



(10) **DE 10 2010 046 512 A1** 2012.03.29

(12)

Offenlegungsschrift

(21) Aktenzeichen: **10 2010 046 512.7**

(22) Anmeldetag: **24.09.2010**

(43) Offenlegungstag: **29.03.2012**

(51) Int Cl.: **C07F 19/00 (2006.01)**

C09K 11/06 (2006.01)

A61K 8/00 (2006.01)

A61K 31/28 (2006.01)

C07F 9/52 (2006.01)

(71) Anmelder:

**Merck Patent GmbH, 64293, Darmstadt, DE;
Universität Regensburg, 93053, Regensburg, DE**

(72) Erfinder:

**Anémian, Rémi Manouk, Dr., 60316, Frankfurt, DE;
König, Burkhard, Prof. Dr., 93138, Lappersdorf,
DE; de Nonancourt, Claire, 65929, Frankfurt, DE**

Die folgenden Angaben sind den vom Anmelder eingereichten Unterlagen entnommen

(54) Bezeichnung: **Phosphorhaltige Metallkomplexe**

(57) Zusammenfassung: Die vorliegende Erfindung betrifft u. a. Metallkomplexe mit verbesserter Löslichkeit, Verfahren zur Herstellung der Metallkomplexe, Vorrichtungen enthaltend diese Metallkomplexe sowie die Verwendung der Metallkomplexe.

Beschreibung

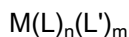
[0001] Der Aufbau organischer Elektrolumineszenzvorrichtungen (OLEDs), in denen organische Halbleiter als funktionelle Materialien eingesetzt werden, ist beispielsweise in US 4539507, US 5151629, EP 0676461 und WO 98/27136 beschrieben. Dabei werden als emittierende Materialien zunehmend metallorganische 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 vierfache Energie- und Leistungseffizienz möglich. Generell gibt es bei OLEDs, die Triplettemission 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 blau, emittieren. Weiterhin weisen viele phosphoreszierende Emittierer keine ausreichende Löslichkeit für eine Verarbeitung aus Lösung auf, so dass es auch hier weiteren Verbesserungsbedarf gibt.

[0002] Gemäß dem Stand der Technik werden in phosphoreszierenden OLEDs als Triplettemitter insbesondere Iridium- und Platinkomplexe eingesetzt, welche üblicherweise als cyclometallierte Komplexe eingesetzt werden. Dabei sind die Liganden häufig Derivate von Phenylpyridin. Jedoch ist die Löslichkeit derartiger Komplexe häufig gering, was eine Verarbeitung aus Lösung erschwert oder gänzlich verhindert.

[0003] Aus dem Stand der Technik sind Iridiumkomplexe bekannt, welche am Phenylring des Phenylpyridinliganden in para-Position zur Koordination an das Metall mit einer gegebenenfalls substituierten Aryl- oder Heteroarylgruppe substituiert sind (WO 2004/026886 A2). Dadurch wurde eine verbesserte Löslichkeit der Komplexe erzielt. Jedoch gibt es auch hier noch weiteren Verbesserungsbedarf in Bezug auf die Löslichkeit sowie die Effizienz und die Lebensdauer der Komplexe.

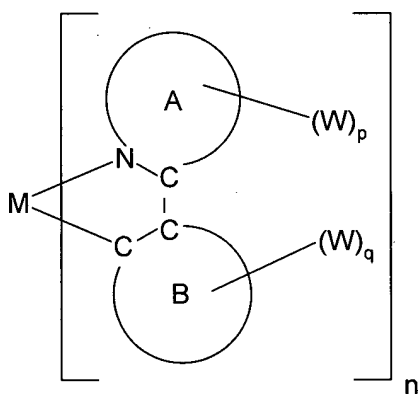
[0004] Überraschend wurde gefunden, dass bestimmte, unten näher beschriebene Metallchelatkomplexe eine verbesserte Löslichkeit aufweisen und weiterhin zu Verbesserungen der organischen Elektrolumineszenzvorrichtung führen, insbesondere hinsichtlich der Effizienz und der Lebensdauer. Diese Metallkomplexe und organische Elektrolumineszenzvorrichtungen, welche diese Komplexe enthalten, sind daher der Gegenstand der vorliegenden Erfindung.

[0005] Gegenstand der Erfindung ist eine Verbindung gemäß Formel (1),



Formel (1)

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



Formel (2)

wobei M an einen beliebigen bidentaten Liganden L über ein Stickstoffatom N sowie über ein Kohlenstoffatom C bindet und

wobei A ein beliebiges heteroaromatisches kondensiertes Ringsystem sein kann und

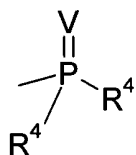
wobei B ein beliebiger aromatischer oder heteroaromatischer Ring oder ein beliebiges aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem sein kann, das kondensiert und/oder nicht kondensiert ist und

wobei für die verwendeten Symbole und Indices gilt:

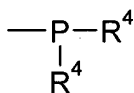
M ist ein Metall ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Iridium, Rhodium, Platin, Palladium, Osmium und Ruthenium, bevorzugt Iridium, Rhodium, Platin und Palladium;

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

W ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten einem Rest der Formeln (3) und (4)



Formel (3)



Formel (4)

wobei V gleich S oder O ist;

R^4 ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten H, D, F, Cl, Br, I, $N(R^2)_2$, eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine geradkettige Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy-, Alkylalkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^2 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen durch $R^2C=CR^2$, $C\equiv C$, $Si(R^2)_2$, $Ge(R^2)_2$, $Sn(R^2)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^2$, $P(=O)(R^2)$, SO , SO_2 , NR^2 , O, S oder $CONR^2$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch D, F, Cl, Br, I, CN oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy-, Arylalkoxy-, Alkylaryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Kombination aus zwei oder mehr dieser Gruppen; dabei können zwei oder mehr Reste R^4 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

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

R^3 ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten 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^3 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden;

q ist eine ganze Zahl größer oder gleich 0;

p ist eine ganze Zahl größer oder gleich 0; mit der Maßgabe, dass $p + q$ eine ganze Zahl größer oder gleich 1 ist;

n ist 1, 2 oder 3 für M gleich Iridium oder Rhodium und ist 1 oder 2 für M gleich Platin oder Palladium;

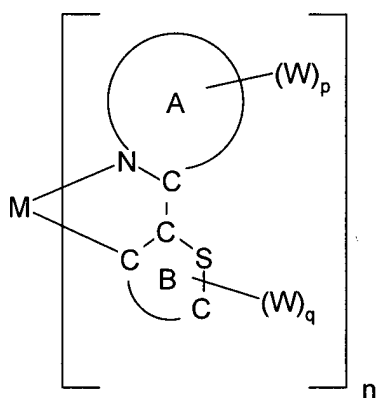
m ist 0, 1, 2, 3 oder 4;

dabei werden die Indizes n und m so gewählt, dass die Koordinationszahl am Metall für M gleich Iridium oder Rhodium 6 entspricht und für M gleich Platin oder Palladium 4 entspricht;

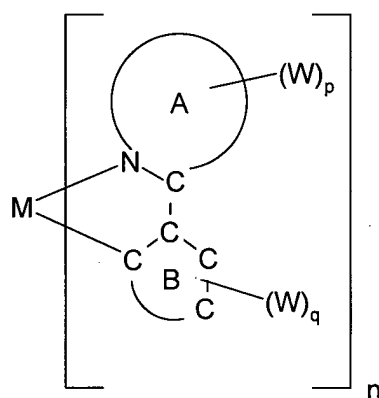
dabei können auch mehrere Liganden L miteinander oder L mit L' über eine beliebige Brücke Z verknüpft sein und so ein tridentates, tetradentates, pentadentates oder hexadentates Ligandensystem aufspannen.

[0006] In einer bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung sind weder die Liganden L untereinander noch die Liganden L mit den Liganden L' miteinander verbrückt.

[0007] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung ist $M(L)_n$ aus Formel (1) gleich den Formeln (5) oder (6).

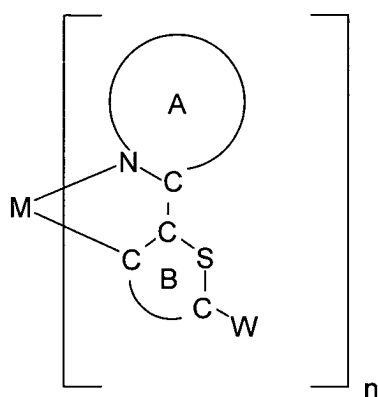


Formel (5)

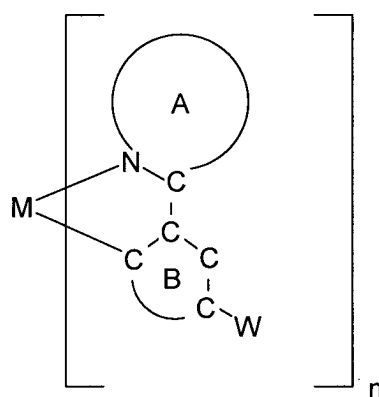


Formel (6)

[0008] In einer ganz bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung ist $M(L)_n$ aus Formel (1) gleich den Formeln (7) und (8).

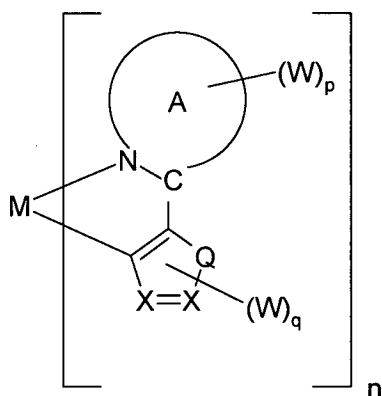


Formel (7)



Formel (8)

[0009] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung ist $M(L)_n$ aus Formel (1) gleich der Formel (9).



Formel (9)

wobei für die verwendeten Symbole in Indizes gilt:

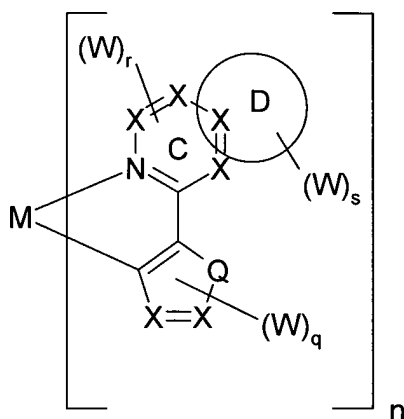
X ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten CR^1 oder N;

Q ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten $R^1C=CR^1$, $R^1C=N$, O, S, Se oder NR^1 ;

R^1 ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten H, D, F, Cl, Br, I, $N(R^2)_2$, CN, NO_2 , $Si(R^2)_3$, $B(OR^2)_2$, $C(=O)R^2$, $P(=O)(R^2)_2$, $S(=O)R^2$, $S(=O)_2R^2$, OSO_2R^2 , eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine geradkettige Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy-, Alkylalkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^2 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere

nicht benachbarte CH_2 -Gruppen durch $\text{R}^2\text{C}=\text{CR}^2$, $\text{C}\equiv\text{C}$, $\text{Si}(\text{R}^2)_2$, $\text{Ge}(\text{R}^2)_2$, $\text{Sn}(\text{R}^2)_2$, $\text{C}=\text{O}$, $\text{C}=\text{S}$, $\text{C}=\text{Se}$, $\text{C}=\text{NR}^2$, $\text{P}(\text{O})(\text{R}^2)$, SO , SO_2 , NR^2 , O , S oder CONR^2 ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch D , F , Cl , Br , I , CN oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy-, Arylalkoxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Kombination aus zwei oder mehr dieser Gruppen; dabei können zwei oder mehr Reste R^1 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden.

[0010] Weiterhin bevorzugt im Sinne der Erfindung sind Teilstrukturen $\text{M}(\text{L})_n$ mit der Formel (10)

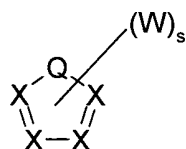


Formel (10)

wobei für die Indizes r und s die Gleichung $p = r + s$ und wegen $p + q \geq 1$ auch $r + s + q \geq 1$ gilt und der aromatische oder heteroaromatische Zyklus D , der in jeder beliebigen und möglichen Art an C kondensiert ist, wobei C ein aromatischer oder heteroaromatischer Ring oder ein aromatisches oder heteroaromatisches kondensiertes und/oder nicht-kondensiertes Ringsystem sein kann.

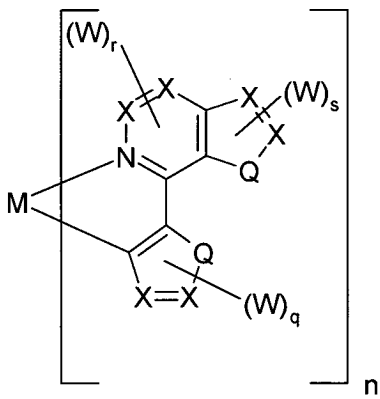
[0011] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung ist der Ring D ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Kombination aus zwei oder mehr dieser Gruppen; dabei können zwei oder mehr Reste R^1 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden.

[0012] In einer besonders bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung ist der Ring D gleich der Formel (11)

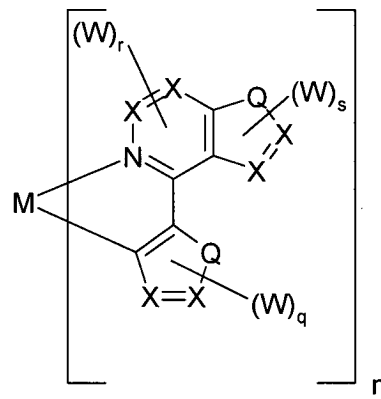


Formel (11)

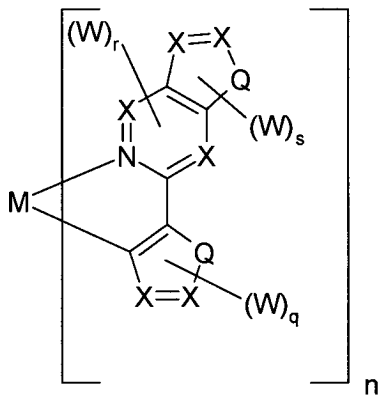
[0013] In einer ganz besonders bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung ist die Teilstruktur $\text{M}(\text{L})_n$ der Formel (1) ausgewählt aus den folgenden Formeln (12) bis (17)



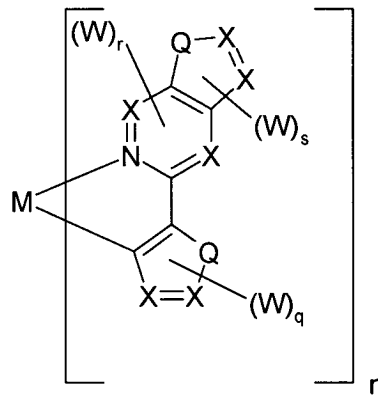
Formel (12)



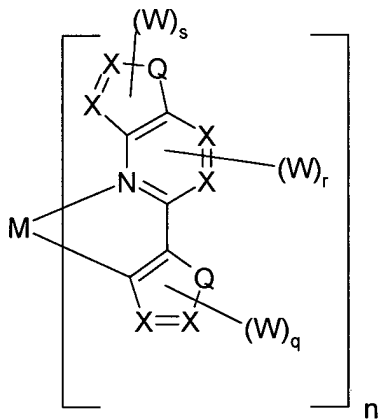
Formel (13)



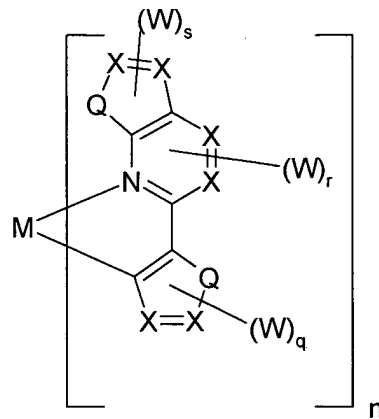
Formel (14)



Formel (15)

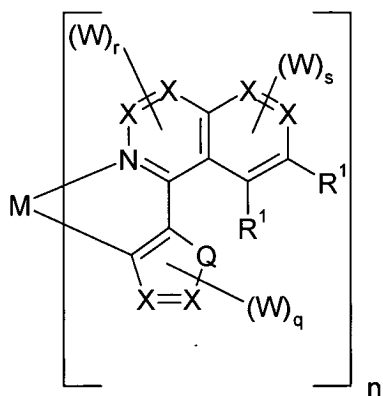


Formel (16)

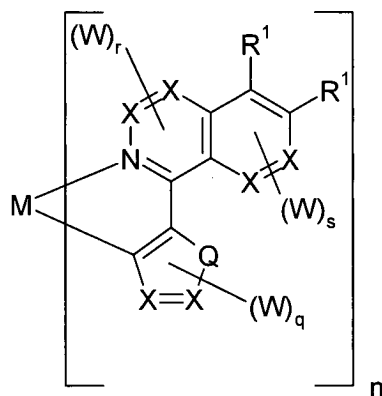


Formel (17)

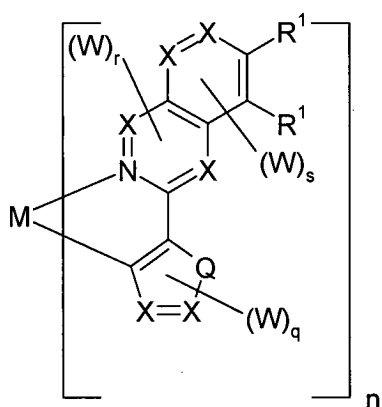
[0014] Weiterhin bevorzugte Ausführungsformen im Sinne der vorliegenden Erfindung sind Teilstrukturen M (L)_n der Formel (1) mit den Formeln (18) bis (23)



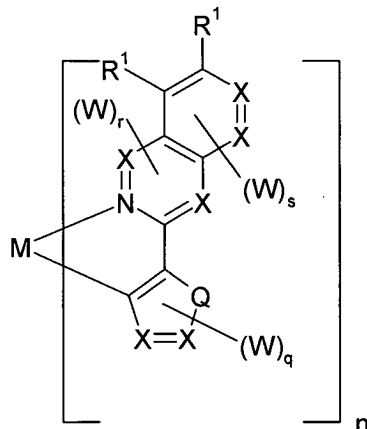
Formel (18)



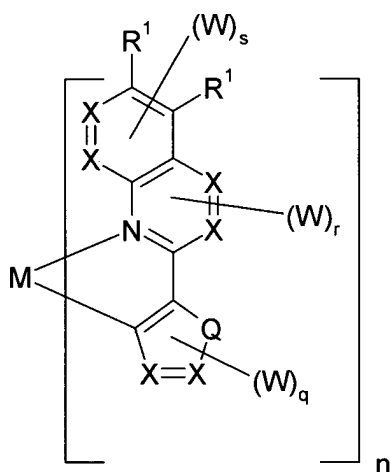
Formel (19)



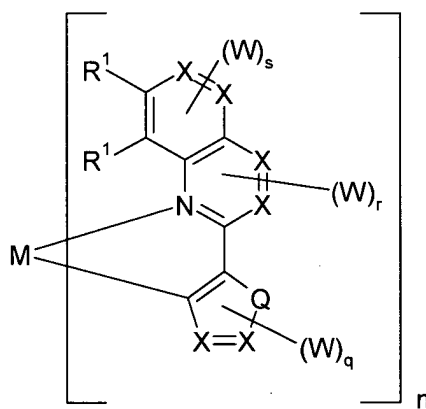
Formel (20)



Formel (21)



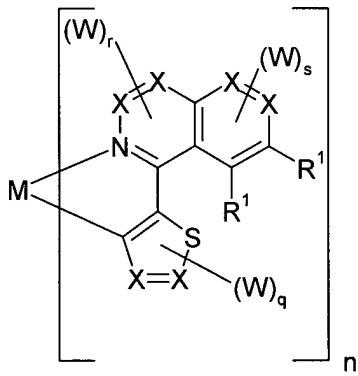
Formel (22)



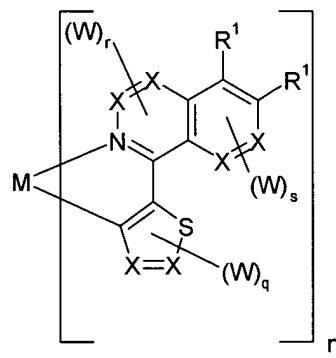
Formel (23)

[0015] Es ist weiterhin besonders bevorzugt im Sinne der vorliegenden Erfindung, wenn der Rest Q entweder S oder R¹C=CR¹ ist.

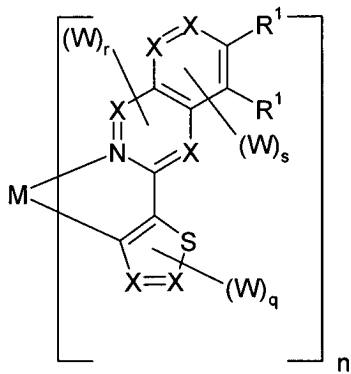
[0016] Ganz bevorzugte Ausführungsformen der vorliegenden Erfindung sind Verbindungen der Formel (1) mit den Teilstrukturen M(L)_n der folgenden Formeln (24) bis (29).



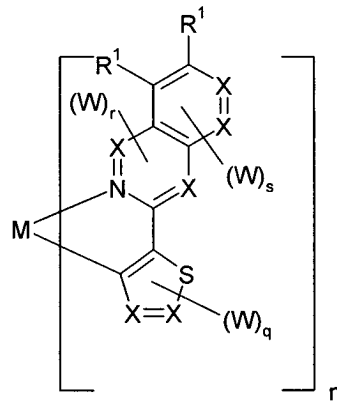
Formel (24)



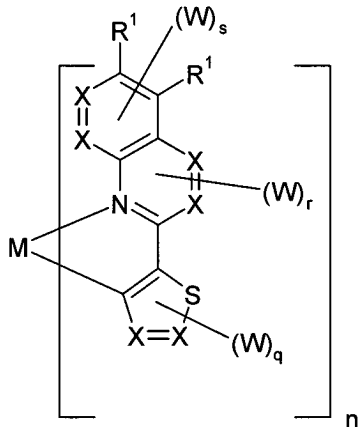
Formel (25)



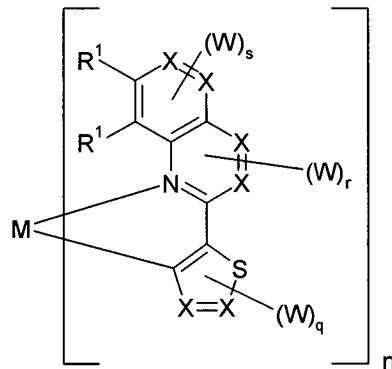
Formel (26)



Formel (27)

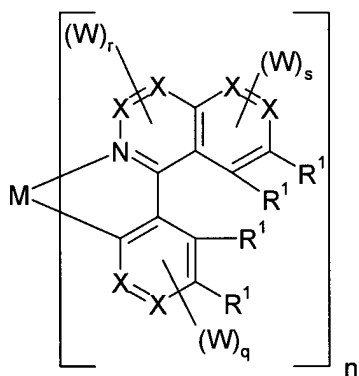


Formel (28)

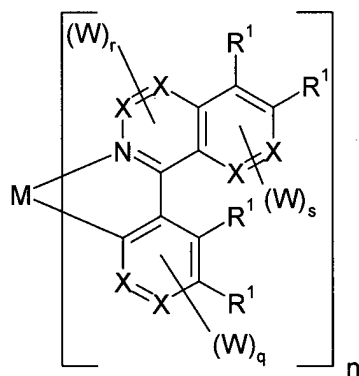


Formel (29)

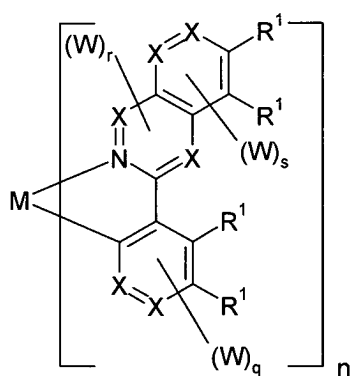
[0017] Ganz besonders bevorzugte Ausführungsformen der vorliegenden Erfindung sind Verbindungen der Formel (1) mit den Teilstrukturen M(L)_n der folgenden Formeln (30) bis (35).



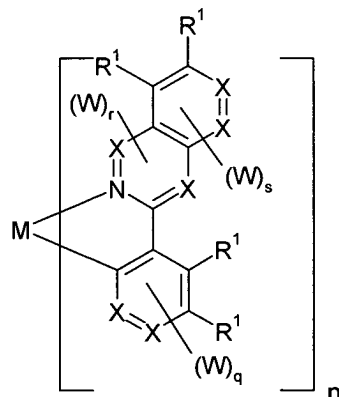
Formel (30)



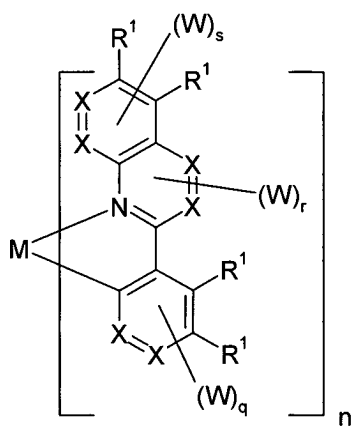
Formel (31)



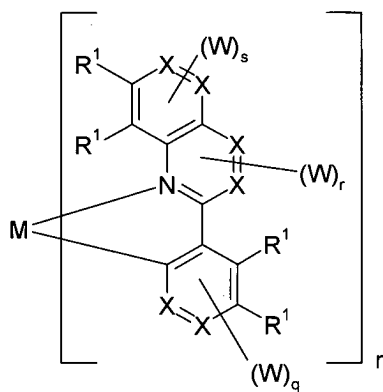
Formel (32)



Formel (33)



Formel (34)

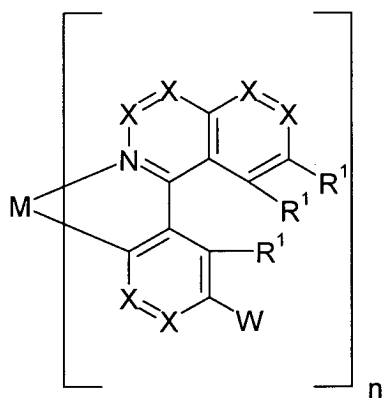


Formel (35)

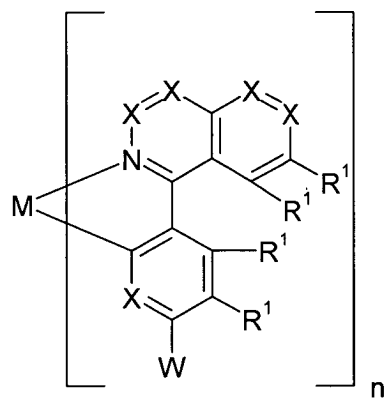
[0018] In einer insbesondere bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung ist $q + r + s = 1$.

[0019] Weiterhin bevorzugt im Sinne der vorliegenden Erfindung sind Verbindungen der Formel (1) mit der Teilstruktur $M(L)_n$ dadurch charakterisiert, dass $r = 0$ ist und somit gilt: $q + s \geq 1$. In einer ganz bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung gilt: $q + s = 1$, wobei der Rest W an jeder beliebigen und möglichen Stelle der Ringe sein kann und dort den Substituenten R¹ ersetzt. Sofern der Rest W über X an den Liganden bindet ist X gleich CR¹ und der Rest W ersetzt wieder den Rest R¹.

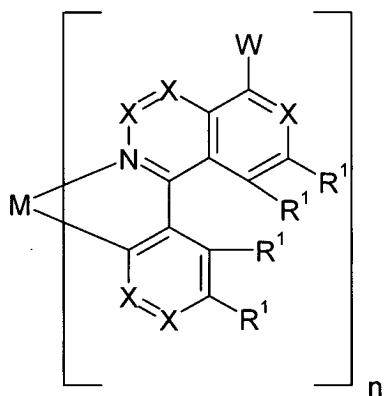
[0020] Ganz bevorzugt im Sinne der vorliegenden Erfindung sind Verbindungen der Formel (1) mit der Teilstruktur $M(L)_n$ der Formeln (36) bis (59).



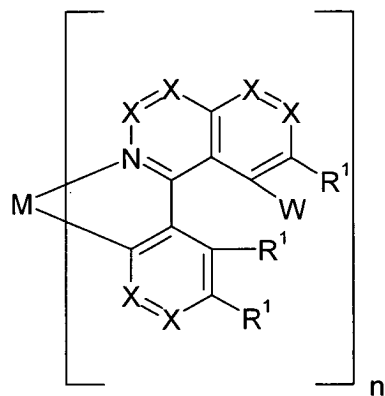
Formel (36)



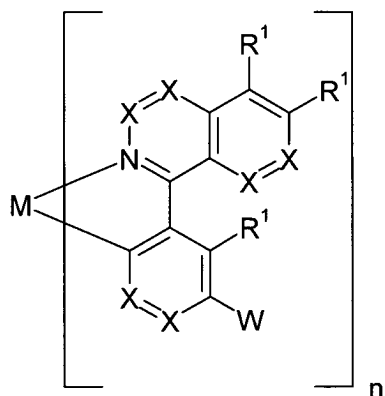
Formel (37)



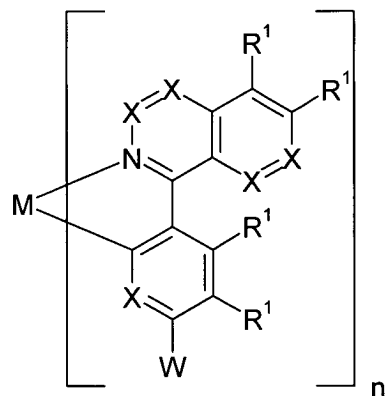
Formel (38)



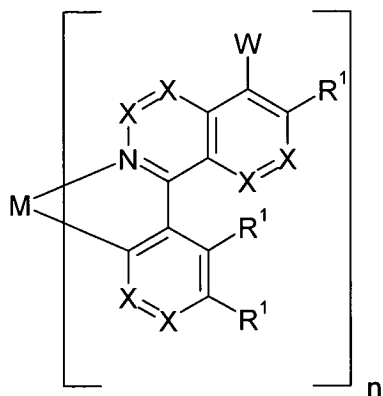
Formel (39)



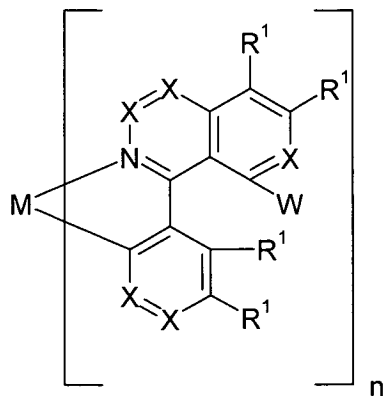
Formel (40)



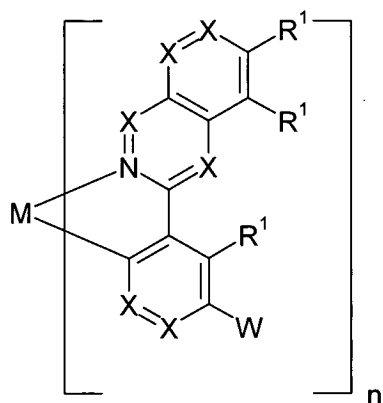
Formel (41)



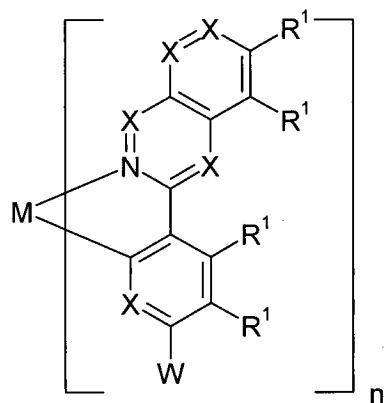
Formel (42)



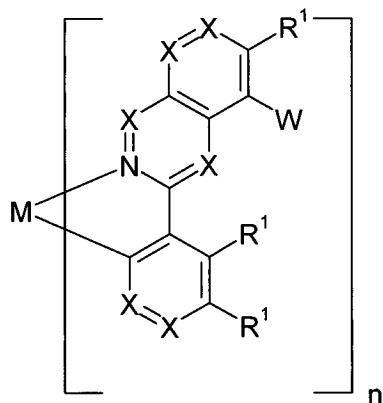
Formel (43)



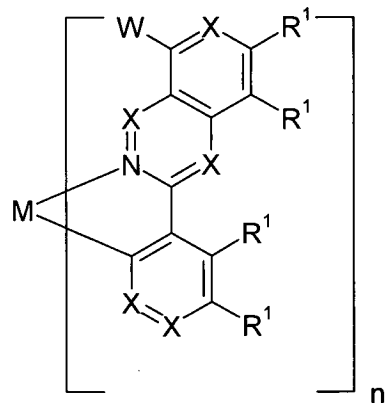
Formel (44)



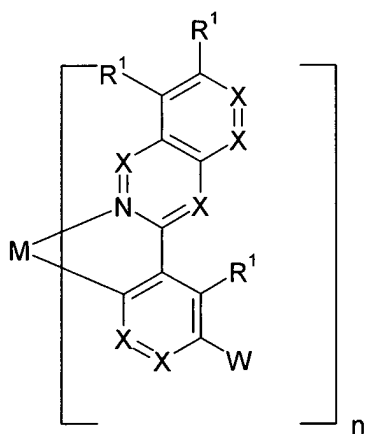
Formel (45)



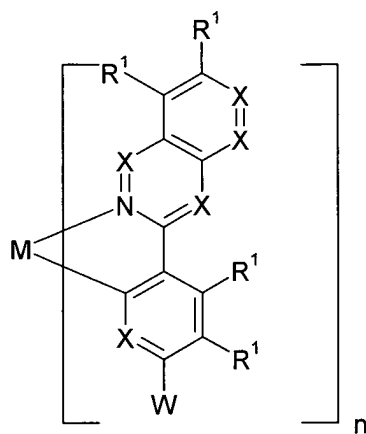
Formel (46)



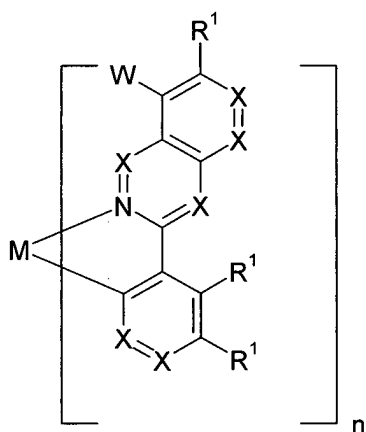
Formel (47)



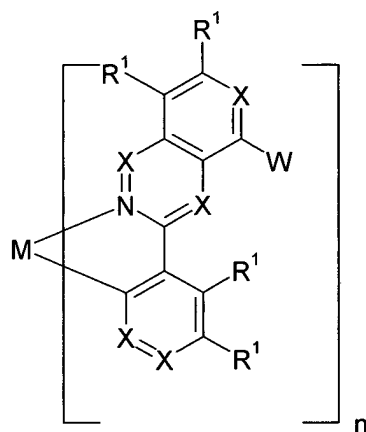
Formel (48)



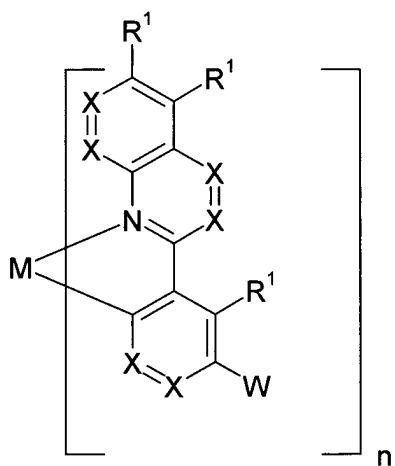
Formel (49)



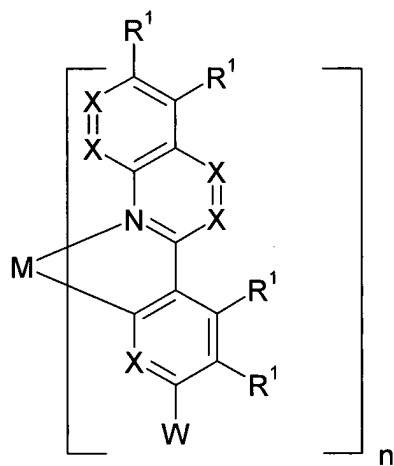
Formel (50)



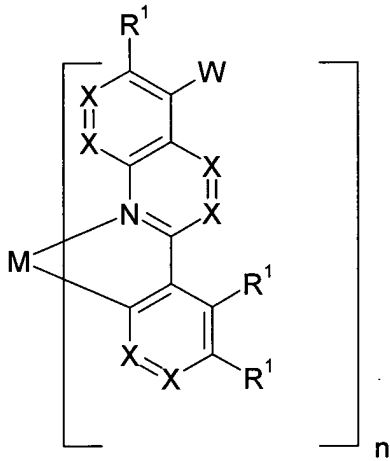
Formel (51)



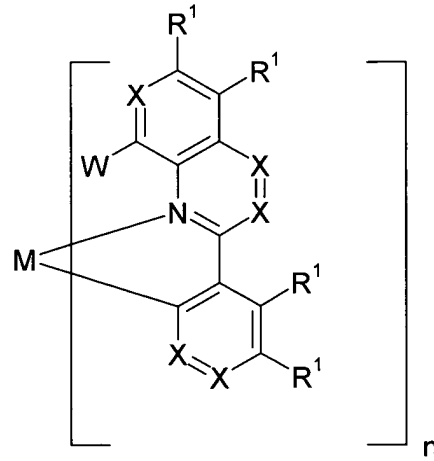
Formel (52)



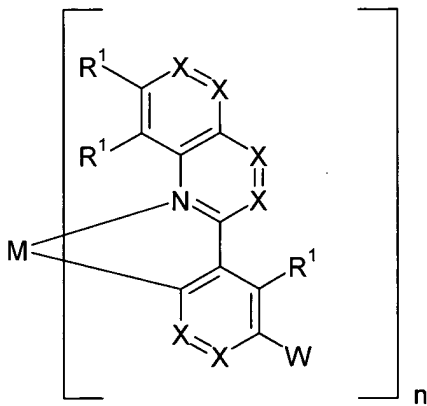
Formel (53)



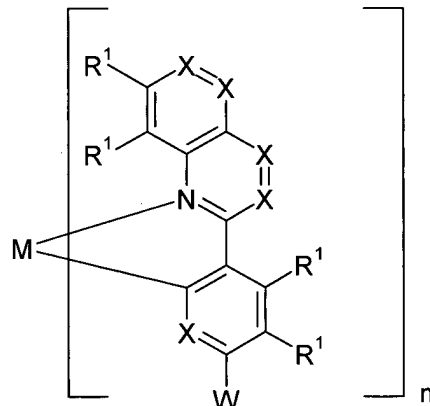
Formel (54)



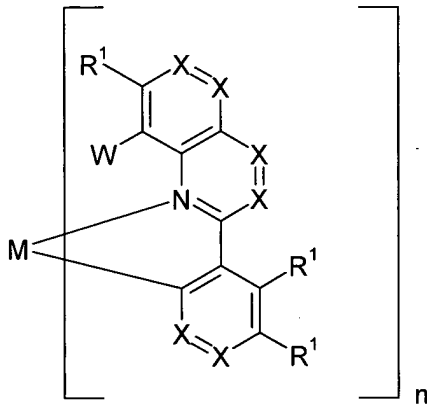
Formel (55)



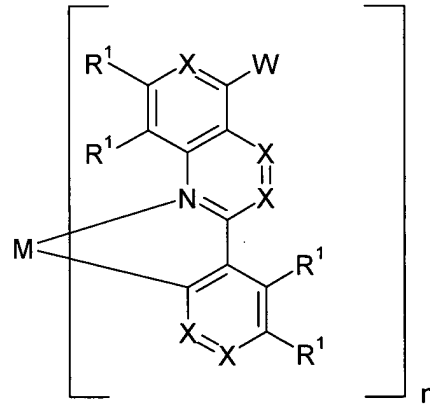
Formel (56)



Formel (57)



Formel (58)



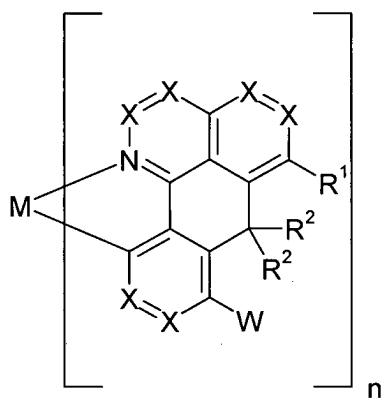
Formel (59)

[0021] Weiterhin ganz besonders bevorzugte Ausführungsformen der vorliegenden Erfindung sind Verbindungen der Formel (1) mit einer Teilstruktur $M(L)_n$ der Formeln (36), (37), (40), (41), (44), (45), (48), (49), (52), (53), (56) und (57).

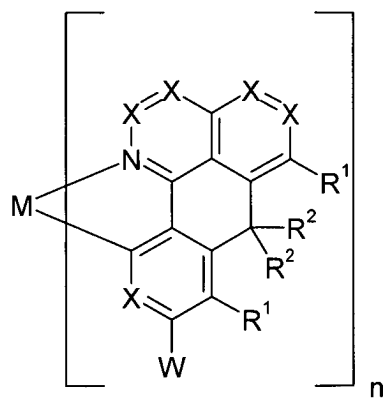
[0022] Auch ganz besonders bevorzugte Ausführungsformen der vorliegenden Erfindung sind Verbindungen der Formel (1) mit einer Teilstruktur $M(L)_n$ der Formeln (36), (37), (40) und (41).

[0023] Insbesondere bevorzugte Ausführungsformen der vorliegenden Erfindung sind Verbindungen der Formel (1) mit einer Teilstruktur $M(L)_n$ der Formeln (36) und (40).

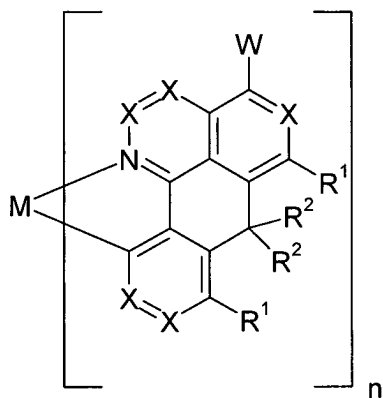
[0024] Die Substituenten R¹ können innerhalb eines Liganden L zu einer Verbrückung führen, die zu einer weiteren Versteifung des Liganden führen. Bevorzugte Ausführungsformen im Sinne der Erfindung stellen die Formeln (60) bis (97) dar.



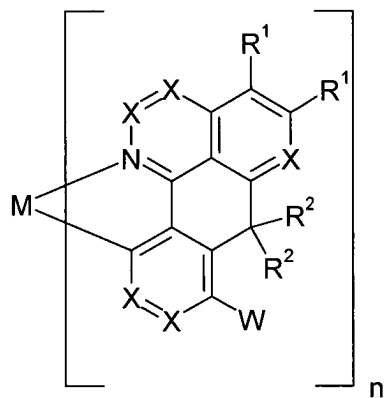
Formel (60)



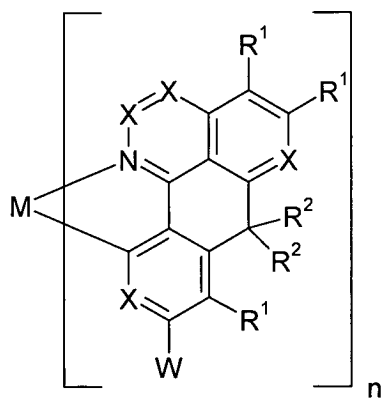
Formel (61)



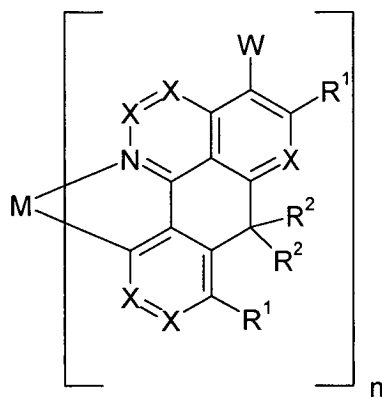
Formel (62)



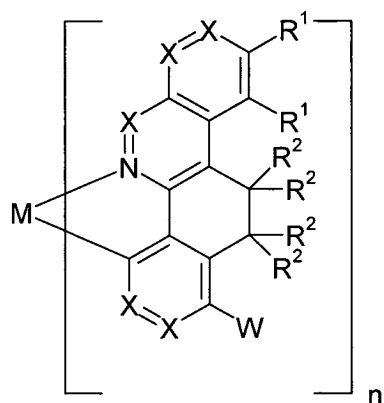
Formel (63)



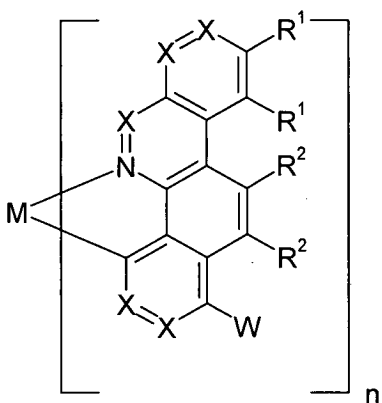
Formel (64)



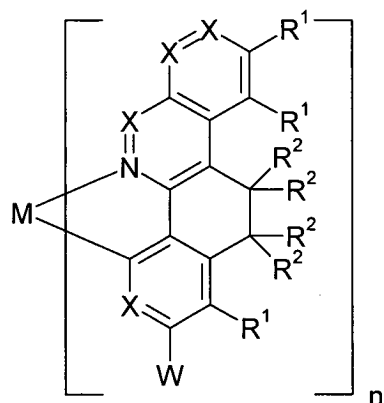
Formel (65)



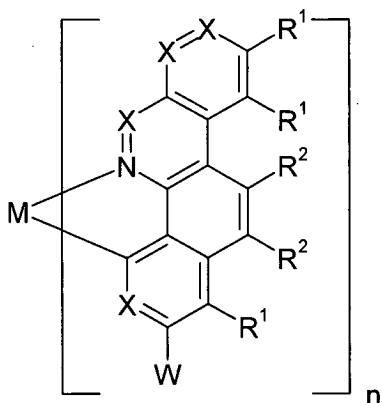
Formel (66)



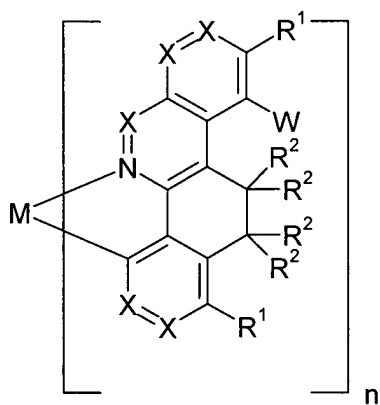
Formel (67)



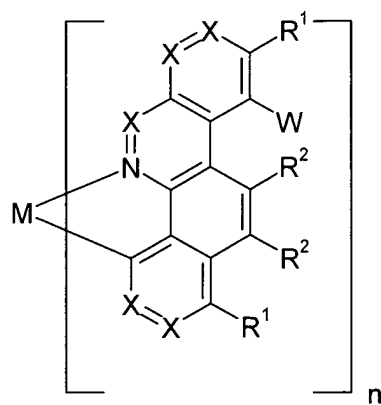
Formel (68)



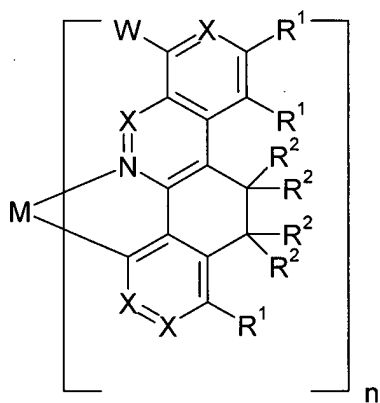
Formel (69)



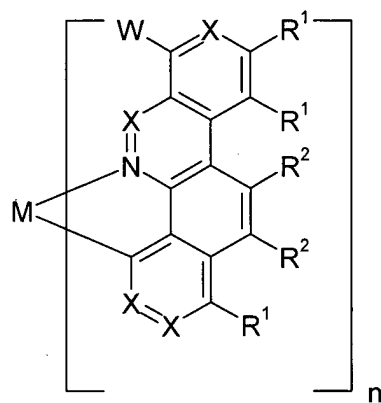
Formel (70)



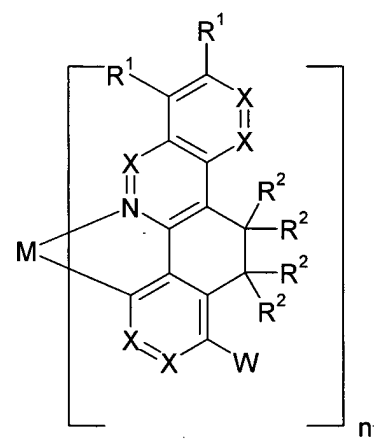
Formel (71)



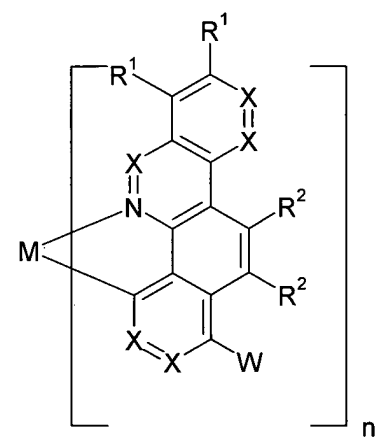
Formel (72)



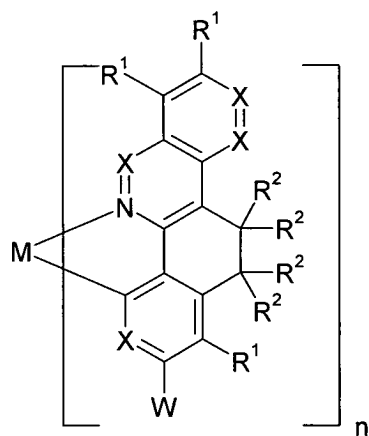
Formel (73)



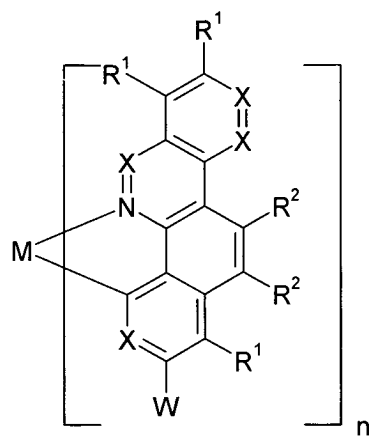
Formel (74)



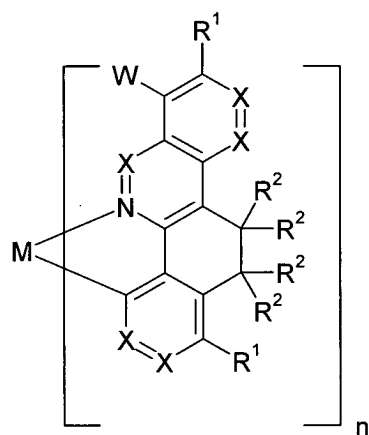
Formel (75)



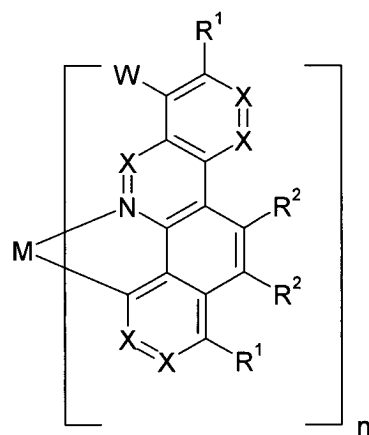
Formel (76)



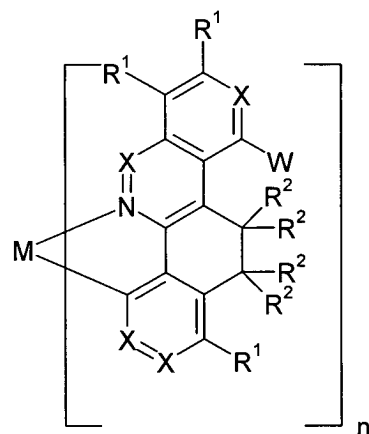
Formel (77)



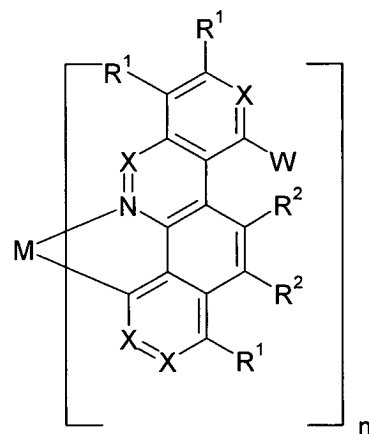
Formel (78)



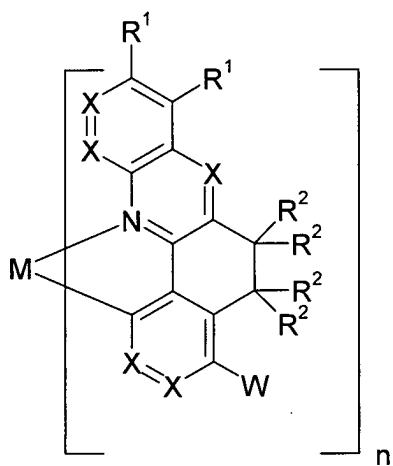
Formel (79)



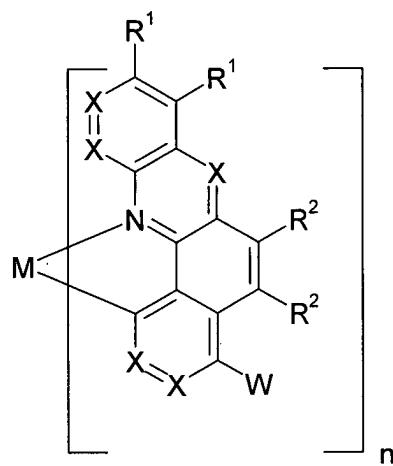
Formel (80)



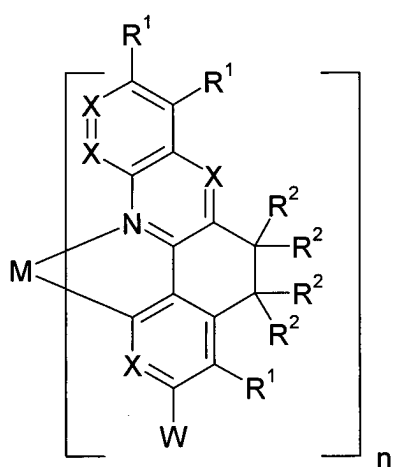
Formel (81)



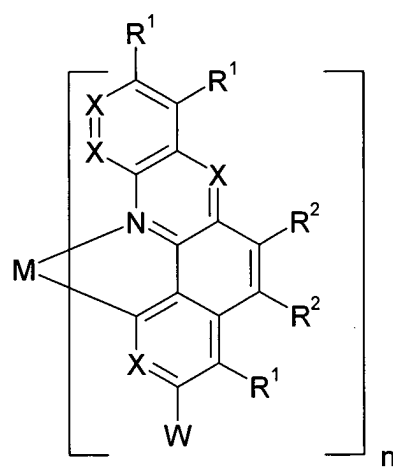
Formel (82)



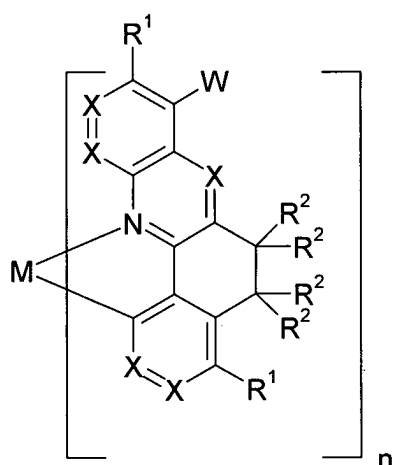
Formel (83)



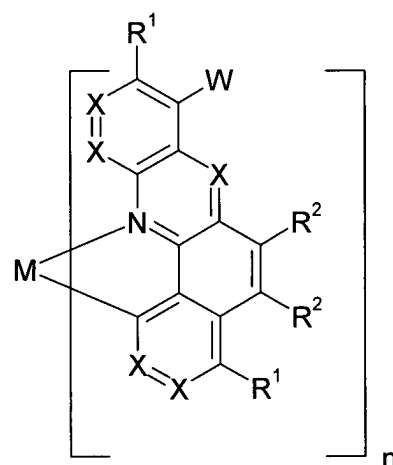
Formel (84)



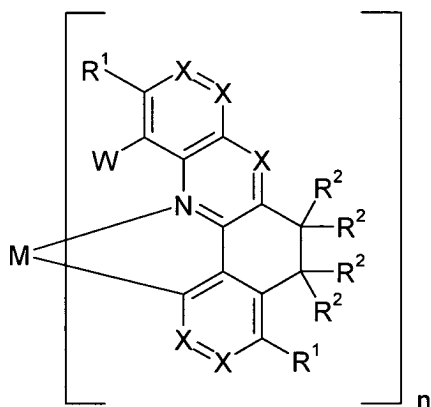
Formel (85)



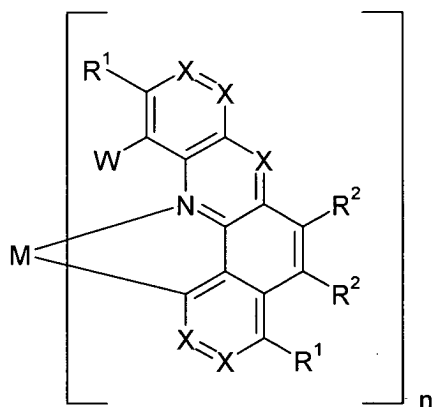
Formel (86)



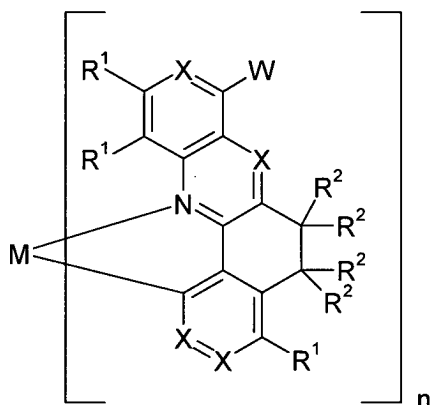
Formel (87)



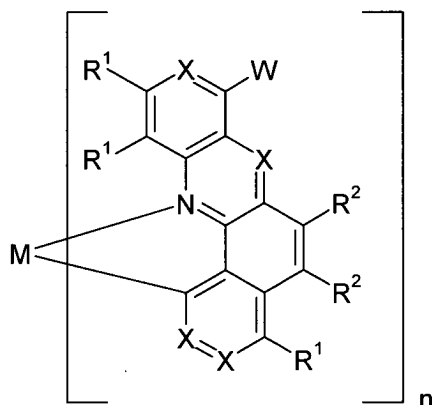
Formel (94)



Formel (95)



Formel (96)

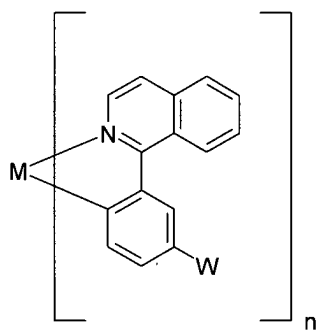


Formel (97)

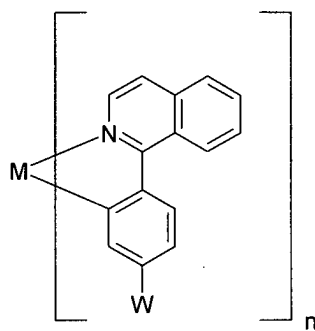
[0025] In einer insbesondere bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung ist X gleich CR¹.

[0026] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung ist R¹ gleich oder verschieden bei jedem Auftreten H, D, F, Cl, Br, I, N(R²)₂, CN, NO₂, eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine geradkettige Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R² substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH₂-Gruppen durch R²C=CR², C≡C, Si(R²)₂, Ge(R²)₂, Sn(R²)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR², P(=O)(R²), SO, SO₂, NR², O, S oder CONR² ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch D, F, Cl, Br, I, CN oder NO₂ ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R² substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R² substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R² substituiert sein kann, oder eine Kombination aus zwei oder mehr dieser Gruppen; dabei können zwei oder mehr Reste R¹ auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden.

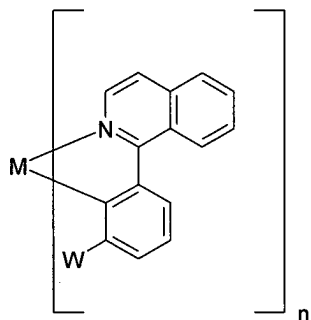
[0027] In einer weiteren ganz bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung sind ist die Teilstruktur M(L)_n der Verbindungen der Formel (1) ausgewählt aus den Formeln (98) bis (109).



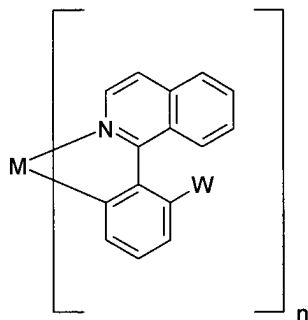
Formel (98)



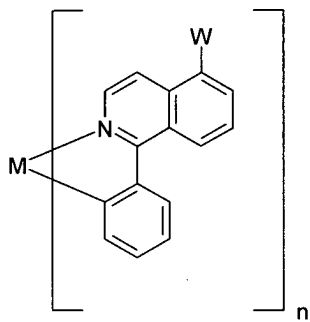
Formel (99)



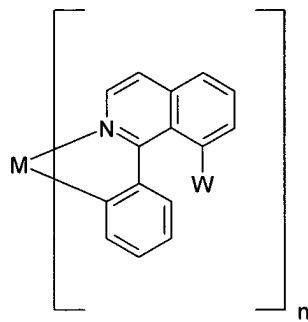
Formel (99a)



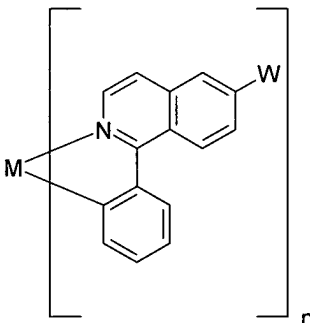
Formel (99b)



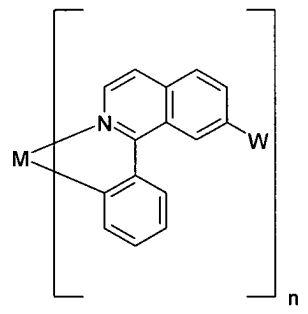
Formel (100)



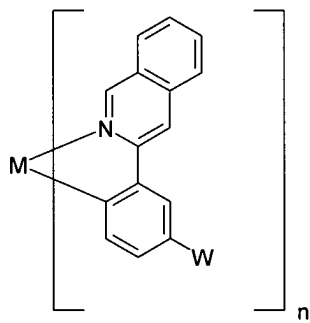
Formel (101)



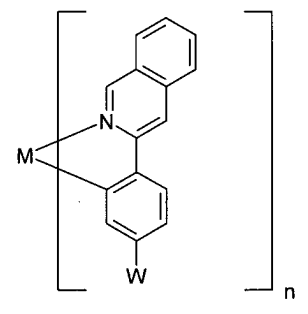
Formel (101a)



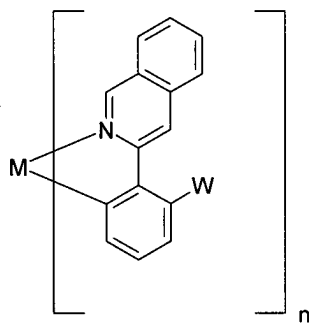
Formel (101b)



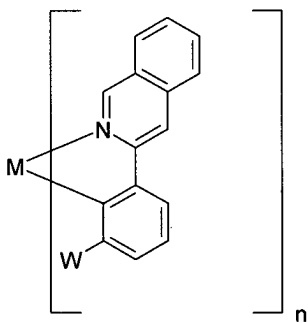
Formel (102)



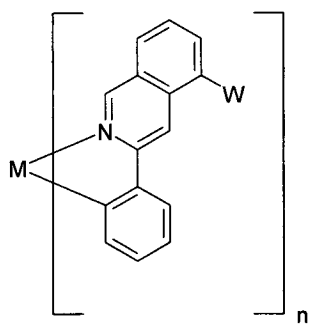
Formel (103)



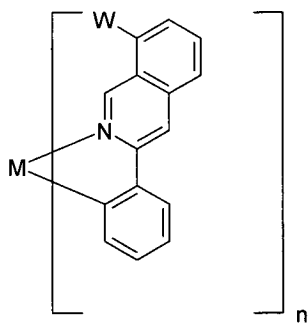
Formel (103a)



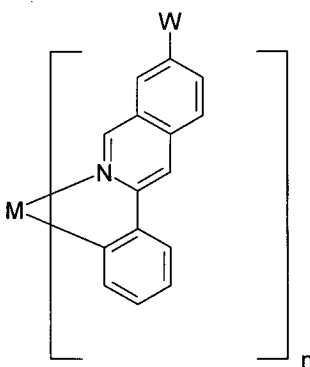
Formel (103b)



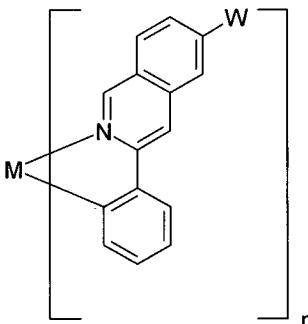
Formel (104)



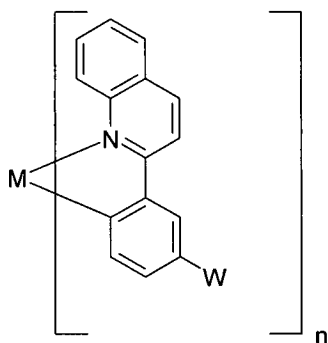
Formel (105)



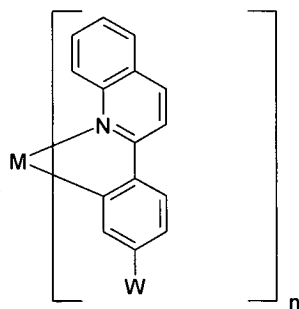
Formel (105a)



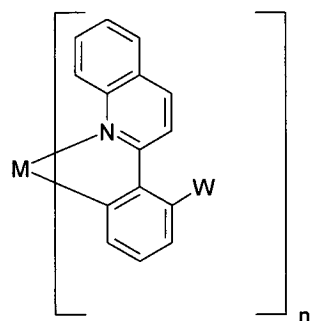
Formel (105b)



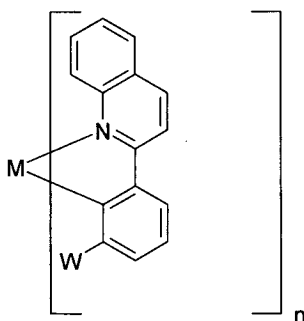
Formel (106)



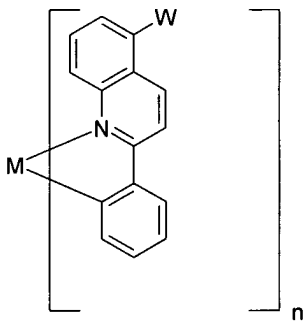
Formel (107)



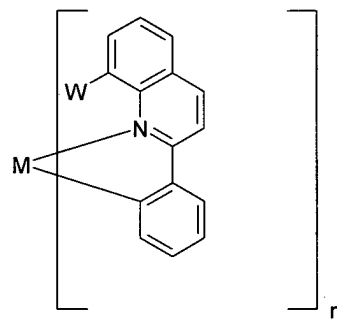
Formel (107a)



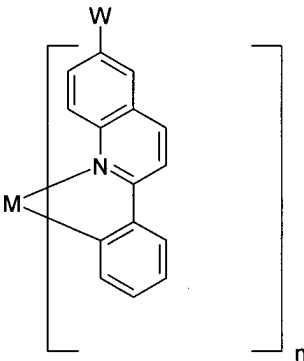
Formel (107b)



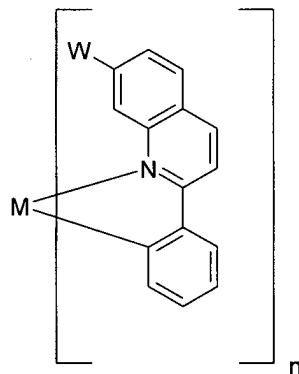
Formel (108)



Formel (109)



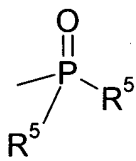
Formel (109a)



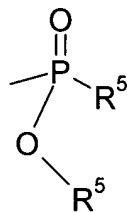
Formel (109b)

[0028] Ganz besonders bevorzugt sind hierbei die Formeln (98), (99), (100), (101), (101a), (101b), (102), (103), (104), (105), (105a), (105b), (106), (107), (108), (109), (109a) und (109b). Weiterhin ganz besonders bevorzugt sind die Formeln (98), (99), (100), (101), (102), (103), (104), (105), (106), (107), (108) und (109). Insbesondere bevorzugt sind dabei die Formeln (98) und (99).

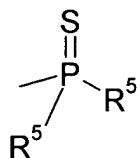
[0029] In einer bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung ist der Rest W ausgewählt aus den Resten der Formeln (110) bis (115).



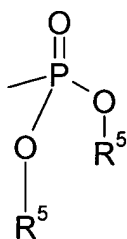
Formel (110)



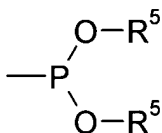
Formel (111)



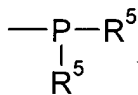
Formel (112)



Formel (113)



Formel (114)



Formel (115)

wobei

R^5 ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten H, D, eine geradkettige Alkyl- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine geradkettige Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^2 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen durch $\text{R}^2\text{C}=\text{CR}^2$, $\text{C}\equiv\text{C}$, $\text{Si}(\text{R}^2)_2$, $\text{Ge}(\text{R}^2)_2$, $\text{Sn}(\text{R}^2)_2$, $\text{C}=\text{O}$, $\text{C}=\text{S}$, $\text{C}=\text{Se}$, $\text{C}=\text{NR}^2$, $\text{P}(\text{=O})(\text{R}^2)$, SO , SO_2 , NR^2 , O , S oder CONR^2 ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch D, F, Cl, Br, I, CN oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Kombination aus zwei oder mehr dieser Gruppen; dabei können zwei oder mehr Reste R^1 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden und der Bindungsstrich die gleiche Bedeutung wie an jeder anderen Stelle innerhalb der vorliegenden Erfindung hat. Er kennzeichnet die Bindung des Restes an den Liganden.

[0030] In einer ganz bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung ist der Rest W gleich der Formel (110).

[0031] In einer bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung ist der Rest R^5 gleich oder verschieden bei jedem Auftreten H, D, eine geradkettige Alkylgruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine geradkettige Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynylgruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^2 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen durch $\text{R}^2\text{C}=\text{CR}^2$, $\text{C}\equiv\text{C}$, $\text{Si}(\text{R}^2)_2$, $\text{Ge}(\text{R}^2)_2$, $\text{Sn}(\text{R}^2)_2$, $\text{C}=\text{O}$, $\text{C}=\text{S}$, $\text{C}=\text{Se}$, $\text{C}=\text{NR}^2$, $\text{P}(\text{=O})(\text{R}^2)$, SO , SO_2 , NR^2 , O , S oder CONR^2 ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch D, F, Cl, Br, I, CN oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Kombination aus zwei oder mehr dieser Gruppen; dabei können zwei oder mehr Reste R^1 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden und

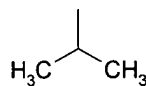
In einer ganz bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung ist der Rest R^5 ausgewählt aus den Formeln (116) bis (286), wobei die angegebenen Formeln ihrerseits mit einem oder mehreren Resten R^3 substituiert sein können, die bei jedem Auftreten gleich oder verschieden sein können.



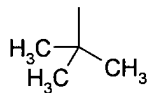
Formel (116)



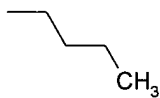
Formel (117)



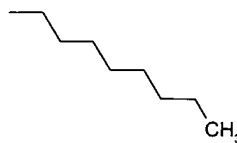
Formel (118)



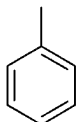
Formel (119)



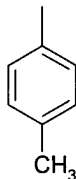
Formel (120)



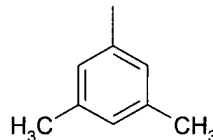
Formel (121)



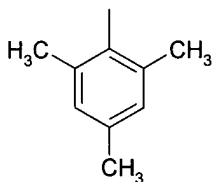
Formel (122)



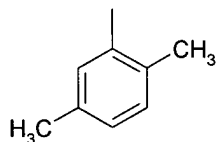
Formel (123)



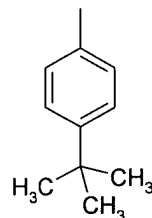
Formel (124)



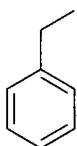
Formel (125)



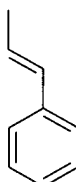
Formel (126)



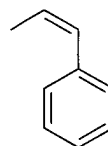
Formel (127)



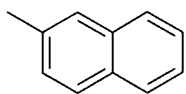
Formel (128)



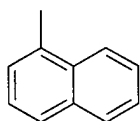
Formel (129)



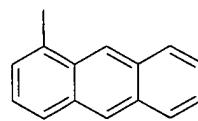
Formel (130)



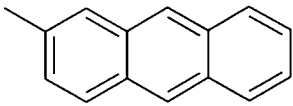
Formel (131)



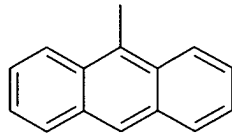
Formel (132)



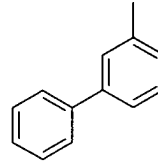
Formel (133)



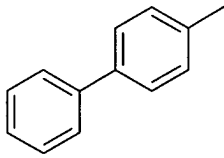
Formel (134)



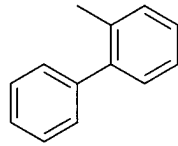
Formel (135)



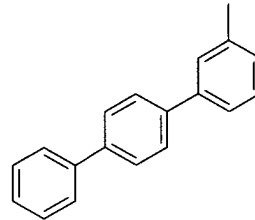
Formel (136)



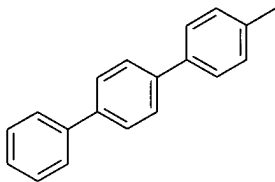
Formel (137)



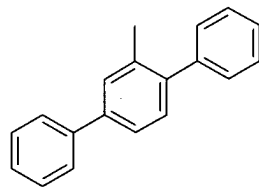
Formel (138)



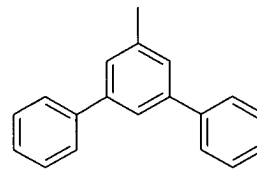
Formel (139)



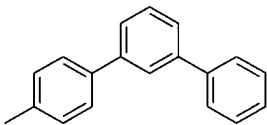
Formel (140)



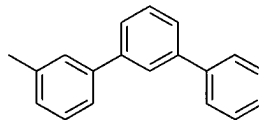
Formel (141)



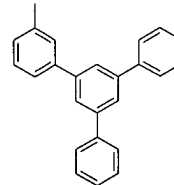
Formel (142)



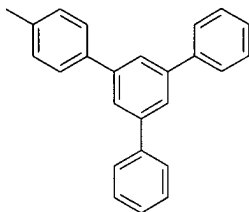
Formel (143)



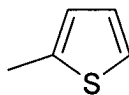
Formel (144)



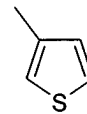
Formel (145)



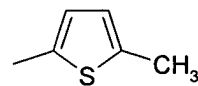
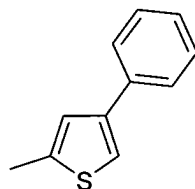
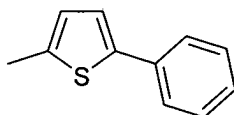
Formel (146)



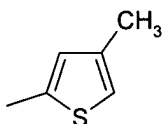
Formel (147)



Formel (148)



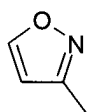
Formel (149)



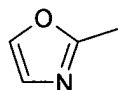
Formel (152)



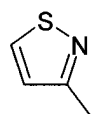
Formel (155)



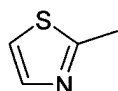
Formel (158)



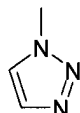
Formel (161)



Formel (164)

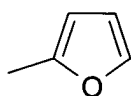


Formel (167)

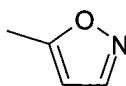


Formel (170)

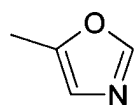
Formel (150)



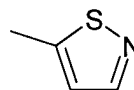
Formel (153)



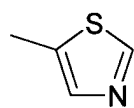
Formel (156)



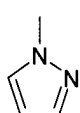
Formel (159)



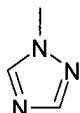
Formel (162)



Formel (165)

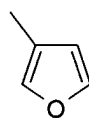


Formel (168)

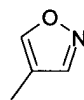


Formel (171)

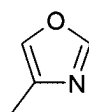
Formel (151)



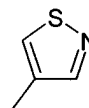
Formel (154)



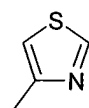
Formel (157)



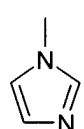
Formel (160)



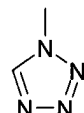
Formel (163)



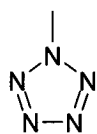
Formel (166)



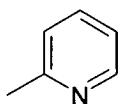
Formel (169)



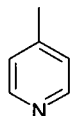
Formel (172)



Formel (173)



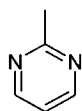
Formel (174)



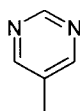
Formel (175)



Formel (176)



Formel (177)



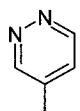
Formel (178)



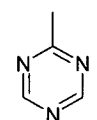
Formel (179)



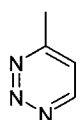
Formel (180)



Formel (181)



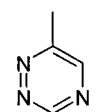
Formel (182)



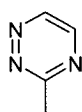
Formel (183)



Formel (184)



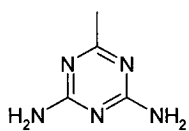
Formel (185)



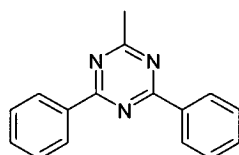
Formel (186)



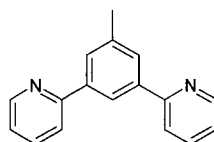
Formel (187)



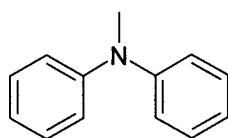
Formel (188)



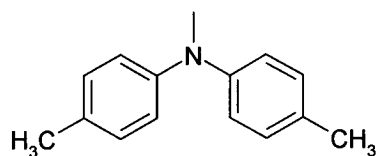
Formel (189)



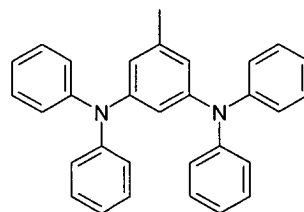
Formel (190)



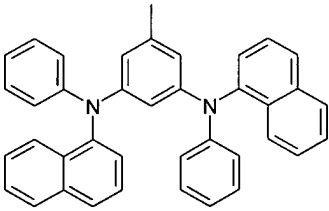
Formel (191)



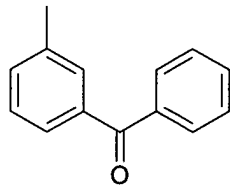
Formel (192)



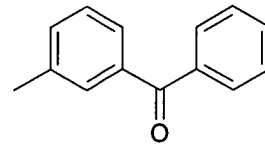
Formel (193)



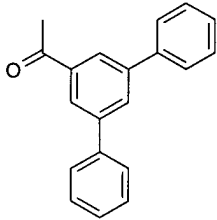
Formel (194)



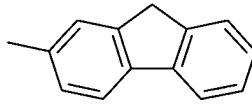
Formel (195)



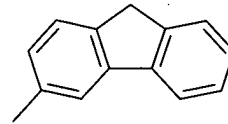
Formel (196)



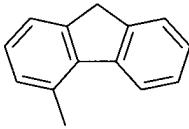
Formel (197)



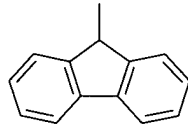
Formel (198)



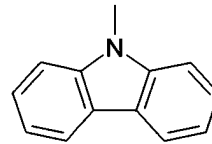
Formel (199)



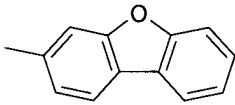
Formel (200)



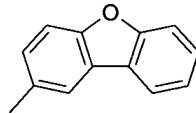
Formel (201)



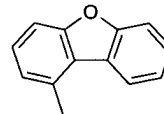
Formel (202)



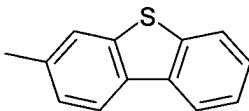
Formel (203)



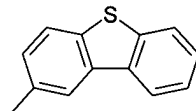
Formel (204)



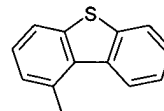
Formel (205)



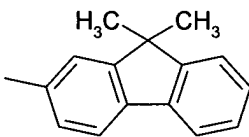
Formel (206)



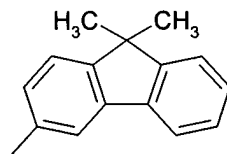
Formel (207)



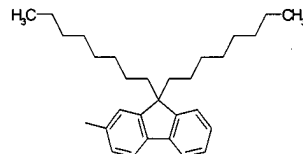
Formel (208)



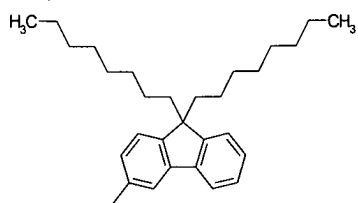
Formel (209)



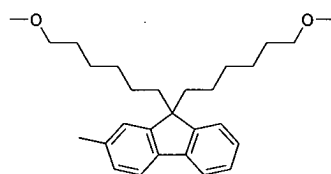
Formel (210)



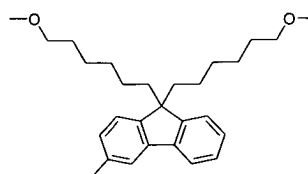
Formel (211)



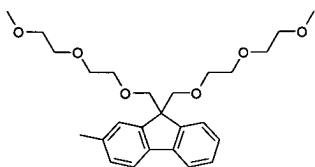
Formel (212)



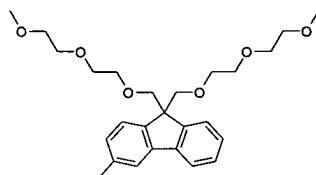
Formel (213)



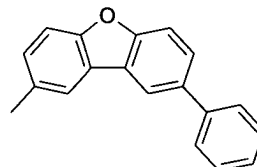
Formel (214)



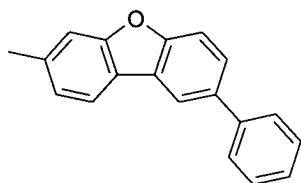
Formel (215)



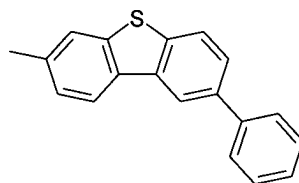
Formel (216)



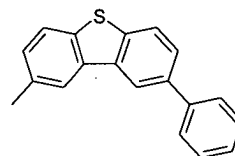
Formel (217)



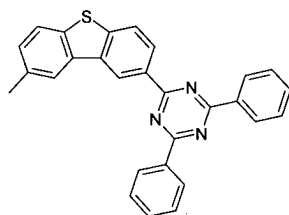
Formel (218)



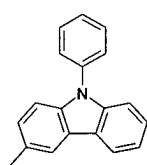
Formel (219)



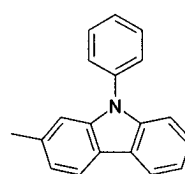
Formel (220)



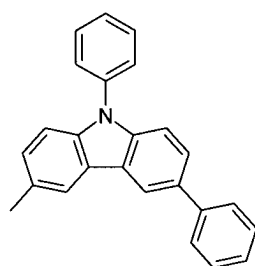
Formel (221)



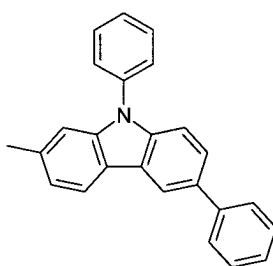
Formel (222)



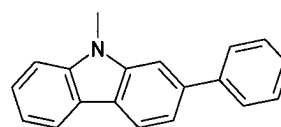
Formel (223)



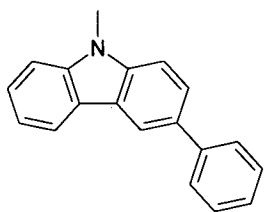
Formel (224)



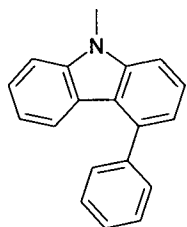
Formel (225)



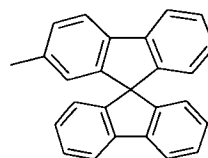
Formel (226)



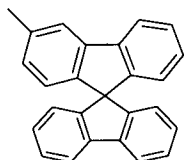
Formel (227)



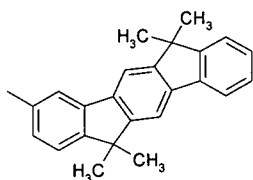
Formel (228)



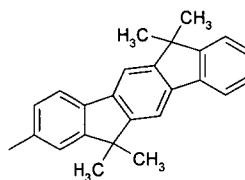
Formel (229)



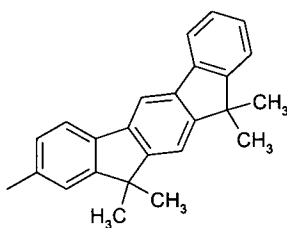
Formel (230)



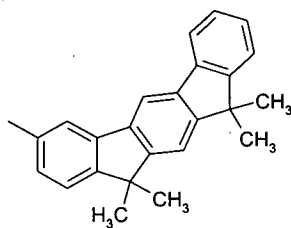
Formel (231)



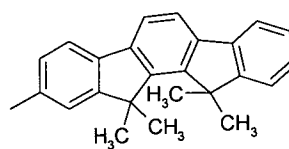
Formel (232)



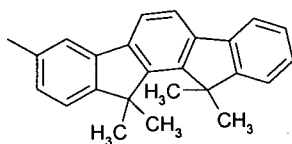
Formel (233)



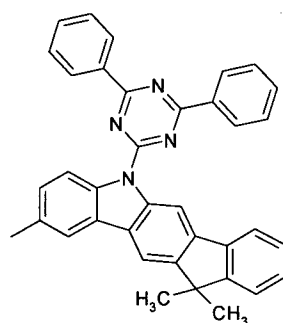
Formel (234)



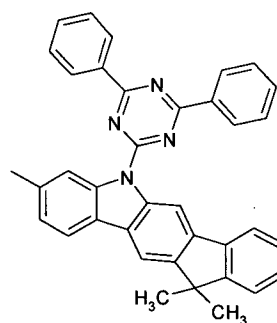
Formel (235)



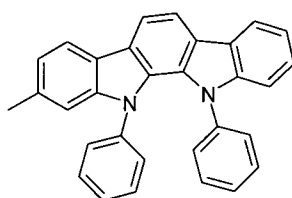
Formel (236)



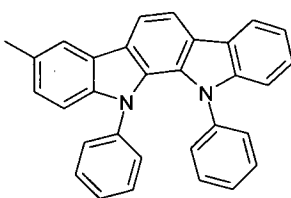
Formel (237)



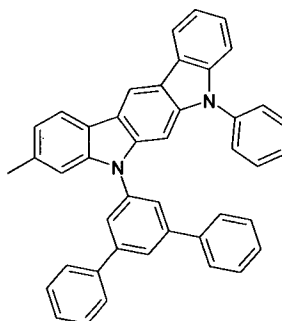
Formel (238)



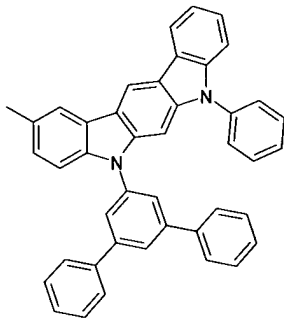
Formel (239)



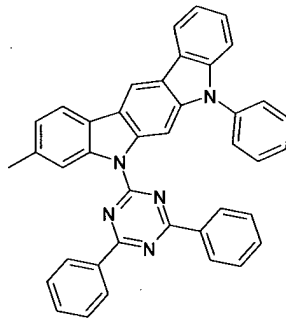
Formel (240)



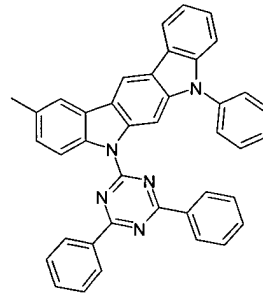
Formel (241)



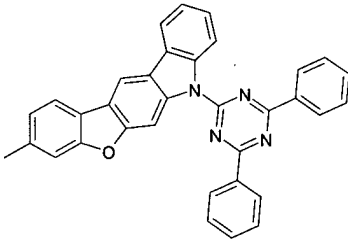
Formel (242)



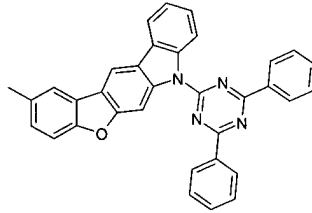
Formel (243)



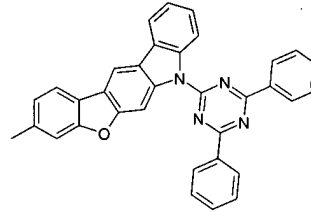
Formel (244)



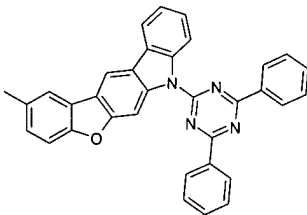
Formel (245)



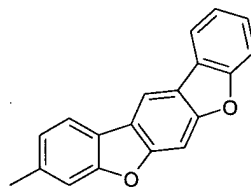
Formel (246)



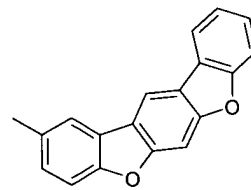
Formel (247)



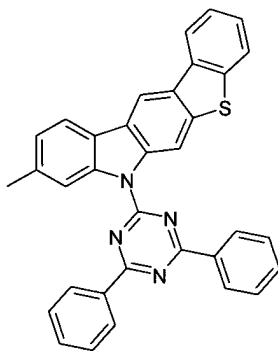
Formel (248)



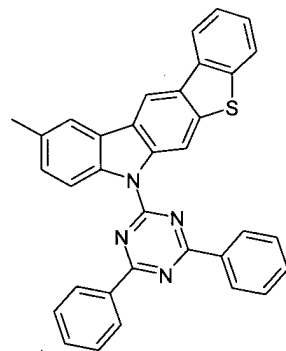
Formel (249)



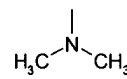
Formel (250)



Formel (251)



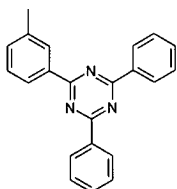
Formel (252)



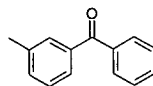
Formel (253)



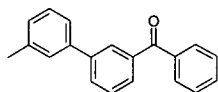
Formel (254)



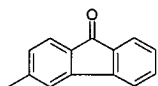
Formel (255)



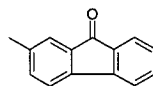
Formel (256)



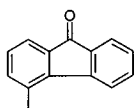
Formel (257)



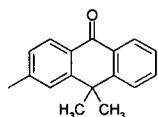
Formel (258)



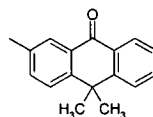
Formel (259)



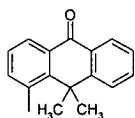
Formel (260)



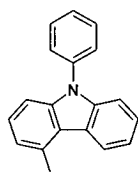
Formel (261)



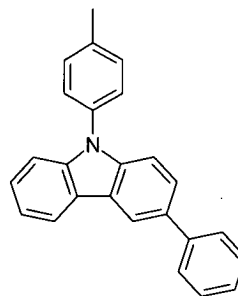
Formel (262)



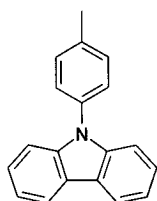
Formel (263)



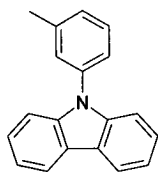
Formel (264)



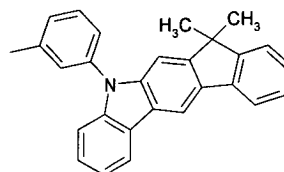
Formel (265)



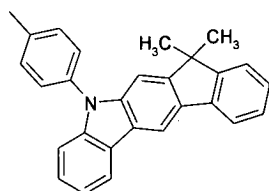
Formel (266)



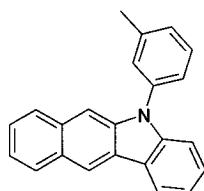
Formel (267)



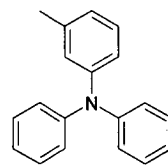
Formel (268)



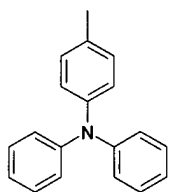
Formel (269)



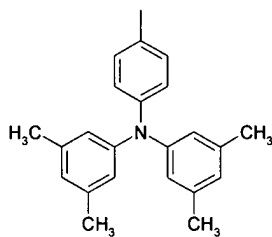
Formel (270)



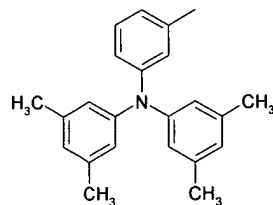
Formel (271)



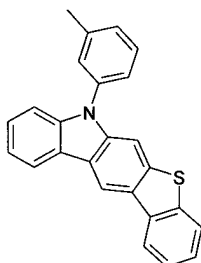
Formel (272)



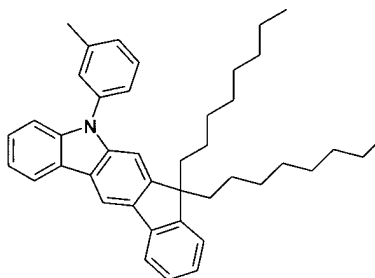
Formel (273)



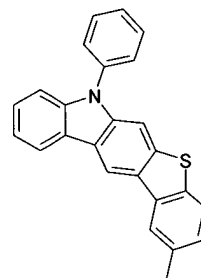
Formel (274)



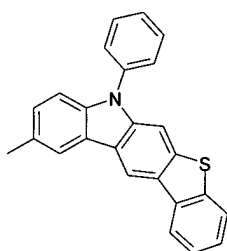
Formel (275)



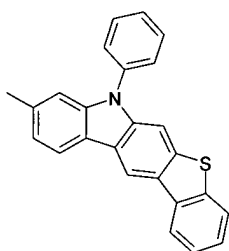
Formel (276)



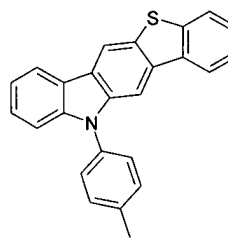
Formel (277)



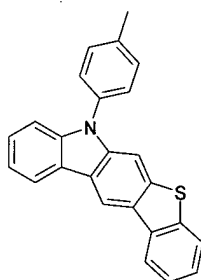
Formel (278)



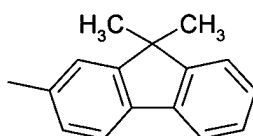
Formel (279)



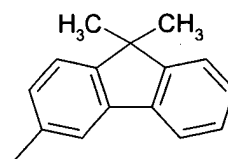
Formel (280)



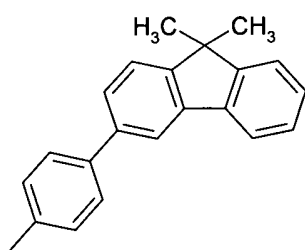
Formel (281)



Formel (282)



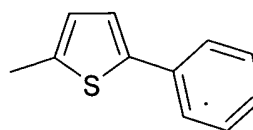
Formel (283)



Formel (284)



Formel (285)



Formel (286)

[0032] 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 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.

[0033] Ein aromatisches Ringsystem im Sinne dieser Erfindung enthält 6 bis 60 C-Atome im Ringsystem. Ein heteroaromatisches Ringsystem im Sinne dieser Erfindung enthält 2 bis 60 C-Atome und mindestens ein Heteroatom im Ringsystem, 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. 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% 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, Triarylamine, Diarylether, Stilben, etc. als aromatische Ringsysteme im Sinne dieser Erfindung verstanden werden, und ebenso Systeme, in denen zwei oder mehrere Arylgruppen beispielsweise durch eine lineare oder cyclische Alkylgruppe oder durch eine Silylgruppe unterbrochen sind.

[0034] Unter einer cyclischen Alkyl Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe im Sinne dieser Erfindung wird eine monocyclische, eine bicyclische oder eine polycyclische Gruppe verstanden.

[0035] Im Rahmen der vorliegenden Erfindung werden unter einer C_1 - bis C_{40} -Alkylgruppe, in der auch einzelne H-Atome oder CH_2 -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_1 - bis C_{40} -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, Dihydropyren, Tetrahydropyren, cis- oder trans-Indenofluoren, cis- oder trans-Monobenzoindenofluoren, cis- oder trans-Dibenzoindenofluoren, 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, 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.

[0036] Die Verbindungen gemäß Formel (1) können elektrisch geladen oder ungeladen sein. In einer bevorzugten Ausführungsform sind die Verbindungen der Formel (1) elektrisch neutral. 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.

[0037] Bevorzugt sind weiterhin Verbindungen gemäß Formel (1), dadurch gekennzeichnet, dass die Summe der Valenzelektronen um das Metallatom für Platin und Palladium 16 und für Iridium oder Rhodium 18 beträgt. Diese Bevorzugung ist durch die besondere Stabilität dieser Metallkomplexe begründet.

[0038] In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung steht M für Iridium oder Platin. Besonders bevorzugt steht M für Iridium.

[0039] Wenn M für Platin oder Palladium steht, steht der Index n für 1 oder 2. Wenn der Index $n = 1$ ist, sind noch ein bidentater oder zwei monodentate Liganden L' , bevorzugt ein bidentater Ligand L' , an das Metall M koordiniert. Entsprechend ist für einen bidentaten Liganden L' der Index $m = 1$ und für zwei monodentate Liganden L' der Index $m = 2$. Wenn der Index $n = 2$ ist, ist der Index $m = 0$.

[0040] Wenn M für Iridium oder Rhodium steht, steht der Index n für 1, 2 oder 3, bevorzugt für 2 oder 3 und besonders bevorzugt für 3. Wenn der Index $n = 1$ ist, sind noch vier monodentate oder zwei bidentate oder ein bidentater und zwei monodentate oder ein tridentater und ein monodentater oder ein tetradentater Ligand L' , bevorzugt zwei bidentate Liganden L' , an das Metall koordiniert. Entsprechend ist der Index m, je nach Liganden L' , gleich 1, 2, 3 oder 4. Wenn der Index $n = 2$ ist, sind noch ein bidentater oder zwei monodentate Liganden L' , bevorzugt ein bidentater Ligand L' , an das Metall koordiniert. Entsprechend ist der Index m, je nach Liganden L' , gleich 1 oder 2. Wenn der Index $n = 3$ ist, ist der Index $m = 0$.

[0041] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform der Erfindung stehen entweder alle Symbole X gleich oder verschieden bei jedem Auftreten für CR^1 oder alle Symbole X stehen für N.

[0042] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform der Erfindung steht das Symbol Q gleich oder verschieden bei jedem Auftreten für $R^1C=CR^1$, $R^1C=N$, O oder NR^1 , besonders bevorzugt für $R^1C=CR^1$ und $R^1C=N$ und insbesondere bevorzugt für $R^1C=CR^1$.

[0043] Es ist besonders bevorzugt, wenn die oben genannten Bevorzugungen gleichzeitig gelten.

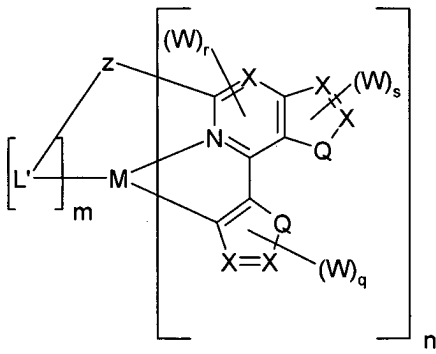
[0044] In einer besonders bevorzugten Ausführungsform der Erfindung gilt für die verwendeten Symbole: M ist Iridium oder Platin, besonders bevorzugt Iridium; X ist bei jedem Auftreten für alle Positionen, die nicht direkt an M gebunden sind, CR^1 ; Q ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten $R^1C=CR^1$ oder $R^1C=N$, besonders bevorzugt $R^1C=CR^1$;

[0045] Wobei die verwendeten Symbole und Indizes die oben genannten Bedeutungen aufweisen, insbesondere die oben genannten bevorzugten Bedeutungen.

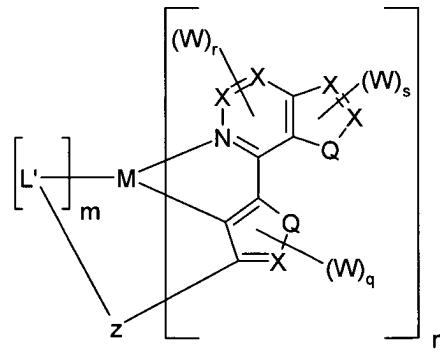
[0046] Die erfindungsgemäßen Verbindungen der Formel (1) können heteroleptische oder homoleptische Komplexe sein. Bevorzugte Ausführungsformen der vorliegenden Erfindung sind homoleptische Komplexe mit $m = 0$.

[0047] Im Fall heteroleptischer Komplexe der Formel (1) kann an einem der Reste R^1 auch eine verbrückende Einheit Z vorhanden sein, die den 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 eine verbrückende Einheit Z vorhanden, so dass die Liganden dreizähligen oder mehrzähligen oder polypodalen Charakter aufweisen. Es können auch zwei solcher verbrückenden Einheiten Z vorhanden sein. Dies führt zur Bildung makrocyclischer Liganden bzw. zur Bildung von Kryptaten.

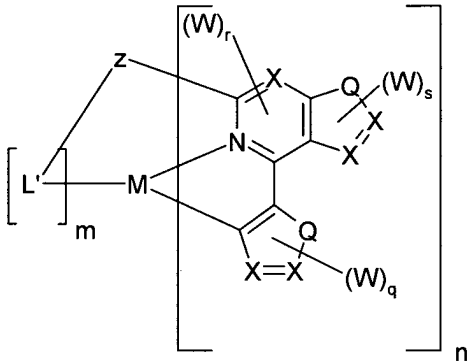
[0048] Bevorzugte Strukturen mit mehrzähligen Liganden bzw. mit polydentaten Liganden sind die Metallkomplexe der folgenden Formeln (287) bis (298),



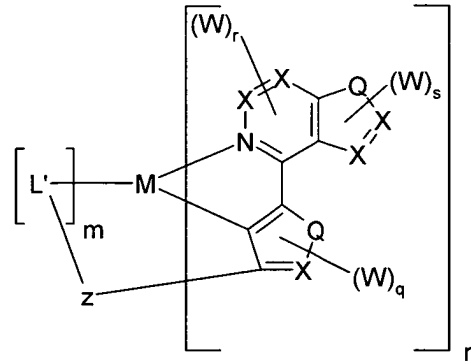
Formel (287)



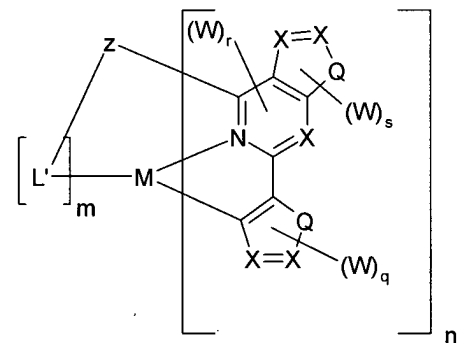
Formel (288)



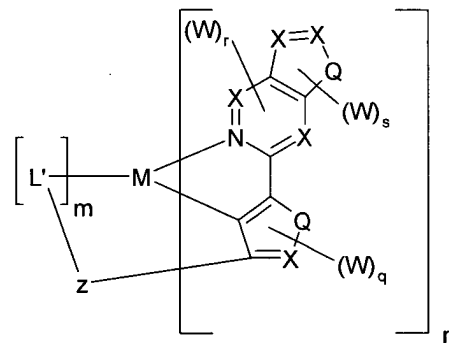
Formel (289)



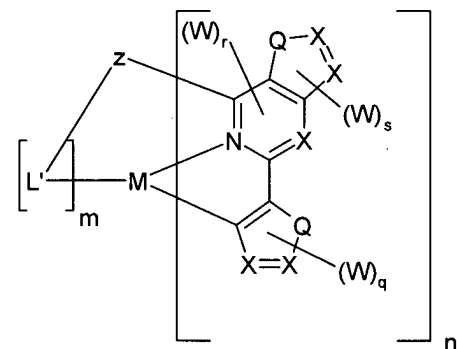
Formel (290)



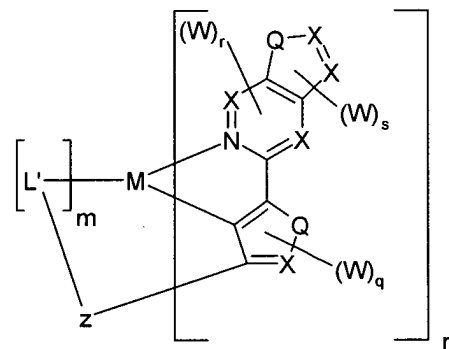
Formel (291)



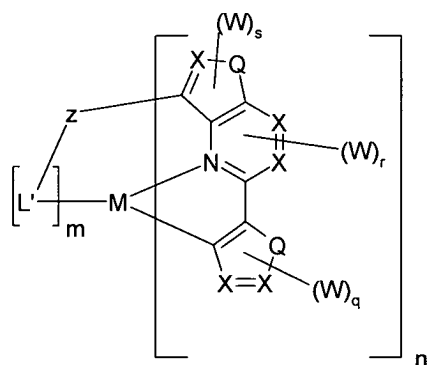
Formel (292)



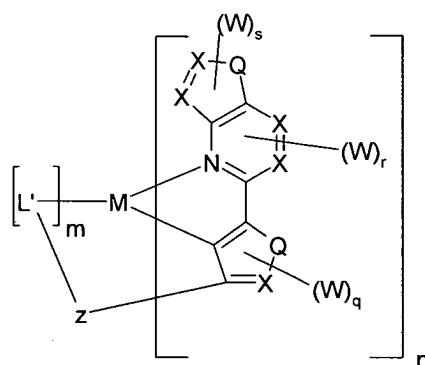
Formel (293)



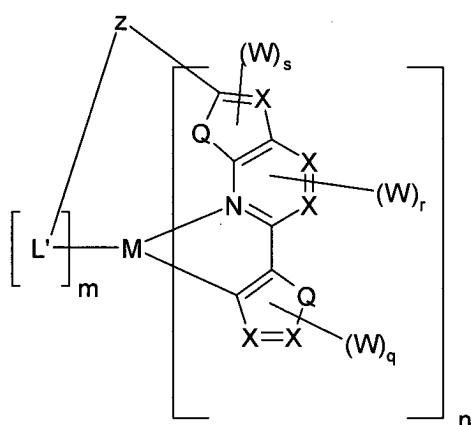
Formel (294)



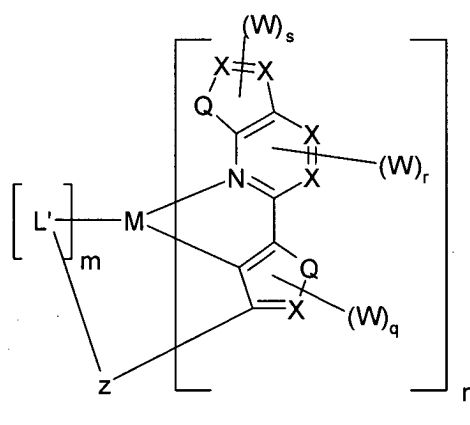
Formel (295)



Formel (296)



Formel (297)

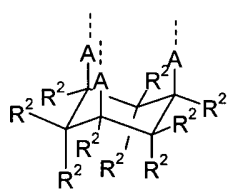


Formel (298)

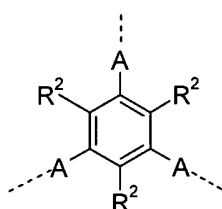
wobei die verwendeten Symbole die oben genannten Bedeutungen aufweisen und Z bevorzugt eine verbrückende Einheit darstellt, enthaltend 1 bis 80 Atome aus der dritten, vierten, fünften und/oder sechsten Hauptgruppe (Gruppe 13, 14, 15 oder 16 gemäß IUPAC) oder einen 3- bis 6-gliedrigen Homo- oder Heterocyclus, die die Teilliganden L miteinander oder L mit L' miteinander kovalent verbindet. Dabei kann die verbrückende Einheit Z auch unsymmetrisch aufgebaut sein, d. h. die Verknüpfung von Z zu L bzw. L' muss nicht identisch sein.

[0049] Die verbrückende Einheit Z kann neutral, einfach, zweifach oder dreifach negativ oder einfach, zweifach oder dreifach positiv geladen sein. Bevorzugt ist Z neutral oder einfach negativ oder einfach positiv geladen. Dabei wird die Ladung von Z bevorzugt so gewählt, dass insgesamt ein neutraler Komplex entsteht.

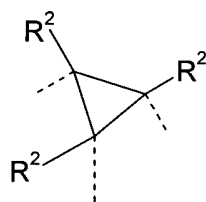
[0050] Wenn Z eine trivalente Gruppe ist, also drei Liganden L miteinander bzw. zwei Liganden L mit L' oder einen Liganden L mit zwei Liganden L' verbrückt, ist Z bevorzugt gleich oder verschieden bei jedem Auftreten gewählt aus der Gruppe bestehend aus B, B(R²)⁻, B(C(R²)₂)₃, (R²)B(C(R²)₂)₃⁻, B(O)₃, (R²)B(O)₃⁻, B(C(R²)₂C(R²)₂)₃, (R²)B(C(R²)₂C(R²)₂)₃⁻, B(C(R²)₂O)₃, (R²)B(C(R²)₂O)₃⁻, B(OC(R²)₂)₃, (R²)B(OC(R²)₂)₃⁻, C(R²), CO⁻, CN(R²)₂, (R²)C(C(R²)₂)₃, (R²)C(O)₃, (R²)C(C(R²)₂C(R²)₂)₃, (R²)C(C(R²)₂O)₃, (R²)C(OC(R²)₂)₃, (R²)C(Si(R²)₂)₃, (R²)C(Si(R²)₂C(R²)₂)₃, (R²)C(C(R²)₂Si(R²)₂)₃, (R²)C(Si(R²)₂Si(R²)₂)₃, Si(R²), (R²)Si(C(R²)₂)₃, (R²)Si(O)₃, (R²)Si(C(R²)₂C(R²)₂)₃, (R²)Si(OC(R²)₂)₃, (R²)Si(C(R²)₂O)₃, (R²)Si(Si(R²)₂)₃, (R²)Si(Si(R²)₂C(R²)₂)₃, (R²)Si(C(R²)₂Si(R²)₂)₃, (R²)Si(Si(R²)₂Si(R²)₂)₃, N, NO, N(R²)⁺, N(C(R²)₂)₃, (R²)N(C(R²)₂)₃⁺, N(C=O)₃, N(C(R²)₂C(R²)₂)₃, (R²)N(C(R²)₂C(R²)₂)₃⁺, P, P(R²)⁺, PO, PS, PSe, PTe, P(O)₃, PO(O)₃, P(OC(R²)₂)₃, PO(OC(R²)₂)₃, P(C(R²)₂)₃, P(R²)(C(R²)₂)₃⁺, PO(C(R²)₂)₃, P(C(R²)₂C(R²)₂)₃, P(R²)(C(R²)₂C(R²)₂)₃⁺, PO(C(R²)₂C(R²)₂)₃, S⁺, S(C(R²)₂)₃⁺, S(C(R²)₂C(R²)₂)₃⁺, oder eine Einheit gemäß Formel (299), (300), (301) oder (302),



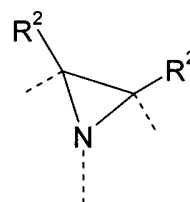
Formel (299)



Formel (300)



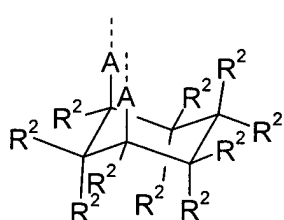
Formel (301)



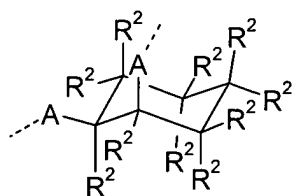
Formel (302)

wobei die gestrichelten Bindungen jeweils die Bindung zu den Teilliganden L bzw. L' andeuten und A gleich oder verschieden bei jedem Auftreten ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus einer Einfachbindung, O, S, S(=O), S(=O)₂, NR², PR², P(=O)R², P(=NR²), C(R²)₂, C(=O), C(=NR²), C(=C(R²)₂), Si(R²)₂ oder BR². Die weiteren verwendeten Symbole haben die oben genannten Bedeutungen.

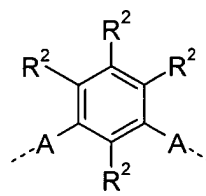
[0051] Wenn Z eine bivalente Gruppe ist, also zwei Liganden L miteinander bzw. einen Liganden L mit L' verbrückt, ist Z bevorzugt gleich oder verschieden bei jedem Auftreten gewählt aus der Gruppe bestehend aus BR², B(R²)₂, C(R²)₂, C(=O), Si(R²)₂, NR², PR², P(R²)₂⁺, P(=O)(R²), P(=S)(R²), AsR², As(=O)(R²), As(=S)(R²), O, S, Se, oder eine Einheit gemäß Formel (303) bis (311),



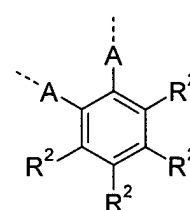
Formel (303)



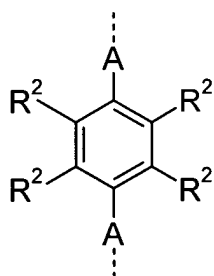
Formel (304)



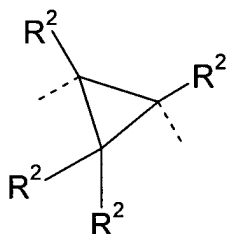
Formel (305)



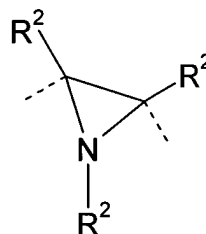
Formel (306)



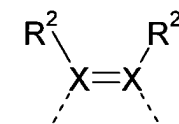
Formel (307)



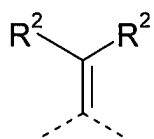
Formel (308)



Formel (309)



Formel (310)



Formel (311)

wobei die gestrichelten Bindungen jeweils die Bindung zu den Teilliganden L bzw. L' andeuten und die weiteren verwendeten Symbole jeweils die oben aufgeführten Bedeutungen haben.

[0052] 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 Z an L gebunden sind.

[0053] 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 Koordinationsstellen auf. Wie oben beschrieben, können die Liganden L' auch über eine verbrückende Gruppe Z an L gebunden sein. Bevorzugte

neutrale, monodentate Liganden L' sind ausgewählt 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, 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.

[0054] Bevorzugte monoanionische, monodentate Liganden L' sind ausgewählt aus Hydrid, Deuterid, den Halogeniden F⁻, Cl⁻, Br⁻ und I⁻, Alkylacetyliden, wie z. B. Methyl-C≡C⁻, tert-Butyl-C≡C⁻, Arylacetyliden, wie z. B. Phenyl-C≡C⁻, 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 C₁-C₂₀-Alkylgruppen, besonders bevorzugt C₁-C₁₀-Alkylgruppen, ganz besonders bevorzugt C₁-C₄-Alkylgruppen. Unter einer Arylgruppe werden auch Heteroarylgruppen verstanden. Diese Gruppen sind wie oben definiert.

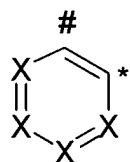
[0055] Bevorzugte di- bzw. trianionische Liganden sind O²⁻, S²⁻, Carbide, welche zu einer Koordination der Form R-C≡M führen, und Nitrene, welche zu einer Koordination der Form R-N=M führen, wobei R allgemein für einen Substituenten steht, oder N³⁻.

[0056] Bevorzugte neutrale oder mono- oder dianionische, bidentate oder höherdentate Liganden L' sind ausgewählt aus Diaminen, wie z. B. Ethylendiamin, N,N,N',N'-Tetramethylethylendiamin, 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], Diminen, 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-diphenylphosphinmethan, Bis-diphenylphosphinoethan, Bis(diphenylphosphino)propan, Bis(diphenylphosphino)butan, Bis(dimethylphosphino)methan, 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, Dibenzoylmethan, Bis(1,1,1-trifluoracetyl)methan, 3-Ketonaten abgeleitet von 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-Dimethylaminoalanin, Salicyliminaten abgeleitet von Salicyliminen, wie z. B. Methylsalicylimin, Ethylsalicylimin, Phenylsalicylimin, Dialkoholaten abgeleitet von Dialkoholen, wie z. B. Ethylenglykol, 1,3-Propylenglykol und Dithiolaten abgeleitet von Dithiolen, wie z. B. 1,2-Ethylendithiol, 1,3-Propylendithiol.

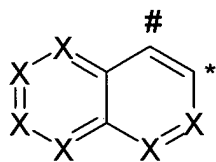
[0057] Bevorzugte tridentate Liganden sind Borste stickstoffhaltiger Heterocyclen, wie z. B. Tetrakis(1-imidazolyl)borat und Tetrakis(1-pyrazolyl)borat.

[0058] Besonders bevorzugt sind weiterhin bidentate monoanionische Liganden L', welche mit dem Metall einen cyclometallierten Fünfring oder Sechsring mit mindestens einer Metall-Kohlenstoff-Bindung aufweisen, insbesondere einen cyclometallierten Fünfring. Dies sind insbesondere Liganden, wie sie allgemein im Gebiet der phosphoreszierenden Metallkomplexe für organische Elektrolumineszenzvorrichtungen verwendet werden, also Liganden vom Typ Phenylpyridin, Naphthylpyridin, Phenylchinolin, Phenylisochinolin, etc., welche jeweils durch einen oder mehrere Reste R¹ bis R⁷ substituiert sein können. Dem Fachmann auf dem Gebiet der phosphoreszierenden Elektrolumineszenzvorrichtungen ist eine Vielzahl derartiger Liganden bekannt, und

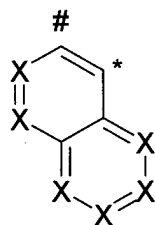
er kann ohne erfinderisches Zutun weitere derartige Liganden als Ligand L' für Verbindungen gemäß Formel (1) auswählen. Generell eignet sich dafür besonders die Kombination aus zwei Gruppen, wie sie durch die folgenden Formeln (312) bis (339) dargestellt sind, wobei eine Gruppe über ein neutrales Stickstoffatom oder ein Carbenatom bindet und die andere Gruppe über ein negativ geladenes Kohlenstoffatom oder ein negativ geladenes Stickstoffatom bindet. Der Ligand L' kann dann aus den Gruppen der Formeln (312) bis (339) gebildet werden, indem diese Gruppen jeweils an der durch # gekennzeichneten 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 Z an den Liganden L gebunden sein.



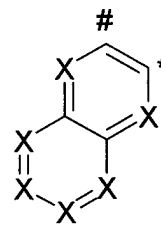
Formel (312)



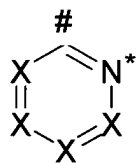
Formel (313)



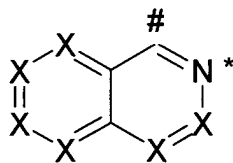
Formel (314)



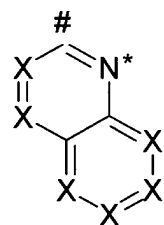
Formel (315)



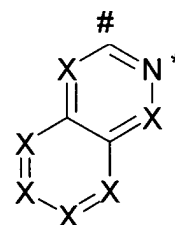
Formel (316)



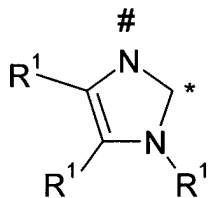
Formel (317)



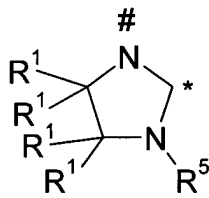
Formel (318)



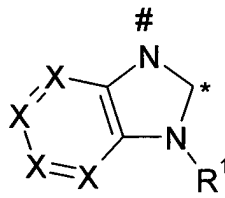
Formel (319)



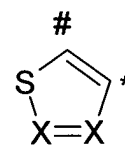
Formel (320)



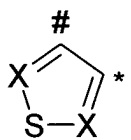
Formel (321)



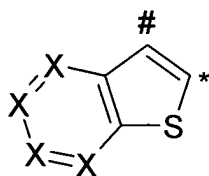
Formel (322)



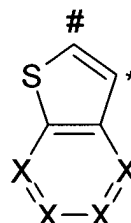
Formel (323)



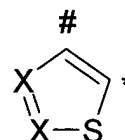
Formel (324)



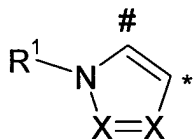
Formel (325)



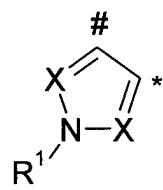
Formel (326)



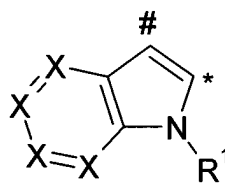
Formel (327)



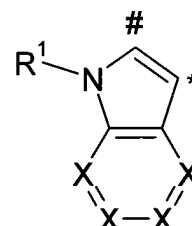
Formel (328)



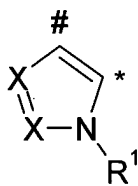
Formel (329)



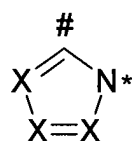
Formel (330)



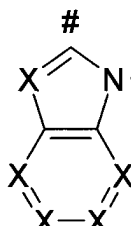
Formel (331)



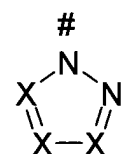
Formel (332)



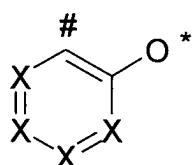
Formel (333)



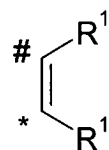
Formel (334)



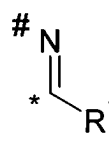
Formel (335)



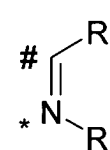
Formel (336)



Formel (337)



Formel (338)



Formel (339)

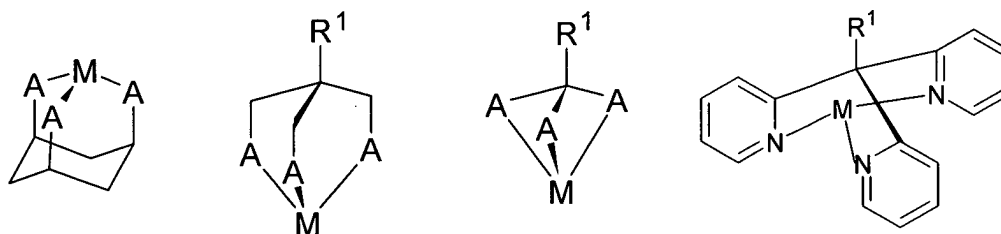
[0059] Dabei haben die verwendeten Symbole dieselbe Bedeutung wie oben beschrieben, und bevorzugt stehen maximal drei Symbole X in jeder Gruppe für N, besonders bevorzugt stehen maximal zwei Symbole X in jeder Gruppe für N, ganz besonders bevorzugt steht maximal ein Symbol X in jeder Gruppe für N. Insbesondere bevorzugt stehen alle Symbole X gleich oder verschieden bei jedem Auftreten für CR¹.

[0060] In einer besonders bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung werden zwei Fragmente eines Liganden L' der Formel (312) bis (339) derart über die Position # miteinander kombiniert, dass wenigstens eines der Fragmente ein Heteroatom an der Position * aufweist.

[0061] In einer ganz besonders bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung setzt sich der Ligand L' aus genau einem Fragment ohne Heteroatom aus der Liste der Formel (312) bis (339) und genau einem Fragment mit Heteroatom, bevorzugte einem Stickstoffatom, aus der Liste der Fragmente mit den Formeln (312) bis (339) zusammen.

[0062] Ebenfalls bevorzugte Liganden L' sind η^5 -Cyclopentadienyl, η^5 -Pentamethylcyclopentadienyl, η^6 -Benzol oder η^7 -Cycloheptatrienyl, welche jeweils durch einen oder mehrere Reste R¹ substituiert sein können.

[0063] Ebenfalls bevorzugte Liganden L' sind 1,3,5-cis-Cyclohexanderivate, insbesondere der Formel (340), 1,1,1-Tri(methylen)methanderivate, insbesondere der Formel (341) und 1,1,1-trisubstituierte Methane, insbesondere der Formel (342) und (343),



Formel (340)

Formel (341)

Formel (342)

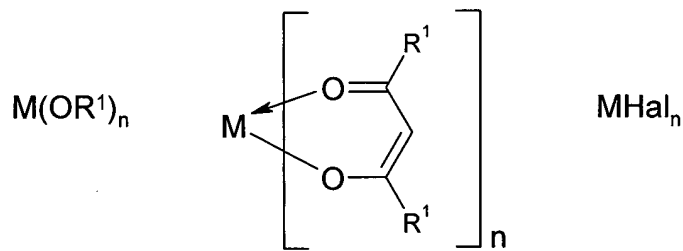
Formel (343)

wobei in den Formeln jeweils die Koordination an das Metall M dargestellt ist, R¹ die oben genannte Bedeutung hat und A, gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für O⁻, S⁻, COO⁻, P(R¹)₂ oder N(R¹)₂ steht.

[0064] Bevorzugte Reste R¹ in den oben aufgeführten Strukturen sind bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, D, F, Br, N(R²)₂, CN, B(OR²)₂, C(=O)R², P(=O)(R²)₂, einer geradkettigen Alkylgruppe mit 1 bis 10 C-Atomen oder einer geradkettigen Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 10 C-Atomen oder einer verzweigten oder cyclischen Alkyl-, Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 3 bis 10 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R² substituiert sein kann, wobei ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 14 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R² substituiert sein kann; dabei können mehrere Reste R¹ auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden. Besonders bevorzugte Reste R¹ sind bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, F, Br, CN, B(OR²)₂, einer geradkettigen Alkylgruppe mit 1 bis 6 C-Atomen, insbesondere Methyl, oder einer verzweigten oder cyclischen Alkylgruppe mit 3 bis 10 C-Atomen, insbesondere iso-Propyl oder tert-Butyl, wobei ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 12 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R² substituiert sein kann; dabei können mehrere Reste R¹ auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden.

[0065] Die erfindungsgemäßen Metallkomplexe sind prinzipiell durch verschiedene Verfahren darstellbar. Es haben sich jedoch die im Folgenden beschriebenen Verfahren als besonders geeignet herausgestellt.

[0066] 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 (344), mit Metallketoketonaten der Formel (345) oder mit Metallhalogeniden der Formel (346),



Formel (344)

Formel (345)

Formel (346)

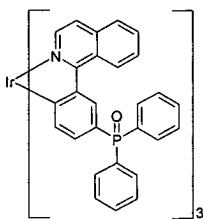
wobei die Symbole M, n und R¹ die oben angegebenen Bedeutungen haben und Hal = F, Cl, Br oder I ist.

[0067] 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 2004/085449 offenbart. Besonders geeignet ist [IrCl₂(acac)₂]⁻, beispielsweise Na[IrCl₂(acac)₂].

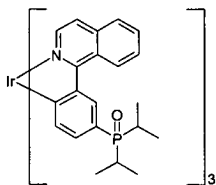
[0068] Die Synthese der Komplexe wird bevorzugt durchgeführt wie in WO 2002/060910 und in WO 2004/085449 beschrieben. Heteroleptische Komplexe können beispielsweise auch gemäß WO 2005/042548 synthetisiert werden. Dabei kann die Synthese beispielsweise auch thermisch, photochemisch und/oder durch Mikrowellenstrahlung aktiviert werden.

[0069] Durch diese Verfahren lassen sich die erfindungsgemäßen Verbindungen gemäß Formel (1) in hoher Reinheit, bevorzugt mehr als 99% (bestimmt mittels ¹H-NMR und/oder HPLC) erhalten.

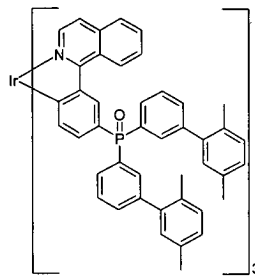
[0070] Mit den hier erläuterten Synthesemethoden lassen sich unter anderem die im Folgenden dargestellten erfindungsgemäßen Verbindungen der Formeln (347) bis (496) herstellen.



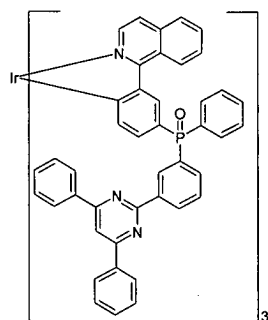
Formel (347)



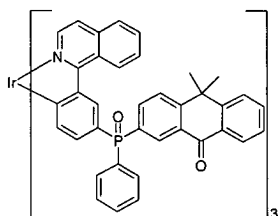
Formel (348)



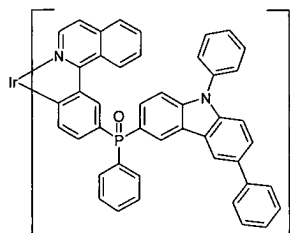
Formel (349)



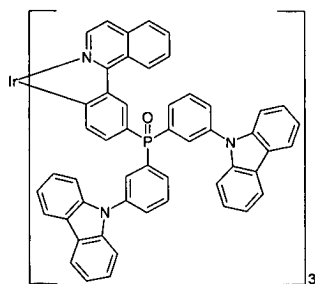
Formel (350)



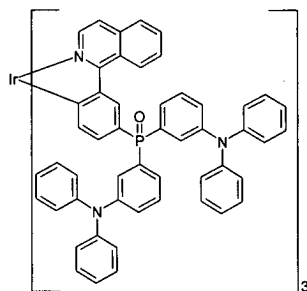
Formel (351)



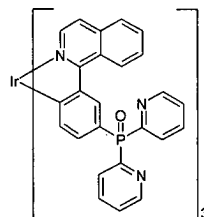
Formel (352)



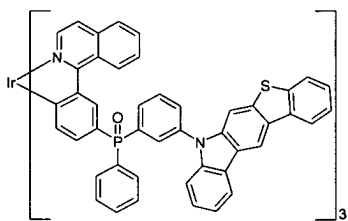
Formel (353)



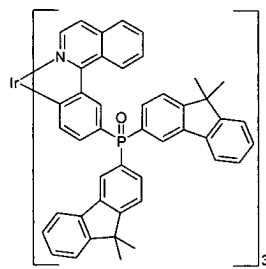
Formel (354)



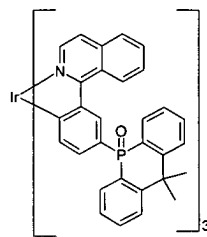
Formel (355)



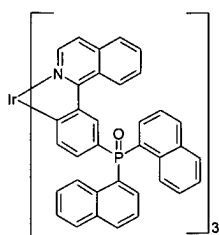
Formel (356)



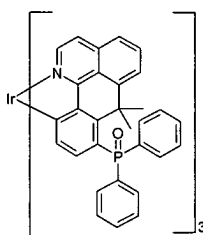
Formel (357)



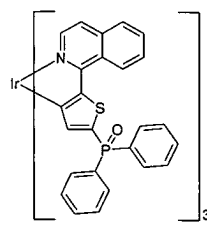
Formel (358)



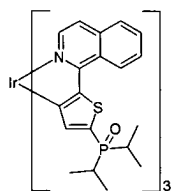
Formel (359)



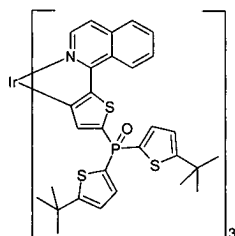
Formel (360)



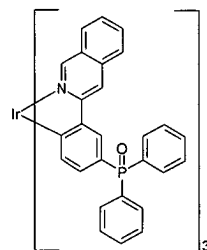
Formel (361)



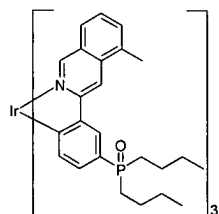
Formel (362)



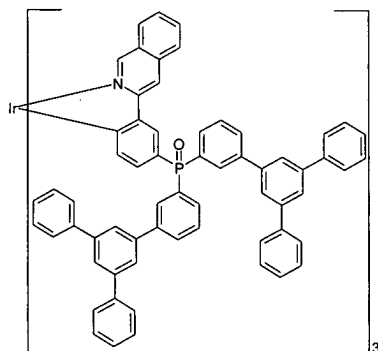
Formel (363)



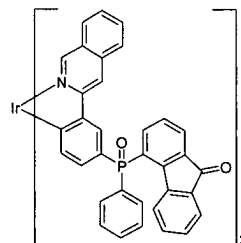
Formel (364)



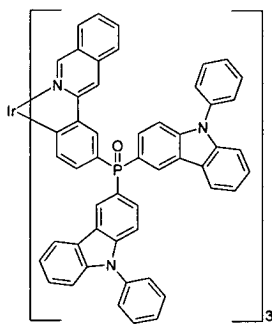
Formel (365)



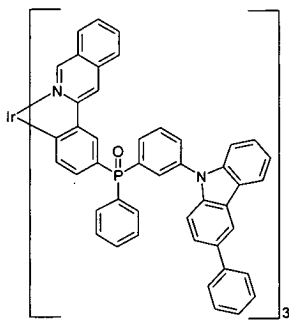
Formel (366)



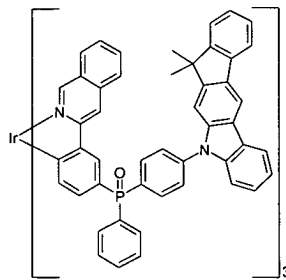
Formel (367)



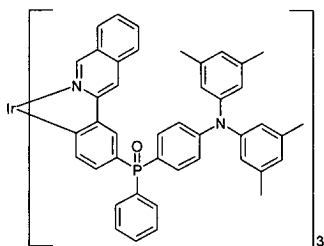
Formel (368)



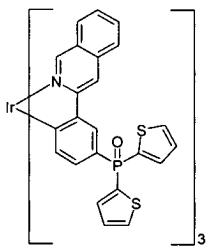
Formel (369)



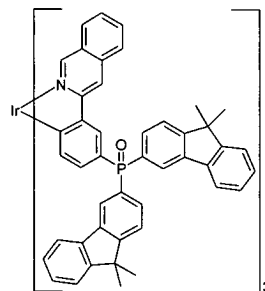
Formel (370)



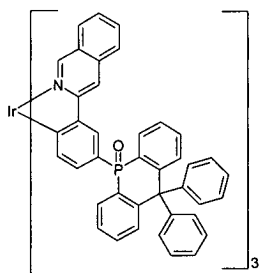
Formel (371)



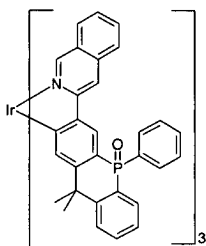
Formel (372)



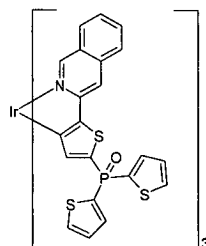
Formel (373)



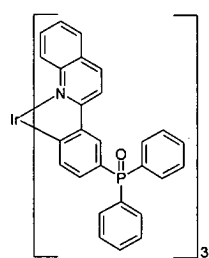
Formel (374)



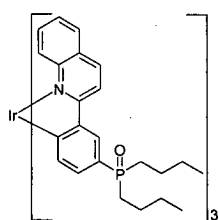
Formel (375)



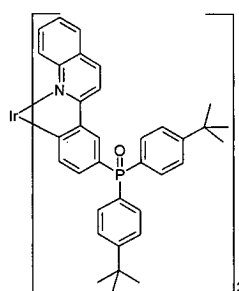
Formel (376)



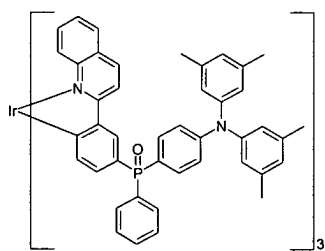
Formel (377)



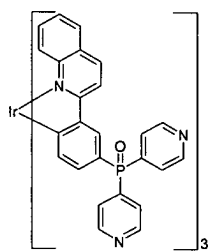
Formel (378)



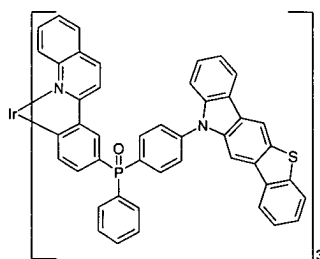
Formel (379)



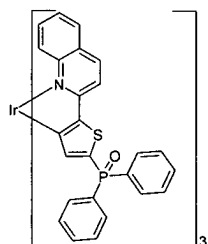
Formel (380)



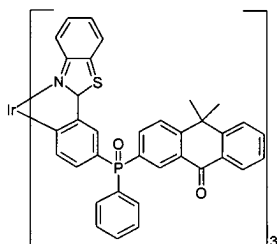
Formel (381)



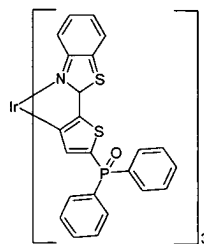
Formel (382)



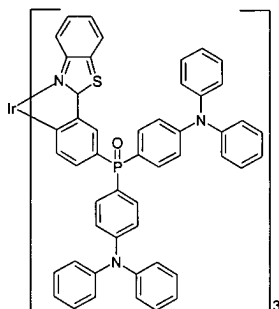
Formel (383)



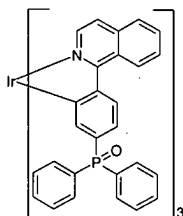
Formel (384)



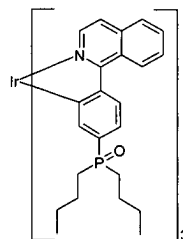
Formel (385)



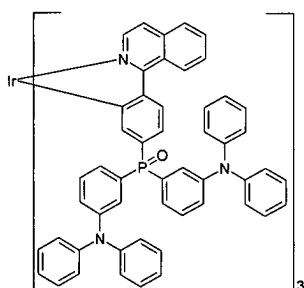
Formel (386)



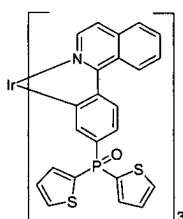
Formel (387)



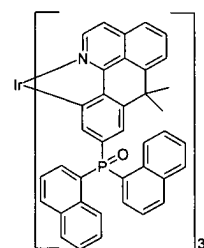
Formel (388)



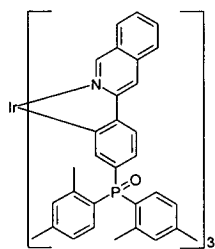
Formel (389)



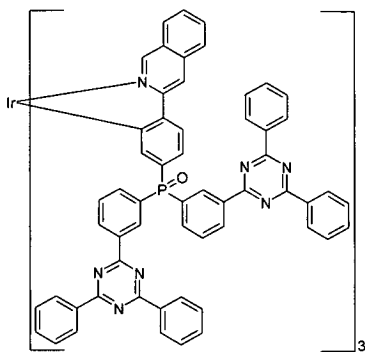
Formel (390)



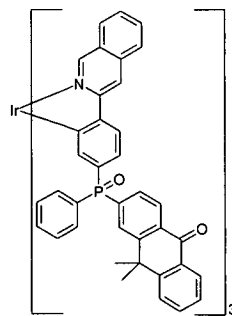
Formel (391)



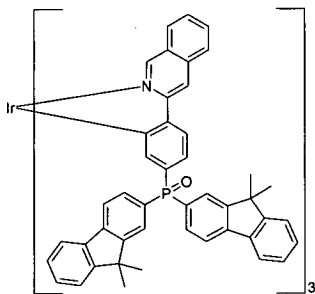
Formel (392)



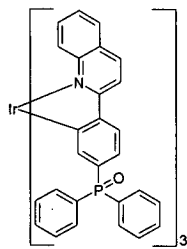
Formel (393)



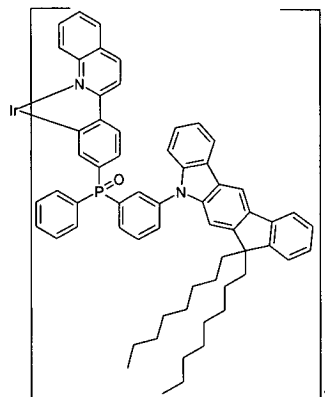
Formel (394)



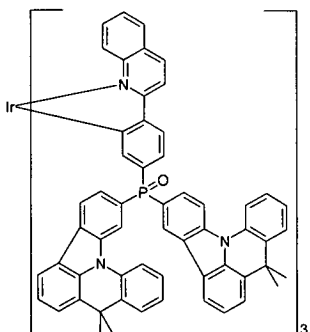
Formel (395)



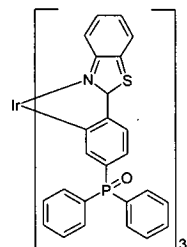
Formel (396)



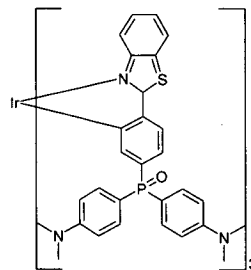
Formel (397)



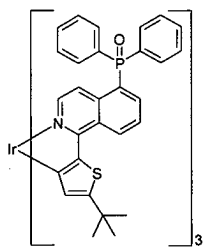
Formel (398)



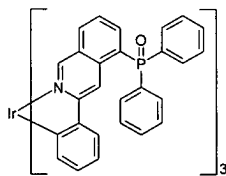
Formel (399)



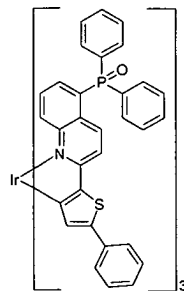
Formel (400)



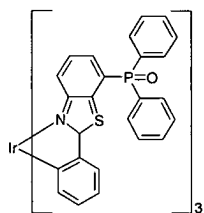
Formel (401)



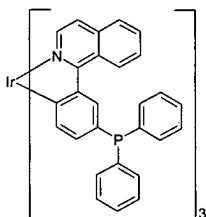
Formel (402)



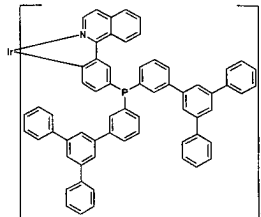
Formel (403)



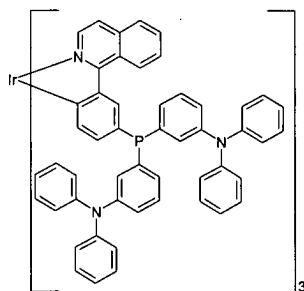
Formel (404)



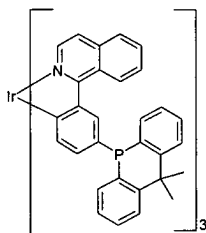
Formel (405)



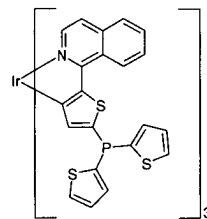
Formel (406)



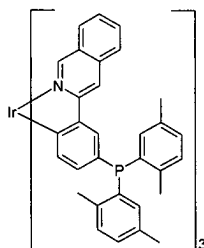
Formel (407)



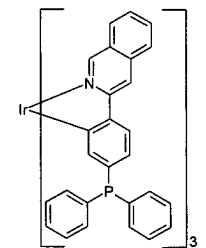
Formel (408)



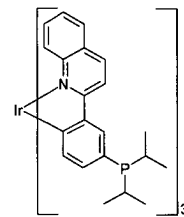
Formel (409)



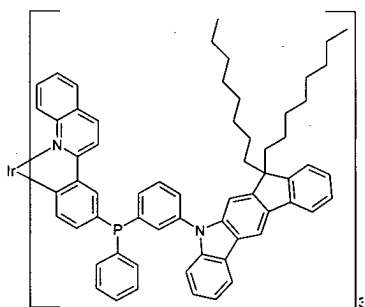
Formel (410)



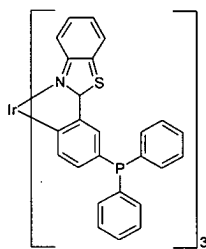
Formel (411)



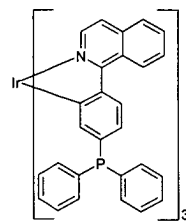
Formel (412)



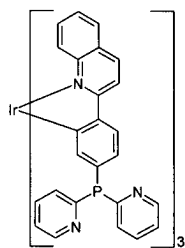
Formel (413)



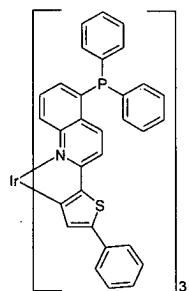
Formel (414)



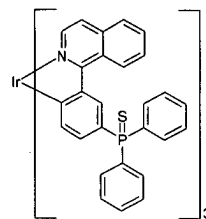
Formel (415)



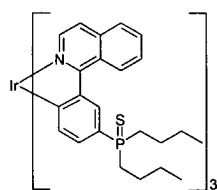
Formel (416)



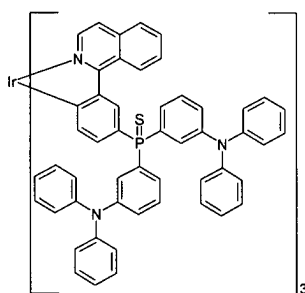
Formel (417)



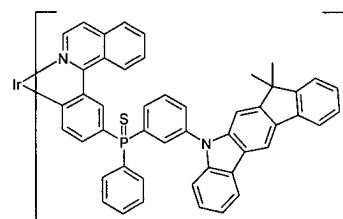
Formel (418)



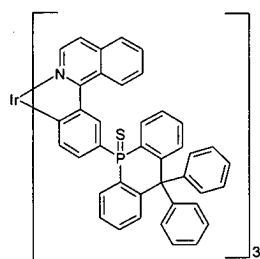
Formel (419)



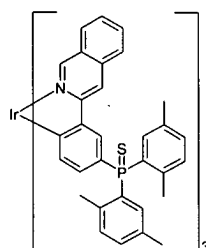
Formel (420)



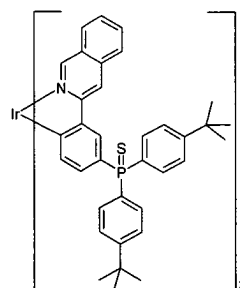
Formel (421)



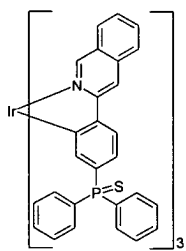
Formel (422)



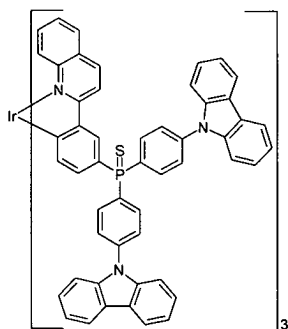
Formel (423)



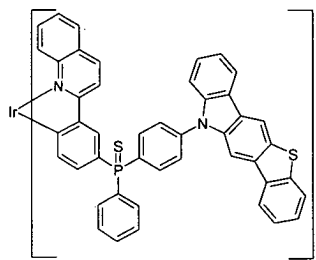
Formel (424)



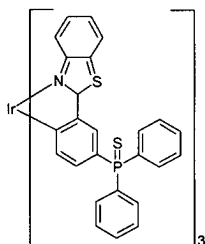
Formel (425)



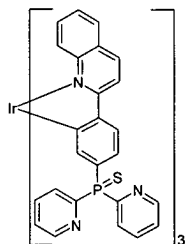
Formel (426)



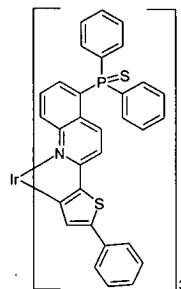
Formel (427)



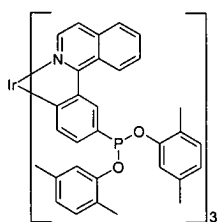
Formel (428)



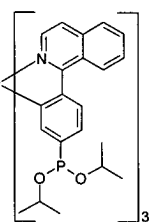
Formel (429)



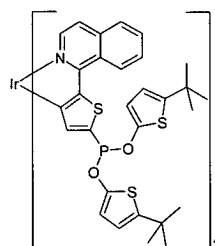
Formel (430)



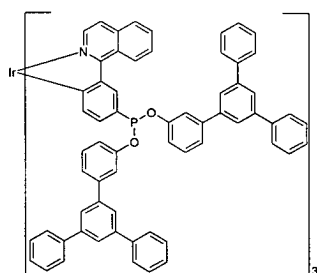
Formel (431)



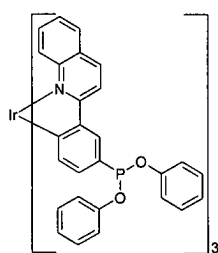
Formel (432)



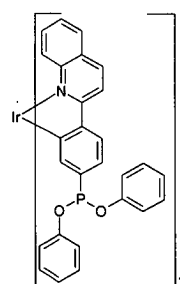
Formel (433)



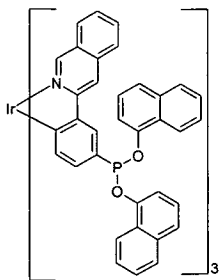
Formel (434)



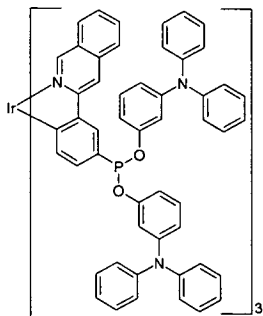
Formel (435)



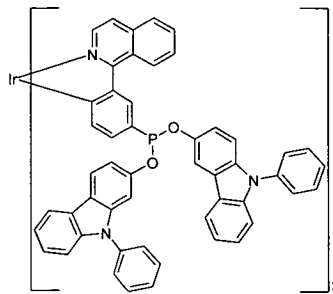
Formel (436)



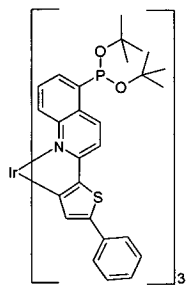
Formel (437)



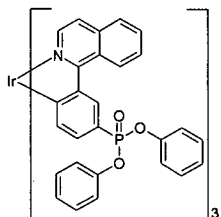
Formel (438)



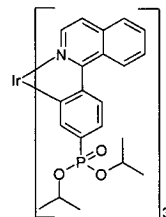
Formel (439)



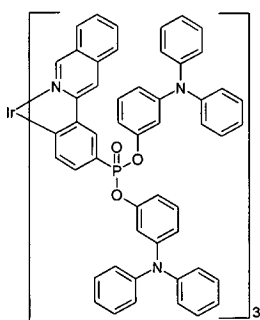
Formel (440)



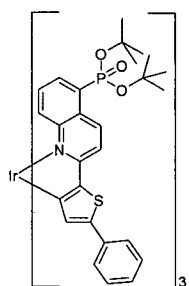
Formel (441)



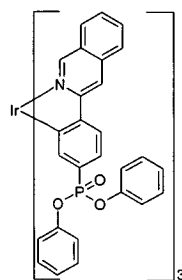
Formel (442)



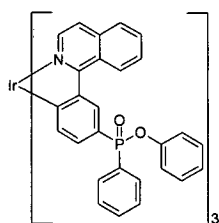
Formel (443)



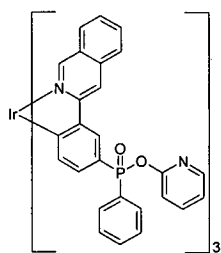
Formel (444)



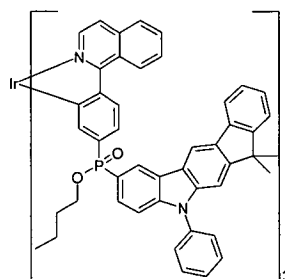
Formel (445)



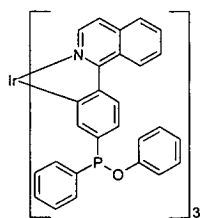
Formel (446)



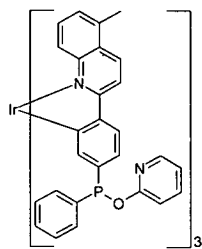
Formel (447)



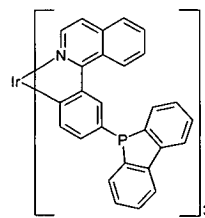
Formel (448)



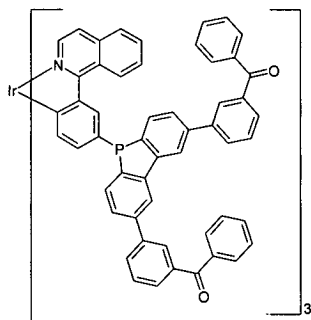
Formel (449)



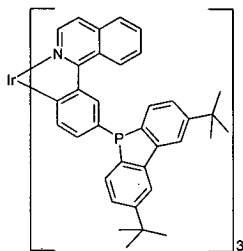
Formel (450)



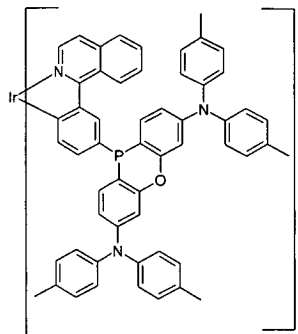
Formel (451)



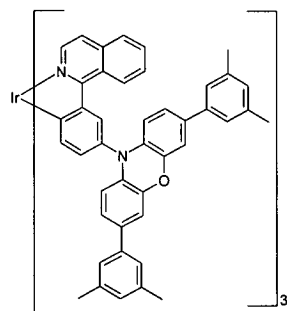
Formel (452)



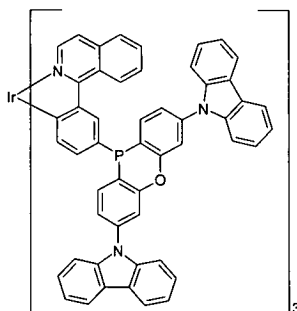
Formel (453)



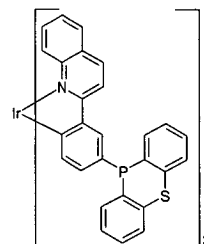
Formel (454)



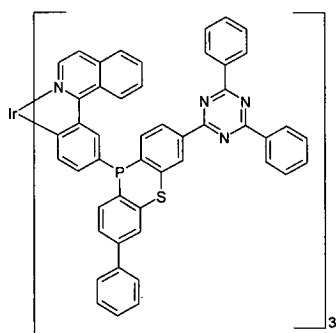
Formel (455)



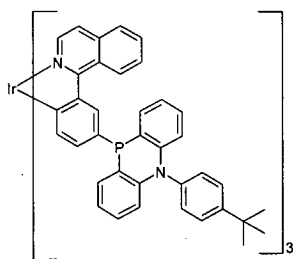
Formel (456)



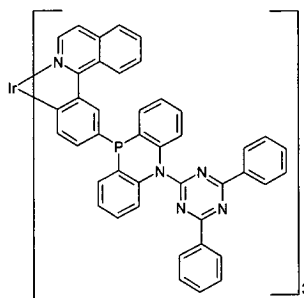
Formel (457)



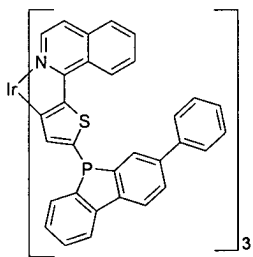
Formel (458)



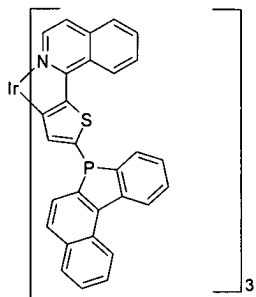
Formel (459)



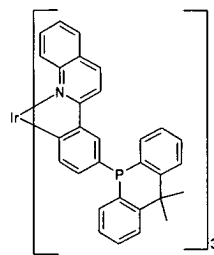
Formel (460)



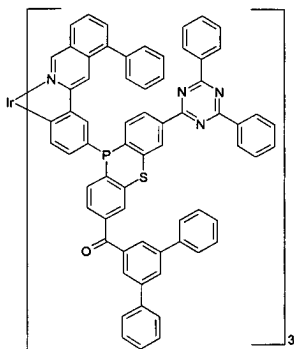
Formel (461)



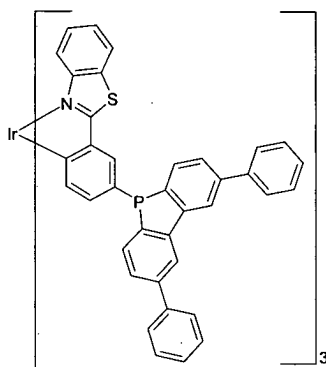
Formel (462)



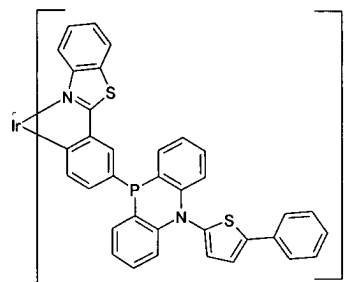
Formel (463)



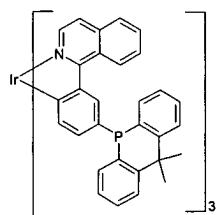
Formel (464)



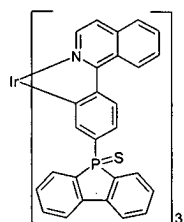
Formel (465)



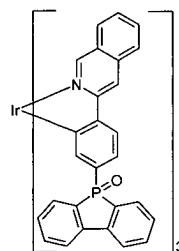
Formel (466)



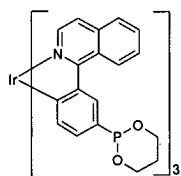
Formel (467)



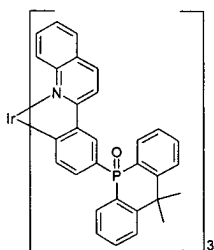
Formel (468)



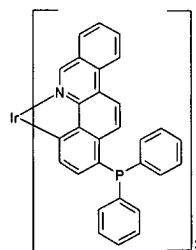
Formel (469)



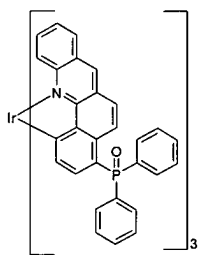
Formel (470)



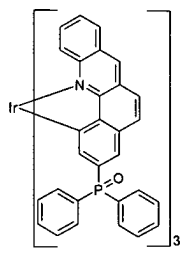
Formel (471)



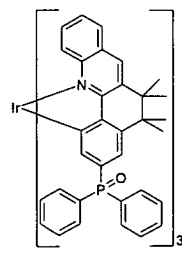
Formel (472)



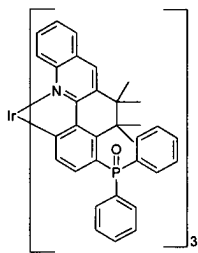
Formel (473)



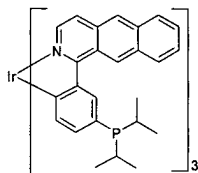
Formel (474)



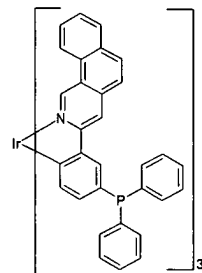
Formel (475)



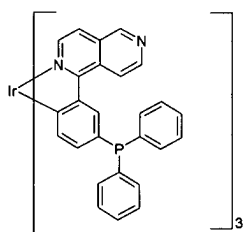
Formel (476)



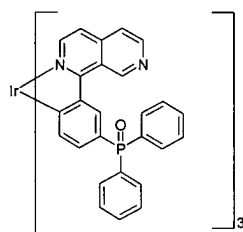
Formel (477)



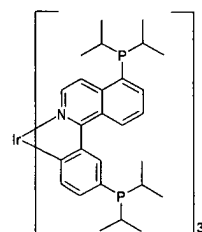
Formel (478)



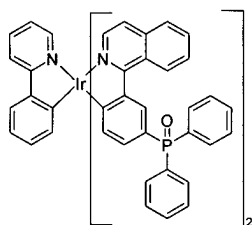
Formel (479)



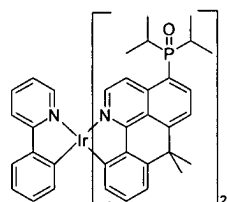
Formel (480)



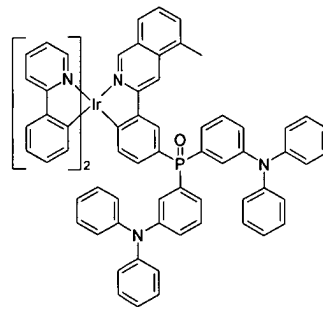
Formel (481)



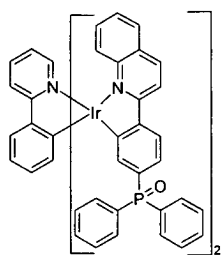
Formel (482)



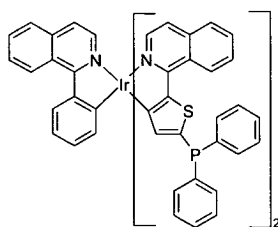
Formel (483)



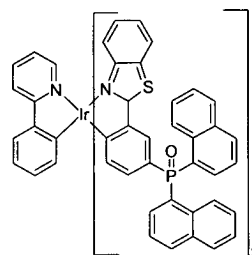
Formel (484)



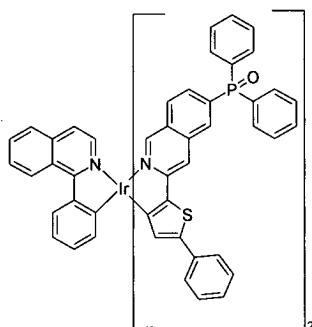
Formel (485)



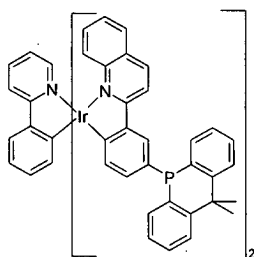
Formel (486)



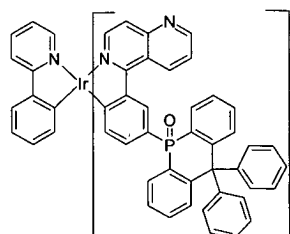
Formel (487)



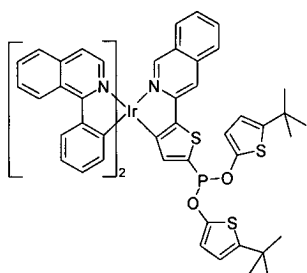
Formel (488)



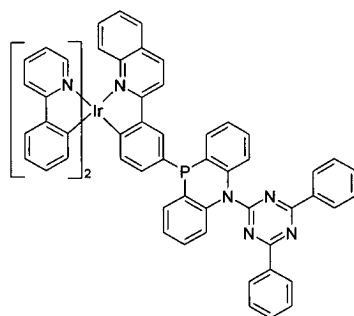
Formel (489)



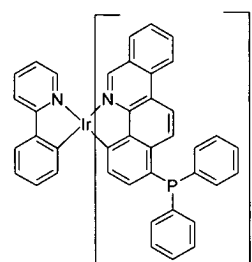
Formel (490)



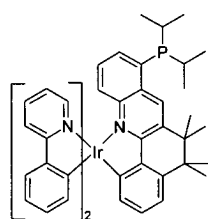
Formel (491)



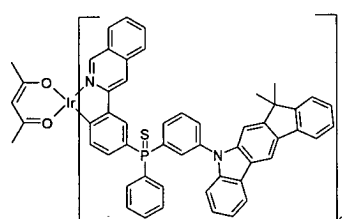
Formel (492)



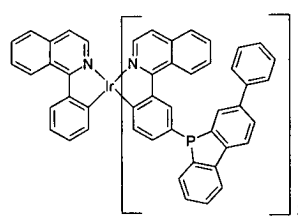
Formel (493)



Formel (494)



Formel (495)



Formel (496)

[0071] 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 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 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 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 als Emissionsmaterial in organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen. Eine bevorzugte Ausführungsform der Erfindung sind daher organische Elektrolumineszenzvorrichtungen.

[0072] 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, Elektroneninjektionsschichten, Excitonenblockierschichten, Ladungserzeugungsschichten und/oder organische oder anorganische p/n-Übergänge. Ebenso können zwischen zwei emittierende Schichten Interlayers eingebracht sein, welche beispielsweise eine Exzitonen-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.

[0073] 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.

[0074] 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 0.1 und 99 Gew.-%, vorzugsweise zwischen 0.5 und 40 Gew.-%, besonders bevorzugt zwischen 1 und 30 Gew.-%, insbesondere zwischen 2 und 25 Gew.-% der Verbindung gemäß Formel (1) bezogen auf die Gesamtmischung aus Emmitter und Matrixmaterial. Entsprechend enthält die Mischung zwischen 99 und 1 Gew.-%, vorzugsweise zwischen 98 und 60 Gew.-%, besonders bevorzugt zwischen 97 und 70 Gew.-%, insbesondere zwischen 95 und 75 Gew.-% des Matrixmaterials bezogen auf die Gesamtmischung aus Emmitter und Matrixmaterial.

[0075] Geeignete Matrixmaterialien für die erfindungsgemäßen Verbindungen sind Ketone, Phosphinoxide, Sulfoxide und Sulfone, z. B. gemäß WO 2004/013080, WO 2004/093207, WO 2006/005627 oder DE 10 2008 033 943, Triarylamine, Carbazolderivate, z. B. CBP (N,N-Bis-carbazolylbiphenyl) oder die in WO 05/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 oder WO 2008/086851 offenbarten Carbazolderivate, Indolocarbazolderivate, z. B. gemäß WO 07/063754 oder WO 08/056746, Indenocarbazolderivate, z. B. gemäß den nicht offen gelegten Anmeldungen DE 10 2009 023 155.2 und DE 10 2009 031 021.5, Azacarbazole, z. B. gemäß EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160, bipolare Matrixmaterialien, z. B. gemäß WO 2007/137725, Silane, z. B. gemäß WO 2005/111172, Azaborole oder Boronester, z. B. gemäß WO 06/117052, Triazinderivate, z. B. gemäß DE 10 2008 036 982, WO 2007/063754 oder WO 2008/056746, Zinkkomplexe, z. B. gemäß EP 652273 oder gemäß WO 2009/062578, Diaza- oder Tetraazasilolderivate, z. B. gemäß DE 10 2008 056 688, oder Diazaphospholderivate, z. B. gemäß DE 10 2009 022 858.6.

[0076] 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 Triazins mit einem Triarylamin-Derivat oder einem Carbazol-Derivat als gemischte Matrix für den erfindungsgemäßen Metallkomplex. Ebenfalls bevorzugt sind auch Mischungen aus einem loch- oder elektronentransportierenden Material mit einem Material, welches weder am Loch- noch am Elektronentransport beteiligt ist, wie beispielsweise in DE 10 2009 014 513.3 offenbart.

[0077] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung können die erfindungsgemäßen Verbindungen in Mischungen mit einem oder mehreren weiteren Emittieren eingesetzt werden. Ganz besonders bevorzugt ist dabei eine Mischung der erfindungsgemäßen Verbindungen mit einem oder mehre-

ren fluoreszierenden Emittern. Weiterhin bevorzugt ist eine Mischung mit einem oder mehreren phosphoreszierenden Emittern. Dabei emittieren fluoreszierende Emitter hauptsächlich aus angeregten Singulett-Zuständen, wohingegen phosphoreszierende Emitter hauptsächlich aus höheren Spinzuständen (z. B. Triplett und Quintett) Licht emittieren. Die Komplexe organischer Übergangsmetalle werden im Sinne dieser Erfindung als phosphoreszierende Emitter verstanden. Vorzugsweise sind die weiteren Emitter organische Verbindungen.

[0078] In einer besonders bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung werden die erfindungsgemäßen Verbindungen mit 3 weiteren, in einer insbesondere bevorzugten Ausführungsform mit 2 weiteren und in einer ganz besonders bevorzugten Ausführungsform mit einem weiteren Emitter gemischt.

[0079] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung enthalten die Emitter-Mischungen 3, insbesondere bevorzugt 2 und ganz besonders bevorzugt eine erfindungsgemäße Verbindung.

[0080] In einer besonders bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung enthalten die Emitter-Mischungen genau eine der erfindungsgemäßen Verbindung und genau einen weiteren Emitter.

[0081] Es ist weiterhin bevorzugt im Sinne der vorliegenden Erfindung, dass die Absorptionsspektren wenigstens eines Emitters und das Emissionsspektrum wenigstens eines anderen Emitters der Mischung überlappen, so dass ein Energietransfer (Double Doping) zwischen den Emittern erleichtert wird. Der Energietransfer kann dabei nach unterschiedlichen Mechanismen erfolgen. Nicht abschließende Beispiele hierfür sind der Energietransfer nach Förster oder Dexter.

[0082] Die beschriebenen Emitter-Mischungen enthalten bevorzugt wenigstens zwei Emitter, die beide rotes Licht emittieren. Weiterhin bevorzugt sind Emitter-Mischungen enthaltend wenigstens einen Emitter, der rotes Licht emittiert und wenigstens einen Emitter, der grünes Licht emittiert.

[0083] 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, Li₂O, BaF₂, MgO, NaF, CsF, Cs₂CO₃, etc.). Die Schichtdicke dieser Schicht beträgt bevorzugt zwischen 0.5 und 5 nm.

[0084] 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-Elektronen (z. B. Al/Ni/NiO_x, Al/PtO_x) 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.

[0085] 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.

[0086] 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.

[0087] 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 ist, beispielsweise kleiner 10^{-7} mbar.

[0088] 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).

[0089] 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 oder Offsetdruck, besonders bevorzugt aber LITI (Light Induced Thermal Imaging, Thermotransferdruck) oder Ink-Jet Druck (Tintenstrahldruck), hergestellt werden. Da die erfindungsgemäßen Verbindungen der Formel (1) eine sehr gute Löslichkeit in organischen Lösemitteln aufweisen, eignen sie sich besonders gut für die Verarbeitung aus Lösung.

[0090] Die organische Elektrolumineszenzvorrichtung kann auch als Hybridsystem 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 Matrixmaterial aus Lösung aufzubringen und darauf eine Lochblockierschicht und/oder eine Elektronentransportschicht im Vakuum aufzudampfen.

[0091] Diese Verfahren sind dem Fachmann generell bekannt und können von ihm ohne Probleme auf organische Elektrolumineszenzvorrichtungen enthaltend Verbindungen gemäß Formel (1) bzw. die oben aufgeführten bevorzugten Ausführungsformen angewandt werden.

[0092] Für die Verarbeitung aus Lösung sind Lösungen bzw. Formulierungen der Verbindungen gemäß Formel (1) erforderlich. Es kann auch bevorzugt sein, Mischungen aus zwei oder mehr Lösemitteln zu verwenden. Geeignete und bevorzugte Lösungsmittel sind beispielsweise Toluol, Anisol, o-, m- oder p-Xylole, Methylbenzolat, Dimethylanisole, Mesitylene, Tetralin, Veratrol, Tetrahydrofuran (THF), Methyl-THF, THP, Chlorbenzol, Dioxan oder Mischungen dieser Lösungsmittel.

[0093] Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ist daher eine Lösung bzw. eine Formulierung enthaltend mindestens eine Verbindung gemäß Formel (1) und ein oder mehrere Lösemittel, insbesondere organische Lösemittel. Wie solche Lösungen hergestellt werden können, ist dem Fachmann bekannt und beispielsweise in der WO 02/072714, der WO 2003/019694 und der darin zitierten Literatur beschrieben.

[0094] Die erfindungsgemäßen elektronischen Vorrichtungen, insbesondere organische Elektrolumineszenzvorrichtungen, zeichnen sich durch folgende überraschende Vorteile gegenüber dem Stand der Technik aus:

1. Die Verbindungen gemäß Formel (1) weisen eine sehr gute Löslichkeit in einer Vielzahl gängiger organischer Lösemittel auf und sind daher sehr gut für die Verarbeitung aus Lösung geeignet. Insbesondere weisen die erfindungsgemäßen Verbindungen eine höhere Löslichkeit auf als die im Stand der Technik beschriebenen ähnlichen Verbindungen.
2. Organische Elektrolumineszenzvorrichtungen enthaltend Verbindungen gemäß Formel (1) als emittierende Materialien weisen eine exzellente Lebensdauer auf. Insbesondere ist die Lebensdauer besser als bei ähnlichen Verbindungen gemäß dem Stand der Technik.
3. Organische Elektrolumineszenzvorrichtungen enthaltend Verbindungen gemäß Formel (1) als emittierende Materialien weisen eine hervorragende Effizienz auf. Insbesondere ist die Effizienz besser als bei ähnlichen Verbindungen gemäß dem Stand der Technik.

[0095] Diese oben genannten Vorteile gehen nicht mit einer Verschlechterung der weiteren elektronischen Eigenschaften einher.

[0096] Die erfindungsgemäßen Verbindungen sind in der Lage unter bestimmten Voraussetzungen Licht zu emittieren. Somit sind diese Verbindungen sehr vielseitig einsetzbar. Einige der Hauptanwendungsgebiete sind dabei Display- oder Beleuchtungs-Technologien. Weiterhin ist es besonders vorteilhaft, die Verbindungen sowie Vorrichtungen enthaltend diese Verbindungen im Bereich der Phototherapie einzusetzen.

[0097] Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung bezieht sich daher auf die Verwendung der erfindungsgemäßen Verbindungen und Vorrichtungen enthaltend die Verbindungen zur Behandlung, Prophylaxe und Diagnose von Erkrankungen. Noch ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung bezieht sich auf die Verwendung, der erfindungsgemäßen Verbindungen und Vorrichtungen enthaltend die Verbindungen zur Behandlung und Prophylaxe kosmetischen Umstände.

[0098] Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung bezieht sich auf die erfindungsgemäßen Verbindungen zu Herstellung von Vorrichtungen zur Therapie, Prophylaxe und/oder Diagnose therapeutischer Erkrankungen.

[0099] Dabei sind viele Erkrankungen sind mit kosmetischen Aspekten assoziiert. So leidet ein Patient mit schwerer Akne in der Gesichtspartie nicht nur an den medizinischen Ursachen und Folgen der Erkrankung, sondern auch an den kosmetischen Begleitumständen.

[0100] Phototherapie oder Lichttherapie findet in vielen medizinischen und/oder kosmetischen Bereichen Anwendung. Die erfindungsgemäßen Verbindungen sowie die Vorrichtungen enthaltend diese Verbindungen können daher zur Therapie und/oder Prophylaxe und/oder Diagnose von allen Erkrankungen und/oder in kosmetischen Anwendungen eingesetzt werden, für die der Fachmann die Anwendung von Phototherapie in Betracht zieht. Der Begriff Phototherapie beinhaltet dabei neben der Bestrahlung auch die photodynamische Therapie (PDT) sowie das Desinfizieren und Sterilisieren im Allgemeinen. Behandelt werden können mittels Phototherapie oder Lichttherapie nicht nur Menschen oder Tiere, sondern auch jegliche andere Art lebender oder unbelebter Materie. Hierzu gehören, bspw., Pilze, Bakterien, Mikroben, Viren, Eukaryonten, Prokaryonten, Nahrungsmittel, Getränke, Wasser und Trinkwasser.

[0101] Der Begriff Phototherapie beinhaltet auch jede Art der Kombination von Lichttherapie und anderen Therapiearten, wie bspw. die Behandlung mit Wirkstoffen. Viele Lichttherapien haben zum Ziel äußere Partien eines Objektes zu bestrahlen oder zu behandeln, so wie die Haut von Menschen und Tieren, Wunden, Schleimhäute, Auge, Haare, Nägel, das Nagelbett, Zahnfleisch und die Zunge. Die erfindungsgemäße Behandlung oder Bestrahlung kann daneben auch innerhalb eines Objektes durchgeführt werden, um bspw. innere Organe (Herz, Lunge etc.) oder Blutgefäße oder die Brust zu behandeln.

[0102] Die erfindungsgemäßen therapeutischen und/oder kosmetischen Anwendungsgebiete sind bevorzugt ausgewählt aus der Gruppe der Hauterkrankungen und Haut-assoziierten Erkrankungen oder Veränderungen bzw. Umstände wie bspw. Psoriasis, Hautalterung, Hautfaltenbildung, Hautverjüngung, vergrößerte Hautporen, Cellulite, ölige/fettige Haut, Follikulitis, aktinische Keratose, precanceröse aktinische Keratose, Hautläsionen, sonnengeschädigte und sonnengestresste Haut, Krähfüße, Hautulkus, Akne, Akne rosacea, Narben durch Akne, Akne Bakterien, Photomodulierung fettiger/ölicher Talgdrüsen sowie deren umgebende Gewebe, Ikterus, Neugeborenenikterus, Vitiligo, Hautkrebs, Hauttumore, Crigler Najjar, Dermatitis, atopische Dermatitis, diabetische Hautgeschwüre sowie Desensibilisierung der Haut.

[0103] Besonders bevorzugt im Sinne der Erfindung sind die Behandlung und/oder Prophylaxe von Psoriasis, Akne, Cellulite, Hautfaltenbildung, Hautalterung, Ikterus und Vitiligo.

[0104] Weitere erfindungsgemäße Anwendungsgebiete für die Zusammensetzungen und/oder Vorrichtungen enthaltend die erfindungsgemäßen Zusammensetzungen sind ausgewählt aus der Gruppe der Entzündungserkrankungen, rheumatoide Arthritis, Schmerztherapie, Behandlung von Wunden, neurologische Erkrankungen und Umstände, Ödeme, Paget's Erkrankung, primäre und metastasierende Tumoren, Bindegewebskrankungen bzw. -veränderungen, Veränderungen des Kollagens, Fibroblasten und von Fibroblasten stammende Zellspiegel in Geweben von Säugetieren, Bestrahlung der Retina, neovasculare und hypertrophe Erkrankungen, allergische Reaktionen, Bestrahlung der Atemwege, Schwitzen, okulare neovasculare Erkrankungen, virale Infektionen besonders Infektionen durch Herpes Simplex oder HPV (Humane Papillomviren) zur Behandlung von Warzen und Genitalwarzen.

[0105] Besonders bevorzugt im Sinne der Erfindung sind die Behandlung und/oder Prophylaxe von rheumatoide Arthritis, viraler Infektionen, und Schmerzen.

[0106] Weitere erfindungsgemäße Anwendungsgebiete für die Verbindungen und/oder Vorrichtungen enthaltend die erfindungsgemäßen Verbindungen sind ausgewählt aus der Winterdepression, Schlafkrankheit, Bestrahlung zur Verbesserung der Stimmung, Linderung von Schmerzen besonders Muskelschmerzen durch

bspw. Verspannungen oder Gelenkschmerzen, Beseitigung der Steifheit von Gelenken und das Aufhellen der Zähne (Bleaching).

[0107] Weitere erfindungsgemäße Anwendungsgebiete für die Verbindungen und/oder Vorrichtungen enthaltend die erfindungsgemäßen Verbindungen sind ausgewählt aus der Gruppe der Desinfektionen. Mit den erfindungsgemäßen Verbindungen und/oder mit den erfindungsgemäßen Vorrichtungen können jegliche Art von Objekten (unbelebte Materie) oder Subjekten (lebende Materie wie bspw. Mensch und Tier) zum Zweck der Desinfektion behandelt werden. Hierzu zählt, zum Beispiel, die Desinfektion von Wunden, die Reduktion von Bakterien, das Desinfizieren chirurgischer Instrumente oder anderer Gegenstände, das Desinfizieren von Nahrungs- und Lebensmitteln, von Flüssigkeiten, insbesondere Wasser, Trinkwasser und andere Getränke, das Desinfizieren von Schleimhäuten und Zahnfleisch und Zähnen. Unter Desinfektion wird hierbei die Reduktion lebender mikrobiologischer Verursacher unerwünschter Effekte, wie Bakterien und Keime, verstanden.

[0108] Zu dem Zweck der oben genannten Phototherapie emittieren Vorrichtungen enthaltend die erfindungsgemäßen Verbindungen bevorzugt Licht der Wellenlänge zwischen 250 and 1250 nm, besonders bevorzugt zwischen 300 and 1000 nm und insbesondere bevorzugt zwischen 400 and 850 nm.

[0109] In einer besonders bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung werden die erfindungsgemäßen Verbindungen in einer organischen lichtemittierenden Diode (OLED) oder einer organischen lichtemittierenden elektrochemischen Zelle (OLEC) zum Zwecke der Phototherapie eingesetzt. Sowohl die OLED als auch die OLEC können dabei einen planaren oder Fiber- bzw. Faser-artigen Aufbau mit beliebigem Querschnitt (z. B. rund, oval, polygonal, quadratisch) mit einem ein- oder mehrschichtigen Aufbau aufweisen. Diese OLECs und/oder OLEDs können in andere Vorrichtungen eingebaut werden, die weitere mechanische, adhäsive und/oder elektronische Bausteine (z. B. Batterie und/oder Steuerungseinheit zur Einstellung der Bestrahlungszeiten, -intensitäten und -wellenlängen) enthalten. Diese Vorrichtungen enthaltend die erfindungsgemäßen OLECs und/oder OLEDs sind vorzugsweise ausgewählt aus der Gruppe enthaltend Pflaster, Pads, Tapes, Bandagen, Manschetten, Decken, Hauben, Schlafsäcken, Textilien und Stents.

[0110] Die Verwendung von den genannten Vorrichtungen zu dem genannten therapeutischen und/oder kosmetischen Zweck ist besonders vorteilhaft gegenüber dem Stand der Technik, da mit Hilfe der erfindungsgemäßen Vorrichtungen unter Verwendung der OLEDs und/oder OLECs homogene Bestrahlungen geringerer Bestrahlungsintensitäten an nahezu jedem Ort und zu jeder Tageszeit möglich sind. Die Bestrahlungen können stationär, ambulant und/oder selbst, d. h., ohne Einleitung durch medizinisches oder kosmetisches Fachpersonal durchgeführt werden. So können, bspw., Pflaster unter der Kleidung getragen werden, so dass eine Bestrahlung auch während der Arbeitszeit, in der Freizeit oder während des Schlafes möglich ist. Auf aufwendige stationäre/ambulante Behandlungen mit kann in vielen Fällen verzichtet bzw. deren Häufigkeit reduziert werden. Die erfindungsgemäßen Vorrichtungen können zum Widergebrauch gedacht sein oder Wegwerfartikel darstellen, die nach ein-, zwei oder dreimaligem Gebrauch entsorgt werden können.

[0111] Weitere Vorteile gegenüber dem Stand der Technik sind bspw. eine geringere Wärmeentwicklung und emotionale Aspekte. So werden Neugeborene, die aufgrund einer Gelbsucht (Ikterus) therapiert werden müssen typischerweise mit verbundenen Augen in einem Brutkasten, ohne körperlichen Kontakt zur den Eltern bestrahlt, was eine emotionale Stresssituation für Eltern und Neugeborene darstellt. Mit Hilfe einer erfindungsgemäßen Decke enthaltend die erfindungsgemäßen OLEDs und/oder OLECs kann der emotionale Stress signifikant vermindert werden. Zudem ist eine bessere Temperierung des Kindes durch eine verringerte Wärmeproduktion der erfindungsgemäßen Vorrichtungen gegenüber herkömmlicher Bestrahlungsgeräte möglich.

[0112] Es sei darauf hingewiesen, dass Variationen der in der vorliegenden Erfindung beschriebenen Ausführungsformen unter den Umfang dieser Erfindung fallen. Jedes in der vorliegenden Erfindung offenbarte Merkmal kann, sofern dies nicht explizit ausgeschlossen wird, durch alternative Merkmale, die demselben, einem äquivalenten oder einem ähnlichen Zweck dienen, ausgetauscht werden. Somit ist jedes in der vorliegenden Erfindung offenbarte Merkmal, sofern nichts anderes gesagt wurde, als Beispiel einer generischen Reihe oder als äquivalentes oder ähnliches Merkmal zu betrachten.

[0113] Alle Merkmale der vorliegenden Erfindung können in jeder Art miteinander kombiniert werden, es sei denn dass sich bestimmte Merkmale und/oder Schritte sich gegenseitig ausschließen. Dies gilt insbesondere für bevorzugte Merkmale der vorliegenden Erfindung. Gleichermaßen können Merkmale nicht wesentlicher Kombinationen separat verwendet werden (und nicht in Kombination).

[0114] Es sei ferner darauf hingewiesen, dass viele der Merkmale, und insbesondere die der bevorzugten Ausführungsformen der vorliegenden Erfindung selbst erfinderisch und nicht lediglich als Teil der Ausführungsformen der vorliegenden Erfindung zu betrachten sind. Für diese Merkmale kann ein unabhängiger Schutz zusätzlich oder alternativ zu jeder gegenwärtig beanspruchten Erfindung begehrt werden.

[0115] Die mit der vorliegenden Erfindung offengelegte Lehre zum technischen Handeln kann abstrahiert und mit anderen Beispielen kombiniert werden.

[0116] Die Erfindung wird durch die nachfolgenden Beispiele näher erläutert, ohne sie dadurch einschränken zu wollen.

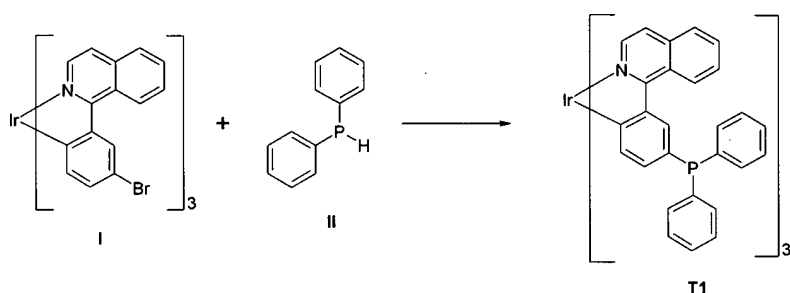
Beispiele

[0117] Die nachfolgenden Synthesen werden, sofern nicht anders angegeben, unter Schutzgasatmosphäre in getrockneten Lösungsmitteln durchgeführt. Die Edukte II und IV können kommerziell (bspw. von VWR Chemikalien) bezogen werden. Verbindungen I und VIII können analog zu denen in WO 02/068435 dargestellt werden. Verbindung VI kann gemäß Organic letters, 2005, 7, 19, 4277–4280 dargestellt werden.

Beispiel 1:

Herstellung der Verbindung T1

Syntheseprozedur für die Darstellung von Verbindung T1:

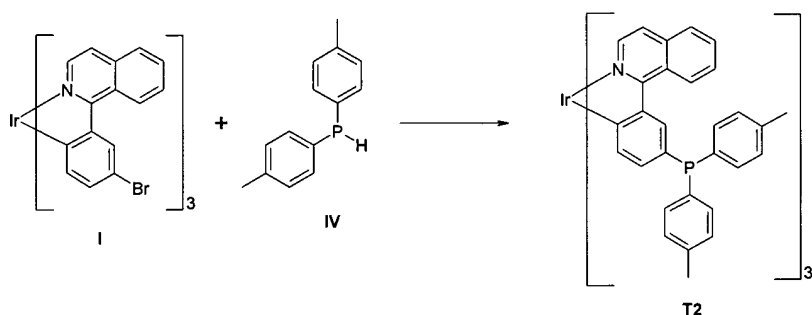


[0118] 5.0 g (4.8 mmol) Verbindung I, und 1.1 g (5.3 mmol) Kalium Acetat werden in 100 mL entgaste Dimethylacetamid, suspendiert. Zu dieser Suspension werden 11 mg (0.05 mmol) Pd(OAc)₂ gegeben. Hierzu werden 2.7 g (14.4 mmol) der Verbindung II gegeben. Die Reaktionsmischung wird 4 Tage unter Rückfluss erhitzt. Nach Erkalten wird die Reaktionslösung auf 175 mL Wasser gegossen. Dann werden 200 mL Dichlormethan hinzugefügt. Die organische Phase wird abgetrennt, dreimal mit 75 mL Wasser gewaschen und anschließend zur Trockene eingeeengt. Der Rückstand wird mit Ethanol gewaschen und aus Toluol umkristallisiert und abschließend bei vermindertem Druck getrocknet. Die Ausbeute beträgt 5.3 g (3.9 mmol), entsprechend 80.7% der Theorie.

Beispiel 2:

Herstellung der Verbindung T2

Syntheseprozedur für die Darstellung von Verbindung T2:

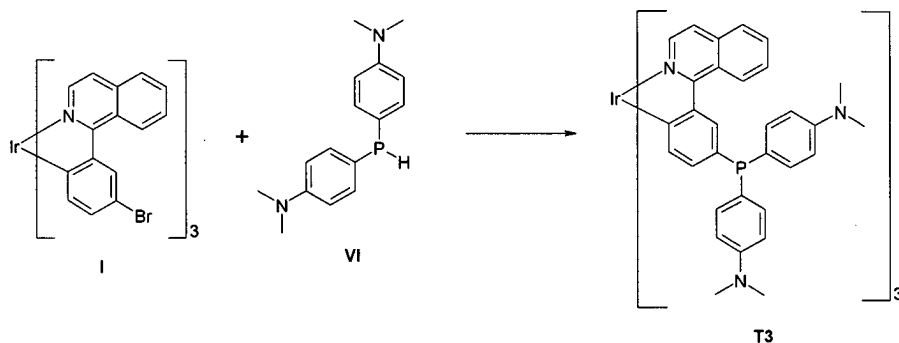


[0119] Die Synthese wird analog zu der von Verbindung T1 in Beispiel 1 mit 5.0 g (4.8 mmol) Verbindung I durchgeführt, wobei die Verbindung II durch 3.1 g (14.4 mmol) von Verbindung IV ersetzt wird. Die Ausbeute beträgt 5.9 g (4.1 mmol), entsprechend 85.2% der Theorie.

Beispiel 3:

Herstellung der Verbindung T3

Syntheseprozedur für die Darstellung von Verbindung T3:

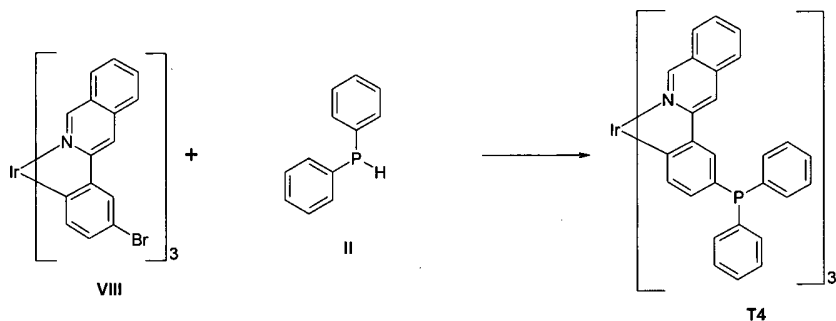


[0120] Die Synthese wird analog zu der von Verbindung T1 in Beispiel 1 mit 5.0 g (4.8 mmol) Verbindung 1 durchgeführt, wobei die Verbindung II durch 3.9 g (14.4 mmol) von Verbindung VI ersetzt wird. Die Ausbeute beträgt 5.3 g (3.3 mmol), entsprechend 68.8% der Theorie.

Beispiel 4:

Herstellung der Verbindung T4

Syntheseprozedur für die Darstellung von Verbindung T4:

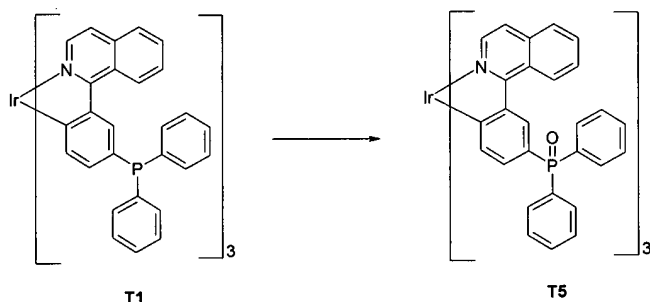


[0121] Die Synthese wird analog der von Verbindung T1 in Beispiel 1 mit 2.7 g (14.4 mmol) von Verbindung II durchgeführt, wobei die Verbindung I durch 5.0 g (4.8 mmol) von Verbindung VIII ersetzt wird. Die Ausbeute beträgt 5.1 g (3.7 mmol), entsprechend 77.9% der Theorie.

Beispiel 5:

Herstellung der Verbindung T5

Syntheseprozedur für die Darstellung von Verbindung T5:

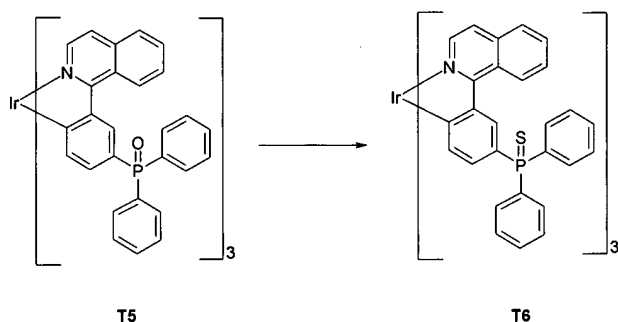


[0122] Zu eine Lösung von 6.0 g (4.4 mmol) von Verbindung T1 in 100 ml Dichloromethan werden 3.8 g (14.6 mmol) N-(Phenylsulfonyl)-3-phenyloxaziridine zugeben. Die Reaktionsmischung wird 20 h bei Raumtemperatur gerührt. Der eingengt Rückstand wird durch eine Kieselgel Säule gereinigt. Der Feststoff wird aus Toluol umkristallisiert und bei vermindertem Druck getrocknet. Die Ausbeute beträgt 1.6 g (1.1 mmol), entsprechend 25.4% der Theorie.

Beispiel 6:

Herstellung der Verbindung T6

Syntheseprozedur für die Darstellung von Verbindung T6:

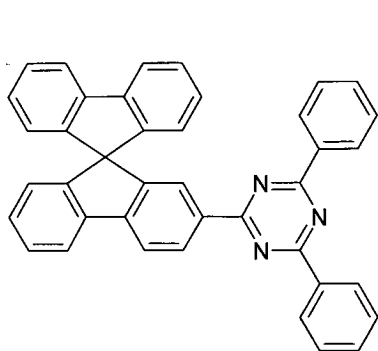


[0123] 7.5 g (5.3 mmol) Verbindung T5 und 3.2 g (8.0 mmol) 2,4-Bis-(4-methoxyphenyl)-[1,3,2,4]dithiadiphosphetane 2,4-disulfide (Lawesson Reagenz) werden in 100 ml entgastem Toluol suspendiert. Der Suspension wird 20 h unter Rückfluss erhitzt. Nach dem Erkalten wird die Reaktionsmischung abfiltriert. Der Feststoff wird aus Toluol umkristallisiert. Die Ausbeute beträgt 5.1 g (3.5 mmol), entsprechend 65.2% der Theorie

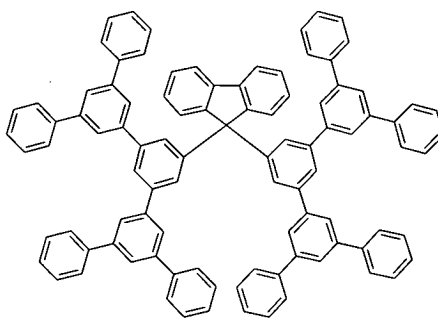
Beispiele 7 bis 12:

Herstellung und Charakterisierung organischer Elektrolumineszenzvorrichtungen
enthaltend die erfindungsgemäßen Verbindungen

[0124] Die Strukturen der im Folgenden verwendeten Matrixmaterialien TMM-1 (synthetisiert nach DE 10 2008 036 982) und TMM-2 (synthetisiert nach DE 10 2008 017 591) sind nachstehend abgebildet.



TMM-1



TMM-2

[0125] Die erfindungsgemäßen Materialien können aus Lösung verwendet werden und führen dort zu einfach herzustellenden Vorrichtungen mit 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). Im vorliegenden Fall werden die erfindungsgemäßen Verbindungen T1 bis T6 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 verwendete elektrolumineszierende Vorrichtung zeigt den folgenden Aufbau: ITO/PEDOT:PSS/Interlayer/EML/Kathode, wobei EML die Emissionsschicht darstellt. Strukturierte ITO-Substrate und das Material für die sogenannte Pufferschicht (PEDOT, genauer gesagt PEDOT:PSS) sind käuflich erhältlich (ITO von Technoprint und anderen, PEDOT:PSS als wässrige Dispersion Clevios Baytron P von H. C. Starck). Die verwendete Interlayer dient der Lochinjektion; in diesem Fall wurde HIL-012 von Merck KGaA, Deutschland, verwendet. 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 der emittierenden Schicht (EML) und der Kathode können auch eine Lochblockierschicht und/oder eine Elektronentransportschicht durch Bedampfung aufgebracht werden. Weiterhin kann auch der Interlayer durch eine oder mehrere Schichten ersetzt werden, die lediglich die Bedingung erfüllen müssen, durch den nachgelagerten Prozessierungsschritt der Abscheidung der emittierenden Schicht aus Lösung nicht wieder abgelöst zu werden.

[0126] Die Vorrichtungen werden standardmäßig mittels Verfahren, die dem Durchschnittsfachmann auf dem Gebiet gut bekannt sind, charakterisiert. Die hier aufgeführten OLED sind allerdings noch nicht optimiert. Tabelle 1 fasst die erhaltenen Daten zusammen. Bei den prozessierten Devices zeigt sich, dass die erfindungsgemäßen Materialien den zuvor zur Verfügung stehenden in Effizienz und/oder Lebensdauer überlegen sind.

Tabelle 1: Ergebnisse mit aus Lösung prozessierten Materialien in der Devicekonfiguration: ITO/PEDOT:PSS/Interlayer/EML/Kathode.

Bsp.	EML 80 nm	Max. Eff. [cd/A]	Spannung [V] bei 100 cd/m ²	CIE (x/y)	Lebensdauer [h], Anfangshelligkeit 1000 cd/m ²
7	TMM-1:TMM-2:T-1	8	5.1	0.66/0.33	6500
8	TMM-1:TMM-2:T-2	7	5.0	0.67/0.33	8000
9	TMM-1:TMM-2:T-3	7	4.9	0.65/0.32	10000
10	TMM-1:TMM-2:T-4	10	5.3	0.61/0.38	10500
11	TMM-1:TMM-2:T-5	8	5.2	0.67/0.33	15000
12	TMM-1:TMM-2:T-6	7	5.3	0.67/0.33	12000

ZITATE ENTHALTEN IN DER BESCHREIBUNG

Diese Liste der vom Anmelder aufgeführten Dokumente wurde automatisiert erzeugt und ist ausschließlich zur besseren Information des Lesers aufgenommen. Die Liste ist nicht Bestandteil der deutschen Patent- bzw. Gebrauchsmusteranmeldung. Das DPMA übernimmt keinerlei Haftung für etwaige Fehler oder Auslassungen.

Zitierte Patentliteratur

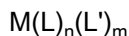
- US 4539507 [0001]
- US 5151629 [0001]
- EP 0676461 [0001]
- WO 98/27136 [0001]
- WO 2004/026886 A2 [0003]
- WO 2002/060910 [0068]
- WO 2004/085449 [0068]
- WO 2005/042548 [0068]
- WO 05/011013 [0072]
- WO 2004/013080 [0075]
- WO 2004/093207 [0075]
- WO 2006/005627 [0075]
- DE 102008033943 [0075]
- WO 05/039246 [0075]
- US 2005/0069729 [0075]
- JP 2004/288381 [0075]
- EP 1205527 [0075]
- WO 2008/086851 [0075]
- WO 07/063754 [0075]
- WO 08/056746 [0075]
- DE 102009023155 [0075]
- DE 102009031021 [0075]
- EP 1617710 [0075]
- EP 1617711 [0075]
- EP 1731584 [0075]
- JP 2005/347160 [0075]
- WO 2007/137725 [0075]
- WO 2005/111172 [0075]
- WO 06/117052 [0075]
- DE 102008036982 [0075, 0124]
- WO 2007/063754 [0075]
- WO 2008/056746 [0075]
- EP 652273 [0075]
- WO 2009/062578 [0075]
- DE 102008056688 [0075]
- DE 102009022858 [0075]
- DE 102009014513 [0076]
- WO 02/072714 [0093]
- WO 2003/019694 [0093]
- WO 02/068435 [0117]
- DE 102008017591 [0124]
- WO 2004/037887 [0125]

Zitierte Nicht-Patentliteratur

- M. A. Baldo et al., Appl. Phys. Lett. 1999, 75, 4–6 [0001]
- M. S. Arnold et al., Appl. Phys. Lett. 2008, 92, 053301 [0088]
- Organic letters, 2005, 7, 19, 4277–4280 [0117]

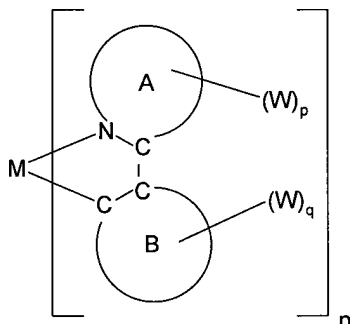
Patentansprüche

1. Verbindung gemäß Formel (1)



Formel (1)

wobei die Verbindung eine Teilstruktur $M(L)_n$ der Formel (2) enthält



Formel (2)

wobei M an einen beliebigen bidentaten Liganden L über ein Stickstoffatom N sowie über ein Kohlenstoffatom C bindet und

wobei A ein beliebiges heteroaromatisches kondensiertes Ringsystem sein kann und

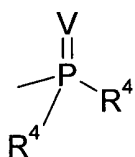
wobei B ein beliebiger aromatischer oder heteroaromatischer Ring oder ein beliebiges aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem sein kann, das kondensiert und/oder nicht kondensiert ist und

wobei für die verwendeten Symbole und Indices gilt:

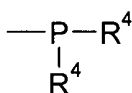
M ist ein Metall ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Iridium, Rhodium, Platin, Palladium, Osmium und Ruthenium;

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

W ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten einem Rest der Formeln (3) und (4)



Formel (3)



Formel (4)

wobei V gleich S oder O ist;

R^4 ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten H, D, F, Cl, Br, I, $N(R^2)_2$, eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine geradkettige Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy-, Alkylalkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^2 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen durch $R^2C=CR^2$, $C\equiv C$, $Si(R^2)_2$, $Ge(R^2)_2$, $Sn(R^2)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^2$, $P(=O)(R^2)$, SO , SO_2 , NR^2 , O, S oder $CONR^2$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch D, F, Cl, Br, I, CN oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy-, Arylalkoxy-, Alkylaryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Kombination aus zwei oder mehr dieser Gruppen; dabei können zwei oder mehr Reste R^4 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden;

R^2 ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten H, D, F, Cl, Br, I, $N(R^3)_2$, CN, NO_2 , $Si(R^3)_3$, $B(OR^3)_2$, $C(=O)R^3$, $P(=O)(R^3)_2$, $S(=O)R^3$, $S(=O)_2R^3$, OSO_2R^3 , eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine geradkettige Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy-, Alkylalkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^3 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht

benachbarte CH_2 -Gruppen durch $\text{R}^3\text{C}=\text{CR}^3$, $\text{C}\equiv\text{C}$, $\text{Si}(\text{R}^3)_2$, $\text{Ge}(\text{R}^3)_2$, $\text{Sn}(\text{R}^3)_2$, $\text{C}=\text{O}$, $\text{C}=\text{S}$, $\text{C}=\text{Se}$, $\text{C}=\text{NR}^3$, $\text{P}(\text{O})(\text{R}^3)$, SO , SO_2 , NR^3 , O , S oder CONR^3 ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch D, F, Cl, Br, I, CN oder NO_2 ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste R^3 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy-, Arylalkoxy-, Alkylaryloxy oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^3 substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^3 substituiert sein kann, oder eine Kombination aus zwei oder mehr dieser Gruppen; dabei können zwei oder mehrere benachbarte Reste R^2 miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden;

R^3 ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten 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^3 auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden;

q ist eine ganze Zahl größer oder gleich 0;

p ist eine ganze Zahl größer oder gleich 0; mit der Maßgabe, dass $p + q$ eine ganze Zahl größer oder gleich 1 ist;

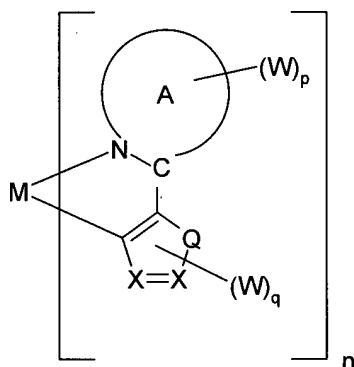
n ist 1, 2 oder 3 für M gleich Iridium oder Rhodium und ist 1 oder 2 für M gleich Platin oder Palladium;

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

dabei werden die Indizes n und m so gewählt, dass die Koordinationszahl am Metall für M gleich Iridium oder Rhodium 6 entspricht und für M gleich Platin oder Palladium 4 entspricht;

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

2. Verbindung nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass die Verbindung der Formel (1) eine Teilstruktur $\text{M}(\text{L})_n$ mit der Formel (9) enthält.



Formel (9)

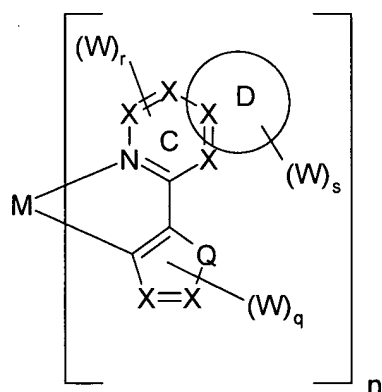
wobei für die verwendeten Symbole und Indizes die Definitionen aus Anspruch 1 gelten.

X ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten CR^1 oder N;

Q ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten $\text{R}^1\text{C}=\text{CR}^1$, $\text{R}^1\text{C}=\text{N}$, O , S , Se oder NR^1 ;

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

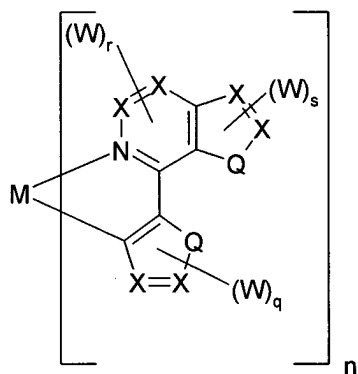
3. Verbindung nach Anspruch 1 oder 2, dadurch gekennzeichnet, dass die Verbindung der Formel (1) eine Teilstruktur $M(L)_n$ mit der Formel (10) enthält.



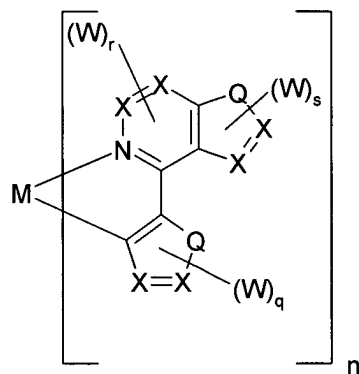
Formel (10)

wobei für die Indizes r und s die Gleichung $p = r + s$ und wegen $p + q \geq 1$ auch $r + s + q \geq 1$ gilt und der aromatische oder heteroaromatische Zyklus D , der in jeder beliebigen und möglichen Art an C kondensiert ist, wobei C ein aromatischer oder heteroaromatischer Ring oder ein aromatisches oder heteroaromatisches kondensiertes und/oder nicht-kondensiertes Ringsystem sein kann.

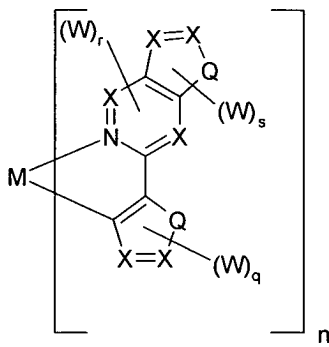
4. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, dass die Teilstruktur $M(L)_n$ ausgewählt ist aus den Formel (12) bis (17)



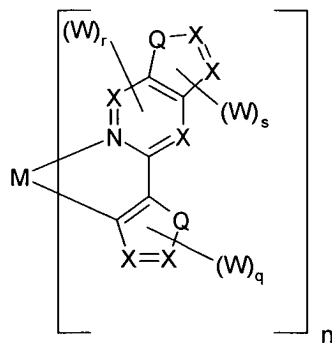
Formel (12)



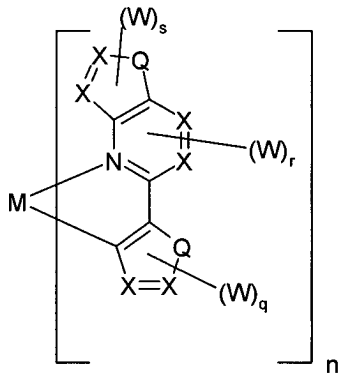
Formel (13)



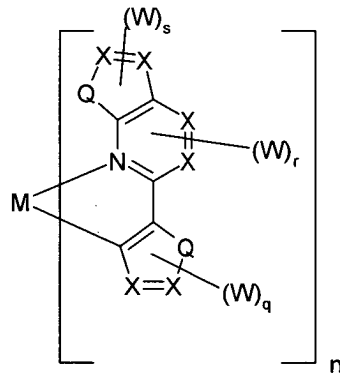
Formel (14)



Formel (15)



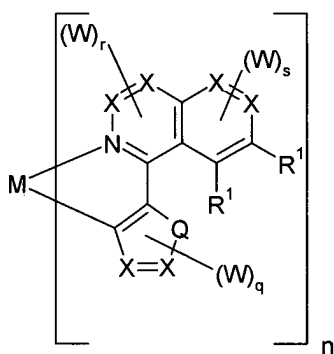
Formel (16)



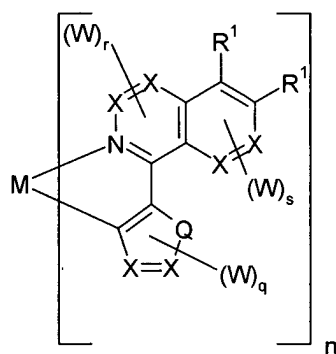
Formel (17)

wobei die angegebenen Indizes und Symbole dieselbe Bedeutung haben wie in den obigen Ansprüchen angegeben.

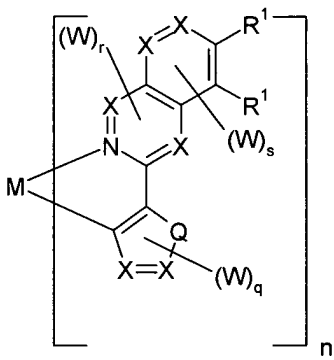
5. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 4, dadurch gekennzeichnet, dass die Teilstruktur M(L)_n ausgewählt ist aus den Formeln (18) bis (23)



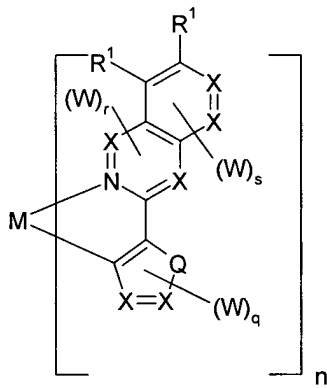
Formel (18)



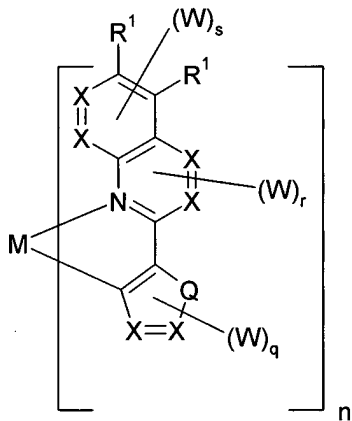
Formel (19)



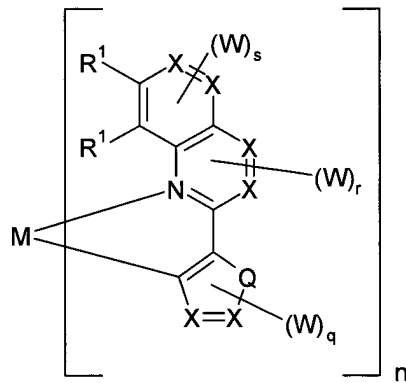
Formel (20)



Formel (21)



Formel (22)

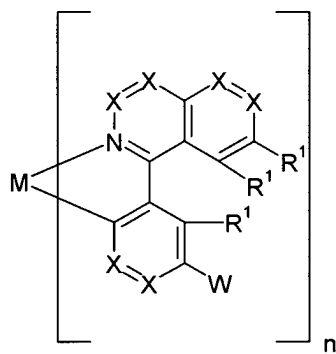


Formel (23)

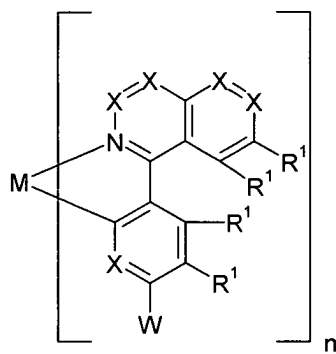
6. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 5, dadurch gekennzeichnet, dass Q gleich $R^1C=CR^1$ oder S ist.

7. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 6, dadurch gekennzeichnet, dass $p + q = 1$ ist.

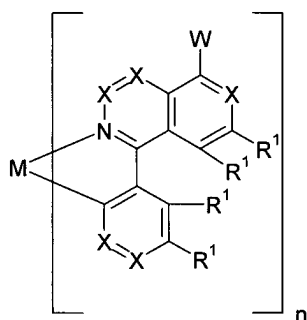
8. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 7, dadurch gekennzeichnet, dass die Teilstruktur $M(L)_n$ ausgewählt ist aus den Formeln (36) bis (59)



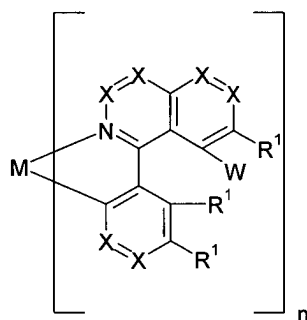
Formel (36)



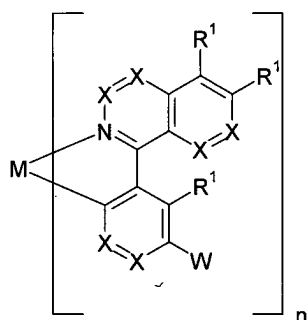
Formel (37)



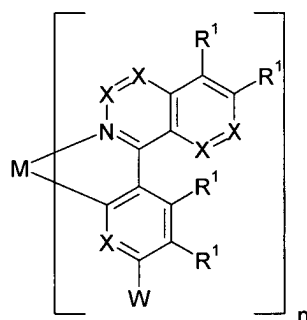
Formel (38)



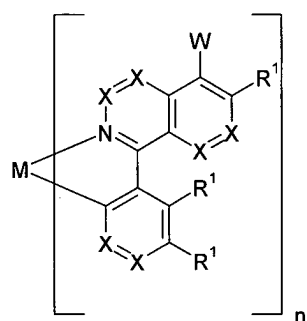
Formel (39)



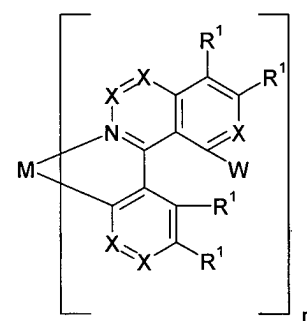
Formel (40)



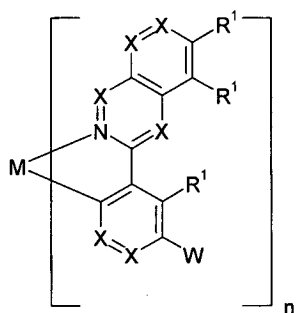
Formel (41)



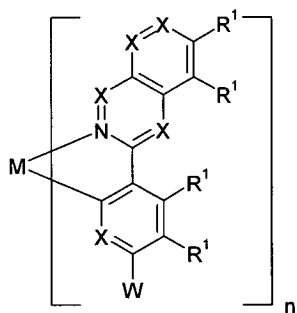
Formel (42)



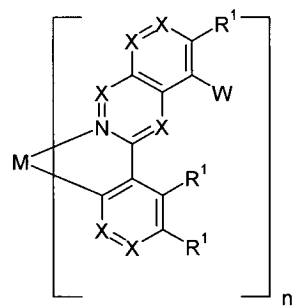
Formel (43)



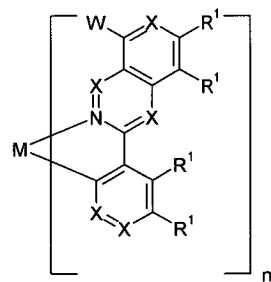
Formel (44)



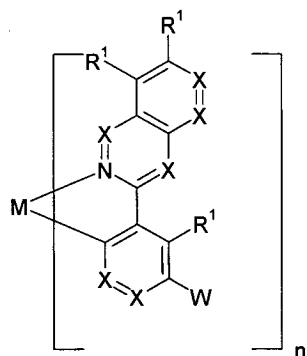
Formel (45)



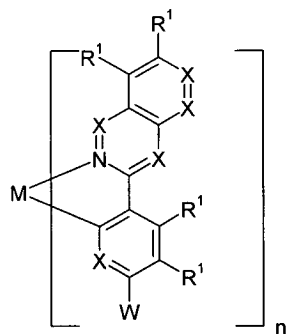
Formel (46)



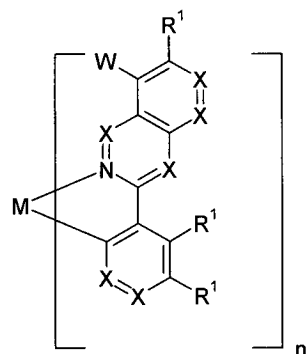
Formel (47)



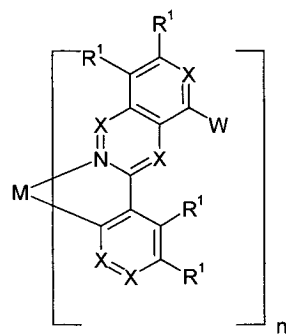
Formel (48)



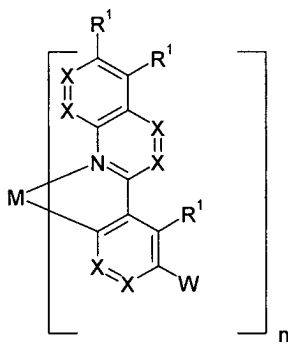
Formel (49)



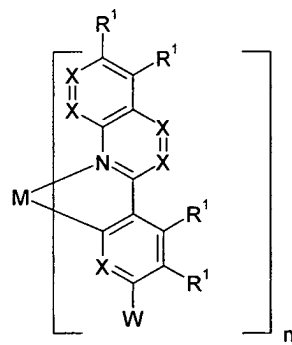
Formel (50)



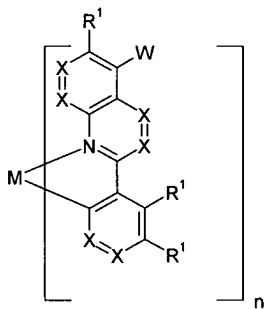
Formel (51)



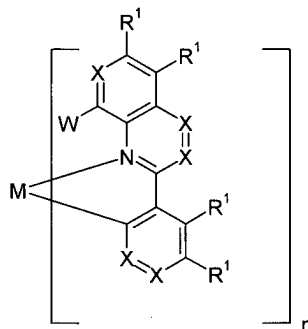
Formel (52)



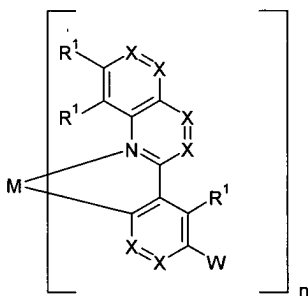
Formel (53)



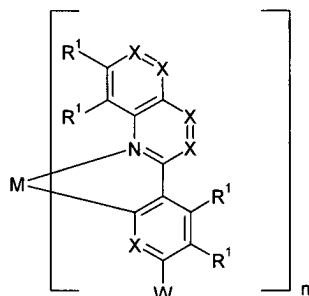
Formel (54)



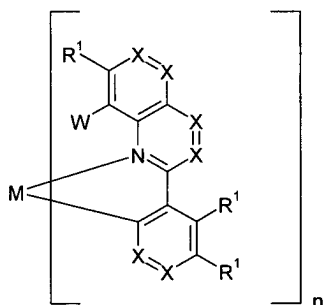
Formel (55)



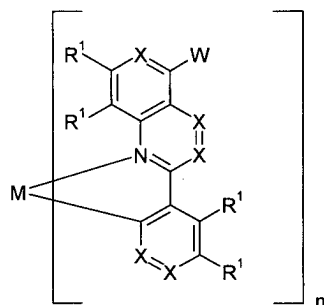
Formel (56)



Formel (57)



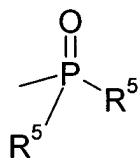
Formel (58)



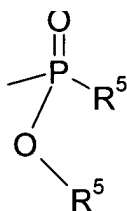
Formel (59)

9. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 8, dadurch gekennzeichnet, dass die Teilstruktur $M(L)_n$ ausgewählt ist aus den Formeln (36), (40), (44), (48), (52), und (56).

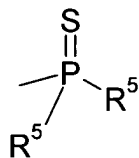
10. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 9, dadurch gekennzeichnet, dass der Rest W gegeben ist durch die Formeln (110) bis (115)



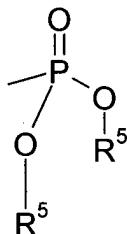
Formel (110)



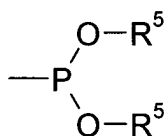
Formel (111)



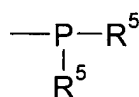
Formel (112)



Formel (113)



Formel (114)



Formel (115)

wobei

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

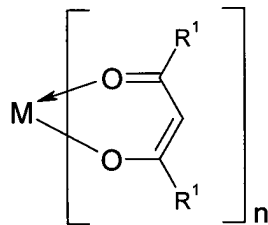
11. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 10, dadurch gekennzeichnet, dass M gleich Iridium ist.

12. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 11, dadurch gekennzeichnet, dass $m = 0$ ist.

13. Verfahren zur Herstellung einer Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 12 durch Umsetzung der entsprechenden freien Liganden mit Metallalkoholaten der Formel (344), mit Metallketoketonen der Formel (345) oder mit Metallhalogeniden der Formel (346)



Formel (344)



Formel (345)



Formel (346)

wobei die Symbole M, n und R¹ die in den obigen Ansprüchen angegebenen Bedeutungen haben und Hal = F, Cl, Br oder I ist.

14. Formulierung enthaltend wenigstens eine Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 12 und wenigstens ein Lösungsmittel.

15. Verwendung einer Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 12 in einer elektronischen 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).

16. Elektronische Vorrichtung, enthaltend mindestens eine Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 12, 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).

17. Organische Elektrolumineszenzvorrichtung nach Anspruch 16, dadurch gekennzeichnet, dass die Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 12 als emittierende Verbindung in einer oder mehreren emittierenden Schichten eingesetzt wird, bevorzugt in Kombination mit einem Matrixmaterial, wobei das Matrixmaterial bevorzugt ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus Ketonen, Phosphinoxiden, Sulfoxiden, Sulfonen, Triarylaminen, Carbazolderivaten, Indolocarbazolderivaten, Indenocarbazolderivaten, Azacarbazolderivaten, bipolaren Matrixmaterialien, Silanen, Azaborolen, Boronestern, Triazinderivaten, Zinkkomplexen, Diaza- oder Tetraazasilolderivaten oder Diazaphospholderivaten oder Mischungen dieser Matrixmaterialien.

18. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 12 oder Vorrichtung nach Anspruch 16 oder 17 zur Therapie, Prophylaxe und/oder Diagnose von Erkrankungen und/oder kosmetischer Umstände.

Es folgt kein Blatt Zeichnungen