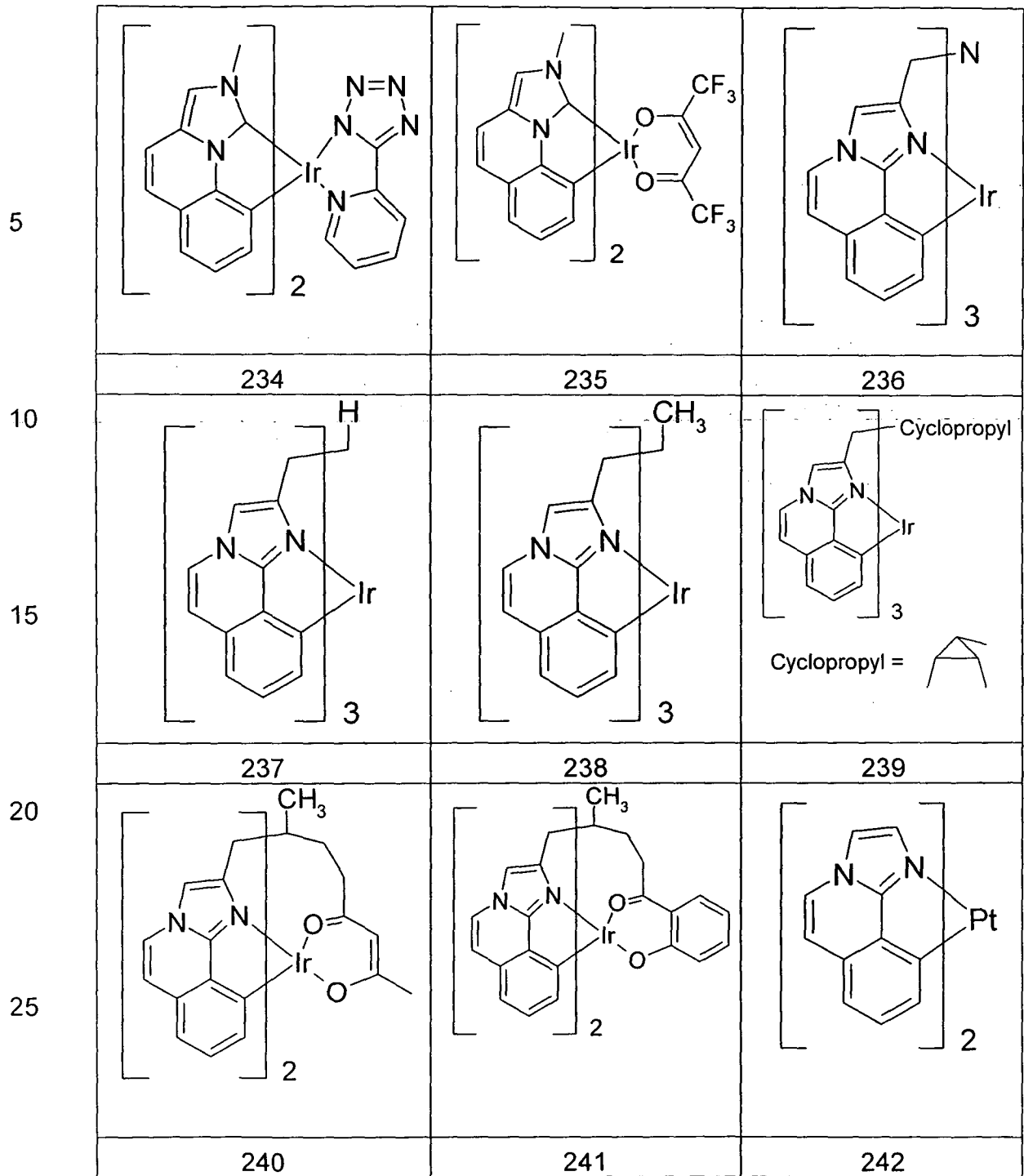






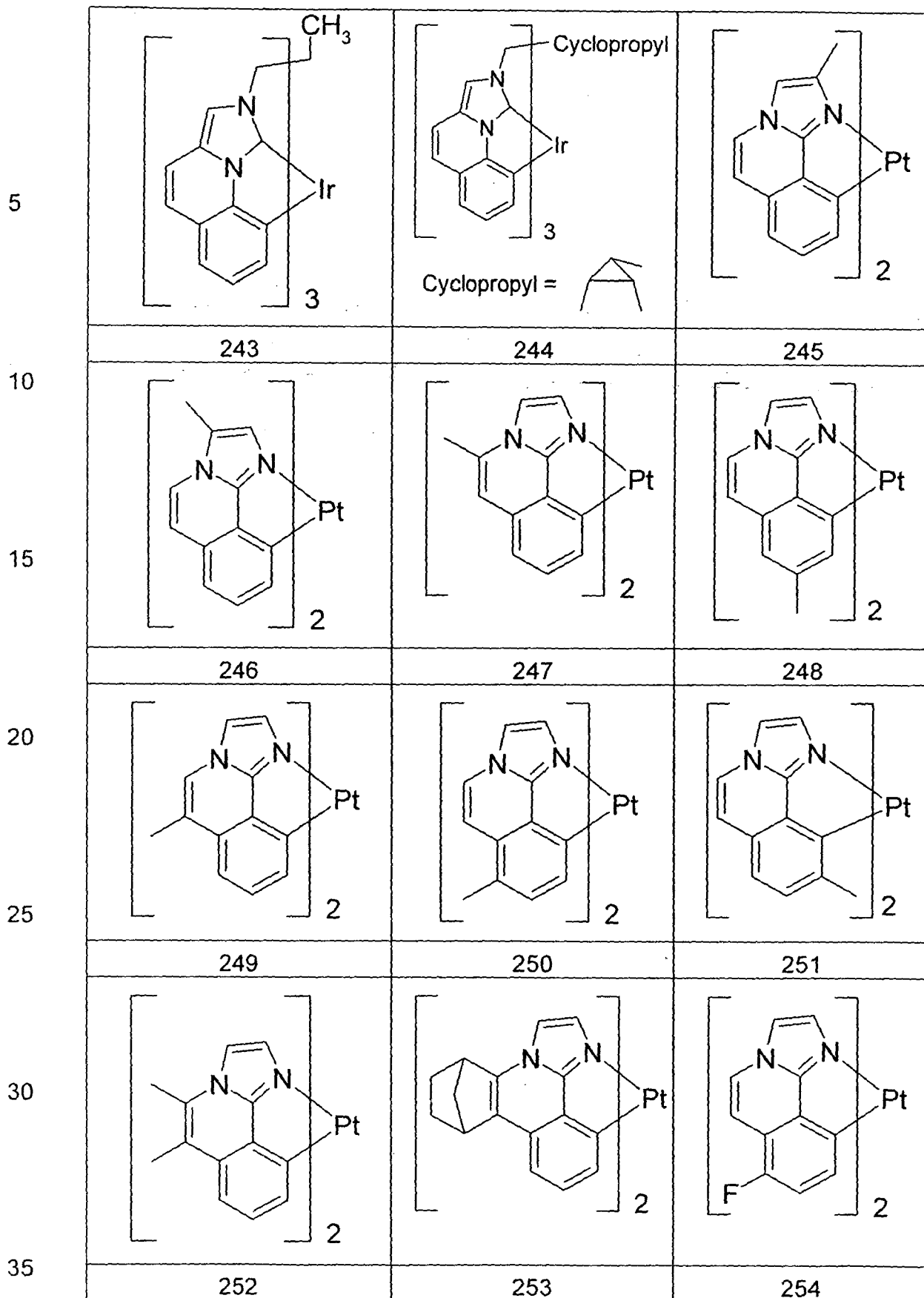


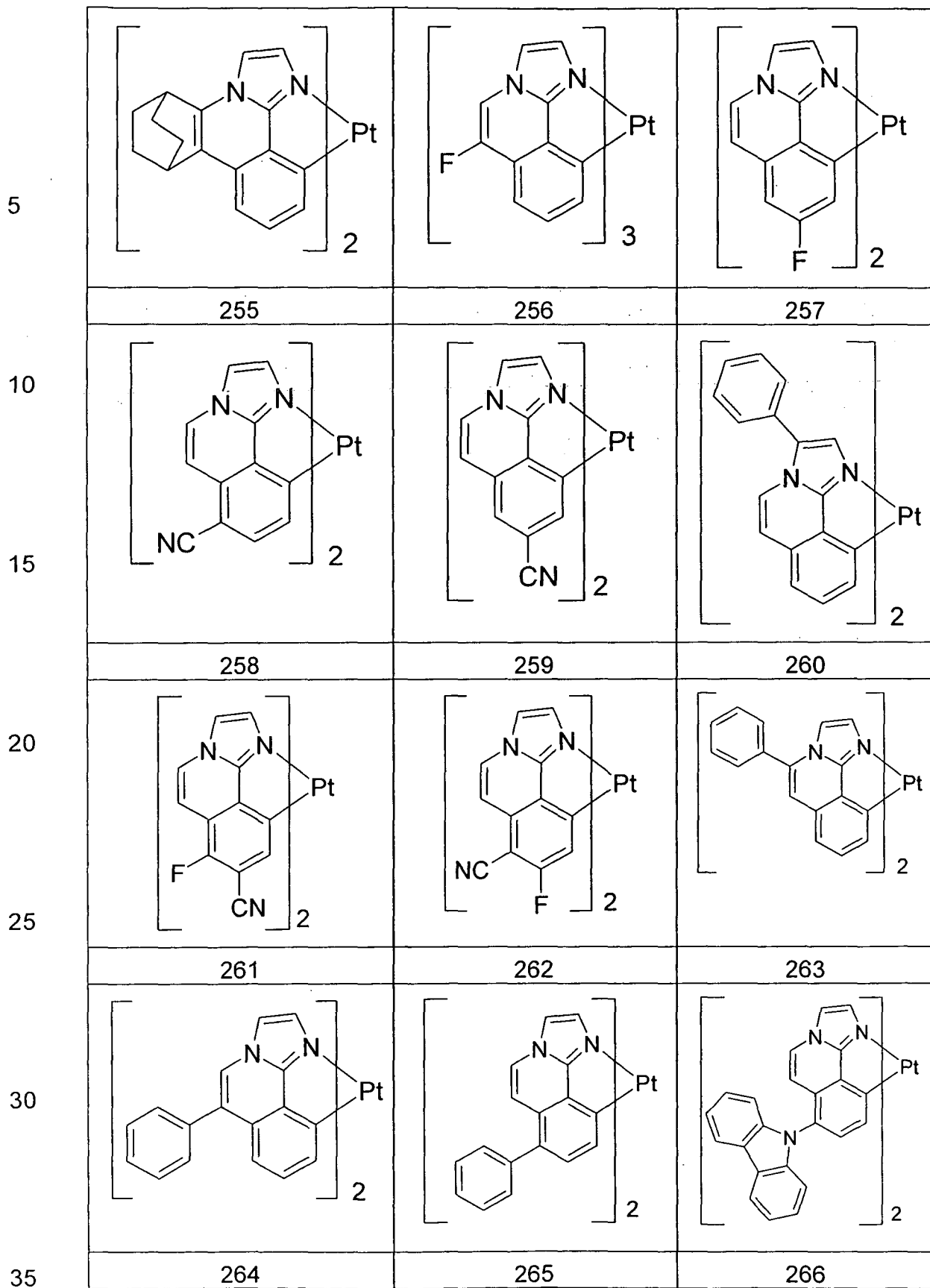


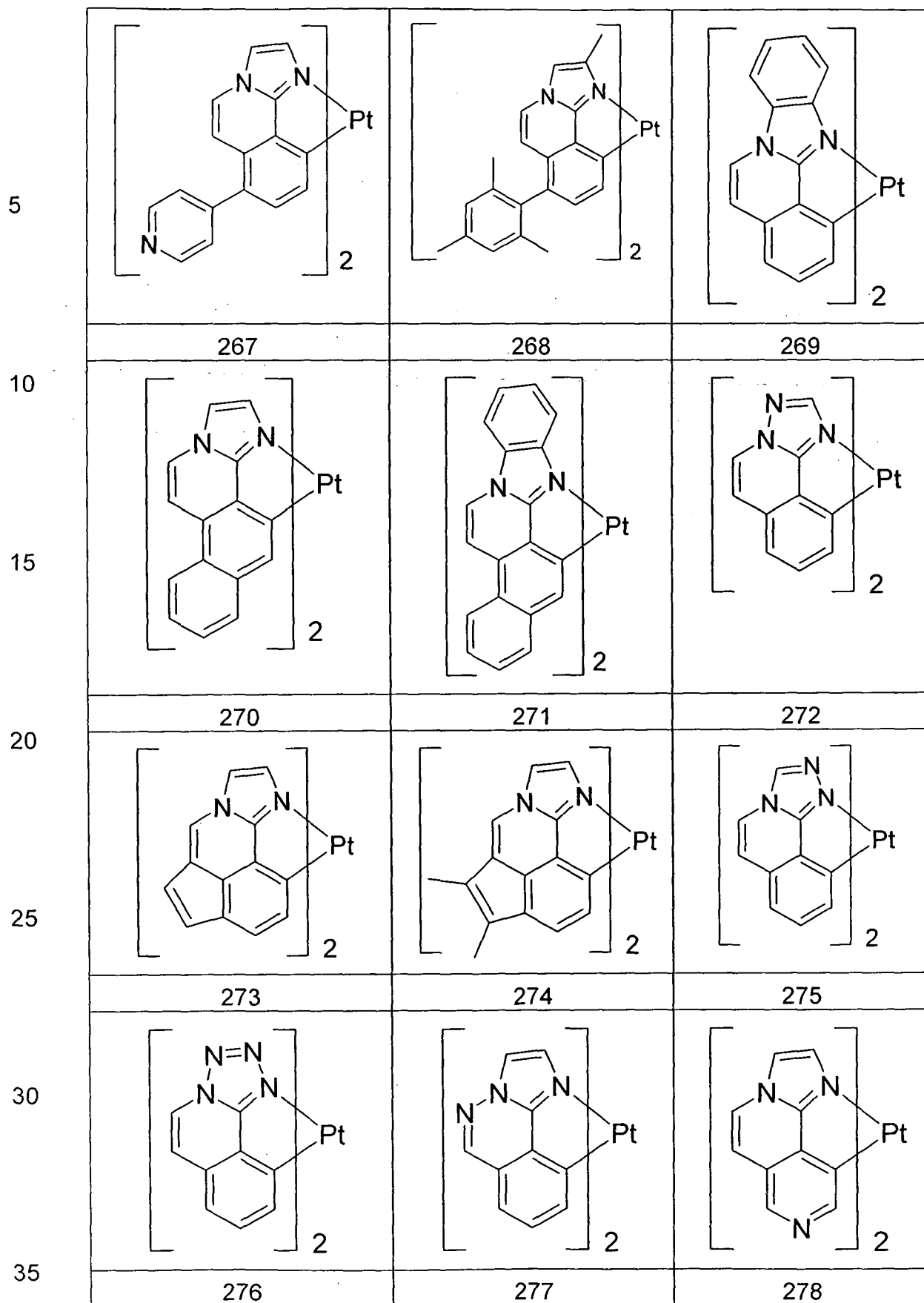


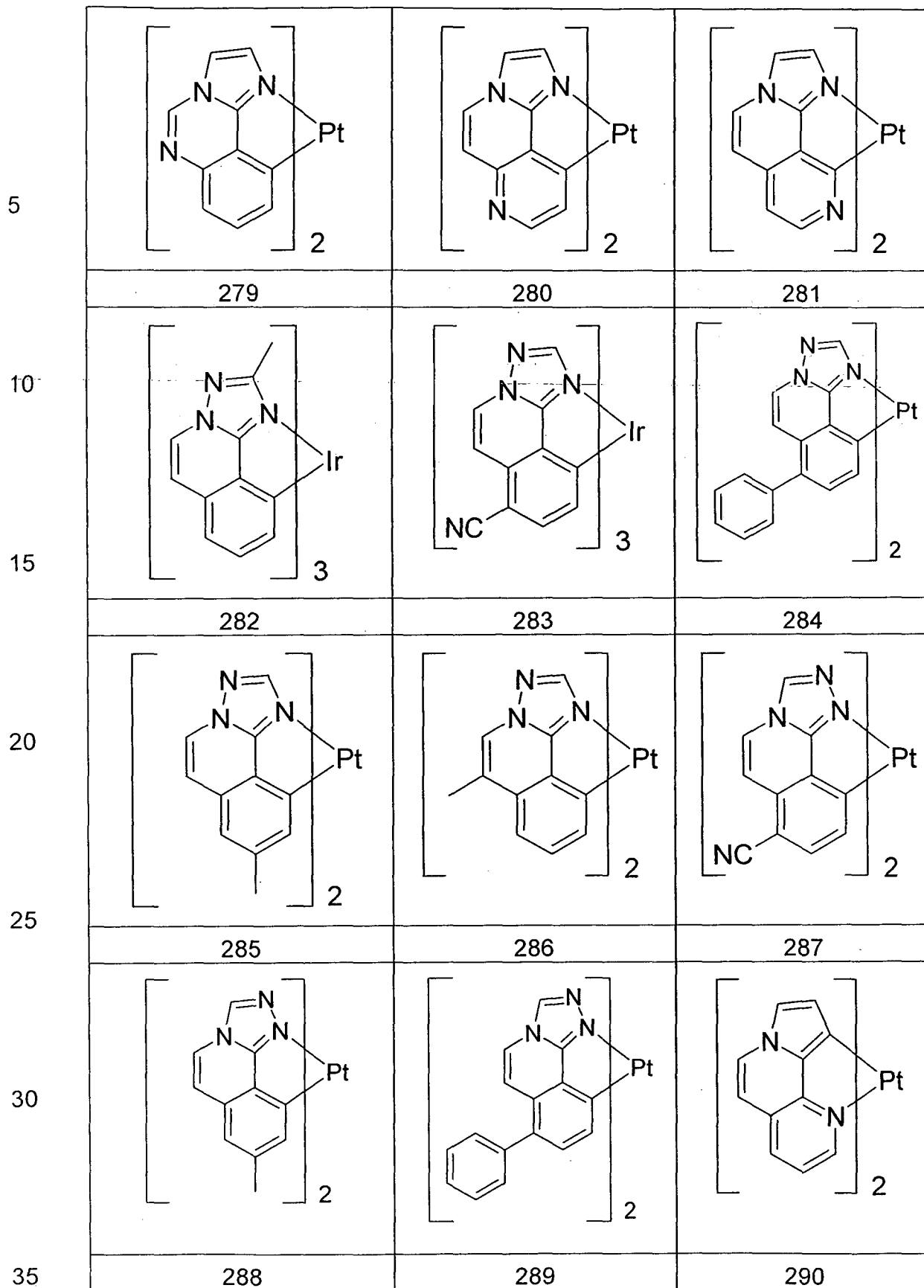
30

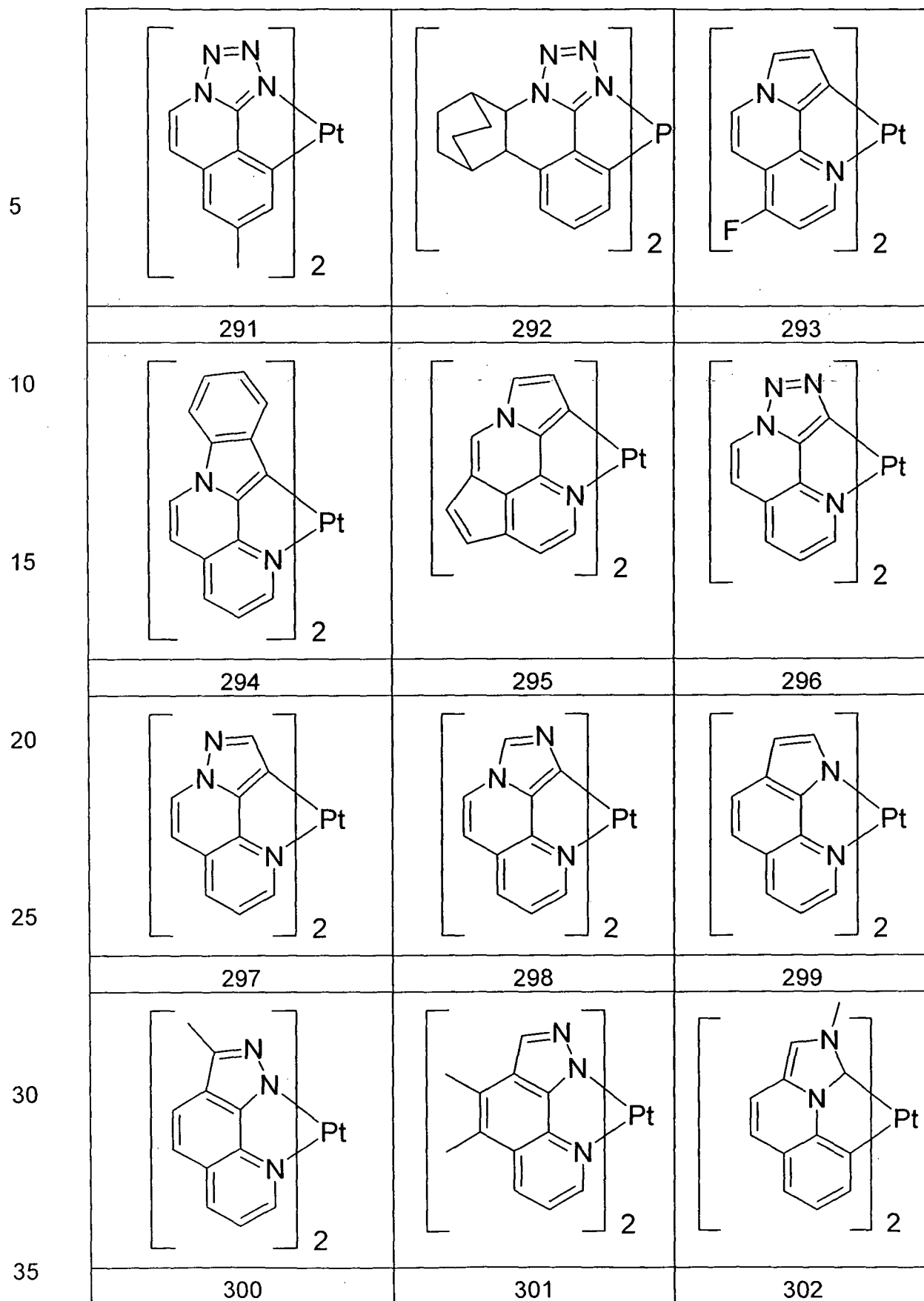
35



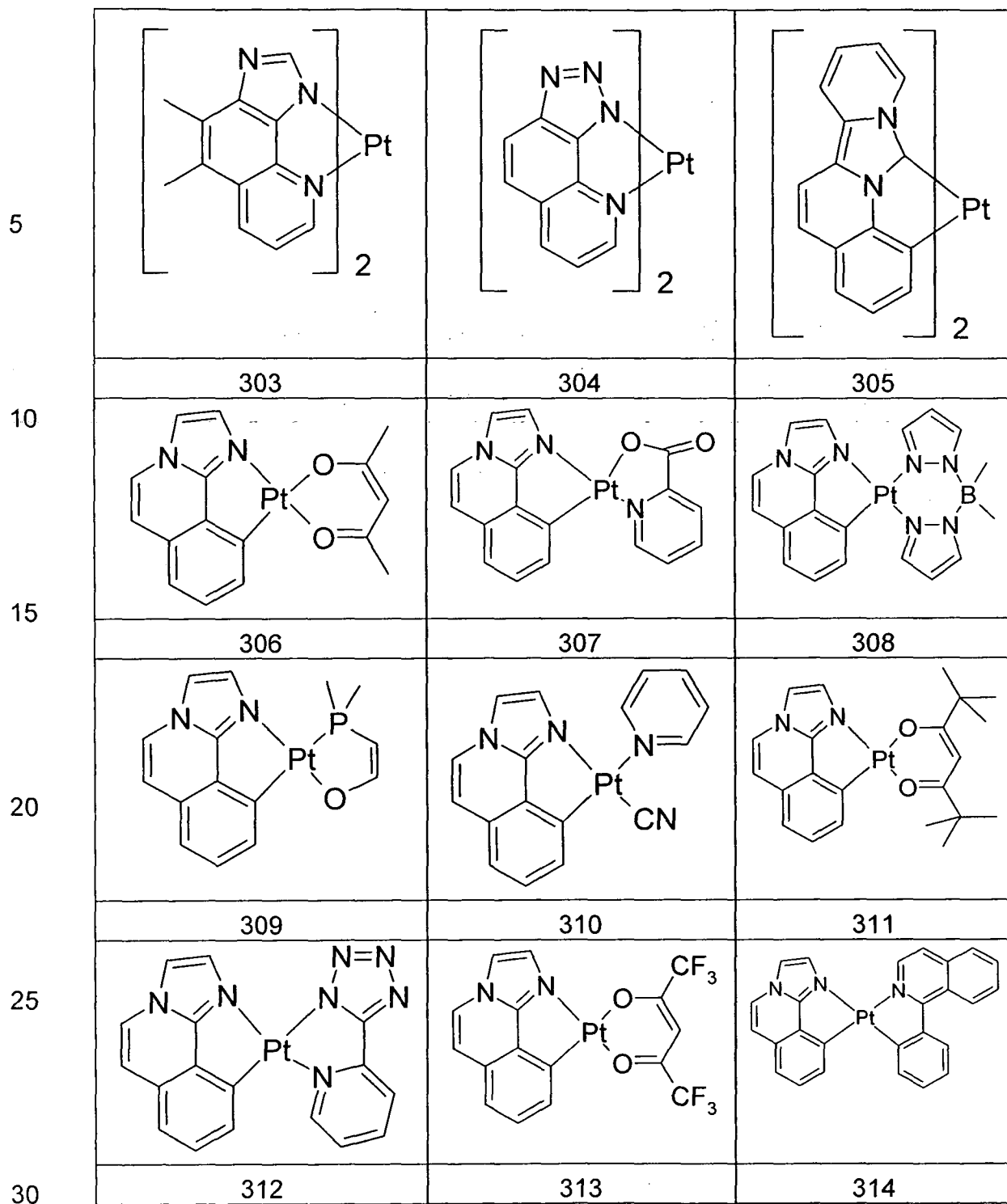


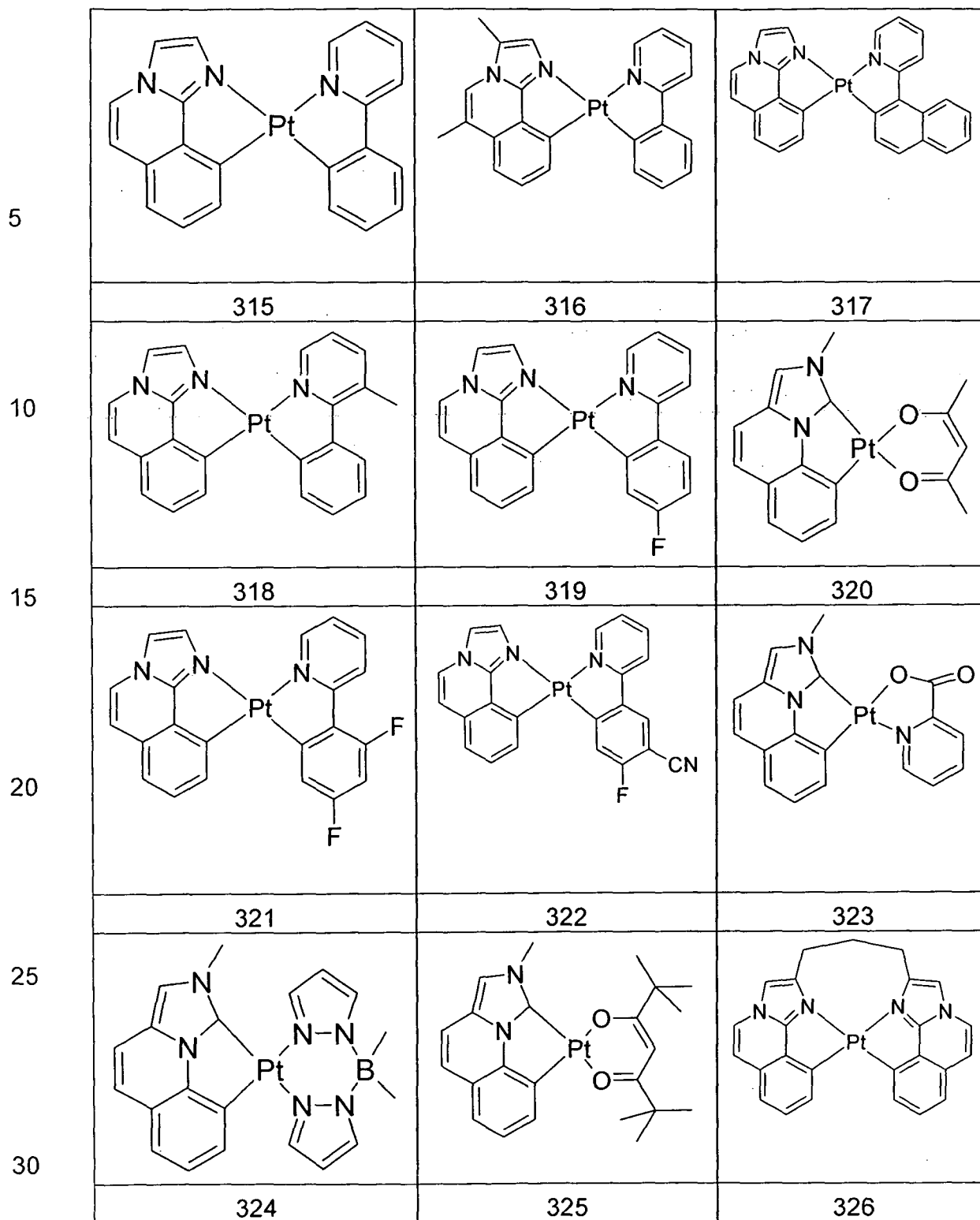


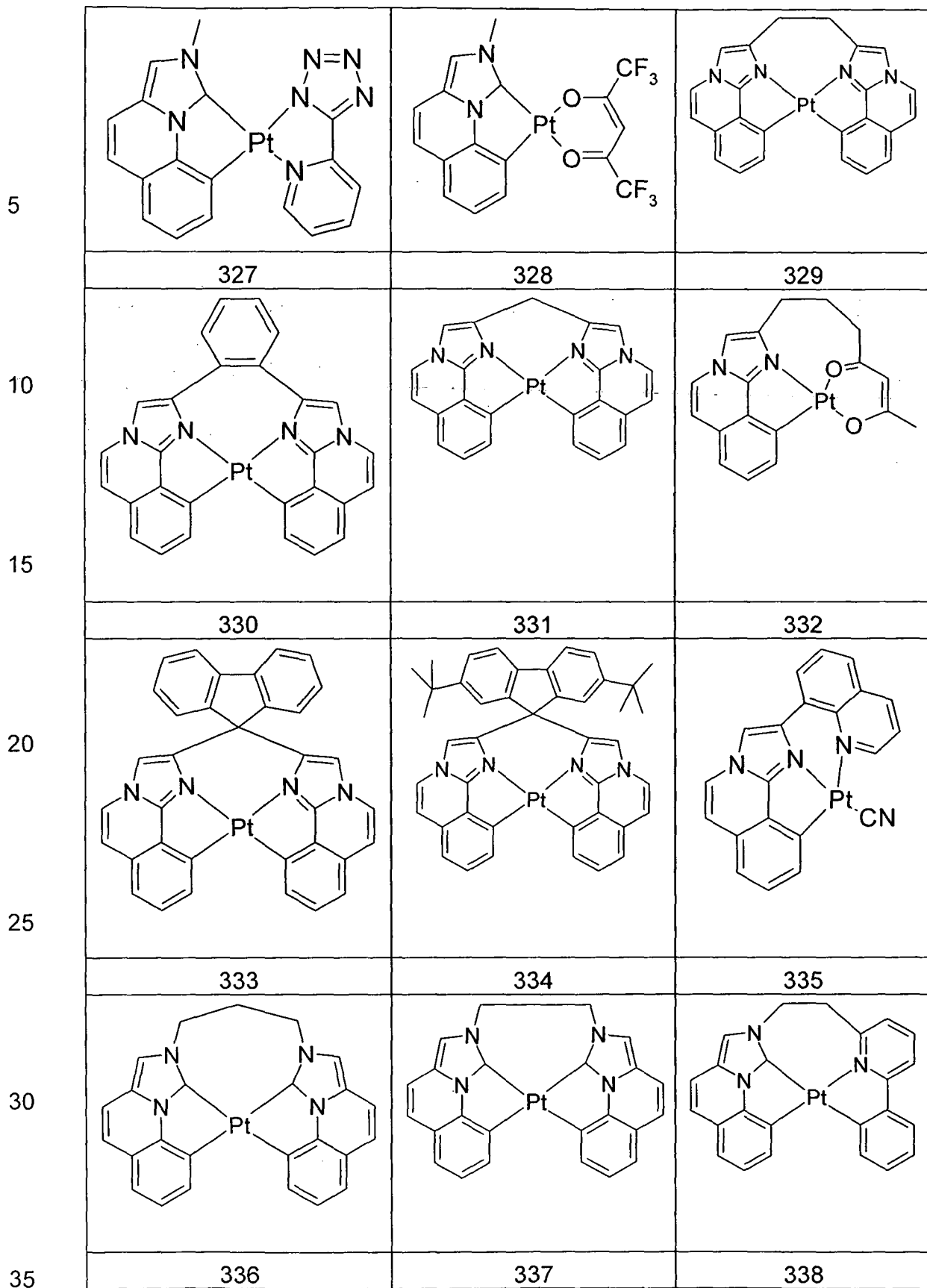




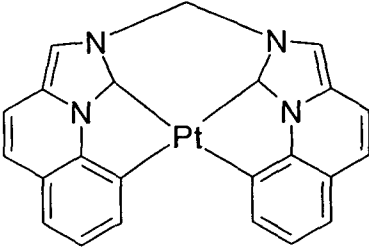
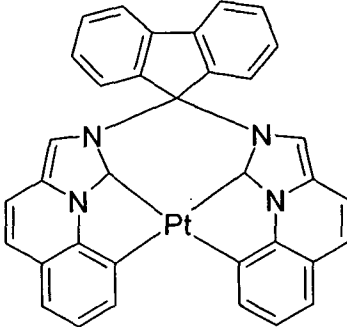
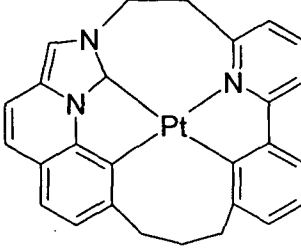
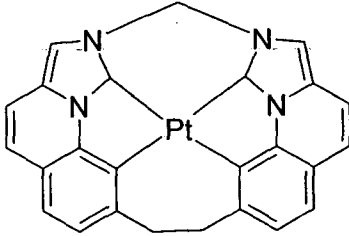
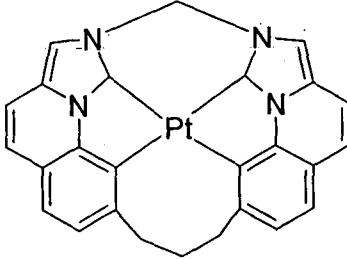
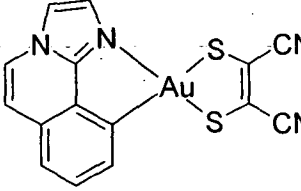
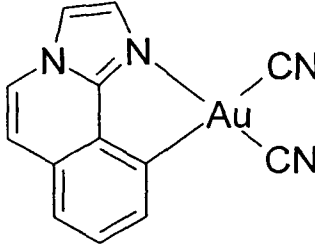
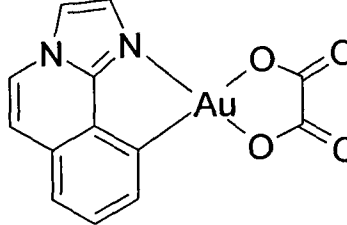
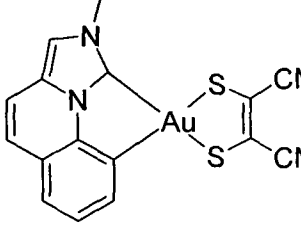
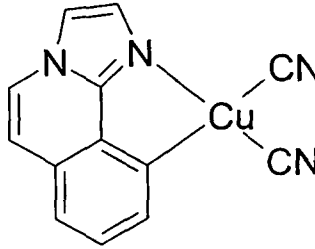
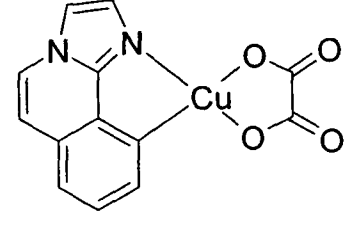
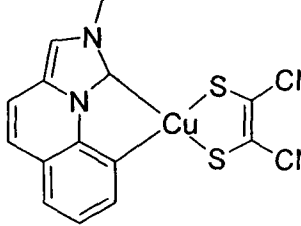




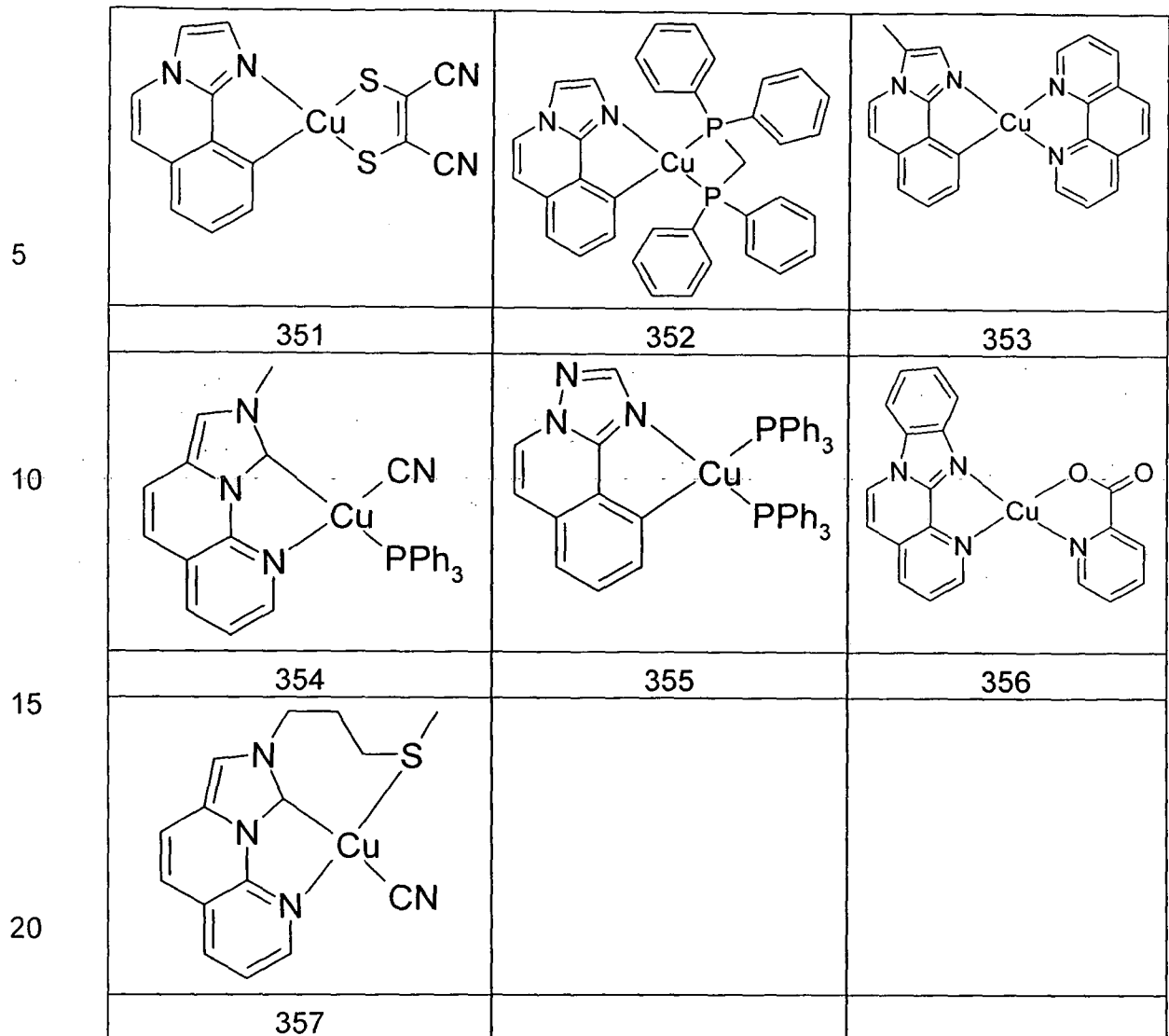




5

		
<p>339</p>	<p>340</p>	<p>341</p>
		
<p>342</p>	<p>343</p>	<p>344</p>
		
<p>345</p>	<p>346</p>	<p>347</p>
		
<p>348</p>	<p>349</p>	<p>350</p>

35



Die erfindungsgemäßen Verbindungen können auch durch geeignete  
 25 Substitution, beispielsweise durch Alkylgruppen, insbesondere verzweigte  
 Alkylgruppen, oder gegebenenfalls substituierte Arylgruppen, beispiels-  
 weise Xylyl-, Mesityl- oder verzweigte Terphenylgruppen, löslich gemacht  
 werden. Diese löslichen Verbindungen eignen sich besonders gut für die  
 Verarbeitung aus Lösung, beispielsweise durch Druckverfahren.

30

Die oben beschriebenen erfindungsgemäßen Verbindungen können auch  
 als Wiederholeinheiten in konjugierten, teilkonjugierten oder nicht-  
 konjugierten Oligomeren, Polymeren oder Dendrimeren Verwendung  
 finden. Unter einem Oligomer im Sinne dieser Erfindung wird eine  
 35 Verbindung mit ca. 3 bis 10 Wiederholeinheiten, die gleich oder

verschieden sein können, verstanden. Die Polymerisation erfolgt dabei bevorzugt über eine Brom- oder Boronsäurefunktionalität. So können derartige Verbindungen u. a. in Polyfluorene (z. B. gemäß EP 842208 oder WO 00/22026), Poly-spirobifluorene (z. B. gemäß EP 707020 oder EP 894107), Poly-dihydrophenanthrene (z. B. gemäß WO 05/014689), Poly-5 indenofluorene (z. B. gemäß WO 04/041901 und WO 04/113468), Poly-phenanthrene (z. B. gemäß WO 05/104264), Poly-para-phenylene (z. B. gemäß WO 92/18552), Polycarbazole (z. B. gemäß WO 04/070772 oder WO 04/113468), Polyketone (z. B. gemäß WO 05/040302), Polysilane (z. B. gemäß WO 05/111113) oder Polythiophene (z. B. gemäß EP 1028136) 10 einpolymerisiert werden oder auch in Copolymeren, die verschiedene dieser Einheiten enthalten. Dabei können sie entweder in die Seitenkette oder in die Hauptkette des Polymers eingebaut werden oder können auch Verzweigungspunkte der Polymerketten (z. B. gemäß WO 06/003000) darstellen.

15 Weiterer Gegenstand der Erfindung sind somit Oligomere, Polymere oder Dendrimere, enthaltend eine oder mehrere der Verbindungen gemäß Formel (1), wobei mindestens einer der oben definierten Reste  $R^1$  bis  $R^8$  eine Bindung zum Polymer oder Dendrimer darstellt. Die Oligomere, Polymere oder Dendrimere können konjugiert, teilkonjugiert oder nicht-20 konjugiert sein. Für Einheiten gemäß Formel (1) gelten in Polymeren und Dendrimeren dieselben Bevorzugungen, wie oben bereits beschrieben. Die Oligomere, Polymere oder Dendrimere können außer den oben aufgeführten Einheiten weitere Einheiten enthalten, die beispielsweise ausgewählt sind aus Wiederholeinheiten, die Lochtransporteigenschaften oder 25 Elektronentransporteigenschaften aufweisen. Hierfür eignen sich die im Stand der Technik bekannten Materialien bzw. Wiederholeinheiten.

30 Die oben genannten Oligomere, Polymere, Copolymeren und Dendrimere zeichnen sich durch ihre gute Löslichkeit in organischen Lösemitteln und hohe Effizienz und Stabilität in elektrolumineszierenden Vorrichtungen aus.

35 Weiterhin können die erfindungsgemäßen Verbindungen gemäß Formel (1), insbesondere solche, die durch Halogene funktionalisiert sind, auch

- 70 -

durch gängige Reaktionstypen weiter funktionalisiert werden und so zu erweiterten Verbindungen gemäß Formel (1) umgesetzt werden. Hier ist als Beispiel die Funktionalisierung mit Arylboronsäuren gemäß Suzuki oder mit Aminen gemäß Hartwig-Buchwald zu nennen.

5 Die oben beschriebenen Komplexe gemäß Formel (1) bzw. die oben aufgeführten bevorzugten Ausführungsformen können in der elektronischen Vorrichtung als aktive Komponente verwendet werden. Unter einer elektronischen Vorrichtung wird eine Vorrichtung verstanden, welche Anode, Kathode und mindestens eine Schicht enthält, wobei diese Schicht  
10 mindestens eine organische bzw. metallorganische Verbindung enthält. Die erfindungsgemäße elektronische Vorrichtung enthält also Anode, Kathode und mindestens eine Schicht, welche mindestens eine Verbindung der oben aufgeführten Formel (1) enthält. Dabei sind bevorzugte elektronische Vorrichtungen ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus  
15 organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen (OLEDs, PLEDs), organischen integrierten Schaltungen (O-ICs), organischen Feld-Effekt-Transistoren (O-FETs), organischen Dünnschichttransistoren (O-TFTs), organischen lichtemittierenden Transistoren (O-LETs), organischen Solarzellen (O-SCs), organischen optischen Detektoren, organischen Photo-  
20 rezeptoren, organischen Feld-Quench-Devices (O-FQDs), lichtemittierenden elektrochemischen Zellen (LECs) oder organischen Laserdioden (O-Laser), enthaltend in mindestens einer Schicht mindestens eine Verbindung gemäß der oben aufgeführten Formel (1). Besonders bevorzugt sind organische Elektrolumineszenzvorrichtungen. Aktive Komponenten sind generell die organischen oder anorganischen Materialien, welche zwischen Anode und Kathode eingebracht sind, beispielsweise Ladungsinjektions-, Ladungstransport- oder Ladungsblockiermaterialien, insbesondere aber Emissionsmaterialien und Matrixmaterialien. Die erfindungsgemäßen Verbindungen zeigen besonders gute Eigenschaften  
25 als Emissionsmaterial in organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen. Eine bevorzugte Ausführungsform der Erfindung sind daher organische Elektrolumineszenzvorrichtungen.

35 Die organische Elektrolumineszenzvorrichtung enthält Kathode, Anode und mindestens eine emittierende Schicht. Außer diesen Schichten kann

sie noch weitere Schichten enthalten, beispielsweise jeweils eine oder mehrere Lochinjektionsschichten, Lochtransportschichten, Lochblockierschichten, Elektronentransportschichten, Elektroneninjectionsschichten, Exzitonenblockierschichten, Elektronenblockierschichten, Ladungserzeugungsschichten und/oder organische oder anorganische p/n-Übergänge. Ebenso können zwischen zwei emittierende Schichten Interlayers eingebracht sein, welche beispielsweise eine Excitonen-blockierende Funktion aufweisen und/oder die Ladungsbalance in der Elektrolumineszenzvorrichtung steuern. Es sei aber darauf hingewiesen, dass nicht notwendigerweise jede dieser Schichten vorhanden sein muss.

Dabei kann die organische Elektrolumineszenzvorrichtung eine emittierende Schicht enthalten, oder sie kann mehrere emittierende Schichten enthalten. Wenn mehrere Emissionsschichten vorhanden sind, weisen diese bevorzugt insgesamt mehrere Emissionsmaxima zwischen 380 nm und 750 nm auf, so dass insgesamt weiße Emission resultiert, d. h. in den emittierenden Schichten werden verschiedene emittierende Verbindungen verwendet, die fluoreszieren oder phosphoreszieren können. Insbesondere bevorzugt sind Dreischichtsysteme, wobei die drei Schichten blaue, grüne und orange oder rote Emission zeigen (für den prinzipiellen Aufbau siehe z. B. WO 05/011013) bzw. Systeme, welche mehr als drei emittierende Schichten aufweisen. Es kann sich auch um ein Hybrid-System handeln, wobei eine oder mehrere Schichten fluoreszieren und eine oder mehrere andere Schichten phosphoreszieren.

In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung enthält die organische Elektrolumineszenzvorrichtung die Verbindung gemäß Formel (1) bzw. die oben aufgeführten bevorzugten Ausführungsformen als emittierende Verbindung in einer oder mehreren emittierenden Schichten.

Wenn die Verbindung gemäß Formel (1) als emittierende Verbindung in einer emittierenden Schicht eingesetzt wird, wird sie bevorzugt in Kombination mit einem oder mehreren Matrixmaterialien eingesetzt. Die Mischung aus der Verbindung gemäß Formel (1) und dem Matrixmaterial enthält zwischen 1 und 99 Vol.-%, vorzugsweise zwischen 2 und 90 Vol.-%, besonders bevorzugt zwischen 3 und 40 Vol.-%, insbesondere



- 72 -

zwischen 5 und 15 Vol.-% der Verbindung gemäß Formel (1) bezogen auf die Gesamtmischung aus Emitter und Matrixmaterial. Entsprechend enthält die Mischung zwischen 99 und 1 Vol.-%, vorzugsweise zwischen 98 und 10 Vol.-%, besonders bevorzugt zwischen 97 und 60 Vol.-%, insbesondere zwischen 95 und 85 Vol.-% des Matrixmaterials bezogen auf die Gesamtmischung aus Emitter und Matrixmaterial.

Als Matrixmaterial können generell alle Materialien eingesetzt werden, die gemäß dem Stand der Technik hierfür bekannt sind. Bevorzugt ist das Triplett-Niveau des Matrixmaterials höher als das Triplett-Niveau des Emitters.

Geeignete Matrixmaterialien für die erfindungsgemäßen Verbindungen sind Ketone, Phosphinoxide, Sulfoxide und Sulfone, z. B. gemäß WO 04/013080, WO 04/093207, WO 06/005627 oder der nicht offen gelegten Anmeldung DE 102008033943.1, Triarylamine, Carbazolderivate, z. B. CBP (N,N-Biscarbazolylbiphenyl), m-CBP oder die in WO 05/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527, WO 08/086851 oder US 2009/0134784 offenbarten Carbazolderivate, Indolocarbazolderivate, z. B. gemäß WO 07/063754 oder WO 08/056746, Indenocarbazolderivate, Azacarbazole, z. B. gemäß EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160, bipolare Matrixmaterialien, z. B. gemäß WO 07/137725, Silane, z. B. gemäß WO 05/111172, Azaborole oder Boronester, z. B. gemäß WO 06/117052, Diazasilolderivate und Diazaphospholderivate, z. B. gemäß der nicht offen gelegten Anmeldung DE 102008056688.8, Triazinderivate, z. B. gemäß der nicht offen gelegten Anmeldung DE 102008036982.9, WO 07/063754 oder WO 08/056746, oder Zinkkomplexe, z. B. gemäß EP 652273 oder WO 09/062578.

Es kann auch bevorzugt sein, mehrere verschiedene Matrixmaterialien als Mischung einzusetzen, insbesondere mindestens ein elektronenleitendes Matrixmaterial und mindestens ein lochleitendes Matrixmaterial. Eine bevorzugte Kombination ist beispielsweise die Verwendung eines aromatischen Ketons oder eines Triazin-Derivates mit einem Triarylamin-Derivat oder einem Carbazol-Derivat als gemischte Matrix für den erfindungsgemäßen Metallkomplex.

Weiterhin bevorzugt ist es, eine Mischung aus zwei oder mehr Triplett-Emittern zusammen mit einer Matrix einzusetzen. Dabei dient der Triplett-Emitter mit dem kürzerwelligen Emissionsspektrum als Co-Matrix für den Triplett-Emitter mit dem längerwelligen Emissionsspektrum.

5

Die erfindungsgemäßen Verbindungen lassen sich auch in anderen Funktionen in der elektronischen Vorrichtung einsetzen, beispielsweise als Lochtransportmaterial in einer Lochinjektions- oder -transportschicht, als Ladungserzeugungsmaterial oder als Elektronenblockiermaterial.

10

Als Kathode sind Metalle mit geringer Austrittsarbeit, Metalllegierungen oder mehrlagige Strukturen aus verschiedenen Metallen bevorzugt, wie beispielsweise Erdalkalimetalle, Alkalimetalle, Hauptgruppenmetalle oder Lanthanoide (z. B. Ca, Ba, Mg, Al, In, Mg, Yb, Sm, etc.). Weiterhin eignen sich Legierungen aus einem Alkali- oder Erdalkalimetall und Silber, beispielsweise eine Legierung aus Magnesium und Silber. Bei mehrlagigen Strukturen können auch zusätzlich zu den genannten Metallen weitere Metalle verwendet werden, die eine relativ hohe Austrittsarbeit aufweisen, wie z. B. Ag, wobei dann in der Regel Kombinationen der Metalle, wie beispielsweise Ca/Ag oder Ba/Ag verwendet werden. Es kann auch bevorzugt sein, zwischen einer metallischen Kathode und dem organischen Halbleiter eine dünne Zwischenschicht eines Materials mit einer hohen Dielektrizitätskonstante einzubringen. Hierfür kommen beispielsweise Alkalimetall- oder Erdalkalimetallfluoride, aber auch die entsprechenden Oxide oder Carbonate in Frage (z. B. LiF, Li<sub>2</sub>O, BaF<sub>2</sub>, MgO, NaF, CsF, Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, etc.). Die Schichtdicke dieser Schicht beträgt bevorzugt zwischen 0.5 und 5 nm.

15

20

25

30

35

Als Anode sind Materialien mit hoher Austrittsarbeit bevorzugt. Bevorzugt weist die Anode eine Austrittsarbeit größer 4.5 eV vs. Vakuum auf. Hierfür sind einerseits Metalle mit hohem Redoxpotential geeignet, wie beispielsweise Ag, Pt oder Au. Es können andererseits auch Metall/Metalloxid-Elektroden (z. B. Al/Ni/NiO<sub>x</sub>, Al/PtO<sub>x</sub>) bevorzugt sein. Für einige Anwendungen muss mindestens eine der Elektroden transparent sein, um entweder die Bestrahlung des organischen Materials (O-SC) oder die

Auskopplung von Licht (OLED/PLED, O-LASER) zu ermöglichen. Ein bevorzugter Aufbau verwendet eine transparente Anode. Bevorzugte Anodenmaterialien sind hier leitfähige gemischte Metalloxide. Besonders bevorzugt sind Indium-Zinn-Oxid (ITO) oder Indium-Zink Oxid (IZO). Bevorzugt sind weiterhin leitfähige, dotierte organische Materialien, insbesondere leitfähige dotierte Polymere, z. B. PEDOT, PANI oder Derivate dieser Polymere.

In den weiteren Schichten können generell alle Materialien verwendet werden, wie sie gemäß dem Stand der Technik für die Schichten verwendet werden, und der Fachmann kann ohne erfinderisches Zutun jedes dieser Materialien in einer elektronischen Vorrichtung mit den erfindungsgemäßen Materialien kombinieren.

Die Vorrichtung wird entsprechend (je nach Anwendung) strukturiert, kontaktiert und schließlich hermetisch versiegelt, da sich die Lebensdauer derartiger Vorrichtungen bei Anwesenheit von Wasser und/oder Luft drastisch verkürzt.

Weiterhin bevorzugt ist eine organische Elektrolumineszenzvorrichtung, dadurch gekennzeichnet, dass eine oder mehrere Schichten mit einem Sublimationsverfahren beschichtet werden. Dabei werden die Materialien in Vakuum-Sublimationsanlagen bei einem Anfangsdruck von üblicherweise kleiner  $10^{-5}$  mbar, bevorzugt kleiner  $10^{-6}$  mbar aufgedampft. Es ist auch möglich, dass der Anfangsdruck noch geringer oder noch höher ist, beispielsweise kleiner  $10^{-7}$  mbar.

Bevorzugt ist ebenfalls eine organische Elektrolumineszenzvorrichtung, dadurch gekennzeichnet, dass eine oder mehrere Schichten mit dem OVPD (Organic Vapour Phase Deposition) Verfahren oder mit Hilfe einer Trägergassublimation beschichtet werden. Dabei werden die Materialien bei einem Druck zwischen  $10^{-5}$  mbar und 1 bar aufgebracht. Ein Spezialfall dieses Verfahrens ist das OVJP (Organic Vapour Jet Printing) Verfahren, bei dem die Materialien direkt durch eine Düse aufgebracht und so strukturiert werden (z. B. M. S. Arnold *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **2008**, *92*, 053301).

Weiterhin bevorzugt ist eine organische Elektrolumineszenzvorrichtung, dadurch gekennzeichnet, dass eine oder mehrere Schichten aus Lösung, wie z. B. durch Spincoating, oder mit einem beliebigen Druckverfahren, wie z. B. Siebdruck, Flexodruck, Offsetdruck oder Nozzle-Printing, besonders bevorzugt aber LITI (Light Induced Thermal Imaging, Thermo-  
5 transferdruck) oder Ink-Jet Druck (Tintenstrahldruck), hergestellt werden. Hierfür sind lösliche Verbindungen nötig, welche beispielsweise durch geeignete Substitution erhalten werden.

10 Die organische Elektrolumineszenzvorrichtung kann auch als Hybrid-system hergestellt werden, indem eine oder mehrere Schichten aus Lösung aufgebracht werden und eine oder mehrere andere Schichten aufgedampft werden. So ist es beispielsweise möglich, eine emittierende Schicht enthaltend eine Verbindung gemäß Formel (1) und ein Matrix-  
15 material aus Lösung aufzubringen und darauf eine Lochblockierschicht und/oder eine Elektronentransportschicht im Vakuum aufzudampfen.

Diese Verfahren sind dem Fachmann generell bekannt und können von ihm ohne Probleme auf organische Elektrolumineszenzvorrichtungen  
20 enthaltend Verbindungen gemäß Formel (1) bzw. die oben aufgeführten bevorzugten Ausführungsformen angewandt werden.

Die erfindungsgemäßen elektronischen Vorrichtungen, insbesondere organische Elektrolumineszenzvorrichtungen, zeichnen sich durch  
25 folgende überraschende Vorteile gegenüber dem Stand der Technik aus:

1. Organische Elektrolumineszenzvorrichtungen enthaltend Verbindungen gemäß Formel (1) als emittierende Materialien weisen  
30 eine exzellente Lebensdauer auf.
2. Organische Elektrolumineszenzvorrichtungen enthaltend Verbindungen gemäß Formel (1) als emittierende Materialien weisen  
eine hervorragende Effizienz auf.

35

3. Mit den erfindungsgemäßen Metallkomplexen sind organische Elektrolumineszenzvorrichtungen zugänglich, welche im blauen Farbbereich phosphoreszieren. Insbesondere blaue Phosphoreszenz ist gemäß dem Stand der Technik nur sehr schwierig mit guten Effizienzen und Lebensdauern zu verwirklichen.

5

Diese oben genannten Vorteile gehen nicht mit einer Verschlechterung der weiteren elektronischen Eigenschaften einher.

10

Die Erfindung wird durch die nachfolgenden Beispiele näher erläutert, ohne sie dadurch einschränken zu wollen. Der Fachmann kann aus den Schilderungen ohne erfinderisches Zutun weitere erfindungsgemäße elektronische Vorrichtungen herstellen und somit die Erfindung im gesamten beanspruchten Bereich ausführen.

15

**Beispiele:**

20

Die nachfolgenden Synthesen werden, sofern nicht anders angegeben, unter einer Schutzgasatmosphäre in getrockneten Lösungsmitteln durchgeführt. Die Metallkomplexe werden zusätzlich unter Ausschluss von Licht gehandhabt. Die Lösungsmittel und Reagenzien können von ALDRICH bzw. ABCR bezogen werden.

**A: Synthese der Liganden**

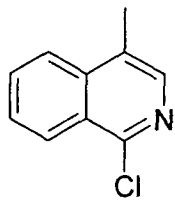
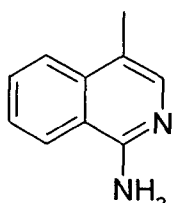
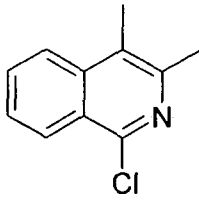
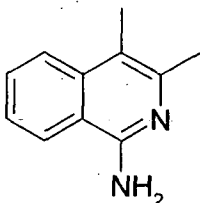
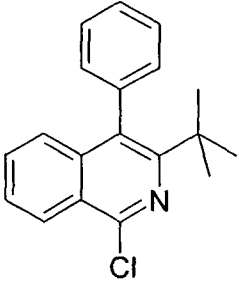
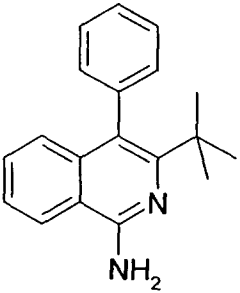
25

**1) Imidazo[2,1-a]isochinolin-Systeme****Synthese von 1-Amino-isochinolin:**

30

Ein Gemisch aus 100 mmol des 1-Chlor-isochinolin-Derivats, 600 mmol Ammoniumchlorid in 100 ml Sulfolan wird 20 h bei 200 °C gerührt. Die erkaltete Mischung wird mit 200 ml Wasser versetzt und 1 h bei Raumtemperatur gerührt. Der Feststoff wird abgesaugt, einmal mit 50 ml Wasser gewaschen und anschließend in einem Gemisch aus 50 ml Methanol und 150 ml konz. Ammoniak-Lösung suspendiert. Die Suspension wird 20 h bei Raumtemperatur gerührt, der Feststoff wird abfiltriert, dreimal mit 50 ml Methanol/Wasser 1:1 gewaschen, im Vakuum getrocknet und einer Kugelrohrdestillation unterzogen.

35

Bsp.	1-Chlor-isoquinolin-Derivat	1-Amino-isoquinolin-Derivat	Ausbeute
5 A1	 24188-78-1		74 %
10 A2	 15787-20-9		67 %
15 20 A3	 55792-01-3		61 %

#### Ligandensynthese Variante A:

Eine gut gerührte Mischung aus 100 mmol des 1-Amino-isoquinolin-Derivats, 150 mmol der Carbonylkomponente, 130 mmol Natriumhydrogencarbonat, 80 ml Ethanol und 15 ml Wasser wird so lange (Aldehyde ca. 3 – 8 h, Ketone ca. 30 – 100 h) unter Rückfluss erhitzt, bis das 1-Amino-isoquinolin umgesetzt ist. Anschließend wird das Lösungsmittel im Vakuum entfernt, der Rückstand wird in 500 ml Dichlormethan aufgenommen, dreimal mit 200 ml Wasser gewaschen. Nach Trocknen der organischen Phase und Entfernen des Lösungsmittels im Vakuum wird der Rückstand an Kieselgel chromatographiert (Laufmittel: Essigsäureethylester – Heptan – Gemische). Die so erhaltenen Öle / Feststoffe werden im Ölpumpenvakuum, durch Kugelrohrdestillation oder Sublimation von Leichtsiedern befreit.

- 78 -

**Ligandensynthese Variante B:**

Eine Mischung aus 100 mol des 1-Amino-isoquinolin-Derivats, 300 mol der Carbonylkomponente, 150 mol Natriumhydrogencarbonat, 150 ml DMF und 30 g Glaskugeln (Durchmesser 3 mm) wird 24 h bei 130 °C gerührt.

5

Anschließend filtriert man von den Glaskugeln und Salzen ab, entfernt das DMF in Vakuum und chromatographiert den Rückstand an Kieselgel (Laufmittel: Essigsäureethylester – Heptan – Gemische). Die so erhaltenen Öle / Feststoffe werden im Ölpumpenvakuum, durch Kugelrohrdestillation oder Sublimation von Leichtsiedern befreit.

10

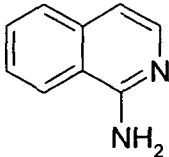
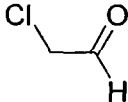
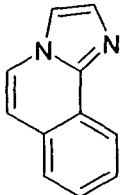
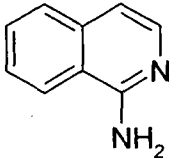
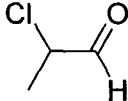
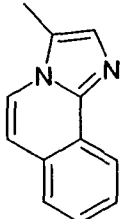
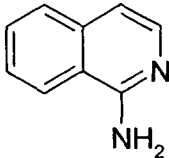
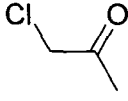
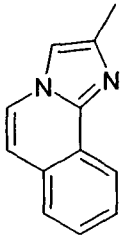
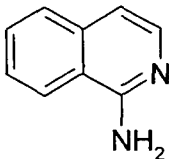
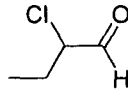
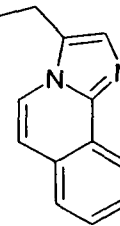
15

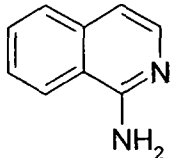
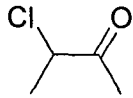
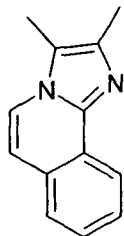
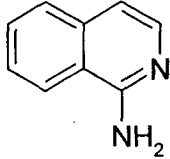
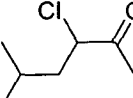
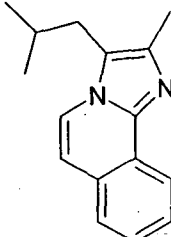
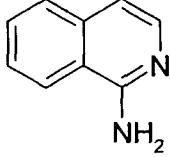
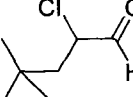
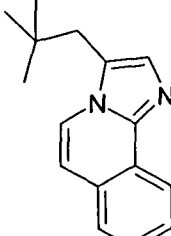
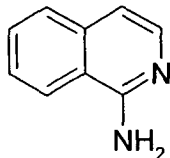
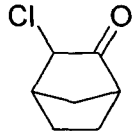
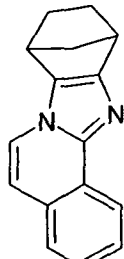
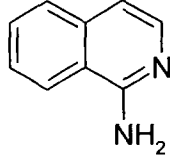
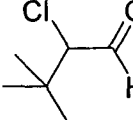
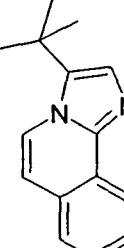
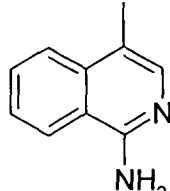
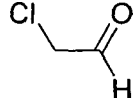
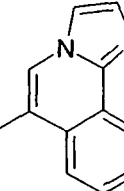
20

25

30

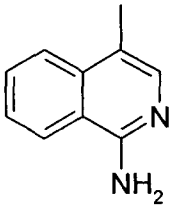
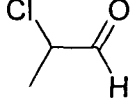
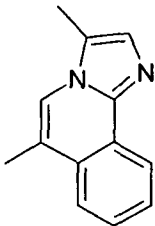
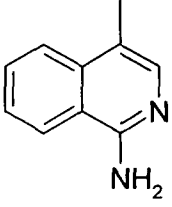
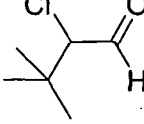
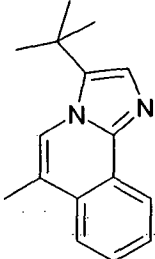
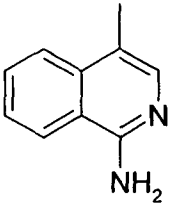
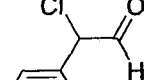
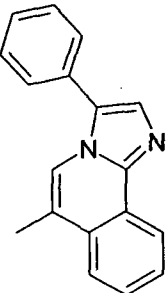
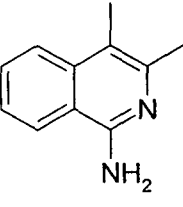
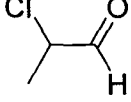
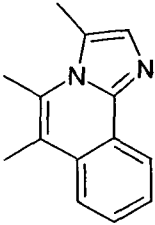
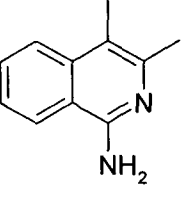
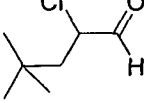
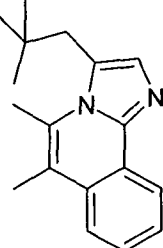
35

Bsp	Variante	1-Amino- isoquinolin-Derivat	Carbonyl- Kompo- nente	Produkt	Ausbeute
L1	A	 1532-84-9	 107-20-0		84 %
L2	A	 1532-84-9	 683-50-1		79 %
L3	A	 1532-84-9	 78-95-5		81 %
L4	A	 1532-84-9	 28832-55-5		83 %

5	L5	A		 4091-39-8		65 %
10	L6	A		 29585-17-9		76 %
15	L7	A		 29846-94-4		70 %
20	L8	B		 61914-03-2		54 %
30	L9	B		 		85 %
35	L10	A		 		91 %



5  
10  
15  
20  
25  
30

L11	A				90 %
L12	B				84 %
L13	A		 4638-79-3		86 %
L14	A				93 %
L15	A				80 %

35

5

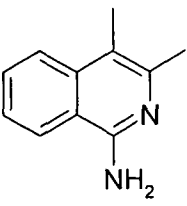
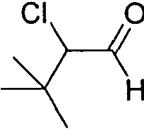
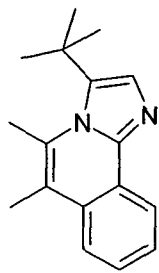
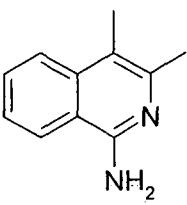
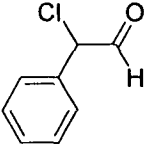
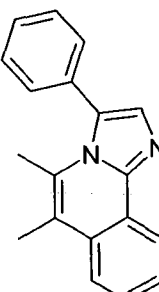
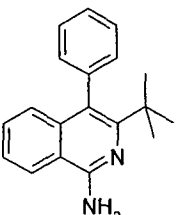
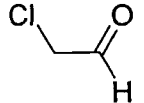
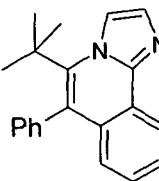
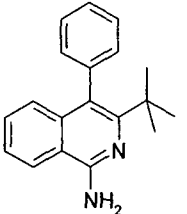
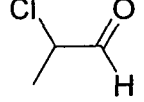
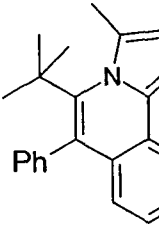
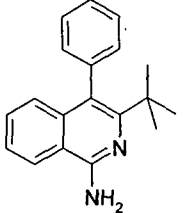
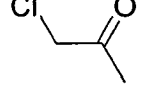
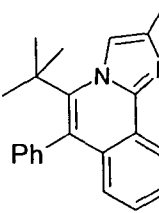
10

15

20

25

30

L16	B				68 %
L17	A				77 %
L18	A				88 %
L19	A				35 %
L20	B				72 %

35

5

10

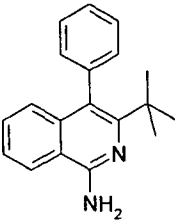
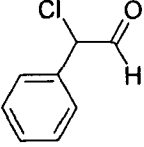
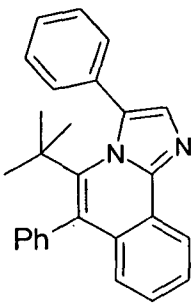
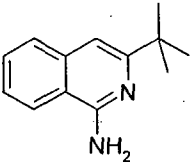
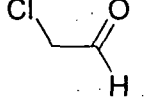
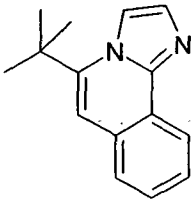
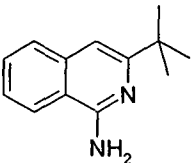
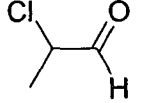
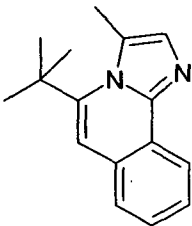
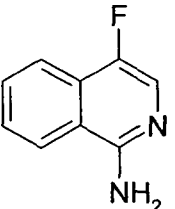
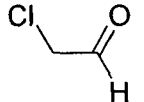
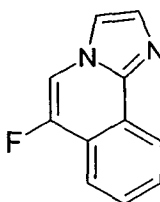
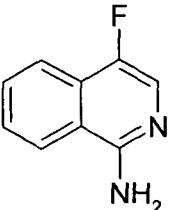
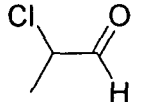
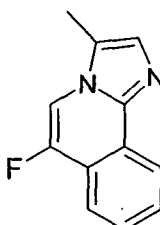
15

20

25

30

35

L21	A				31 %
L22	A	 58814-41-8			91 %
L23	B				73 %
L24	A	 55270-26-3			84 %
L25	A				84 %

5

10

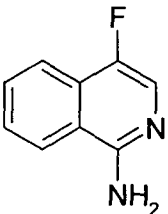
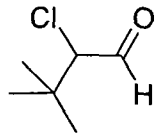
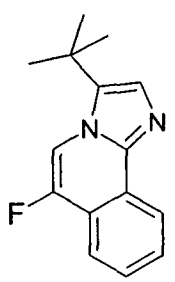
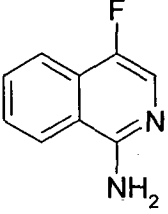
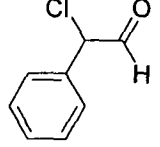
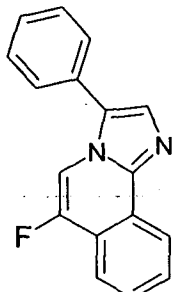
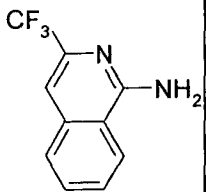
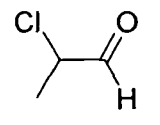
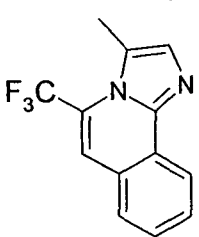
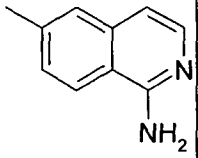
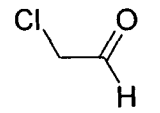
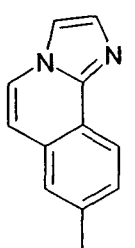
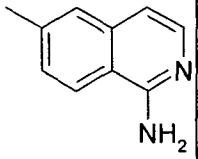
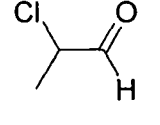
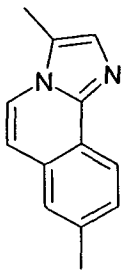
15

20

25

30

35

L26	B				79 %
L27	A				80 %
L28	B	 <p>58814-43-0</p>			29 %
L29	A	 <p>42398-74-3</p>			89 %
L30	A				90 %

5

10

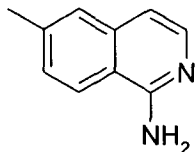
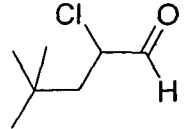
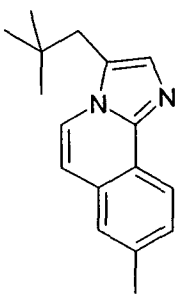
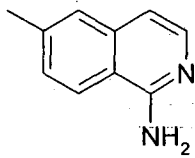
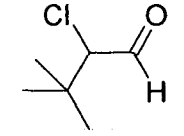
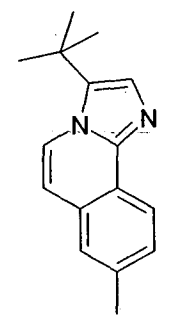
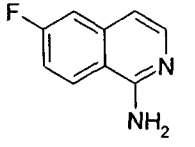
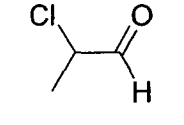
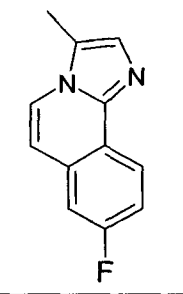
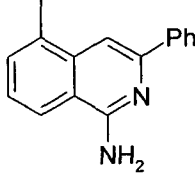
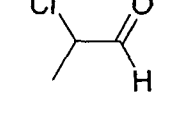
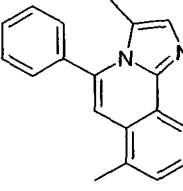
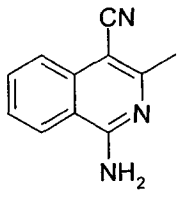
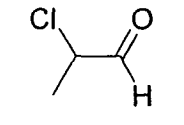
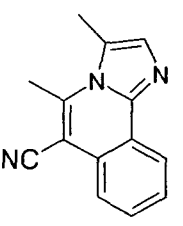
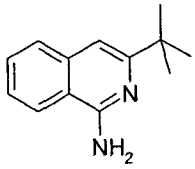
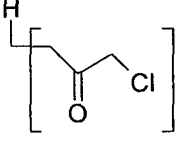
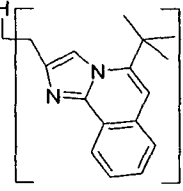
15

20

25

30

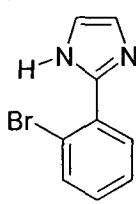
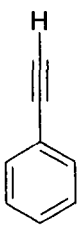
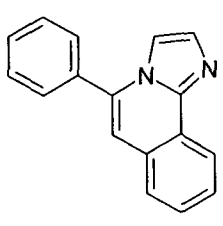
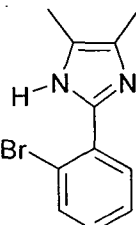
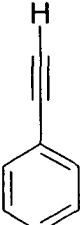
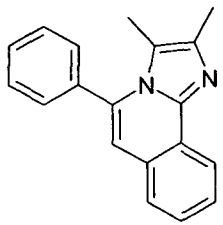
35

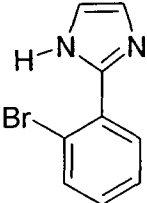
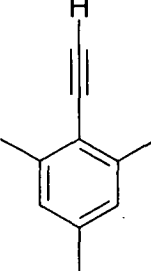
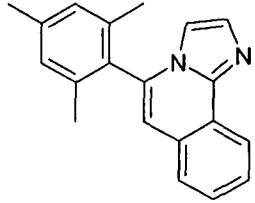
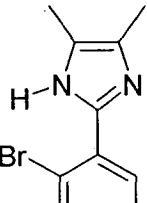
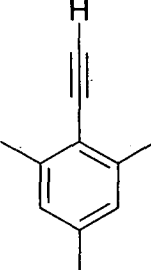
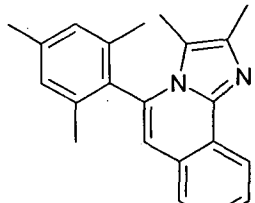
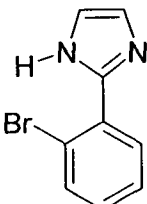
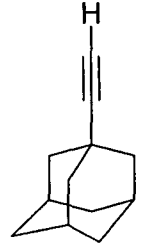
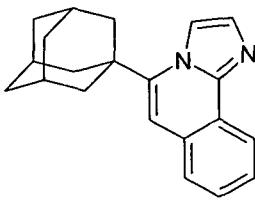
L31	A				82 %
L32	B				71 %
L33	A	 <p>1009034-72-3</p>			87 %
L34	A	 <p>58814-44-1</p>			48 %
L35	A	 <p>161468-33-3</p>			69 %
L36	A				41 %

			55756-20-2		
--	--	--	------------	--	--

**Ligandensynthese Variante C:**

100 mmol des 2-Phenylimidazol-Derivats wird in 400 ml Triethylamin vorgelegt. Unter Rühren gibt man nacheinander 200 ml des Alkins, 6 mmol  
 5 Triphenylphosphin, 6 mmol Kupfer(I)iodid und 3 mmol Palladium(II)acetat zu. Anschließend wird die Reaktionsmischung 20 h bei 80 °C gerührt. Nach  
 Erkalten wird die Reaktionsmischung mit 400 ml Dichlormethan verdünnt, die Feststoffe werden durch Filtration über ein Celite-Bett abgetrennt, das  
 10 Filtrat wird zur Trockene eingengt. Der Rückstand wird in 300 ml Dichlormethan aufgenommen, die Lösung wird dreimal mit je 100 ml konz.  
 Ammoniak-Lösung und dreimal mit je 100 ml Wasser gewaschen und über Magnesiumsulfat getrocknet. Nach Entfernen des Lösungsmittels im  
 15 Vakuum wird das Rohprodukt auf Kieselgel (5 g pro g Rohprodukt) aufgezogen und auf eine Kieselgelsäule gepackt. Mit Dichlormethan werden  
 zunächst Nebenprodukte entfernt, dann wird auf THF umgestellt und das Produkt eluiert. Die so erhaltenen Öle / Feststoffe werden im Ölpumpen-  
 vakuum, durch Kugelrohrdestillation oder Sublimation von Leichtsiedern befreit.

Bsp	2-Phenyl- imidazol- Derivat	Alkin	Produkt	Ausbeute
L37	 162356-38-9	 536-74-3		38 %
L38	 496807-43-3			51 %

5	L39		 769-26-6		44 %
10	L40				21 %
15	L41		 40430-66-8		17 %
20					

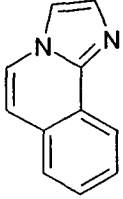
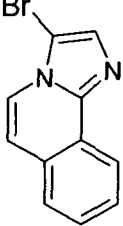
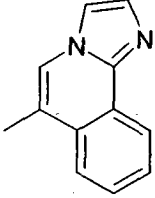
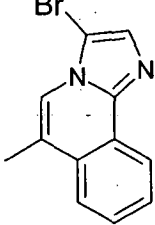
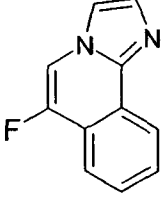
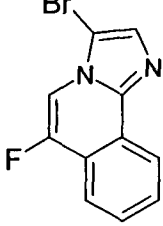
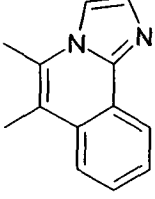
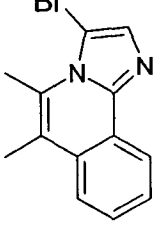
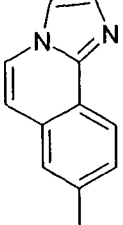
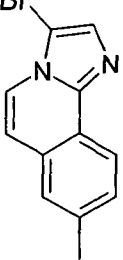
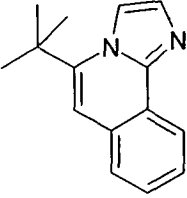
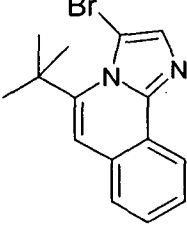
### Ligandensynthese Variante D:

#### Synthese von 3-Brom-imidazo[2,1-a]isochinolinen:

25 Eine auf +5° C gekühlte, gut gerührte Lösung von 100 mmol des Imidazo[2,1-a]iso-chinolin-Derivats in 300 ml THF wird portionsweise derart mit 105 mmol N-Bromsuccinimid versetzt, dass die Temperatur +10 °C nicht übersteigt. Nach vollendeter Zugabe und Erwärmen der

30 Reaktionsmischung auf Raumtemperatur wird mit 300 ml Dichlormethan verdünnt, die org. Phase wird fünfmal mit 500 ml ges. Natriumcarbonat-Lösung gewaschen und über Magnesiumsulfat getrocknet. Das Lösungsmittel wird im Vakuum weitgehend entfernt, der Rückstand wird mit 200 ml n-Heptan versetzt und 12 h gerührt. Der so erhaltene Feststoff wird

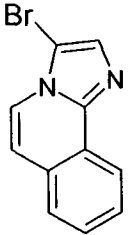

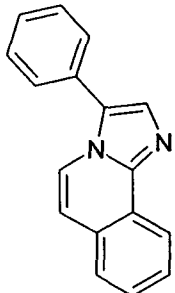
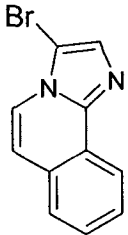
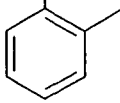
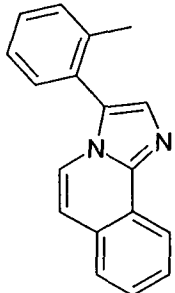
35 abfiltriert, mit n-Heptan gewaschen und im Vakuum getrocknet.

Bsp.	Imidazo[2,1-a]iso- chinolin-Derivat	3-Brom-imidazo[2,1-a] isochinolin-Derivat	Ausbeute
5 A4			81 %
10 A5			79 %
15 A6			76 %
20 A7			64 %
25 A8			80 %
30 A9			45 %
35			



**Suzukikupplung:**

Ein gut gerührtes Gemisch von 100 mmol des 3-Brom-imidazo[2,1-a]iso-chinolin-Derivats, 400 mmol der Boronsäure, 600 mmol Trikaliumphosphat (wasserfrei), 200 g Glaskugeln (3 mm Durchmesser) in 500 ml Toluol wird mit 20 mmol Dicyclohexyl(2',6'-dimethoxy[1,1'-biphenyl]-2-yl)-phosphin und 10 mmol Palladium(II)acetat versetzt und 60 h bei 70 °C gerührt. Nach Erkalten wird über ein Celite-Bett abfiltriert, die organische Phase wird dreimal mit 500 ml Wasser gewaschen, über Magnesiumsulfat getrocknet und dann im Vakuum zur Trockene eingeeengt. Der Rückstand wird an Kieselgel (Laufmittel Essigsäureethylester – n-Heptan) chromatographiert. Die so erhaltenen Öle / Feststoffe werden im Ölpumpenvakuum, durch Kugelrohrdestillation oder Sublimation von Leichtsiedern und Metallspuren befreit.

Bsp.	3-Brom-imidazo[2,1-a]iso-chinolin-Derivat	Boron-säure	Produkt	Ausbeute
L42		HO-B-OH  98-80-6		87 %
L43		HO-B-OH  16419-60-6		80 %

30

35

5

10

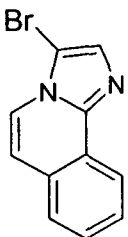
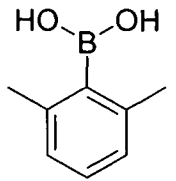
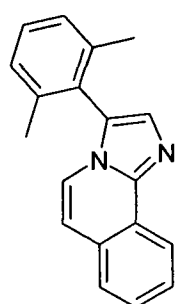
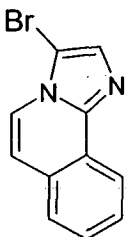
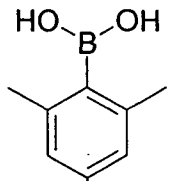
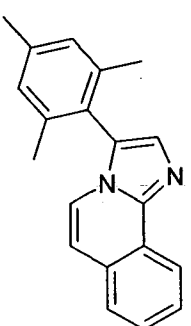
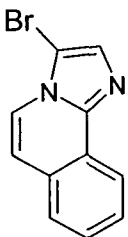
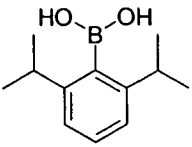
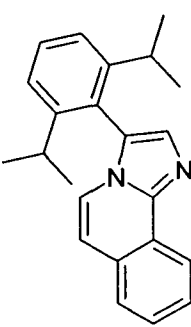
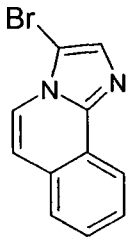
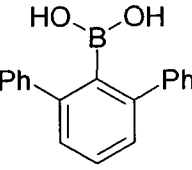
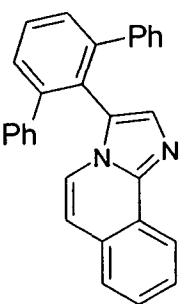
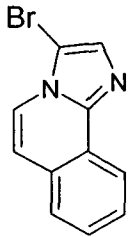
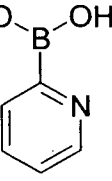
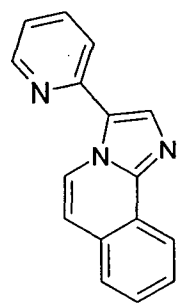
15

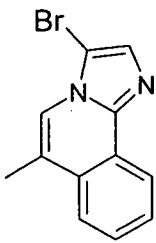
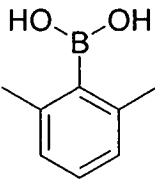
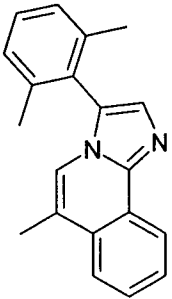
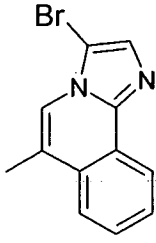
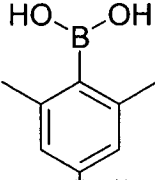
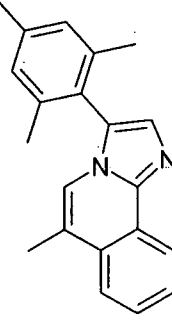
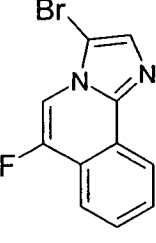
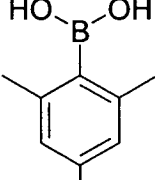
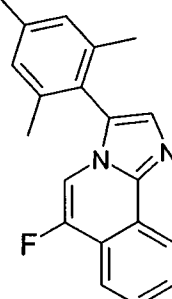
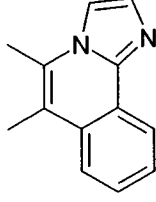
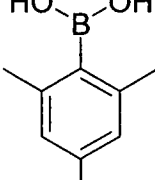
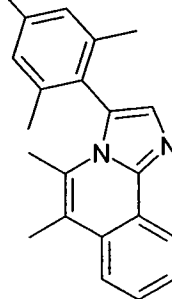
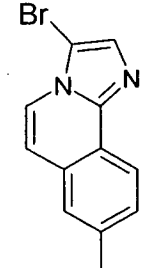
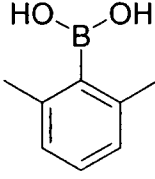
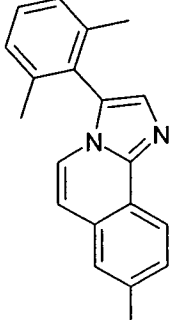
20

25

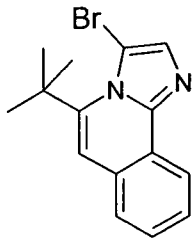
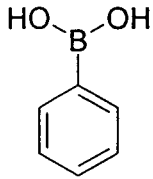
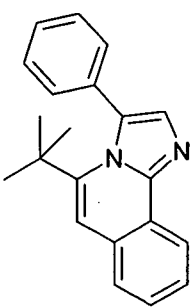
30

35

L44		HO-B-OH  100379-00-8		76 %
L45		HO-B-OH  5980-97-2		59 %
L46		HO-B-OH  363166-79-4		37 %
L47		HO-B-OH  1065663-52-6		17 %
L48		HO-B-OH  197958-29-5		83 %

5	L49				71 %
10	L50				66 %
15	L51				69 %
20	L52				57 %
25	L53				71 %
30					
35					

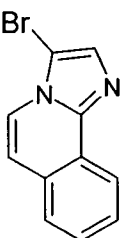
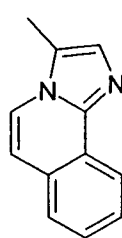
- 91 -

L54				23 %
-----	---	---	---	------

5

**Ligandensynthese Variante E:**

10 Zu einer gut gerührten, auf  $-78\text{ }^{\circ}\text{C}$  gekühlten Lösung von 100 mmol des  
 3-Brom-imidazo[2,1-a]iso-chinolin-Derivats in 1000 ml Diethylether tropft  
 man während 5 min. 105 mmol, 62.6 ml n-Butyllitium (1.6 M in Hexan) zu.  
 Man rührt 15 min. nach und gibt dann 120 mmol des Elektrophils während  
 15 organische Phase einmal mit 500 ml Wasser, trocknet diese über  
 Magnesiumsulfat und entfernt das Lösungsmittel im Vakuum. Der Rück-  
 stand wird an Kieselgel (Laufmittel Essigsäureethylester – n-Heptan)  
 chromatographiert. Die so erhaltenen Öle / Feststoffe werden im  
 Ölpumpenvakuum, durch Kugelrohrdestillation oder Sublimation von  
 20 Leichtsiedern befreit.

Bsp.	3-Brom-imidazo [2,1-a]iso-chinolin- Derivat	Elektrophil	Produkt	Ausbeute
L55		$\text{H}_3\text{C-I}$		87 %

30

35

5

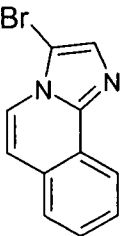
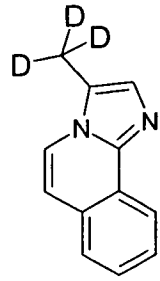
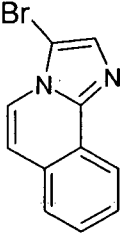
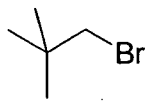
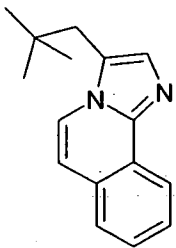
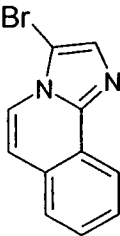
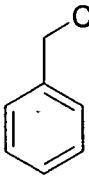
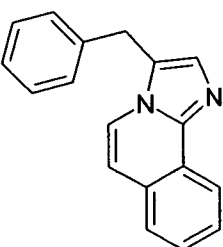
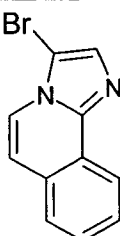
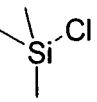
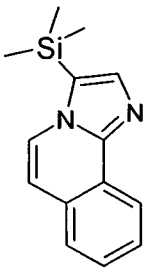
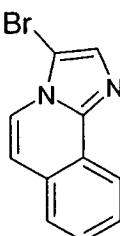
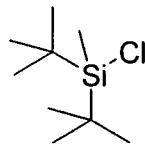
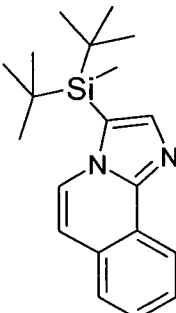
10

15

20

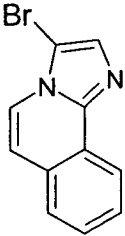
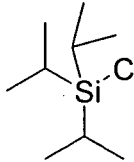
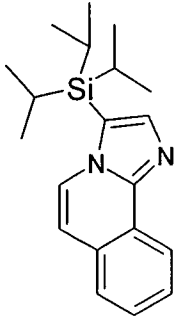
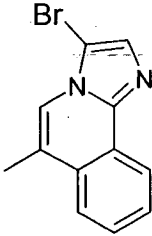
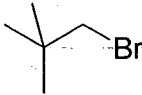
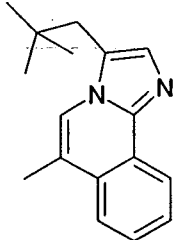
25

30

L56		D <sub>3</sub> C-I		83 %
L57		 630-17-1		70 %
L58				84 %
L59		 Die org. Phase wird nicht mit Wasser gewaschen.		57 %
L60		 70892-81-8 Die org. Phase wird nicht mit Wasser gewaschen.		36 %

35

- 93 -

5 L61		 13154-24-0 Die org. Phase wird nicht mit Wasser gewaschen.		21 %
10 L62				74 %

15

**Ligandensynthese Variante F:**

Ein gut gerührtes Gemisch von 100 mmol des 2-Aryl-imidazol-Derivats, 120 mmol des Alkins und 120 mmol Kupfer(II)acetat in 1000 ml DMF wird mit 2 mmol Pentamethylcyclopentadienylrhodium(III)chloro-dimer und 8 mmol Tetrphenylcyclopentadien versetzt und 20 h bei 80 °C gerührt. Nach Erkalten wird über ein Celite-Bett abfiltriert, die organische Phase wird mit 1000 ml Dichlormethan versetzt, fünfmal mit 500 ml Wasser gewaschen, über Magnesiumsulfat getrocknet und dann im Vakuum zur Trockene eingeeengt. Der Rückstand wird an Kieselgel (Laufmittel Essigsäureethylester – n-Heptan) chromatographiert. Die so erhaltenen Öle / Feststoffe werden im Ölpumpenvakuum, durch Kugelrohrdestillation oder Sublimation von Leichtsiedern befreit.

30

35

5

10

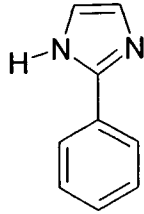

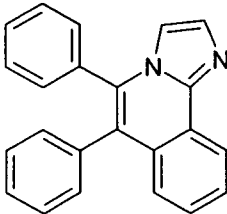
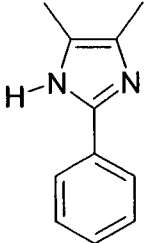

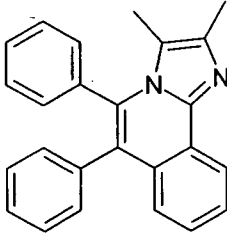
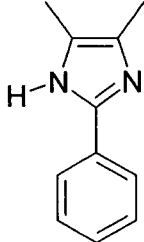
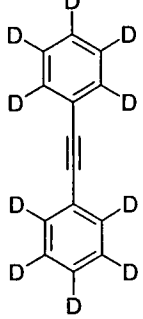
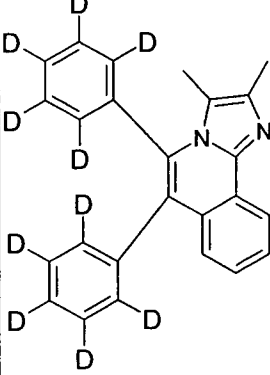
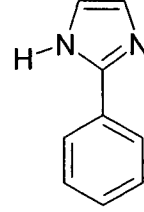
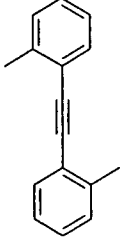
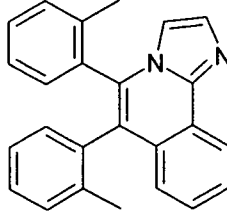
15

20

25

30

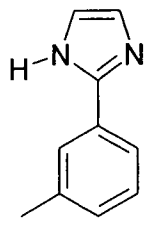

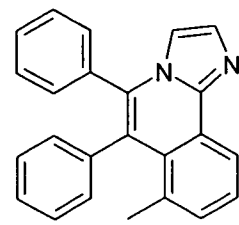
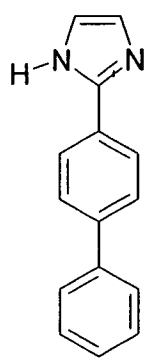

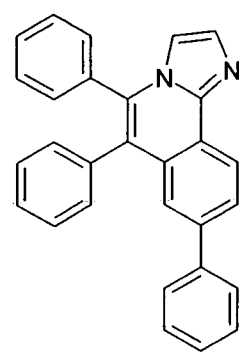
35

Bsp.	2-Aryl-imidazol-Derivat	Alkin	Produkt	Ausbeute
L63	 670-96-2	 501-65-5		63 %
L64	 13682-20-7			54 %
L65		 19339-46-9		57 %
L66		 5294-03-1		61 %

5

10

15

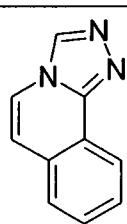
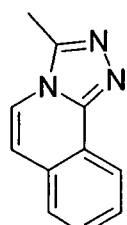
L67	 21202-37-9			26 %
L68	 92437-07-5			57 %

2) 1,2,4-Triazolo[3,4-a]isochinolin-Systeme

20

25

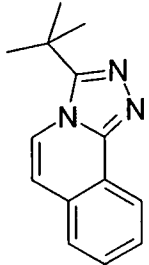
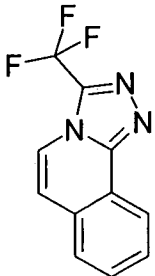
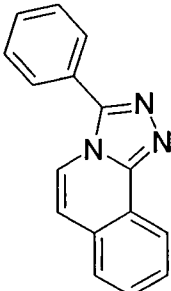
30

Bsp	Literatur	Produkt
L69	G. S. Sidhu et al. J. Heterocyclic Chem. <b>1966</b> , 3(2), 158.	
L70	H. Reimlinger et al. Chem. Ber. <b>1970</b> , 103, 1960.	

35

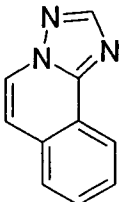
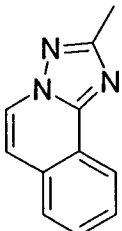


- 96 -

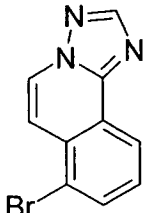
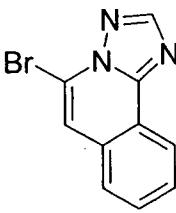
5	L71	Analog Bsp. L70 , jedoch wird statt Acetanhydrid Pivaloinsäureanhydrid [1538-75-6] eingesetzt	
10	L72	H. Reimlinger et al. Chem. Ber. <b>1970</b> , <i>103</i> , 1960.	
15	L73	H. Reimlinger et al. Chem. Ber. <b>1970</b> , <i>103</i> , 1960.	

20

### 3) 1,2,4-Triazolo[5,1-a]isochinolin-Systeme

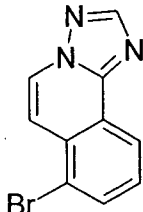
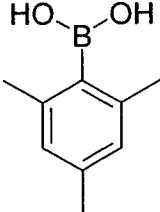
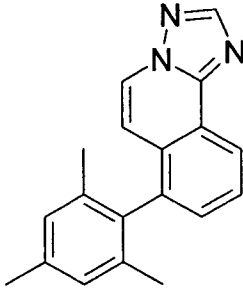
Bsp	Literatur	Produkt	
25	L74	Y.-I. Lin et al. J. Org. Chem., <b>1981</b> , <i>46(15)</i> , 3123	
30	L75	C. N. Hoang et al. ARKIVOC, <b>2001</b> , <i>2(2)</i> , 42-50	

35

L76	C. Hoogzand et al. Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas <b>1971</b> , <i>90</i> (11), 1225-33	
L77	H. Reimlinger et al. Chem. Ber., <b>1971</b> , <i>104</i> (12), 3965-75	

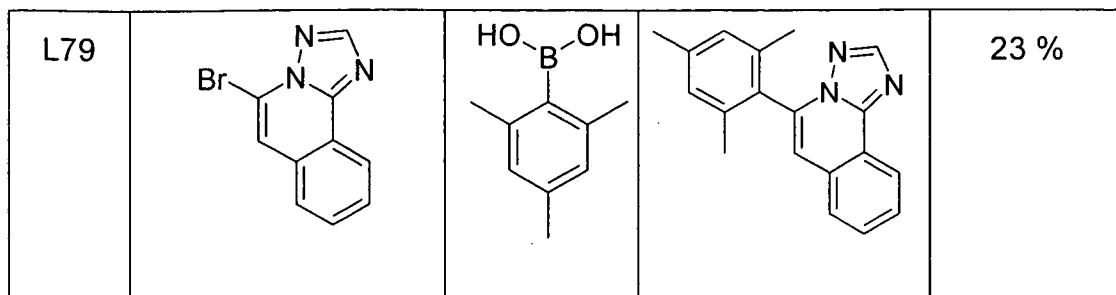
**Suzuki-Kupplung:**

Ein gut gerührtes Gemisch von 100 mmol des Brom-1,2,4-Triazolo[5,1-a]isochinolin-Derivats, 400 mmol der Boronsäure, 600 mmol Trikaliumphosphat (wasserfrei), 200 g Glaskugeln (3 mm Durchmesser) in 500 ml Toluol wird mit 20 mmol Dicyclohexyl(2',6'-dimethoxy[1,1'-biphenyl]-2-yl)-phosphin und 10 mmol Palladium(II)acetat versetzt und 60 h bei 70 °C gerührt. Nach Erkalten wird über ein Celite-Bett abfiltriert, die organische Phase wird dreimal mit 500 ml Wasser gewaschen, über Magnesiumsulfat getrocknet und dann im Vakuum zur Trockene eingeengt. Der Rückstand wird an Kieselgel (Laufmittel Essigsäureethylester – n-Heptan) chromatographiert. Die so erhaltenen Öle / Feststoffe werden im Ölpumpenvakuum, durch Kugelrohrdestillation oder Sublimation von Leichtsiedern befreit.

Bsp.	Brom-1,2,4-triazolo[5,1-a]isochinolin-Derivat	Boronsäure	Produkt	Ausbeute
L78				47 %

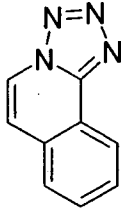
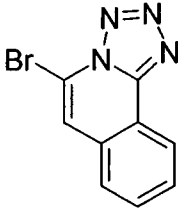
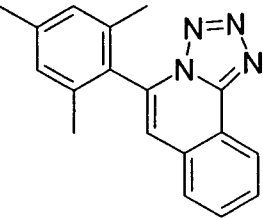
- 98 -

5



#### 4) Tetrazolo[5,1-a]isochinoline

10

Bsp.	Literatur	Produkt
L80	J. M. Keith, J. Org. Chem. <b>2006</b> , 71(25), 9540.	
L81	H. Reimlinger, Chem. Ber. <b>1975</b> , 108(12), 3780-6	
L82	Aus Bromid gemäß Bsp. L79 durch Suzuki-Kupplung analog zu Verfahren 3) 1,2,4-Triazolo[5,1-a]isochinolin-Systeme	

25

#### 5) Benzimidazo[2,1-a]isochinolin-Systeme

##### Ligandensynthese Variante A:

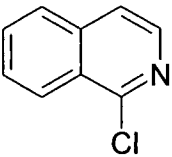
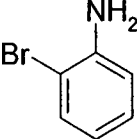
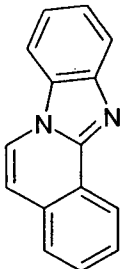
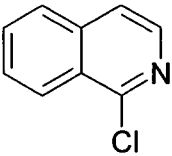
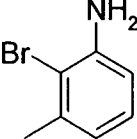
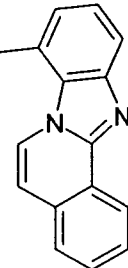
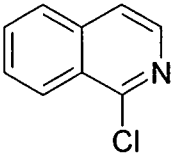
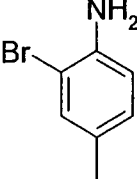
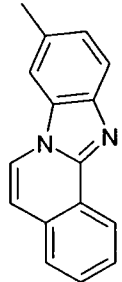
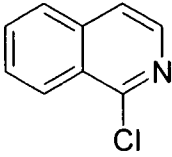
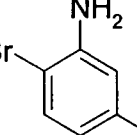
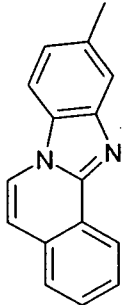
30

Eine gut gerührte Mischung von 500 mmol des 1-Chlor-isochinolin-Derivats, 600 mmol des Anilins, 1250 mmol Kaliumcarbonat, 200 g Glas-  
kugeln (3 mm Durchmesser), 10 mmol Triphenylphosphin und 2 mmol  
Palladium(II)acetat in 1500 ml o-Xylol wird 3 – 48 h unter Rückfluss  
erhitzt, bis das 1-Chlor-isochinolin-Derivat verbraucht ist. Nach Erkalten  
wird über ein Kieselgel-Bett abfiltriert, mit 2000 ml THF nachgewaschen

35

und das Filtrat zur Trockene eingengt. Der Rückstand wird in 100 ml Essigsäureethylester in der Siedehitze gelöst und langsam mit 800 ml n-Heptan versetzt. Nach Erkalten wird von auskristallisiertem FS abgesaugt, dieser wird zweimal mit je 100 ml n-Heptan gewaschen und im Vakuum getrocknet. Die so erhaltenen Öle / Feststoffe werden im Ölpumpen-

5 vakuum, durch Kugelrohrdestillation oder Sublimation von Leichtsiedern befreit.

Bsp.	1-Chlor-iso-chinolin-Derivat	Anilin	Produkt	Ausbeute
10 L83		 615-36-1		73 %
15 L84		 54879-20-8		56 %
20 L85		 583-68-6		67 %
25 L86		 53078-85-6		67 %
30 35				

5

10

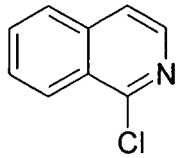
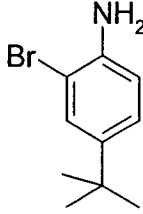
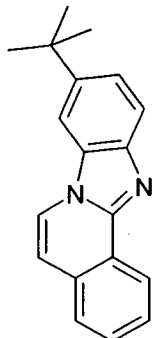
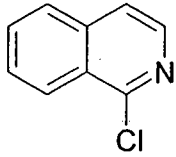
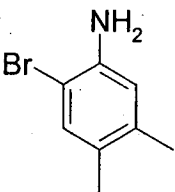
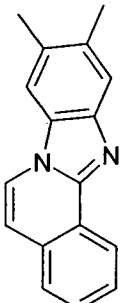
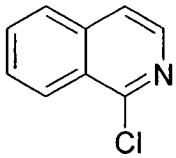
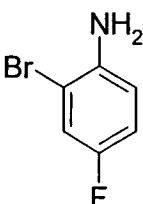
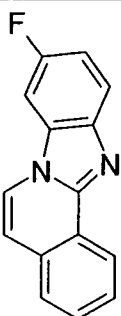
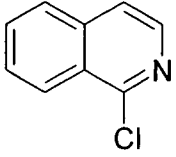
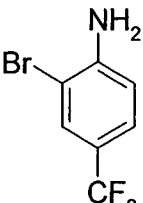
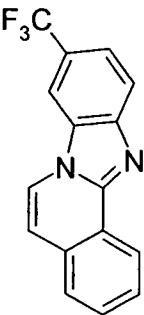
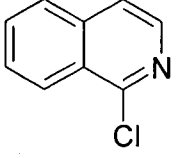
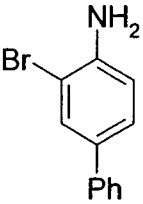
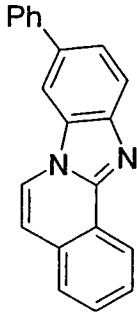
15

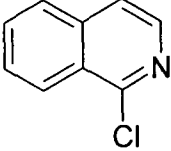
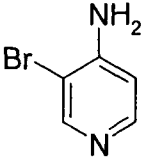
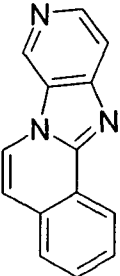
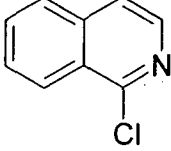
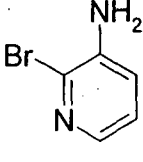
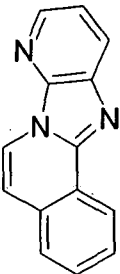
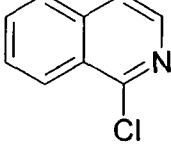
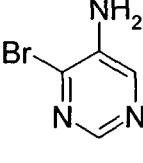
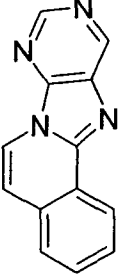
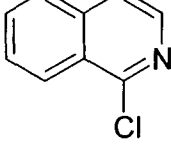
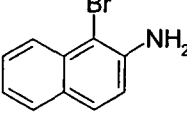
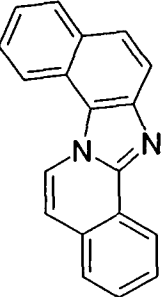
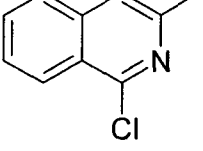
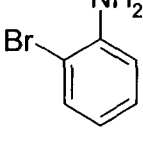
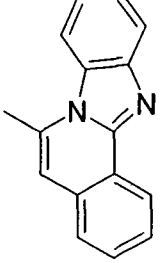
20

25

30

35

L87		 103273-01-4		65 %
L88		 22364-29-0		61 %
L89		 1003-98-1		72 %
L90		 57946-63-1		50 %
L91		 41738-70-9		69 %

5	<p>L92</p> 	 <p>13534-98-0</p>		<p>34 %</p>
10	<p>L93</p> 	 <p>39856-58-1</p>		<p>41 %</p>
15	<p>L94</p> 	 <p>849353-34-0</p>		<p>19 %</p>
20	<p>L95</p> 	 <p>20191-75-7</p>		<p>64 %</p>
25	<p>L96</p>  <p>7115-16-4</p>			<p>71 %</p>
30				
35				

5

10

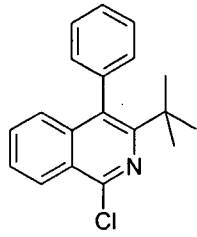
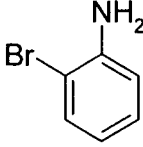
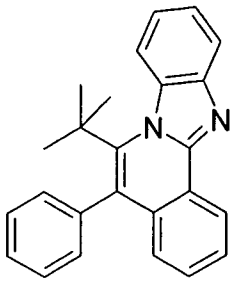
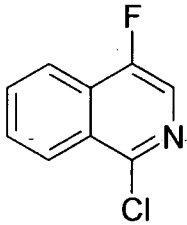
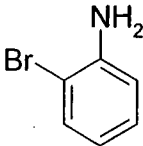
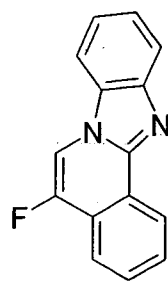
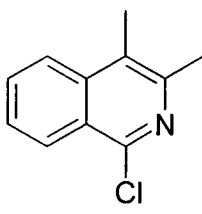

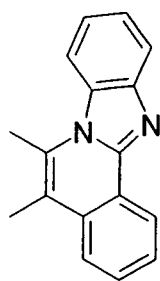
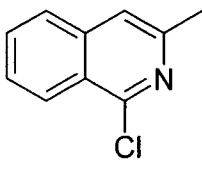
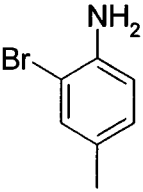
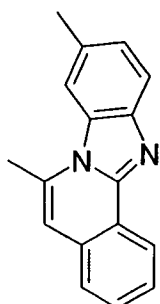
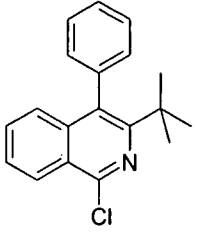
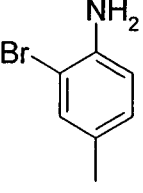
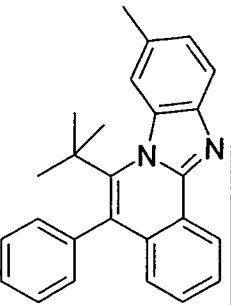
15

20

25

30

35

L97				29 %
L98				67 %
L99				71 %
L100				65 %
L101				34 %

5

10

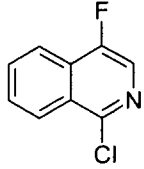
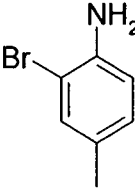
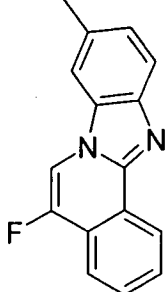
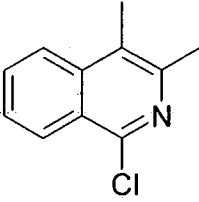
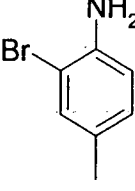
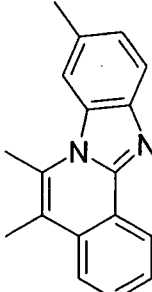
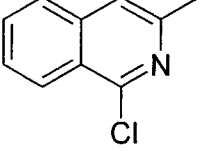
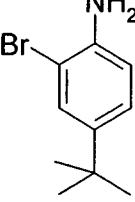
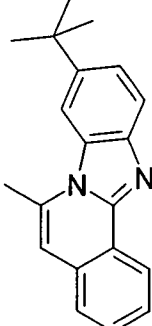
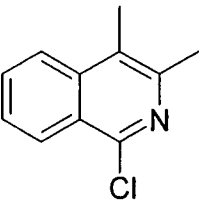
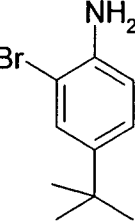
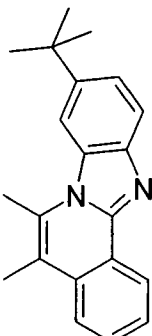
15

20

25

30

35

<p>L102</p>	 <p>435278-06-1</p>			<p>68 %</p>
<p>L103</p>				<p>60 %</p>
<p>L104</p>				<p>55 %</p>
<p>L105</p>				<p>69 %</p>



5

10

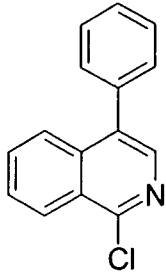
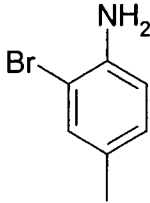
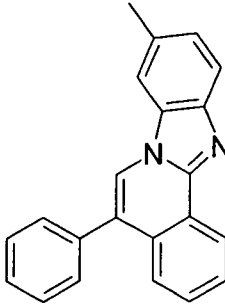
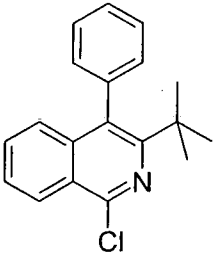
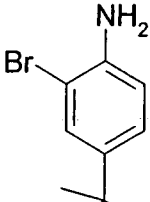
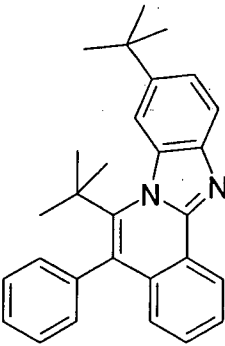
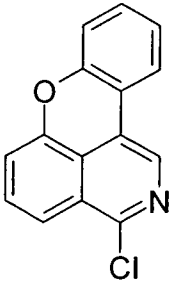
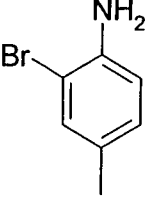
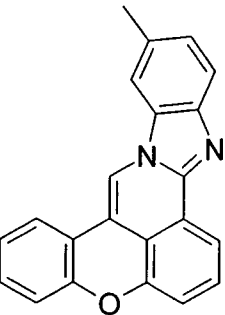
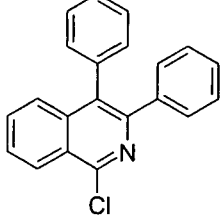
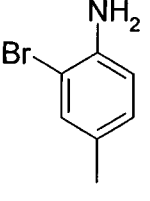
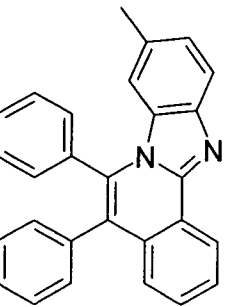
15

20

25

30

35

<p>L106</p>	 <p>65810-96-0</p>			<p>63 %</p>
<p>L107</p>	 <p>55792-01-3</p>			<p>28 %</p>
<p>L108</p>	 <p>59500-31-2</p>			<p>22 %</p>
<p>L109</p>	 <p>102183-41-5</p>			<p>62 %</p>

5

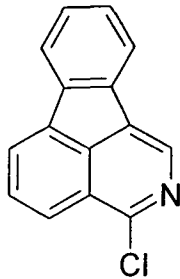
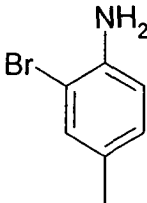
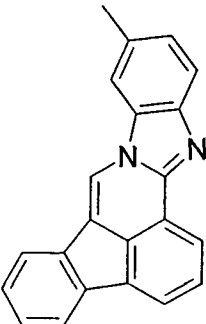
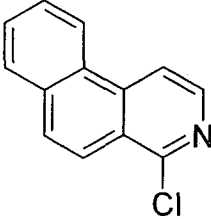
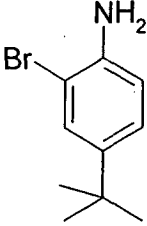
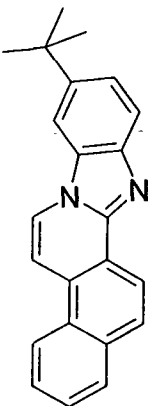
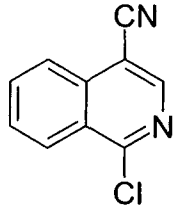
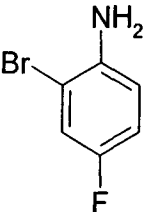

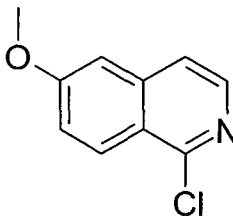
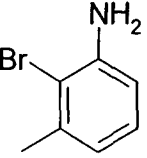
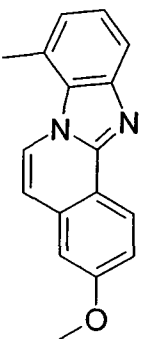
10

15

20

25

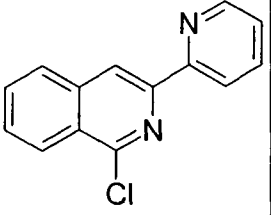
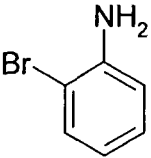
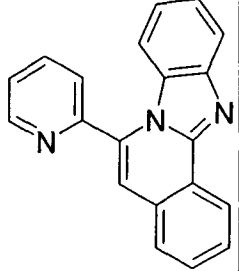
30

<p>L110</p>	 <p>33279-84-4</p>			<p>31 %</p>
<p>L111</p>	 <p>32081-28-0</p>			<p>74 %</p>
<p>L112</p>	 <p>53491-80-8</p>			<p>19 %</p>
<p>L113</p>	 <p>132997-77-4</p>			<p>59 %</p>

35

- 106 -

5

L114				44 %
	58839-98-8			

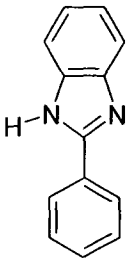

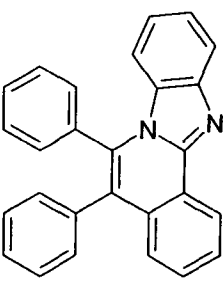
**Ligandensynthese Variante B:**

10

Ein gut gerührtes Gemisch von 100 mmol des 2-Aryl-benzimidazol-Derivats, 120 mmol des Alkins und 120 mmol Kupfer(II)acetat in 1000 ml DMF wird mit 2 mmol Pentamethylcyclopentadienylrhodium(III)chloro-dimer und 8 mmol Tetraphenylcyclopentadien versetzt und 20 h bei 80 °C gerührt. Nach Erkalten wird über ein Celite-Bett abfiltriert, die organische Phase wird mit 1000 ml Dichlormethan versetzt, fünfmal mit 500 ml Wasser gewaschen, über Magnesiumsulfat getrocknet und dann im Vakuum zur Trockene eingengt. Der Rückstand wird an Kieselgel (Laufmittel Essigsäureethylester – n-Heptan) chromatographiert. Die so erhaltenen Öle / Feststoffe werden im Ölpumpenvakuum, durch Kugelrohrdestillation oder Sublimation von Leichtsiedern befreit.

15

20

Bsp.	2-Aryl-benzimidazol-Derivat	Alkin	Produkt	Ausbeute
L115				43 %

25

30

35

5

10

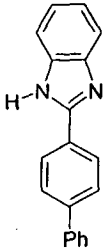

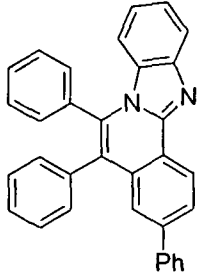
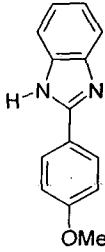

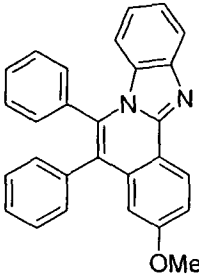
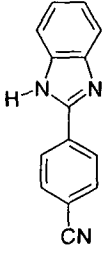

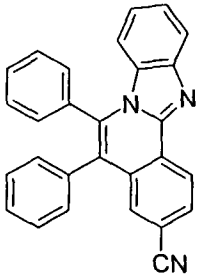
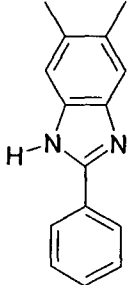

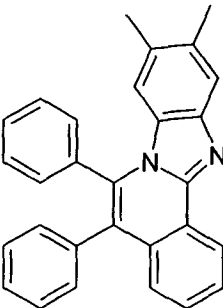
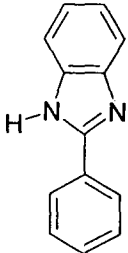
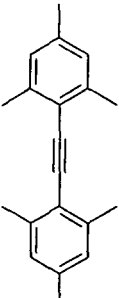
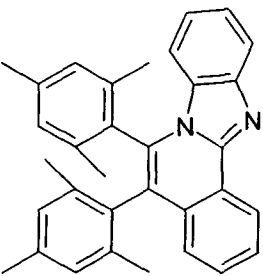
15

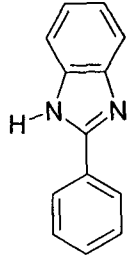

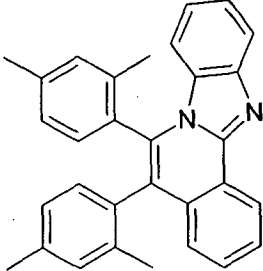
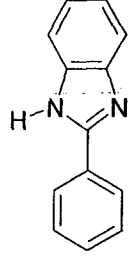

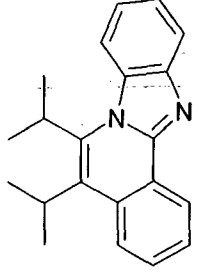
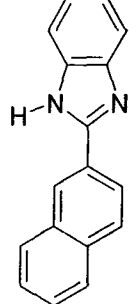

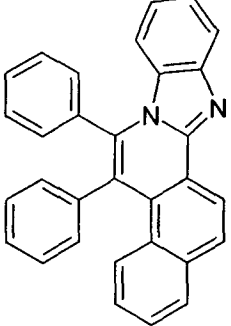
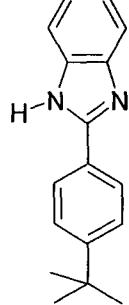

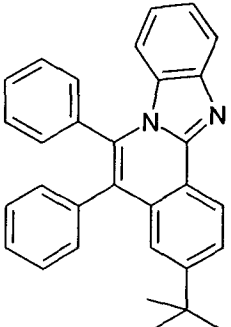
20

25

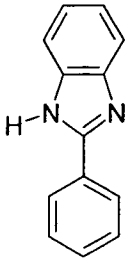
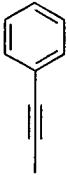
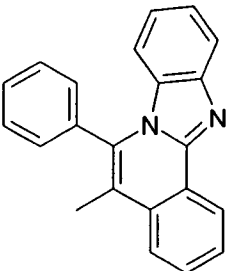
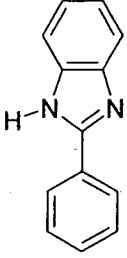
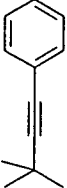
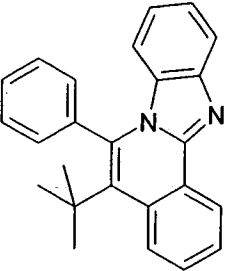
30

35

L116	 <p>2562-77-8</p>			45 %
L117	 <p>2620-81-7</p>			37 %
L118	 <p>4110-15-0</p>			23 %
L119	 <p>14313-45-2</p>			45 %
L120		 <p>5806-58-6</p>		9 %

<p>5</p>	<p>L121</p>		 <p>61440-87-7</p>		<p>23 %</p>
<p>10</p>	<p>L122</p>		 <p>927-99-1</p>		<p>6 %</p>
<p>15</p> <p>20</p>	<p>L123</p>	 <p>3367-02-0</p>			<p>29 %</p>
<p>25</p> <p>30</p>	<p>L124</p>	 <p>49671-76-3</p>			<p>43 %</p>

- 109 -

5 L125		 1001024-39-0		13 %
10 L126		 103239-12-9		16 %

**Ligandensynthese Variante C:**

15 100 mmol des 2-(2-Bromphenyl)-imidazol-Derivats wird in 300 ml Triethylamin und 200 ml DMF vorgelegt. Unter Rühren gibt man nacheinander 200 ml des Alkins, 5 mmol Triphenylphosphin, 5 mmol Kupfer(I)iodid und 2 mmol Palladium(II)acetat zu. Anschließend wird die Reaktionsmischung 20 h bei 80 °C gerührt. Nach Erkalten wird die Reaktionsmischung mit 400 ml Dichlormethan verdünnt, die Feststoffe werden durch Filtration über ein Celite-Bett abgetrennt, das Filtrat wird zur Trockene eingeeengt. Der Rückstand wird in 300 ml Dichlormethan aufgenommen, die Lösung wird dreimal mit je 100 ml konz. Ammoniak-Lösung, dreimal mit je 100 ml Wasser gewaschen und über Magnesiumsulfat getrocknet. Die so erhaltenen Öle / Feststoffe werden im Ölpumpenvakuum, durch Kugelrohrdestillation oder Sublimation von Leichtsiedern und Metallspuren befreit.

20

25

30

35

5

10

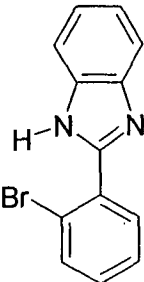
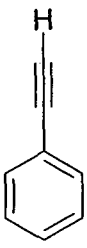
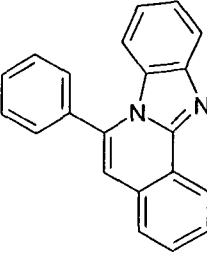
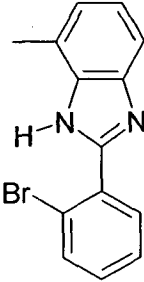
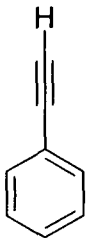
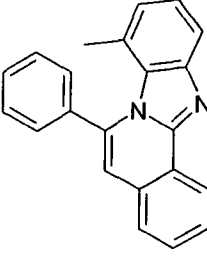
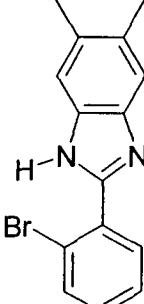
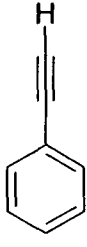
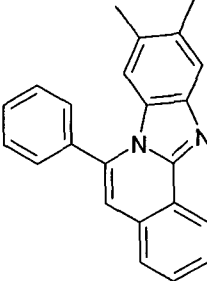
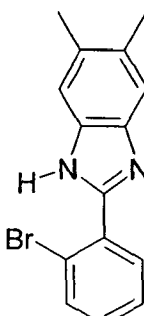
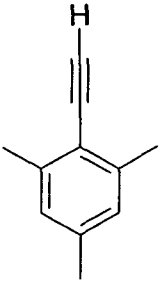
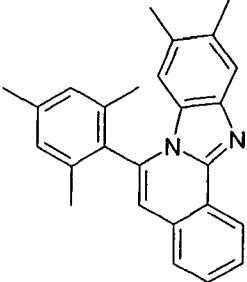
15

20

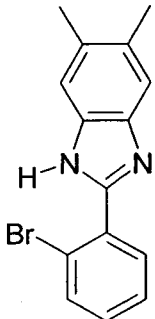
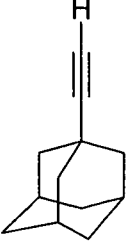
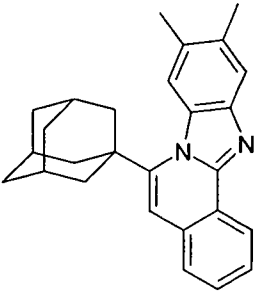
25

30

35

Bsp.	2-(2-Brom-phenyl)-imidazol	Alkin	Produkt	Ausbeute
L127	 13275-42-8			37 %
L128	 168209-94-7			34 %
L129	 1176128-00-9	 769-26-6		38 %
L130		 76 9-26-6		27 %

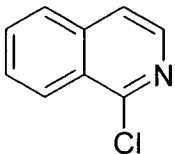
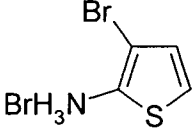
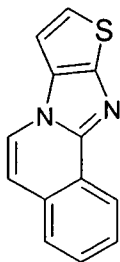
- 111 -

5 L131		 40430-66-8		9 %
-----------	---	---	--	-----

## 6) Heteroimidazo[2,1-a]isochinolin-Systeme

### Ligandensynthese Variante A:

Eine gut gerührte Mischung von 500 mmol des 1-Chlor-isochinolin-Derivats, 520 mmol desamins, 1250 mmol Kaliumcarbonat (bei Hydrobromiden 1800 mmol), 200 g Glaskugeln (3 mm Durchmesser), 10 mmol Triphenylphosphin und 2 mmol Palladium(II)acetat in 1500 ml o-Xylol wird 3 – 36 h unter Rückfluss erhitzt, bis das 1-Chlor-iso-chinolin verbraucht ist. Nach Erkalten wird über ein Kieselgel-Bett abfiltriert, mit 2000 ml THF nachgewaschen und das Filtrat zur Trockene eingeengt. Der Rückstand wird in 100 ml Essigsäureethylester in der Siedehitze gelöst und langsam mit 800 ml n-Heptan versetzt. Nach Erkalten wird von auskristallisiertem FS abgesaugt, dieser zweimal mit je 100 ml n-Heptan gewaschen und im Vakuum getrocknet. Gegebenenfalls wird das Rohprodukt nochmals aus Essigester / Heptan umkristallisiert. Die so erhaltenen Öle / Feststoffe werden im Ölpumpenvakuum, durch Kugelrohrdestillation oder Sublimation von Leichtsiedern befreit.

Bsp.	1-Chlor-iso-chinolin	Amin	Produkt	Ausbeute
30 L132		 85069-56-3		56 %

35



5

10

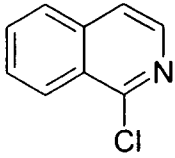
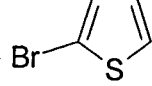
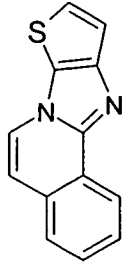
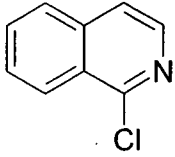
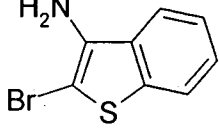
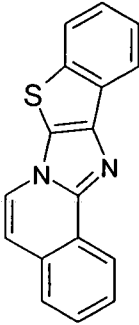
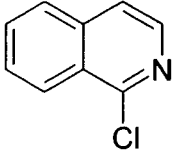
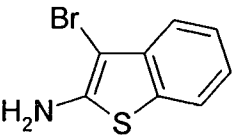
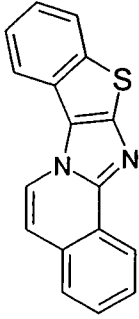
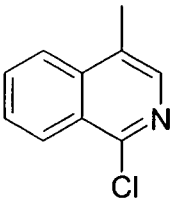
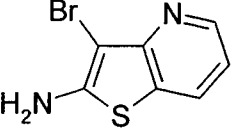
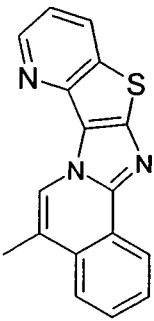
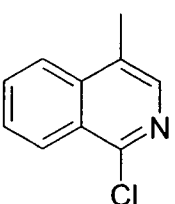
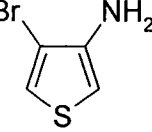
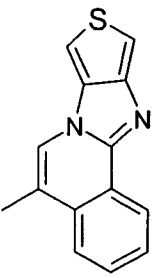
15

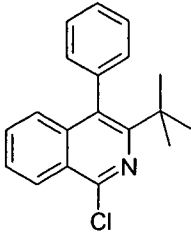
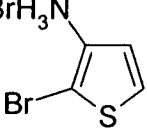
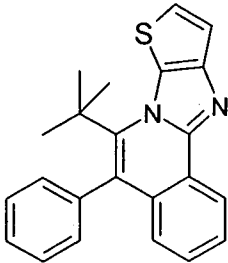
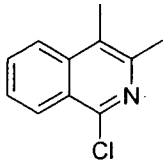
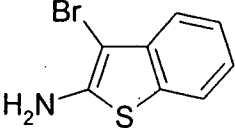
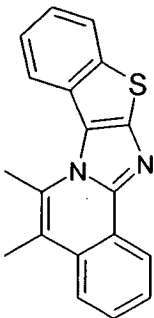
20

25

30

35

L133		$\text{BrH}_3\text{N}$  85069-58-5		64 %
L134		$\text{H}_2\text{N}$  90490-37-2		82 %
L135		 344747-99-5		78 %
L136		 1104630-95-6		26 %
L137		 161833-43-8		17 %

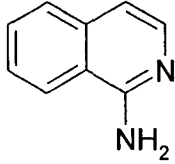
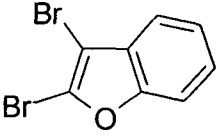
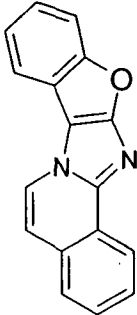
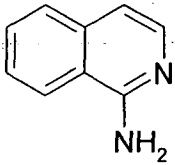
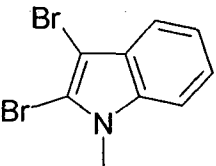
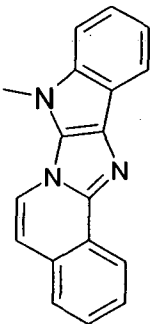
5	L138		$\text{BrH}_3\text{N}$  85069-58-5		45 %
10	L139		 344747-99-5		50 %

#### 15 Ligandensynthese Variante B:

Eine gut gerührte Mischung von 500 mmol 1-Amino-isochinolin, 520 mmol des Dibromids, 1250 mmol Kaliumcarbonat, 200 g Glaskugeln (3 mm Durchmesser), 10 mmol Triphenylphosphin und 2 mmol Palladium(II)-acetat in 1500 ml o-Xylol wird 3 – 12 h unter Rückfluss erhitzt, bis das 1-Amino-isochinolin verbraucht ist. Nach Erkalten wird über ein Kieselgel-Bett abfiltriert, mit 2000 ml THF nachgewaschen und das Filtrat zur Trockene eingengt. Der Rückstand wird in 100 ml Essigsäureethylester in der Siedehitze gelöst und langsam mit 800 ml n-Heptan versetzt. Nach Erkalten wird von auskristallisiertem FS abgesaugt, dieser zweimal mit je 100 ml n-Heptan gewaschen und im Vakuum getrocknet. Gegebenenfalls wird das Rohprodukt nochmals aus Essigester / Heptan umkristallisiert. Die so erhaltenen Öle / Feststoffe werden im Ölpumpenvakuum, durch Kugelrohrdestillation oder Sublimation von Leichtsiedern befreit.

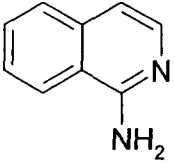
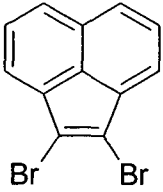
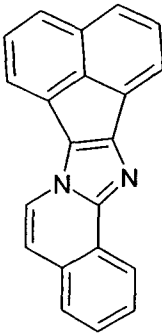
30

35

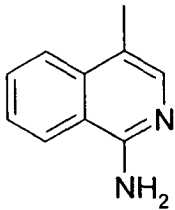
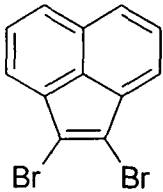
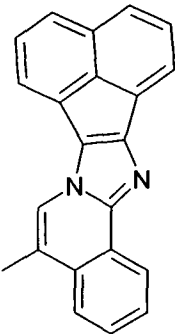
Bsp.	1-Amino- iso-chinolin	Dibromid	Produkt	Ausbeute
L140		 64150-61-4		22 %
L141		 128746-62-3		19 %

### 7) 8H-Acenaphth[1',2':4,5]imidazo[2,1-a]benz[de]iso-chinolin

Durchführung analog 6) Heteroimidazo[2,1-a]isochinolin-Systeme,  
Ligandensynthese Variante B.

Bsp.	1-Amino- isochinolin	Dibromid	Produkt	Ausbeute
L142		 13019-33-5		25 %

- 115 -

5	L143				16 %
---	------	---	---	--	------

10

## 8) Imidazo[2,1-a]phthalazin-Systeme

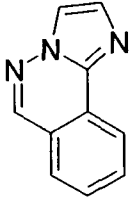
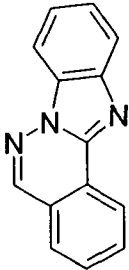
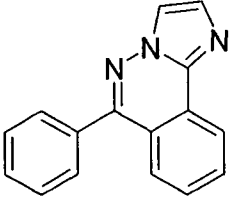
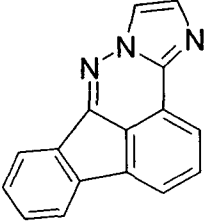
15

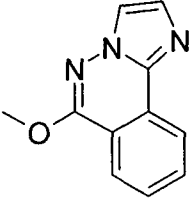
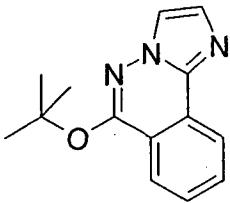
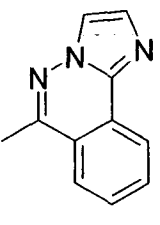
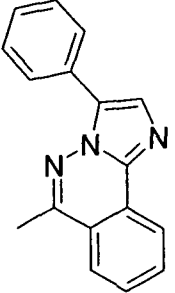
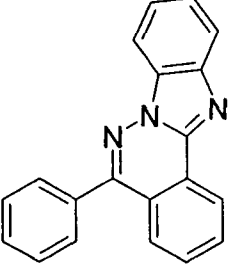
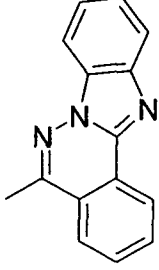
20

25

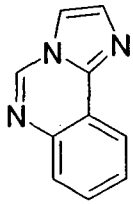
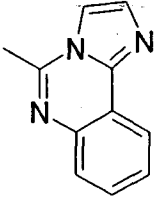
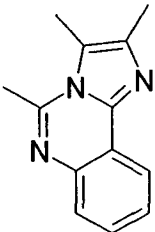
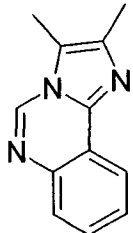
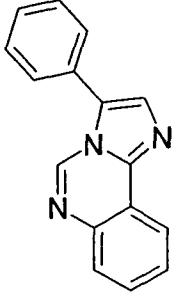
30

35

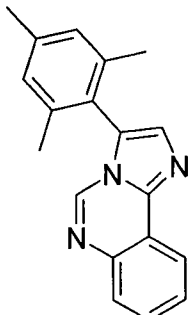
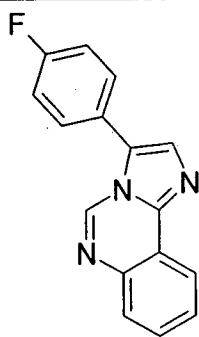
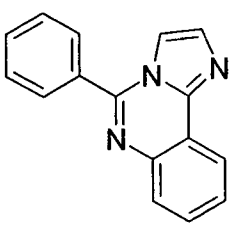
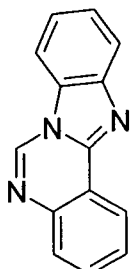
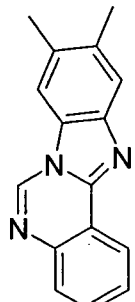
Bsp.	Literatur	Produkt
L144	A. D. C. Parenty et al. Synthesis <b>2008</b> , 9, 1479	
L145	A. Heim-Riether et al. Synthesis <b>2009</b> , 10, 1715-1719	
L146	DE 2206012  Aus dem Hydrochlorid wird mit festem Kaliumcarbonat in EtOH die Base freigesetzt.	
L147	DE 2206012	

	L148	US 3704300	
5	L149	Analog zu Bsp. L148 durch Einsatz von tert-Butanol	
10	L150	S. El-Feky et al. Polish Journal of Chemistry <b>1991</b> , 65(9-10), 1645-57	
15	L151	D. Catarzi et al. Farmaco <b>1993</b> , 48(4), 447-57	
20	L152	M. Razvi et al. Indian Journal of Chemistry, Section B: Organic Chemistry Including Medicinal Chemistry <b>1992</b> , 31B(11), 788-9	
30	L153	V. A. Kuznetsov et al. Tetrahedron <b>2006</b> , 62(42), 10018	
35			

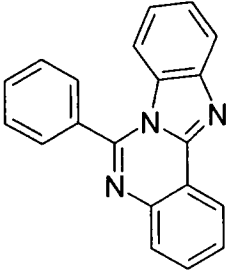
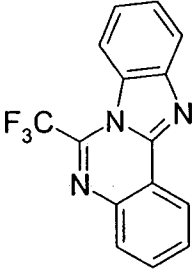
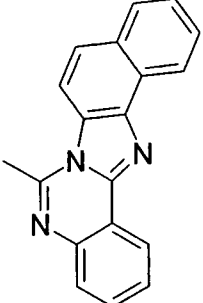
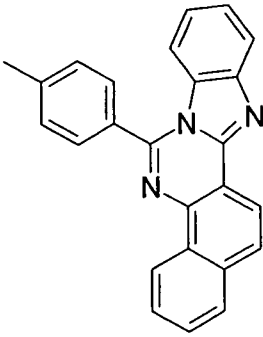
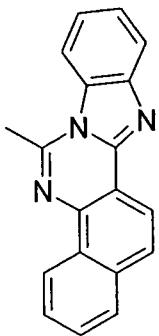
## 9) Imidazo[1,2-c]chinazolin-Systeme

	Bsp.	Literatur	Produkt
5	L154	P. Franchetti et al. Journal of Heterocyclic Chemistry <b>1970</b> , 7(6), 1295	
10	L155	P. Franchetti et al. Journal of Heterocyclic Chemistry <b>1970</b> , 7(6), 1295	
15	L156	P. Franchetti et al. Journal of Heterocyclic Chemistry <b>1970</b> , 7(6), 1295	
20	L157	P. Franchetti et al. Journal of Heterocyclic Chemistry <b>1970</b> , 7(6), 1295	
25	L158	F. Claudi et al. Journal of Organic Chemistry <b>1974</b> , 39(24), 3508	
30			

- 118 -

5	L159	Analog zu Bsp. 158 durch Einsatz von 2-Mesitylaziridin [65855-33-6] statt 2-Phenylaziridin, Ausbeute: 23 %	
10	L160	J. Kalinowska-Torz et al. Acta Poloniae Pharmaceutica <b>1984</b> , 41(2), 161	
15	L161	M. Cardellini et al. Farmaco, Edizione Scientifica <b>1975</b> , 30(7), 536	
20	L162	M. Davis et al. Journal of the Chemical Society <b>1962</b> , 945	
25	L163	D.-Q. Shi et al. Gaodeng Xuexiao Huaxue Xuebao <b>2007</b> , 28(10), 1889	

35

5	L164	M. Davis, Michael et al. Journal of the Chemical Society <b>1962</b> , 945	
10	L165	A. V. Bogatskii et al. Ukrainskii Khimicheskii Zhurnal (Russian Edition) <b>1979</b> , 45(3), 225	
15	L166	S. Vomero et al. Farmaco, Edizione Scientifica <b>1984</b> , 39(5), 394	
20	L167	J. Padmaja et al. Indian Journal of Chemistry, Section B: Organic Chemistry Including Medicinal Chemistry <b>1988</b> , 27B(10), 909	
25	L168	J. Padmaja et al. Indian Journal of Chemistry, Section B: Organic Chemistry Including Medicinal Chemistry <b>1988</b> , 27B(10), 909	



**Ligandensynthese:**

Darstellung analog 1) Imidazo[2,1-a]isochinolin-Systeme.

5

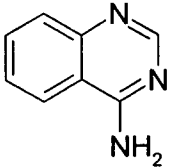
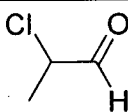
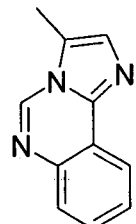
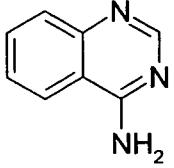
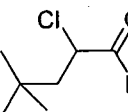
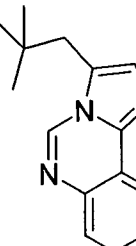
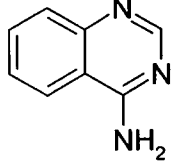
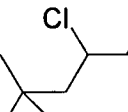
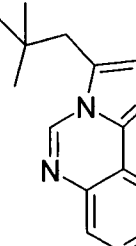
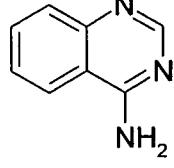
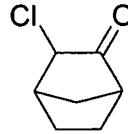
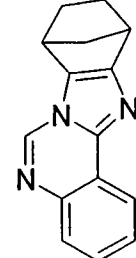
10

15

20

25

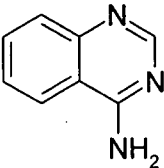
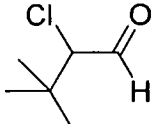
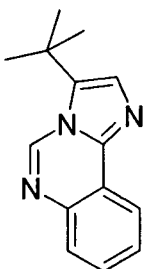
30

Bsp.	Variante	Chinazol-4-ylamin	Carbonyl-Verb.	Produkt	Ausbeute
L169	A	 15018-66-3			76 %
L170	A				65 %
L171	A				54 %
L172	A				51 %

35

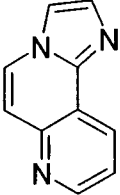
- 121 -

5

L173	B				75 %
------	---	---	---	---	------

## 10) Imidazo[2,1-f][1,6]naphthyridine-Systeme

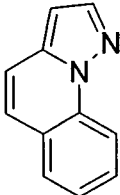
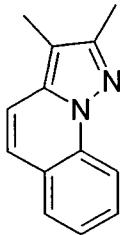
10

Bsp.	Literatur	Produkt
L174	J. M. Chezal et al. Tetrahedron <b>2002</b> , 58(2), 295	

15

## 11) Pyrazolo[1,5-a]chinolin-Systeme

20

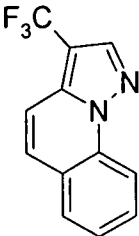
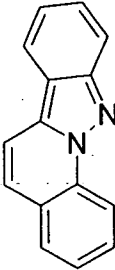
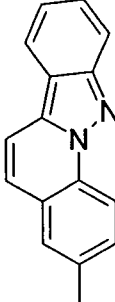
Bsp.	Literatur	Produkt
L175	D. Barrett et al. Recent Research Developments in Organic Chemistry <b>1997</b> , 1, 137	
L176	H. Gnichtel et al. Liebigs Annalen der Chemie <b>1981</b> , 10, 1751	

25

30

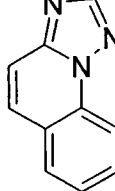
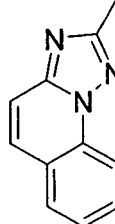
35

- 122 -

5	L177	R. E. Banks Journal of Fluorine Chemistry <b>1980</b> , <i>15</i> (2), 179	
10	L178	Y. P. Reddy et al. Indian Journal of Chemistry, Section B: Organic Chemistry Including Medicinal Chemistry <b>1988</b> , <i>27B</i> (6), 563	
15	L179	Y. P. Reddy et al. Indian Journal of Chemistry, Section B: Organic Chemistry Including Medicinal Chemistry <b>1988</b> , <i>27B</i> (6), 563	

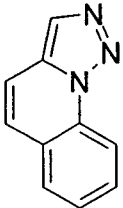
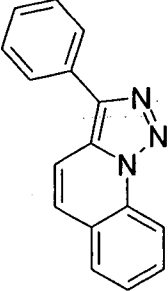
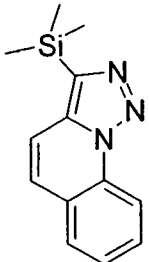
20

**12) [1,2,4]Triazolo[1,5-a]chinolin-Systeme**

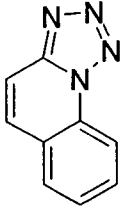
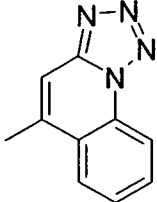
	Bsp.	Literatur	Produkt
25	L180	S. Batori et al. Heterocycles <b>1990</b> , <i>31</i> (2), 289	
30	L181	C. N. Hoang, et al. ARKIVOC <b>2001</b> , <i>2</i> (2), 42	

35

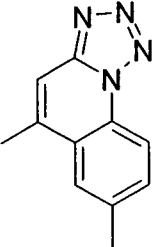
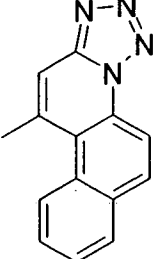
## 13) [1,2,3]Triazolo[1,5-a]chinolin-Systeme

Bsp.	Literatur	Produkt
L182	Y. Tamura et al. Journal of Heterocyclic Chemistry <b>1975</b> , 12(3), 481	
L183	Y. Tamura et al. Journal of Heterocyclic Chemistry <b>1975</b> , 12(3), 481	
L184	R. Ballesteros-Garrido et al. Tetrahedron <b>2009</b> , 65(22), 4410	

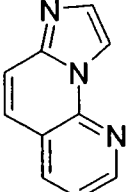
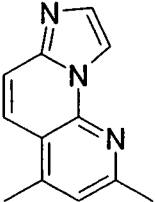
## 14) Tetrazolo[1,5-a]chinolin-Systeme

Bsp.	Literatur	Produkt
L185	J. K. Laha Synthesis <b>2008</b> , 24, 4002	
L186	US 2743274	

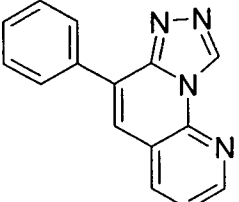
- 124 -

5	L187 DE 2166398	
10	L188 C. W. Rees et al. Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 1: Organic and Bio-Organic Chemistry (1972-1999) <b>1976</b> , 20, 2178	

**15) Imidazo[1,2-a][1,8]naphthyridin-Systeme**

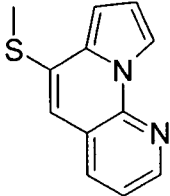
15	<b>Bsp.</b> <b>Literatur</b>	<b>Produkt</b>
20	L189 A. Gueiffier et al. Journal of Heterocyclic Chemistry <b>1997</b> , 34(3), 765	
25	L190 A. Gueiffier et al. Journal of Heterocyclic Chemistry <b>1997</b> , 34(3), 765	

**16) [1,2,4]Triazolo[4,3-a][1,8]naphthyridin-Systeme**

30	<b>Bsp.</b> <b>Literatur</b>	<b>Produkt</b>
35	L191 H. Shailaja Rani et al. Indian Journal of Chemistry, Section B: Organic Chemistry Including Medicinal Chemistry <b>1996</b> , 35B(2), 106	

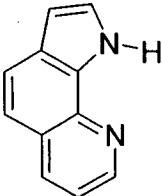
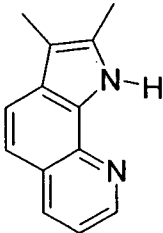
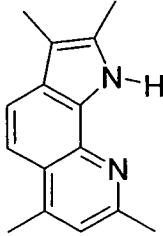
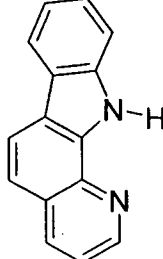
- 125 -

## 17) Pyrrolo[1,2-a][1,8]naphthyridin-Systeme

Bsp.	Literatur	Produkt
L192	I. Cardinaud et al. Heterocycles <b>1993</b> , 36(11), 2513	

5

## 18) 1H-Pyrrolo[3,2-h]chinolin-Systeme

Bsp.	Literatur	Produkt
L193	M. Vlachou et al. Heterocycles <b>2002</b> , 57(1), 129	
L194	Zh. F. Sergeeva et al. Khimiya Geterotsiklicheskikh Soedinenii <b>1975</b> , 12, 1656	
L195	S. A. Yamashkin et al. Khimiya Geterotsiklicheskikh Soedinenii <b>1995</b> , 1, 58	
L196	C. B. de Koning et al. Perkin 1 <b>2000</b> , 11, 1705	

10

15

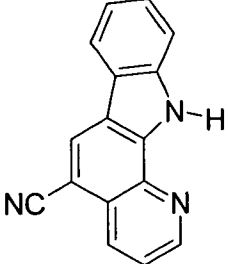
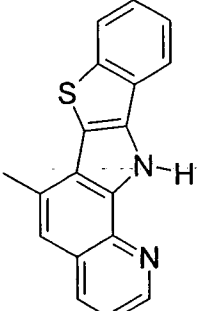
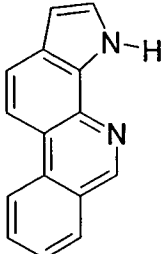
20

25

30

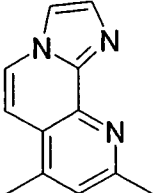
35

- 126 -

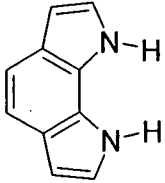
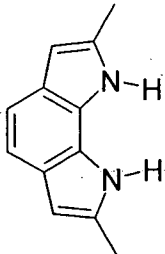
5	L197	C. Galvez et al. Journal of Chemical Research, Synopses <b>1987</b> , 1, 16	
10	L198	N. P. Buu-Hoi et al. Journal of the Chemical Society [Section] C: Organic <b>1966</b> , 1, 47	
15	L199	E. P. Baberkina et al. Zhurnal Organicheskoi Khimii <b>1991</b> , 27(5), 1110	

20

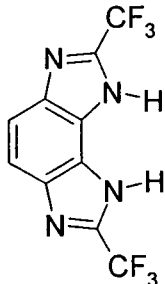
**19) Imidazo[1,2-h][1,7]naphthyridin-Systeme**

25	Bsp.	Literatur	Produkt
30	L200	J. M. Chezal et al. Tetrahedron <b>2002</b> , 58(2), 295	
35	L201	M. Andaloussi et al. European Journal of Medicinal Chemistry <b>2008</b> , 43(11), 2505	

## 20) 1,8-Dihydro-pyrrolo[3,2-g]indole

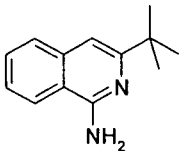
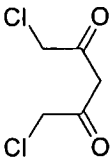
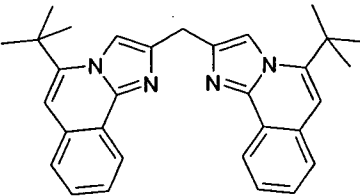
Bsp.	Literatur	Produkt
L202	A. Berlin et al. Journal of the Chemical Society, Chemical Communications <b>1987</b> , 15, 1176	
L203	Schiavon, et al. Synthetic Metals <b>1989</b> , 28(1-2), C199-C204	

## 21) 1,8-Dihydro-benzo[1,2-d:3,4-d']diimidazole

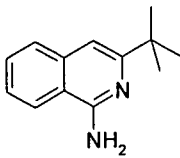

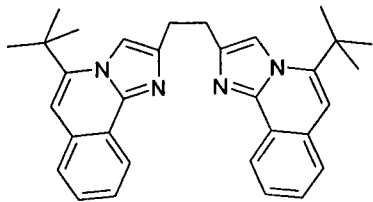
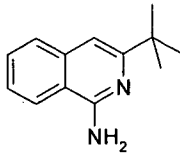
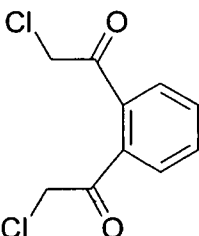
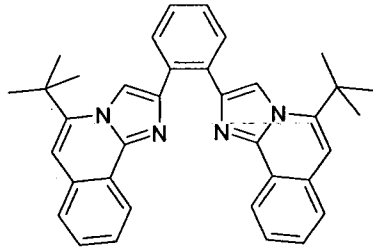
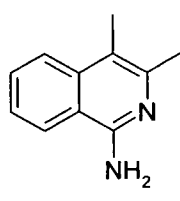
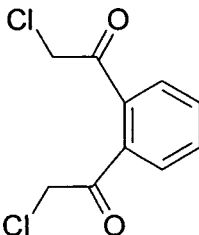
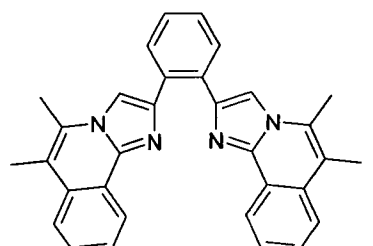
Bsp.	Literatur	Produkt
L204	A. Berlin et al. Journal of the Chemical Society, Chemical Communications <b>1987</b> , 15, 1176	

## 22) Verbrückte Imidazo[2,1-a]isochinolin-Systeme

Die nachfolgenden Liganden werden aus den gezeigten 1-Aminoisochinolin-Derivaten und den Carbonyl-Komponenten analog zu den Imidazo[2,1-a]isochinolin-Systemen, Variante A dargestellt.

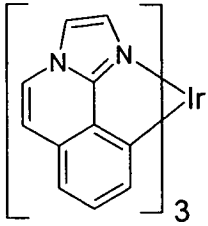
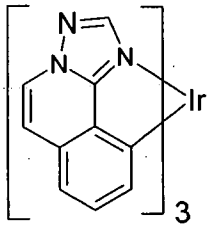
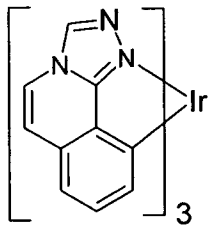
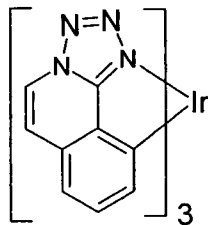
Bsp.	1-Aminoisochinolin-Derivat	Carbonyl-Komponente	Produkt	Ausbeute
L205		 40630-12-4		54 %



5	L206		 72444-45-2		55 %
10	L207		 1087400-52-9		63 %
15	L208				37 %

**B: Synthese der Metallkomplexe****1) Tris-homoleptische-Iridium-Komplexe:****Variante A:**

Eine Mischung aus 12.5 mmol des Liganden, 2.5 mmol Natrium-bis-acetylacetonato-di-chloro-iridat(III) [770720-50-8] in 5 ml Triethylenglycol wird unter Überleitung eines leichten Argonstromes 24 h bei 240° C gerührt. Nach Erkalten wird mit 100 ml 1N Salzsäure verdünnt und fünfmal mit 100 ml Dichlormethan extrahiert. Die org. Phase wird dreimal mit 200 ml Wasser gewaschen, über einem Gemisch aus Natriumsulfat und Natriumcarbonat getrocknet und dann zur Trockene eingeeengt. Der Rückstand wird an Kieselgel (Laufmittel Dichlormethan) chromatographiert, anschließend aus Dichlormethan / Hexan umkristallisiert und dann im Vakuum sublimiert.

Bsp.	Ligand	Ir-Komplex	Ausbeute
5 Ir(L1) <sub>3</sub>	L1		19 %
10 Ir(L74) <sub>3</sub>	L74		23.9 %
15 Ir(L69) <sub>3</sub>	L69		12.0 %
20 Ir(L80) <sub>3</sub>	L80		3.4 %

25

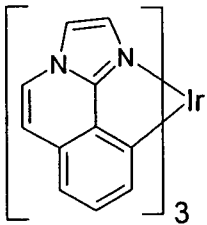
**Variante B:**

Ein Gemisch aus 10 mmol Tris-acetylacetonato-iridium(III) [15635-87-7] und 60 mmol des Liganden wird unter Vakuum ( $10^{-3}$  mbar) in eine 100 ml Glasampulle abgeschmolzen. Die Ampulle wird für die angegebene Zeit bei der angegebenen Temperatur getempert, wobei das aufgeschmolzene Gemisch mit Hilfe eines Magnetrührers gerührt wird. Nach Erkalten – ACHTUNG: die Ampullen stehen meist unter Druck! - wird die Ampulle geöffnet, der Sinterkuchen wird mit 200 g Glaskugeln (3 mm Durchmesser) in 500 ml EtOH bei 60 °C 5 h gerührt und dabei mechanisch aufgeschlossen. Nach Erkalten dekantiert man die feine Suspension von

35

- 130 -

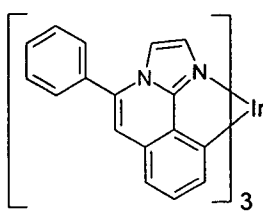
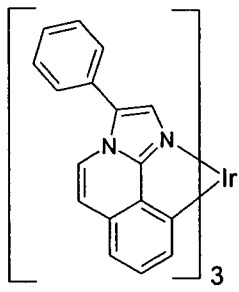
den Glaskugeln ab, saugt den Feststoff ab und trocknet diesen im Vakuum. Der trockene Feststoff wird in einem Heißextraktor auf einem 10 cm hohen Kieselgel-Bett platziert und dann mit 1,2-Dichlorethan oder Chlorbenzol extrahiert. Nach beendeter Extraktion wird das Extraktionsmittel im Vakuum auf ca. 50 ml eingeeengt, die Suspension wird mit 100 ml Methanol versetzt und 1 h nachgerührt. Nach Absaugen und Trocknen wird die Reinheit des Metall-Komplexes mittels NMR und / oder HPLC bestimmt. Liegt die Reinheit unter 99.9 % wird der Heißextraktionsschritt wiederholt, ist eine Reinheit von > 99.9 % erreicht wird der Metallkomplex getempert oder sublimiert. Das Tempern erfolgt im Hochvakuum (p ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von 200 – 300 °C. Die Sublimation erfolgt im Hochvakuum (p ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von ca. 300 bis ca. 420 °C.

Bsp.	Ligand	Ir-Komplex	Reaktionstemp./ Reaktionszeit	Ausbeute
Ir(L1) <sub>3</sub>	L1	 Ir(L1) <sub>3</sub>	245 °C / 30 h	5 %
Ir(L2) <sub>3</sub>	L2	Ir(L2) <sub>3</sub>	245 °C / 30 h	23 %
Ir(L3) <sub>3</sub>	L3	Ir(L3) <sub>3</sub>	245 °C / 30 h	13 %
Ir(L4) <sub>3</sub>	L4	Ir(L4) <sub>3</sub>	245 °C / 30 h	19 %
Ir(L5) <sub>3</sub>	L5	Ir(L5) <sub>3</sub>	240 °C / 45 h	65 %
Ir(L6) <sub>3</sub>	L6	Ir(L6) <sub>3</sub>	240 °C / 48 h	62 %
Ir(L7) <sub>3</sub>	L7	Ir(L7) <sub>3</sub>	240 °C / 48 h	38 %
Ir(L8) <sub>3</sub>	L8	Ir(L8) <sub>3</sub>	240 °C / 48 h	77 %
Ir(L9) <sub>3</sub>	L9	Ir(L9) <sub>3</sub>	250 °C / 50 h	59 %
Ir(L10) <sub>3</sub>	L10	Ir(L10) <sub>3</sub>	245 °C / 30 h	9 %

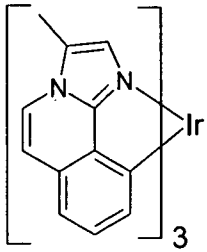
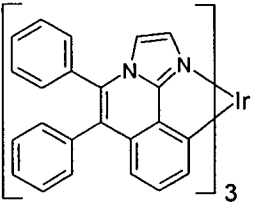
- 131 -

	Ir(L11) <sub>3</sub>	L11	Ir(L11) <sub>3</sub>	245 °C / 30 h	23 %
	Ir(L12) <sub>3</sub>	L12	Ir(L12) <sub>3</sub>	245 °C / 30 h	47 %
	Ir(L13) <sub>3</sub>	L13	Ir(L13) <sub>3</sub>	245 °C / 30 h	51 %
5	Ir(L14) <sub>3</sub>	L14	Ir(L14) <sub>3</sub>	245 °C / 26 h	42 %
	Ir(L15) <sub>3</sub>	L15	Ir(L15) <sub>3</sub>	245 °C / 30 h	41 %
	Ir(L16) <sub>3</sub>	L16	Ir(L16) <sub>3</sub>	245 °C / 40 h	45 %
10	Ir(L17) <sub>3</sub>	L17	Ir(L17) <sub>3</sub>	240 °C / 48 h	32 %
	Ir(L18) <sub>3</sub>	L18	Ir(L18) <sub>3</sub>	240 °C / 48 h	11 %
	Ir(L19) <sub>3</sub>	L19	Ir(L19) <sub>3</sub>	240 °C / 48 h	38 %
	Ir(L20) <sub>3</sub>	L20	Ir(L20) <sub>3</sub>	240 °C / 48 h	61 %
15	Ir(L21) <sub>3</sub>	L21	Ir(L21) <sub>3</sub>	240 °C / 44 h	35 %
	Ir(L22) <sub>3</sub>	L22	Ir(L22) <sub>3</sub>	245 °C / 20 h	9 %
	Ir(L23) <sub>3</sub>	L23	Ir(L23) <sub>3</sub>	240 °C / 44 h	40 %
	Ir(L24) <sub>3</sub>	L24	Ir(L24) <sub>3</sub>	245 °C / 20 h	5 %
20	Ir(L25) <sub>3</sub>	L25	Ir(L25) <sub>3</sub>	245 °C / 28 h	31 %
	Ir(L26) <sub>3</sub>	L26	Ir(L26) <sub>3</sub>	245 °C / 32 h	36 %
	Ir(L27) <sub>3</sub>	L27	Ir(L27) <sub>3</sub>	250 °C / 32 h	39 %
25	Ir(L28) <sub>3</sub>	L28	Ir(L28) <sub>3</sub>	240 °C / 44 h	28 %
	Ir(L29) <sub>3</sub>	L29	Ir(L29) <sub>3</sub>	240 °C / 40 h	4 %
	Ir(L30) <sub>3</sub>	L30	Ir(L30) <sub>3</sub>	240 °C / 40 h	30 %
	Ir(L31) <sub>3</sub>	L31	Ir(L31) <sub>3</sub>	240 °C / 40 h	43 %
30	Ir(L32) <sub>3</sub>	L32	Ir(L32) <sub>3</sub>	240 °C / 40 h	44 %
	Ir(L33) <sub>3</sub>	L33	Ir(L33) <sub>3</sub>	245 °C / 28 h	27 %
	Ir(L34) <sub>3</sub>	L34	Ir(L34) <sub>3</sub>	240 °C / 35 h	36 %
35	Ir(L35) <sub>3</sub>	L35	Ir(L35) <sub>3</sub>	240 °C / 32 h	20 %

- 132 -

	$\text{Ir}(\text{L36})_3$	L36	$\text{Ir}(\text{L36})_3$	260 °C / 60 h	15 %
5	$\text{Ir}(\text{L37})_3$	L37	 $\text{Ir}(\text{L37})_3$	270 °C / 48 h	18 %
	$\text{Ir}(\text{L38})_3$	L38	$\text{Ir}(\text{L38})_3$	270 °C / 48 h	48 %
10	$\text{Ir}(\text{L39})_3$	L39	$\text{Ir}(\text{L39})_3$	270 °C / 48 h	34 %
	$\text{Ir}(\text{L40})_3$	L40	$\text{Ir}(\text{L40})_3$	270 °C / 48 h	76 %
	$\text{Ir}(\text{L41})_3$	L41	$\text{Ir}(\text{L41})_3$	270 °C / 48 h	22 %
15	$\text{Ir}(\text{L42})_3$	L42	 $\text{Ir}(\text{L42})_3$	255 °C / 25 h	47 %
20	$\text{Ir}(\text{L43})_3$	L43	$\text{Ir}(\text{L43})_3$	250 °C / 60 h	43 %
	$\text{Ir}(\text{L44})_3$	L44	$\text{Ir}(\text{L44})_3$	250 °C / 60 h	55 %
25	$\text{Ir}(\text{L45})_3$	L45	$\text{Ir}(\text{L45})_3$	250 °C / 60 h	60 %
	$\text{Ir}(\text{L46})_3$	L46	$\text{Ir}(\text{L46})_3$	250 °C / 60 h	34 %
	$\text{Ir}(\text{L47})_3$	L47	$\text{Ir}(\text{L47})_3$	260 °C / 35 h	46 %
	$\text{Ir}(\text{L48})_3$	L48	$\text{Ir}(\text{L48})_3$	240 °C / 55 h	17 %
30	$\text{Ir}(\text{L49})_3$	L49	$\text{Ir}(\text{L49})_3$	250 °C / 60 h	58 %
	$\text{Ir}(\text{L50})_3$	L50	$\text{Ir}(\text{L50})_3$	250 °C / 60 h	61 %
	$\text{Ir}(\text{L51})_3$	L51	$\text{Ir}(\text{L51})_3$	250 °C / 38 h	40 %
	$\text{Ir}(\text{L52})_3$	L52	$\text{Ir}(\text{L52})_3$	250 °C / 60 h	68 %
35	$\text{Ir}(\text{L53})_3$	L53	$\text{Ir}(\text{L53})_3$	250 °C / 43 h	48 %

- 133 -

		$\text{Ir}(\text{L54})_3$	255 °C / 52 h	31 %
5		$\text{Ir}(\text{L55})_3$  $\text{Ir}(\text{L55})_3$	245 °C / 30 h	23 %
10		$\text{Ir}(\text{L56})_3$	245 °C / 30 h	21 %
		$\text{Ir}(\text{L57})_3$	245 °C / 50 h	41 %
		$\text{Ir}(\text{L58})_3$	250 °C / 38 h	34 %
15		$\text{Ir}(\text{L59})_3$	240 °C / 18 h	7 %
		$\text{Ir}(\text{L60})_3$	240 °C / 18 h	22 %
		$\text{Ir}(\text{L61})_3$	240 °C / 22 h	21 %
		$\text{Ir}(\text{L62})_3$	250 °C / 42 h	40 %
20		$\text{Ir}(\text{L63})_3$  $\text{Ir}(\text{L63})_3$	275 °C / 48 h	27 %
25		$\text{Ir}(\text{L64})_3$	275 °C / 30 h	61 %
		$\text{Ir}(\text{L65})_3$	275 °C / 30 h	57 %
30		$\text{Ir}(\text{L66})_3$	280 °C / 18 h	44 %
		$\text{Ir}(\text{L67})_3$	280 °C / 22 h	46 %
		$\text{Ir}(\text{L68})_3$	285 °C / 24 h	41 %

35

5

10

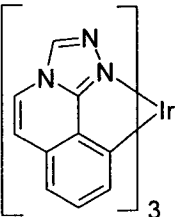
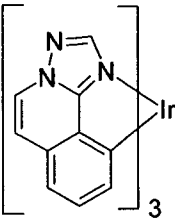
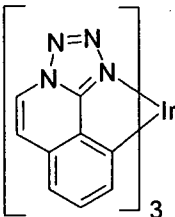
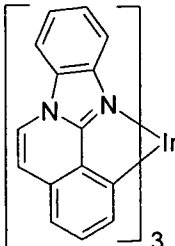
15

20

25

30

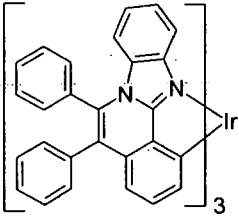
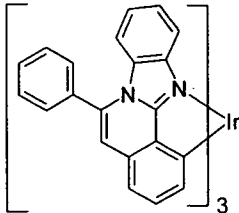
35

$\text{Ir}(\text{L69})_3$	L69	 $\text{Ir}(\text{L69})_3$	250 °C / 32 h	7 %
$\text{Ir}(\text{L70})_3$	L70	$\text{Ir}(\text{L70})_3$	250 °C / 22 h	11 %
$\text{Ir}(\text{L71})_3$	L71	$\text{Ir}(\text{L71})_3$	275 °C / 16 h	2 %
$\text{Ir}(\text{L72})_3$	L72	$\text{Ir}(\text{L72})_3$	260 °C / 26 h	23 %
$\text{Ir}(\text{L73})_3$	L73	$\text{Ir}(\text{L73})_3$	260 °C / 18 h	15 %
$\text{Ir}(\text{L74})_3$	L74	 $\text{Ir}(\text{L74})_3$	240 °C / 24 h	13 %
$\text{Ir}(\text{L75})_3$	L75	$\text{Ir}(\text{L75})_3$	240 °C / 24 h	25 %
$\text{Ir}(\text{L78})_3$	L78	$\text{Ir}(\text{L78})_3$	245 °C / 24 h	15 %
$\text{Ir}(\text{L79})_3$	L79	$\text{Ir}(\text{L79})_3$	245 °C / 30 h	36 %
$\text{Ir}(\text{L80})_3$	L80	 $\text{Ir}(\text{L80})_3$	220 °C / 24 h	3 %
$\text{Ir}(\text{L82})_3$	L82	$\text{Ir}(\text{L82})_3$	230 °C / 24 h	11 %
$\text{Ir}(\text{L83})_3$	L83	 $\text{Ir}(\text{L83})_3$	250 °C / 28 h	72 %

- 135 -

	Ir(L84) <sub>3</sub>	L84	Ir(L84) <sub>3</sub>	250 °C / 28 h	74 %
	Ir(L85) <sub>3</sub>	L85	Ir(L85) <sub>3</sub>	250 °C / 28 h	69 %
	Ir(L86) <sub>3</sub>	L86	Ir(L86) <sub>3</sub>	250 °C / 24 h	63 %
5	Ir(L87) <sub>3</sub>	L87	Ir(L87) <sub>3</sub>	250 °C / 32 h	70 %
	Ir(L88) <sub>3</sub>	L88	Ir(L88) <sub>3</sub>	250 °C / 20 h	75 %
	Ir(L89) <sub>3</sub>	L89	Ir(L89) <sub>3</sub>	255 °C / 18 h	65 %
10	Ir(L90) <sub>3</sub>	L90	Ir(L90) <sub>3</sub>	245 °C / 29 h	79 %
	Ir(L91) <sub>3</sub>	L91	Ir(L91) <sub>3</sub>	250 °C / 30 h	70 %
	Ir(L92) <sub>3</sub>	L92	Ir(L92) <sub>3</sub>	270 °C / 24 h	35 %
	Ir(L93) <sub>3</sub>	L93	Ir(L93) <sub>3</sub>	270 °C / 26 h	38 %
15	Ir(L94) <sub>3</sub>	L94	Ir(L94) <sub>3</sub>	270 °C / 24 h	53 %
	Ir(L95) <sub>3</sub>	L95	Ir(L95) <sub>3</sub>	280 °C / 28 h	72 %
	Ir(L96) <sub>3</sub>	L96	Ir(L96) <sub>3</sub>	265 °C / 24 h	68 %
	Ir(L97) <sub>3</sub>	L97	Ir(L97) <sub>3</sub>	250 °C / 32 h	66 %
20	Ir(L98) <sub>3</sub>	L98	Ir(L98) <sub>3</sub>	250 °C / 20 h	71 %
	Ir(L99) <sub>3</sub>	L99	Ir(L99) <sub>3</sub>	250 °C / 22 h	77 %
	Ir(L100) <sub>3</sub>	L100	Ir(L100) <sub>3</sub>	245 °C / 32 h	68 %
25	Ir(L101) <sub>3</sub>	L101	Ir(L101) <sub>3</sub>	260 °C / 22 h	70 %
	Ir(L102) <sub>3</sub>	L102	Ir(L102) <sub>3</sub>	250 °C / 22 h	71 %
	Ir(L103) <sub>3</sub>	L103	Ir(L103) <sub>3</sub>	250 °C / 22 h	70 %
	Ir(L104) <sub>3</sub>	L104	Ir(L104) <sub>3</sub>	255 °C / 26 h	73 %
30	Ir(L105) <sub>3</sub>	L105	Ir(L105) <sub>3</sub>	250 °C / 20 h	67 %
	Ir(L106) <sub>3</sub>	L106	Ir(L106) <sub>3</sub>	255 °C / 25 h	67 %
	Ir(L107) <sub>3</sub>	L107	Ir(L107) <sub>3</sub>	250 °C / 24 h	65 %
35	Ir(L108) <sub>3</sub>	L108	Ir(L108) <sub>3</sub>	275 °C / 18 h	63 %



	$\text{Ir}(\text{L109})_3$	L109	$\text{Ir}(\text{L109})_3$	275 °C / 22 h	58 %
	$\text{Ir}(\text{L110})_3$	L110	$\text{Ir}(\text{L110})_3$	275 °C / 24 h	43 %
	$\text{Ir}(\text{L111})_3$	L111	$\text{Ir}(\text{L111})_3$	275 °C / 20 h	57 %
5	$\text{Ir}(\text{L112})_3$	L112	$\text{Ir}(\text{L112})_3$	255 °C / 16 h	23 %
	$\text{Ir}(\text{L113})_3$	L113	$\text{Ir}(\text{L113})_3$	255 °C / 18 h	26 %
	$\text{Ir}(\text{L114})_3$	L114	$\text{Ir}(\text{L114})_3$	260 °C / 16 h	9 %
10	$\text{Ir}(\text{L115})_3$	L115	 $\text{Ir}(\text{L115})_3$	280 °C / 20 h	76 %
15	$\text{Ir}(\text{L116})_3$	L116	$\text{Ir}(\text{L116})_3$	280 °C / 22 h	72 %
	$\text{Ir}(\text{L117})_3$	L117	$\text{Ir}(\text{L117})_3$	280 °C / 30 h	78 %
	$\text{Ir}(\text{L118})_3$	L118	$\text{Ir}(\text{L118})_3$	270 °C / 20 h	26 %
20	$\text{Ir}(\text{L119})_3$	L119	$\text{Ir}(\text{L119})_3$	270 °C / 18 h	19 %
	$\text{Ir}(\text{L120})_3$	L120	$\text{Ir}(\text{L120})_3$	285 °C / 40 h	75 %
	$\text{Ir}(\text{L121})_3$	L121	$\text{Ir}(\text{L121})_3$	280 °C / 30 h	74 %
	$\text{Ir}(\text{L122})_3$	L122	$\text{Ir}(\text{L122})_3$	280 °C / 22 h	11 %
25	$\text{Ir}(\text{L123})_3$	L123	$\text{Ir}(\text{L123})_3$	285 °C / 40 h	69 %
	$\text{Ir}(\text{L124})_3$	L124	$\text{Ir}(\text{L124})_3$	280 °C / 36 h	73 %
	$\text{Ir}(\text{L125})_3$	L125	$\text{Ir}(\text{L125})_3$	265 °C / 40 h	66 %
	$\text{Ir}(\text{L126})_3$	L126	$\text{Ir}(\text{L126})_3$	265 °C / 38 h	64 %
30	$\text{Ir}(\text{L127})_3$	L127	 $\text{Ir}(\text{L127})_3$	265 °C / 40 h	67 %
35					

- 137 -

$\text{Ir}(\text{L128})_3$	L128	$\text{Ir}(\text{L128})_3$	265 °C / 30 h	44 %
$\text{Ir}(\text{L129})_3$	L129	$\text{Ir}(\text{L129})_3$	265 °C / 60 h	57 %

5

10

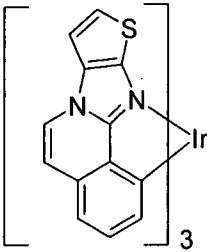
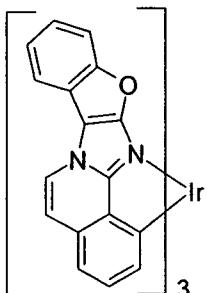
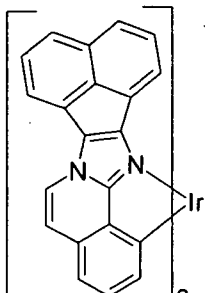
15

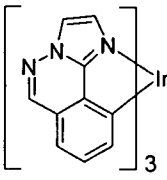
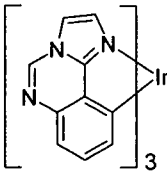
20

25

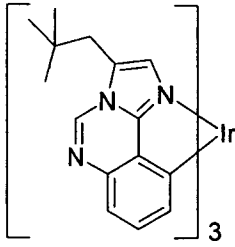
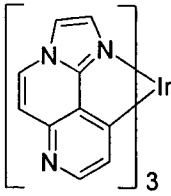
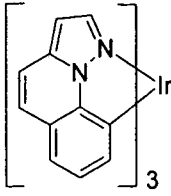
30

35

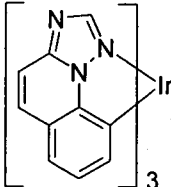
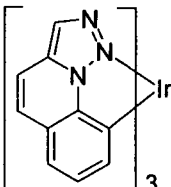
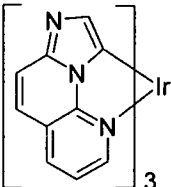
	$\text{Ir}(\text{L130})_3$	L130	$\text{Ir}(\text{L130})_3$	260 °C / 55 h	62 %
	$\text{Ir}(\text{L131})_3$	L131	$\text{Ir}(\text{L131})_3$	245 °C / 45 h	52 %
5	$\text{Ir}(\text{L132})_3$	L132	 $\text{Ir}(\text{L132})_3$	270 °C / 20 h	15 %
10	$\text{Ir}(\text{L133})_3$	L133	$\text{Ir}(\text{L133})_3$	275 °C / 30 h	17 %
	$\text{Ir}(\text{L134})_3$	L134	$\text{Ir}(\text{L134})_3$	270 °C / 20 h	34 %
	$\text{Ir}(\text{L135})_3$	L135	$\text{Ir}(\text{L135})_3$	270 °C / 20 h	61 %
15	$\text{Ir}(\text{L136})_3$	L136	$\text{Ir}(\text{L136})_3$	265 °C / 30 h	56 %
	$\text{Ir}(\text{L137})_3$	L137	$\text{Ir}(\text{L137})_3$	275 °C / 24 h	30 %
	$\text{Ir}(\text{L138})_3$	L138	$\text{Ir}(\text{L138})_3$	265 °C / 34 h	23 %
	$\text{Ir}(\text{L139})_3$	L139	$\text{Ir}(\text{L139})_3$	270 °C / 47 h	67 %
20	$\text{Ir}(\text{L140})_3$	L140	 $\text{Ir}(\text{L140})_3$	270 °C / 28 h	53 %
25	$\text{Ir}(\text{L141})_3$	L141	$\text{Ir}(\text{L141})_3$	270 °C / 28 h	28 %
30	$\text{Ir}(\text{L142})_3$	L142	 $\text{Ir}(\text{L142})_3$	270 °C / 48 h	47 %
35					

		$\text{Ir}(\text{L143})_3$	265 °C / 64 h	61 %
5		$\text{Ir}(\text{L144})_3$  $\text{Ir}(\text{L144})_3$	245 °C / 46 h	7 %
		$\text{Ir}(\text{L145})_3$	250 °C / 36 h	74 %
10		$\text{Ir}(\text{L146})_3$	245 °C / 28 h	13 %
		$\text{Ir}(\text{L147})_3$	265 °C / 35 h	23 %
		$\text{Ir}(\text{L148})_3$	245 °C / 16 h	5 %
		$\text{Ir}(\text{L149})_3$	245 °C / 26 h	10 %
15		$\text{Ir}(\text{L150})_3$	250 °C / 36 h	7 %
		$\text{Ir}(\text{L151})_3$	255 °C / 42 h	38 %
		$\text{Ir}(\text{L152})_3$	255 °C / 40 h	77 %
		$\text{Ir}(\text{L153})_3$	245 °C / 46 h	74 %
20		$\text{Ir}(\text{L154})_3$  $\text{Ir}(\text{L154})_3$	245 °C / 26 h	11 %
25		$\text{Ir}(\text{L155})_3$	245 °C / 30 h	14 %
		$\text{Ir}(\text{L156})_3$	245 °C / 36 h	65 %
		$\text{Ir}(\text{L157})_3$	245 °C / 36 h	63 %
30		$\text{Ir}(\text{L158})_3$	250 °C / 28 h	48 %
		$\text{Ir}(\text{L159})_3$	245 °C / 30 h	54 %
		$\text{Ir}(\text{L160})_3$	245 °C / 30 h	50 %
35		$\text{Ir}(\text{L161})_3$	240 °C / 38 h	32 %

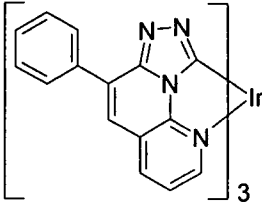
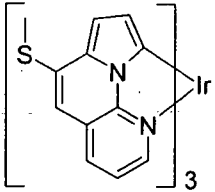
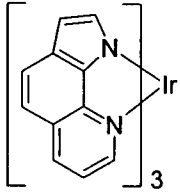
- 140 -

	$\text{Ir}(\text{L162})_3$	L162	$\text{Ir}(\text{L162})_3$	255 °C / 30 h	71 %
	$\text{Ir}(\text{L163})_3$	L163	$\text{Ir}(\text{L163})_3$	250 °C / 34 h	69 %
	$\text{Ir}(\text{L164})_3$	L164	$\text{Ir}(\text{L164})_3$	255 °C / 30 h	70 %
5	$\text{Ir}(\text{L165})_3$	L165	$\text{Ir}(\text{L165})_3$	250 °C / 30 h	59 %
	$\text{Ir}(\text{L166})_3$	L166	$\text{Ir}(\text{L166})_3$	255 °C / 40 h	25 %
	$\text{Ir}(\text{L167})_3$	L167	$\text{Ir}(\text{L167})_3$	265 °C / 30 h	38 %
	$\text{Ir}(\text{L168})_3$	L168	$\text{Ir}(\text{L168})_3$	270 °C / 35 h	55 %
10	$\text{Ir}(\text{L169})_3$	L169	$\text{Ir}(\text{L169})_3$	250 °C / 36 h	42 %
	$\text{Ir}(\text{L170})_3$	L170	 $\text{Ir}(\text{L170})_3$	255 °C / 28 h	33 %
	$\text{Ir}(\text{L171})_3$	L171	$\text{Ir}(\text{L171})_3$	255 °C / 30 h	68 %
20	$\text{Ir}(\text{L172})_3$	L172	$\text{Ir}(\text{L172})_3$	255 °C / 30 h	71 %
	$\text{Ir}(\text{L173})_3$	L173	$\text{Ir}(\text{L173})_3$	255 °C / 30 h	36 %
	$\text{Ir}(\text{L174})_3$	L174	 $\text{Ir}(\text{L174})_3$	245 °C / 30 h	6 %
25	$\text{Ir}(\text{L175})_3$	L175	 $\text{Ir}(\text{L175})_3$	250 °C / 30 h	3 %
30					
35					

- 141 -

	$\text{Ir}(\text{L176})_3$	L176	$\text{Ir}(\text{L176})_3$	250 °C / 34 h	67 %
	$\text{Ir}(\text{L177})_3$	L177	$\text{Ir}(\text{L177})_3$	255 °C / 32 h	48 %
	$\text{Ir}(\text{L178})_3$	L178	$\text{Ir}(\text{L178})_3$	260 °C / 30 h	75 %
5	$\text{Ir}(\text{L179})_3$	L179	$\text{Ir}(\text{L179})_3$	260 °C / 30 h	74 %
	$\text{Ir}(\text{L180})_3$	L180	 $\text{Ir}(\text{L180})_3$	250 °C / 24 h	26 %
10	$\text{Ir}(\text{L181})_3$	L181	$\text{Ir}(\text{L181})_3$	250 °C / 24 h	16 %
	$\text{Ir}(\text{L182})_3$	L182	 $\text{Ir}(\text{L182})_3$	250 °C / 30 h	17 %
15	$\text{Ir}(\text{L183})_3$	L183	$\text{Ir}(\text{L183})_3$	260 °C / 20 h	31 %
20	$\text{Ir}(\text{L184})_3$	L184	$\text{Ir}(\text{L184})_3$	230 °C / 25 h	23 %
	$\text{Ir}(\text{L185})_3$	L185	$\text{Ir}(\text{L185})_3$	230 °C / 18 h	5 %
	$\text{Ir}(\text{L186})_3$	L186	$\text{Ir}(\text{L186})_3$	235 °C / 20 h	7 %
25	$\text{Ir}(\text{L187})_3$	L187	$\text{Ir}(\text{L187})_3$	230 °C / 25 h	8 %
	$\text{Ir}(\text{L188})_3$	L188	$\text{Ir}(\text{L188})_3$	240 °C / 25 h	13 %
30	$\text{Ir}(\text{L189})_3$	L189	 $\text{Ir}(\text{L189})_3$	245 °C / 35 h	9 %

35

	$\text{Ir}(\text{L190})_3$	L190	$\text{Ir}(\text{L190})_3$	245 °C / 26 h	12 %
5	$\text{Ir}(\text{L191})_3$	L191	 $\text{Ir}(\text{L191})_3$	250 °C / 26 h	26 %
10	$\text{Ir}(\text{L192})_3$	L192	 $\text{Ir}(\text{L192})_3$	250 °C / 36 h	8 %
15	$\text{Ir}(\text{L193})_3$	L193	 $\text{Ir}(\text{L193})_3$	230 °C / 16 h	6 %
20	$\text{Ir}(\text{L194})_3$	L194	$\text{Ir}(\text{L194})_3$	230 °C / 16 h	54 %
	$\text{Ir}(\text{L195})_3$	L195	$\text{Ir}(\text{L195})_3$	230 °C / 26 h	71 %
	$\text{Ir}(\text{L196})_3$	L196	$\text{Ir}(\text{L196})_3$	250 °C / 36 h	58 %
25	$\text{Ir}(\text{L197})_3$	L197	$\text{Ir}(\text{L197})_3$	250 °C / 36 h	27 %
	$\text{Ir}(\text{L198})_3$	L198	$\text{Ir}(\text{L198})_3$	255 °C / 46 h	34 %
	$\text{Ir}(\text{L199})_3$	L199	$\text{Ir}(\text{L199})_3$	250 °C / 46 h	17 %

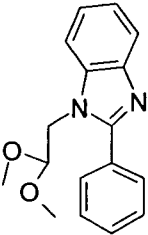
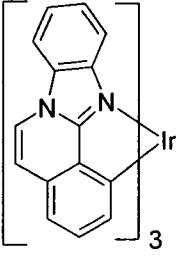
### Variante C: Ligandensynthese am Komplex

30 Ein Gemisch aus 10 mmol Tris-acetylacetonato-iridium(III) [15635-87-7] und 60 mmol des Imidazol-Derivats wird unter Vakuum ( $10^{-3}$  mbar) in eine 100 ml Glasampulle abgeschmolzen. Die Ampulle wird für die angegebene Zeit bei der angegebenen Temperatur getempert, wobei das aufgeschmolzene Gemisch mit Hilfe eines Magnetrührers gerührt wird.

35 Nach Erkalten – ACHTUNG: die Ampullen stehen meist unter Druck! -

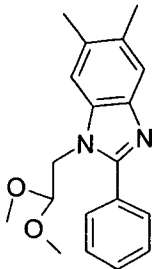
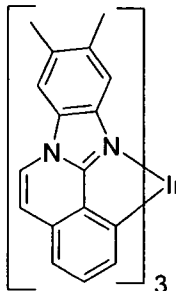
- 143 -

wird die Ampulle geöffnet, der Sinterkuchen wird mit 100 g Glaskugeln (3 mm Durchmesser) in 300 ml EtOH bei 50 °C 5 h gerührt und dabei mechanisch aufgeschlossen. Nach Erkalten dekantiert man die feine Suspension von den Glaskugeln ab, saugt den Feststoff ab und trocknet diesen im Vakuum. Der Feststoff wird in einem Gemisch aus 90 ml Essigsäure und 10 ml Essigsäureanhydrid suspendiert, die Suspension wird mit 1 ml Trifluoressigsäure versetzt und dann 1 h unter Rückfluss erhitzt. Nach Erkalten saugt man vom Feststoff ab, wäscht diesen einmal mit 20 ml Essigsäure und dreimal mit je 30 ml Ethanol und trocknet diesen im Vakuum. Der trockene Feststoff wird in einem Heißextraktor auf einem 10-cm hohen Kieselgel-Bett platziert und dann mit 1,2-Dichlorethan extrahiert. Nach beendeter Extraktion wird das Extraktionsmittel im Vakuum auf ca. 50 ml eingengt, die Suspension wird mit 100 ml Methanol versetzt und 1 h nachgerührt. Nach Absaugen und Trocknen wird die Reinheit des Metall-Komplexes mittels NMR und / oder HPLC bestimmt. Liegt die Reinheit unter 99.9 % wird der Heißextraktionsschritt wiederholt, ist eine Reinheit von > 99.9 % erreicht wird der Metallkomplex sublimiert. Die Sublimation erfolgt im Hochvakuum ( $p$  ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von ca. 350 bis ca. 370 °C.

Beispiel	Imidazol-Derivat	Ir-Komplex	Ausbeute
Ir(L83) <sub>3</sub>	 <p>Darstellung nach US 2009163545</p>	 <p>Ir(L83)<sub>3</sub></p>	20 %

35



Ir(L88) <sub>3</sub>	 <p data-bbox="523 582 778 660">Darstellung nach US 2009163545</p>	 <p data-bbox="949 638 1061 683">Ir(L88)<sub>3</sub></p>	35 %
----------------------	---	--	------

5

10

## 2) Heteroleptische-Iridium-Komplexe:

### Variante A:

Ein Gemisch aus 10 mmol Natrium-bis-acetylacetonato-dichloro-iridat(III) [770720-50-8] und 21 mmol des Liganden wird unter Vakuum ( $10^{-3}$  mbar) in eine 50 ml Glasampulle abgeschmolzen. Die Ampulle wird für 6 – 12 h bei 220 – 250 °C getempert, wobei das aufgeschmolzene Gemisch mit Hilfe eines Magnetrührers gerührt wird. Nach Erkalten – ACHTUNG: die Ampullen stehen meist unter Druck! - wird die Ampulle geöffnet, der Sinterkuchen wird mit 200 g Glaskugeln (3 mm Durchmesser) in 500 ml EtOH bei 60 °C 5 h gerührt und dabei mechanisch aufgeschlossen. Nach Erkalten dekantiert man die feine Suspension von den Glaskugeln ab, saugt das entsprechende Chloro-Dimer der Formel  $[\text{Ir}(\text{L})_2\text{Cl}]_2$  ab und trocknet dieses im Vakuum. Das so erhaltene rohe Chloro-Dimer der Formel  $[\text{Ir}(\text{L})_2\text{Cl}]_2$  wird in einem Gemisch aus 75 ml 2-Ethoxyethanol und 25 ml Wasser suspendiert und mit 13 mmol des Co-Liganden bzw. der Co-Liganden-Verbindung und 15 mmol Natriumcarbonat versetzt. Nach 20 h unter Rückfluss gibt man weitere 75 ml Wasser tropfenweise zu, saugt nach Erkalten vom Feststoff ab, wäscht diesen dreimal mit je 50 ml Wasser und dreimal mit je 50 ml Methanol und trocknet diesen im Vakuum. Der Feststoff wird in einem Heißextraktor auf einem 10 cm hohen Kieselgel-Bett platziert und dann mit Dichlormethan oder 1,2-Dichlorethan extrahiert. Nach beendeter Extraktion wird das Extraktionsmittel im Vakuum auf ca. 50 ml eingengt, die Suspension wird mit 100 ml Methanol versetzt und 1 h nachgerührt. Nach Absaugen und Trocknen wird die Reinheit des Metall-Komplexes mittels NMR und / oder HPLC

35

- 145 -

bestimmt. Liegt die Reinheit unter 99.9 % wird der Heißextraktionsschritt wiederholt, ist eine Reinheit von > 99.9 % erreicht wird der Metallkomplex getempert oder sublimiert. Das Tempern erfolgt im Hochvakuum (p ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von 200 – 300 °C. Die Sublimation erfolgt im Hochvakuum (p ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von ca. 300 bis ca. 420 °C.

5

10

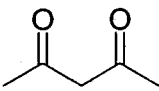
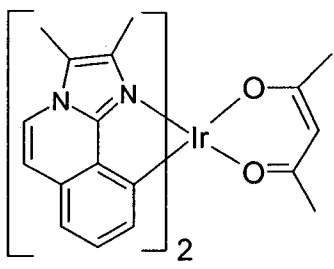
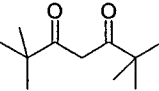
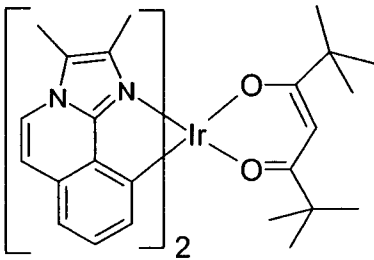
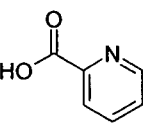
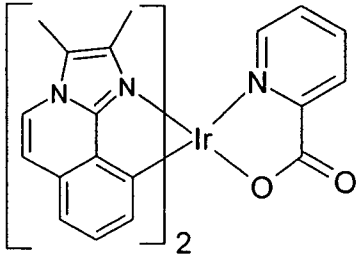
15

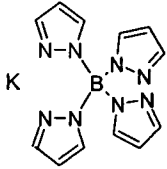
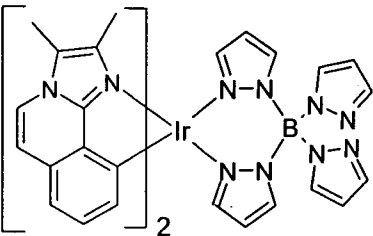
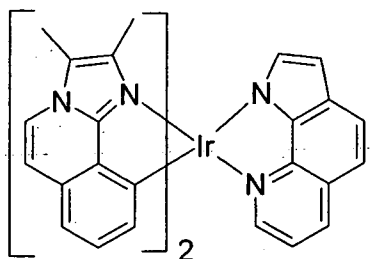
20

25

30

35

Bsp.	Li-gand	Co-Ligand	Ir-Komplex	Aus-beute
Ir(L5) <sub>2</sub> (CL1)	L5	 123-54-6 CL1	 Ir(L5) <sub>2</sub> (CL1)	51 %
Ir(L5) <sub>2</sub> (CL2)	L5	 17594-47-7 CL2	 Ir(L5) <sub>2</sub> (CL2)	55 %
Ir(L5) <sub>2</sub> (CL3)	L5	 98-98-6 CL3	 Ir(L5) <sub>2</sub> (CL3)	56 %

5	$\text{Ir}(\text{L5})_2(\text{CL4})$	L5	 14782-58-2 CL4	 $\text{Ir}(\text{L5})_2(\text{CL4})$	43 %
10	$\text{Ir}(\text{L5})_2(\text{L193})$	L5	L193	 $\text{Ir}(\text{L5})_2(\text{L193})$	61 %
15	$\text{Ir}(\text{L7})_2(\text{CL1})$	L7	CL1	$\text{Ir}(\text{L7})_2(\text{CL1})$	40 %
	$\text{Ir}(\text{L9})_2(\text{CL1})$	L9	CL1	$\text{Ir}(\text{L9})_2(\text{CL1})$	55 %
	$\text{Ir}(\text{L15})_2(\text{CL1})$	L15	CL1	$\text{Ir}(\text{L15})_2(\text{CL1})$	61 %
	$\text{Ir}(\text{L49})_2(\text{CL1})$	L49	CL1	$\text{Ir}(\text{L49})_2(\text{CL1})$	37 %
20	$\text{Ir}(\text{L83})_2(\text{CL2})$	L83	CL2	$\text{Ir}(\text{L83})_2(\text{CL1})$	17 %
	$\text{Ir}(\text{L104})_2(\text{CL2})$	L104	CL2	$\text{Ir}(\text{L104})_2(\text{CL2})$	41 %
	$\text{Ir}(\text{L105})_2(\text{CL2})$	L105	CL2	$\text{Ir}(\text{L105})_2(\text{CL2})$	40 %
25	$\text{Ir}(\text{L119})_2(\text{CL3})$	L119	CL3	$\text{Ir}(\text{L119})_2(\text{CL3})$	23 %
	$\text{Ir}(\text{L130})_2(\text{CL3})$	L130	CL3	$\text{Ir}(\text{L130})_2(\text{CL3})$	64 %
	$\text{Ir}(\text{L139})_2(\text{CL3})$	L139	CL3	$\text{Ir}(\text{L139})_2(\text{CL3})$	58 %
	$\text{Ir}(\text{L163})_2(\text{CL1})$	L163	CL1	$\text{Ir}(\text{L163})_2(\text{CL1})$	51 %
30	$\text{Ir}(\text{L172})_2(\text{L199})$	L172	L199	$\text{Ir}(\text{L172})_2(\text{L199})$	44 %

**Variante B:**

Ein Gemisch aus 10 mmol Natrium-bis-acetylacetonato-dichloro-iridat(III) [770720-50-8] und 22 mmol des Liganden wird unter Vakuum ( $10^{-3}$  mbar) in eine 50 ml Glasampulle abgeschmolzen. Die Ampulle wird für 6 – 12 h

35

- 147 -

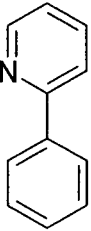
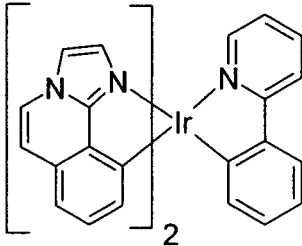
bei 220 – 250 °C getempert, wobei das aufgeschmolzene Gemisch mit Hilfe eines Magnetrührers gerührt wird. Nach Erkalten – ACHTUNG: die Ampullen stehen meist unter Druck! - wird die Ampulle geöffnet, der Sinterkuchen wird mit 200 g Glaskugeln (3 mm Durchmesser) in 500 ml EtOH bei 60 °C 5 h gerührt und dabei mechanisch aufgeschlossen. Nach

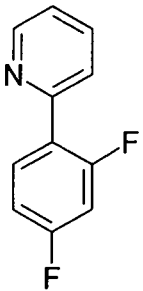
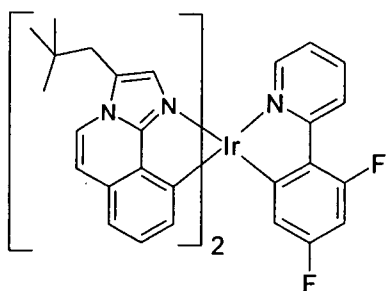
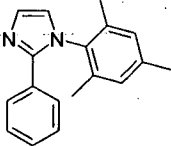
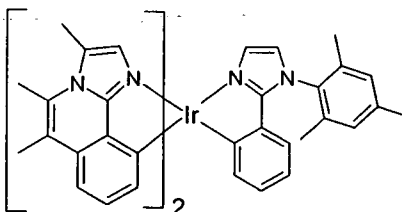
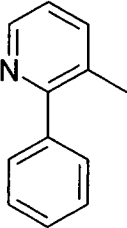
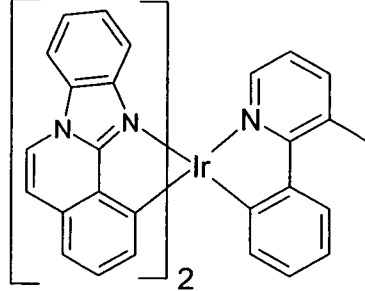
5 Erkalten dekantiert man die feine Suspension von den Glaskugeln ab, saugt das entsprechende rohe Chloro-Dimer der Formel  $[\text{Ir}(\text{L})_2\text{Cl}]_2$  ab und trocknet dieses im Vakuum. Das rohe Chloro-Dimer der Formel  $[\text{Ir}(\text{L})_2\text{Cl}]_2$  wird nach WO 2007/065523, Beispiel 5 in Gegenwart von 75 mmol N,N-Dimethylglycin in einem Dioxan-Wasser Gemisch weiter umgesetzt. Die

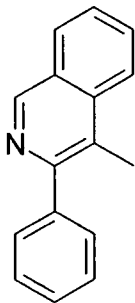
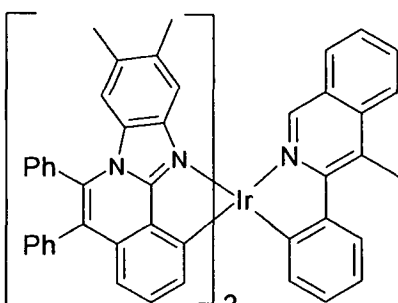
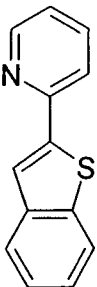
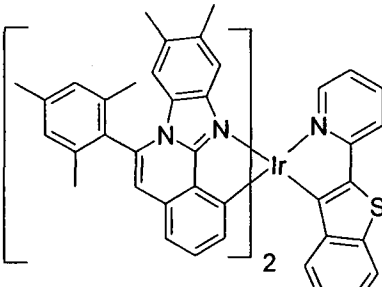
10 so erhaltenen Feststoffe werden in einem Heißextraktor auf einem 10 cm hohen Kieselgel-Bett platziert und dann mit Dichlormethan oder 1,2-Dichlorethan extrahiert. Nach beendeter Extraktion wird das Extraktionsmittel im Vakuum auf ca. 50 ml eingengt, die Suspension wird mit 100 ml Methanol versetzt und 1 h nachgerührt. Nach Absaugen und Trocknen

15 wird die Reinheit des Metall-Komplexes mittels NMR und / oder HPLC bestimmt. Liegt die Reinheit unter 99.9 % wird der Heißextraktionsschritt wiederholt, ist eine Reinheit von > 99.9 % erreicht wird der Metallkomplex getempert oder sublimiert. Das Tempern erfolgt im Hochvakuum (p ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von 200 – 300 °C. Die Sublimation

20 erfolgt im Hochvakuum (p ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von ca. 300 bis ca. 420 °C.

Bsp.	Li-gand	Co-Ligand	Ir-Komplex	Aus-beute
$\text{Ir}(\text{L1})_2(\text{CL5})$	L1	 1008-89-5 CL5	 $\text{Ir}(\text{L1})_2(\text{CL5})$	51 %
$\text{Ir}(\text{L7})_2(\text{CL5})$	L7	CL5	$\text{Ir}(\text{L7})_2(\text{CL5})$	72 %

5	$\text{Ir}(\text{L7})_2(\text{CL6})$	<p>L7</p>  <p>391604-55-0</p> <p>CL6</p>	 <p><math>\text{Ir}(\text{L7})_2(\text{CL6})</math></p>	<p>48 %</p>
10	$\text{Ir}(\text{L14})_2(\text{CL7})$	<p>L14</p>  <p>1093072-00-4</p> <p>CL7</p>	 <p><math>\text{Ir}(\text{L14})_2(\text{CL7})</math></p>	<p>53 %</p>
15	$\text{Ir}(\text{L49})_2(\text{CL7})$	<p>L49</p> <p>CL7</p>	<p><math>\text{Ir}(\text{L49})_2(\text{CL7})</math></p>	<p>57 %</p>
20	$\text{Ir}(\text{L83})_2(\text{CL8})$	<p>L83</p>  <p>10273-90-2</p> <p>CL8</p>	 <p><math>\text{Ir}(\text{L83})_2(\text{CL8})</math></p>	<p>77 %</p>
25	$\text{Ir}(\text{L104})_2(\text{CL8})$	<p>L104</p> <p>CL8</p>	<p><math>\text{Ir}(\text{L104})_2(\text{CL8})</math></p>	<p>82 %</p>
30	$\text{Ir}(\text{L105})_2(\text{CL8})$	<p>L105</p> <p>CL8</p>	<p><math>\text{Ir}(\text{L105})_2(\text{CL8})</math></p>	<p>80 %</p>
35	$\text{Ir}(\text{L119})_2(\text{CL8})$	<p>L119</p> <p>CL8</p>	<p><math>\text{Ir}(\text{L119})_2(\text{CL8})</math></p>	<p>69 %</p>

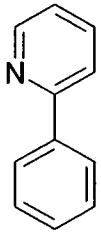
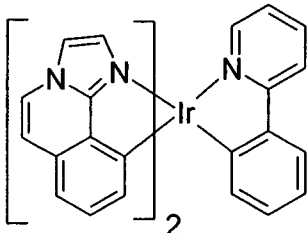
5	$\text{Ir}(\text{L119})_2(\text{CL9})$	L119	 51089-62-4 CL9	 $\text{Ir}(\text{L119})_2(\text{CL9})$	73 %
10	$\text{Ir}(\text{L130})_2(\text{CL10})$	L130	 38210-35-4 CL10	 $\text{Ir}(\text{L130})_2(\text{CL10})$	42 %
20	$\text{Ir}(\text{L139})_2(\text{CL7})$	L139	CL7	$\text{Ir}(\text{L139})_2(\text{CL7})$	55 %

**Variante C:**

Ein Gemisch aus 10 mmol Natrium-bis-acetylacetonato-dichloro-iridat(III) [770720-50-8] und 21 mmol des Liganden wird unter Vakuum ( $10^{-3}$  mbar) in eine 50 ml Glasampulle abgeschmolzen. Die Ampulle wird für 6 – 12 h bei 220 – 250 °C getempert, wobei das aufgeschmolzene Gemisch mit Hilfe eines Magnetrührers gerührt wird. Nach Erkalten – ACHTUNG: die Ampullen stehen meist unter Druck! - wird die Ampulle geöffnet, der Sinterkuchen wird mit 200 g Glaskugeln (3 mm Durchmesser) in 500 ml EtOH bei 60 °C 5 h gerührt und dabei mechanisch aufgeschlossen. Nach Erkalten dekantiert man die feine Suspension von den Glaskugeln ab, saugt das entsprechende Chloro-Dimer der Formel  $[\text{Ir}(\text{L})_2\text{Cl}]_2$  ab und trocknet dieses im Vakuum. Das so erhaltene rohe Chloro-Dimer der Formel  $[\text{Ir}(\text{L})_2\text{Cl}]_2$  wird in 100 ml THF suspendiert, die Suspension wird mit 40 mmol des Co-Liganden, 20 mmol Silber(I)trifluoracetat und 80 mmol

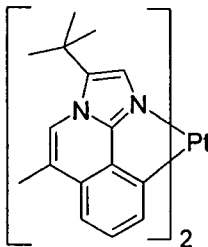
- 150 -

Kaliumcarbonat versetzt und 24 h unter Rückfluss erhitzt. Nach Erkalten wird das THF im Vakuum entfernt, der Feststoff wird in einem Heißextraktor auf einem 10 cm hohen Kieselgel-Bett platziert und dann mit Dichlormethan oder 1,2-Dichlorethan extrahiert. Nach beendeter Extraktion wird das Extraktionsmittel im Vakuum auf ca. 50 ml eingeeengt, die Suspension wird mit 100 ml Methanol versetzt und 1 h nachgerührt. Nach Absaugen und Trocknen wird die Reinheit des Metall-Komplexes mittels NMR und / oder HPLC bestimmt. Liegt die Reinheit unter 99.9 % wird der Heißextraktionsschritt wiederholt, ist eine Reinheit von > 99.9 % erreicht wird der Metallkomplex getempert oder sublimiert. Das Tempern erfolgt im Hochvakuum (p ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von 200 – 300 °C. Die Sublimation erfolgt im Hochvakuum (p ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von ca. 300 bis ca. 420 °C.

Bsp.	Li-gand	Co-Ligand	Ir-Komplex	Aus-beute
Ir(L1) <sub>2</sub> (CL5)	L1	 CL5	 Ir(L1) <sub>2</sub> (CL5)	83 %
Ir(L12) <sub>2</sub> (L7)	L12	L7	Ir(L12) <sub>2</sub> (L7)	31 %
Ir(L12) <sub>2</sub> (L32)	L32	L32	Ir(L12) <sub>2</sub> (L32)	43 %
Ir(L12) <sub>2</sub> (L51)	L51	L51	Ir(L12) <sub>2</sub> (L51)	45 %
Ir(L51) <sub>2</sub> (L12)	L51	L12	Ir(L51) <sub>2</sub> (L12)	32 %
Ir(L79) <sub>2</sub> (CL7)	L79	CL7	Ir(L79) <sub>2</sub> (CL7)	50 %
Ir(L99) <sub>2</sub> (L111)	L99	L111	Ir(L99) <sub>2</sub> (L111)	38 %
Ir(L139) <sub>2</sub> (CL8)	L139	CL8	Ir(L139) <sub>2</sub> (CL8)	41 %
Ir(L164) <sub>2</sub> (CL8)	L164	CL8	Ir(L164) <sub>2</sub> (CL8)	46 %

**3) Bis-homoleptische-Platin-Komplexe:**

Ein Gemisch aus 5 mmol Bis(benzonitril)-di(chloro)platin(II) [14873-63-3], 20 mmol des Liganden, 20 mmol Lithiumacetat und 20 ml Essigsäure wird in einer Ampulle vorgelegt. Diese wird über freeze-pump-thaw-Zyklen entgast, unter Vakuum abgeschmolzen und dann bei 130 °C 20 min. Mikrowellenstrahlung (Discover™-Gerät der Fa. CEM-GmbH, Kamp-Lintfort, Deutschland, Magnetron Frequenz 2450 MHz, 150 W pro Liter) ausgesetzt. Die Reaktionsmischung wird nach Erkalten in ein Gemisch aus 80 ml EtOH und 20 ml Wasser eingerührt, der feine Feststoff wird abgesaugt, dreimal mit 20 ml Ethanol gewaschen und im Vakuum getrocknet. Der trockene Feststoff wird in einem Heißextraktor auf einem 10 cm hohen Kieselgel-Bett platziert und dann mit THF extrahiert. Nach beendeter Extraktion wird das Extraktionsmittel im Vakuum auf ca. 30 ml eingengt, die Suspension wird mit 75 ml Methanol versetzt und 1 h nachgerührt. Nach Absaugen und Trocknen wird die Reinheit des Metall-Komplexes mittels NMR und / oder HPLC bestimmt. Liegt die Reinheit unter 99.9 % wird der Heißextraktionsschritt wiederholt, ist eine Reinheit von > 99.9 % erreicht wird der Metallkomplex getempert oder sublimiert. Das Tempern erfolgt im Hochvakuum ( $p$  ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von 200 – 300 °C. Die Sublimation erfolgt im Hochvakuum ( $p$  ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von ca. 300 bis ca. 420 °C.

Beispiel	Ligand	Pt-Komplex	Ausbeute
Pt (L12) <sub>2</sub>	L12	 Pt (L12) <sub>2</sub>	3 %
Pt (L41) <sub>2</sub>	L41	Pt (L41) <sub>2</sub>	22 %
Pt (L46) <sub>2</sub>	L46	Pt (L46) <sub>2</sub>	19 %

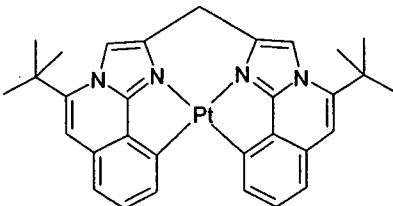


Pt (L101) <sub>2</sub>	L101	Pt (L101) <sub>2</sub>	8 %
Pt (L165) <sub>2</sub>	L165	Pt (L165) <sub>2</sub>	24 %

#### 4) Platin-Komplexe mit tetradentaten Liganden:

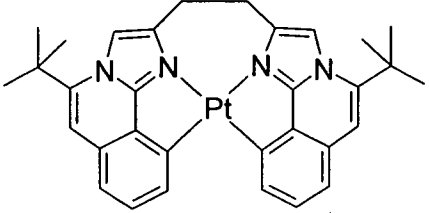
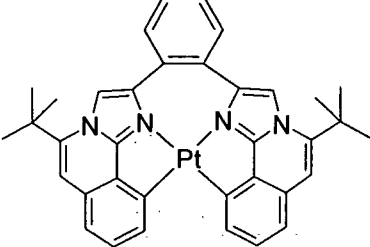
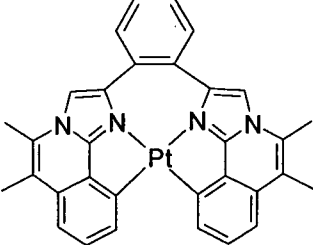
5 Ein Gemisch aus 5 mmol Bis(benzonitril)-di(chloro)platin(II) [14873-63-3],  
 5 mmol des Liganden, 20 mmol Lithiumacetat und 20 ml Essigsäure wird  
 in einer Ampulle vorgelegt. Diese wird über freeze-pump-thaw-Zyklen  
 entgast, unter Vakuum abgeschmolzen und dann bei 130 °C 20 min.  
 Mikrowellenstrahlung (Discover<sup>TM</sup>-Gerät der Fa. CEM-GmbH, Kamp-  
 10 Lintfort, Deutschland, Magnetron Frequenz 2450 MHz, 150 W pro Liter)  
 ausgesetzt. Die Reaktionsmischung wird nach Erkalten in ein Gemisch  
 aus 80 ml EtOH und 20 ml Wasser eingerührt, der feine Feststoff wird  
 abgesaugt, dreimal mit 20 ml Ethanol gewaschen und im Vakuum  
 getrocknet. Der trockene Feststoff wird in einem Heißextraktor auf einem  
 15 10 cm hohen Kieselgel-Bett platziert und dann mit THF extrahiert. Nach  
 beendeter Extraktion wird das Extraktionsmittel im Vakuum auf ca. 30 ml  
 eingeeengt, die Suspension wird mit 75 ml Methanol versetzt und 1 h  
 nachgerührt. Nach Absaugen und Trocknen wird die Reinheit des Metall-  
 Komplexes mittels NMR und / oder HPLC bestimmt. Liegt die Reinheit  
 20 unter 99.9 % wird der Heißextraktionsschritt wiederholt, ist eine Reinheit  
 von > 99.9 % erreicht wird der Metallkomplex getempert oder sublimiert.  
 Das Tempern erfolgt im Hochvakuum (p ca. 10<sup>-6</sup> mbar) im Temperatur-  
 bereich von 200 – 300 °C. Die Sublimation erfolgt im Hochvakuum (p ca.  
 10<sup>-6</sup> mbar) im Temperaturbereich von ca. 300 bis ca. 420 °C.

25

Beispiel	Ligand	Pt-Komplex	Ausbeute
Pt (L205)	L205		23 %

35

- 153 -

5	Pt (L206)	L206		17 %
10	Pt (L207)	L207		26 %
15	Pt (L208)	L208		31 %

### 5) Heteroleptische Platin-Komplexe:

Ein Gemisch aus 5 mmol Platin(II)chlorid, 6 mmol des Liganden, 0.5 mmol Tetra-n-butyl-ammoniumchlorid in 10 ml Dichlormethan wird 12 h unter Rückfluss erhitzt. Nach tropfenweiser Zugabe von 50 ml Methanol wird vom feinen Feststoff abgesaugt, dieser wird zweimal mit 10 ml Methanol gewaschen und im Vakuum getrocknet. Das so erhaltene rohe Chloro-Dimer der Formel  $[Pt(L)Cl]_2$  wird in einem Gemisch aus 45 ml 2-Ethoxyethanol und 15 ml Wasser suspendiert und mit 7 mmol des Co-Liganden bzw. der Co-Liganden-Verbindung und 7 mmol Natriumcarbonat versetzt. Nach 20 h unter Rückfluss gibt mal weitere 75 ml Wasser tropfenweise zu, saugt nach Erkalten vom Feststoff ab, wäscht diesen dreimal mit je 50 ml Wasser und dreimal mit je 50 ml Methanol und trocknet diesen im Vakuum. Der trockene Feststoff wird in einem Heißextraktor auf einem 10 cm hohen Kieselgel-Bett platziert und dann mit THF extrahiert. Nach beendeter Extraktion wird das Extraktionsmittel im Vakuum auf ca. 15 ml eingeeengt, die Suspension wird mit 75 ml Methanol versetzt und 1 h nachgerührt. Nach Absaugen und Trocknen wird die Reinheit des Metallkomplexes mittels NMR und / oder HPLC bestimmt. Liegt die Reinheit

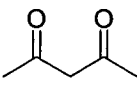
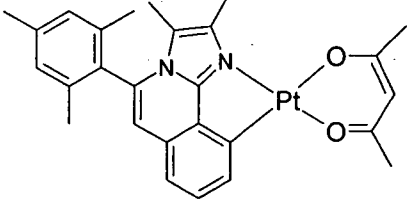
unter 99.9 % wird der Heißextraktionsschritt wiederholt, ist eine Reinheit von > 99.9 % erreicht wird der Metallkomplex getempert oder sublimiert. Das Tempern erfolgt im Hochvakuum ( $p$  ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von 200 – 300 °C. Die Sublimation erfolgt im Hochvakuum ( $p$  ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von ca. 300 bis ca. 420 °C.

5

10

15

20

Bsp.	Li-gand	Co-Ligand	Pt-Komplex	Aus-beute
Pt(L40)(CL1)	L40	 CL1	 Pt(L40)(CL1)	32 %
Pt(L66)(CL2)	L66	CL2	Pt(L66)(CL2)	22 %
Pt(L107)(CL1)	L107	CL1	Pt(L107)(CL1)	13 %
Pt(L107)(L196)	L107	L196	Pt(L107)(L196)	17 %
Pt(L107)(L199)	L107	L199	Pt(L107)(L199)	28 %

### 6) Heteroleptische Gold-Komplexe:

25

30

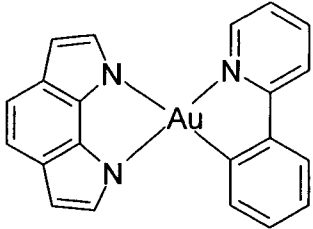
35

Ein Gemisch aus 5 mmol Dichloro[2-(2-pyridinyl)phenyl-C,N]-gold, 6 mmol des Liganden, 10 mmol Triethylamin in 50 ml THF wird 20 h bei 50 °C gerührt. Nach Einengen der Reaktionsmischung auf 10 ml und tropfenweiser Zugabe von 50 ml Methanol wird vom feinen Feststoff abgesaugt, dieser wird zweimal mit 10 ml Methanol gewaschen und im Vakuum getrocknet. Der trockene Feststoff wird in einem Heißextraktor auf einem 10 cm hohen Celite-Bett platziert und dann mit THF extrahiert. Nach beendeter Extraktion wird das Extraktionsmittel im Vakuum auf ca. 15 ml eingeeengt, die Suspension wird mit 75 ml Methanol versetzt und 1 h nachgerührt. Nach Absaugen und Trocknen wird die Reinheit des Metallkomplexes mittels NMR und / oder HPLC bestimmt. Liegt die Reinheit

- 155 -

unter 99.9 % wird der Heißextraktionsschritt wiederholt, ist eine Reinheit von > 99.9 % erreicht wird der Metallkomplex getempert oder sublimiert. Das Tempern erfolgt im Hochvakuum ( $p$  ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von 200 – 300 °C. Die Sublimation erfolgt im Hochvakuum ( $p$  ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von ca. 300 bis ca. 420 °C.

5

Bsp.	Li-gand	Co-Ligand	Au-Komplex	Aus-beute
Au(L202)(CL5)	L202	CL5	 Au(L202)(CL5)	42 %
Au(L203)(CL5)	L203	CL5	Au(L203)(CL5)	37 %
Au(L204)(CL5)	L204	CL5	Au(L204)(CL5)	11 %

15

20

### 7) Heteroleptische Kupfer-Komplexe:

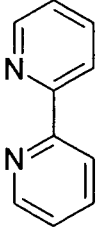
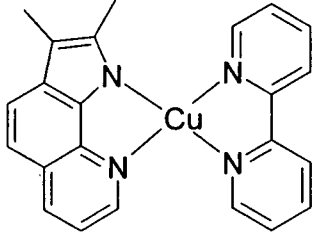
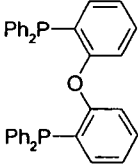
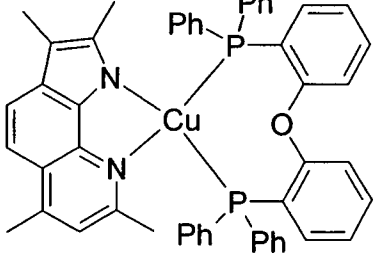
Ein Gemisch aus 5 mmol Tetrakis(acetonitril)kupfer(I)tetrafluoroborat [15418-29-8], 5 mmol des Liganden, 5 mmol des Co-Liganden und 6 mmol Triethylamin in 50 ml THF wird 20 h bei Raumtemperatur gerührt.

25

Nach Einengen der Reaktionsmischung auf 5 ml und tropfenweiser Zugabe von 50 ml Methanol wird vom feinen Feststoff abgesaugt, dieser wird zweimal mit 10 ml Methanol gewaschen und im Vakuum getrocknet. Das Rohprodukt wird zweimal aus Dichlormethan / Methanol umkristallisiert. Das Tempern erfolgt im Hochvakuum ( $p$  ca.  $10^{-6}$  mbar) im Temperaturbereich von 200 °C.

30

35

Bsp.	Li-gand	Co-Ligand	Cu-Komplex	Aus-beute
5 10	Cu(L194)(CL11) L194	 366-18-7 CL11	 Cu(L194)(CL11)	63 %
	Cu(L196)(CL11) L196	CL11	Cu(L196)(CL11)	48 %
15 20	Cu(L195)(CL12)	 166330-10-5 CL12	 Cu(L195)(CL12)	71 %

### Herstellung der OLEDs

Die Herstellung von erfindungsgemäßen OLEDs sowie OLEDs nach dem Stand der Technik erfolgt nach einem allgemeinen Verfahren gemäß WO 04/058911, das auf die hier beschriebenen Gegebenheiten (Schichtdickenvariation, verwendete Materialien) angepasst wird.

In den folgenden Beispielen 1 bis 250 (siehe Tabellen 1 und 2) werden die Ergebnisse verschiedener OLEDs vorgestellt. Glasplättchen, die mit strukturiertem ITO (Indium Zinn Oxid) der Dicke 150 nm beschichtet sind, werden zur verbesserten Prozessierung mit 20 nm PEDOT beschichtet (Poly(3,4-ethyldioxy-2,5-thiophen), aus Wasser aufgeschleudert; bezogen von H. C. Starck, Goslar, Deutschland). Diese beschichteten Glasplättchen bilden die Substrate, auf welche die OLEDs aufgebracht werden. Die OLEDs haben prinzipiell folgenden Schichtaufbau: Substrat /

optionale Lochinjektionsschicht (HIL) / Lochtransportschicht (HTL) /  
optionale Zwischenschicht (IL) / Elektronenblockierschicht (EBL) /  
Emissionsschicht (EML) / optionale Lochblockierschicht (HBL) /  
Elektronentransportschicht (ETL) / optionale Elektroneninjectionsschicht  
(EIL) und abschließend eine Kathode. Die Kathode wird durch eine  
5 100 nm dicke Aluminiumschicht gebildet

Zunächst werden vakuumprozessierte OLEDs beschrieben. Hierfür  
werden alle Materialien in einer Vakuumkammer thermisch aufgedampft.  
Dabei besteht die Emissionsschicht immer aus mindestens einem Matrix-  
10 material (Hostmaterial, Wirtsmaterial) und einem emittierenden Dotierstoff  
(Dotand, Emitter), der dem Matrixmaterial bzw. den Matrixmaterialien  
durch Coverdampfung in einem bestimmten Volumenanteil beigemischt  
wird. Eine Angabe wie M3:M2:Ir(L1)<sub>3</sub> (55%:35%:10%) bedeutet hierbei,  
dass das Material M3 in einem Volumenanteil von 55%, M2 in einem Anteil  
15 von 35% und Ir(L1)<sub>3</sub> in einem Anteil von 10% in der Schicht vorliegt.  
Analog kann auch die Elektronentransportschicht aus einer Mischung  
zweier Materialien bestehen. Der genaue Aufbau der OLEDs ist Tabelle 1  
zu entnehmen. Die zur Herstellung der OLEDs verwendeten Materialien  
sind in Tabelle 3 gezeigt.

20 Die OLEDs werden standardmäßig charakterisiert. Hierfür werden die  
Elektrolumineszenzspektren, die Stromeffizienz (gemessen in cd/A) und  
die Spannung (gemessen bei 1000 cd/m<sup>2</sup> in V) bestimmt aus Strom-  
Spannungs-Helligkeits-Kennlinien (IUL-Kennlinien). Für ausgewählte  
25 Versuche wird ebenfalls die Lebensdauer bestimmt. Als Lebensdauer wird  
die Zeit definiert, nach der die Leuchtdichte von einer bestimmten Start-  
leuchtdichte aus auf einen gewissen Anteil abgesunken ist. Die Angabe  
LD50 bedeutet, dass es sich bei der genannten Lebensdauer um die Zeit  
handelt, bei der die Leuchtdichte auf 50% der Startleuchtdichte abgefallen  
30 ist, also von z. B. 4000 cd/m<sup>2</sup> auf 2000 cd/m<sup>2</sup>. Je nach Emissionsfarbe  
wurden unterschiedliche Starthelligkeiten gewählt. Die Werte für die  
Lebensdauer können mit Hilfe dem Fachmann bekannten Umrechnungs-  
formeln auf eine Angabe für andere Startleuchtdichten umgerechnet  
werden. Hierbei ist die Lebensdauer für eine Startleuchtdichte von  
35 1000 cd/m<sup>2</sup> eine übliche Angabe.

### Verwendung von erfindungsgemäßen Verbindungen als Emittermaterialien und Lochtransportmaterialien in phosphoreszierenden OLEDs

Die erfindungsgemäßen Verbindungen lassen sich unter anderem als phosphoreszierende Emittermaterialien in der Emissionsschicht in OLEDs einsetzen. Hierbei kommen die Metallkomplexe mit den Zentralatomen Ir, Pt, Au und Cu zum Einsatz. Als Vergleich gemäß dem Stand der Technik wird die Verbindung Ir(ref)<sub>3</sub> verwendet. Desweiteren wird gezeigt, dass sich die erfindungsgemäßen Verbindungen auch als Lochtransportierende Materialien einsetzen lassen. Die Ergebnisse der OLEDs sind in Tabelle 2 zusammengefasst.

Tabelle 1: Aufbau der OLEDs

Bsp.	HTL1 Dicke	HTL2 Dicke	EBL Dicke	EML Dicke	HBL Dicke	ETL Dicke	EIL Dicke
1	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M1:EBM3:Ir(L1) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M1 10 m	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
2	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3: Ir(L1) <sub>3</sub> (90%:10%) 40 nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
3	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M4:EBM3: Ir(L1) <sub>3</sub> (68%:30%:2%) 40 m	M4 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
4	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M4:EBM3: Ir(L1) <sub>3</sub> (28%:70%:2%) 40 m	M4 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
5	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M2: Ir(L1) <sub>3</sub> (85%15%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
6	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM2 15 nm	M5: Ir(L1) <sub>3</sub> (80%10%) 40 nm	M3 10 nm	Alq <sub>3</sub>	LiF
7	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L1) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
8	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L2) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
9	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L3) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
10	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L4) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
11	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L5) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
12	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L6) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
13	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L7) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---

- 159 -

5	14	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L8) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	15	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L9) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	16	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L10) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	17	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L11) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	18	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L12) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	19	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L13) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
10	20	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L14) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	21	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L15) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	22	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L16) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
15	23	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L17) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	24	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L18) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	25	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L19) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	26	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L20) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
20	27	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L21) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	28	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L22) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	29	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L23) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
25	30	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L24) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	31	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L25) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	32	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L26) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
30	33	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L27) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	34	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L28) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	35	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L29) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
35	36	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L30) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---



- 160 -

5	37	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L31) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	38	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L32) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	39	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L33) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	40	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L34) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	41	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L35) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	42	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L36) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
10	43	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L37) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	44	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L38) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	45	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L39) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	46	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L40) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
15	47	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L41) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	48	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L42) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	49	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L43) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
20	50	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L44) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	51	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L45) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	52	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L46) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
25	53	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L47) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	54	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L48) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	55	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L49) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
30	56	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L50) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	57	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L51) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	58	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L52) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
35	59	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L53) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---

5

10

15

20

25

30

35

60	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L54) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
61	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L56) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
62	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L58) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
63	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L59) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
64	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L60) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
65	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L61) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
66	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L62) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
67	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L63) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
68	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L64) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
69	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L65) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
70	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L66) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
71	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L69) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
72	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L70) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
73	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L71) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
74	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L72) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
75	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L73) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
76	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L74) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
77	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L75) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
78	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L78) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
79	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L79) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
80	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L80) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
81	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L82) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
82	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L83) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---

5	83	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:Ir(L83) <sub>3</sub> (90%:10%) 40 nm	M3 10 nm	Alq <sub>3</sub> 20 nm	LiF
	84	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM2 15 nm	M4:Ir(L83) <sub>3</sub> (90%:10%) 40 nm	M3 10 nm	Alq <sub>3</sub> 20 nm	LiF
	85	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	M4:Ir(L83) <sub>3</sub> (90%:10%) 40 nm	M6 10 nm	Alq <sub>3</sub> 20 nm	LiF
	86	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	EBM3:Ir(L83) <sub>3</sub> (90%:10%) 40 nm	M6 10 nm	Alq <sub>3</sub> 20 nm	LiF
	87	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM2 15 nm	EBM2:M3:Ir(L83) <sub>3</sub> (60%:30%:10%) 40 nm	M3 10 nm	Alq <sub>3</sub> 20 nm	LiF
	88	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M6:Ir(L83) <sub>3</sub> (90%:10%) 40 nm	M3 10 nm	Alq <sub>3</sub> 20 nm	LiF
10	89	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM2 15 nm	M6:EBM3:Ir(L83) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	Alq <sub>3</sub> 20 nm	LiF
	90	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M7:Ir(L83) <sub>3</sub> (95%:5%) 40 nm	M3 10 nm	Alq <sub>3</sub> 20 nm	LiF
	91	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L84) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
15	92	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L85) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	93	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L86) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	94	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L87) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
20	95	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L88) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	96	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L89) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	97	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L90) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
25	98	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L91) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	99	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L92) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	100	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L93) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
30	101	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L94) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	102	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L95) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	103	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L96) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	104	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L97) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
35	105	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L98) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---

- 163 -

5	106	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L99) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	107	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L100) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	108	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L101) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	109	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L102) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	110	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L103) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	111	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L104) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
10	112	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L105) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	113	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L106) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	114	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L107) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
15	115	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L112) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	116	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L113) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	117	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L114) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
20	118	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L115) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	119	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L118) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	120	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L119) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
25	121	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L120) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	122	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L122) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	123	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L125) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
30	124	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L126) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	125	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L127) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	126	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L128) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
35	127	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L129) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	128	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L130) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---

5

10

15

20

25

30

35

129	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L131) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
130	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L132) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
131	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L133) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
132	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L134) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
133	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L135) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
134	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L136) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
135	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L137) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
136	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L138) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
137	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L139) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
138	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L142) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
139	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L144) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
140	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L145) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
141	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L146) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
142	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L147) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
143	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L148) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
144	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L149) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
145	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L150) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
146	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L151) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
147	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L152) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
148	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L153) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
149	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L154) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
150	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L155) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
151	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L156) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---

- 165 -

5	152	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L157) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	153	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L158) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	154	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L159) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	155	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L160) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	156	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L161) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	157	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L162) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
10	158	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L163) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	159	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L164) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	160	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L165) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	161	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L169) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
15	162	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L170) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	163	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L171) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	164	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L172) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
20	165	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L173) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	166	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L174) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	167	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L175) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
25	168	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L176) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	169	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L177) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	170	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L178) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
30	171	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L179) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	172	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L180) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
	173	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L181) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
35	174	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L182) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---

- 166 -

5

10

15

20

25

30

35

175	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L183) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
176	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L184) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
177	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L185) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
178	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L186) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
179	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L187) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
180	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L188) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
181	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L189) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
182	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L190) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
183	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L191) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
184	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1:Ir(L192) <sub>3</sub> (90%:10%) 40 nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
185	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1:Ir(L193) <sub>3</sub> (90%:10%) 40 nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
186	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1:Ir(L194) <sub>3</sub> (90%:10%) 40 nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
187	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1:Ir(L195) <sub>3</sub> (90%:10%) 40 nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
188	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L200) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
189	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L201) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
190	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1:Ir(L202) <sub>3</sub> (90%:10%) 40 nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
191	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1:Ir(L203) <sub>3</sub> (90%:10%) 40 nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
192	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L204) <sub>3</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
193	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L5) <sub>2</sub> (CL1) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
194	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L5) <sub>2</sub> (CL2) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
195	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L5) <sub>2</sub> (CL3) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
196	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L5) <sub>2</sub> (CL4) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
197	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1:Ir(L5) <sub>2</sub> (L193) (90%:10%) 40 nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---

- 167 -

5  
10  
15  
20  
25  
30  
35

198	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L7) <sub>2</sub> (CL1) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
199	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L9) <sub>2</sub> (CL1) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
200	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L15) <sub>2</sub> (CL1) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
201	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L49) <sub>2</sub> (CL1) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
202	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L83) <sub>2</sub> (CL2) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
203	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L104) <sub>2</sub> (CL2) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
204	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L105) <sub>2</sub> (CL2) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
205	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L119) <sub>2</sub> (CL3) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
206	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L130) <sub>2</sub> (CL3) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
207	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L139) <sub>2</sub> (CL3) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
208	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L163) <sub>2</sub> (CL3) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
209	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L172) <sub>2</sub> (L199) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
210	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L1) <sub>2</sub> (CL5) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
211	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L7) <sub>2</sub> (CL5) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
212	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L7) <sub>2</sub> (CL6) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
213	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L15) <sub>2</sub> (CL7) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
214	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L49) <sub>2</sub> (CL7) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
215	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L83) <sub>2</sub> (CL8) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
216	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L104) <sub>2</sub> (CL8) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
217	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L105) <sub>2</sub> (CL8) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
218	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L119) <sub>2</sub> (CL8) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
219	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1:Ir(L119) <sub>2</sub> (CL9) (90%:10%) 40 nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
220	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1:Ir(L130) <sub>2</sub> (CL10) 90%:10%) 40 nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---



5

10

15

20

25

30

35

221	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L139) <sub>2</sub> (CL7) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
222	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L12) <sub>2</sub> (L7) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
223	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L12) <sub>2</sub> (L32) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
224	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L12) <sub>2</sub> (L51) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
225	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L51) <sub>2</sub> (L12) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
226	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L79) <sub>2</sub> (CL7) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
227	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L99) <sub>2</sub> (L111) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
228	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L139) <sub>2</sub> (CL8) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
229	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Ir(L164) <sub>2</sub> (CL8) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
230	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Pt(L12) <sub>2</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
231	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Pt(L41) <sub>2</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
232	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Pt(L46) <sub>2</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
233	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Pt(L101) <sub>2</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
234	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Pt(L165) <sub>2</sub> (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
235	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Pt(L205) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
236	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Pt(L206) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
237	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Pt(L207) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
238	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Pt(L208) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
239	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Pt(L40)(CL1) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
240	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Pt(L66)(CL2) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
241	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M3:EBM3:Pt(L107)(CL1) (80%:10%:10%) 40 nm	M3 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
242	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1:Pt (L107)(L196) (90%:10%) 40 nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---
243	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1:Pt(L107)(L199) (90%:10%) 40 nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 nm	---

5

10

244	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1: Au(L202)(CL5) (90%:10%) 40 nm	---	ETM1: LiQ (50%:50%) 20 nm	---
245	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1: Pt(L203)(CL5) (90%:10%) 40 nm	---	ETM1: LiQ (50%:50%) 20 nm	---
246	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1: Pt(L204)(CL5) (90%:10%) 40 nm	---	ETM1: LiQ (50%:50%) 20 nm	---
247	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1: Cu(L194)(CL11) (90%:10%) 40 nm	---	ETM1: LiQ (50%:50%) 20 nm	---
248	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1: Pt(L196)(CL11) (90%:10%) 40 nm	---	ETM1: LiQ (50%:50%) 20 nm	---
249	HTM1 20 nm	EBM1 20 m	---	ETM1: Pt(L195)(CL12) (90%:10%) 40 nm	---	ETM1: LiQ (50%:50%) 20 nm	---
250	Ir(L83) <sub>3</sub> 20 nm	M2: Ir(L83) <sub>3</sub> (70%:30%) - 20 nm	---	M2: Ir(L83) <sub>3</sub> (85%:15%) 40 nm	M3 10 nm	Alq <sub>3</sub> 20 nm	LiF
Vgl.	HTM1 20 nm	EBM1 5 m	EBM3 15 nm	M2: Ir(ref) (85%:15%) 40 nm	M3 10 nm	Alq <sub>3</sub> 20 nm	LiF

15

Tabelle 2: Verwendung von erfindungsgemäßen Verbindungen als Matrixmaterialien in phosphoreszenten OLEDs

20

25

30

35

Bsp.	Spannung (V) 1000 cd/m <sup>2</sup>	Effizienz (cd/A) bei 1000 cd/m <sup>2</sup>	CIE x/y bei 1000 cd/m <sup>2</sup>	LD50 (h) bei 1000 cd/m <sup>2</sup>
1	6.1	9.4	0.34/0.52	1300
2	5.2	8.1	0.52/0.47	600
3	14.0	7.5	0.18/0.32	300
4	14.2	7.2	0.18/0.31	400
5	8.1	9.8	0.19/0.35	400
6	6.5	8.2	0.19/0.35	700
7	5.1	8.9	0.34/0.52	1200
8	6.2	15.0	0.29/0.52	---
9	5.0	18.2	0.27/0.48	---
10	6.0	19.3	0.26/0.47	---
11	5.5	15.5	0.29/0.53	---
12	5.8	20.3	0.23/0.45	---
13	5.7	22.5	0.25/0.46	---
14	4.8	19.9	0.27/0.46	---
15	5.3	22.3	0.26/0.47	---
16	5.7	27.6	0.29/0.52	---
17	4.9	29.3	0.28/0.50	---
18	6.1	9.3	0.16/0.24	300
19	5.1	28.6	0.29/0.52	---
20	4.9	11.2	0.19/0.35	---
21	5.0	14.5	0.19/0.35	---
22	4.7	16.7	0.16/0.30	600

	23	4.9	17.3	0.19/0.35	---
	24	5.3	16.9	0.18/0.31	---
	25	5.2	16.7	0.18/0.34	---
	26	5.5	17.3	0.19/0.35	---
	27	5.0	22.7	0.21/0.39	---
	28	5.0	14.9	0.20/0.41	---
5	29	4.9	19.0	0.21/0.38	---
	30	5.2	14.7	0.18/0.32	700
	31	5.5	16.9	0.19/0.34	---
	32	4.6	21.3	0.21/0.38	---
	33	4.8	13.9	0.20/0.36	---
	34	5.3	16.7	0.18/0.32	500
10	35	4.8	18.3	0.18/0.31	---
	36	4.7	16.3	0.17/0.31	300
	37	5.6	22.5	0.21/0.36	---
	38	5.0	25.8	0.21/0.35	800
	39	4.9	15.6	0.17/0.30	---
	40	5.8	12.9	0.20/0.36	---
15	41	5.3	13.9	0.16/0.25	---
	42	4.9	18.6	0.20/0.39	---
	43	5.5	15.5	0.21/0.36	---
	44	5.0	23.2	0.23/0.40	---
	45	4.9	25.6	0.21/0.36	---
	46	5.1	27.1	0.22/0.38	---
20	47	4.7	24.9	0.18/0.31	---
	48	5.3	22.9	0.21/0.38	---
	49	4.9	23.1	0.20/0.37	---
	50	4.8	20.3	0.19/0.34	---
	51	4.8	19.7	0.19/0.33	400
	52	4.9	20.1	0.17/0.26	---
25	53	5.3	21.1	0.17/0.26	---
	54	5.2	23.1	0.20/0.38	---
	55	4.9	19.9	0.19/0.32	---
	56	4.7	22.3	0.18/0.32	---
	57	5.6	16.7	0.20/0.39	---
	58	7.3	24.1	0.20/0.35	---
	59	5.6	22.1	0.21/0.36	---
30	60	4.8	16.7	0.22/0.38	---
	61	5.7	19.3	0.23/0.40	700
	62	5.5	23.5	0.25/0.43	---
	63	4.5	19.5	0.19/0.33	---
	64	4.8	22.6	0.17/0.28	---
	65	5.1	19.7	0.19/0.34	200
35	66	5.5	19.0	0.21/0.38	---
	67	4.9	24.9	0.28/0.52	17000

	68	5.8	19.6	0.26/0.49	22000
	69	5.2	22.7	0.28/0.48	---
	70	5.4	20.6	0.21/0.35	---
	71	4.7	22.4	0.19/0.32	1800
	72	4.9	24.7	0.20/0.35	---
	73	5.2	23.9	0.20/0.34	---
5	74	4.8	19.7	0.18/0.30	---
	75	5.5	18.7	0.21/0.35	---
	76	4.8	22.7	0.20/0.30	2800
	77	6.1	24.6	0.21/0.40	---
	78	5.5	20.7	0.19/0.26	---
	79	5.1	19.6	0.20/0.32	---
10	80	8.5	15.7	0.25/0.43	1500
	81	8.3	16.9	0.19/0.28	---
	82	5.4	24.7	0.33/0.51	12000
	83	6.2	23.0	0.34/0.51	7000
	84	5.7	18.8	0.19/0.45	1200
	85	6.0	14.1	0.20/0.46	700
15	86	7.4	11.3	0.17/0.40	200
	87	4.9	20.7	0.26/0.47	600
	88	8.9	7.3	0.23/0.45	2100
	89	7.4	8.6	0.21/0.44	2600
	90	5.8	37.2	0.25/0.49	100
	91	5.4	22.7	0.26/0.47	---
	92	5.6	36.5	0.23/0.45	---
20	93	5.1	24.9	0.22/0.45	---
	94	4.8	26.7	0.20/0.44	2400
	95	5.6	22.7	0.29/0.45	---
	96	4.9	25.0	0.23/0.39	---
	97	5.8	22.9	0.21/0.37	---
	98	5.2	24.7	0.22/0.43	---
25	99	4.9	22.0	0.25/0.49	---
	100	5.5	21.9	0.25/0.43	---
	101	5.3	19.7	0.23/0.39	---
	102	5.9	30.9	0.29/0.52	---
	103	4.7	26.9	0.20/0.43	---
	104	6.7	33.5	0.23/0.39	---
30	105	5.8	23.8	0.21/0.32	---
	106	5.3	18.9	0.22/0.32	---
	107	4.7	25.7	0.23/0.42	---
	108	4.5	25.6	0.19/0.43	2800
	109	5.5	28.8	0.21/0.32	---
	110	5.3	32.6	0.21/0.32	---
35	111	4.9	26.9	0.30/0.46	---
	112	6.7	29.0	0.29/0.43	---

	113	5.2	26.4	0.26/0.43	---
	114	6.3	23.9	0.23/0.43	---
	115	5.0	22.7	0.19/0.36	---
	116	4.8	19.8	0.21/0.32	---
	117	5.7	31.0	0.29/0.52	---
	118	5.2	29.8	0.30/0.55	25000
5	119	5.4	29.6	0.21/0.35	---
	120	5.6	26.8	0.30/0.49	---
	121	4.7	33.8	0.21/0.34	---
	122	4.9	30.2	0.22/0.38	---
	123	5.1	24.8	0.20/0.37	---
	124	4.6	29.8	0.19/0.34	---
10	125	5.8	32.2	0.28/0.55	23000
	126	4.4	29.8	0.26/0.42	---
	127	5.3	30.7	0.23/0.38	---
	128	6.0	23.8	0.22/0.36	---
	129	5.8	26.8	0.21/0.30	---
	130	5.0	26.5	0.19/0.34	1700
15	131	4.8	25.6	0.20/0.38	---
	132	4.2	36.6	0.26/0.38	---
	133	4.6	33.3	0.23/0.38	---
	134	5.2	30.5	0.26/0.47	---
	135	5.3	34.8	0.23/0.37	---
	136	4.3	35.7	0.19/0.32	---
20	137	4.7	34.5	0.25/40	---
	138	5.5	23.4	0.26/0.47	---
	139	5.2	39.1	0.32/0.50	29000
	140	4.6	40.3	0.35/0.59	---
	141	4.3	32.0	0.30/0.50	---
	142	4.8	29.9	0.29/0.59	---
	143	5.3	33.5	0.28/0.50	---
25	144	5.1	29.8	0.27/0.45	---
	145	4.9	38.9	0.30/0.55	---
	146	4.7	37.6	0.26/0.46	---
	147	5.0	38.6	0.33/0.60	---
	148	4.7	35.6	0.30/0.55	---
	149	5.5	27.3	0.26/0.49	23000
30	150	5.3	29.3	0.26/0.45	---
	151	5.1	30.5	0.25/0.50	---
	152	4.9	34.0	0.23/0.37	---
	153	4.9	33.4	0.26/0.49	---
	154	4.2	39.8	0.23/0.26	---
	155	4.8	26.8	0.20/0.28	---
35	156	5.0	28.1	0.19/0.25	3100
	157	6.0	22.0	0.26/0.47	---

- 173 -

	158	4.9	25.6	0.23/0.35	---
	159	5.1	26.4	0.23/0.39	---
	160	5.5	20.2	0.19/0.26	---
	161	5.1	30.6	0.27/0.50	12000
	162	4.6	36.5	0.23/0.35	---
	163	4.5	32.7	0.24/0.37	---
5	164	4.9	29.6	0.22/0.40	---
	165	4.8	32.3	0.24/0.42	---
	166	5.3	22.7	0.19/0.29	1600
	167	5.3	26.4	0.26/0.49	4500
	168	5.0	25.3	0.21/0.38	---
	169	4.8	22.0	0.19/0.28	---
10	170	5.2	30.5	0.28/0.51	---
	171	5.6	33.5	0.29/0.52	---
	172	4.8	32.3	0.27/0.52	15000
	173	5.4	26.7	0.22/0.42	---
	174	6.2	28.4	0.29/0.52	800
	175	5.3	33.7	0.28/0.51	---
15	176	4.4	36.1	0.27/0.51	---
	177	5.7	30.6	0.24/0.48	300
	178	5.9	38.9	0.23/0.38	---
	179	6.2	35.7	0.24/0.40	---
	180	5.8	33.6	0.29/0.58	---
	181	4.6	28.3	0.23/0.42	400
20	182	4.3	26.8	0.21/0.35	---
	183	5.7	37.2	0.19/0.26	500
	184	5.3	8.1	0.64/0.36	---
	185	4.5	16.6	0.62/0.38	19000
	186	4.8	7.9	0.68/0.32	---
	187	5.5	10.5	0.67/0.33	32000
	188	4.3	19.7	0.20/0.28	---
25	189	4.1	18.0	0.18/0.24	---
	190	4.5	16.7	0.19/0.27	---
	191	5.1	17.2	0.61/0.39	16700
	192	4.7	16.5	0.63/0.37	22000
	193	5.7	23.6	0.26/0.45	---
	194	5.2	25.1	0.24/0.38	900
30	195	5.9	22.0	0.37/0.61	10000
	196	5.2	23.1	0.22/0.28	---
	197	4.2	19.6	0.61/0.39	22000
	198	4.9	16.4	0.23/0.38	---
	199	5.3	14.2	0.21/0.29	---
	200	5.2	18.9	0.19/0.35	3200
35	201	4.6	19.0	0.18/0.32	---
	202	6.2	26.8	0.23/0.45	---

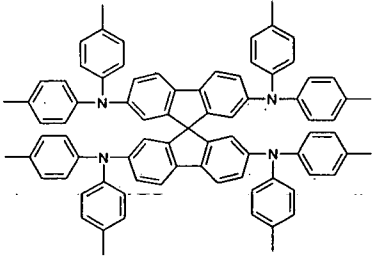
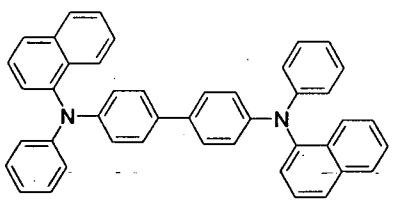
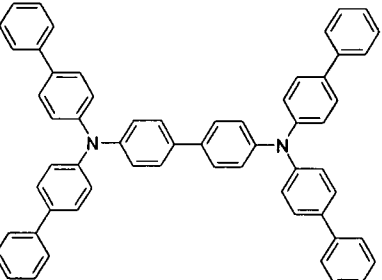
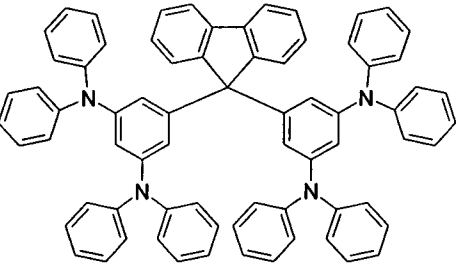
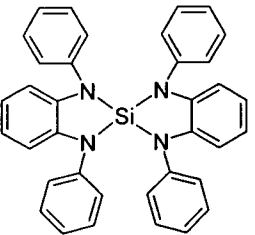
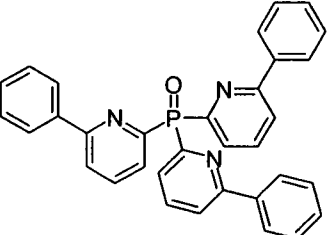
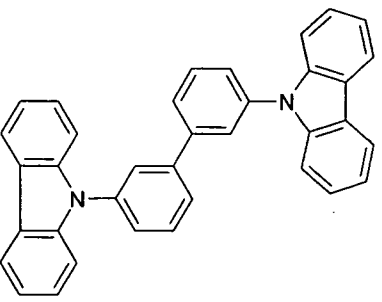
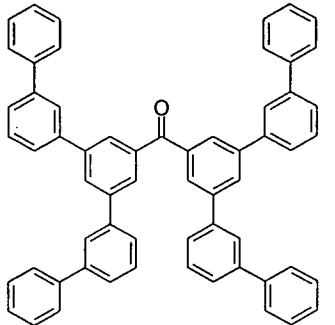
	203	5.1	29.0	0.29/0.42	---
	204	6.2	25.4	0.28/0.51	---
	205	5.6	35.7	0.33/0.58	21000
	206	5.7	19.7	0.21/0.32	---
	207	4.9	29.4	0.25/0.50	---
	208	4.7	24.1	0.24/0.35	---
5	209	5.5	10.9	0.55/0.43	26000
	210	4.2	30.5	0.28/0.55	---
	211	4.7	16.0	0.21/0.28	---
	212	5.3	12.1	0.19/0.23	---
	213	4.9	17.3	0.20/0.25	---
	214	5.7	19.5	0.23/0.40	---
10	215	4.8	45.8	0.30/0.60	---
	216	4.9	13.2	0.26/0.49	---
	217	5.0	30.1	0.29/0.51	---
	218	5.2	32.2	0.30/0.59	---
	219	4.7	12.8	0.67/0.33	35000
	220	4.3	14.7	0.66/0.34	---
15	221	5.1	39.0	0.35/0.62	---
	222	5.8	15.6	0.17/0.26	600
	223	5.8	20.4	0.20/0.29	---
	224	4.7	13.9	0.18/0.24	---
	225	4.8	14.0	0.19/0.25	---
	226	5.2	16.5	0.17/0.22	---
20	227	4.6	31.2	0.29/0.56	---
	228	4.3	38.4	0.30/0.59	---
	229	4.4	36.7	0.32/0.57	29000
	230	5.6	19.1	0.25/0.47	600
	231	5.2	17.4	0.23/0.35	---
	232	6.7	13.1	0.19/0.28	1200
25	233	5.8	17.9	0.22/0.42	---
	234	6.4	18.6	0.23/0.39	---
	235	5.1	16.5	0.19/0.24	1100
	236	8.0	8.9	0.25/0.45	600
	237	5.2	14.0	0.22/0.28	---
	238	4.9	11.2	0.23/0.32	---
30	239	5.5	16.4	0.25/0.35	5000
	240	5.1	12.1	0.23/0.33	---
	241	4.9	13.1	0.35/0.58	---
	242	4.2	13.1	0.65/0.35	23000
	243	5.9	11.1	0.66/0.33	---
	244	6.3	20.5	0.62/0.38	1500
35	245	5.9	19.7	0.63/0.37	2500
	246	5.3	14.3	0.59/0.37	---
	247	4.8	17.3	0.58/0.36	---

248	5.2	14.2	0.63/0.37	---
249	4.7	8.6	0.64/0.36	---
250	6.2	21.4	0.34/0.51	500
Vgl.	6.7	9.6	0.18/0.30	300

5

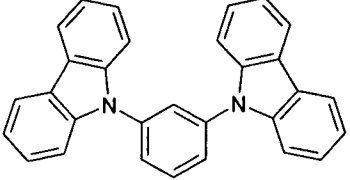
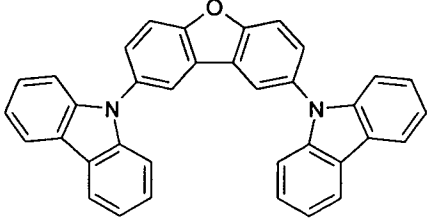
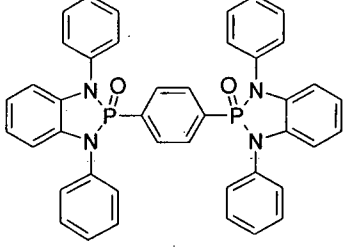
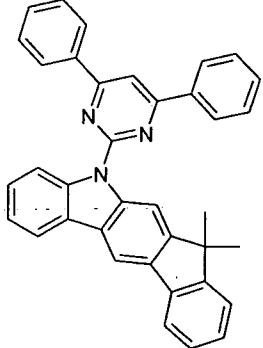
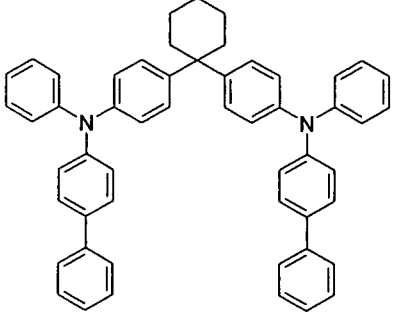
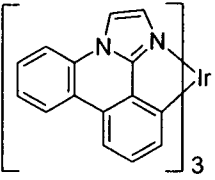
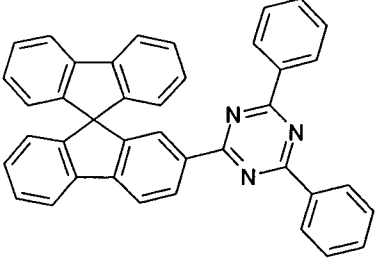
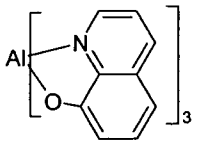
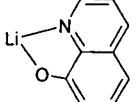
Tabelle 3: Strukturformeln der verwendeten Materialien

10

	
HTM1	NPB
	
EBM1	EBM2
	
EBM3	M1
	
M2	M3

35



		
5	M4	M5
		
10	M6	M7
		
15	M8	Ir(ref)
		
25	ETM1	Alq <sub>3</sub>
		
30	LiQ	
35		

Erfindungsgemäße Materialien können auch aus Lösung verwendet werden und führen dort zu wesentlich einfacheren OLEDs gegenüber vakuumprozessierten OLEDs mit dennoch guten Eigenschaften.

Die Herstellung solcher Bauteile lehnt sich an die Herstellung polymerer Leuchtdioden (PLEDs) an, die in der Literatur bereits vielfach beschrieben ist (z. B. in der WO 2004/037887 A2). Der Aufbau setzt sich aus Substrat / ITO / PEDOT (80 nm) / Interlayer / Emissionsschicht (80 nm) / Kathode zusammen. Die verwendete Interlayer dient der Lochinjektion; in diesem Fall wird HIL-012 von Merck verwendet. Im vorliegenden Fall werden die erfindungsgemäßen Emitter für die Emissionsschicht neben der Matrices in Toluol gelöst. Der typische Feststoffgehalt solcher Lösungen liegt zwischen 16 und 25 g/L, wenn, wie hier, die für eine Device typische Schichtdicke von 80 nm mittels Spincoating erzielt werden soll. Die Emissionsschicht wird in einer Inertgasatmosphäre, im vorliegenden Fall Argon, aufgeschleudert und 10 min bei 120 °C ausgeheizt. Zuletzt wird eine Kathode aus Barium und Aluminium im Vakuum aufgedampft. Zwischen EML und Kathode können auch die in den vorgenannten Beispielen verwendeten Schichten HBL und ETL per Bedampfung aufgebracht werden, auch kann die Interlayer durch eine oder mehrere Schichten ersetzt werden, die lediglich die Bedingung erfüllen müssen, durch den nachgelagerten Prozessierungsschritt der EML-Abscheidung aus Lösung nicht wieder abgelöst zu werden.

Auch die lösungsprozessierten Devices werden standardmäßig in den Matrices PS (Polystyrol):M8:M1: Ir(LX)<sub>3</sub> (26%:14%:42%:20%) charakterisiert, die genannten OLED-Beispiele sind noch nicht optimiert. Tabelle 4 fasst die erhaltenen Daten zusammen. Bei den prozessierten OLEDs zeigt sich hier, dass die erfindungsgemäßen Materialien zu effizienten blau bis grün emittierenden OLEDs führen.

30

35

- 178 -

Tabelle 4: Ergebnisse mit aus Lösung prozessierten Materialien

Bsp.	EML mit Emmitter 80 nm	Spannung [V] bei 100 cd/m <sup>2</sup>	Max. Eff. [cd/A]	CIE (x, y)
251	Ir(L67) <sub>3</sub>	8.3	12.6	0.21/0.38
252	Ir(L68) <sub>3</sub>	8.6	10.6	0.22/0.41
253	Ir(L108) <sub>3</sub>	7.9	13.4	0.23/0.39
254	Ir(L109) <sub>3</sub>	7.7	11.3	0.24/0.45
255	Ir(L110) <sub>3</sub>	8.6	9.1	0.25/0.49
256	Ir(L111) <sub>3</sub>	7.6	14.7	0.24/0.43
257	Ir(L116) <sub>3</sub>	6.9	16.4	0.28/0.52
258	Ir(L117) <sub>3</sub>	7.1	14.8	0.27/0.50
259	Ir(L121) <sub>3</sub>	8.6	19.1	0.30/0.50
260	Ir(L123) <sub>3</sub>	9.5	20.6	0.32/0.59
261	Ir(L124) <sub>3</sub>	8.1	17.6	0.31/0.54
262	Ir(L136) <sub>3</sub>	7.2	19.4	0.28/0.50
263	Ir(L137) <sub>3</sub>	8.6	23.4	0.33/0.62
264	Ir(L143) <sub>3</sub>	7.7	22.8	0.36/0.60
265	Ir(L166) <sub>3</sub>	8.3	18.6	0.35/0.60
266	Ir(L167) <sub>3</sub>	7.9	19.5	0.36/0.59
267	Ir(L168) <sub>3</sub>	8.4	16.4	0.33/0.62
268	Ir(L196) <sub>3</sub>	8.8	12.7	0.63/0.37
269	Ir(L197) <sub>3</sub>	8.7	19.8	0.58/0.38
270	Ir(L198) <sub>3</sub>	7.9	8.4	0.66/0.34
271	Ir(L199) <sub>3</sub>	8.3	7.2	0.67/0.33

Patentansprüche

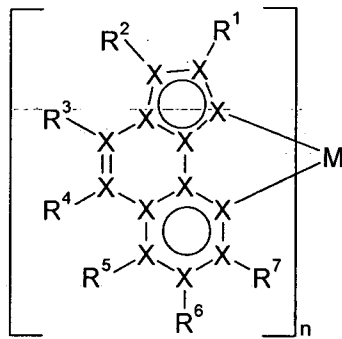
1. Verbindung gemäß Formel (1),



5

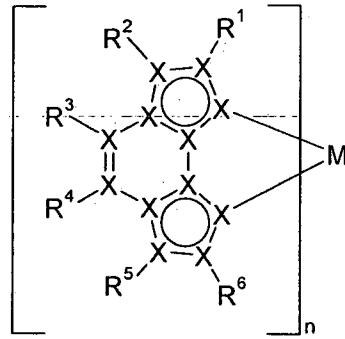
enthaltend eine Teilstruktur  $M(L)_n$  der Formel (2) oder Formel (3):

10



15

Formel (2)



Formel (3)

wobei für die verwendeten Symbole und Indizes gilt:

20

M ist ein Metall;

X ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus der Gruppe bestehend aus C, N und B; und alle X gemeinsam stellen ein 14  $\pi$ -Elektronensystem dar;

25

$R^1$  bis  $R^7$  ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, D, F, Cl, Br, I,  $N(R^8)_2$ ,  $CN$ ,  $NO_2$ ,  $Si(R^8)_3$ ,  $B(OR^8)_2$ ,  $C(=O)R^8$ ,  $P(=O)(R^8)_2$ ,  $S(=O)R^8$ ,  $S(=O)_2R^8$ ,  $OSO_2R^8$ , eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 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  $R^8$  substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $CH_2$ -Gruppen durch  $R^8C=CR^8$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^8)_2$ ,  $Ge(R^8)_2$ ,  $Sn(R^8)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^8$ ,  $P(=O)(R^8)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^8$ , O, S oder  $CONR^8$

35

ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch D, F, Cl, Br, I, CN 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>8</sup> substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R<sup>8</sup> substituiert sein kann, oder eine Aralkyl- oder Heteroaralkylgruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R<sup>8</sup> substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R<sup>8</sup> substituiert sein kann; dabei können R<sup>1</sup> und R<sup>2</sup> und/oder R<sup>2</sup> und R<sup>3</sup> und/oder R<sup>4</sup> und R<sup>5</sup> und/oder R<sup>5</sup> und R<sup>6</sup> und/oder R<sup>6</sup> und R<sup>7</sup> auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden; weiterhin können R<sup>3</sup> und R<sup>4</sup> miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden;

mit der Maßgabe, dass R<sup>1</sup> bis R<sup>7</sup> ein freies Elektronenpaar darstellt, wenn die Gruppe X, an welche dieser Rest R<sup>1</sup> bis R<sup>7</sup> gebunden ist, ein Stickstoffatom mit abgesättigter Valenz ist;

R<sup>8</sup> ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, D, F, Cl, Br, I, N(R<sup>9</sup>)<sub>2</sub>, CN, NO<sub>2</sub>, Si(R<sup>9</sup>)<sub>3</sub>, B(OR<sup>9</sup>)<sub>2</sub>, C(=O)R<sup>9</sup>, P(=O)(R<sup>9</sup>)<sub>2</sub>, S(=O)R<sup>9</sup>, S(=O)<sub>2</sub>R<sup>9</sup>, OSO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>, eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 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<sup>9</sup> substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen durch R<sup>9</sup>C=CR<sup>9</sup>, C≡C, Si(R<sup>9</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>9</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>9</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>9</sup>, P(=O)(R<sup>9</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>9</sup>, O, S oder CONR<sup>9</sup> ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch D, F, Cl, Br, I, CN oder NO<sub>2</sub> ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aroma-

5 tischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^9$  substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste  $R^9$  substituiert sein kann, oder eine Aralkyl- oder Heteroaralkylgruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste  $R^9$  substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Aryl- heteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste  $R^9$  substituiert sein kann; dabei können zwei oder mehrere benachbarte Reste  $R^8$  miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden;

15  $R^9$  ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, D, F oder ein aliphatischer, aromatischer und/oder heteroaromatischer Kohlenwasserstoffrest mit 1 bis 20 C-Atomen, in dem auch ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können; dabei können zwei oder mehrere Substituenten  $R^9$  auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden;

20  $L'$  ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten ein beliebiger Coligand;

25  $n$  ist 1, 2, 3 oder 4;

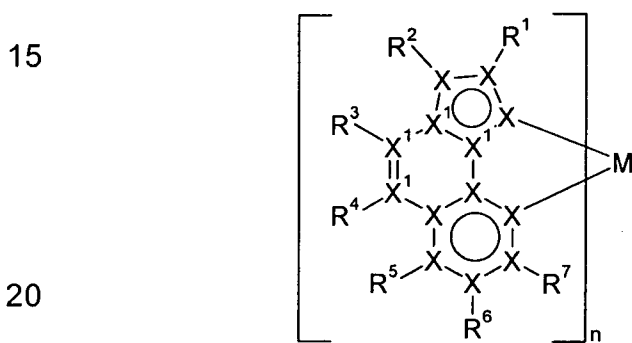
$m$  ist 0, 1, 2, 3, 4, 5 oder 6;

30 dabei können auch mehrere Liganden  $L$  miteinander oder  $L$  mit  $L'$  über eine beliebige Brücke  $V$  verknüpft sein und so ein tridentates, tetradentates, pentadentates oder hexadentates Ligandensystem aufspannen.

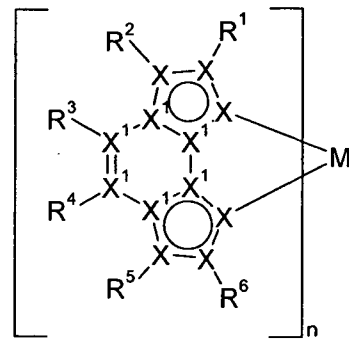
35 2. Verbindung nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass die Liganden  $L$  über ein Kohlenstoffatom und ein Stickstoffatom oder über

zwei Kohlenstoffatome oder über zwei Stickstoffatome an das Metall M binden, bevorzugt über ein Kohlenstoffatom und ein Stickstoffatom.

3. Verbindungen nach Anspruch 1 oder 2 dadurch gekennzeichnet, dass M für ein Übergangsmetall, bevorzugt ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Chrom, Molybdän, Wolfram, Rhenium, Ruthenium, Osmium, Rhodium, Iridium, Nickel, Palladium, Platin, Kupfer, Silber und Gold, oder für ein Hauptgruppenelement aus der dritten, der vierten oder der fünften Hauptgruppe steht.
4. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, dass die Teilstruktur gemäß Formel (2) und Formel (3) ausgewählt ist aus den Formeln (2a) und (3a),

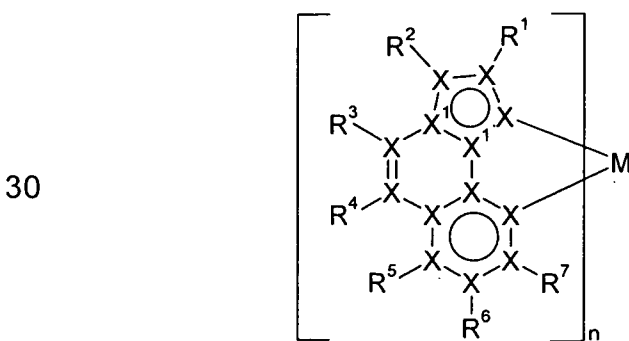


Formel (2a)

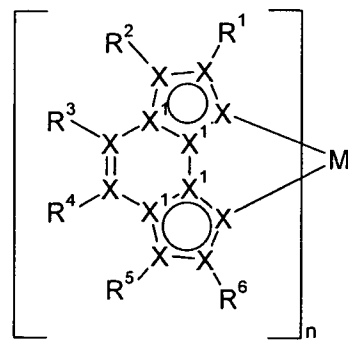


Formel (3a)

und bevorzugt ausgewählt ist aus den Formeln (2b) und (3b),



Formel (2b)



Formel (3b)

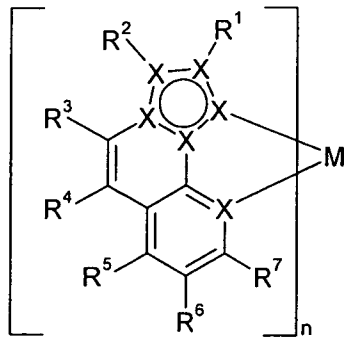
wobei die verwendeten Symbole und Indizes die in Anspruch 1 genannten Bedeutungen aufweisen und weiterhin gilt:

$X^1$  ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten C oder N, mit der Maßgabe, dass mindestens eine Gruppe  $X^1$  für N steht.

5

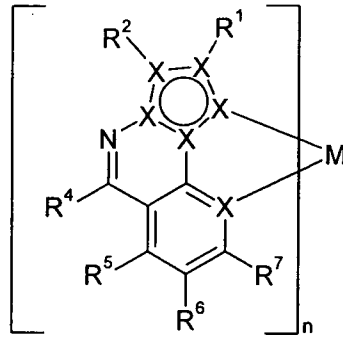
5. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 4, dadurch gekennzeichnet, dass die Teilstrukturen der Formel (2) ausgewählt sind aus den Strukturen der Formeln (4), (5) und (6) und die Teilstrukturen der Formel (3) ausgewählt sind aus den Strukturen der Formeln (7) und (8);

10

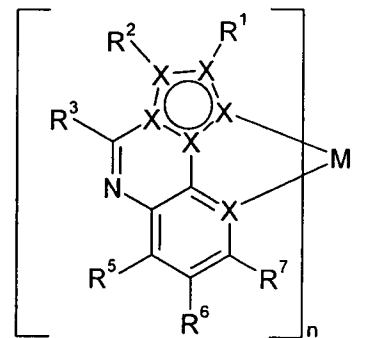


15

Formel (4)

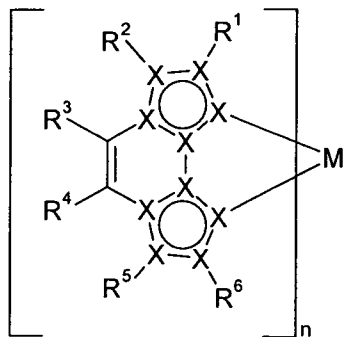


Formel (5)



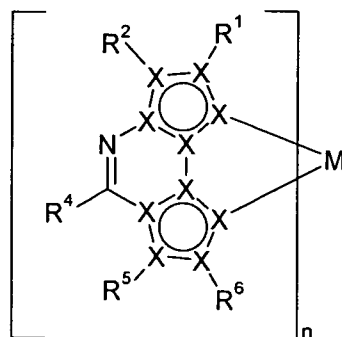
Formel (6)

20



25

Formel (7)



Formel (8)

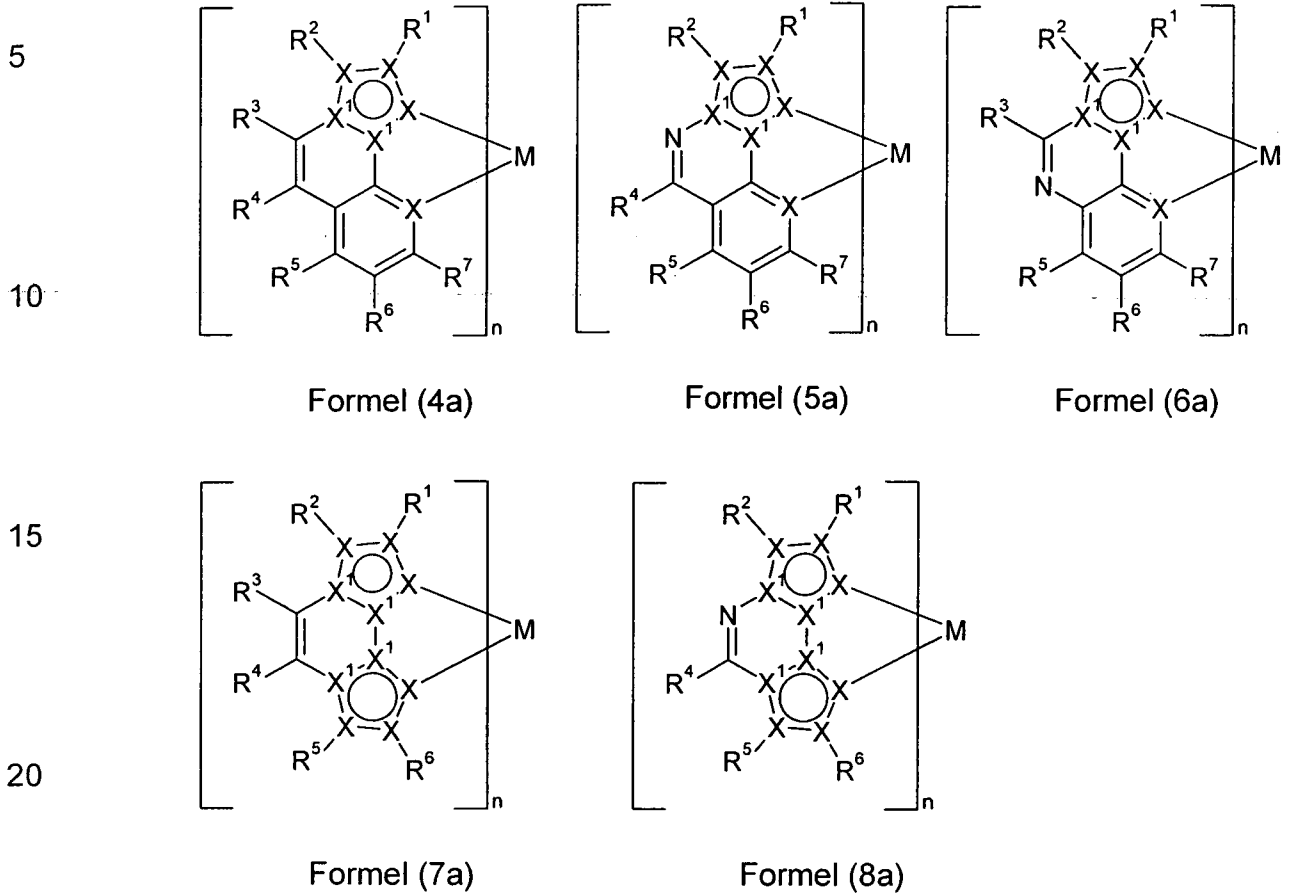
30

wobei die Symbole und Indizes die in Anspruch 1 angegebenen Bedeutungen haben.

35



6. Verbindung nach Anspruch 5, dadurch gekennzeichnet, dass die Teilstrukturen der Formeln (4) bis (8) ausgewählt sind aus den Strukturen der folgenden Formeln (4a) bis (8a),

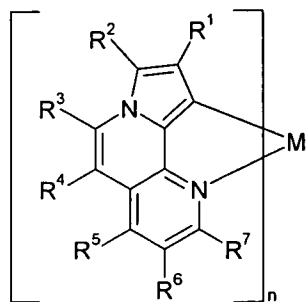


wobei die Symbole und Indizes die in Anspruch 1 und Anspruch 4  
 25 angegebenen Bedeutungen haben.

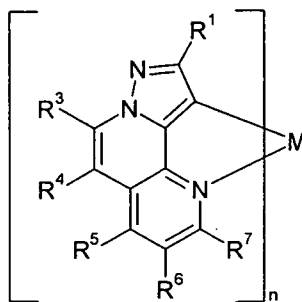
7. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 6,  
 dadurch gekennzeichnet, dass die Teilstrukturen gemäß den Formeln  
 (2) und (3) ausgewählt sind aus Strukturen gemäß den Formeln (9) bis  
 30 (77),

35

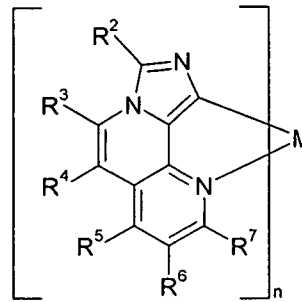
5



Formel (9)

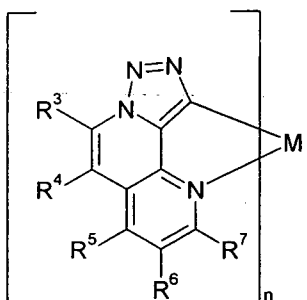


Formel (10)

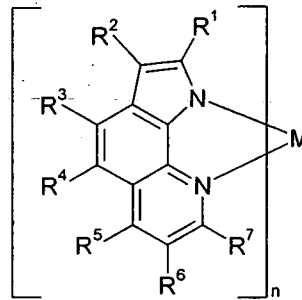


Formel (11)

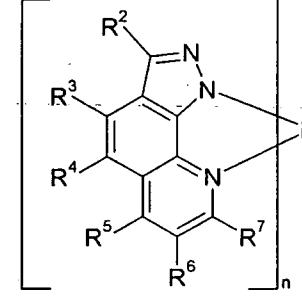
10



Formel (12)

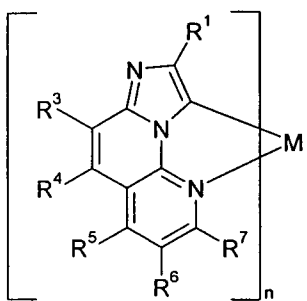


Formel (13)

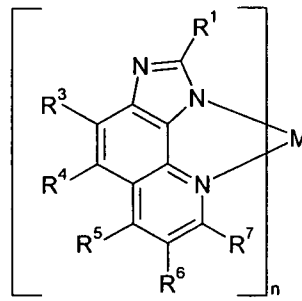


Formel (14)

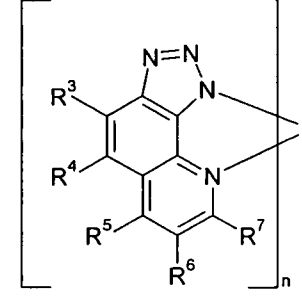
15



Formel (15)

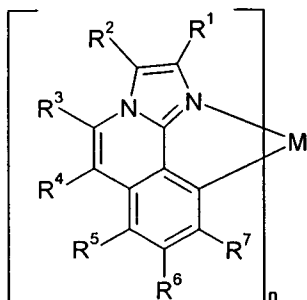


Formel (16)

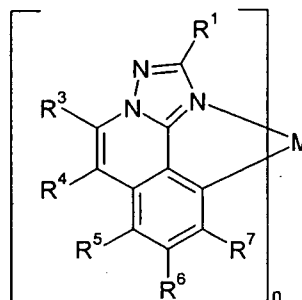


Formel (17)

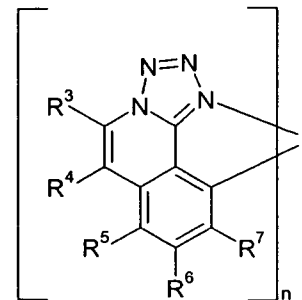
25



Formel (18)



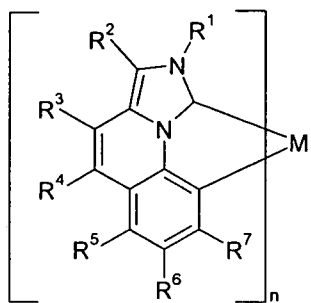
Formel (19)



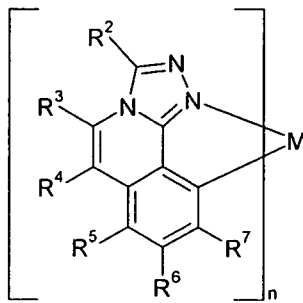
Formel (20)

35

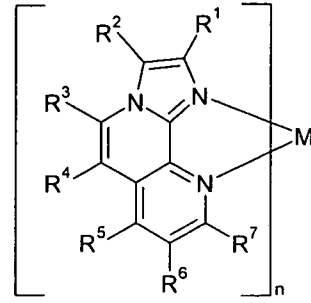
5



Formel (21)

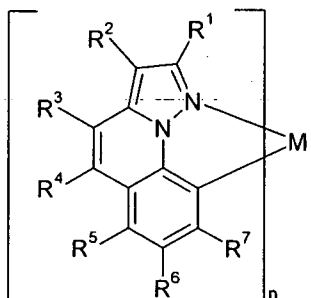


Formel (22)

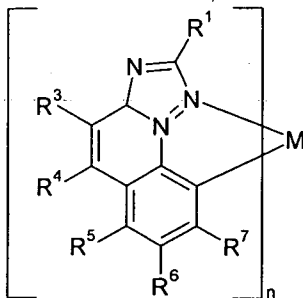


Formel (23)

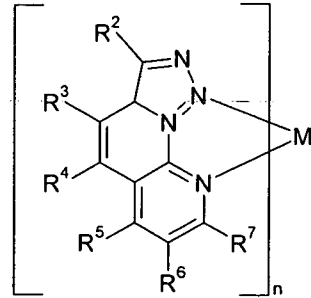
10



Formel (24)

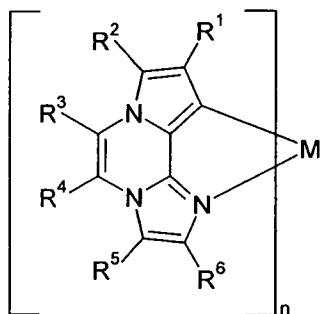


Formel (25)

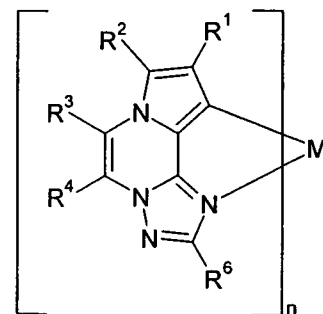


Formel (26)

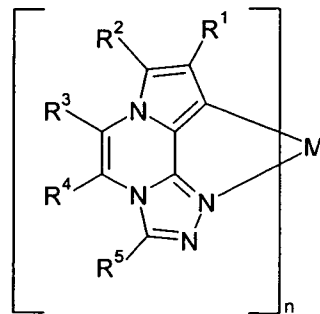
15



Formel (27)

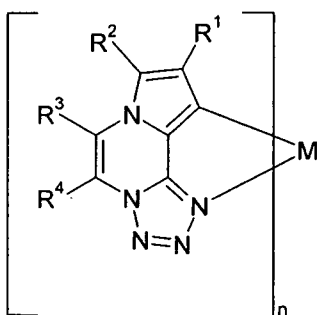


Formel (28)

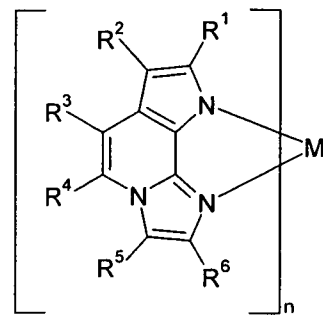


Formel (29)

25



Formel (30)

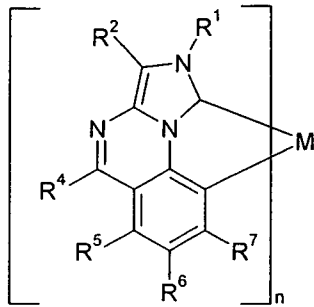


Formel (31)

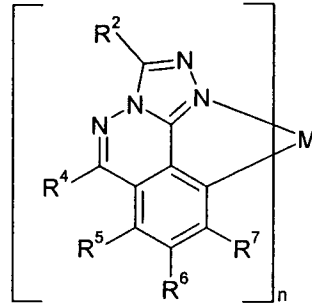
35



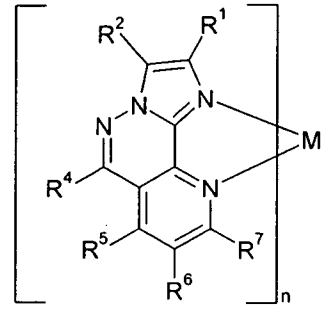
5



Formel (44)

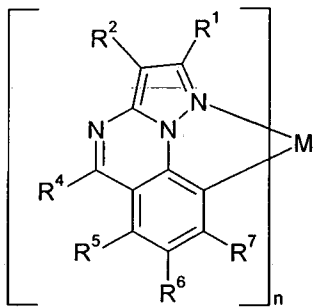


Formel (45)

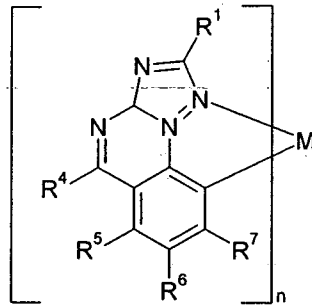


Formel (46)

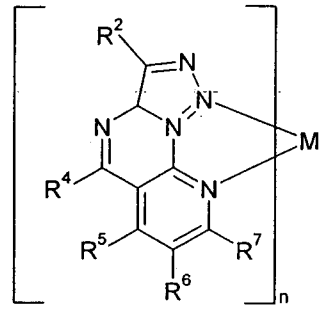
10



Formel (47)



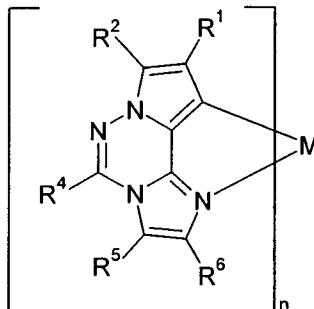
Formel (48)



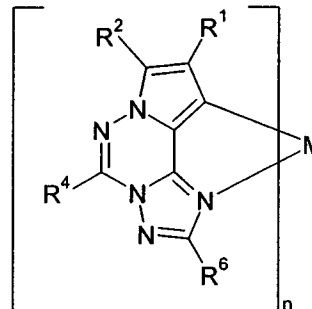
Formel (49)

15

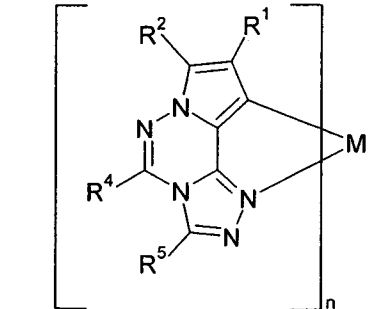
20



Formel (50)



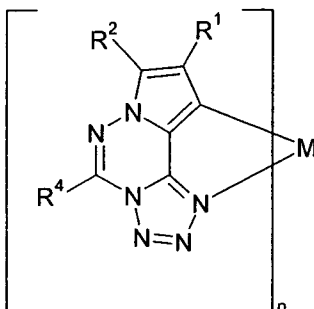
Formel (51)



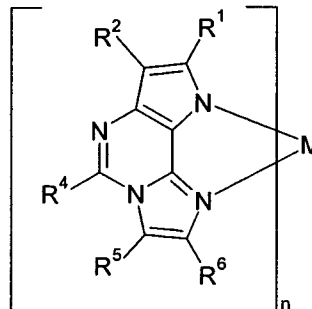
Formel (52)

25

30



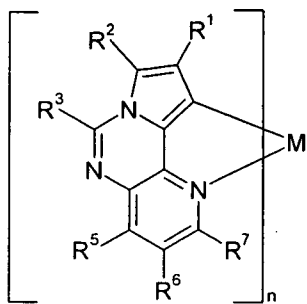
Formel (53)



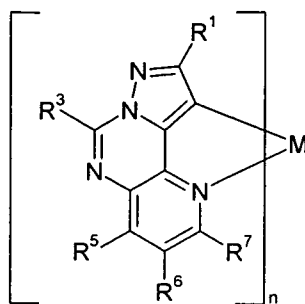
Formel (54)

35

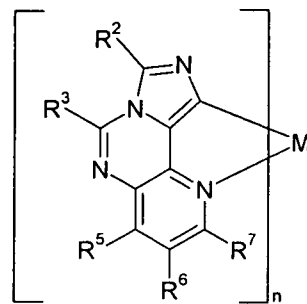
5



Formel (55)

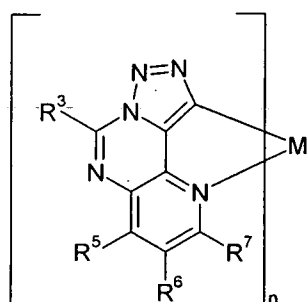


Formel (56)

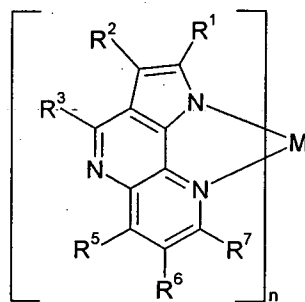


Formel (57)

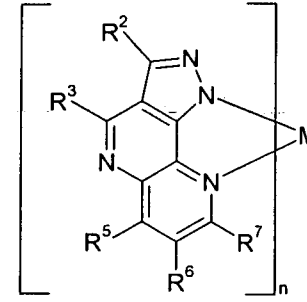
10



Formel (58)

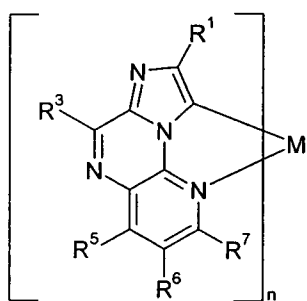


Formel (59)

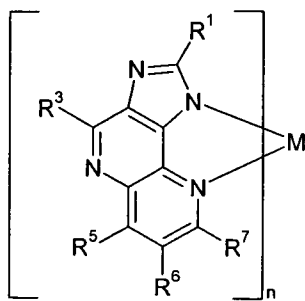


Formel (60)

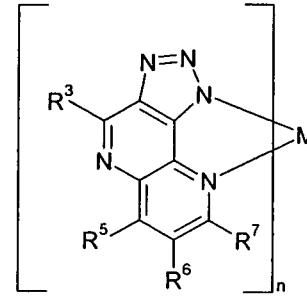
15



Formel (61)

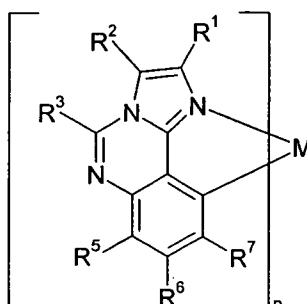


Formel (62)

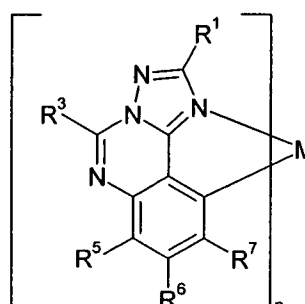


Formel (63)

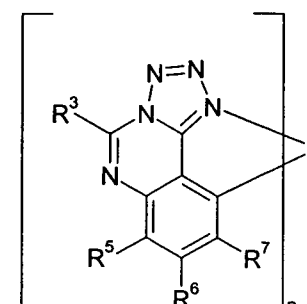
25



Formel (64)



Formel (65)



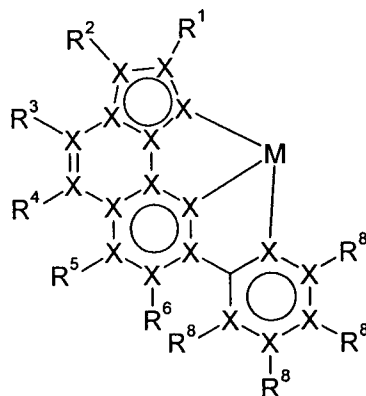
Formel (66)

35

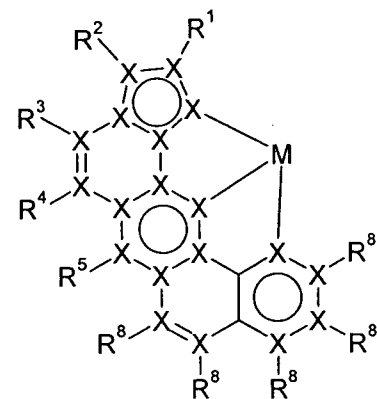


wobei die verwendeten Symbole und Indizes die in Anspruch 1 angegebenen Bedeutungen haben.

8. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 7, dadurch gekennzeichnet, dass mindestens einer der Substituenten  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  und/oder  $R^4$ , bevorzugt  $R^2$ ,  $R^3$  und/oder  $R^4$ , ein Substituent ungleich Wasserstoff oder Deuterium ist.
9. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 8, dadurch gekennzeichnet, dass der Substituent  $R^6$  bzw.  $R^7$ , der in ortho-Position zur Metallkoordination steht, eine koordinierende Gruppe darstellt, die an das Metall M koordiniert, bevorzugt ausgewählt aus Aryl- bzw. Heteroarylgruppen, Aryl- oder Alkylcyaniden, Aryl- oder Alkylisocyaniden, Aminen oder Amidinen, Alkoholen oder Alkoholaten, Thioalkoholen oder Thioalkoholaten, Phosphinen, Phosphiten, Carbonylfunktionen, Carboxylaten, Carbamiden oder Aryl- oder Alkylacetyliden.
10. Verbindung nach Anspruch 9, dadurch gekennzeichnet, dass die Teilstruktur gemäß Formel (2) bzw. Formel (3) ausgewählt ist aus den Strukturen der Formeln (90) bis (97),



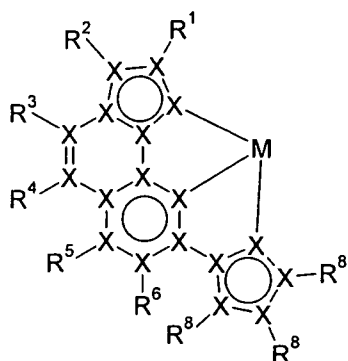
Formel (90)



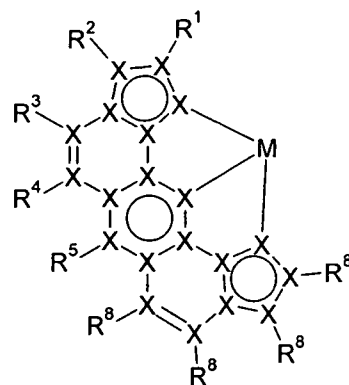
Formel (91)



5

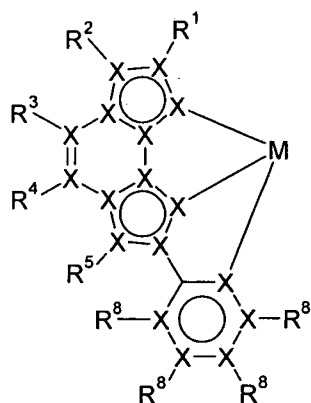


Formel (92)

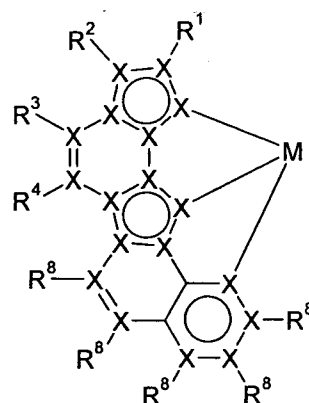


Formel (93)

10



Formel (94)



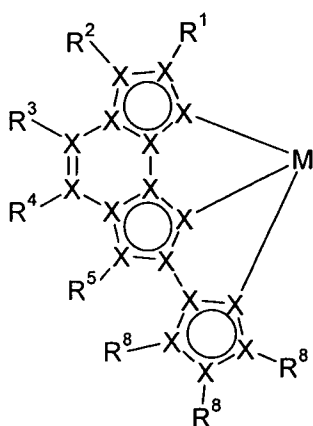
Formel (95)

15

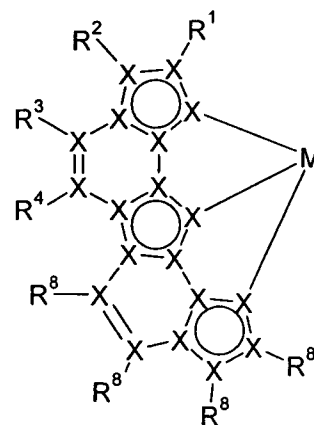
20

25

30



Formel (96)



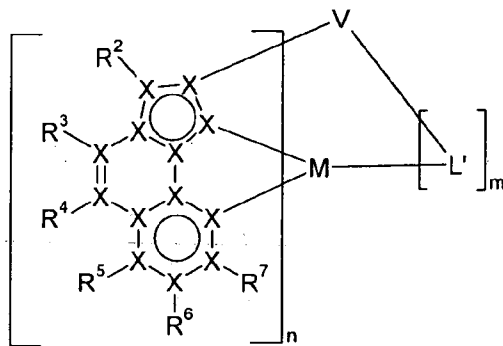
Formel (97)

wobei die verwendeten Symbole die in Anspruch 1 genannten Bedeutungen haben.

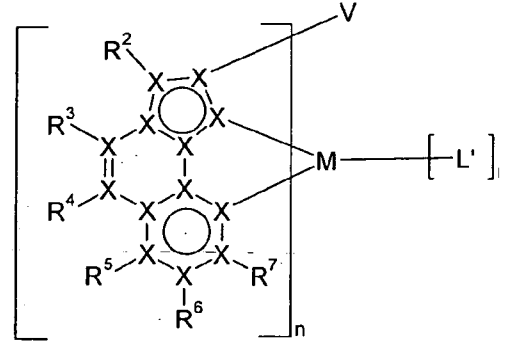
35

11. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 10, dadurch gekennzeichnet, dass die Komplexe einen mehrzähligen Liganden bzw. polydentaten Liganden enthalten, wobei die Metallkomplexe ausgewählt sind aus den Formeln (98) bis (105),

5

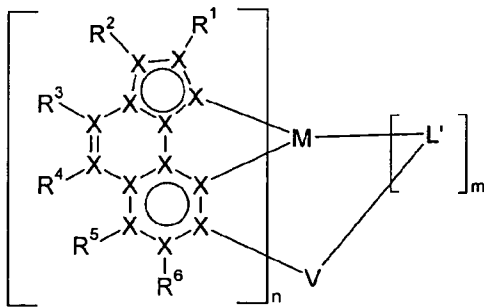


Formel (98)

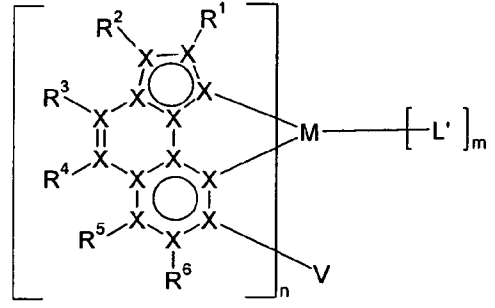


Formel (99)

15



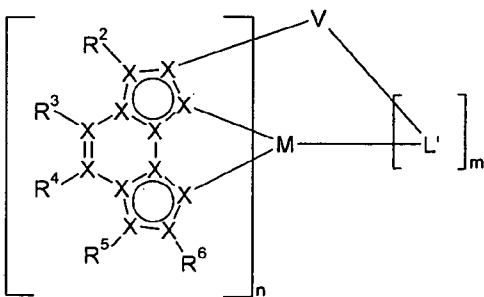
Formel (100)



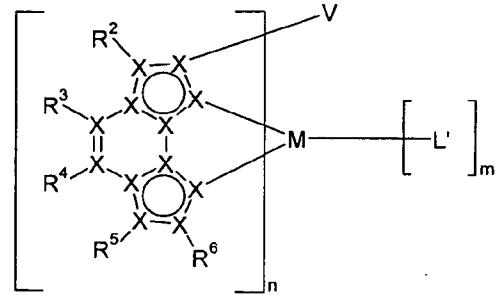
Formel (101)

20

25

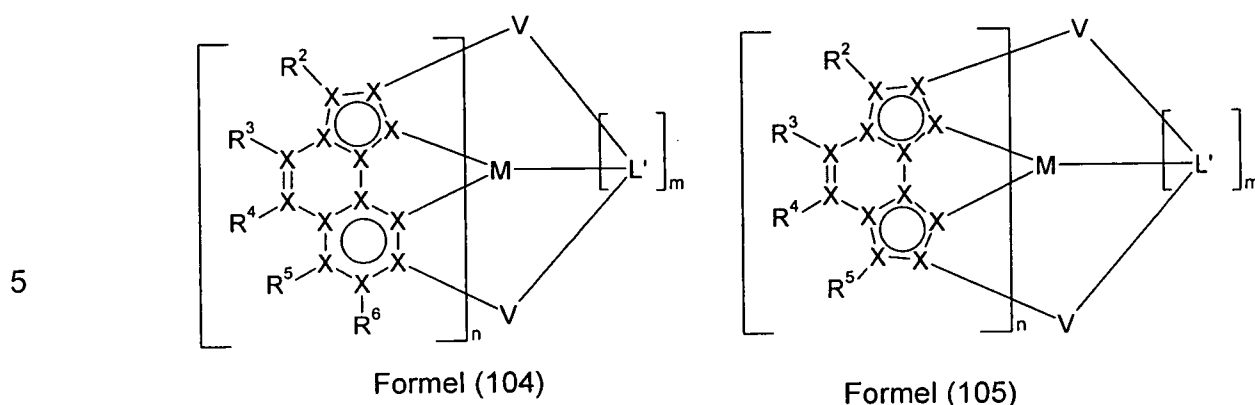


Formel (102)



Formel (103)

35



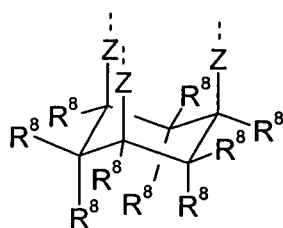
10 wobei die verwendeten Symbole die oben genannten Bedeutungen aufweisen und V bevorzugt eine verbrückende Einheit darstellt, enthaltend 1 bis 80 Atome aus der dritten, vierten, fünften und/oder sechsten Hauptgruppe (Gruppe 13, 14, 15 oder 16 gemäß IUPAC) oder einen 3- bis 6-gliedrigen Homo- oder Heterocyclus, die die

15 Teilliganden L miteinander oder L mit L' miteinander kovalent verbindet.

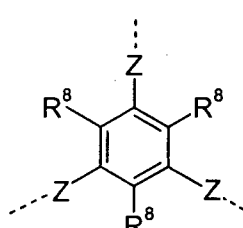
12. Verbindung nach Anspruch 11, dadurch gekennzeichnet, dass V, wenn es eine trivalente Gruppe ist, also drei Liganden L miteinander bzw. zwei Liganden L mit L' oder einen Liganden L mit zwei Liganden L' verbrückt, gleich oder verschieden bei jedem Auftreten ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus B,  $B(R^8)^-$ ,  $B(C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)B(C(R^8)_2)_3^-$ ,  $B(O)_3$ ,  $(R^8)B(O)_3^-$ ,  $B(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)B(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^-$ ,  $B(C(R^8)_2O)_3$ ,  $(R^8)B(C(R^8)_2O)_3^-$ ,  $B(OC(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)B(OC(R^8)_2)_3^-$ ,  $C(R^8)$ ,  $CO^-$ ,  $CN(R^8)_2$ ,  $(R^8)C(C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(O)_3$ ,  $(R^8)C(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(C(R^8)_2O)_3$ ,  $(R^8)C(OC(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(Si(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(Si(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(C(R^8)_2Si(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(Si(R^8)_2Si(R^8)_2)_3$ ,  $Si(R^8)$ ,  $(R^8)Si(C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(O)_3$ ,  $(R^8)Si(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(OC(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(C(R^8)_2O)_3$ ,  $(R^8)Si(Si(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(Si(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(C(R^8)_2Si(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(Si(R^8)_2Si(R^8)_2)_3$ , N, NO,  $N(R^8)^+$ ,  $N(C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)N(C(R^8)_2)_3^+$ ,  $N(C=O)_3$ ,  $N(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)N(C(R^8)_2C(R^8)_2)^+$ , P,  $P(R^8)^+$ , PO, PS, PSe, PTe,  $P(O)_3$ ,  $PO(O)_3$ ,  $P(OC(R^8)_2)_3$ ,  $PO(OC(R^8)_2)_3$ ,  $P(C(R^8)_2)_3$ ,  $P(R^8)(C(R^8)_2)_3^+$ ,  $PO(C(R^8)_2)_3$ ,  $P(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $P(R^8)(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^+$ ,  $PO(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ , As,  $As(R^8)^+$ , AsO, AsS, AsSe, AsTe,  $As(O)_3$ ,  $AsO(O)_3$ ,  $As(OC(R^8)_2)_3$ ,  $AsO(OC(R^8)_2)_3$ ,  $As(C(R^8)_2)_3$ ,  $As(R^8)(C(R^8)_2)_3^+$ ,
- 20
- 25
- 30
- 35

- 195 -

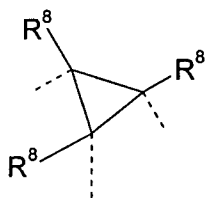
$\text{AsO}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{As}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{As}(\text{R}^8)(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  
 $\text{AsO}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Sb}$ ,  $\text{Sb}(\text{R}^8)^+$ ,  $\text{SbO}$ ,  $\text{SbS}$ ,  $\text{SbSe}$ ,  $\text{SbTe}$ ,  $\text{Sb}(\text{O})_3$ ,  
 $\text{SbO}(\text{O})_3$ ,  $\text{Sb}(\text{OC}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{SbO}(\text{OC}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Sb}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Sb}(\text{R}^8)(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  
 $\text{SbO}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Sb}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Sb}(\text{R}^8)(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  
 $\text{SbO}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Bi}$ ,  $\text{Bi}(\text{R}^8)^+$ ,  $\text{BiO}$ ,  $\text{BiS}$ ,  $\text{BiSe}$ ,  $\text{BiTe}$ ,  $\text{Bi}(\text{O})_3$ ,  $\text{BiO}(\text{O})_3$ ,  
5  $\text{Bi}(\text{OC}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{BiO}(\text{OC}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Bi}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Bi}(\text{R}^8)(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  
 $\text{BiO}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Bi}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Bi}(\text{R}^8)(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  
 $\text{BiO}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{S}^+$ ,  $\text{S}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{S}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{Se}^+$ ,  
 $\text{Se}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{Se}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{Te}^+$ ,  $\text{Te}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  
 $\text{Te}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  
10 oder einer Einheit gemäß Formel (106), (107), (108) oder (109),



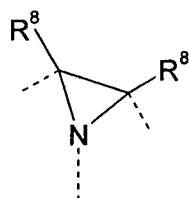
Formel (106)



Formel (107)



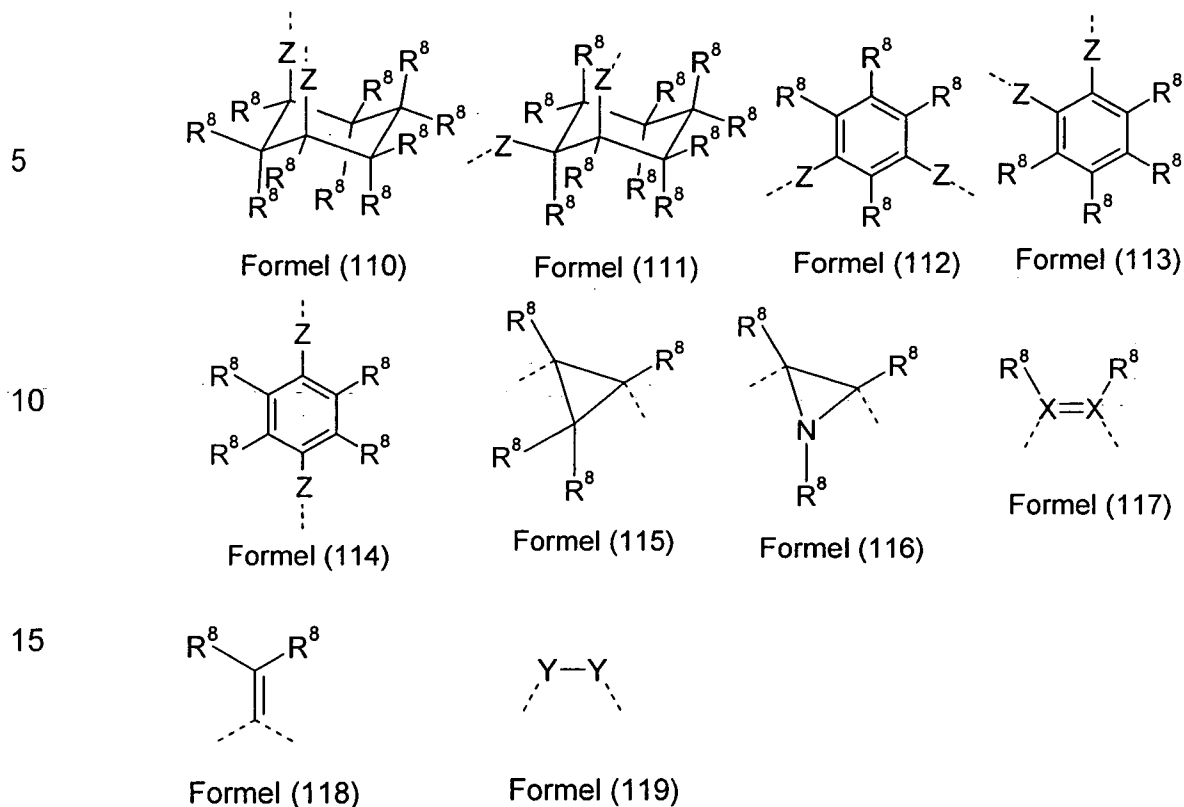
Formel (108)



Formel (109)

25 wobei die gestrichelten Bindungen jeweils die Bindung zu den Teil-  
liganden L bzw. L' andeuten und Z gleich oder verschieden bei jedem  
Auftreten ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus einer Einfach-  
bindung, O, S, S(=O), S(=O)<sub>2</sub>, NR<sup>8</sup>, PR<sup>8</sup>, P(=O)R<sup>8</sup>, P(=NR<sup>8</sup>), C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>,  
C(=O), C(=NR<sup>8</sup>), C(=C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>), Si(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub> oder BR<sup>8</sup> und die weiteren ver-  
30 wendeten Symbole haben die in Anspruch 1 genannten Bedeutungen  
haben;  
oder dass V, wenn V eine bivalente Gruppe ist, also zwei Liganden L  
miteinander bzw. einen Liganden L mit L' verbrückt, ist bevorzugt  
gleich oder verschieden bei jedem Auftreten ausgewählt ist aus der  
35 Gruppe bestehend aus BR<sup>8</sup>, B(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub><sup>-</sup>, C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, C(=O), Si(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, NR<sup>8</sup>, PR<sup>8</sup>,

$P(R^8)_2^+$ ,  $P(=O)(R^8)$ ,  $P(=S)(R^8)$ ,  $AsR^8$ ,  $As(=O)(R^8)$ ,  $As(=S)(R^8)$ , O, S, Se, oder einer Einheit gemäß Formel (110) bis (119),

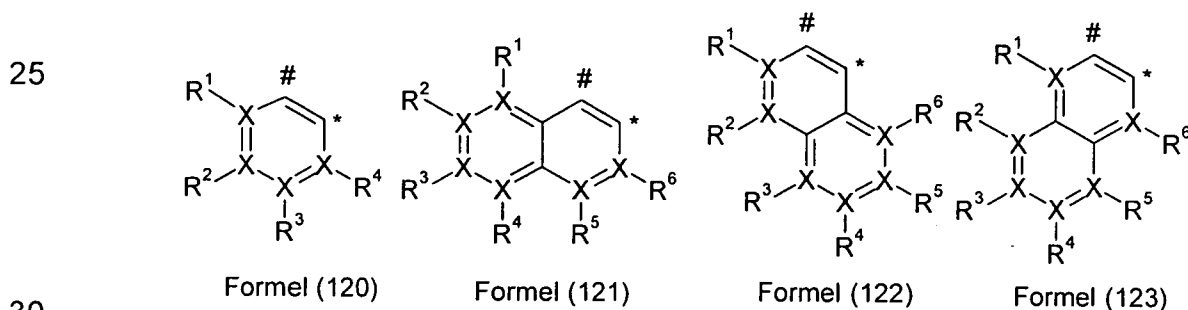


20 wobei die gestrichelten Bindungen jeweils die Bindung zu den Teil-  
liganden L bzw. L' andeuten, Z gleich oder verschieden bei jedem  
Auftreten ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus einer Einfach-  
bindung, O, S, S(=O), S(=O)<sub>2</sub>, NR<sup>8</sup>, PR<sup>8</sup>, P(=O)R<sup>8</sup>, P(=NR<sup>8</sup>), C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>,  
25 C(=O), C(=NR<sup>8</sup>), C(=C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>), Si(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub> oder BR<sup>8</sup> Y bei jedem Auftreten  
gleich oder verschieden für C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, N(R<sup>8</sup>), O oder S steht und die  
weiteren verwendeten Symbole jeweils die in Anspruch 1 aufgeführten  
Bedeutungen haben.

30 13. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 12,  
dadurch gekennzeichnet, dass die Liganden L' gleich oder  
verschieden bei jedem Auftreten ausgewählt sind aus der Gruppe  
bestehend aus Kohlenmonoxid, Stickstoffmonoxid, Alkylcyaniden, Aryl-  
cyaniden, Alkylisocyaniden, Arylisocyaniden, Aminen, Phosphinen,  
Phosphiten, Arsinen, Stibinen, stickstoffhaltigen Heterocyclen,  
35 Carbenen, Hydrid, Deuterid, F<sup>-</sup>, Cl<sup>-</sup>, Br<sup>-</sup> und I<sup>-</sup>, Alkylacetylid, Aryl-

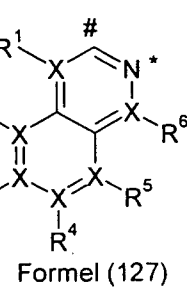
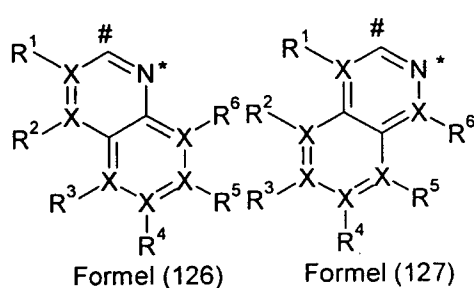
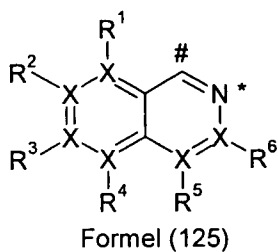
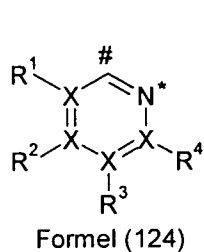
- 197 -

acetylid, Cyanid, Cyanat, Isocyanat, Thiocyanat, Isothiocyanat, aliphatischen oder aromatischen Alkoholaten, aliphatischen oder aromatischen Thioalkoholaten, Amid, Carboxylaten, Arylgruppen,  $O^{2-}$ ,  $S^{2-}$ , Carbiden, Nitrenen,  $N^{3-}$ , Diaminen, Iminen, Diiminen, Heterocyclen enthaltend zwei Stickstoffatome, Diphosphinen, 1,3-Diketonaten abgeleitet von 1,3-Diketonen, 3-Ketonaten abgeleitet von 3-Ketoestern, Carboxylaten abgeleitet von Aminocarbonsäuren, Salicyliminaten abgeleitet von Salicyliminen, Dialkoholaten abgeleitet von Dialkoholen, Dithiolaten abgeleitet von Dithiolen, Boraten stickstoffhaltiger Heterocyclen,  $\eta^5$ -Cyclopentadienyl,  $\eta^5$ -Pentamethylcyclopentadienyl,  $\eta^6$ -Benzol oder  $\eta^7$ -Cycloheptatrienyl, welche jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^1$  substituiert sein können; und/oder die Liganden  $L'$  sind gleich oder verschieden bei jedem Auftreten bidentate Liganden  $L'$ , welche mit dem Metall einen cyclometallierten Fünfring oder Sechsring aufweisen, bevorzugt die Kombination aus zwei Gruppen, wie sie durch die Formeln (120) bis (147) dargestellt sind, wobei eine Gruppe bevorzugt über ein neutrales Stickstoffatom oder ein Carbenatom bindet und die andere Gruppe bevorzugt über ein negativ geladenes Kohlenstoffatom oder ein negativ geladenes Stickstoffatom bindet, wobei in diesen Gruppen die Aromaten jeweils an der durch # gekennzeichneten Position aneinander binden und die Position, an der die Gruppen an das Metall koordinieren, durch \* gekennzeichnet ist,

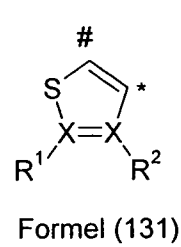
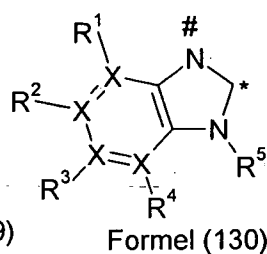
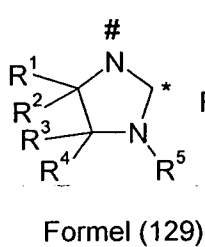
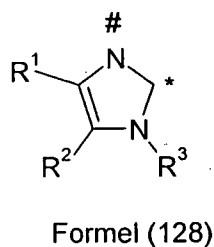


35

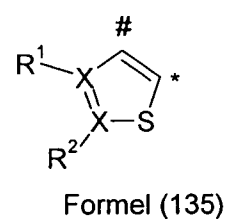
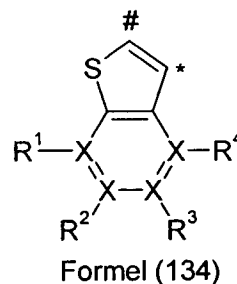
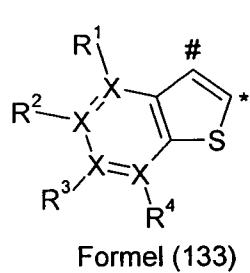
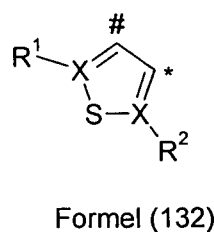
5



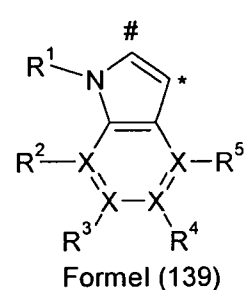
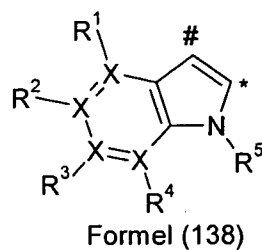
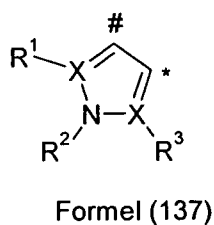
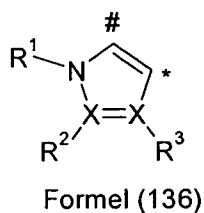
10



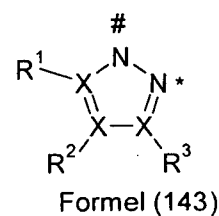
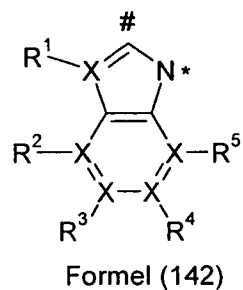
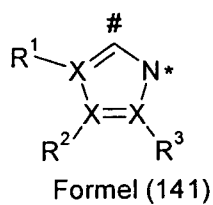
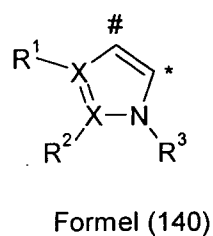
15



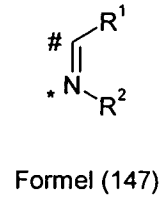
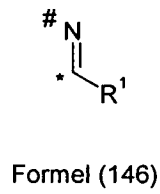
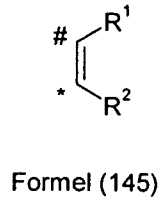
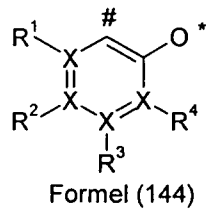
20



25



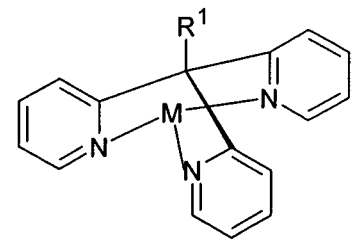
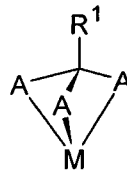
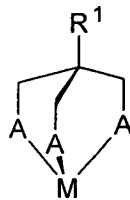
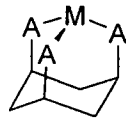
35



5

wobei die verwendeten Symbole dieselbe Bedeutung haben, wie in Anspruch 1 beschrieben;  
 und/oder die Liganden L' sind 1,3,5-cis,cis-Cyclohexanderivate, insbesondere der Formel (148), 1,1,1-Tri(methylen)methanderivate, insbesondere der Formel (149) und 1,1,1-trisubstituierte Methane, insbesondere der Formel (150) und (151),

10



15

wobei in den Formeln (148) bis (151) jeweils die Koordination an das Metall M dargestellt ist, R<sup>1</sup> die in Anspruch 1 genannte Bedeutung hat und A, gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für O<sup>-</sup>, S<sup>-</sup>, COO<sup>-</sup>, P(R<sup>1</sup>)<sub>2</sub> oder N(R<sup>1</sup>)<sub>2</sub> steht.

20

25 14. Verfahren zur Herstellung einer Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 13 durch Umsetzung der entsprechenden freien Liganden oder einer Vorstufe des Liganden mit Metallalkoholaten der Formel (152), mit Metallketoketonaten der Formel (153) oder mit Metallhalogeniden der Formel (154),

30

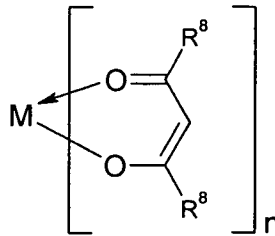
35



- 200 -



Formel (152)



Formel (153)



Formel (154)

5

10

wobei die Symbole M, n und  $R^8$  die oben angegebenen Bedeutungen haben und Hal = F, Cl, Br oder I ist, oder mit Metallverbindungen, die sowohl Alkoholat- und/oder Halogenid- und/oder Hydroxy- wie auch Ketoketonatreste tragen und auch geladen sein können.

15

15. Oligomere, Polymere oder Dendrimere, enthaltend eine oder mehrere der Verbindungen nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 13, wobei mindestens einer der oben definierten Reste  $R^1$  bis  $R^8$  eine Bindung zum Polymer oder Dendrimer darstellt.

20

16. Verwendung einer Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 13 oder eines Oligomers, Polymers oder Dendrimers nach Anspruch 15 in einer elektronischen Vorrichtung.

25

17. Elektronische Vorrichtung, bevorzugt ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen (OLEDs, PLEDs), organischen integrierten Schaltungen (O-ICs), organischen Feld-Effekt-Transistoren (O-FETs), organischen Dünnschichttransistoren (O-TFTs), organischen lichtemittierenden Transistoren (O-LETs), organischen Solarzellen (O-SCs), organischen optischen Detektoren, organischen Photorezeptoren, organischen Feld-Quench-Devices (O-FQDs), lichtemittierenden elektrochemischen Zellen (LECs) oder organischen Laserdioden (O-Laser), enthaltend mindestens eine Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 13 oder ein Oligomer, Polymer oder Dendrimer nach Anspruch 15.

30

35

18. Organische Elektrolumineszenzvorrichtung nach Anspruch 17, dadurch gekennzeichnet, dass die Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 13 oder das Oligomer, Polymer oder

- 201 -

Dendrimer nach Anspruch 15 als emittierende Verbindung in einer oder mehreren emittierenden Schichten eingesetzt wird.

- 5
19. Organische Elektrolumineszenzvorrichtung nach Anspruch 18, dadurch gekennzeichnet, dass das Matrixmaterial der emittierenden Schicht ausgewählt ist aus Ketonen, Phosphinoxiden, Sulfoxiden, Sulfonen, Triarylaminen, Carbazolderivaten, Indolocarbazolderivaten, Indenocarbazolderivaten, Azacarbazolen, bipolaren Matrixmaterialien, Silanen, Azaborolen, Boronestern, Diazasilolderivaten, Diazaphosphol-
- 10
- derivaten, Triazinderivaten oder Zinkkomplexen.

15

20

25

30

35

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**

International application No  
PCT/EP2010/000177

<b>A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER</b>					
INV.	C07F1/00	C07F1/08	C07F15/00	C07F19/00	C09K11/06
	H05B33/14	H01L51/50	C07D471/04	C07D471/14	C07D487/14
ADD.					
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC					
<b>B. FIELDS SEARCHED</b>					
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C07F C09K H05B 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 practical, search terms used) EPO-Internal, CHEM ABS Data					
<b>C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT</b>					
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages			Relevant to claim No.	
A	WO 2008/156879 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORP [US]; KNOWLES DAVID B [US]; LIN CHUN [US]; MACK) 24 December 2008 (2008-12-24) the whole document			1-19	
A	WO 2007/095118 A2 (UNIVERSAL DISPLAY CORP [US]; KNOWLES DAVID B [US]; LIN CHUN [US]; MACK) 23 August 2007 (2007-08-23) cited in the application the whole document			1-19	
A	WO 2008/143059 A1 (KONICA MINOLTA HOLDINGS INC [JP]; OTSU SHINYA [JP]; IKEMIZU DAI [JP];) 27 November 2008 (2008-11-27) the whole document			1-19	
	----- -/--				
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.					
* Special categories of cited documents :					
*A* document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance *E* earlier document but published on or after the international filing date *L* document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) *O* document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means *P* document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed		*T* later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention *X* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone *Y* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art. *&* document member of the same patent family			
Date of the actual completion of the international search			Date of mailing of the international search report		
29 June 2010			14/07/2010		
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  Rinkel, Bert		

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No

PCT/EP2010/000177

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 2008/140114 A1 (KONICA MINOLTA HOLDINGS INC [JP]; OTSU SHINYA [JP]; IKEMIZU DAI [JP];) 20 November 2008 (2008-11-20) the whole document	1-19
X	----- DATABASE CA [Online] CHEMICAL ABSTRACTS SERVICE, COLUMBUS, OHIO, US; 1971, HENNIG, HORST ET AL: "Coordination tendencies of acidic amino groups. 12. EPR investigations on cationic copper(II) chelates of 5-amino-2-methyl-3H-imidazo[4,5-h]quinoline" XP002589524 retrieved from STN Database accession no. 75:13278 * abstract & HENNIG, HORST ET AL: "Coordination tendencies of acidic amino groups. 12. EPR investigations on cationic copper(II) chelates of 5-amino-2-methyl-3H-imidazo[4,5-h]quinoline" ZEITSCHRIFT FUER CHEMIE , 11(3), 115-17 CODEN: ZECEAL; ISSN: 0044-2402, 1971, -----	1-8

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**

Information on patent family members

International application No

PCT/EP2010/000177

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 2008156879 A1	24-12-2008	US 2008297033 A1	04-12-2008
WO 2007095118 A2	23-08-2007	EP 1981898 A2	22-10-2008
		JP 2009526071 T	16-07-2009
		KR 20080098489 A	10-11-2008
WO 2008143059 A1	27-11-2008	NONE	
WO 2008140114 A1	20-11-2008	US 2010141126 A1	10-06-2010

**INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT**

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2010/000177

**A. KLASIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES**

INV. C07F1/00 C07F1/08 C07F15/00 C07F19/00 C09K11/06  
 H05B33/14 H01L51/50 C07D471/04 C07D471/14 C07D487/14

ADD.

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

**B. RECHERCHIERTE GEBIETE**

Recherchiertes Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)

C07F C09K H05B 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

**C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN**

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
A	WO 2008/156879 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORP [US]; KNOWLES DAVID B [US]; LIN CHUN [US]; MACK) 24. Dezember 2008 (2008-12-24) das ganze Dokument	1-19
A	WO 2007/095118 A2 (UNIVERSAL DISPLAY CORP [US]; KNOWLES DAVID B [US]; LIN CHUN [US]; MACK) 23. August 2007 (2007-08-23) in der Anmeldung erwähnt das ganze Dokument	1-19
A	WO 2008/143059 A1 (KONICA MINOLTA HOLDINGS INC [JP]; OTSU SHINYA [JP]; IKEMIZU DAI [JP];) 27. November 2008 (2008-11-27) das ganze Dokument	1-19
	-/--	

Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen  Siehe Anhang Patentfamilie

- |   |  |
|---|--|
| <ul style="list-style-type: none"> <li>* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen :</li> <li>*A* Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist</li> <li>*E* älteres Dokument, das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist</li> <li>*L* Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt)</li> <li>*O* Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht</li> <li>*P* Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>*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</li> <li>*X* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderscher Tätigkeit beruhend betrachtet werden</li> <li>*Y* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderscher Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren anderen Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist</li> <li>*&amp;* Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist</li> </ul> |
|---|--|

Datum des Abschlusses der internationalen Recherche	Absenddatum des internationalen Recherchenberichts
29. Juni 2010	14/07/2010
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  Rinkel, Bert

## INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2010/000177

## C. (Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
A	WO 2008/140114 A1 (KONICA MINOLTA HOLDINGS INC [JP]; OTSU SHINYA [JP]; IKEMIZU DAI [JP];) 20. November 2008 (2008-11-20) das ganze Dokument	1-19
X	<p>-----</p> <p>DATABASE CA [Online]            CHEMICAL ABSTRACTS SERVICE, COLUMBUS,            OHIO, US;            1971,            HENNIG, HORST ET AL: "Coordination            tendencies of acidic amino groups. 12.            EPR investigations on cationic copper(II)            chelates of            5-amino-2-methyl-3H-imidazo[4,5-h]quinolin            e"            XP002589524            gefunden im STN            Database accession no. 75:13278            * Zusammenfassung            &amp; HENNIG, HORST ET AL: "Coordination            tendencies of acidic amino groups. 12.            EPR investigations on cationic copper(II)            chelates of            5-amino-2-methyl-3H-imidazo[4,5-h]quinolin            e"            ZEITSCHRIFT FUER CHEMIE , 11(3), 115-17            CODEN: ZECEAL; ISSN: 0044-2402, 1971,            -----</p>	1-8

**INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT**

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2010/000177

Im Recherchenbericht angeführtes Patendokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 2008156879 A1	24-12-2008	US 2008297033 A1	04-12-2008
WO 2007095118 A2	23-08-2007	EP 1981898 A2	22-10-2008
		JP 2009526071 T	16-07-2009
		KR 20080098489 A	10-11-2008
WO 2008143059 A1	27-11-2008	KEINE	
WO 2008140114 A1	20-11-2008	US 2010141126 A1	10-06-2010