

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

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum
Internationales Büro

(43) Internationales Veröffentlichungsdatum
30. September 2021 (30.09.2021)



(10) Internationale Veröffentlichungsnummer
WO 2021/191117 A1

(51) Internationale Patentklassifikation:

C07D 487/04 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 471/04 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C07D 495/14 (2006.01)

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2021/057202

(22) Internationales Anmeldedatum:
22. März 2021 (22.03.2021)

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:
20165094.2 24. März 2020 (24.03.2020) EP

(71) Anmelder: MERCK PATENT GMBH [DE/DE]; Frankfurter Strasse 250, 64293 Darmstadt (DE).

(72) Erfinder: PARHAM, Amir Hossain; c/o Merck KGaA, Frankfurter Strasse 250, 64293 DARMSTADT (DE). EHRENREICH, Christian; c/o Merck KGaA, Frankfurter Strasse 250, 64293 DARMSTADT (DE). ENGELHART,

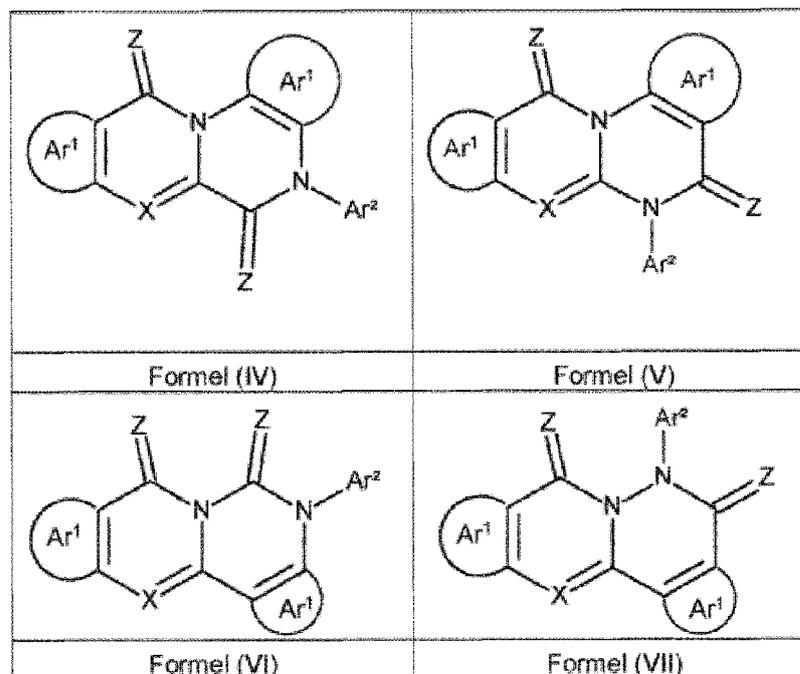
Jens; c/o Merck KGaA, Frankfurter Strasse 250, 64293 DARMSTADT (DE).

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

(84) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare regionale Schutzrechtsart): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), europäisches (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI,

(54) Title: MATERIALS FOR ELECTRONIC DEVICES

(54) Bezeichnung: MATERIALIEN FÜR ELEKTRONISCHE VORRICHTUNGEN



Formel = Formula

(57) Abstract: The application relates to heterocyclic compounds of formulae (IV) to (VII), to the use of said compounds in an electronic device, and to methods for producing said compounds.

(57) Zusammenfassung: Die vorliegende Anmeldung betrifft heterocyclische Verbindungen der Formeln (IV) bis (VII), die Verwendung der Verbindungen in einer elektronischen Vorrichtung, und Verfahren zur Herstellung der Verbindungen.

[Fortsetzung auf der nächsten Seite]

WO 2021/191117 A1

SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN,
GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

Veröffentlicht:

— *mit internationalem Recherchenbericht (Artikel 21 Absatz
3)*

Materialien für elektronische Vorrichtungen

Die vorliegende Erfindung betrifft Materialien für die Verwendung in elektronischen Vorrichtungen sowie elektronische Vorrichtungen, enthaltend diese Materialien.

Unter elektronischen Vorrichtungen im Sinne dieser Anmeldung werden sogenannte organische elektronische Vorrichtungen verstanden (organic electronic devices), welche organische Halbleitermaterialien als Funktionsmaterialien enthalten. Insbesondere werden darunter OLEDs (organische Elektrolumineszenzvorrichtungen) verstanden. Unter der Bezeichnung OLEDs werden elektronische Vorrichtungen verstanden, welche eine oder mehrere Schichten enthaltend organische Verbindungen aufweisen und unter Anlegen von elektrischer Spannung Licht emittieren. Der Aufbau und das allgemeine Funktionsprinzip von OLEDs sind dem Fachmann bekannt.

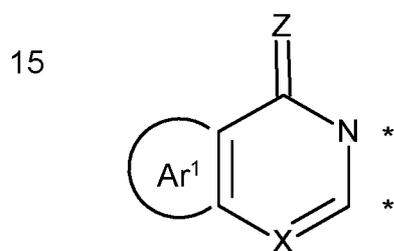
In OLEDs werden als emittierende Materialien häufig phosphoreszierende metallorganische Komplexe eingesetzt. Generell gibt es bei OLEDs, insbesondere auch bei OLEDs, die Triplettemission (Phosphoreszenz) zeigen, immer noch Verbesserungsbedarf, beispielsweise im Hinblick auf Effizienz, Betriebsspannung und Lebensdauer. Die Eigenschaften phosphoreszierender OLEDs werden nicht nur von den eingesetzten Triplettemittern bestimmt. Hier sind insbesondere auch die anderen verwendeten Materialien, wie Matrixmaterialien, von besonderer Bedeutung. Verbesserungen dieser Materialien können somit auch zu Verbesserungen der OLED-Eigenschaften führen. Eine bekannte Klasse von Materialien, die als Matrixmaterialien für Triplettemitter in OLEDs verwendet wird, sind beispielsweise aromatische Isochinoline.

Aufgabe der vorliegenden Erfindung ist die Bereitstellung von Verbindungen, welche sich für den Einsatz in einer OLED eignen, insbesondere

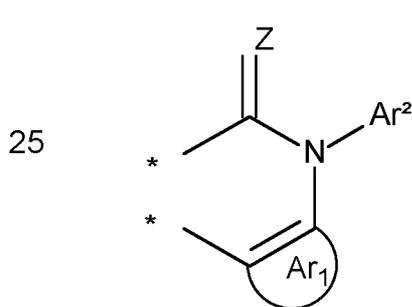
als Matrixmaterial für phosphoreszierende Emitter oder als Elektronen-transportmaterial, und dort zu guten Eigenschaften führen.

Überraschend wurde gefunden, dass bestimmte, unten näher beschriebene Verbindungen diese Aufgabe lösen und sich gut für die Verwendung in OLEDs eignen. Dabei weisen die OLEDs insbesondere eine lange Lebensdauer, eine hohe Effizienz und eine geringe Betriebsspannung auf. Diese Verbindungen sowie elektronische Vorrichtungen, insbesondere organische Elektrolumineszenzvorrichtungen, welche diese Verbindungen enthalten, sind daher der Gegenstand der vorliegenden Erfindung.

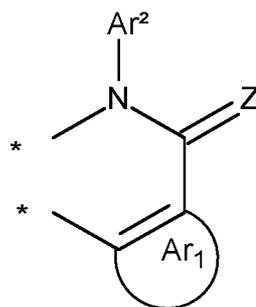
Gegenstand der vorliegenden Anmeldung ist damit eine Verbindung einer Formel (I),



20 wobei an den mit * markierten Bindungspunkten am Ring eine Einheit gemäß Formel (II) oder Formel (III) jeweils über die mit * markierten Bindungen gebunden ist



Formel (II)



Formel (III),

30

und wobei für die auftretenden Variablen gilt:

X ist gleich N oder CAr^3 ;

Z ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus O oder S;

5 Ar^1 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus
ankondensierten aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen
Ringatomen, und ankondensierten heteroaromatischen Ringsystemen mit 5
bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei die aromatischen Ringsysteme
und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^1 substituiert
10 sind;

Ar^2 ist gewählt aus verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen
mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-
Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen
15 Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40
aromatischen Ringatomen; wobei die genannten Gruppen jeweils mit einem
oder mehreren Resten R^2 substituiert sind;

Ar^3 ist gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $\text{C}(=\text{O})\text{R}^3$, CN, $\text{Si}(\text{R}^3)_3$, $\text{N}(\text{R}^3)_2$,
20 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^3)_2$, OR^3 , $\text{S}(=\text{O})\text{R}^3$, $\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^3$, geradkettigen Alkyl- oder
Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl-
oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen
mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40
aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5
25 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-,
Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme
und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^3 substituiert
sind; und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-,
Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch $-\text{R}^3\text{C}=\text{CR}^3-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $\text{Si}(\text{R}^3)_2$,
30 $\text{C}=\text{O}$, $\text{C}=\text{NR}^3$, $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$, $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^3-$, NR^3 , $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^3)$, $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, SO oder
 SO_2 ersetzt sein können;

R^1 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R^1 miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^4 substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, $C=O$, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, $-O-$, $-S-$, SO oder SO_2 ersetzt sein können;

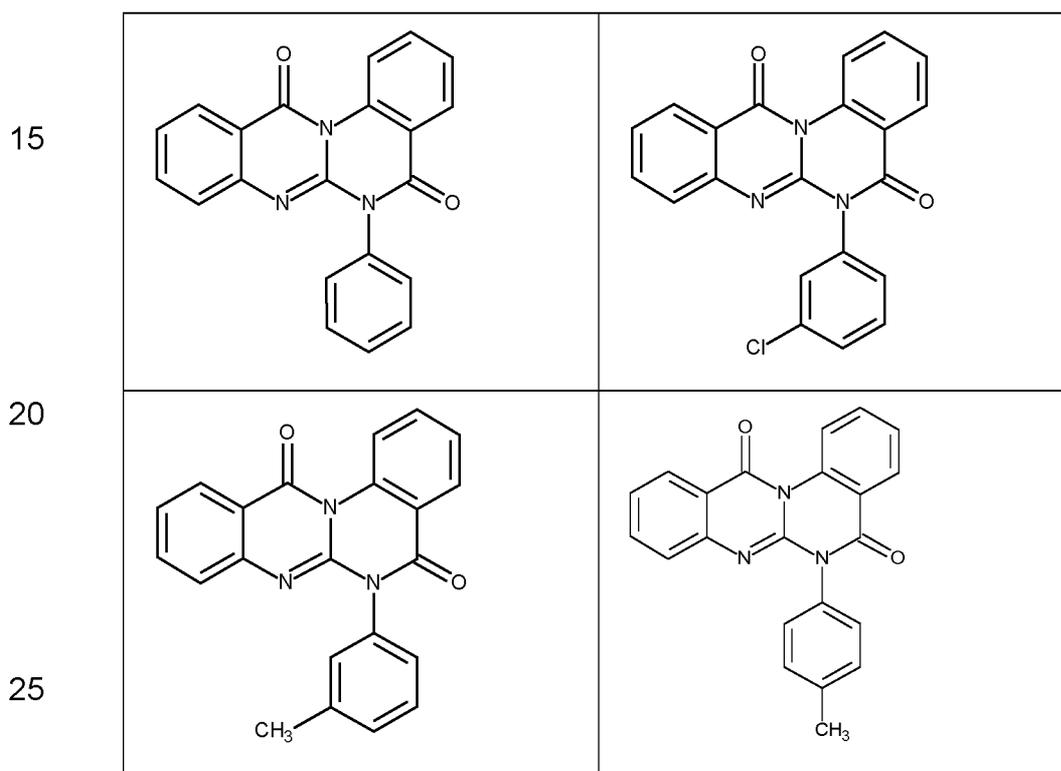
R^2 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R^2 miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^4 substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, $C=O$, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, $-O-$, $-S-$, SO oder SO_2 ersetzt sein können;

R^3 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R^3 miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^4 substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, $C=O$, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, $-O-$, $-S-$, SO oder SO_2 ersetzt sein können;

R^4 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^5$, CN, $Si(R^5)_3$, $N(R^5)_2$, $P(=O)(R^5)_2$, OR^5 , $S(=O)R^5$, $S(=O)_2R^5$, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R^4 miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^5 substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch $-R^5C=CR^5-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^5)_2$, $C=O$, $C=NR^5$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^5-$, NR^5 , $P(=O)(R^5)$, $-O-$, $-S-$, SO oder SO_2 ersetzt sein können;

R^5 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, CN, Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R^5 miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; und wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen, aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme mit einem oder mehreren Resten gewählt aus F und CN substituiert sein können;

wobei die folgenden Verbindungen ausgeschlossen sind:



Die folgenden Definitionen gelten für die chemischen Gruppen, die in der vorliegenden Anmeldung verwendet werden. Sie gelten, soweit keine spezielleren Definitionen angegeben sind.

Unter einer Arylgruppe im Sinne dieser Erfindung wird entweder ein einzelner aromatischer Cyclus, also Benzol, oder ein kondensierter aromatischer Polycyclus, beispielsweise Naphthalin, Phenanthren oder Anthracen, verstanden. Ein kondensierter aromatischer Polycyclus besteht im Sinne der vorliegenden Anmeldung aus zwei oder mehr miteinander kondensierten einzelnen aromatischen Cyclen. Unter Kondensation zwischen Cyclen ist dabei zu verstehen, dass die Cyclen mindestens eine Kante miteinander teilen. Eine Arylgruppe im Sinne dieser Erfindung enthält 6 bis 40 aromatische Ringatome. Weiterhin enthält eine Arylgruppe kein Heteroatom als aromatisches Ringatom, sondern nur Kohlenstoffatome.

Unter einer Heteroarylgruppe im Sinne dieser Erfindung wird entweder ein einzelner heteroaromatischer Cyclus, beispielsweise Pyridin, Pyrimidin oder Thiophen, oder ein kondensierter heteroaromatischer Polycyclus, beispielsweise Chinolin oder Carbazol, verstanden. Ein kondensierter heteroaromatischer Polycyclus besteht im Sinne der vorliegenden Anmeldung aus zwei oder mehr miteinander kondensierten einzelnen aromatischen oder heteroaromatischen Cyclen, wobei wenigstens einer der aromatischen und heteroaromatischen Cyclen ein heteroaromatischer Cyclus ist. Unter Kondensation zwischen Cyclen ist dabei zu verstehen, dass die Cyclen mindestens eine Kante miteinander teilen. Eine Heteroarylgruppe im Sinne dieser Erfindung enthält 5 bis 40 aromatische Ringatome, von denen mindestens eines ein Heteroatom darstellt. Die Heteroatome der Heteroarylgruppe sind bevorzugt ausgewählt aus N, O und S.

Unter einer Aryl- oder Heteroarylgruppe, die jeweils mit den oben genannten Resten substituiert sein kann werden insbesondere Gruppen verstanden, welche abgeleitet sind von Benzol, Naphthalin, Anthracen, Phenanthren, Pyren, Dihydropyren, Chrysen, Perylen, Triphenylen, Fluoranthren, Benzanthracen, Benzphenanthren, Tetracen, Pentacen, Benzpyren, Furan, Benzofuran, Isobenzofuran, Dibenzofuran, Thiophen,

Benzothiophen, Isobenzothiophen, Dibenzothiophen, Pyrrol, Indol, Isoindol, Carbazol, Pyridin, Chinolin, Isochinolin, Acridin, Phenanthridin, Benzo-5,6-chinolin, Benzo-6,7-chinolin, Benzo-7,8-chinolin, Phenothiazin, Phenoxazin, Pyrazol, Indazol, Imidazol, Benzimidazol, Benzimidazolo[1,2-
5 a]benzimidazol, Naphthimidazol, Phenanthrimidazol, Pyridimidazol, Pyrazinimidazol, Chinoxalinimidazol, Oxazol, Benzoxazol, Naphthoxazol, Anthroxazol, Phenanthroxazol, Isoxazol, 1,2-Thiazol, 1,3-Thiazol, Benzo-thiazol, Pyridazin, Benzopyridazin, Pyrimidin, Benzpyrimidin, Chinoxalin, Pyrazin, Phenazin, Naphthyridin, Azacarbazol, Benzocarbonin, Phenanthrolin, 1,2,3-Triazol, 1,2,4-Triazol, Benzotriazol, 1,2,3-Oxadiazol,
10 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.

15

Ein aromatisches Ringsystem im Sinne dieser Erfindung ist ein System, welches nicht notwendigerweise nur Arylgruppen enthält, sondern welches zusätzlich einen oder mehrere nicht-aromatische Ringe enthalten kann, die mit wenigstens einer Arylgruppe kondensiert sind. Diese nicht-
20 aromatischen Ringe enthalten ausschließlich Kohlenstoffatome als Ringatome. Beispiele für Gruppen, die von dieser Definition umfasst sind, sind Tetrahydronaphthalin, Fluoren und Spirobifluoren. Weiterhin umfasst der Begriff aromatisches Ringsystem Systeme, die aus zwei oder mehr aromatischen Ringsystemen bestehen, die über Einfachbindungen
25 miteinander verbunden sind, beispielsweise Biphenyl, Terphenyl, 7-Phenyl-2-fluorenyl, Quaterphenyl und 3,5-Diphenyl-1-phenyl. Ein aromatisches Ringsystem im Sinne dieser Erfindung enthält 6 bis 40 C-Atome und keine Heteroatome im Ringsystem. Die Definition von „aromatisches Ringsystem“ umfasst nicht Heteroarylgruppen.

30

Ein heteroaromatisches Ringsystem entspricht der oben genannten Definition eines aromatischen Ringsystems, mit dem Unterschied, dass es

mindestens ein Heteroatom als Ringatom enthalten muss. Wie es beim aromatischen Ringsystem der Fall ist, muss das heteroaromatische Ringsystem nicht ausschließlich Arylgruppen und Heteroarylgruppen enthalten, sondern es kann zusätzlich einen oder mehrere nicht-
5 aromatische Ringe enthalten, die mit wenigstens einer Aryl- oder Heteroarylgruppe kondensiert sind. Die nicht-aromatischen Ringe können ausschließlich C-Atome als Ringatome enthalten, oder sie können zusätzlich ein oder mehrere Heteroatome enthalten, wobei die Heteroatome bevorzugt gewählt sind aus N, O und S. Ein Beispiel für ein
10 derartiges heteroaromatisches Ringsystem ist Benzopyranyl. Weiterhin werden unter dem Begriff „heteroaromatisches Ringsystem“ Systeme verstanden, die aus zwei oder mehr aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystemen bestehen, die miteinander über Einfachbindungen verbunden sind, wie beispielsweise 4,6-Diphenyl-2-triazinyl. Ein
15 heteroaromatisches Ringsystem im Sinne dieser Erfindung enthält 5 bis 40 Ringatome, die gewählt sind aus Kohlenstoff und Heteroatomen, wobei mindestens eines der Ringatome ein Heteroatom ist. Die Heteroatome des heteroaromatischen Ringsystems sind bevorzugt ausgewählt aus N, O und S.

20 Die Begriffe „heteroaromatisches Ringsystem“ und „aromatisches Ringsystem“ gemäß der Definition der vorliegenden Anmeldung unterscheiden sich damit dadurch voneinander, dass ein aromatisches Ringsystem kein Heteroatom als Ringatom aufweisen kann, während ein
25 heteroaromatisches Ringsystem mindestens ein Heteroatom als Ringatom aufweisen muss. Dieses Heteroatom kann als Ringatom eines nicht-aromatischen heterocyclischen Rings oder als Ringatom eines aromatischen heterocyclischen Rings vorliegen.

30 Entsprechend der obenstehenden Definitionen ist jede Arylgruppe vom Begriff „aromatisches Ringsystem“ umfasst, und jede Heteroarylgruppe ist vom Begriff „heteroaromatisches Ringsystem“ umfasst.

Unter einem aromatischen Ringsystem mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen oder einem heteroaromatischen Ringsystem mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen, werden insbesondere Gruppen verstanden, die
5 abgeleitet sind von den oben unter Arylgruppen und Heteroarylgruppen genannten Gruppen sowie von Biphenyl, Terphenyl, Quaterphenyl, Fluoren, Spirobifluoren, Dihydrophenanthren, Dihdropyren, Tetrahydropyren, Indenofluoren, Truxen, Isotruxen, Spirotruxen, Spiroisotruxen, Indenocarbazol, oder von Kombinationen dieser Gruppen.

10 Im Rahmen der vorliegenden Erfindung werden unter einer geradkettigen Alkylgruppe mit 1 bis 20 C-Atomen bzw. einer verzweigten oder cyclischen Alkylgruppe mit 3 bis 20 C-Atomen bzw. einer Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen, in der auch einzelne H-Atome oder CH₂-Gruppen
15 durch die oben bei der Definition der Reste genannten Gruppen substituiert sein können, bevorzugt die Reste Methyl, Ethyl, n-Propyl, i-Propyl, n-Butyl, i-Butyl, s-Butyl, t-Butyl, 2-Methylbutyl, n-Pentyl, s-Pentyl, Cyclopentyl, neo-Pentyl, n-Hexyl, Cyclohexyl, neo-Hexyl, n-Heptyl, Cycloheptyl, n-Octyl, Cyclooctyl, 2-Ethylhexyl, Trifluormethyl, Pentafluorethyl, 2,2,2-Trifluorethyl,
20 Ethenyl, Propenyl, Butenyl, Pentenyl, Cyclopentenyl, Hexenyl, Cyclohexenyl, Heptenyl, Cycloheptenyl, Octenyl, Cyclooctenyl, Ethinyl, Propinyl, Butinyl, Pentinyl, Hexinyl oder Octinyl verstanden.

Unter einer Alkoxy- oder Thioalkylgruppe mit 1 bis 20 C-Atomen, in der
25 auch einzelne H-Atome oder CH₂-Gruppen durch die oben bei der Definition der Reste genannten Gruppen substituiert sein können, werden bevorzugt Methoxy, Trifluormethoxy, Ethoxy, n-Propoxy, i-Propoxy, n-Butoxy, i-Butoxy, s-Butoxy, t-Butoxy, n-Pentoxy, s-Pentoxy, 2-Methylbutoxy, n-Hexoxy, Cyclohexyloxy, n-Heptoxy, Cycloheptyloxy, n-Octyloxy,
30 Cyclooctyloxy, 2-Ethylhexyloxy, Pentafluorethoxy, 2,2,2-Trifluorethoxy, Methylthio, Ethylthio, n-Propylthio, i-Propylthio, n-Butylthio, i-Butylthio, s-Butylthio, t-Butylthio, n-Pentylthio, s-Pentylthio, n-Hexylthio, Cyclohexylthio,

n-Heptylthio, Cycloheptylthio, n-Octylthio, Cyclooctylthio, 2-Ethylhexylthio, Trifluormethylthio, Pentafluorethylthio, 2,2,2-Trifluorethylthio, Ethenylthio, Propenylthio, Butenylthio, Pentenylthio, Cyclopentenylthio, Hexenylthio, Cyclohexenylthio, Heptenylthio, Cycloheptenylthio, Octenylthio, Cyclooctenylthio, Ethinylthio, Propinylthio, Butinylthio, Pentinylthio, Hexinylthio, Heptinylthio oder Octinylthio verstanden.

Unter der Formulierung, dass zwei oder mehr Reste miteinander einen Ring bilden können, soll im Rahmen der vorliegenden Anmeldung unter anderem verstanden werden, dass die beiden Reste miteinander durch eine chemische Bindung verknüpft sind. Weiterhin soll unter der oben genannten Formulierung aber auch verstanden werden, dass für den Fall, dass einer der beiden Reste Wasserstoff darstellt, der zweite Rest unter Bildung eines Rings an die Position, an die das Wasserstoffatom gebunden war, bindet.

Bevorzugt ist Z gleich O.

Bevorzugt ist X gleich N. Gemäß einer alternativen, ebenfalls bevorzugten Ausführungsform ist X gleich $C\text{Ar}^3$.

Bevorzugt ist Ar^1 bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus ankondensierten aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 18 aromatischen Ringatomen, und ankondensierten heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 18 aromatischen Ringatomen, wobei die genannten Ringsysteme mit Resten R^1 substituiert sind. Weiterhin bevorzugt ist Ar^1 bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus ankondensierten Arylgruppen mit 6 bis 18 aromatischen Ringatomen und ankondensierten Heteroarylgruppen mit 5 bis 18 aromatischen Ringatomen, die jeweils mit Resten R^1 substituiert sind. Besonders bevorzugt ist Ar^1 bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus ankondensierten Gruppen gewählt aus Benzol, Biphenyl, Pyridin, Pyrimidin, Pyridazin, Naphthalin, Chinolin, Chinazolin,

Phenanthren, Anthracen, Fluoren, Carbazol, Furan, Dibenzofuran, Thiophen und Dibenzothiophen, ganz besonders bevorzugt Benzol, Pyridin, Furan und Thiophen, am stärksten bevorzugt Benzol, die jeweils mit Resten R^1 substituiert sind.

5

Bevorzugt ist Ar^2 ein aromatisches Ringsystem mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, das mit Resten R^2 substituiert ist. Besonders bevorzugt ist Ar^2 gewählt aus Benzol, Pyridin, Pyrimidin, Pyridazin, Naphthalin, Chinolin, Chinazolin, Phenanthren, Anthracen, Fluoren, Carbazol, Dibenzofuran, 10 Dibenzothiophen, Biphenyl, Terphenyl, Quaterphenyl, Fluoren, Spirobifluoren, Dihydrophenanthren, Dihdropyren, Tetrahydropyren, Indenofluoren, Truxen, Isotruxen, Spirotruxen, Spiroisotruxen, Indenocarbazol, die jeweils mit Resten R^2 substituiert sind, oder aus Kombinationen dieser Gruppen, am stärksten bevorzugt ist Ar^2 gewählt aus 15 Phenyl, Pyridin, Naphthalin, Triphenylen, Carbazol, Pyrimidin, Triazin, Triazinyl-Phenylen und Biphenyl, die jeweils mit Resten R^2 substituiert sind.

15

20

Bevorzugt ist Ar^3 bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, die mit Resten R^3 substituiert sind, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen, die mit Resten R^3 substituiert sind.

25

30

Bevorzugt ist R^1 bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, geradkettigen Alkylgruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkylgruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei die genannten Alkylgruppen, die genannten aromatischen Ringsysteme und die genannten 30 heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^4 substituiert sind; und wobei in den genannten Alkylgruppen eine oder mehrere CH_2 -Gruppen

durch $-C\equiv C-$, $-R^4C=CR^4-$, $Si(R^4)_2$, $C=O$, $C=NR^4$, $-NR^4-$, $-O-$, $-S-$, $-C(=O)O-$ oder $-C(=O)NR^4-$ ersetzt sein können.

5 Bevorzugt ist R^2 bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, geradkettigen Alkylgruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkylgruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei die genannten Alkylgruppen, die
10 genannten aromatischen Ringsysteme und die genannten heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^4 substituiert sind; und wobei in den genannten Alkylgruppen eine oder mehrere CH_2 -Gruppen durch $-C\equiv C-$, $-R^4C=CR^4-$, $Si(R^4)_2$, $C=O$, $C=NR^4$, $-NR^4-$, $-O-$, $-S-$, $-C(=O)O-$ oder $-C(=O)NR^4-$ ersetzt sein können.

15 Bevorzugt ist R^3 bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, geradkettigen Alkylgruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkylgruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei die genannten Alkylgruppen, die
20 genannten aromatischen Ringsysteme und die genannten heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^4 substituiert sind; und wobei in den genannten Alkylgruppen eine oder mehrere CH_2 -Gruppen
25 durch $-C\equiv C-$, $-R^4C=CR^4-$, $Si(R^4)_2$, $C=O$, $C=NR^4$, $-NR^4-$, $-O-$, $-S-$, $-C(=O)O-$ oder $-C(=O)NR^4-$ ersetzt sein können.

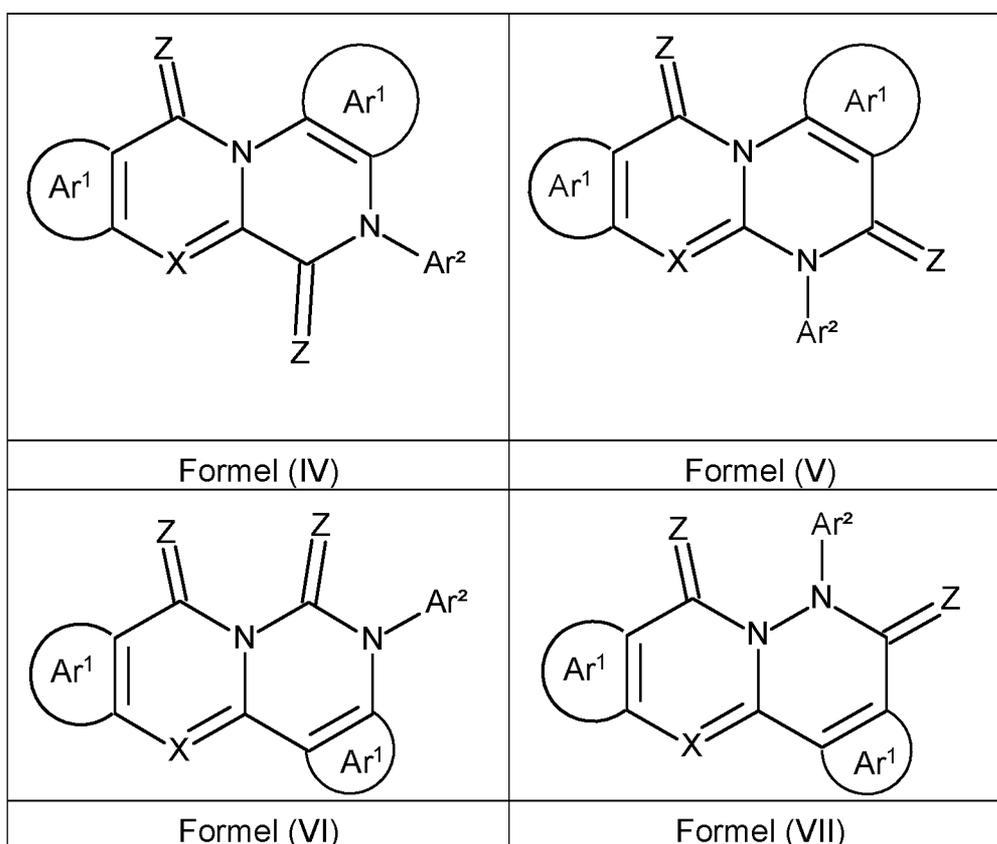
30 Bevorzugt ist R^4 bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, CN, Alkylgruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R^4

miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; und wobei die genannten Alkyl-, Alkenyl- und Alkynylgruppen, aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme mit einem oder mehreren Resten gewählt aus F und CN substituiert sein können;

5

Bevorzugt entsprechen die Verbindungen der Formel (I) einer der Formeln (IV) bis (VII),

10



15

20

25

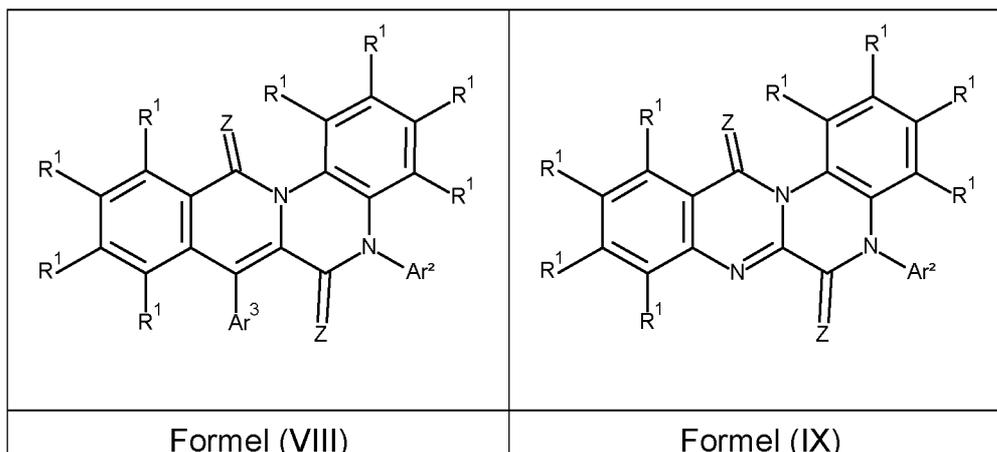
wobei die Variablen definiert sind wie für die Verbindungen der Formel (I).

Unter den oben genannten Formeln sind die Formeln (IV), (V) und (VI) besonders bevorzugt.

30

Besonders bevorzugt entsprechen die Verbindungen der Formel (IV) einer der Formeln (VIII) oder (IX):

5

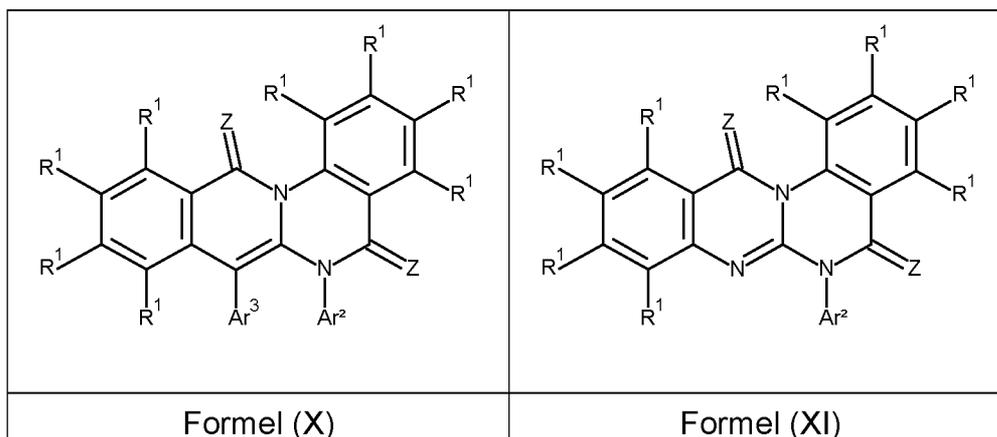


10

wobei die Variablen definiert sind wie für die Verbindungen der Formel (I). Bevorzugt entsprechen die Variablen in Formeln (VIII) und (IX) ihren oben angegebenen bevorzugten Ausführungsformen.

Besonders bevorzugt entsprechen die Verbindungen der Formel (V) einer der Formeln (X) oder (XI):

15



20

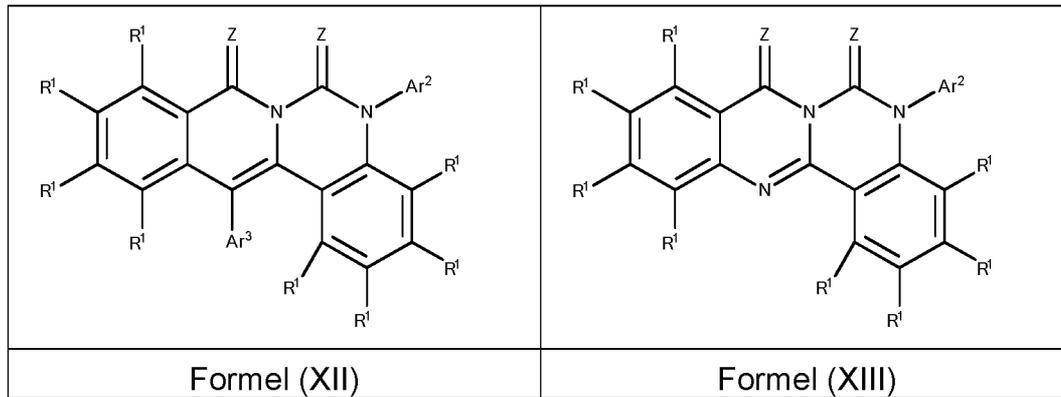
wobei die Variablen definiert sind wie für die Verbindungen der Formel (I). Bevorzugt entsprechen die Variablen in Formeln (X) und (XI) ihren oben angegebenen bevorzugten Ausführungsformen.

25

Besonders bevorzugt entsprechen die Verbindungen der Formel (VI) einer der Formeln (XII) oder (XIII):

30

5



10

wobei die Variablen definiert sind wie für die Verbindungen der Formel (I). Bevorzugt entsprechen die Variablen in Formeln (XII) und (XIII) ihren oben angegebenen bevorzugten Ausführungsformen.

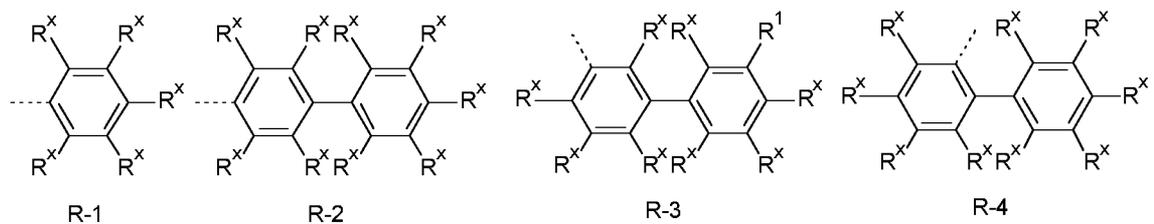
15

Besonders bevorzugt sind weiterhin Verbindungen der Formel (I), in denen mindestens eine, bevorzugt zwei Gruppen gewählt aus R^1 , Ar^2 und Ar^3 , besonders bevorzugt mindestens eine, bevorzugt zwei Gruppen gewählt aus R^1 und Ar^2 gewählt sind aus aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, die mit Resten R^4 bzw. R^2 bzw. R^3 substituiert sind, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen, die mit Resten R^4 bzw. R^2 bzw. R^3 substituiert sind.

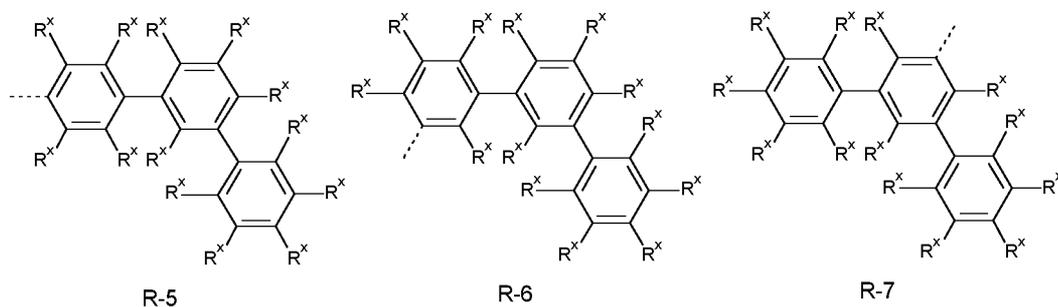
20

In diesen Fällen sind die aromatischen und heteroaromatischen Ringsysteme bevorzugt gewählt aus den Gruppen R-1 bis R-84:

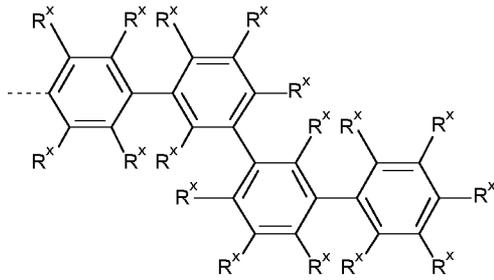
25



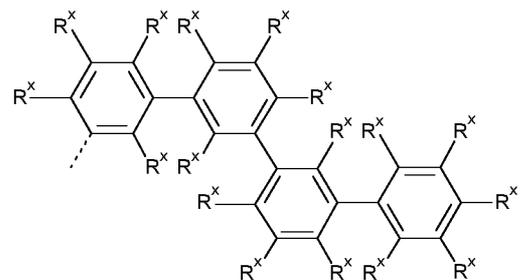
30



5

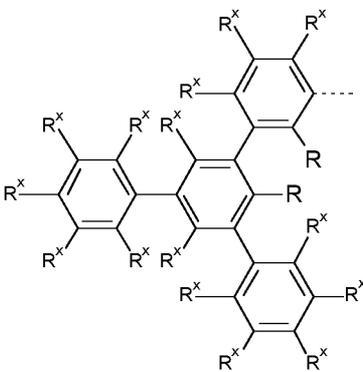


R-8

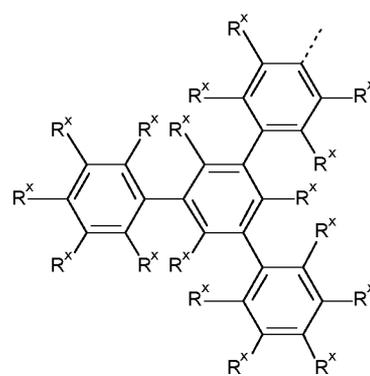


R-9

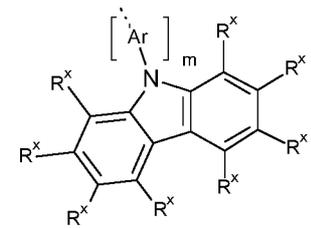
10



R-10



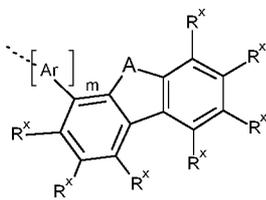
R-11



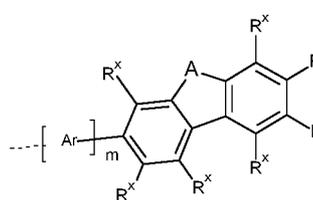
R-12

15

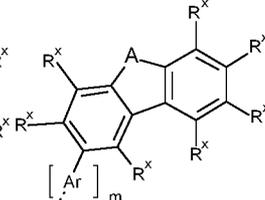
20



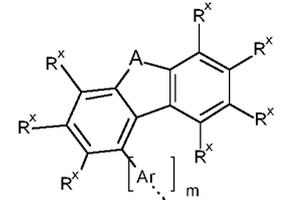
R-13



R-14

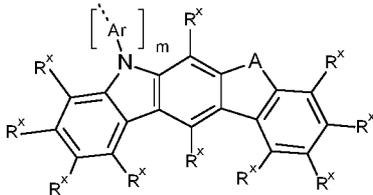


R-15

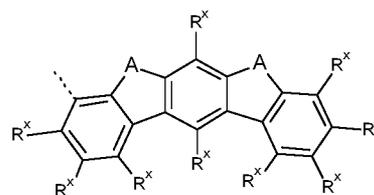


R-16

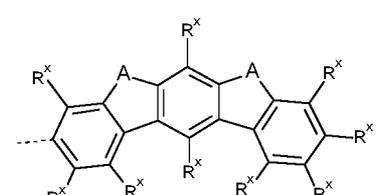
25



R-17



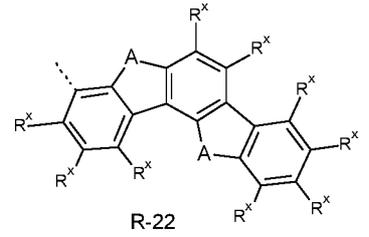
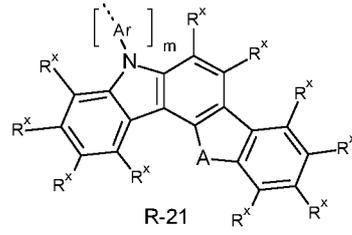
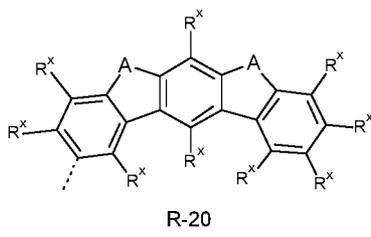
R-18



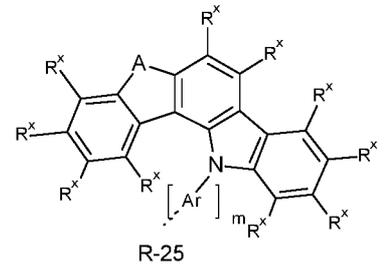
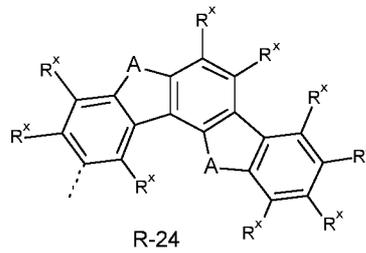
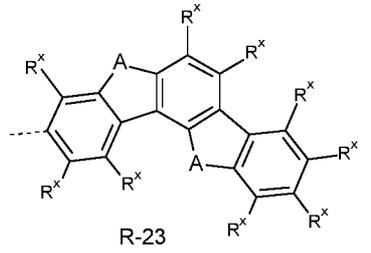
R-19

30

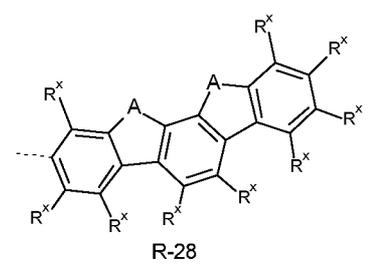
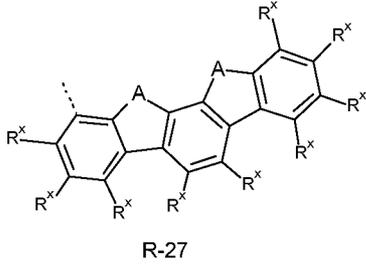
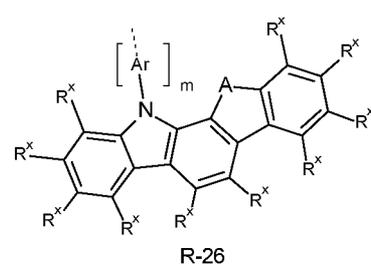
5



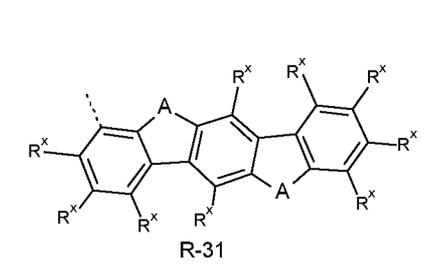
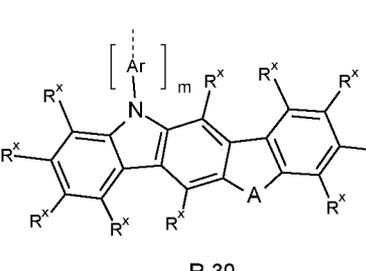
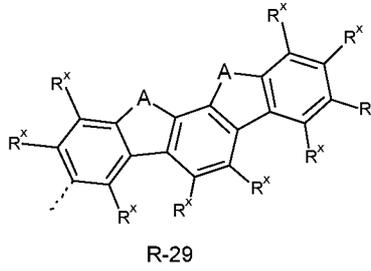
10



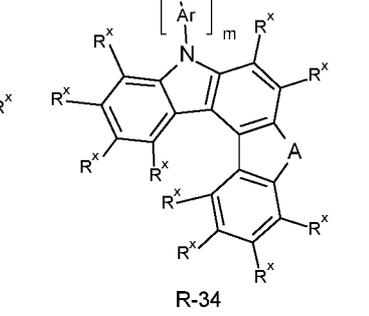
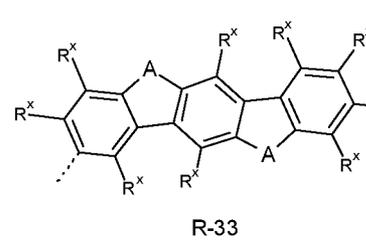
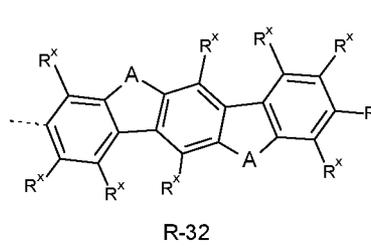
15



20

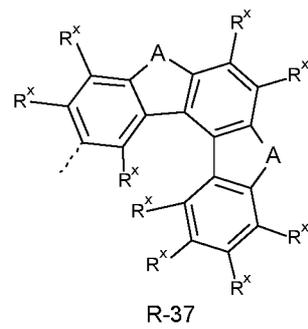
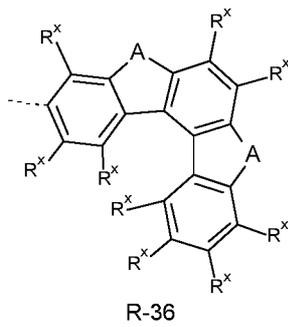
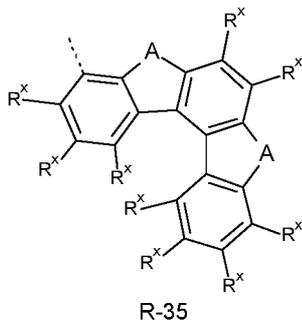


25

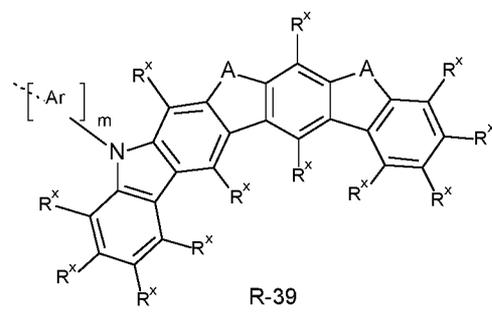
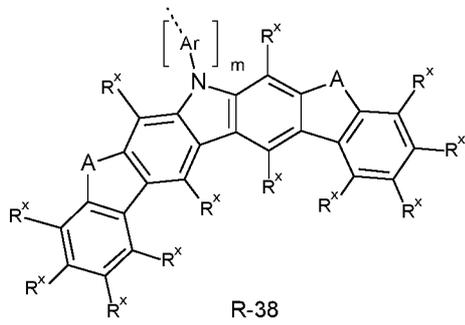


30

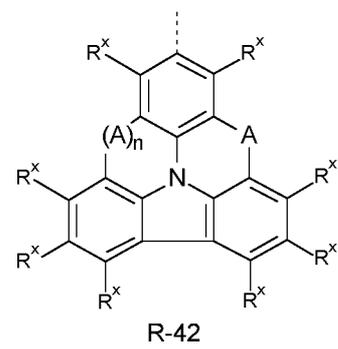
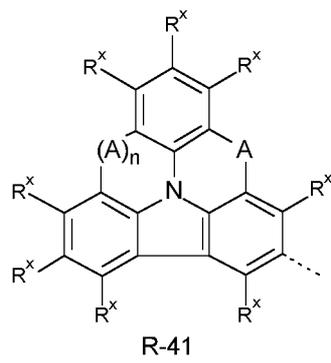
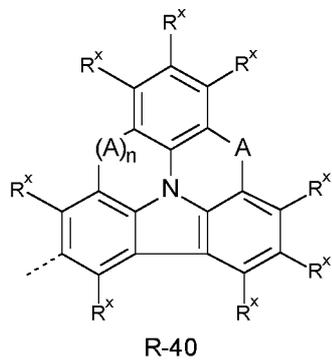
5



10



15

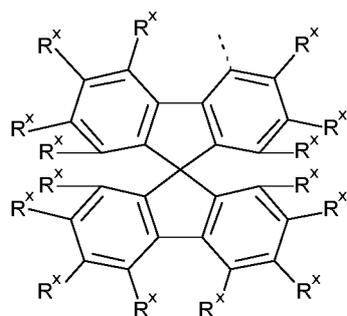


20

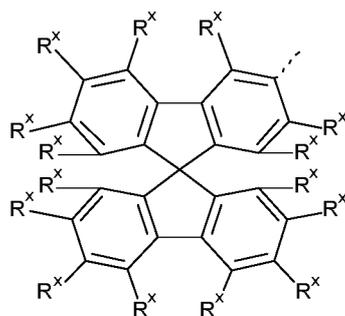
25

30

5

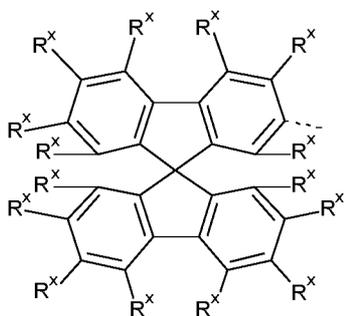


R-43

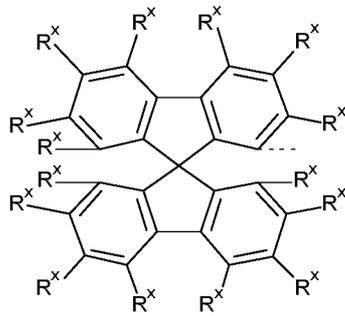


R-44

10

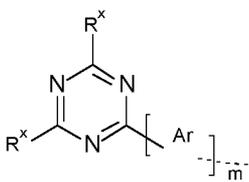


R-45

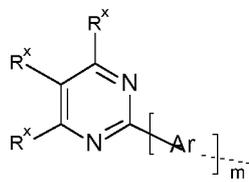


R-46

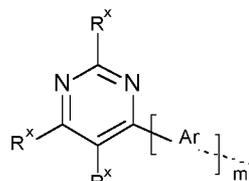
15



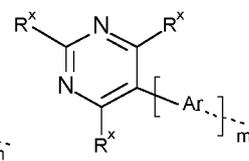
R-47



R-48

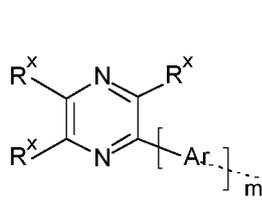


R-49

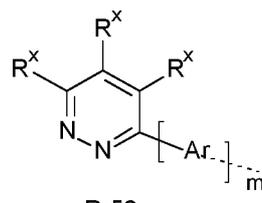


R-50

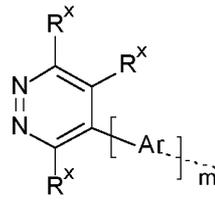
20



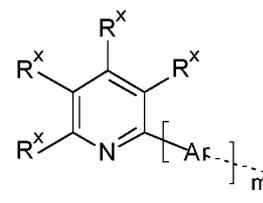
R-51



R-52



R-53

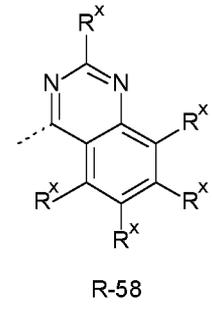
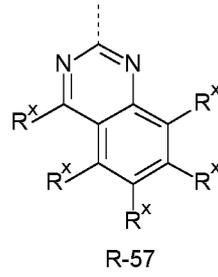
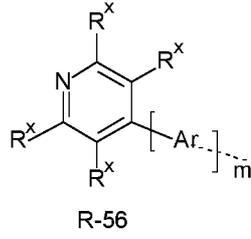
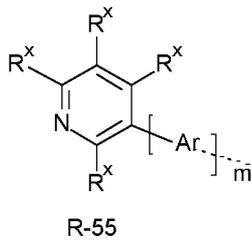


R-54

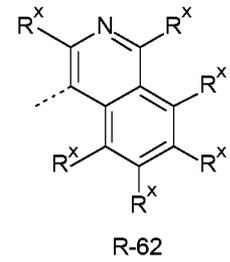
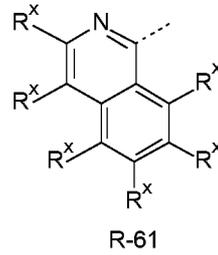
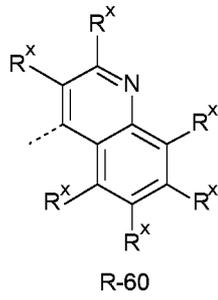
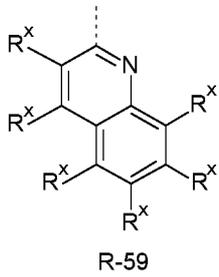
25

30

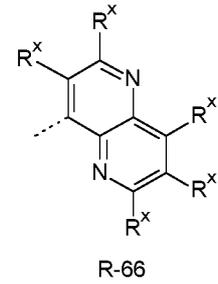
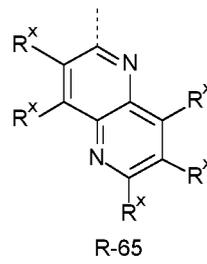
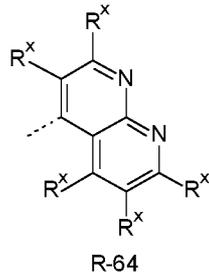
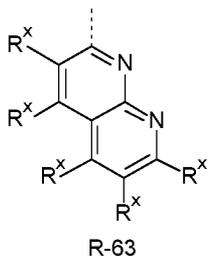
5



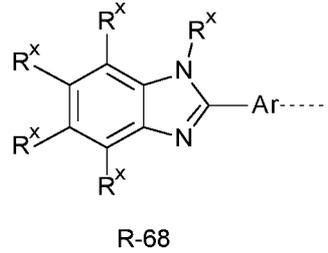
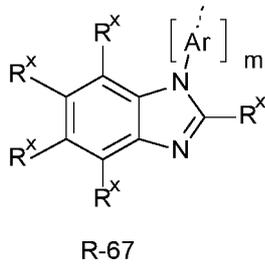
10



15

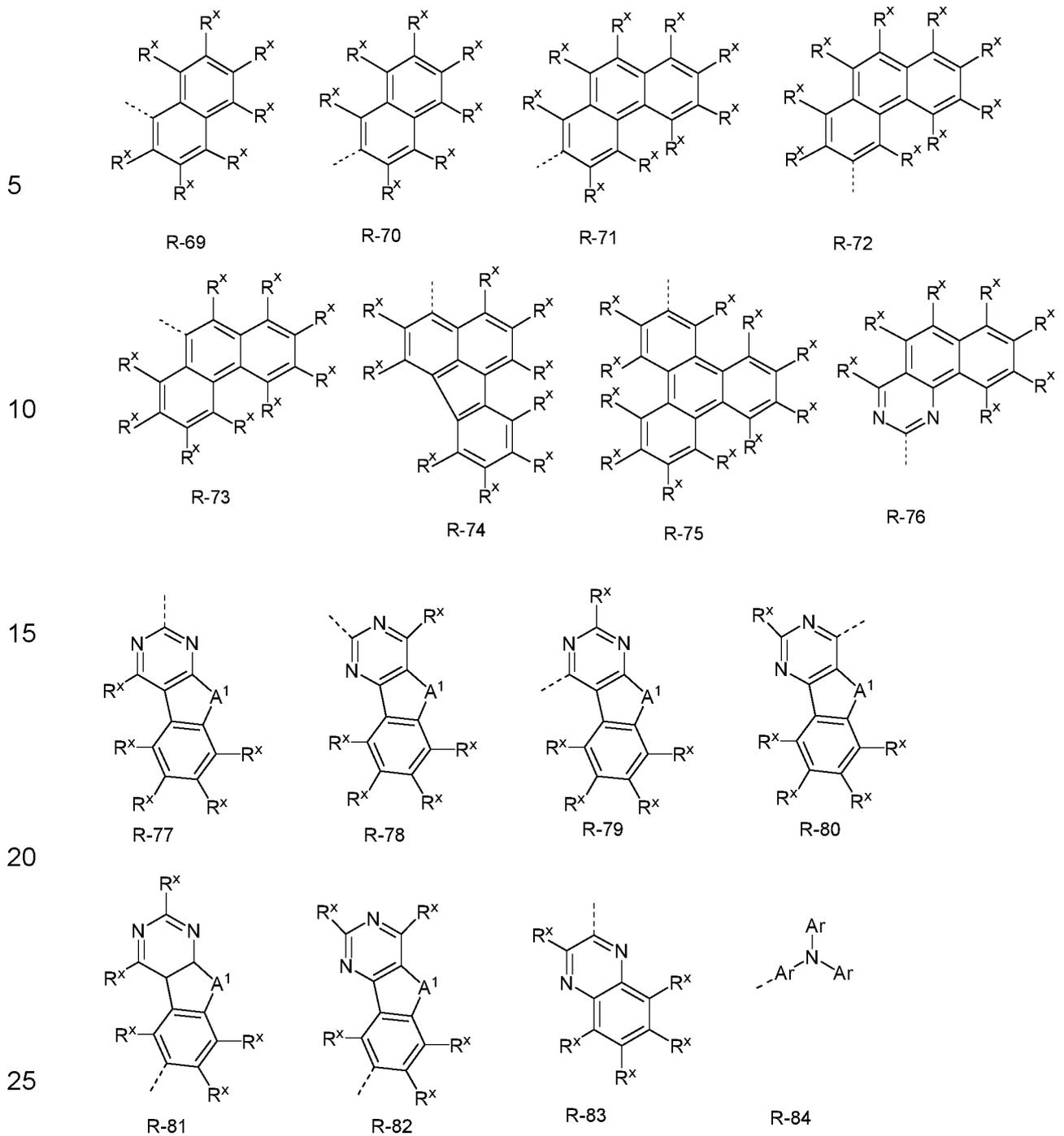


20



25

30



wobei die gestrichelte Bindung die Bindung an ein Kohlenstoffatom des Grundgerüsts in Formel (I) darstellt und wobei weiterhin gilt:

- Ar steht in den Gruppen R-1 bis R-84 für ein aromatisches Ringsystem mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, das mit einem oder mehreren Resten R^x substituiert ist oder für ein heteroaromatisches Ringsystem

mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen, das mit einem oder mehreren Resten R^x substituiert ist;

- A ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus $C(R^x)_2$, NR^x , S und O;
- 5 - A^1 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus $C(R^x)_2$, NR^x , S und O;
- m ist 0 oder 1; wobei m=0 bedeutet, dass die betreffende Gruppe nicht vorhanden ist und die an die betreffende Gruppe bindenden Gruppen direkt miteinander verbunden sind;
- n ist 0 oder 1, wobei n=0 bedeutet, dass an dieser Position keine
- 10 Gruppe A gebunden ist und an den entsprechenden Kohlenstoffatomen stattdessen Reste R^x gebunden sind;

wobei für R^x gilt,

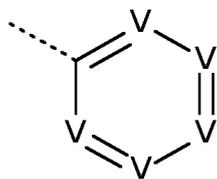
- Wenn für R^1 eine Gruppe aus R-1 bis R-84 gewählt wird, dann steht R^x für R^4 ;
- 15 - Wenn für Ar^2 eine Gruppe aus R-1 bis R-84 gewählt wird, dann steht R^x für R^2 ;
- Wenn für Ar^3 eine Gruppe aus R-1 bis R-84 gewählt wird, dann steht R^x für R^3 ;

und die Variablen R^2 , R^3 und R^4 sind wie für die Verbindungen der Formel (I) definiert.

20

Bevorzugt entsprechen die Verbindungen einer der Formeln (IV) bis (VII), besonders bevorzugt einer der Formeln (IV) bis (VI), wobei:

- Z gleich oder verschieden gewählt ist aus O und S ;
- X gleich N oder CAr^3 ist;
- 25 - Ar^1 gleich Phenyl ist, das mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert ist;
- und Ar^2 gleich



30

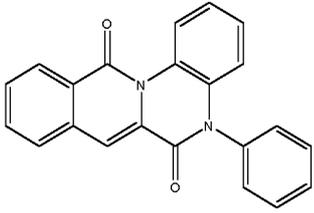
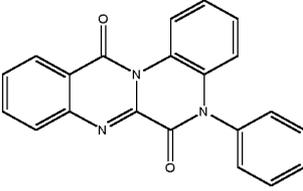
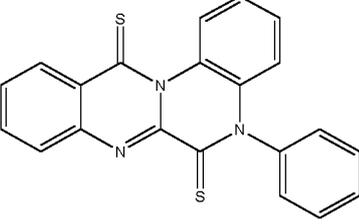
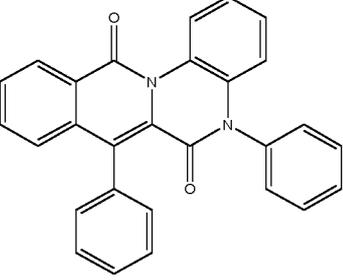
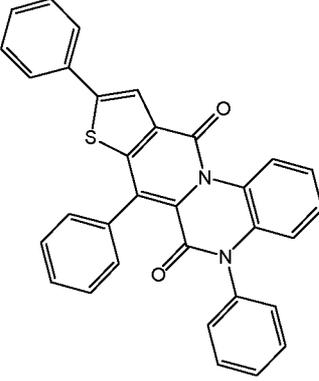
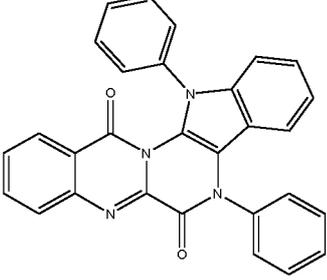
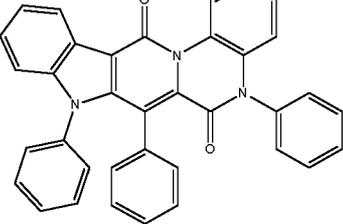
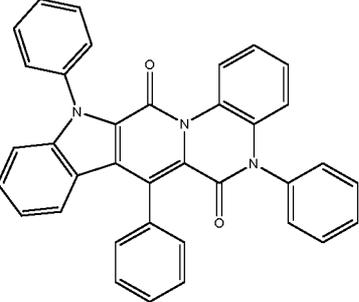
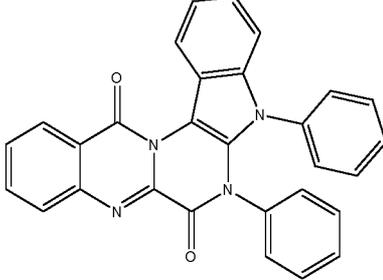
ist;

- o wobei V gleich oder verschieden N oder CR^2 ist, und wobei:

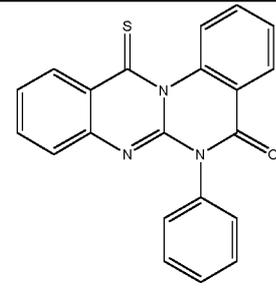
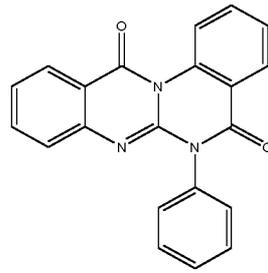
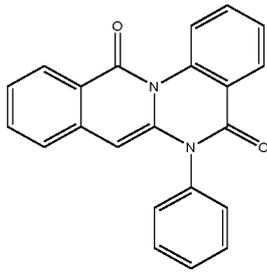
- bevorzugt maximal 3 V gleich N sind;
- bevorzugt nicht zwei oder mehr benachbarte V gleich N sind; und
- besonders bevorzugt Ar² eine Phenylgruppe oder eine Triazingruppe ist, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R² substituiert ist.

5

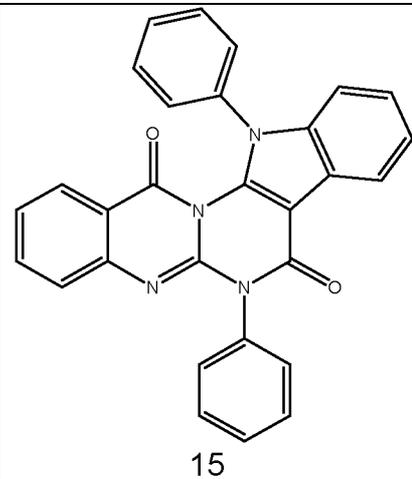
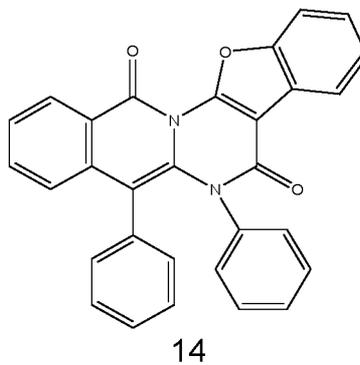
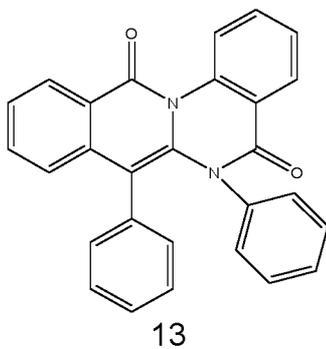
Bevorzugte Verbindungen der Formel (I) sind in der folgenden Tabelle gezeigt:

10	 <p>1</p>	 <p>2</p>	 <p>3</p>
15	 <p>4</p>	 <p>5</p>	 <p>6</p>
20	 <p>7</p>	 <p>8</p>	 <p>9</p>
25			
30			

5

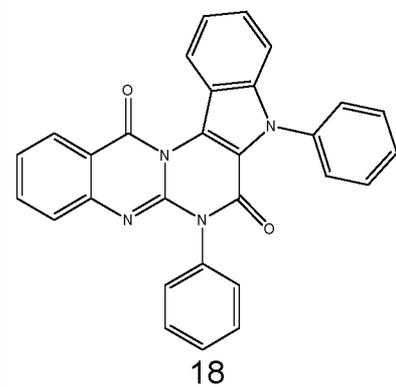
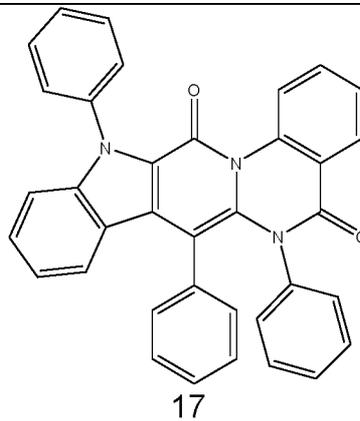
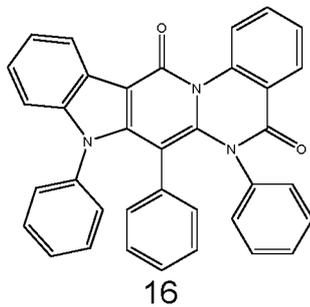


10



15

20

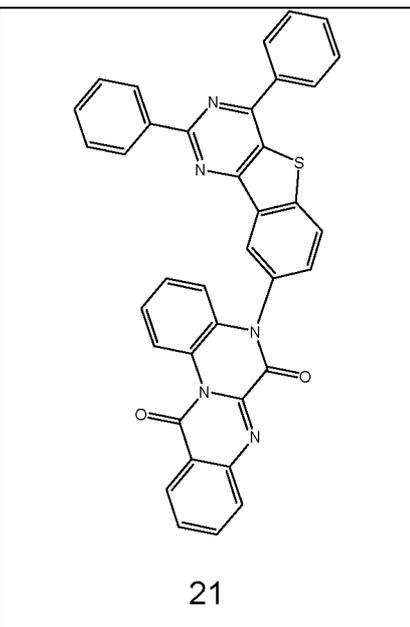
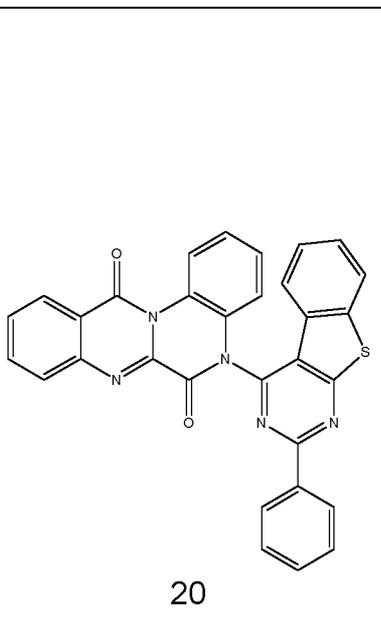
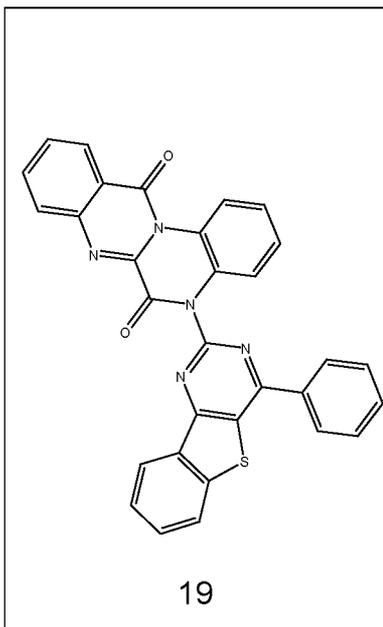


25

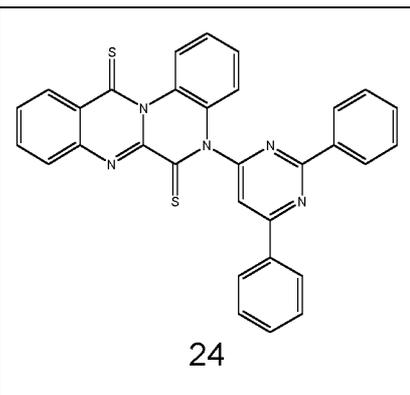
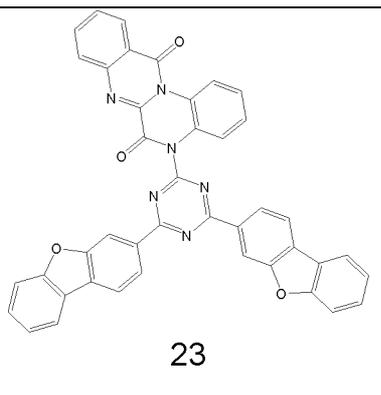
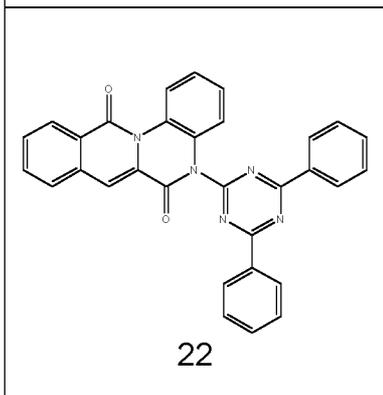
30

5

10

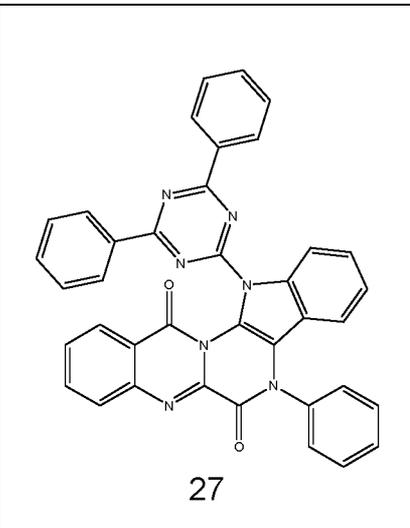
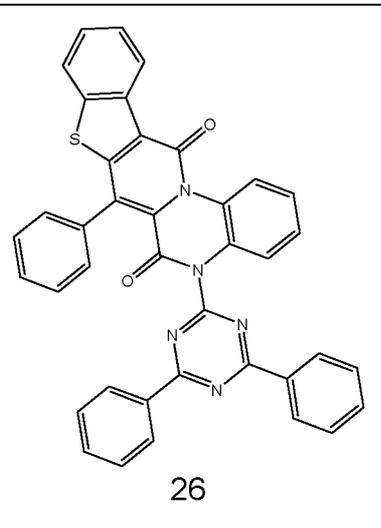
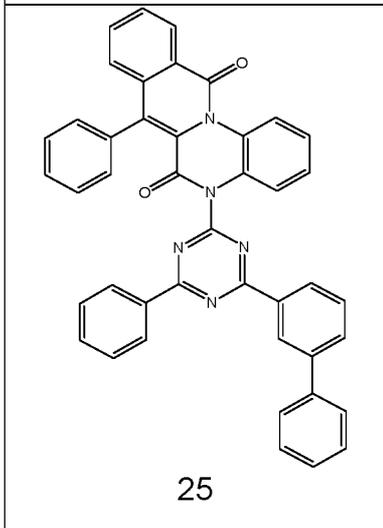


15



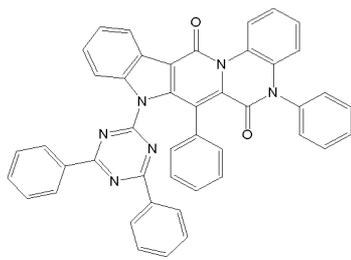
20

25

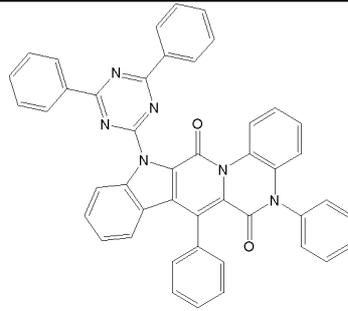


30

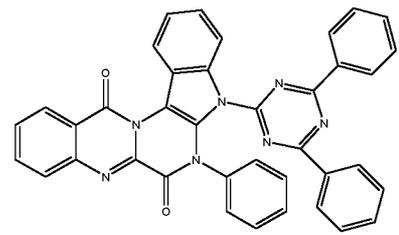
5



28

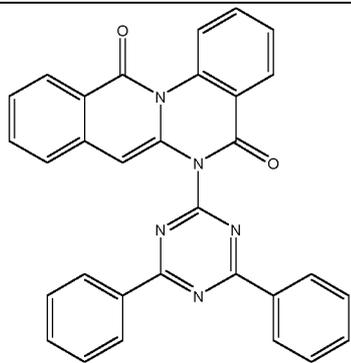


29

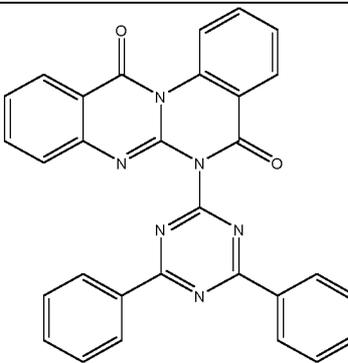


30

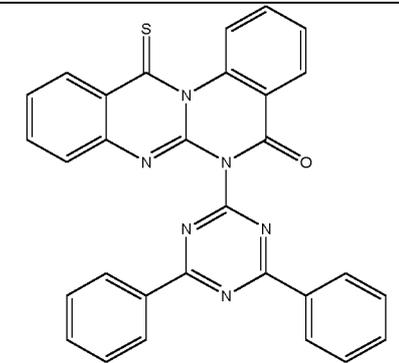
10



31



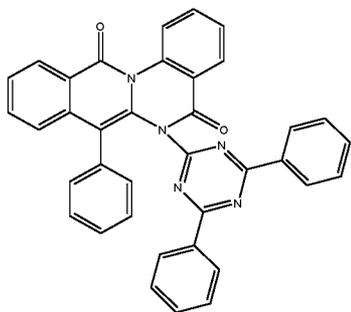
32



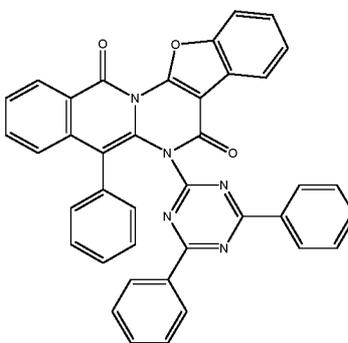
33

15

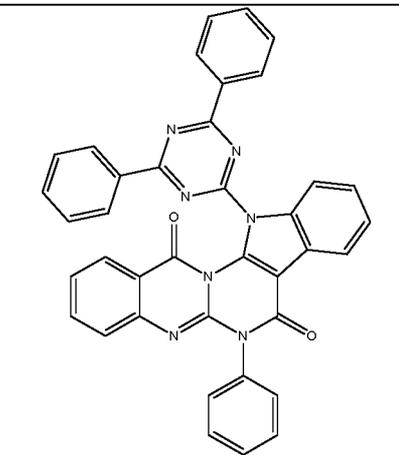
20



34



35

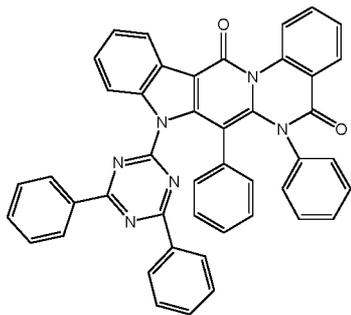


36

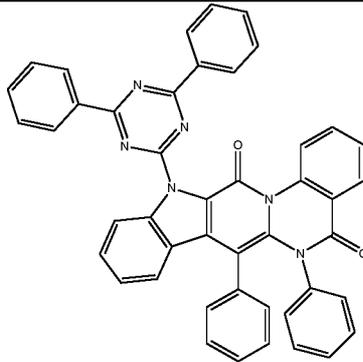
25

30

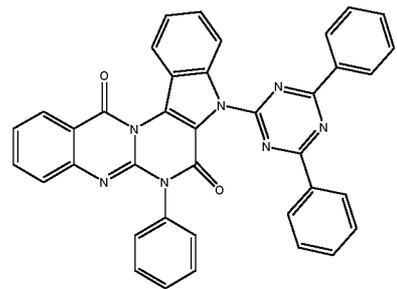
5



37

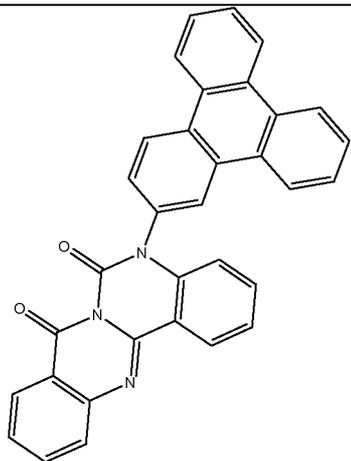


38

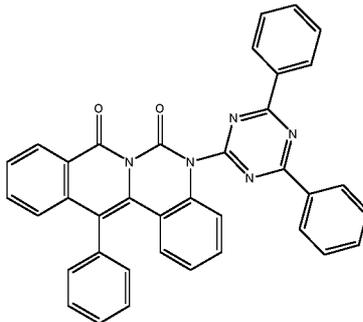


39

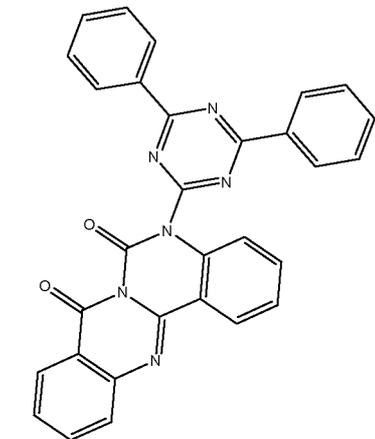
10



40



41

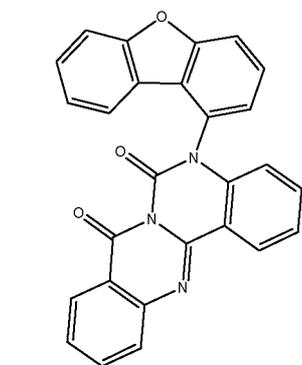


42

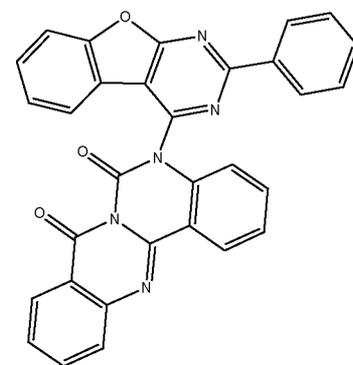
15

20

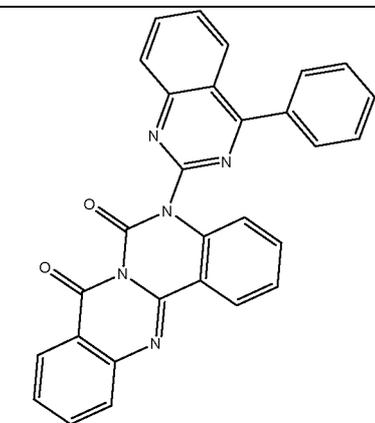
25



43



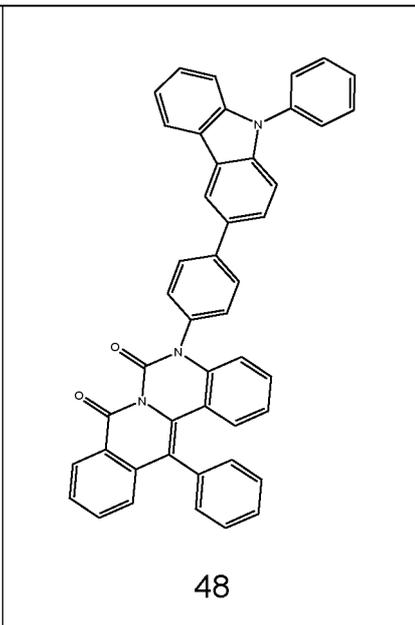
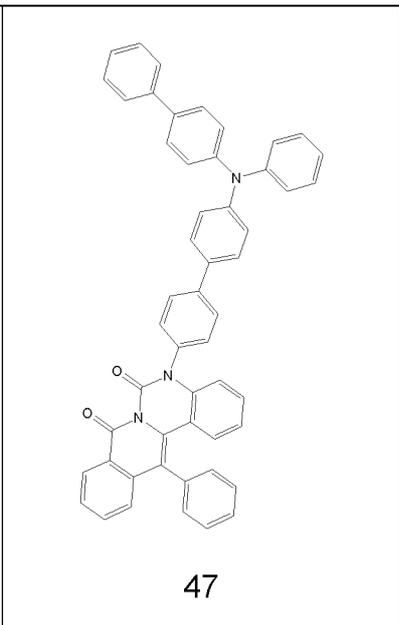
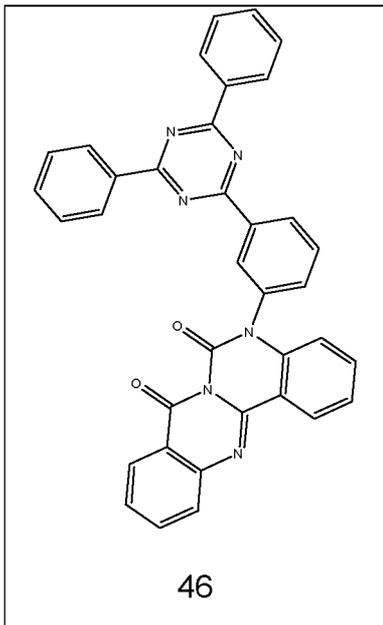
44



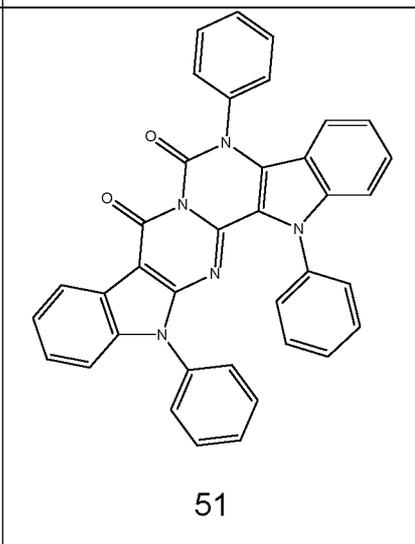
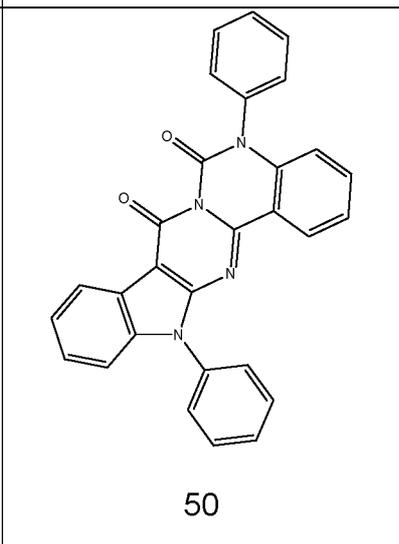
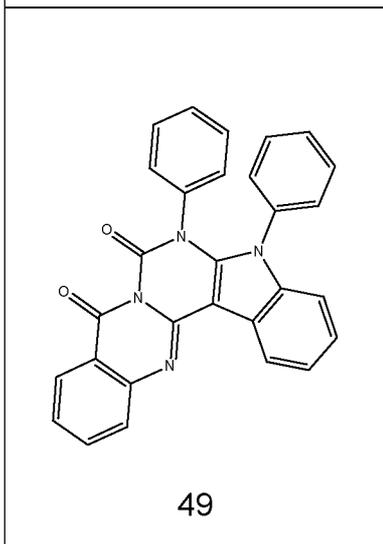
45

30

5

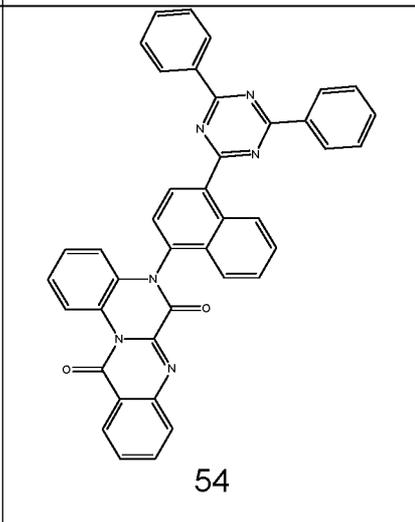
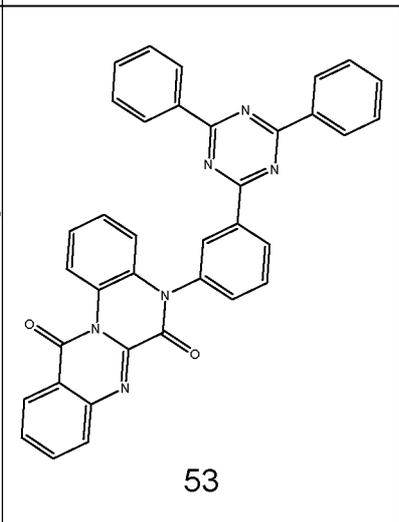
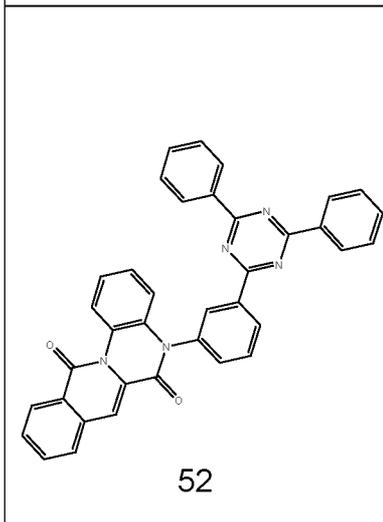


15



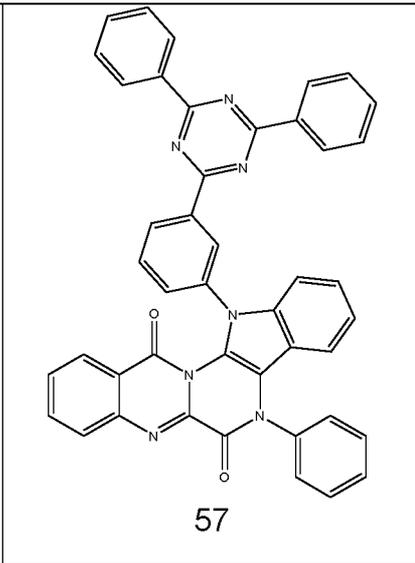
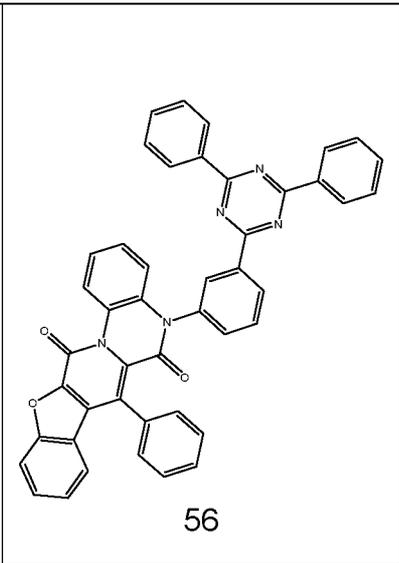
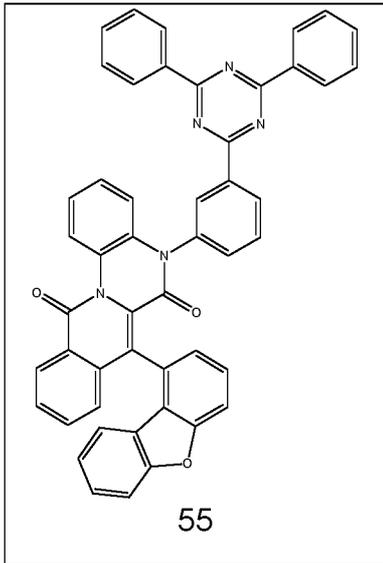
20

25

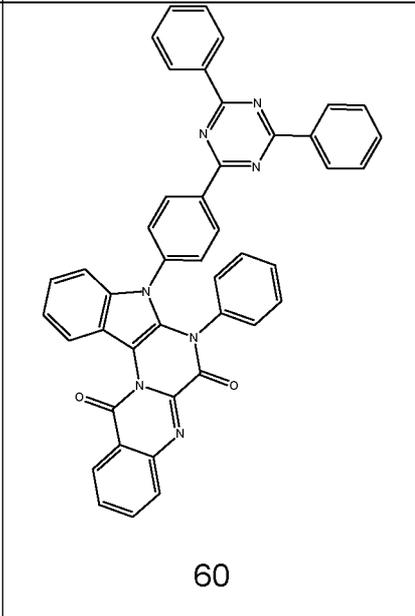
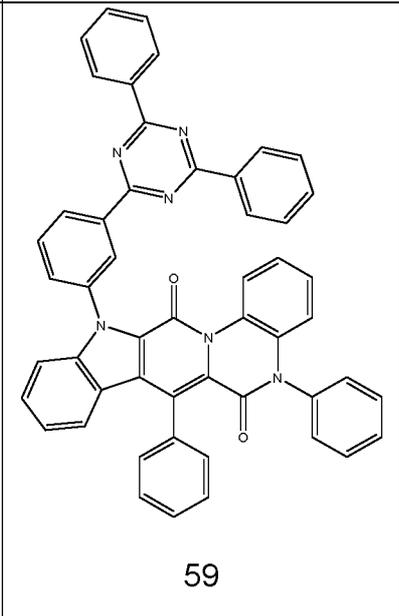
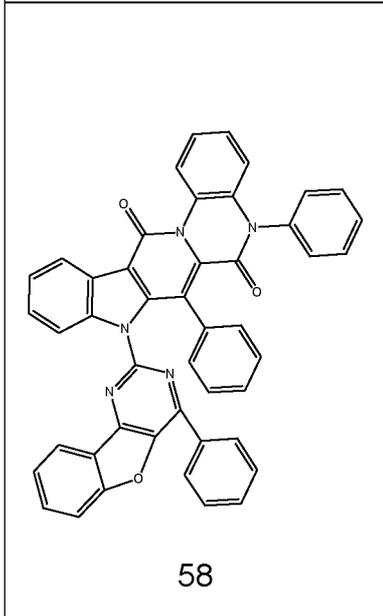


30

5



10

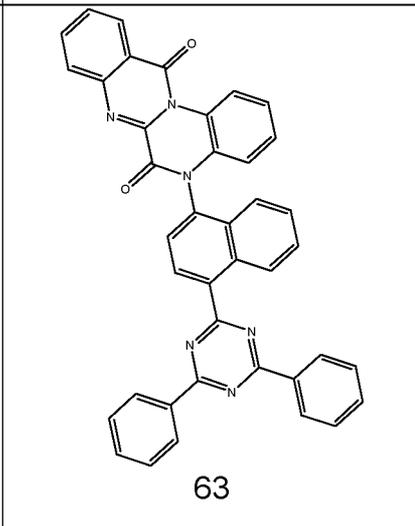
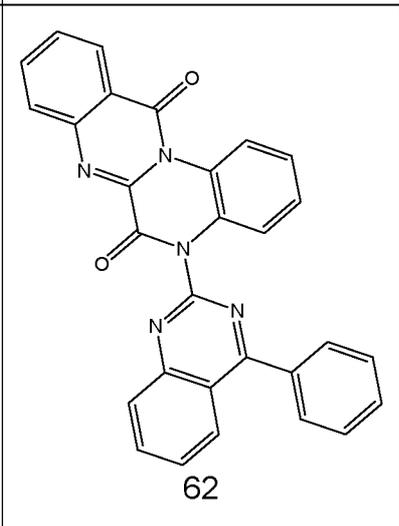
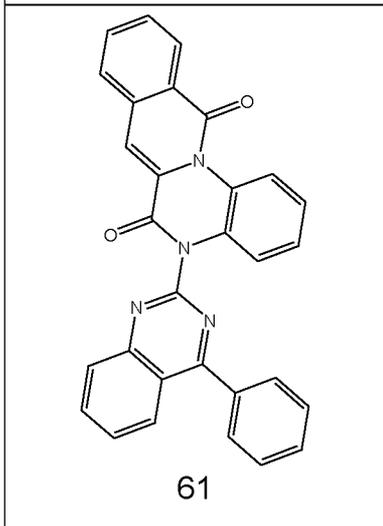


15

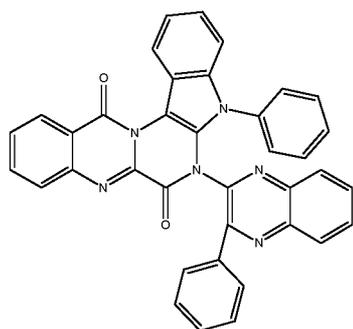
20

25

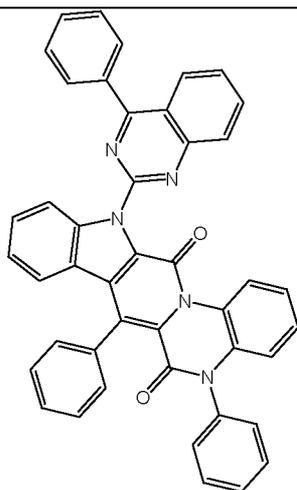
30



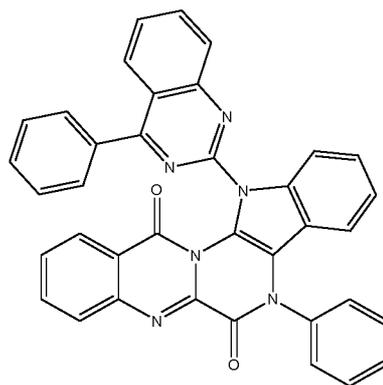
5



64

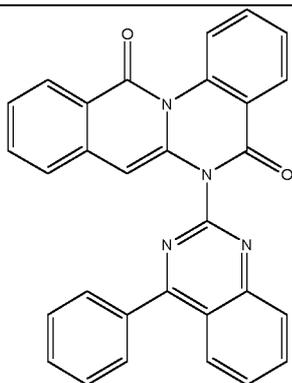


65

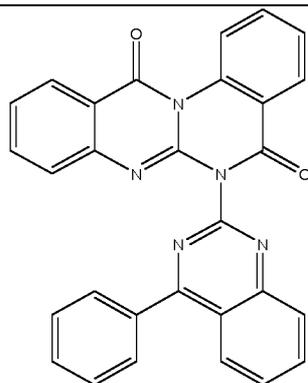


66

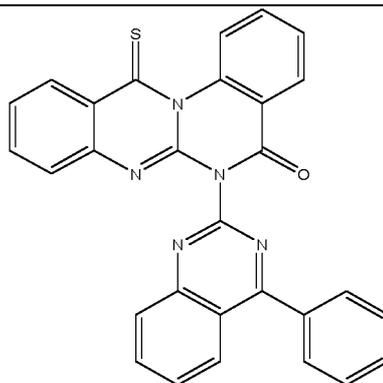
10



67



68



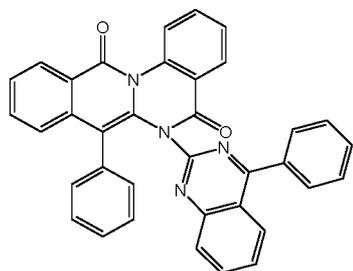
69

15

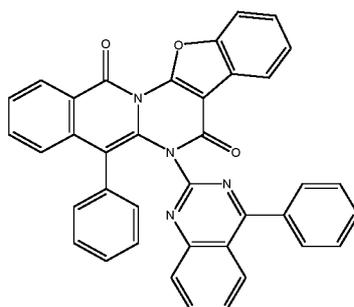
20

25

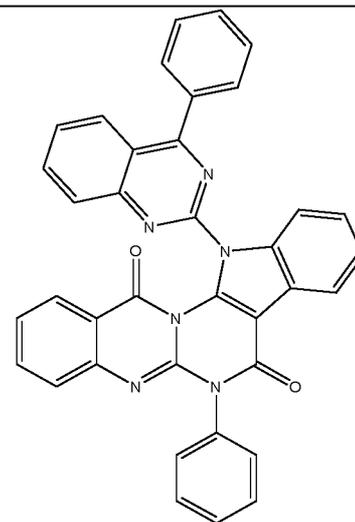
30



70

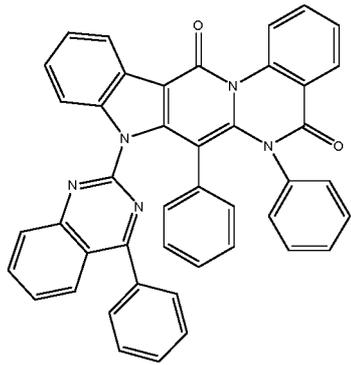


71

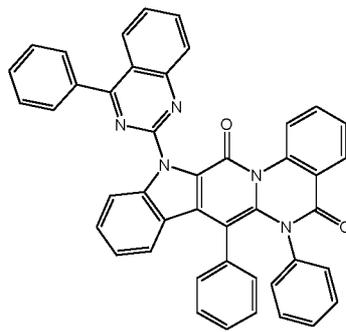


72

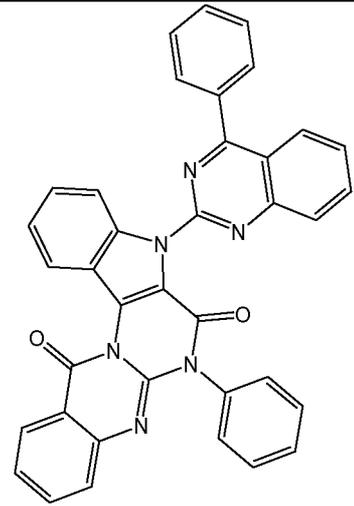
5



73



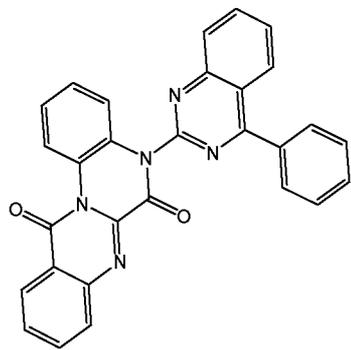
74



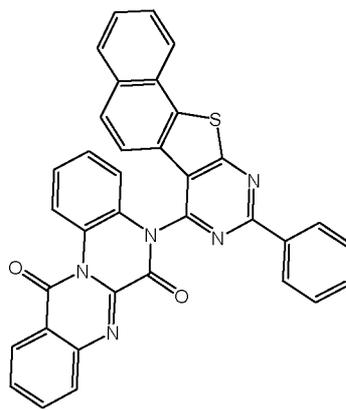
75

10

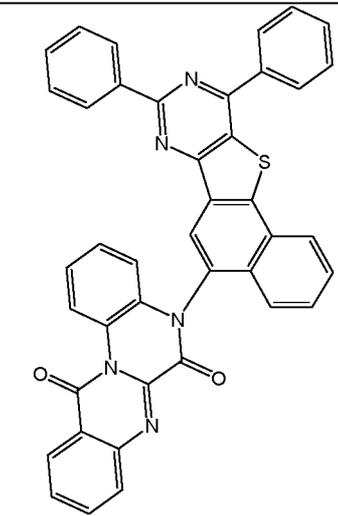
15



76



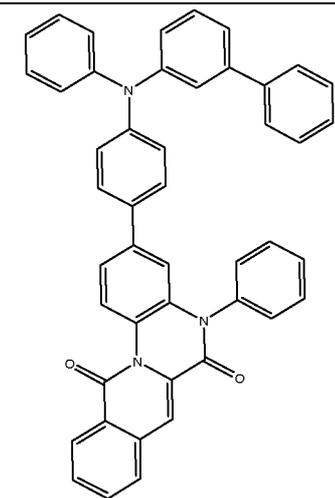
77



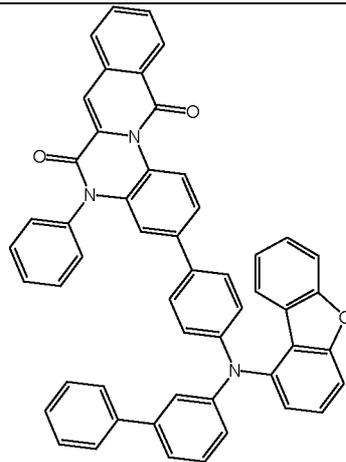
78

20

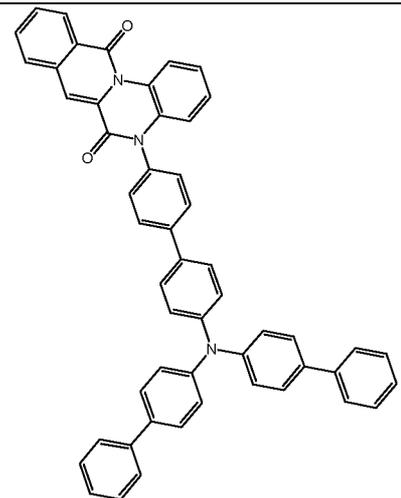
25



79



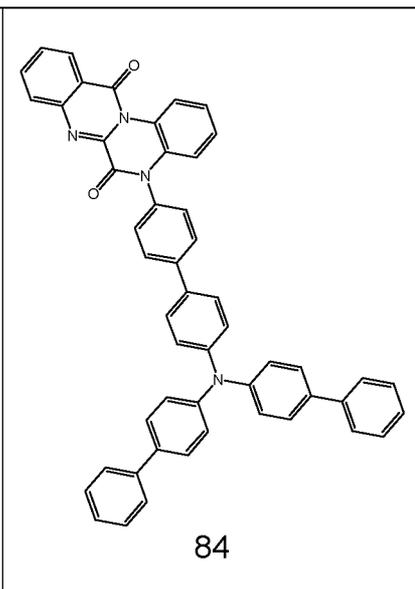
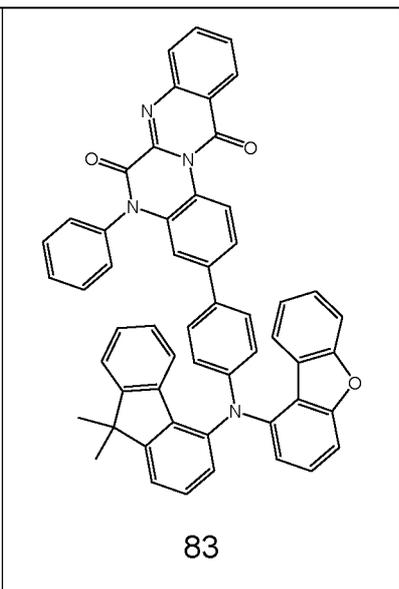
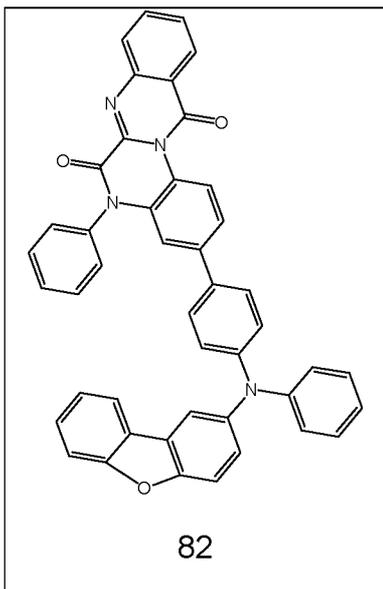
80



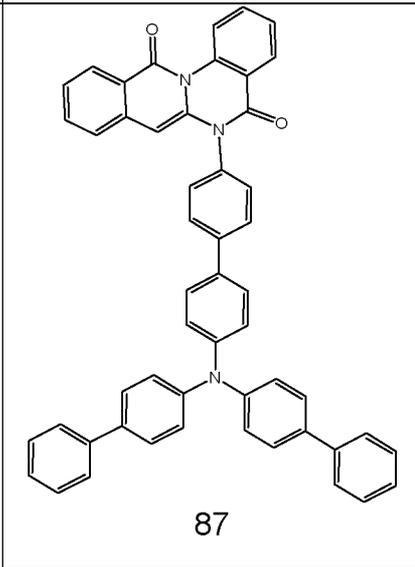
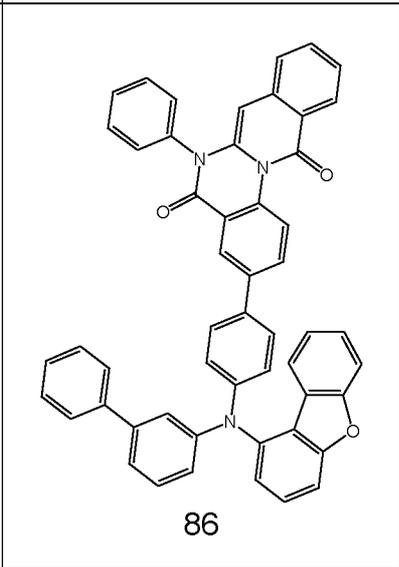
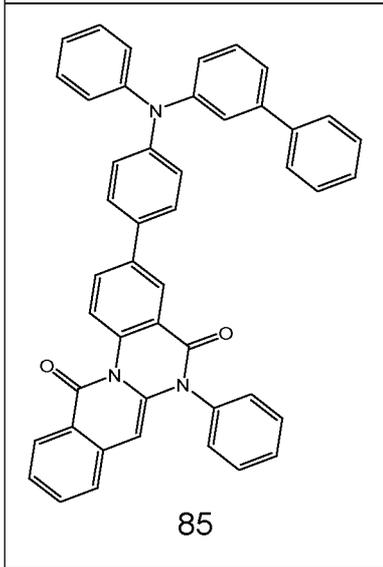
81

30

5



10

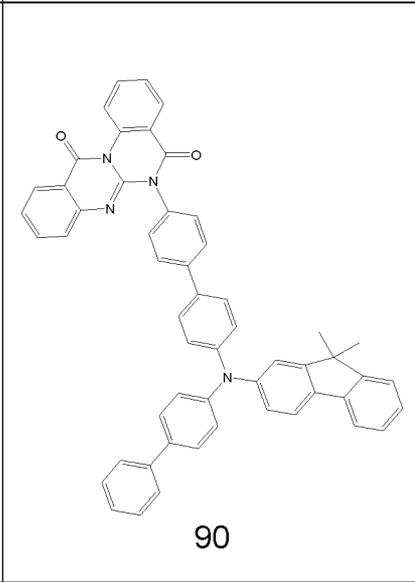
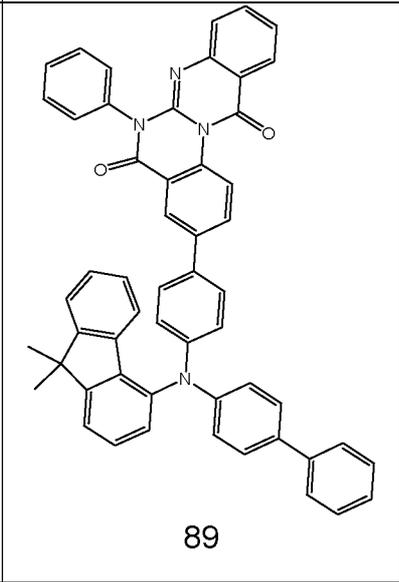
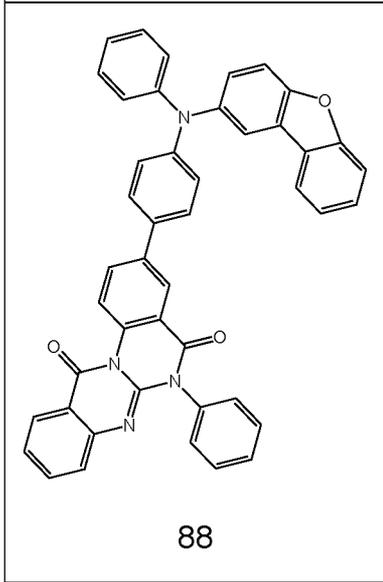


15

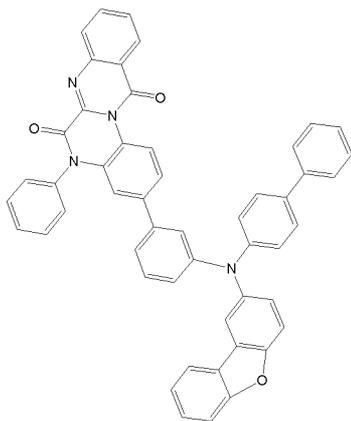
20

25

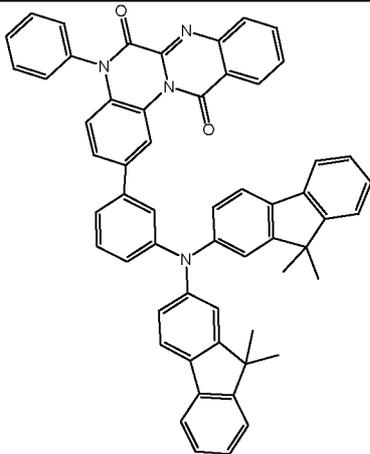
30



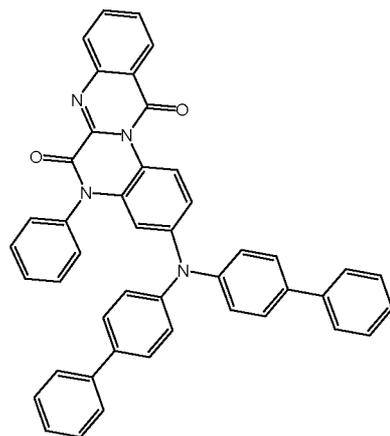
5



91

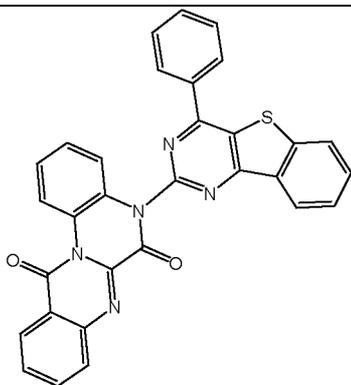


92

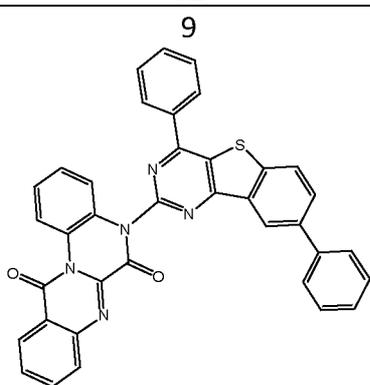


93

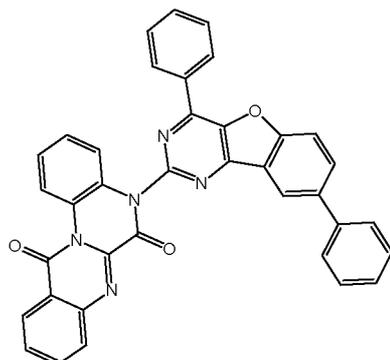
10



94



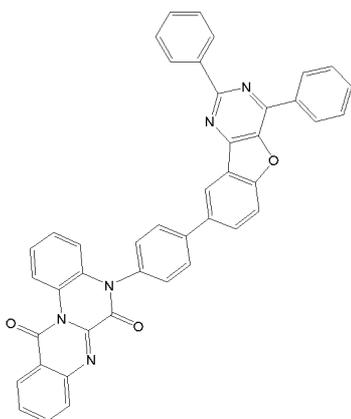
95



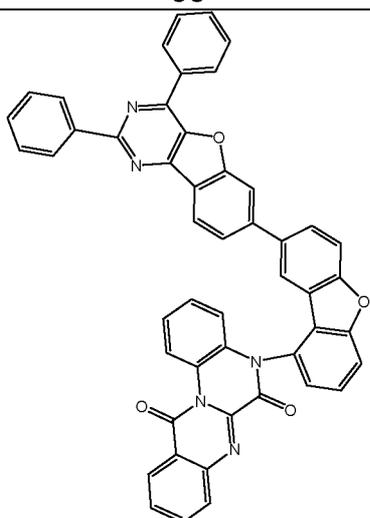
96

15

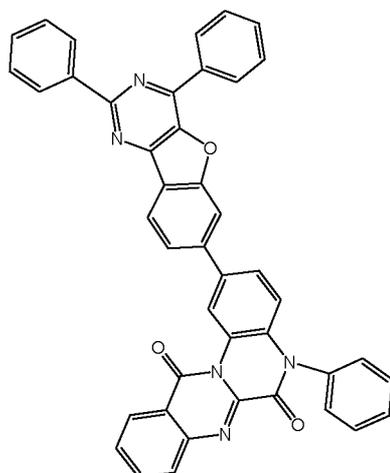
20



97



98



99

25

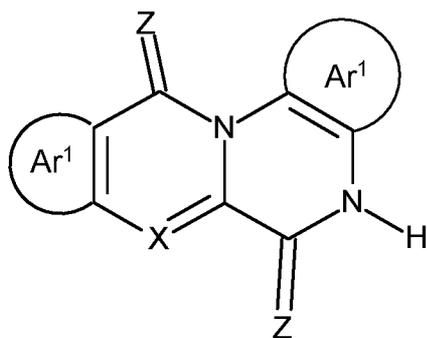
30

Die Verbindungen der Formel (I) können mittels bekannter Syntheseschritte der organischen Chemie, wie beispielsweise Bromierung, Suzuki-Kupplung und Hartwig-Buchwald- Kupplung hergestellt werden. Im Folgenden sind einige bevorzugte Syntheseverfahren exemplarisch gezeigt. Diese können vom Fachmann im Rahmen seines allgemeinen Fachwissen abgewandelt werden und sind nicht beschränkend zu verstehen.

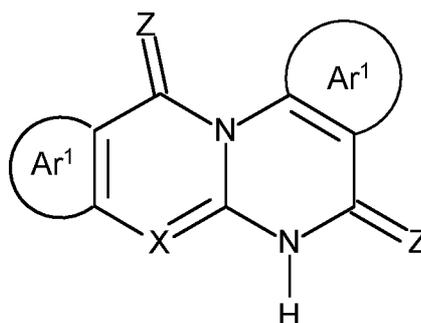
5

Gemäß einem bevorzugten Verfahren zur Herstellung der Verbindungen der Formel (I) wird in einem ersten Schritt das Grundgerüst hergestellt, das einer der Formeln (IV-Int) bis (VII-Int) entspricht:

10



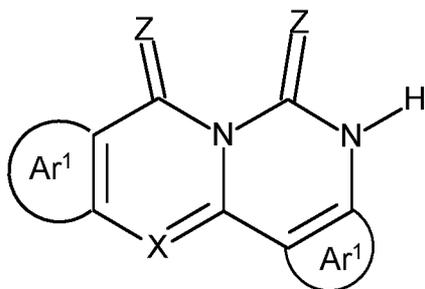
Formel (IV-Int)



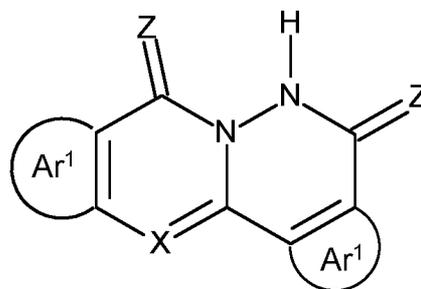
Formel (V-Int)

15

20



Formel (VI-Int)



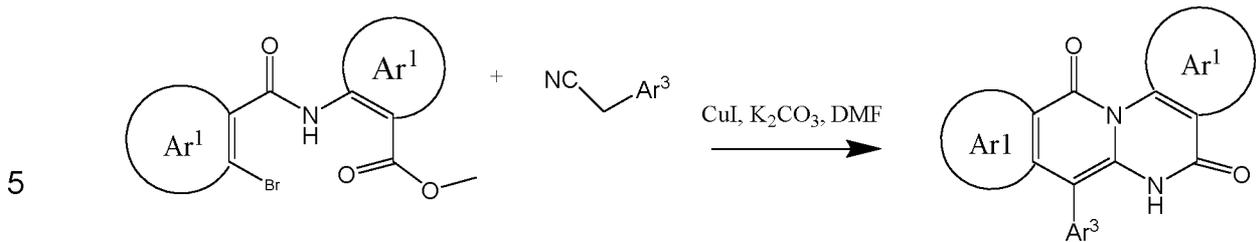
Formel (VII-Int).

25

Beispielhafte Synthesen der Grundgerüste der Formeln (IV-Int) bis (VII-Int) sind im Folgenden gezeigt:

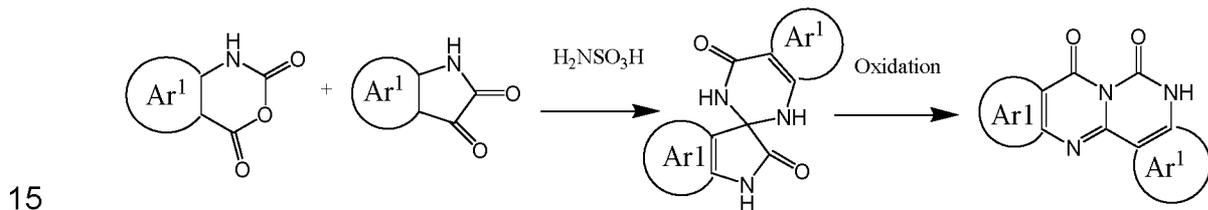
30

Schema 1 zeigt die Synthese des Grundgerüsts der Formel (V-Int).

Schema 1

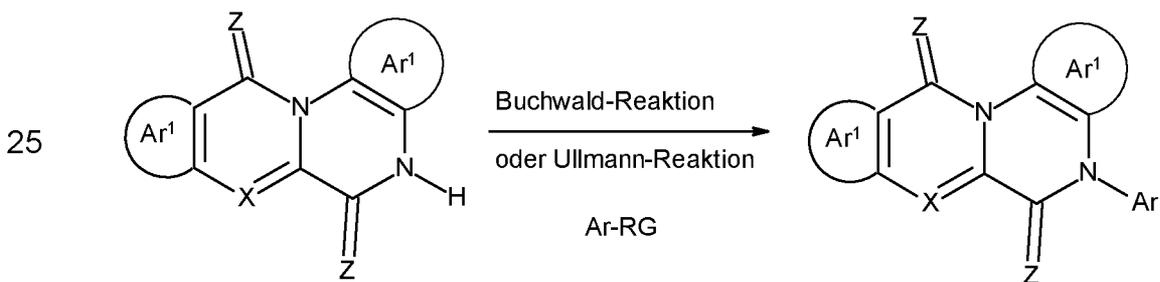
Schema 2 zeigt die Synthese des Grundgerüsts der Formel (VI-Int).

10

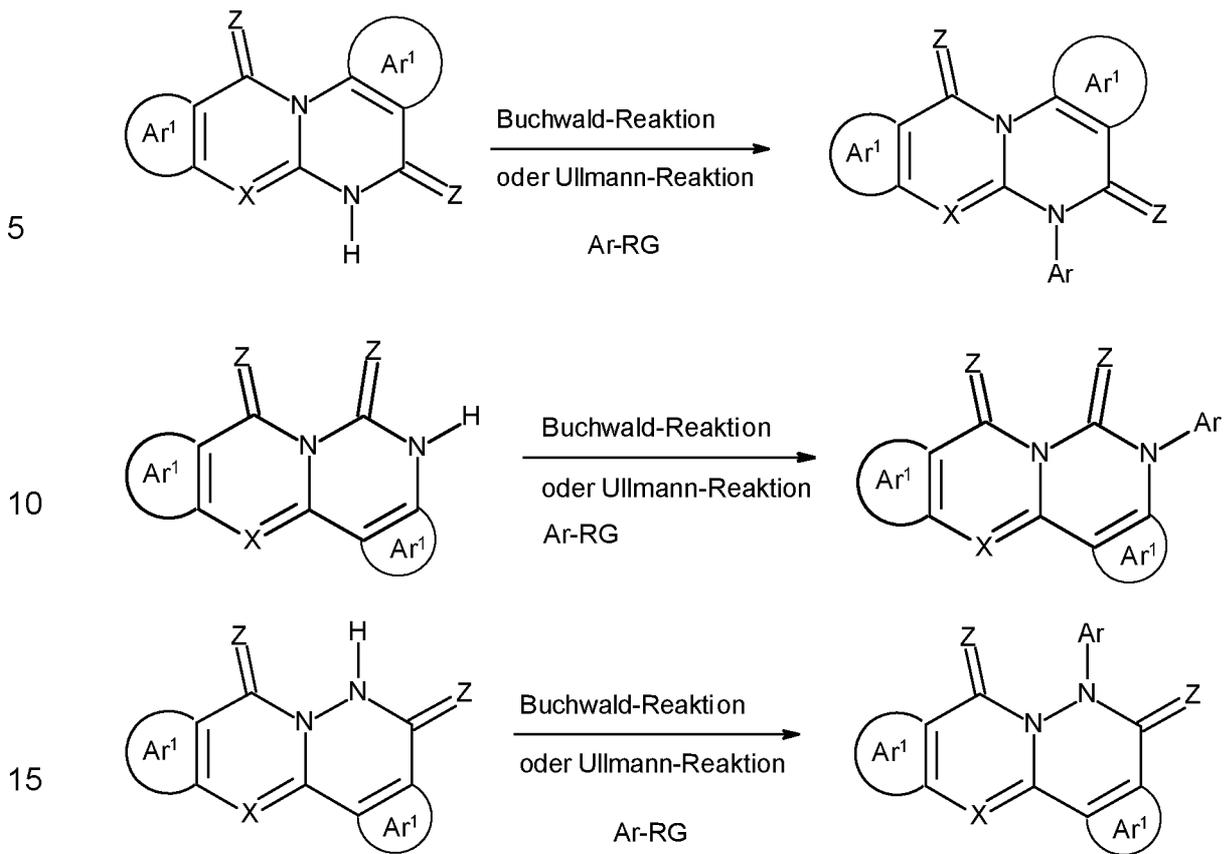
Schema 2

Im Anschluss an die Synthese des Grundkörpers gemäß einer der Formeln (IV-Int) bis (VII-Int) wird in einer metallorganischen Kupplungsreaktion, bevorzugt einer Ullmann-Reaktion oder einer Buchwald-Reaktion, ein Aromat an das freie Stickstoffatom des Zwischenprodukts gemäß Formel (IV-Int) bis (VII-Int) gebunden.

20

Schema 3

30



Ar ist in den oben genannten Schemata ein optional substituierter Aromat
oder Heteroaromat. RG ist eine reaktive Gruppe, bevorzugt Halogen.

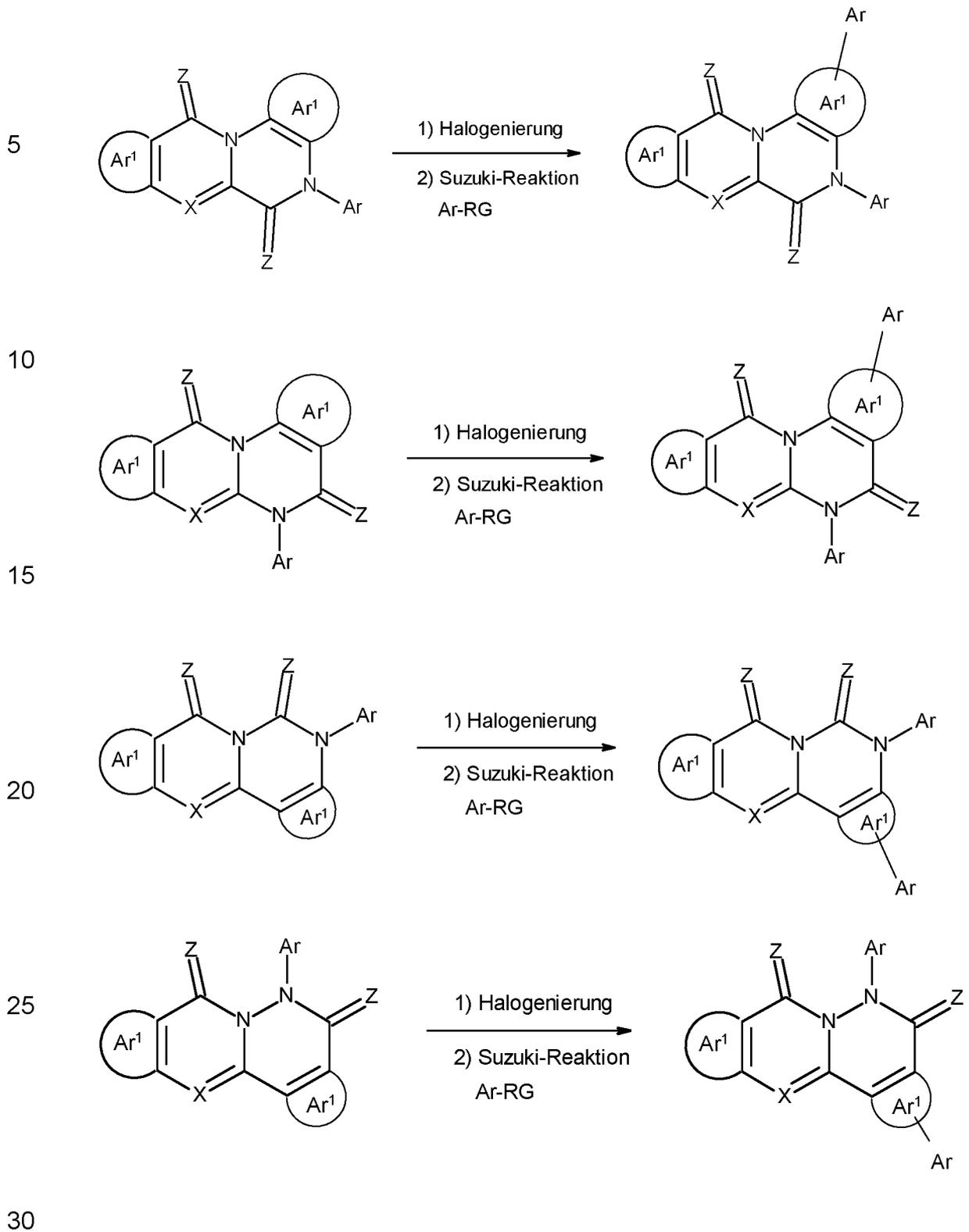
20

In einem weiteren optionalen Schritt (Schema 4) kann die in oben
genanntem Schema erhaltene Verbindung der Formel (I) an einem der
Ringe halogeniert und anschließend in einer Suzuki-Reaktion in dieser
Position an einen Aromaten oder Heteroaromaten gebunden werden:

25

30

Schema 4



Ar ist in den oben genannten Schemata ein optional substituierter Aromat oder Heteroaromat. RG ist eine reaktive Gruppe, bevorzugt Halogen.

Gegenstand der vorliegenden Anmeldung ist damit ein Verfahren zur Herstellung einer Verbindung gemäß Formel (I), dadurch gekennzeichnet, dass zunächst ein Intermediat gemäß einer der Formeln (IV-Int) bis (VII-Int) hergestellt wird, bevorzugt durch eine Ringschlussreaktion, und dass

5 hergestellt wird, bevorzugt durch eine Ringschlussreaktion, und dass anschließend in einer Ullmann-Reaktion oder einer Buchwald-Reaktion ein Aromat oder Heteroaromat in der Position der Gruppe Ar² der Formel (I) eingeführt wird. Gemäß einer bevorzugten Ausführungsform wird

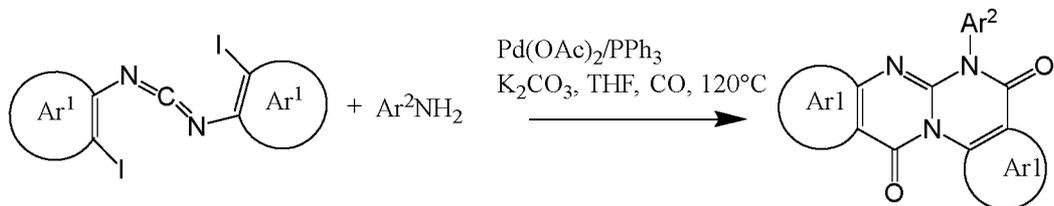
10 anschließend eine Halogenierungsreaktion, bevorzugt eine Bromierungsreaktion, an einem der Ringe Ar¹ durchgeführt, wodurch ein Halogensubstituent beziehungsweise ein Bromsubstituent an einem der Ringe Ar¹ eingeführt wird, und daran anschließend eine Suzuki-Reaktion durchgeführt, in der in der Position des Halogensubstituenten beziehungsweise des Bromsubstituenten ein Aromat eingeführt wird.

15

Im folgenden Schema 5 ist schließlich ein Verfahren zur Synthese einer Verbindung der Formel (I) in einem Schritt gezeigt:

Schema 5

20

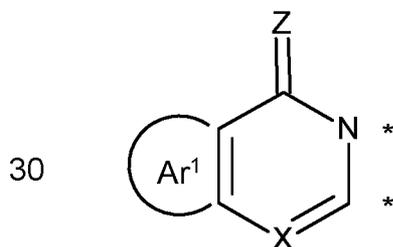


25

30

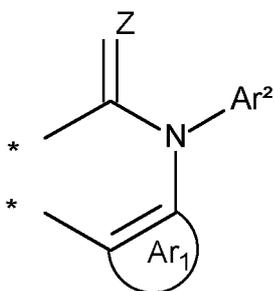
Für die Verarbeitung der erfindungsgemäßen Verbindungen aus flüssiger Phase, beispielsweise durch Spin-Coating oder durch Druckverfahren, sind Formulierungen der erfindungsgemäßen Verbindungen erforderlich. Diese Formulierungen können beispielsweise Lösungen, Dispersionen oder Emulsionen sein. Es kann bevorzugt sein, hierfür Mischungen aus zwei oder mehr Lösemitteln zu verwenden. Geeignete und bevorzugte Lösemittel sind beispielsweise Toluol, Anisol, o-, m- oder p-Xylol, Methylbenzoat, Mesitylen, Tetralin, Veratrol, THF, Methyl-THF, THP, Chlorbenzol, Dioxan, Phenoxytoluol, insbesondere 3-Phenoxytoluol, (-)-Fenchon, 1,2,3,5-Tetramethylbenzol, 1,2,4,5-Tetramethylbenzol, 1-Methylnaphthalin, 2-Methylbenzothiazol, 2-Phenoxyethanol, 2-Pyrrolidinon, 3-Methylanisol, 4-Methylanisol, 3,4-Dimethylanisol, 3,5-Dimethylanisol, Acetophenon, α -Terpineol, Benzothiazol, Butylbenzoat, Cumol, Cyclohexanol, Cyclohexanon, Cyclohexylbenzol, Decalin, Dodecylbenzol, Ethylbenzoat, Indan, NMP, p-Cymol, Phenetol, 1,4-Diisopropylbenzol, Dibenzylether, Diethylenglycolbutylmethylether, Triethylenglycolbutylmethylether, Diethylenglycoldibutylether, Triethylenglycoldimethylether, Diethylenglycolmonobutylether, Tripropyleneglycoldimethylether, Tetraethylenglycoldimethylether, 2-Isopropyl-naphthalin, Pentylbenzol, Hexylbenzol, Heptylbenzol, Octylbenzol, 1,1-Bis(3,4-dimethylphenyl)ethan, 2-Methylbiphenyl, 3-Methylbiphenyl, 1-Methylnaphthalin, 1-Ethyl-naphthalin, Ethyloctanoat, Sebacinsäure-diethylester, Octyloctanoat, Heptylbenzol, Menthyl-isovalerat, Cyclohexylhexanoat oder Mischungen dieser Lösemittel.

Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ist daher eine Formulierung, enthaltend eine Verbindung einer Formel (I),

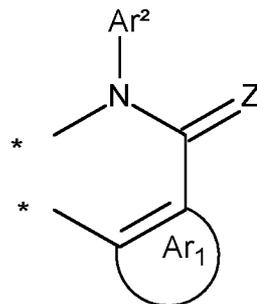


wobei an den mit * markierten Bindungspunkten am Ring eine Einheit gemäß Formel (II) oder Formel (III) jeweils über die mit * markierten Bindungen gebunden ist

5



10 Formel (II)



Formel (III),

und wobei für die auftretenden Variablen gilt:

15

X ist gleich N oder CAr^3 ;

Z ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus O oder S;

20

Ar^1 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus ankondensierten aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und ankondensierten heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei die aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^1 substituiert sind;

25

Ar^2 ist gewählt aus verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei die genannten Gruppen jeweils mit einem oder mehreren Resten R^2 substituiert sind;

30

Ar^3 ist gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^3$, CN, $Si(R^3)_3$, $N(R^3)_2$, $P(=O)(R^3)_2$, OR^3 , $S(=O)R^3$, $S(=O)_2R^3$, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^3 substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch $-R^3C=CR^3-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^3)_2$, $C=O$, $C=NR^3$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^3-$, NR^3 , $P(=O)(R^3)$, $-O-$, $-S-$, SO oder SO_2 ersetzt sein können;

R^1 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R^1 miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^4 substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, $C=O$, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, $-O-$, $-S-$, SO oder SO_2 ersetzt sein können;

R^2 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$,

geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen,
verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-
Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen
Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und
5 heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen;
wobei zwei oder mehr Reste R^2 miteinander verknüpft sein können und
einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl-
und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und
heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^4 substituiert sind;
10 und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-,
Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$,
 $C=O$, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, $-O-$, $-S-$, SO oder
 SO_2 ersetzt sein können;

15 R^3 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl,
Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$,
geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen,
verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-
Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen
20 Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und
heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen;
wobei zwei oder mehr Reste R^3 miteinander verknüpft sein können und
einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl-
und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und
heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^4 substituiert sind;
25 und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-,
Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$,
 $C=O$, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, $-O-$, $-S-$, SO oder
 SO_2 ersetzt sein können;

30 R^4 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl,
Br, I, $C(=O)R^5$, CN, $Si(R^5)_3$, $N(R^5)_2$, $P(=O)(R^5)_2$, OR^5 , $S(=O)R^5$, $S(=O)_2R^5$,

geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen,
verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-
Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen
Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und
5 heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen;
wobei zwei oder mehr Reste R^4 miteinander verknüpft sein können und
einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl-
und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und
heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^5 substituiert sind;
10 und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-,
Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch $-\text{R}^5\text{C}=\text{CR}^5-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $\text{Si}(\text{R}^5)_2$,
 $\text{C}=\text{O}$, $\text{C}=\text{NR}^5$, $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$, $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^5-$, NR^5 , $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^5)$, $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, SO oder
 SO_2 ersetzt sein können;

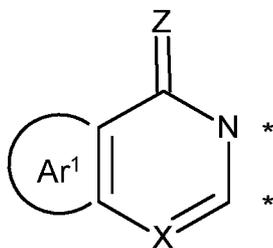
15 R^5 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D,
F, Cl, Br, I, CN, Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, Alkenyl-
oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen
mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen und heteroaromatischen
Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder
20 mehr Reste R^5 miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden
können; und wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und
Alkynylgruppen, aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen
Ringsysteme mit einem oder mehreren Resten gewählt aus F und CN
substituiert sein können; und mindestens eine weitere Verbindung.

25 Die weitere Verbindung kann beispielsweise ein Lösemittel sein,
insbesondere eines der oben genannten Lösemittel oder eine Mischung
dieser Lösemittel. Die weitere Verbindung kann aber auch mindestens eine
weitere organische oder anorganische Verbindung sein, die ebenfalls in der
30 elektronischen Vorrichtung eingesetzt wird, beispielsweise eine
emittierende Verbindung und/oder ein weiteres Matrixmaterial. Geeignete
emittierende Verbindungen und weitere Matrixmaterialien sind hinten im

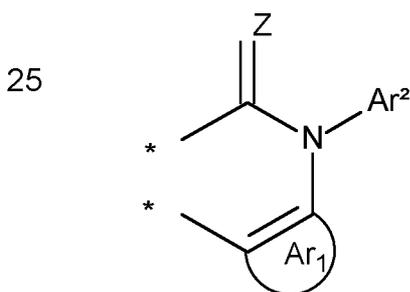
Zusammenhang mit der organischen Elektrolumineszenzvorrichtung aufgeführt. Diese weitere Verbindung kann auch polymer sein.

Die erfindungsgemäßen Verbindungen eignen sich für die Verwendung in einer elektronischen Vorrichtung, insbesondere in einer organischen Elektrolumineszenzvorrichtung. Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ist daher die Verwendung einer erfindungsgemäßen Verbindung der Formel (I), wie oben in Zusammenhang mit der anmeldungsgemäßen Formulierung definiert, in einer elektronischen Vorrichtung, insbesondere in einer organischen Elektrolumineszenzvorrichtung.

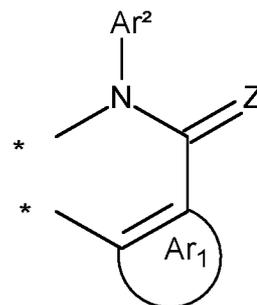
Ein nochmals weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ist eine elektronische Vorrichtung enthaltend mindestens eine Verbindung der Formel (I),



20 wobei an den mit * markierten Bindungspunkten am Ring eine Einheit gemäß Formel (II) oder Formel (III) jeweils über die mit * markierten Bindungen gebunden ist



Formel (II)



Formel (III),

30

und wobei für die auftretenden Variablen gilt:

X ist gleich N oder CAr^3 ;

5 Z ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus O oder S;

Ar¹ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus
ankondensierten aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen
Ringatomen, und ankondensierten heteroaromatischen Ringsystemen mit 5
10 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei die aromatischen Ringsysteme
und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R¹ substituiert
sind;

Ar² ist gewählt aus verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen
15 mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-
Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen
Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40
aromatischen Ringatomen; wobei die genannten Gruppen jeweils mit einem
oder mehreren Resten R² substituiert sind;

20 Ar³ ist gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $\text{C}(=\text{O})\text{R}^3$, CN, $\text{Si}(\text{R}^3)_3$, $\text{N}(\text{R}^3)_2$,
 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^3)_2$, OR^3 , $\text{S}(=\text{O})\text{R}^3$, $\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^3$, geradkettigen Alkyl- oder
Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl-
oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen
25 mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40
aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5
bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-,
Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme
und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R³ substituiert
30 sind; und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-,
Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch $-\text{R}^3\text{C}=\text{CR}^3-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $\text{Si}(\text{R}^3)_2$,

$C=O$, $C=NR^3$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^3-$, NR^3 , $P(=O)(R^3)$, $-O-$, $-S-$, SO oder SO_2 ersetzt sein können;

5 R^1 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H , D , F , Cl , Br , I , $C(=O)R^4$, CN , $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkinygruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und hetero-
10 aromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R^1 miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkinygruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^4 substituiert sind;
15 und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkinygruppen durch $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, $C=O$, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, $-O-$, $-S-$, SO oder SO_2 ersetzt sein können;

20 R^2 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H , D , F , Cl , Br , I , $C(=O)R^4$, CN , $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkinygruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen
25 Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R^2 miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkinygruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^4 substituiert sind;
30 und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkinygruppen durch $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$,

C=O, C=NR⁴, -C(=O)O-, -C(=O)NR⁴-, NR⁴, P(=O)(R⁴), -O-, -S-, SO oder SO₂ ersetzt sein können;

5 R³ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R⁴, CN, Si(R⁴)₃, N(R⁴)₂, P(=O)(R⁴)₂, OR⁴, S(=O)R⁴, S(=O)₂R⁴, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und
10 heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R³ miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R⁴ substituiert sind;
15 und wobei eine oder mehrere CH₂-Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch -R⁴C=CR⁴-, -C≡C-, Si(R⁴)₂, C=O, C=NR⁴, -C(=O)O-, -C(=O)NR⁴-, NR⁴, P(=O)(R⁴), -O-, -S-, SO oder SO₂ ersetzt sein können;

20 R⁴ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R⁵, CN, Si(R⁵)₃, N(R⁵)₂, P(=O)(R⁵)₂, OR⁵, S(=O)R⁵, S(=O)₂R⁵, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen
25 Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R⁴ miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R⁵ substituiert sind;
30 und wobei eine oder mehrere CH₂-Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch -R⁵C=CR⁵-, -C≡C-, Si(R⁵)₂,

C=O, C=NR⁵, -C(=O)O-, -C(=O)NR⁵-, NR⁵, P(=O)(R⁵), -O-, -S-, SO oder SO₂ ersetzt sein können;

5 R⁵ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, CN, Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R⁵ miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden
10 können; und wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen, aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme mit einem oder mehreren Resten gewählt aus F und CN substituiert sein können..

15 Eine elektronische Vorrichtung im Sinne der vorliegenden Erfindung ist eine Vorrichtung, welche mindestens eine Schicht enthält, die mindestens eine organische Verbindung enthält. Das Bauteil kann dabei auch anorganische Materialien enthalten oder auch Schichten, welche vollständig aus anorganischen Materialien aufgebaut sind.

20

Die elektronische Vorrichtung ist bevorzugt ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen (OLEDs), organischen integrierten Schaltungen (O-ICs), organischen Feld-Effekt-Transistoren (O-FETs), organischen Dünnschichttransistoren (O-TFTs),
25 organischen lichtemittierenden Transistoren (O-LETs), organischen Solarzellen (O-SCs), farbstoffsensibilisierten organischen Solarzellen (DSSCs), organischen optischen Detektoren, organischen Photorezeptoren, organischen Feld-Quench-Devices (O-FQDs), lichtemittierenden elektrochemischen Zellen (LECs), organischen Laserdioden (O-Laser) und „organic plasmon emitting devices“, bevorzugt aber organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen (OLEDs), besonders bevorzugt phosphoreszierenden OLEDs.
30

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, Exzitonenblockierschichten, Elektronenblockierschichten und/oder Ladungserzeugungsschichten (Charge-Generation Layers). Ebenso können zwischen zwei emittierende Schichten Interlayer eingebracht sein, welche beispielsweise eine exzitonenblockierende Funktion aufweisen. 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 Systeme mit drei emittierenden Schichten, wobei die drei Schichten blaue, grüne und orange oder rote Emission zeigen. Es kann sich bei der erfindungsgemäßen organischen Elektrolumineszenzvorrichtung auch um eine Tandem-OLED handeln, insbesondere für weiß emittierende OLEDs.

Die erfindungsgemäße Verbindung gemäß den oben aufgeführten Ausführungsformen kann dabei in unterschiedlichen Schichten eingesetzt werden, je nach genauer Struktur. Bevorzugt ist eine organische Elektrolumineszenzvorrichtung, enthaltend eine Verbindung gemäß Formel (I) bzw. den oben ausgeführten bevorzugten Ausführungsformen in einer emittierenden Schicht als Matrixmaterial für einen oder mehrere phosphoreszierende Emitter oder für Emitter, die TADF (thermally activated delayed fluorescence) zeigen, insbesondere für phosphoreszierende Emitter. Dabei kann die organische Elektrolumineszenzvorrichtung eine emittierende

Schicht enthalten, oder sie kann mehrere emittierende Schichten enthalten, wobei mindestens eine emittierende Schicht mindestens eine erfindungsgemäße Verbindung als Matrixmaterial enthält. Weiterhin kann die erfindungsgemäße Verbindung auch in einer Elektronentransportschicht
5 und/oder in einer Lochblockierschicht und/oder in einer Lochtransportschicht und/oder in einer Exzitonenblockierschicht eingesetzt werden.

Wenn die erfindungsgemäße Verbindung als Matrixmaterial für eine phosphoreszierende Verbindung in einer emittierenden Schicht eingesetzt wird,
10 wird sie bevorzugt in Kombination mit einem oder mehreren phosphoreszierenden Materialien (Triplettemitter) eingesetzt. Unter Phosphoreszenz im Sinne dieser Erfindung wird die Lumineszenz aus einem angeregten Zustand mit höherer Spinmultiplizität verstanden, also einem Spinzustand >1, insbesondere aus einem angeregten Tripletzustand. Im Sinne dieser
15 Anmeldung sollen alle lumineszierenden Komplexe mit Übergangsmetallen oder Lanthaniden, insbesondere alle Iridium-, Platin- und Kupferkomplexe, als phosphoreszierende Verbindungen angesehen werden.

Die Mischung aus der erfindungsgemäßen Verbindung und der emittierenden Verbindung enthält zwischen 99 und 1 Vol.-%, vorzugsweise zwischen
20 98 und 10 Vol.-%, besonders bevorzugt zwischen 97 und 60 Vol.-%, insbesondere zwischen 95 und 80 Vol.-% der erfindungsgemäßen Verbindung bezogen auf die Gesamtmischung aus Emitter und Matrixmaterial. Entsprechend enthält die Mischung zwischen 1 und 99 Vol.-%, vorzugsweise
25 zwischen 2 und 90 Vol.-%, besonders bevorzugt zwischen 3 und 40 Vol.-%, insbesondere zwischen 5 und 20 Vol.-% des Emitters bezogen auf die Gesamtmischung aus Emitter und Matrixmaterial.

Eine weitere bevorzugte Ausführungsform der vorliegenden Erfindung ist der
30 Einsatz der erfindungsgemäßen Verbindung als Matrixmaterial für einen phosphoreszierenden Emitter in Kombination mit einem weiteren Matrixmaterial. Geeignete Matrixmaterialien, welche in Kombination mit den erfin-

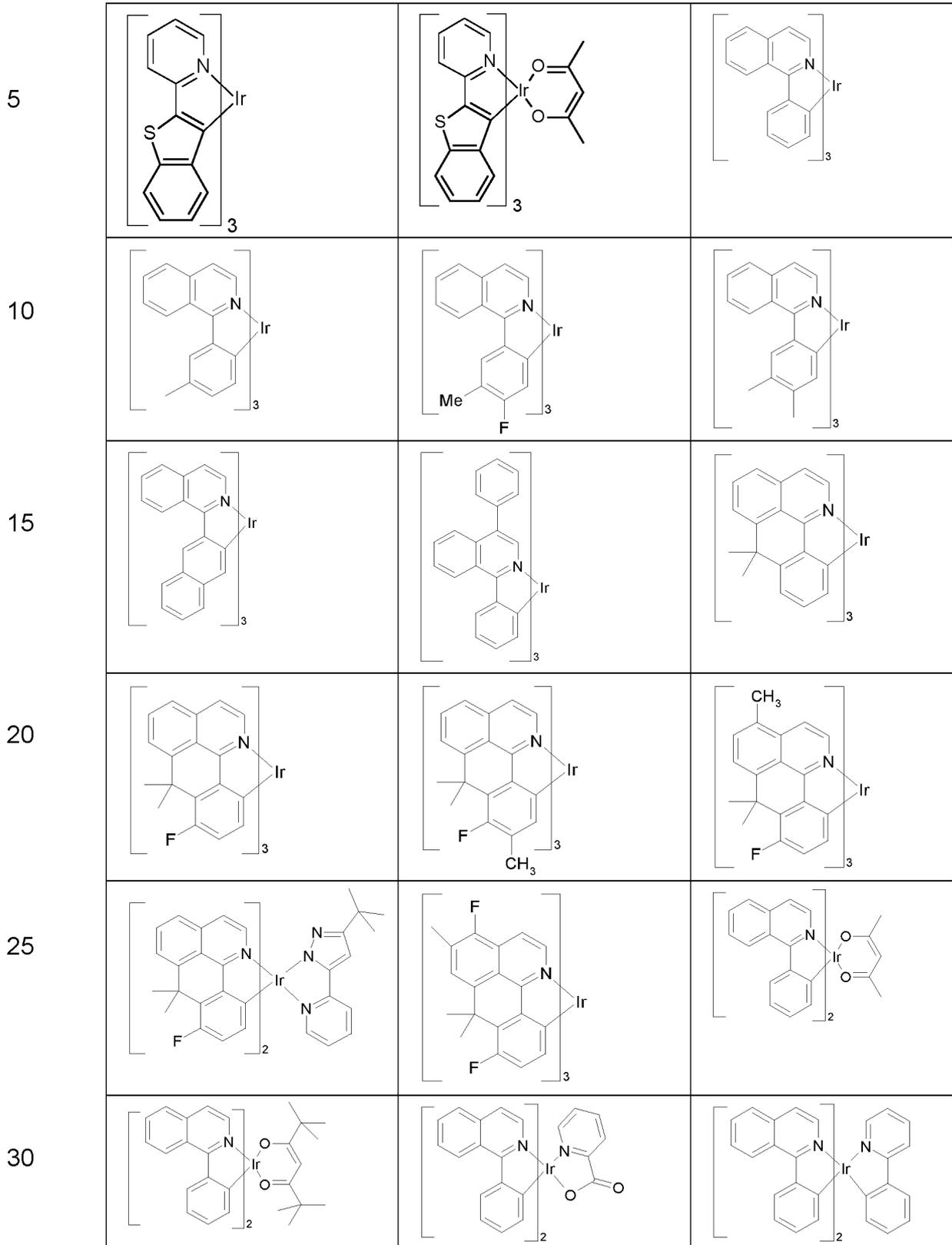
5 dungsgemäßen Verbindungen eingesetzt werden können, sind aromatische Ketone, aromatische Phosphinoxide oder aromatische Sulfoxide oder Sulfone, z. B. gemäß WO 2004/013080, WO 2004/093207, WO 2006/005627 oder WO 2010/006680, Triarylamine, Carbazolderivate, z. B. CBP (N,N-Biscarbazolylbiphenyl) oder die in WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527, WO 2008/086851 oder WO 2013/041176, Indolocarbazolderivate, z. B. gemäß WO 2007/063754 oder WO 2008/056746, Indenocarbazolderivate, z. B. gemäß WO 2010/136109, WO 2011/000455, WO 2013/041176 oder WO 2013/056776, Azacarbazol-
10 derivate, 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 2006/117052, Triazinderivate, z. B. gemäß WO 2007/063754, WO 2008/056746, WO 2010/015306, WO 2011/057706, WO 2011/060859
15 oder WO 2011/060877, Zinkkomplexe, z. B. gemäß EP 652273 oder WO 2009/062578, Diazasilol- bzw. Tetraazasilol-Derivate, z. B. gemäß WO 2010/054729, Diazaphosphol-Derivate, z. B. gemäß WO 2010/054730, verbrückte Carbazol-Derivate, z. B. gemäß WO 2011/042107, WO 2011/060867, WO 2011/088877 und WO 2012/143080, Triphenylenderivate,
20 z. B. gemäß WO 2012/048781, oder Dibenzofuranderivate, z. B. gemäß WO 2015/169412, WO 2016/015810, WO 2016/023608, WO 2017/148564 oder WO 2017/148565. Ebenso kann ein weiterer phosphoreszierender Emitter, welcher kürzerwellig als der eigentliche Emitter emittiert, als Co-Host in der Mischung vorhanden sein oder eine Verbindung, die nicht oder nicht in
25 wesentlichem Umfang am Ladungstransport teilnimmt, wie beispielsweise in WO 2010/108579 beschrieben.

In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung werden die Materialien in Kombination mit einem weiteren Matrixmaterial eingesetzt. Bevorzugte
30 Co-Matrixmaterialien, insbesondere wenn die erfindungsgemäße Verbindung mit einem elektronenarmen heteroaromatischen Ringsystem substituiert ist, sind gewählt aus der Gruppe der Biscarbazole, der verbrückten Carbazole,

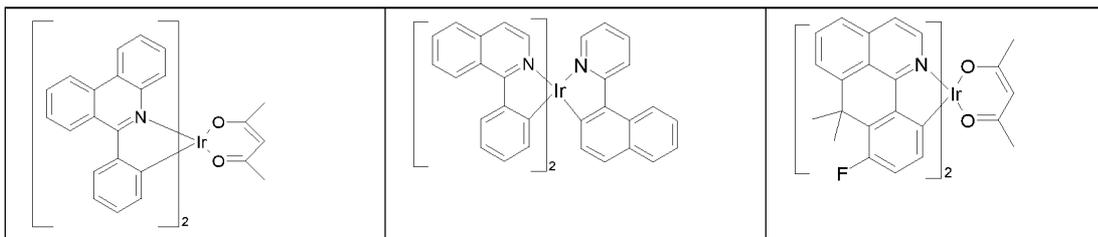
der Triarylamine, der Dibenzofuran-Carbazol-Derivate bzw. Dibenzofuran-Amin-Derivate und der Carbazolamine.

- 5 Als phosphoreszierende Verbindungen (= Triplettmitter) eignen sich insbesondere Verbindungen, die bei geeigneter Anregung Licht, vorzugsweise im sichtbaren Bereich, emittieren und außerdem mindestens ein Atom der Ordnungszahl größer 20, bevorzugt größer 38 und kleiner 84, besonders bevorzugt größer 56 und kleiner 80 enthalten, insbesondere ein Metall mit dieser Ordnungszahl. Bevorzugt werden als Phosphoreszenzemitter
- 10 Verbindungen, die Kupfer, Molybdän, Wolfram, Rhenium, Ruthenium, Osmium, Rhodium, Iridium, Palladium, Platin, Silber, Gold oder Europium enthalten, verwendet, insbesondere Verbindungen, die Iridium oder Platin enthalten.
- 15 Beispiele der oben beschriebenen Emitter können den Anmeldungen WO 00/70655, WO 2001/41512, WO 2002/02714, WO 2002/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 05/033244, WO 05/019373, US 2005/0258742, WO 2009/146770, WO 2010/015307, WO 2010/031485, WO 2010/054731, WO 2010/054728, WO 2010/086089, WO 2010/099852,
- 20 WO 2010/102709, WO 2011/032626, WO 2011/066898, WO 2011/157339, WO 2012/007086, WO 2014/008982, WO 2014/023377, WO 2014/094961, WO 2014/094960, WO 2015/036074, WO 2015/104045, WO 2015/117718, WO 2016/015815, WO 2016/124304, WO 2017/032439, WO 2018/011186 und WO 2018/041769, WO 2019/020538, WO 2018/178001 sowie den noch
- 25 nicht offen gelegten Patentanmeldungen EP 17206950.2 und EP 18156388.3 entnommen werden. Generell eignen sich alle phosphoreszierenden Komplexe, wie sie gemäß dem Stand der Technik für phosphoreszierende OLEDs verwendet werden und wie sie dem Fachmann auf dem Gebiet der organischen Elektrolumineszenz bekannt sind, und der
- 30 Fachmann kann ohne erfinderisches Zutun weitere phosphoreszierende Komplexe verwenden.

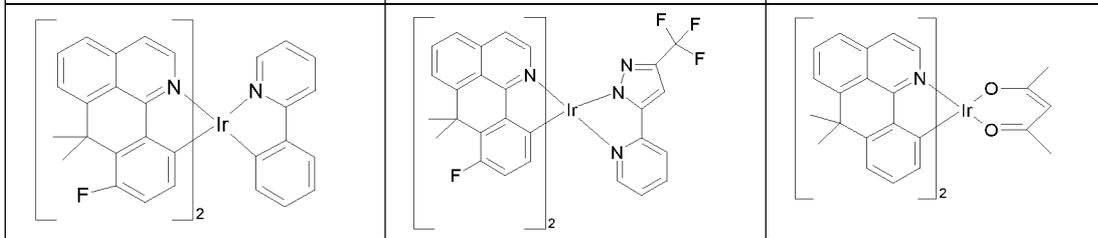
Beispiele für phosphoreszierende Dotanden sind nachfolgend aufgeführt.



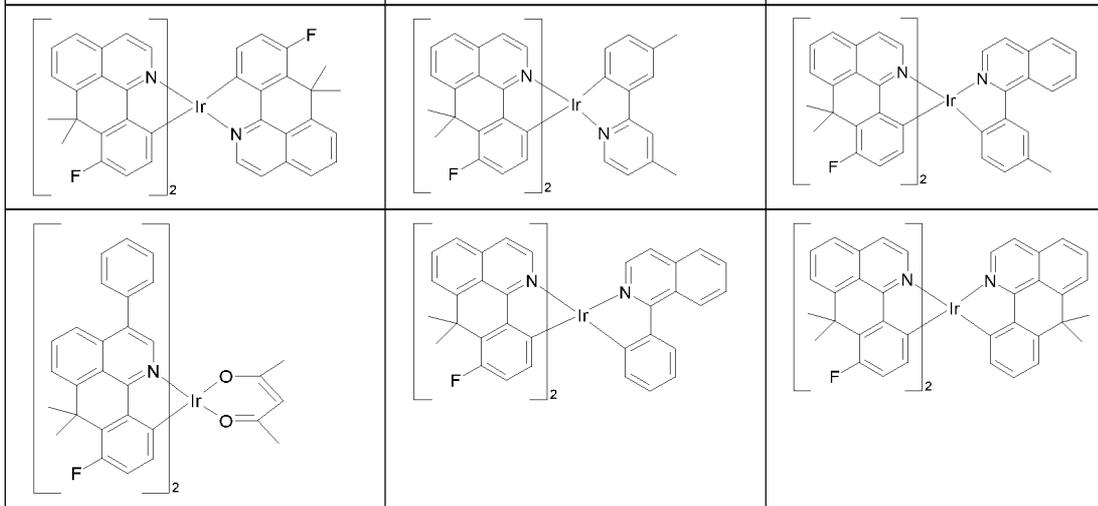
5



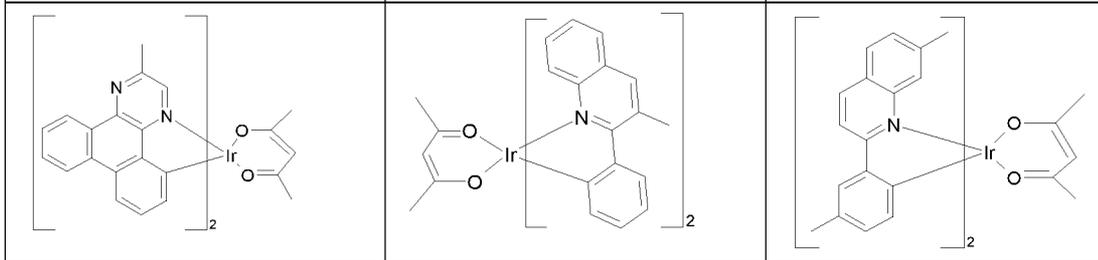
10



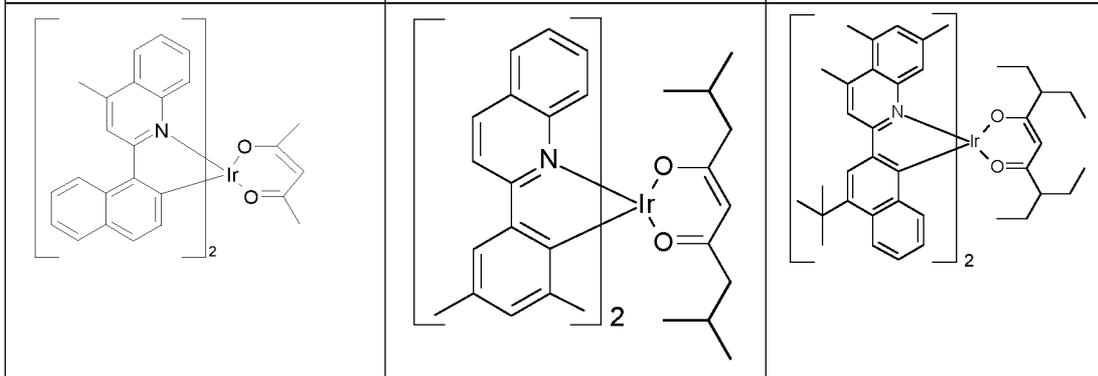
15



20

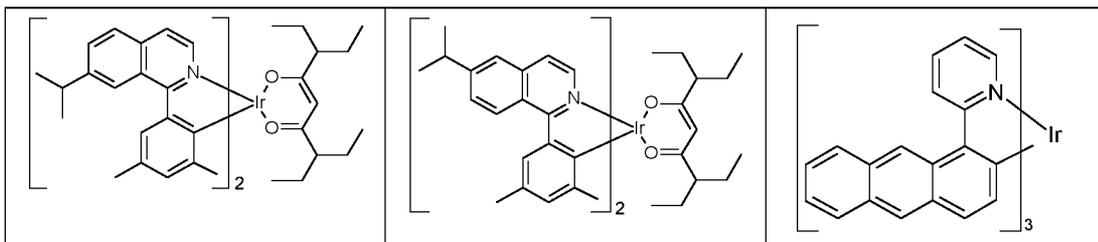


25

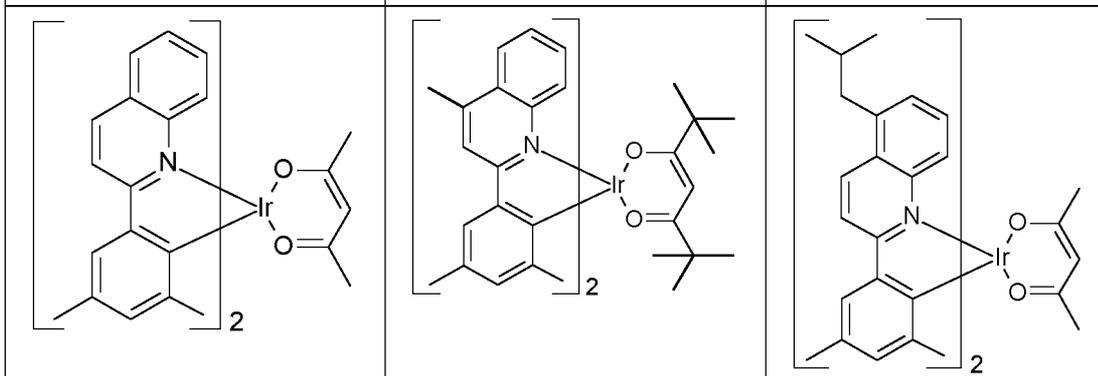


30

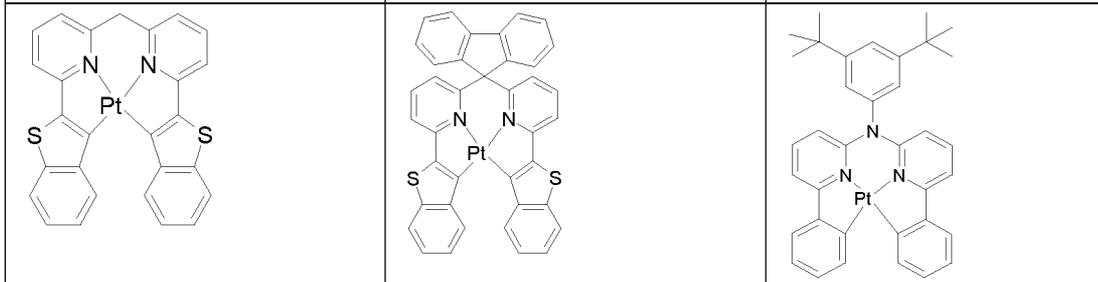
5



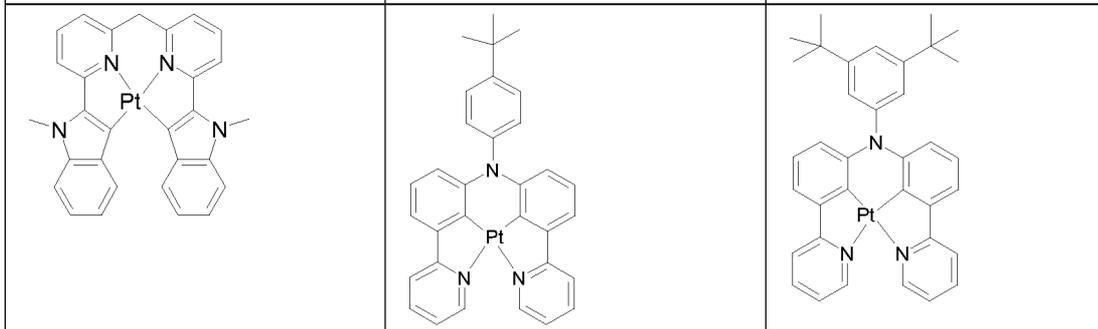
10



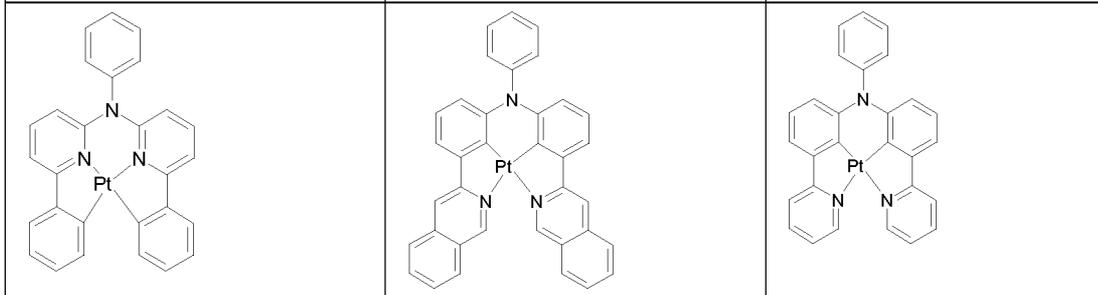
15



20

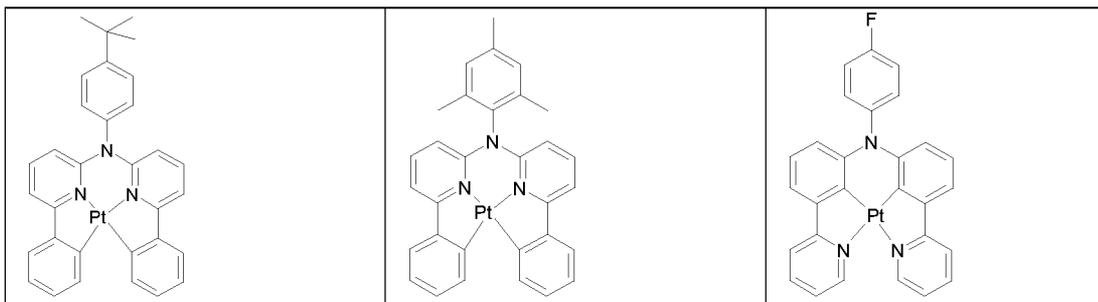


25

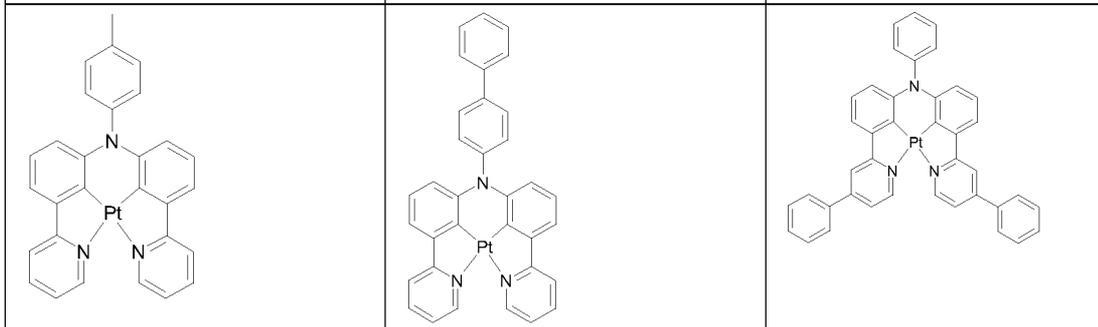


30

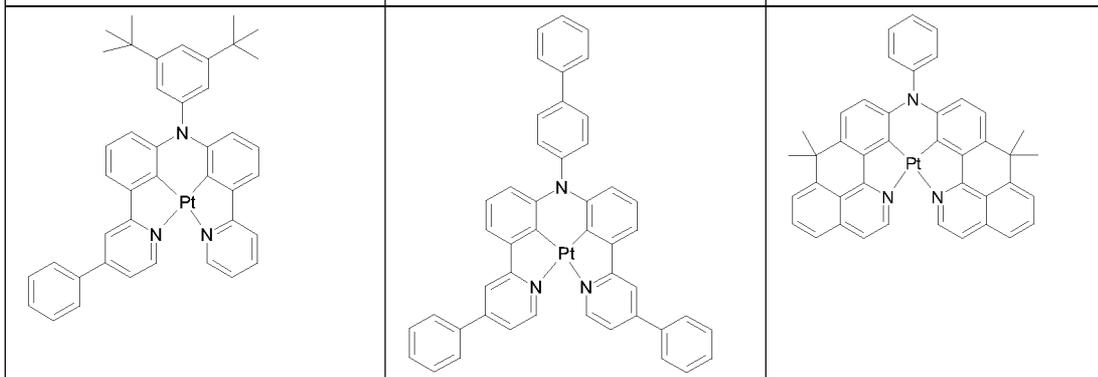
5



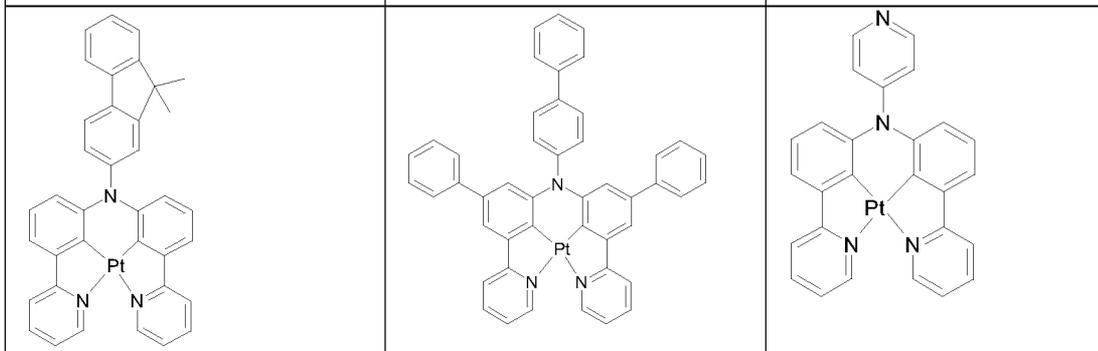
10



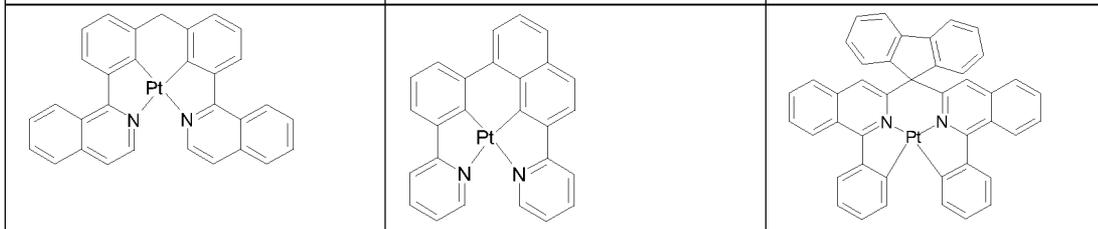
15



20

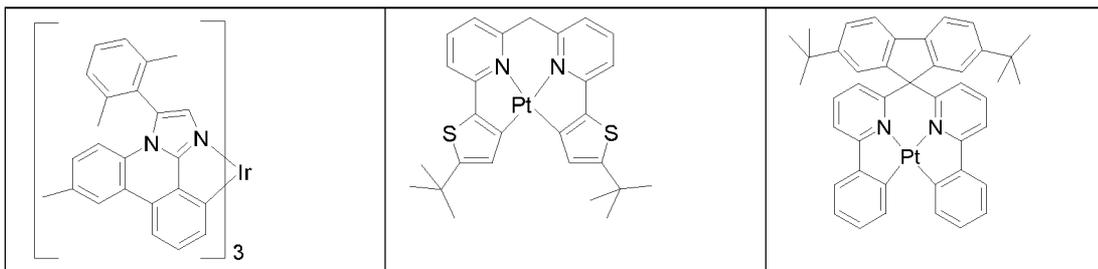


25

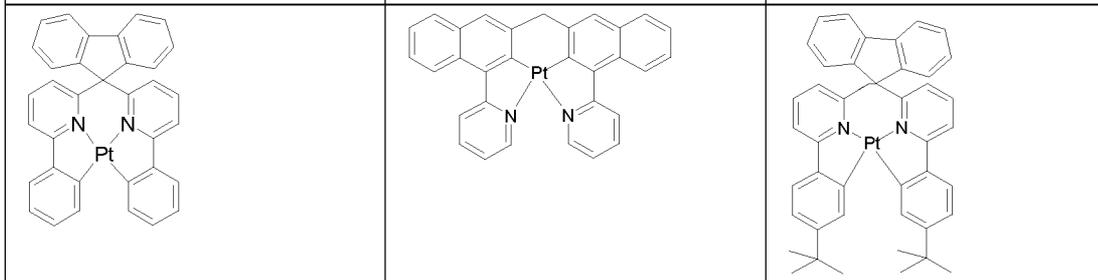


30

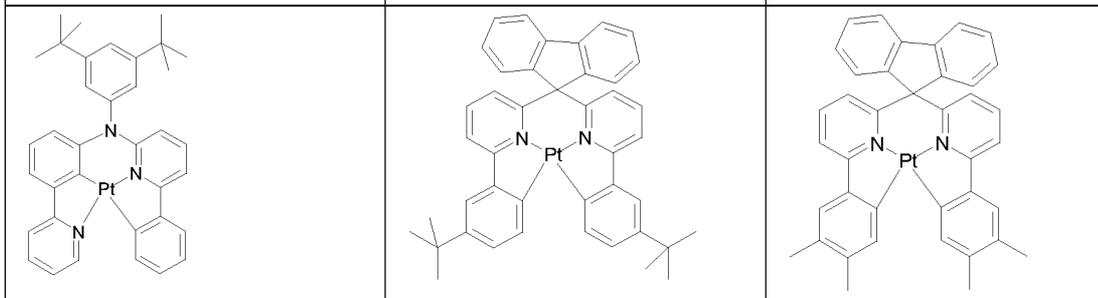
5



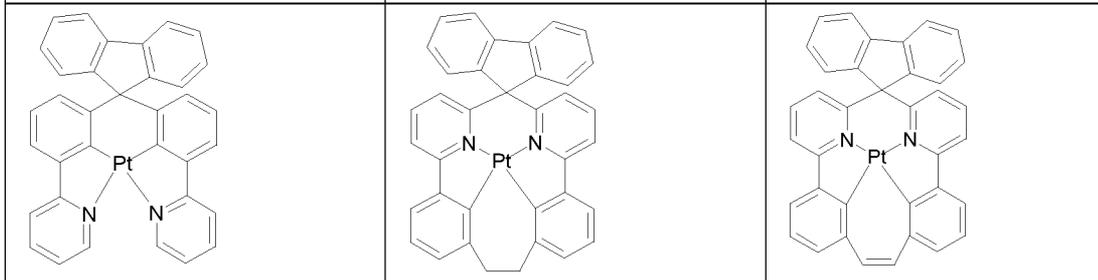
10



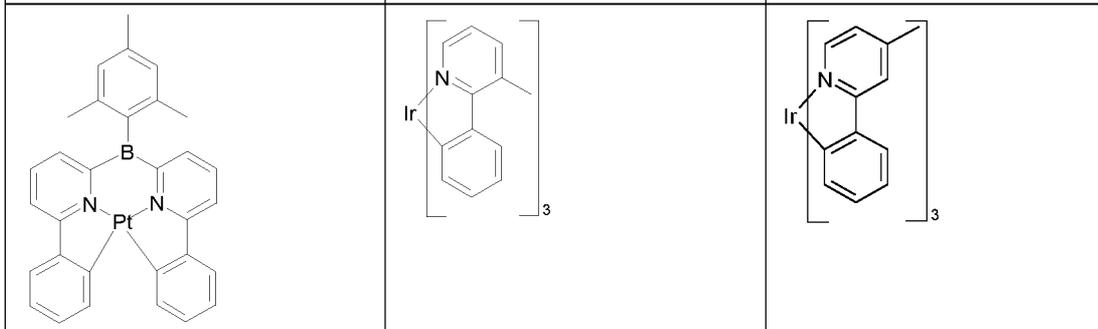
15



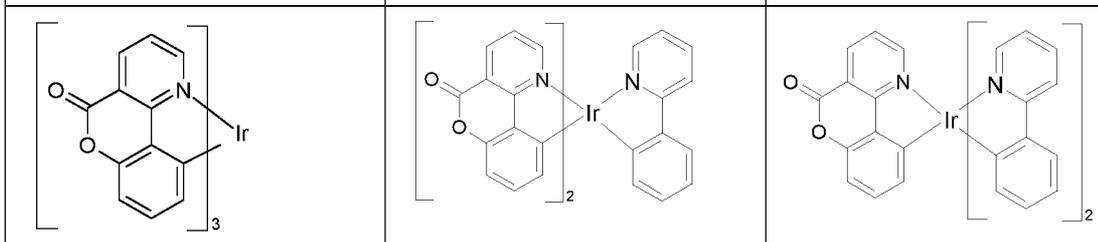
20



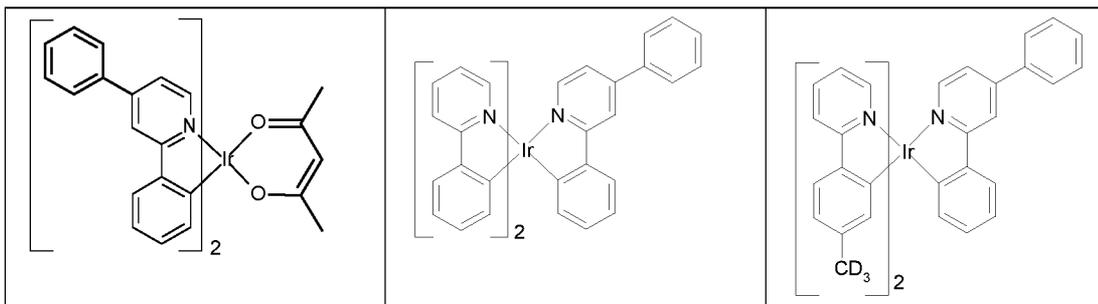
25



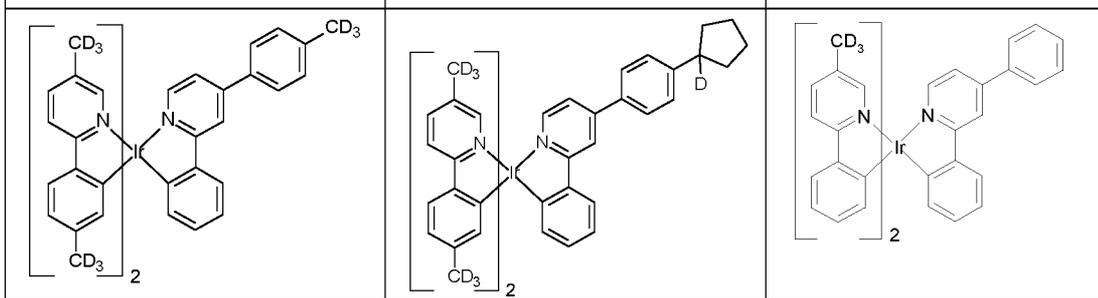
30



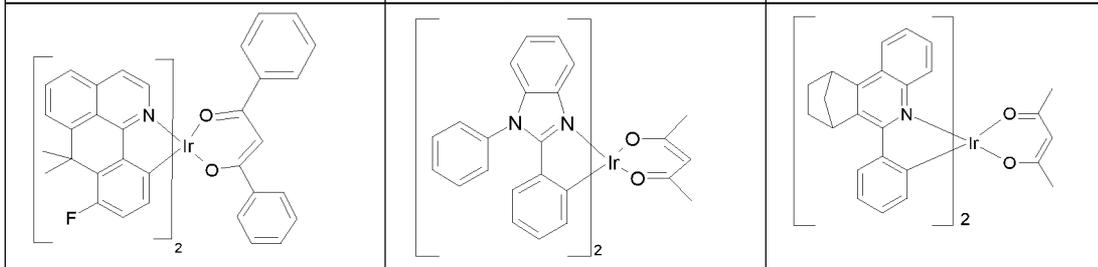
5



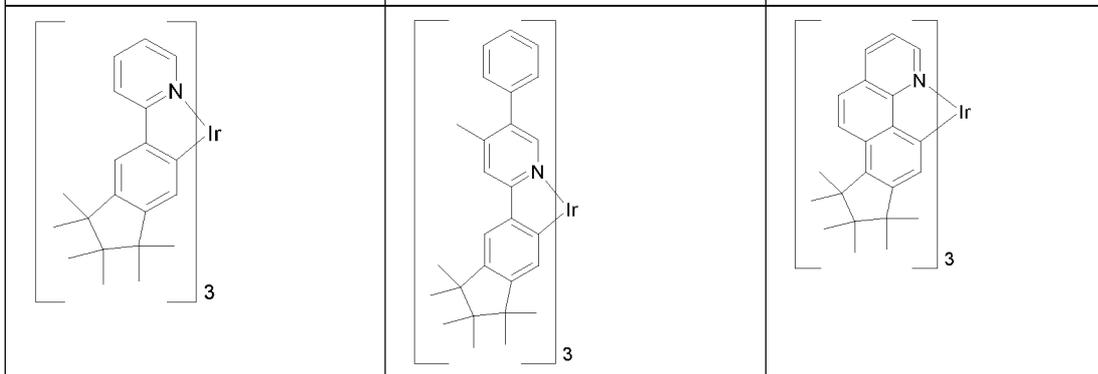
10



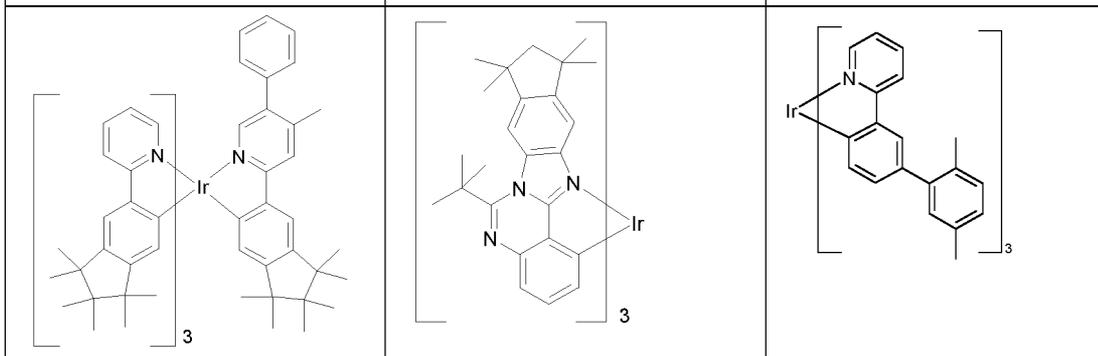
15



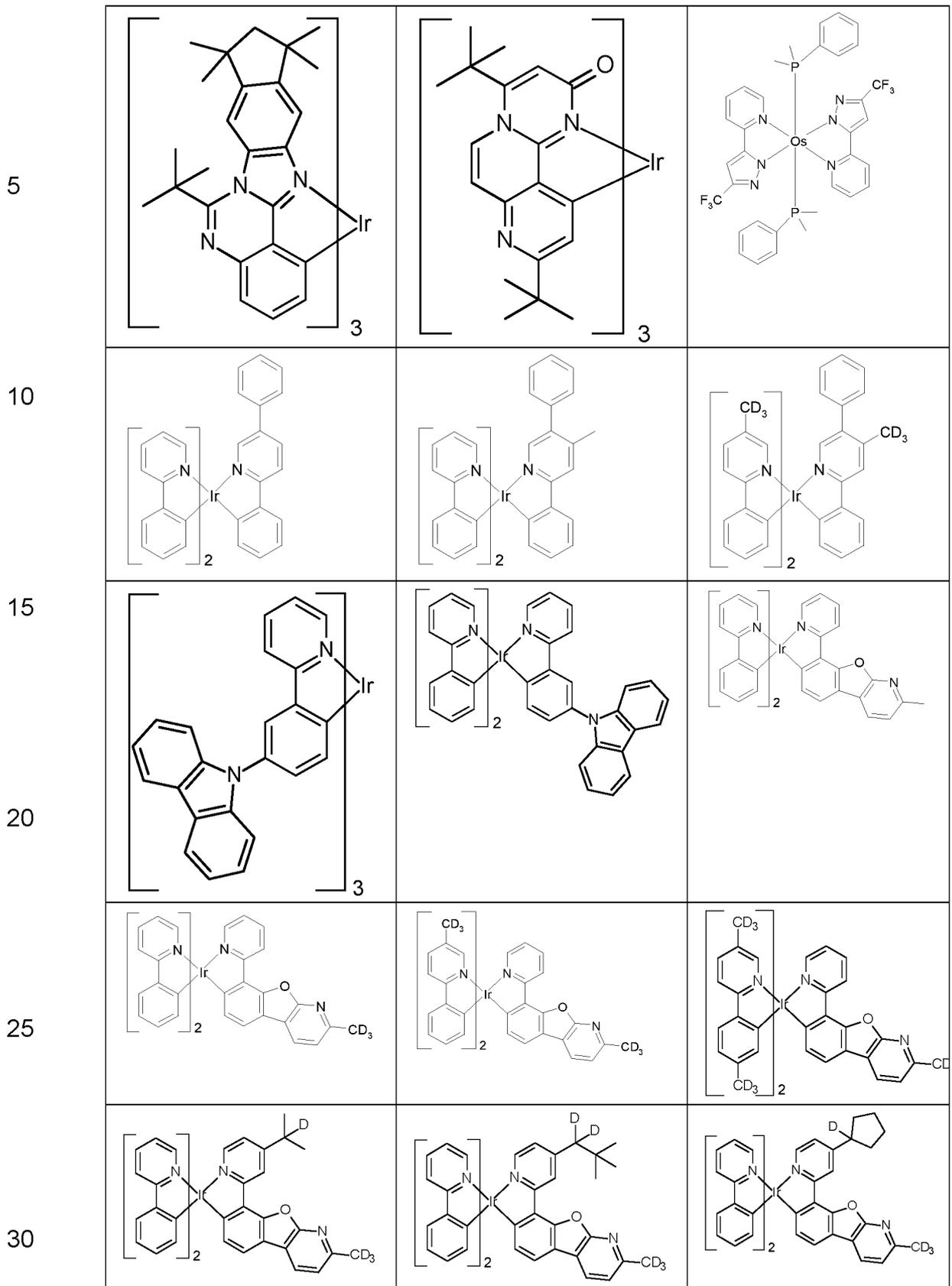
20



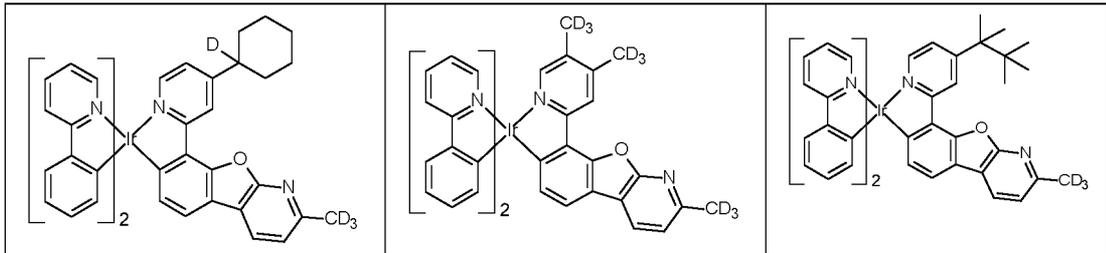
25



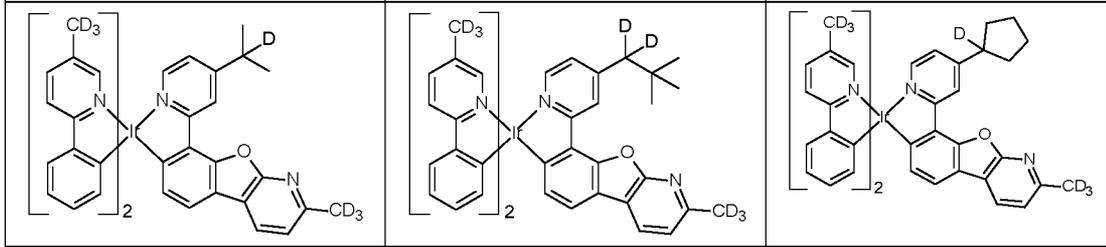
30



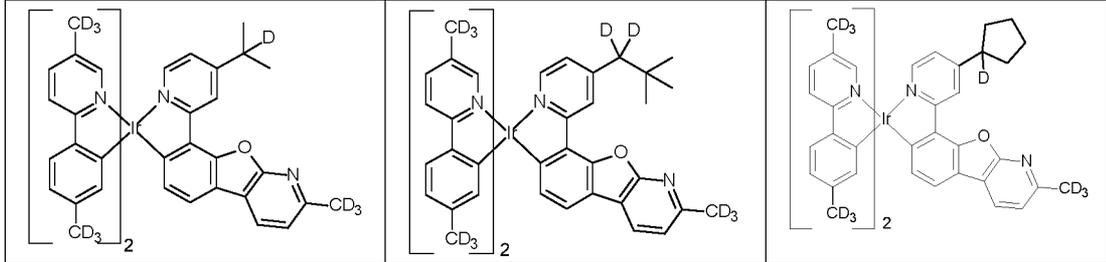
5



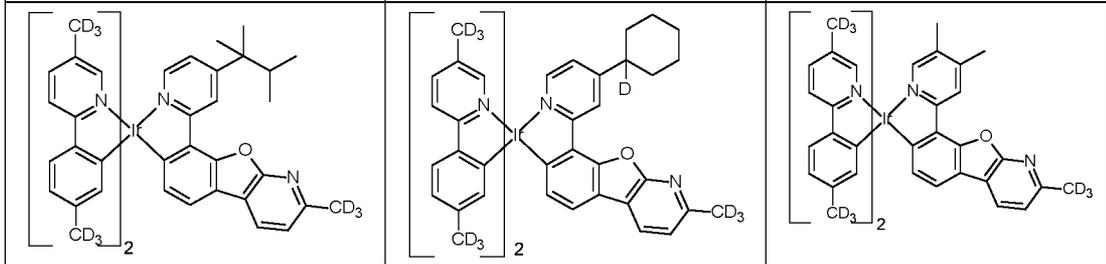
10



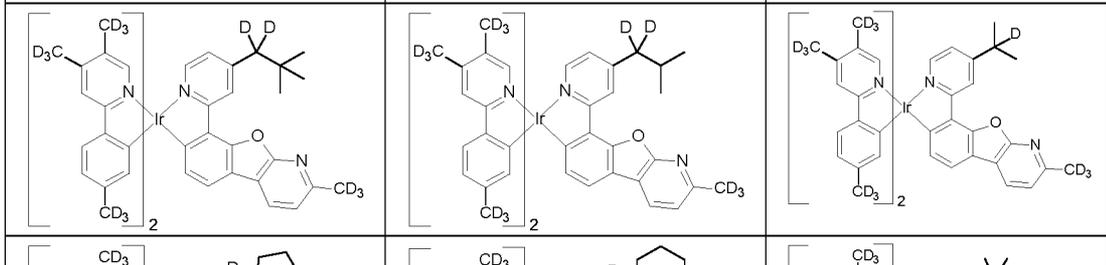
15



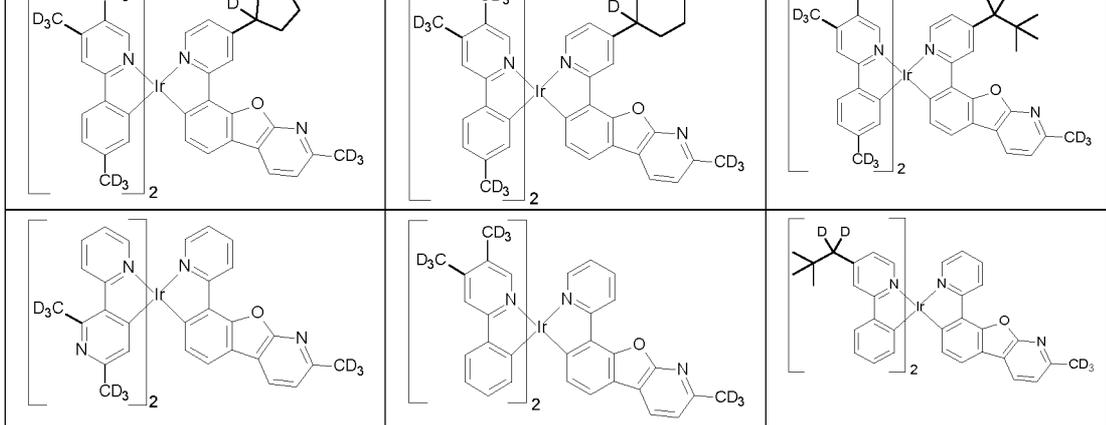
20



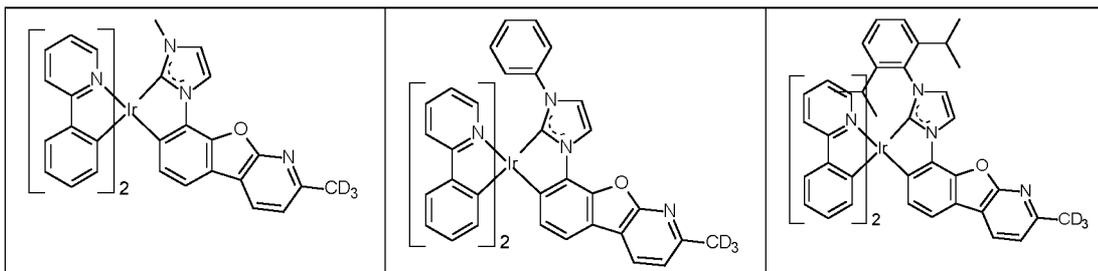
25



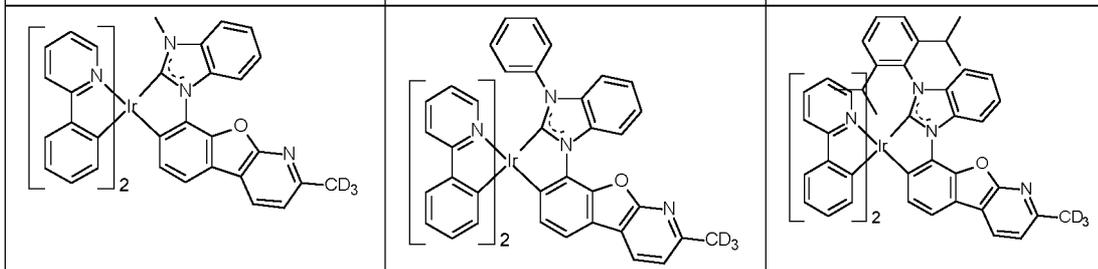
30



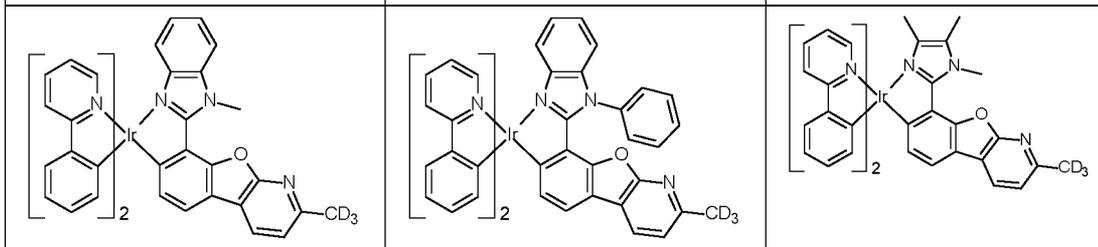
5



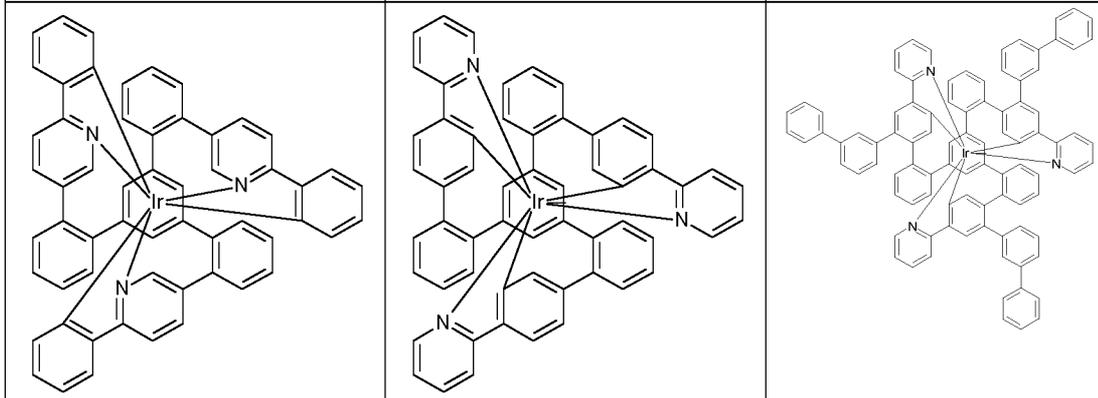
10



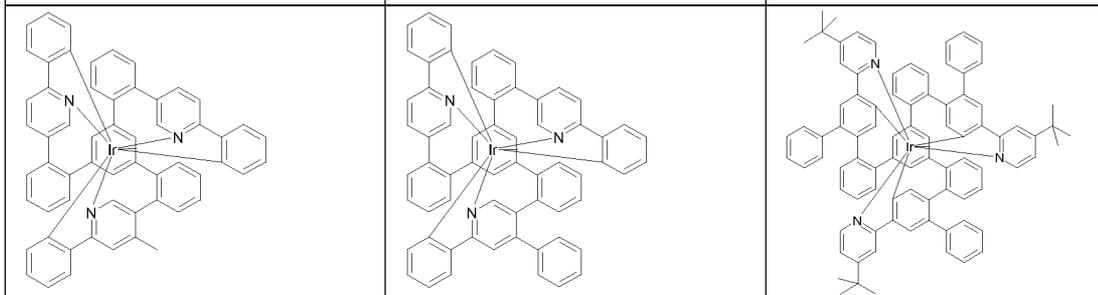
15



20

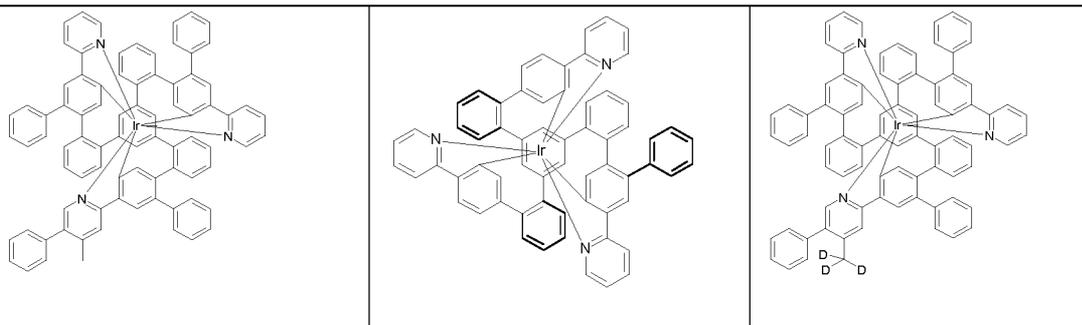


25

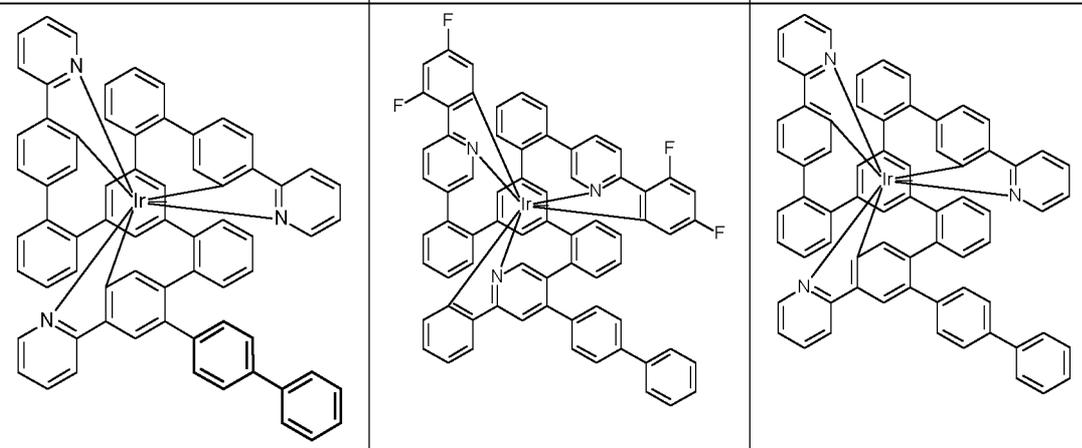


30

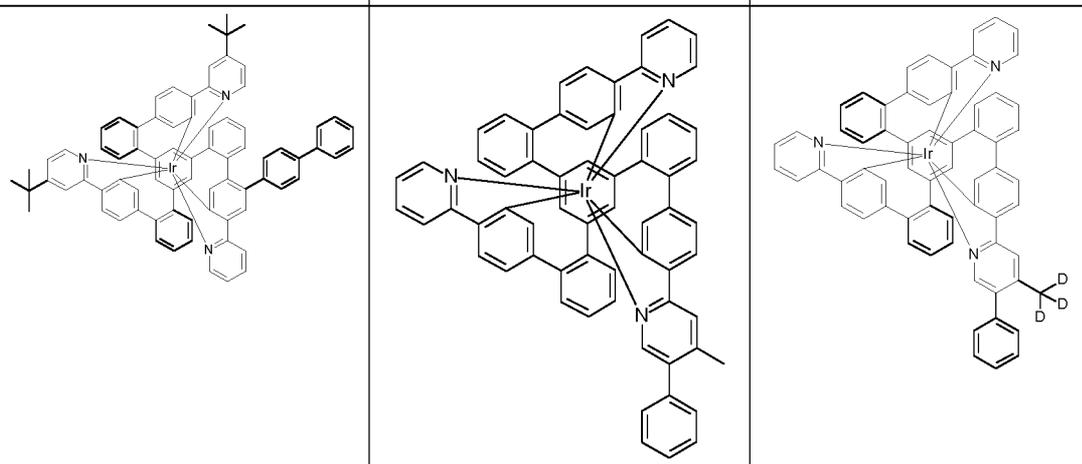
5



10

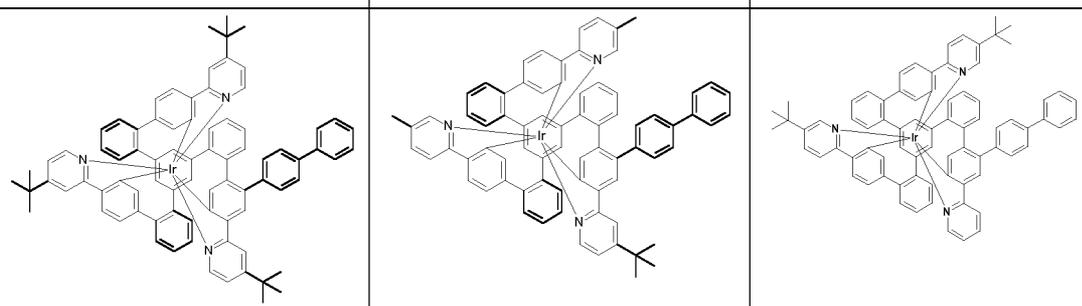


15



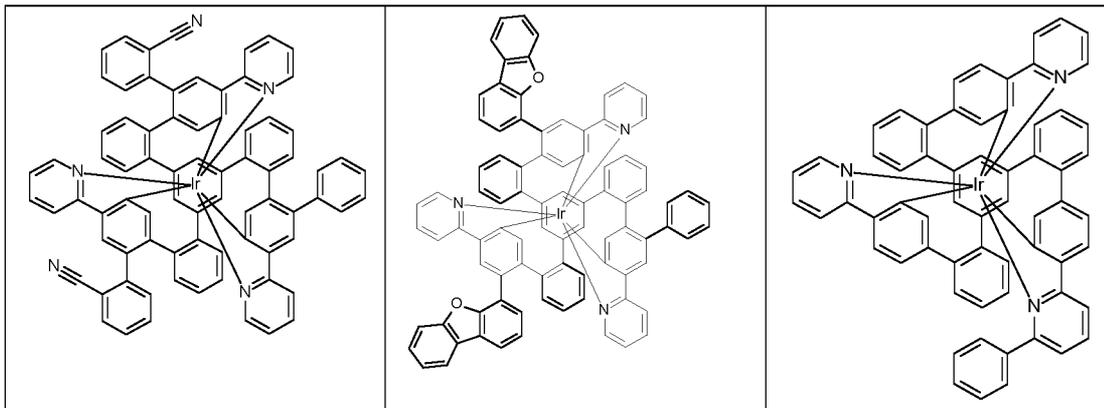
20

25

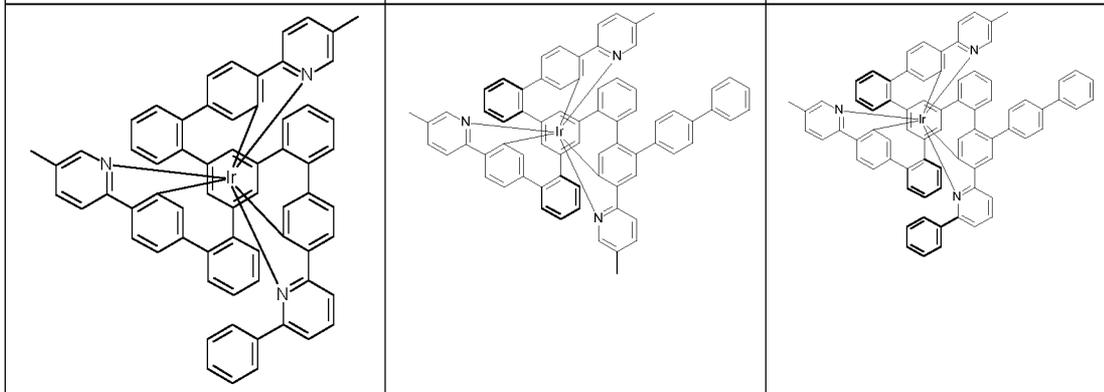


30

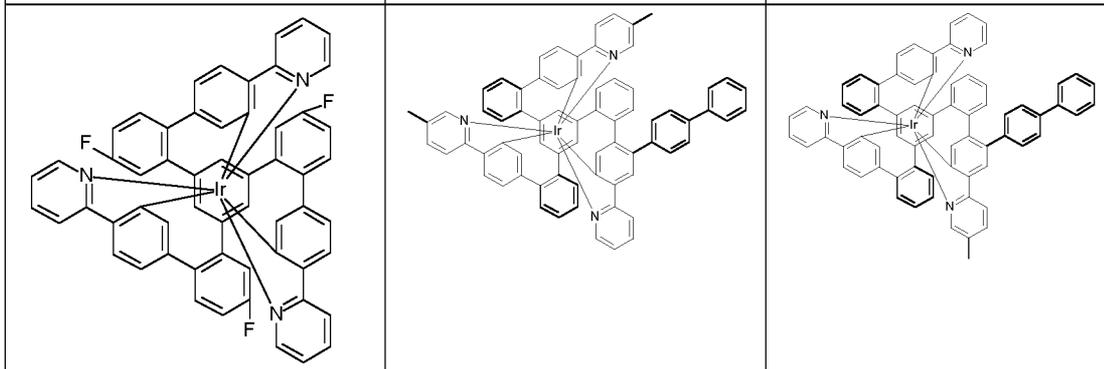
5



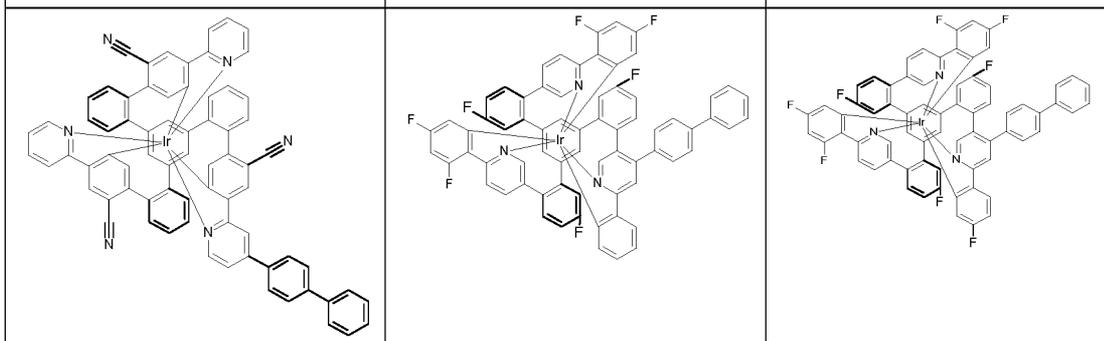
10



15



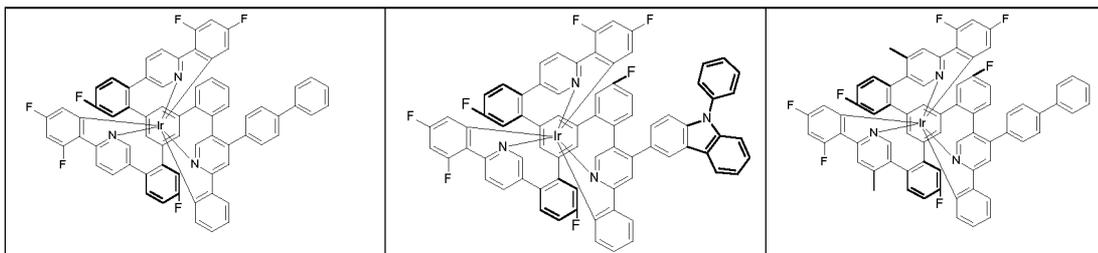
20



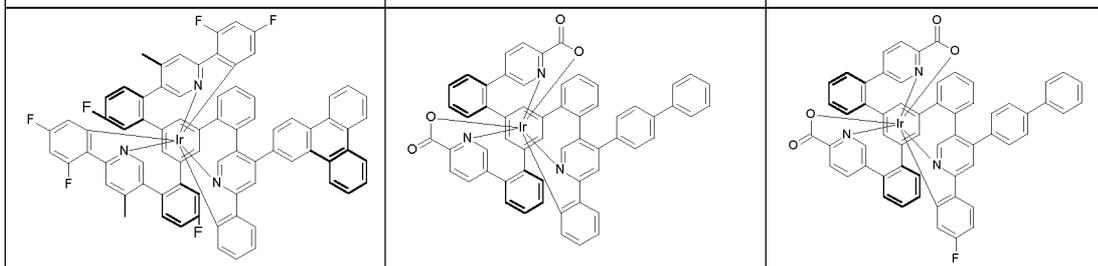
25

30

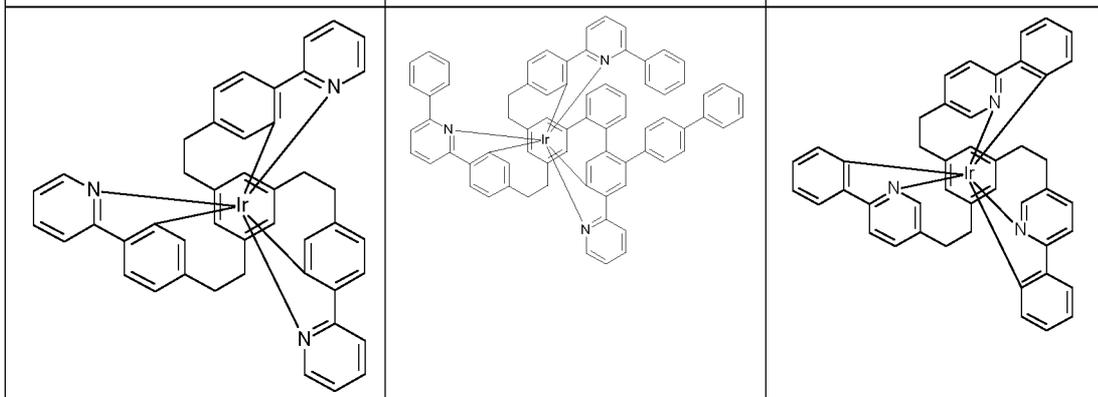
5



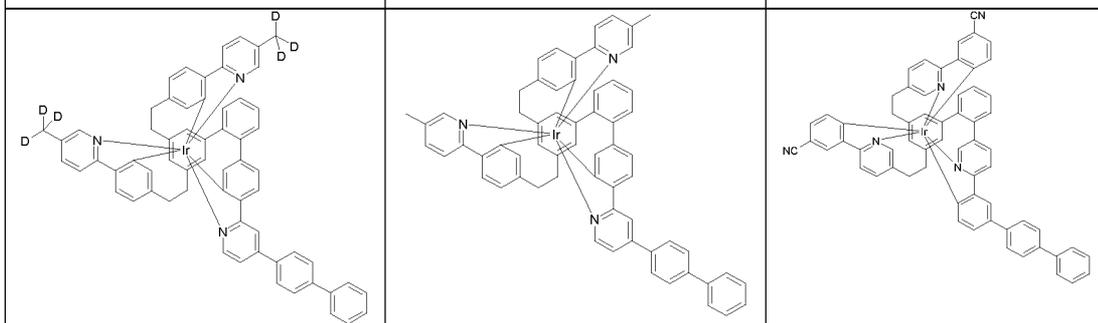
10



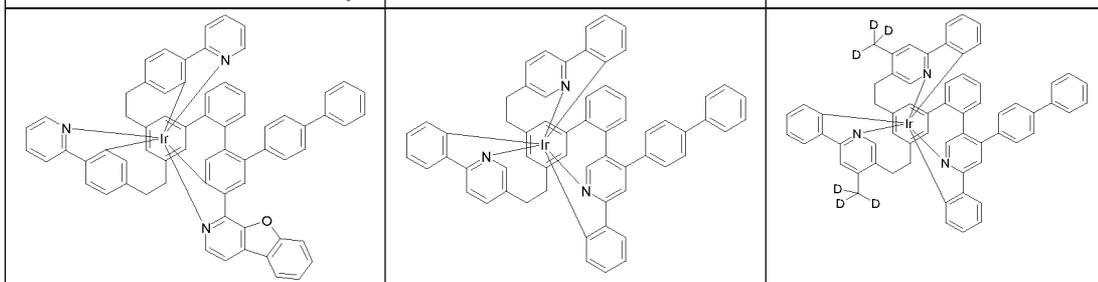
15



20

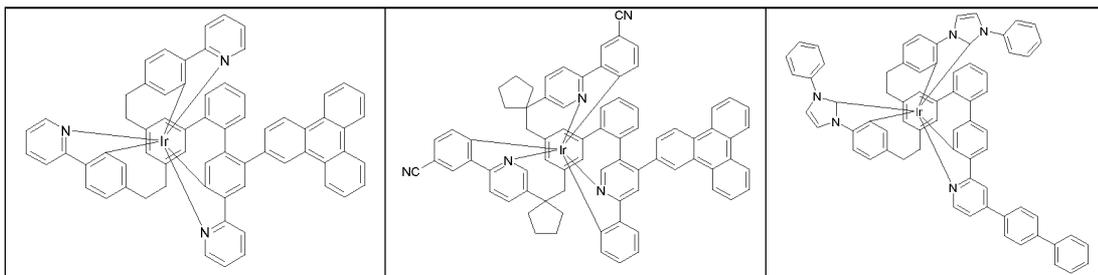


25

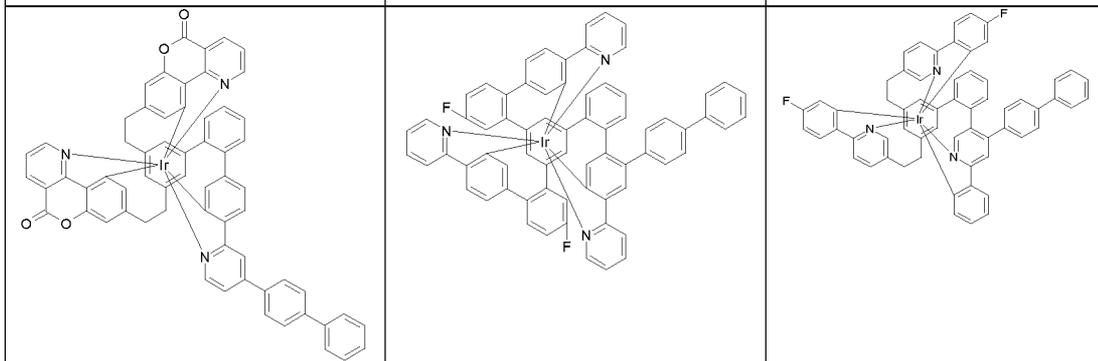


30

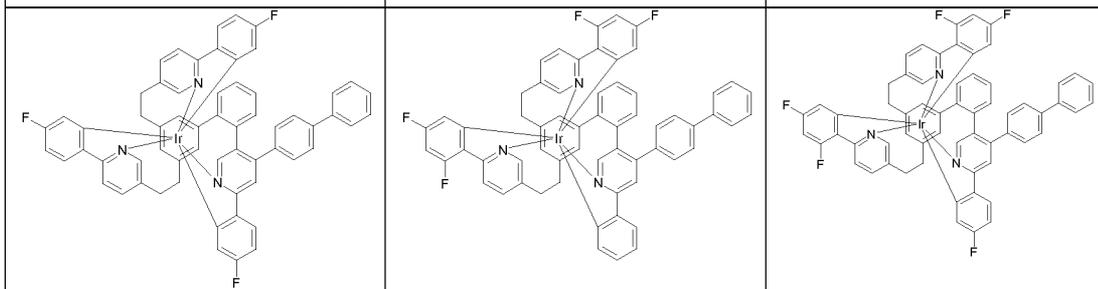
5



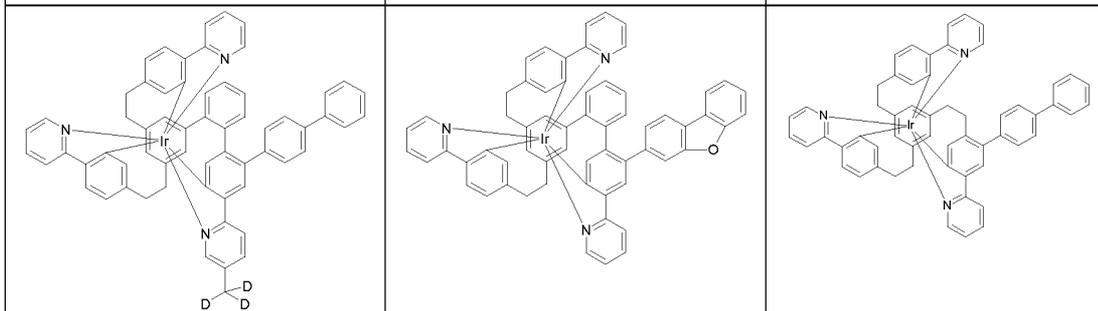
10



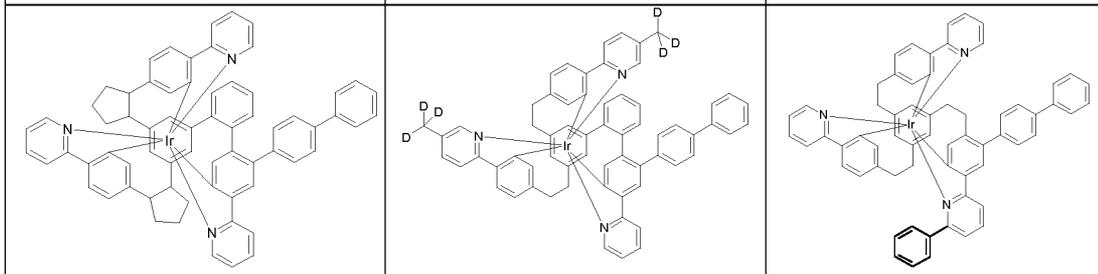
15



20

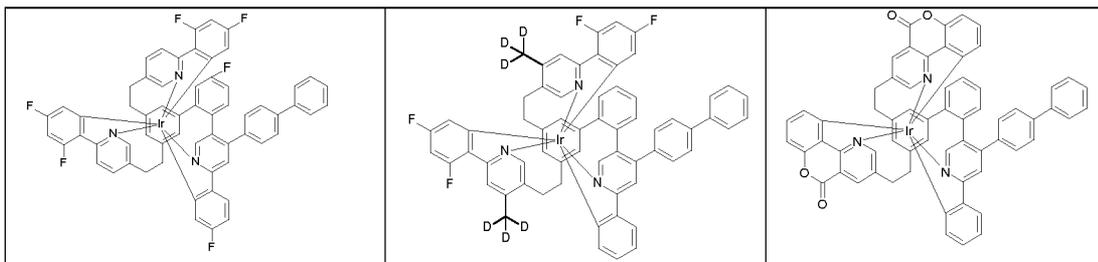


25

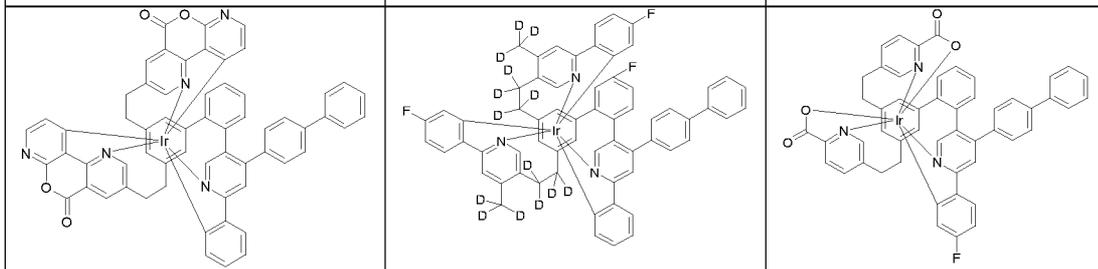


30

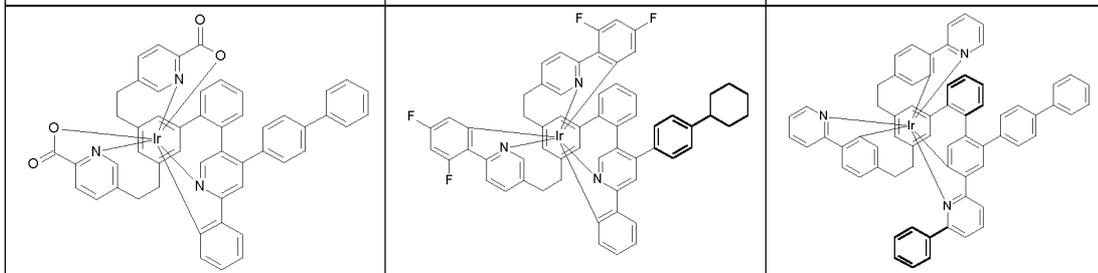
5



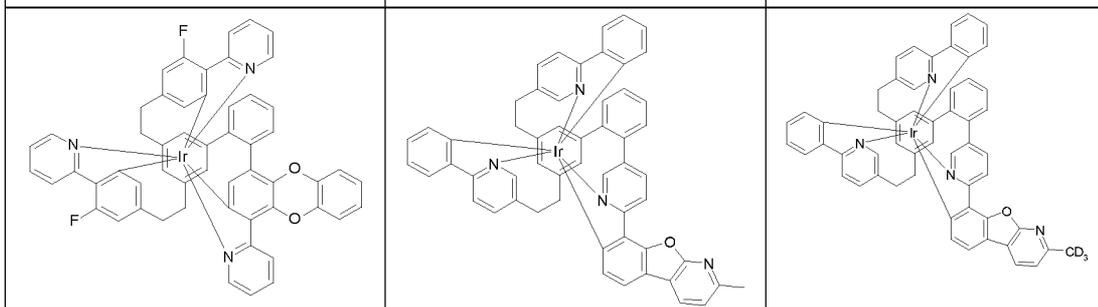
10



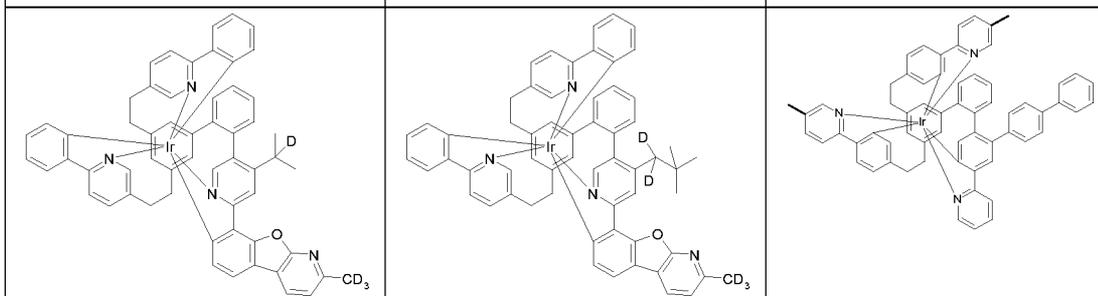
15



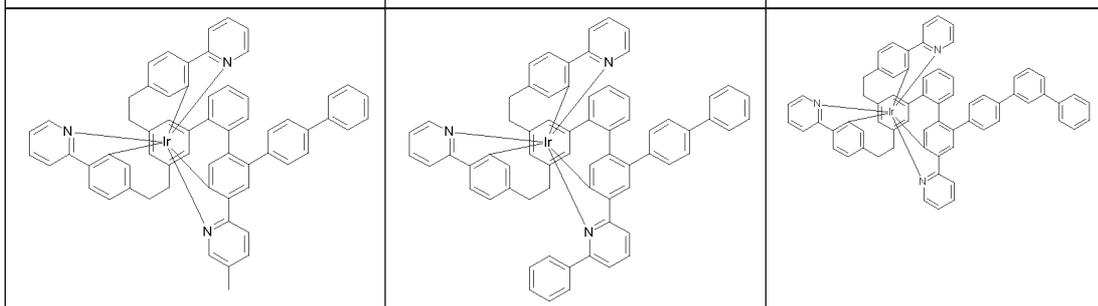
20



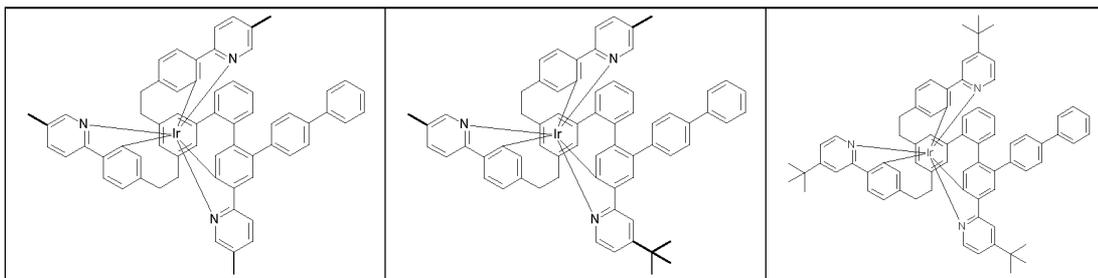
25



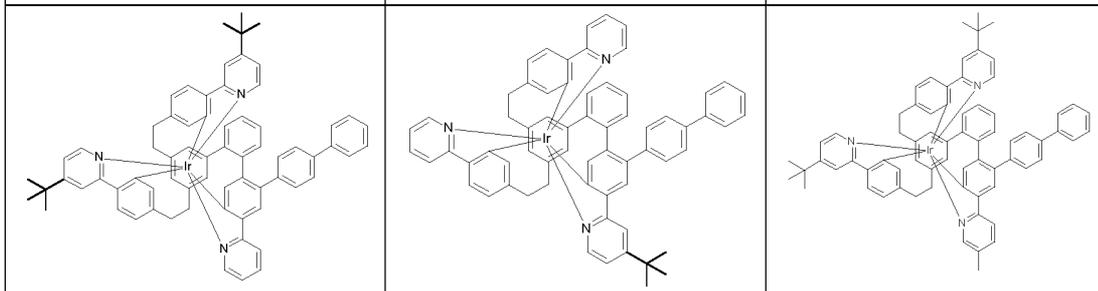
30



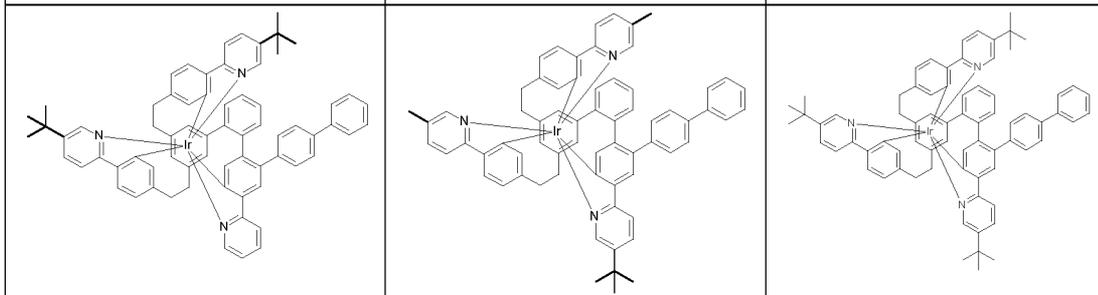
5



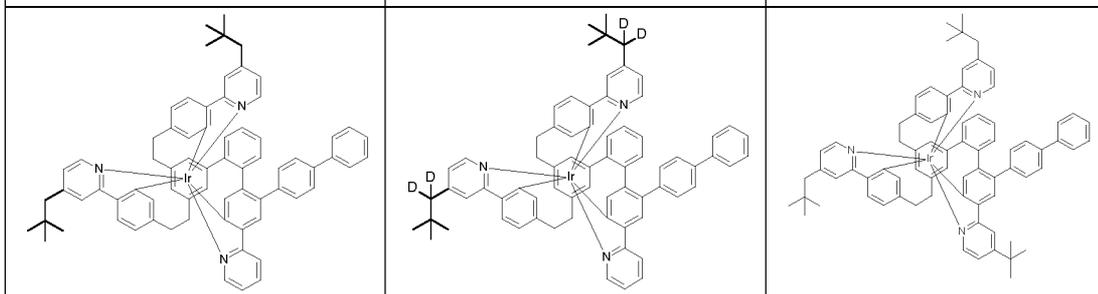
10



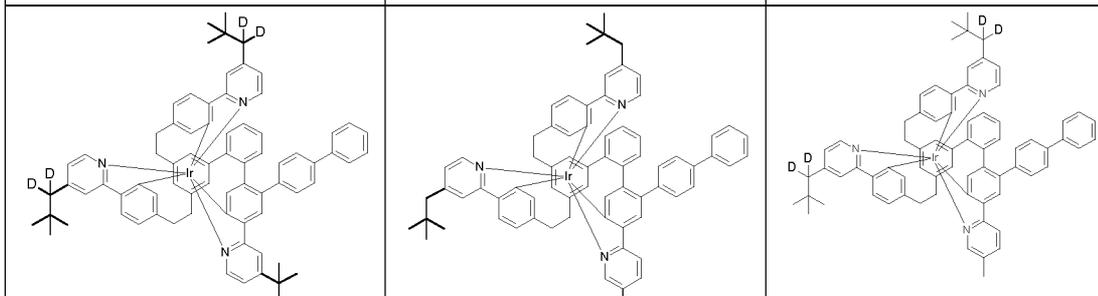
15



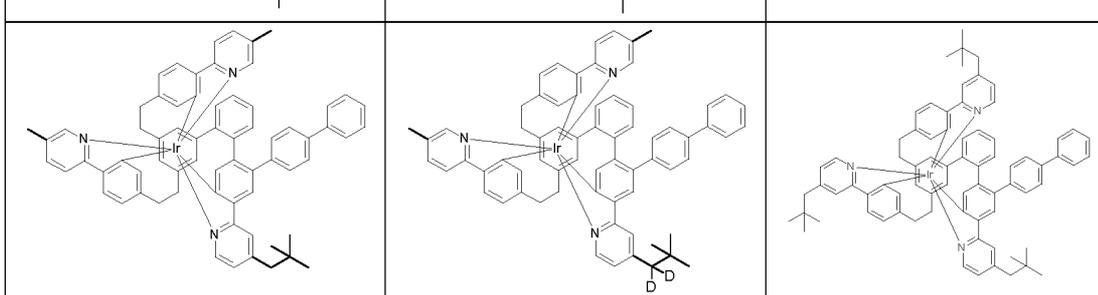
20



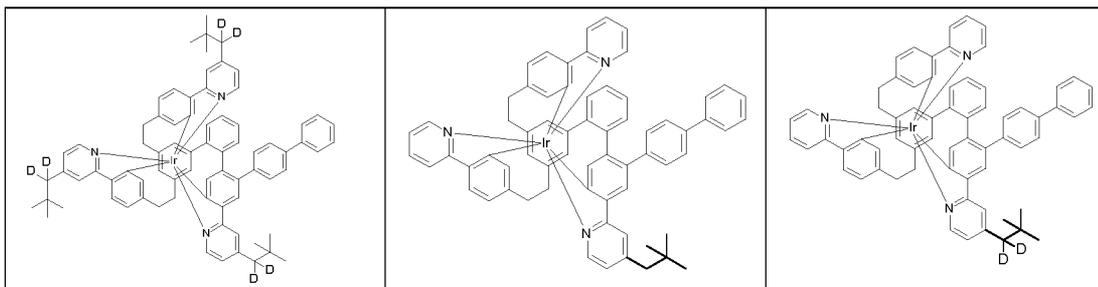
25



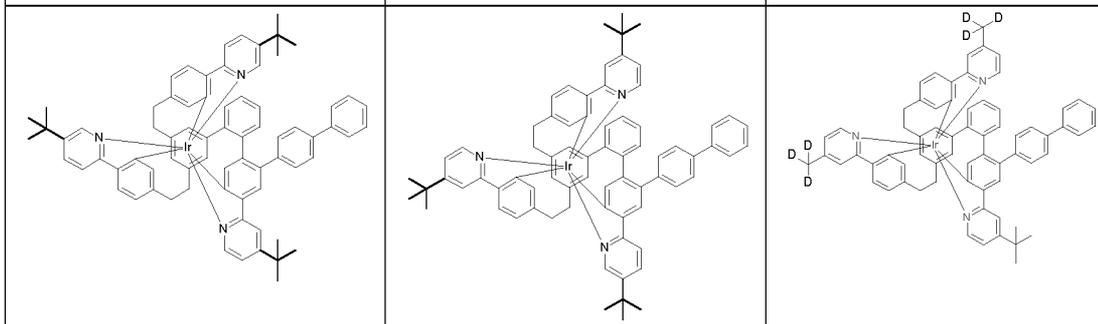
30



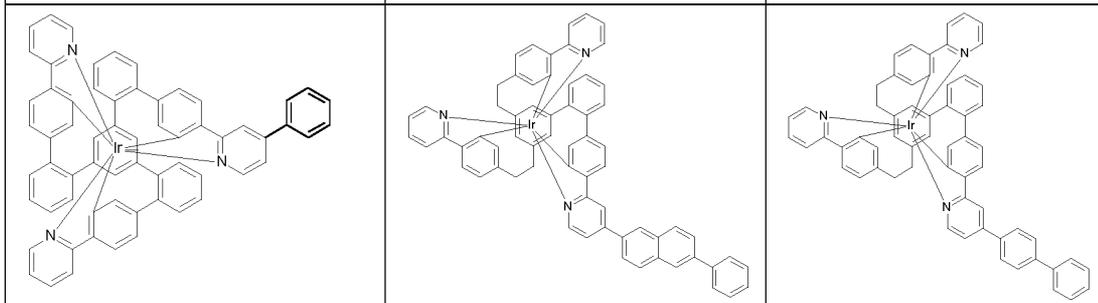
5



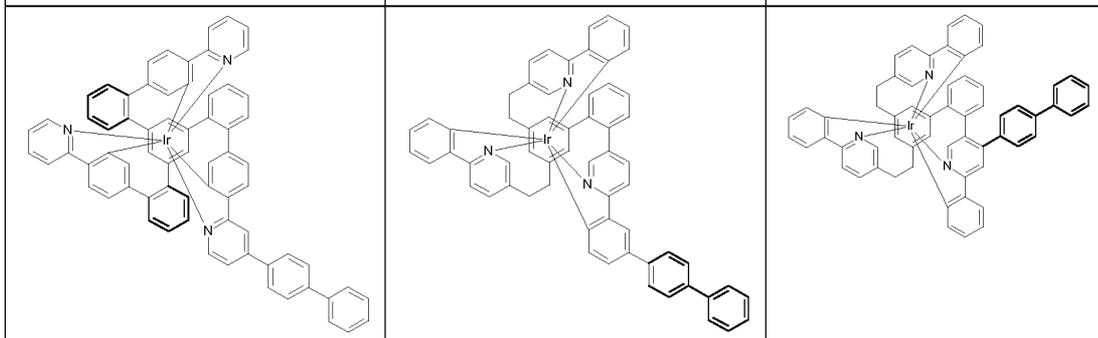
10



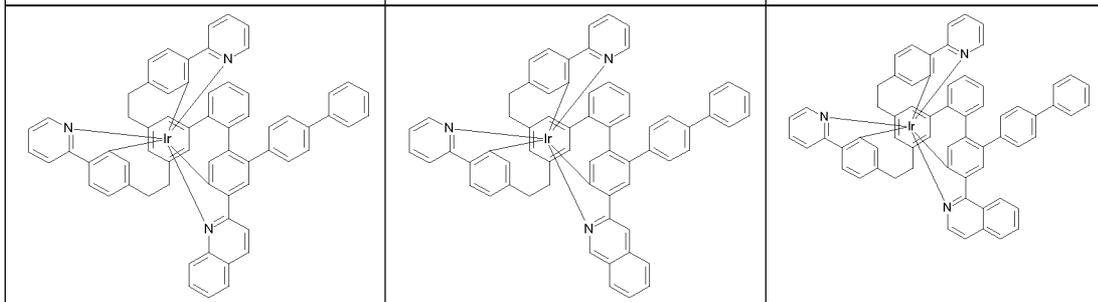
15



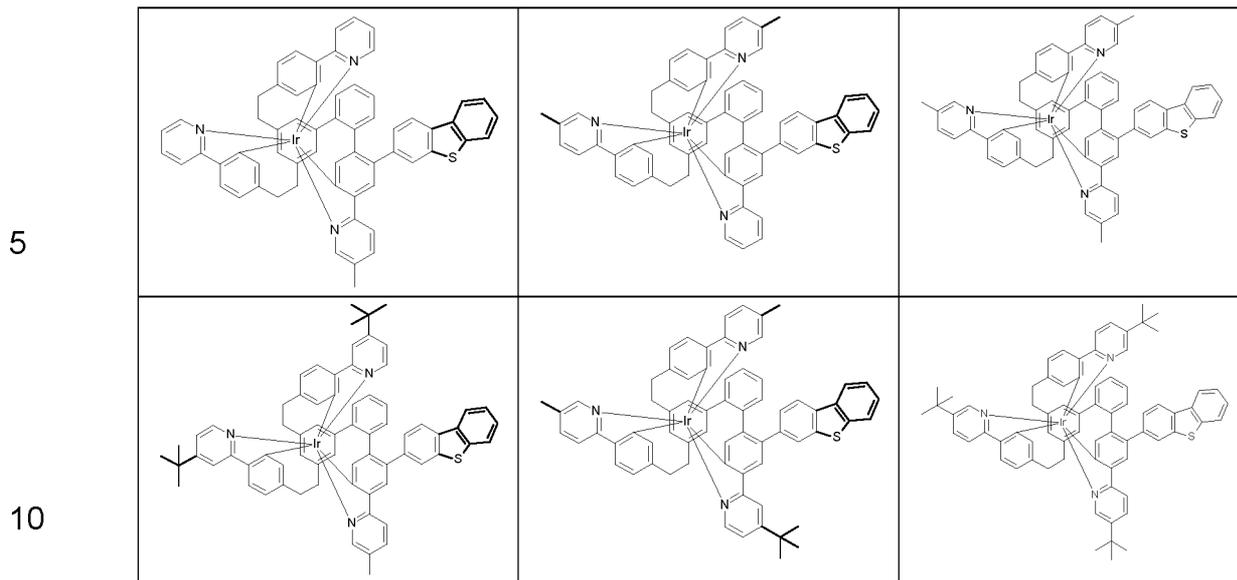
20



25



30



15

In den weiteren Schichten der erfindungsgemäßen organischen Elektrolumineszenzvorrichtung können alle Materialien verwendet werden, wie sie üblicherweise gemäß dem Stand der Technik eingesetzt werden. Der Fachmann kann daher ohne erfinderisches Zutun alle für organische Elektrolumineszenzvorrichtungen bekannten Materialien in Kombination mit den erfindungsgemäßen Verbindungen gemäß Formel (I) bzw. den oben ausgeführten bevorzugten Ausführungsformen einsetzen.

20

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 kleiner 10^{-5} mbar, bevorzugt kleiner 10^{-6} mbar aufgedampft. Es ist aber auch möglich, dass der Anfangsdruck noch geringer ist, beispielsweise kleiner 10^{-7} mbar.

25

30

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.

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

- Weiterhin sind Hybridverfahren möglich, bei denen beispielsweise eine oder mehrere Schichten aus Lösung aufgebracht werden und eine oder
15 mehrere weitere Schichten aufgedampft werden.

- Diese Verfahren sind dem Fachmann generell bekannt und können von ihm ohne erfinderisches Zutun auf organische Elektrolumineszenzvorrichtungen enthaltend die erfindungsgemäßen Verbindungen angewandt werden.

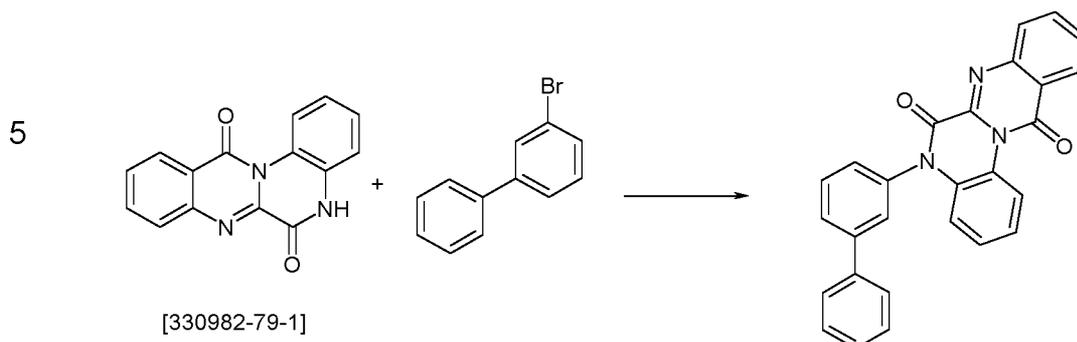
20

Beispiele

- Die nachfolgenden Synthesen werden, sofern nicht anders angegeben, unter einer Schutzgasatmosphäre durchgeführt. Die Edukte können von
25 den Firmen ALDRICH bzw. ABCR (Palladium(II)acetat, Tri-o-tolylphosphin, Anorganika, Lösemittel) bezogen werden. Die Angaben bei den literaturbekannten Edukten sind die CAS-Nummern.

30

a) 5-(3-phenylphenyl)quinoxalino[2,1-b]quinazoline-6,12-dion



10 6,6 g (24.8 mmol, 1.00eq) 5H-quinoxalino[2,1-b]quinazoline-6,12-dion, 21.3 ml (128 mmol, 5.2eq) 3-Bromobiphenyl [2113-57-7] und 7.20g Kaliumcarbonat (52.1 mmol, 2.10eq) werden in 220 ml getrocknetem DMF vorgelegt und mit Argon inertisiert. Anschließend werden 0.62 g (2.7 mmol, 0.11eq) 1,3-Di(2-pyridyl)-1,3-propandion und 0.52g (2.7 mmol, 0.11eq)

15 Kupfer(I)-iodid zugegeben und das Gemisch für drei Tage bei 140°C erhitzt. Nach beendeter Reaktion wird der Ansatz vorsichtig am Rotationsverdampfer eingeeengt, der ausgefallene Feststoff abgesaugt und mit Wasser und Ethanol gewaschen. Das Rohprodukt wird zweimal mittels Heißextraktor (Toluol/Heptan 1:1) aufgereinigt und der erhaltene Feststoff

20 aus Toluol umkristallisiert. Die Ausbeute beträgt nach Sublimation 6,6 g (15 mmol) 60 % der Theorie.

Analog werden folgende Verbindungen erhalten:

25

Bsp.	Edukt 1	Edukt 1	Produkt	Ausbeute
1a	 [40078-06-6]	 [83819-97-0]		56%

30

5

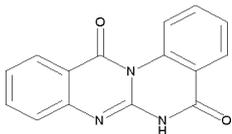
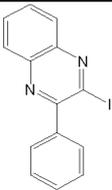
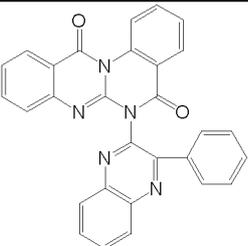
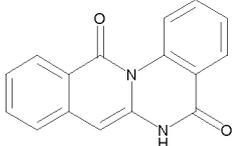
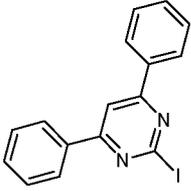
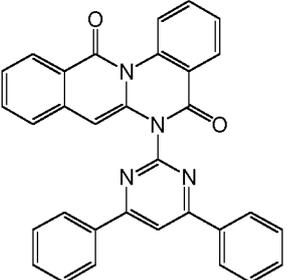
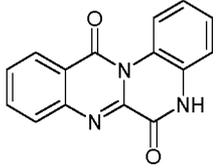
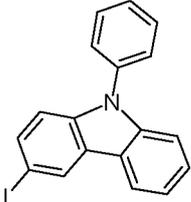
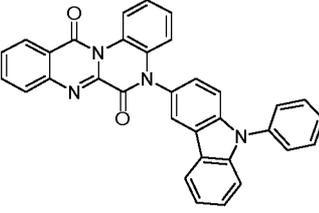
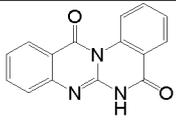
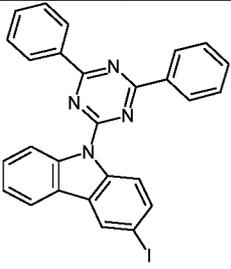
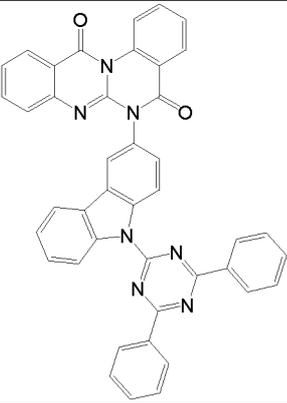
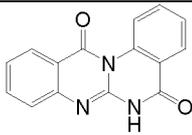
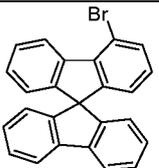
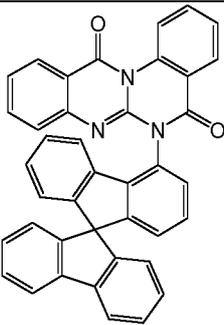
10

15

20

25

30

2a	 [40078-06-6]	 [1009737-39-6]		52%
3a	 [500198-60-7]	 [374077-23-3]		56%
4a	 [330982-79-1]	 [502161-03-7]		60%
5a	 [40078-06-6]	 [1692900-05-2]		57%
6a	 [40078-06-6]	 [171408-76-7]		61%

5

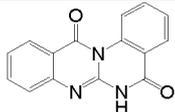
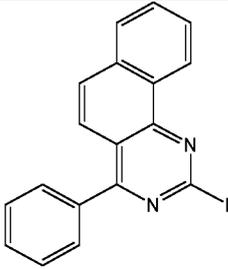
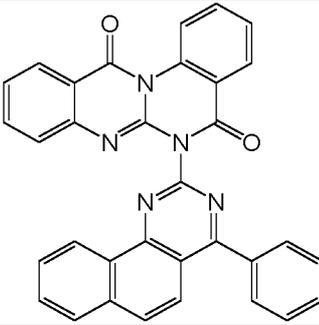
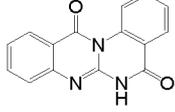
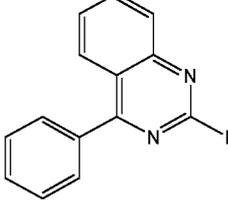
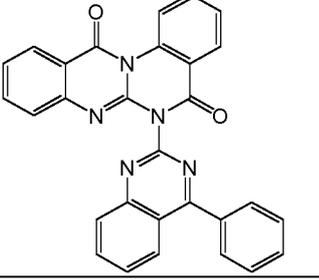
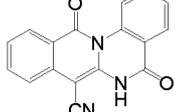
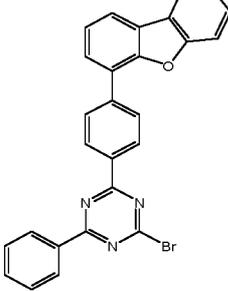
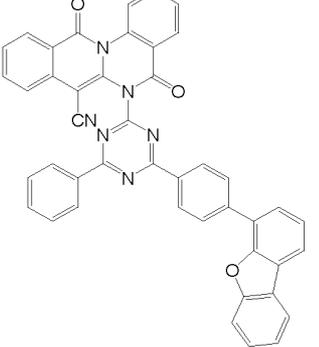
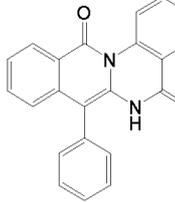
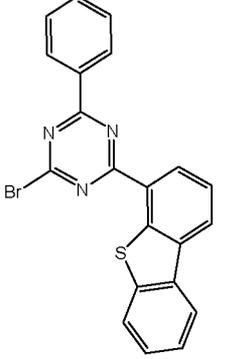
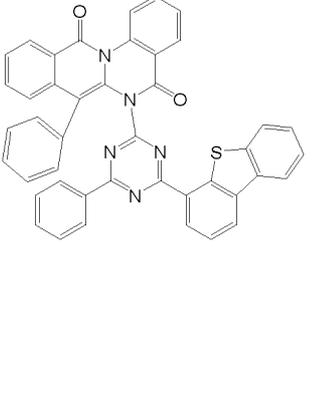
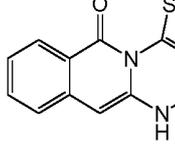
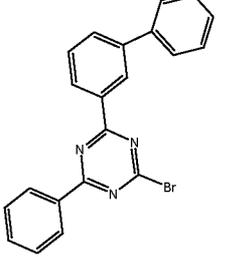
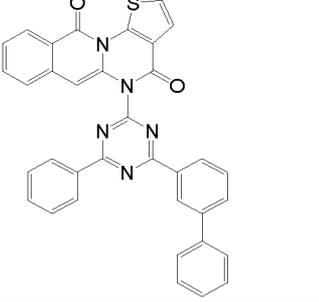
10

15

20

25

30

<p>7a</p>  <p>[40078-06-6]</p>	 <p>[1616881-55-0]</p>		<p>58%</p>
<p>8a</p>  <p>[40078-06-6]</p>	 <p>[1628067-38-8]</p>		<p>59%</p>
<p>9a</p>  <p>[1416052-96-4]</p>	 <p>[2305895-72-9]</p>		<p>66%</p>
<p>10a</p>  <p>[1381841-93-5]</p>	 <p>[2244026-83-1]</p>		<p>60%</p>
<p>11a</p>  <p>[1146577-90-3]</p>	 <p>[2021249-67-0]</p>		<p>48%</p>

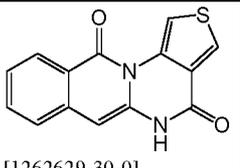
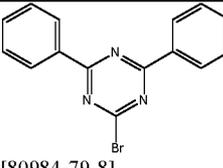
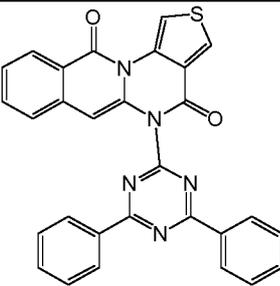
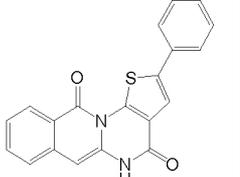
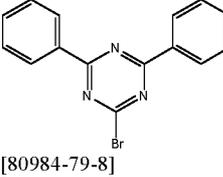
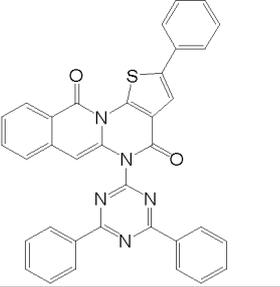
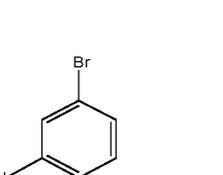
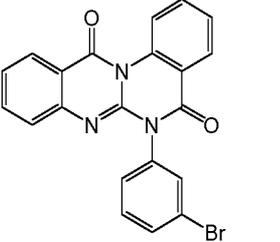
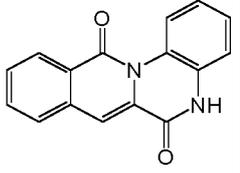
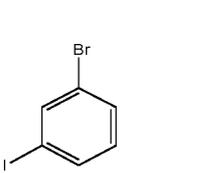
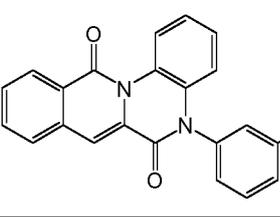
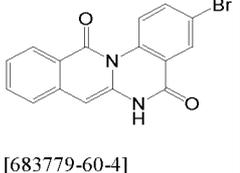
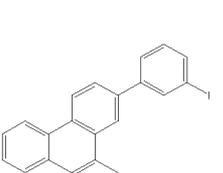
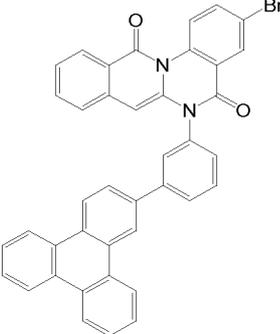
5

10

15

20

25

<p>12a</p>  <p>[1262629-30-0]</p>	 <p>[80984-79-8]</p>		<p>54%</p>
<p>13a</p>  <p>[380422-47-9]</p>	 <p>[80984-79-8]</p>		<p>50%</p>
<p>14a</p>  <p>[40078-06-6]</p>			<p>53%</p>
<p>15a</p>  <p>[330982-79-1]</p>			<p>55%</p>
<p>16a</p>  <p>[683779-60-4]</p>	 <p>[1395888-84-2]</p>		<p>60%</p>

30

5

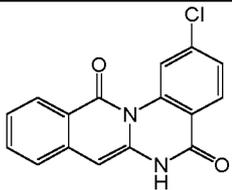
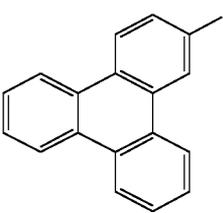
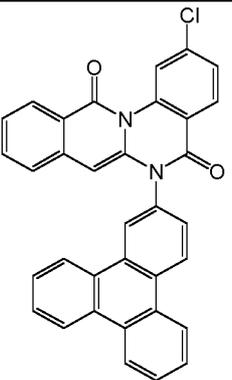
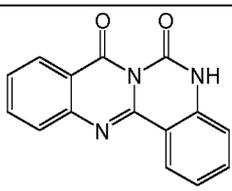
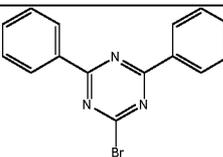
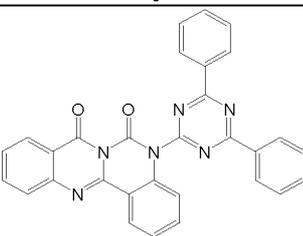
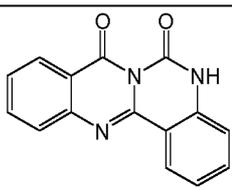
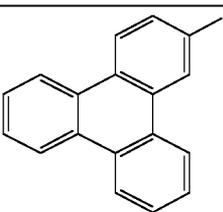
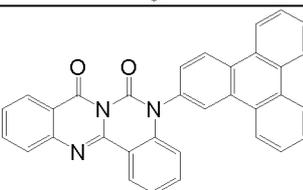
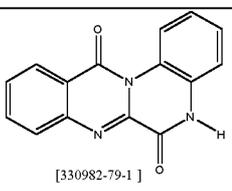
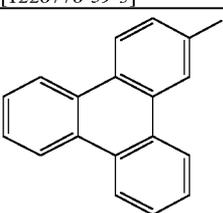
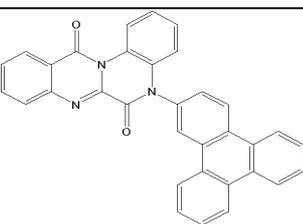
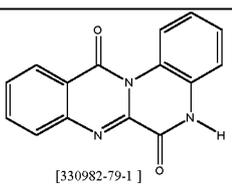
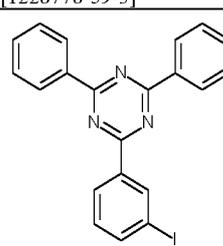
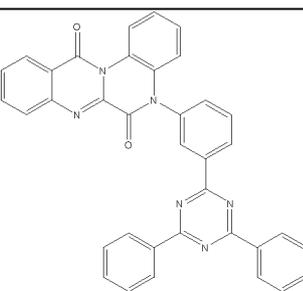
10

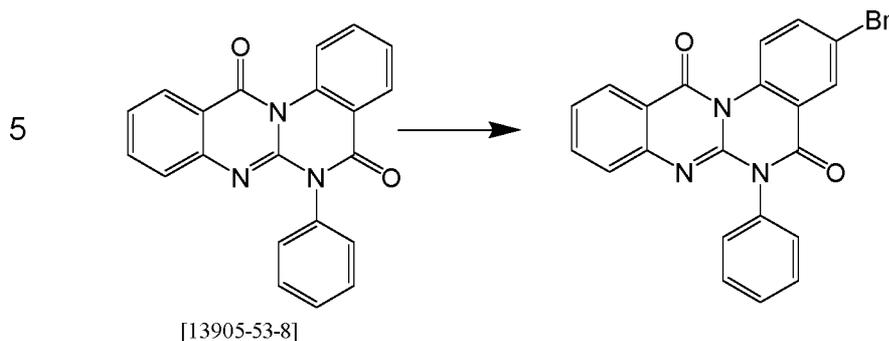
15

20

25

30

17a	 <p>[889767-89-9]</p>	 <p>[1228778-59-3]</p>		59%
18a	 <p>[19589-44-7]</p>	 <p>[80984-79-8]</p>		63%
19a	 <p>[19589-44-7]</p>	 <p>[1228778-59-3]</p>		60%
20a	 <p>[330982-79-1]</p>	 <p>[1228778-59-3]</p>		64%
21a	 <p>[330982-79-1]</p>	 <p>[476799-05-9]</p>		67%

b) 3-Brom-6-phenyl-5*H*-Quinazolino[3,2-*a*]quinazoline-5,12(6*H*)-dion

10

7,8 g (23 mmol) 6-Phenyl-5*H*-Quinazolino[3,2-*a*]quinazolin-5,12(6*H*)-dion werden in 150 mL DMF vorgelegt. Anschließend tropft man unter Lichtausschluss bei Raumtemperatur eine Lösung aus 4 g (22.5 mmol) NBS in 100 ml DMF zu, lässt auf Raumtemperatur kommen und rührt 4 h weiter bei dieser Temperatur. Anschließend wird die Mischung mit 150 mL Wasser versetzt und mit CH₂Cl₂ extrahiert. Die organische Phase wird über MgSO₄ getrocknet und die Lösungsmittel im Vakuum entfernt. Das Produkt wird mit Hexan heiß ausgerührt und abgesaugt. Ausbeute: 7.7g (18,4 mmol), 80 % d. Th., Reinheit nach ¹H-NMR ca. 97 %.

15

20

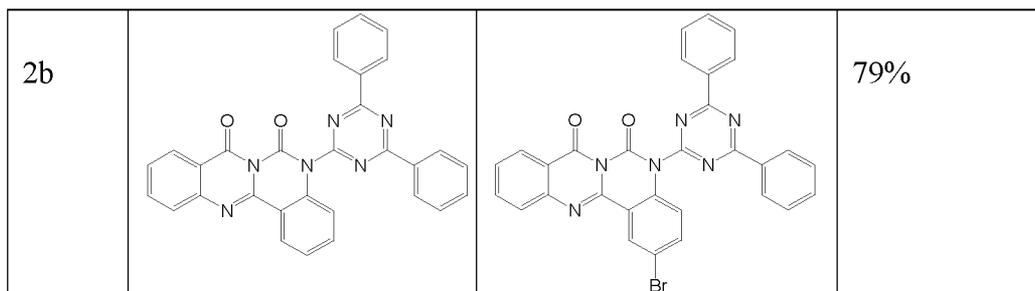
Analog werden folgende Verbindungen erhalten:

Bsp.	Edukt 1	Produkt	Ausbeute
1b			85%

25

30

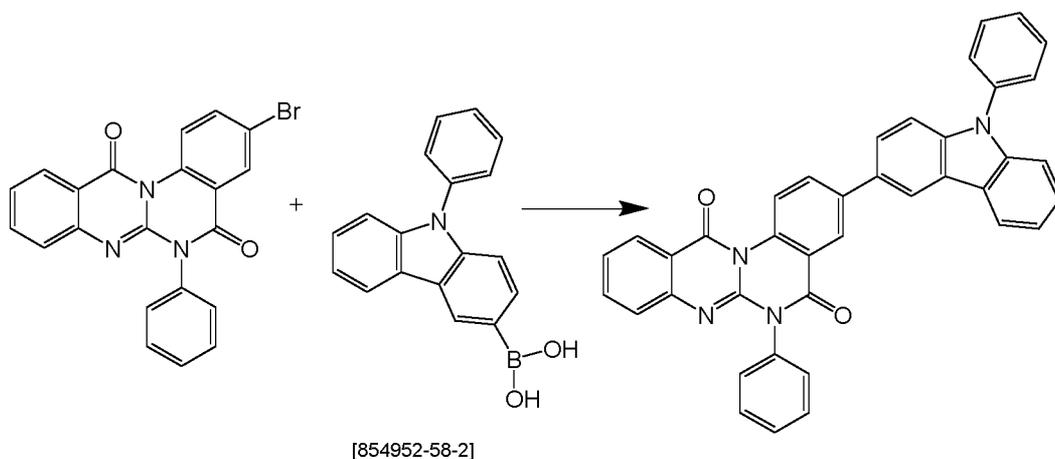
5



c) 6-Phenyl-3-(9-phenylcarbazol-3-yl)quinazolino[2,1-b]quinazoline-5,12-dione

10

15



20

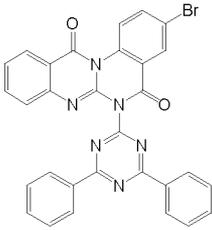
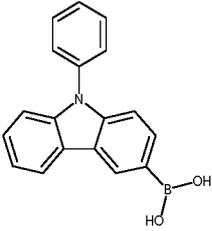
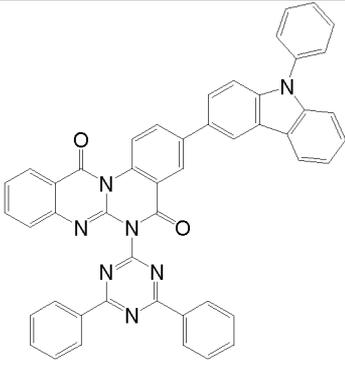
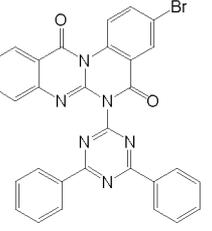
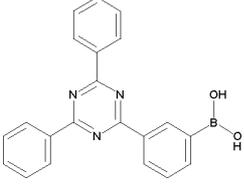
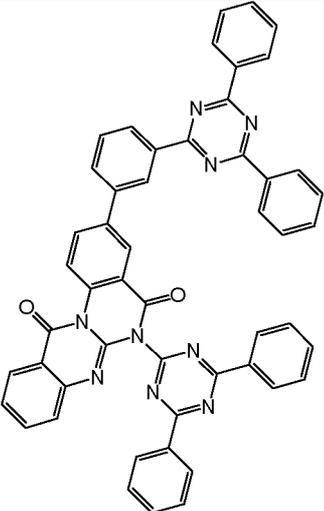
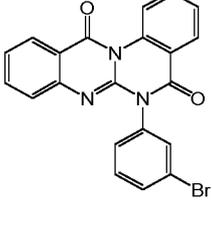
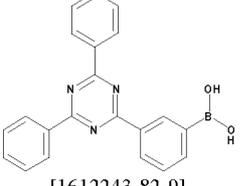
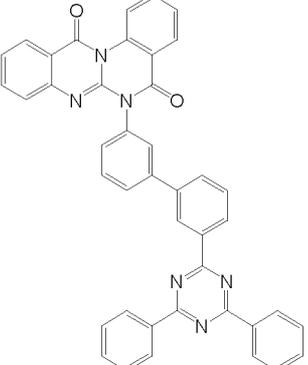
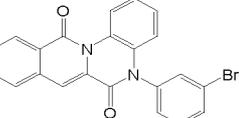
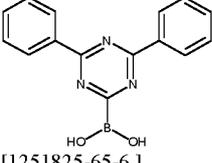
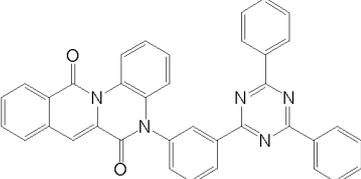
29,9 g (110.0 mmol) Triphenylboronsäure, 46 g (110.0 mmol) 3-Brom-6-phenyl-5H-Quinazolino[3,2-a]quinazoline-5,12(6H)-dion und 44.6 g (210.0 mmol) Trikaliumphosphat werden in 500 mL Toluol, 500 mL Dioxan und 500 mL Wasser suspendiert. Zu dieser Suspension werden 913 mg (3.0 mmol) Tri-*o*-tolylphosphin und dann 112 mg (0.5 mmol) Palladium(II)acetat gegeben, und die Reaktionsmischung wird 16 h unter Rückfluss erhitzt.

25

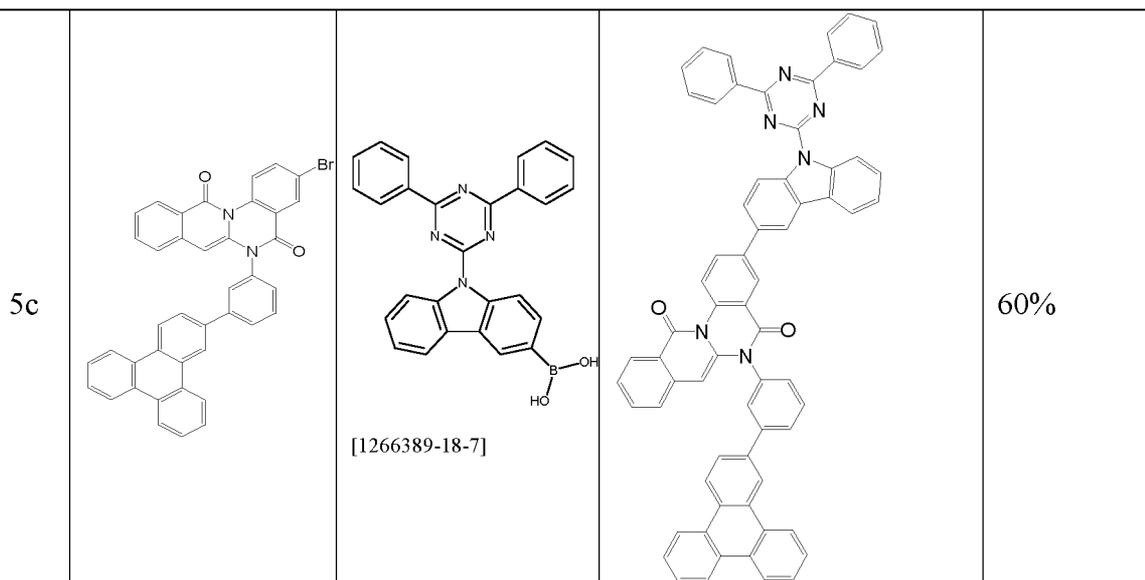
Nach Erkalten wird die organische Phase abgetrennt, über Kieselgel filtriert, dreimal mit je 200 mL Wasser gewaschen und anschließend zur Trockene eingengt. Der Rückstand wird aus Toluol und aus Dichlormethan / *iso*-Propanol umkristallisiert und abschließend im Hochvakuum sublimiert, Reinheit beträgt 99.9 %. Die Ausbeute beträgt 54 g (93 mmol), entsprechend 85 % der Theorie.

30

Analog werden die folgenden Verbindungen erhalten:

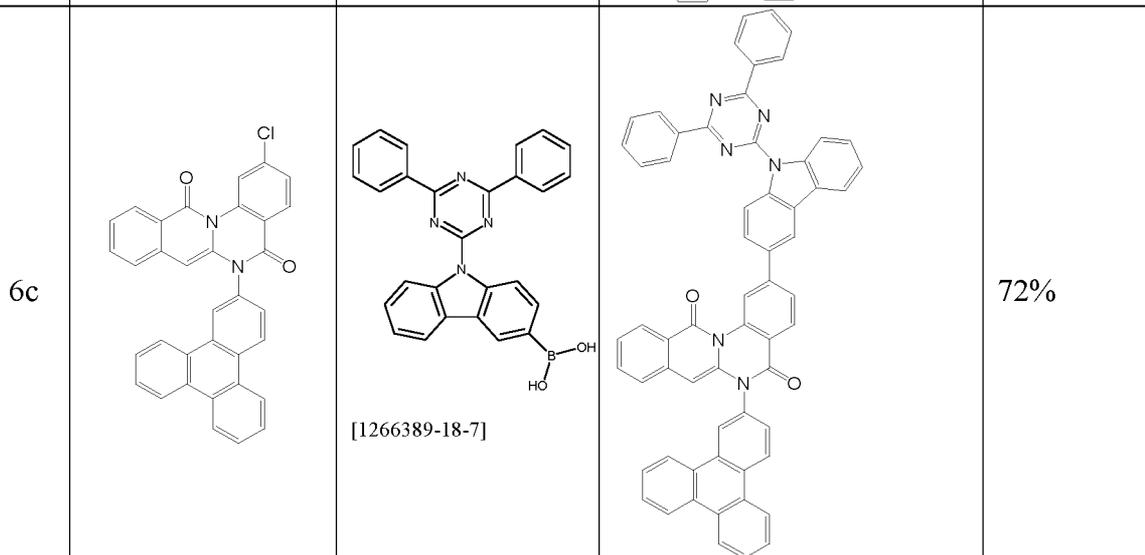
	Edukt 1	Edukt 2	Produkt	Ausbeute
5		 [854952-58-2]		72%
10		 [1612243-82-9]		64%
15		 [1612243-82-9]		67%
20		 [1251825-65-6]		80%

5



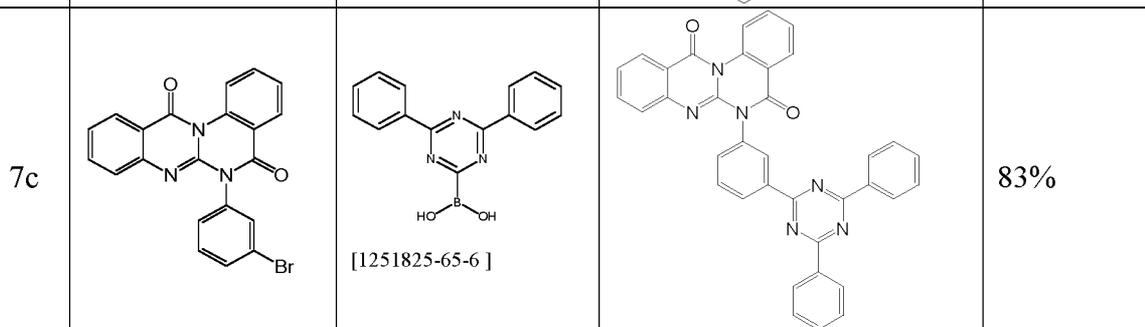
10

15



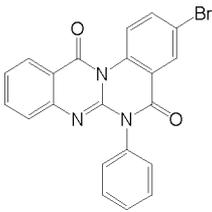
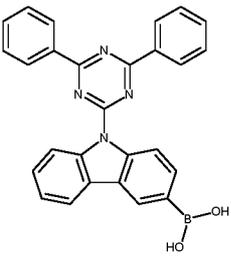
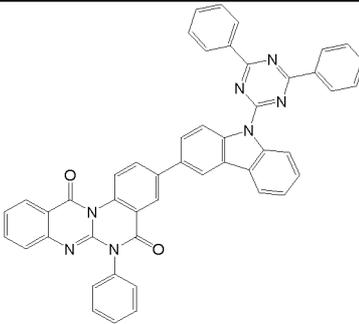
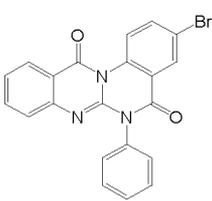
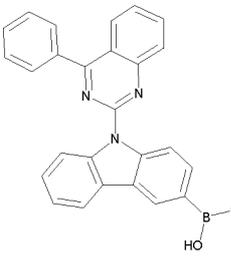
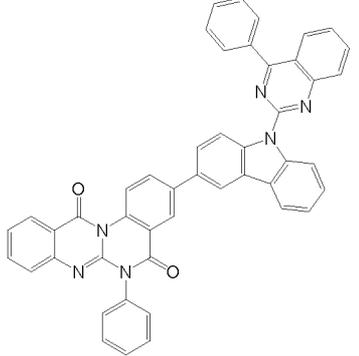
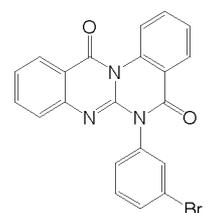
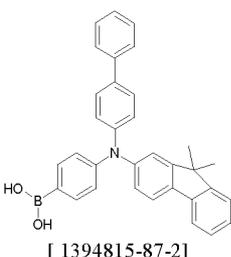
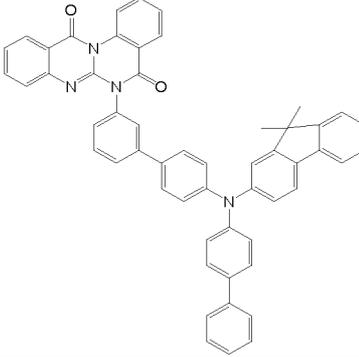
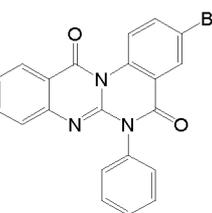
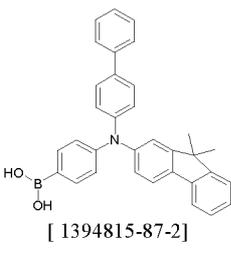
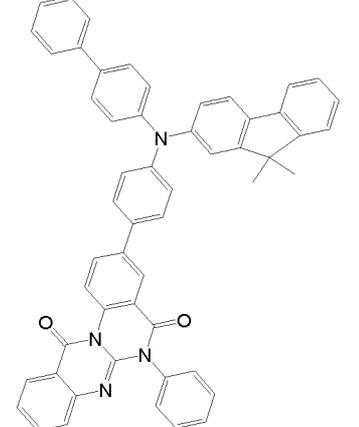
20

25

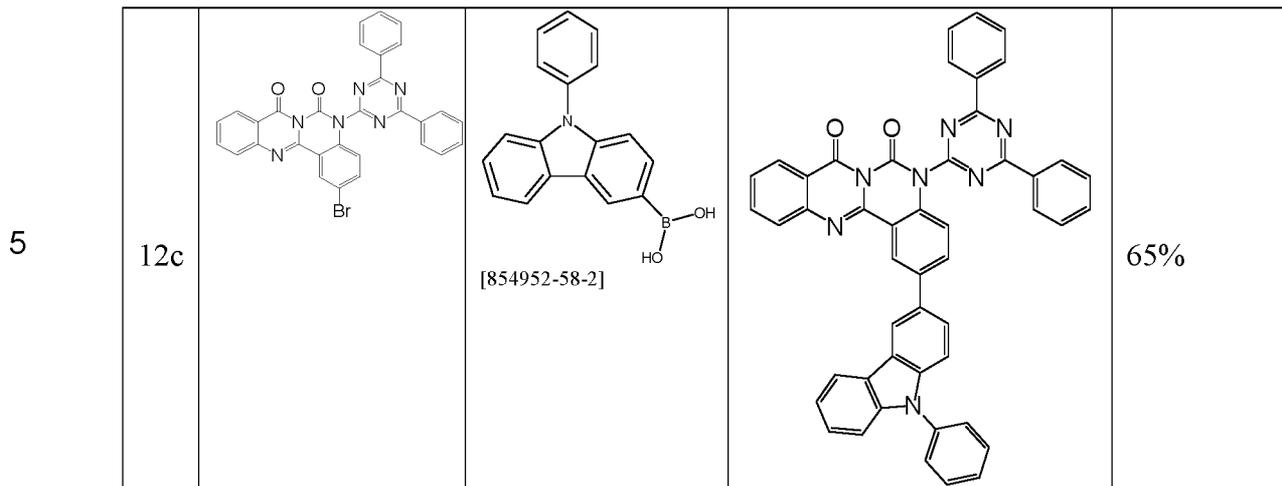


30

5

<p>8c</p> 	 <p>[1266389-18-7]</p>		<p>75%</p>
<p>9c</p> 	 <p>[1642121-58-1]</p>		<p>71%</p>
<p>10c</p> 	 <p>[1394815-87-2]</p>		<p>66%</p>
<p>11c</p> 	 <p>[1394815-87-2]</p>		<p>69%</p>

30



10

Herstellung der OLEDs

In den folgenden Beispielen E1 bis E9 (siehe Tabelle 1) wird der Einsatz der erfindungsgemäßen Materialien in OLEDs vorgestellt.

15

Vorbehandlung für die Beispiele E1 bis E9:

Glasplättchen, die mit strukturiertem ITO (Indium Zinn Oxid) der Dicke 50 nm beschichtet sind, werden vor der Beschichtung mit einem Sauerstoffplasma, gefolgt von einem Argonplasma, behandelt. Diese mit Plasma behandelten Glasplättchen bilden die Substrate, auf welche die OLEDs aufgebracht werden.

20

Die OLEDs haben prinzipiell folgenden Schichtaufbau: Substrat / optionale interlayer (IL) / Lochinjektionsschicht (HIL) / Lochtransportschicht (HTL) / Elektronenblockierschicht (EBL) / Emissionsschicht (EML) / optionale Lochblockierschicht (HBL) / Elektronentransportschicht (ETL) / optionale Elektroneninjektionsschicht (EIL) und abschließend eine Kathode. Die Kathode wird durch eine 100 nm dicke Aluminiumschicht gebildet. Der genaue Aufbau der OLEDs ist Tabelle 1 zu entnehmen. Die zur Herstellung der OLEDs benötigten Materialien sind in Tabelle 2 gezeigt. Die Daten der OLEDs sind in Tabelle 3 und 4 aufgelistet.

25

30

Alle Materialien werden in einer Vakuumkammer thermisch aufgedampft. Dabei besteht die Emissionsschicht immer aus mindestens einem Matrixmaterial (Hostmaterial, Wirtsmaterial) und einem emittierendem Dotierstoff

(Dotand, Emitter), der dem Matrixmaterial bzw. den Matrixmaterialien durch Coverdampfung in einem bestimmten Volumenanteil beigemischt wird. Eine Angabe wie IC1:EG1:TEG1 (45%:45%:10%) bedeutet hierbei, dass das Material IC1 in einem Volumenanteil von 45%, EG1 in einem Anteil von 45% und TEG1 in einem Anteil von 10% in der Schicht vorliegt. Analog kann auch die Elektronentransportschicht aus einer Mischung von zwei Materialien bestehen.

Die OLEDs werden standardmäßig charakterisiert. Hierfür werden die Elektrolumineszenzspektren, die Stromeffizienz (SE, gemessen in cd/A) und die externe Quanteneffizienz (EQE, gemessen in %) in Abhängigkeit der Leuchtdichte, berechnet aus Strom-Spannungs-Leuchtdichte-Kennlinien unter Annahme einer lambertschen Abstrahlcharakteristik bestimmt. Die Elektrolumineszenzspektren werden bei einer Leuchtdichte von 1000 cd/m² bestimmt und daraus die CIE 1931 x und y Farbkordinaten berechnet. Die so erhaltenen Ergebnisse sind Tabelle 3 zu entnehmen.

Verwendung der erfindungsgemäßen Materialien in OLEDs

Die erfindungsgemäßen Verbindungen EG1 bis EG7 können in den Beispielen E1 bis E8 als Matrixmaterial in der Emissionsschicht von phosphoreszierenden grünen OLEDs eingesetzt werden.

In Tabelle 4 sind die Ergebnisse einiger Beispiele zusammengefasst. Bei Verwendung der erfindungsgemäßen Verbindung EG7 als Elektronentransportmaterial treten geringere Spannung und gute Effizienz auf.

Tabelle 1: Aufbau der OLEDs

Bsp	IL	HIL Dicke	HTL Dicke	EBL Dicke	EML Dicke	HBL Dicke	ETL Dicke	EIL Dicke
E1		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG1:TEG1 (88%:12%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E2		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG2:TEG1 (88%:12%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E3		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG1:IC1:TEG1 (49%:44%:7%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm

5

E4		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG3:IC2:TEG1 (44%:44%:12%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E5		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG4:IC3:TEG1 (49%:44%:7%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E6		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG5:IC4:TEG1 (49%:44%:7%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E7		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG6:IC1:TEG1 (49%:44%:7%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E8		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG7:IC1:TEG1 (49%:44%:7%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E9	SpA1 70nm		HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	EG7:LiQ (50%:50%) 40nm	

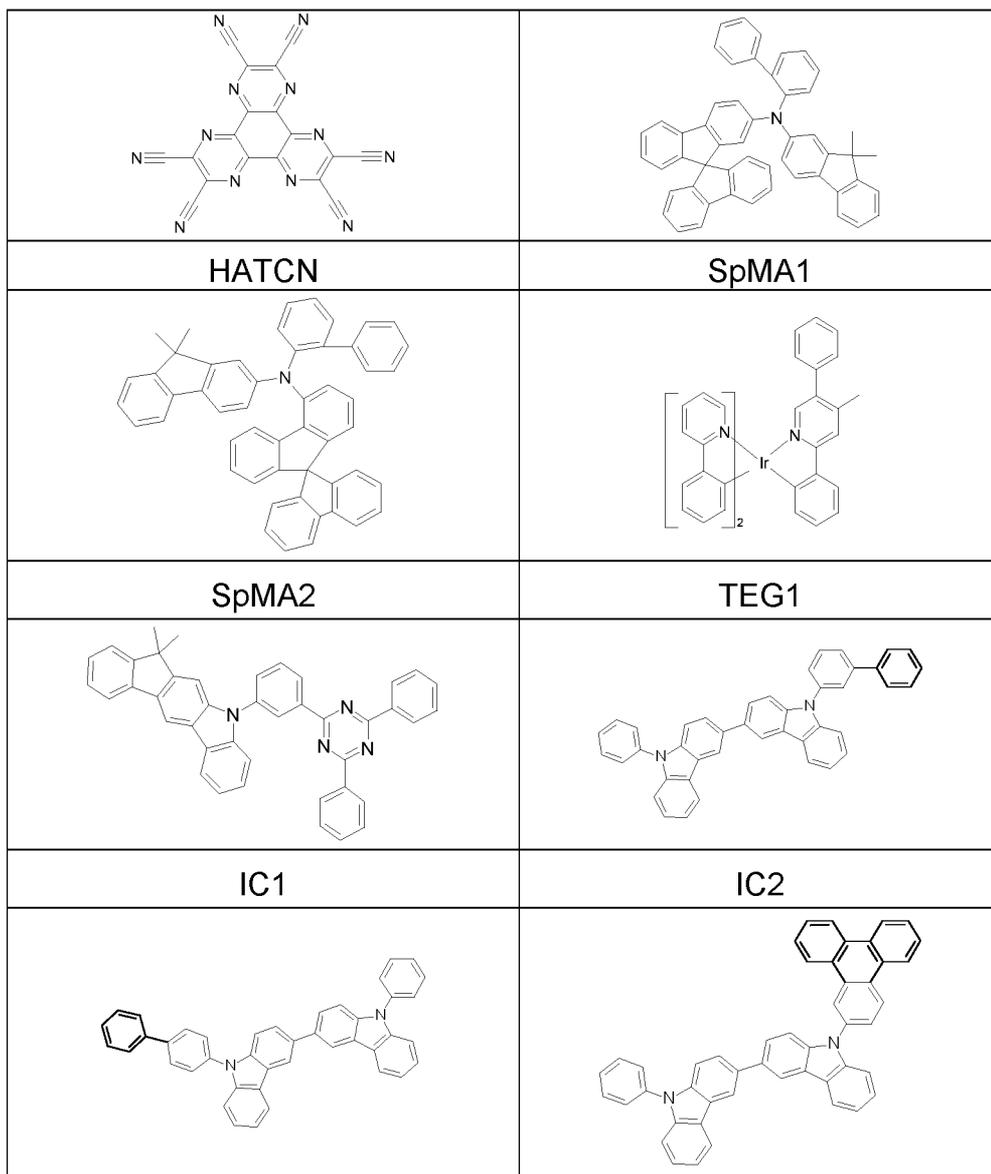
10

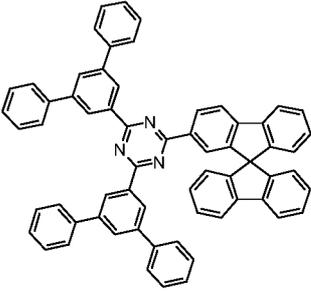
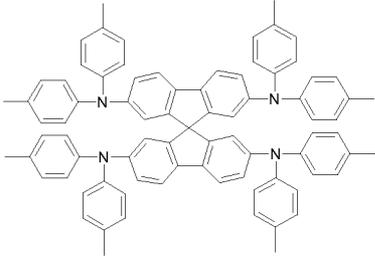
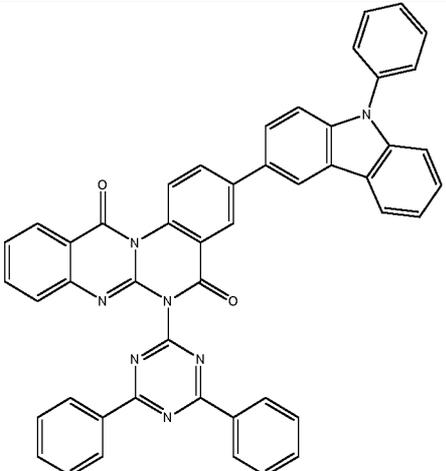
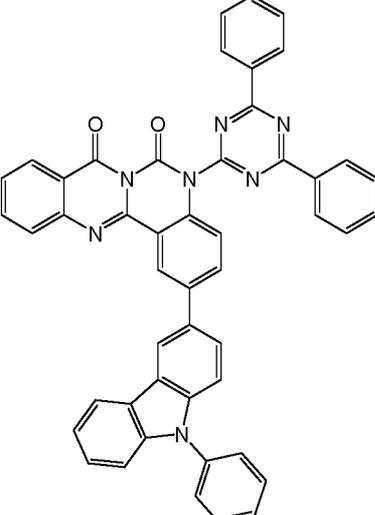
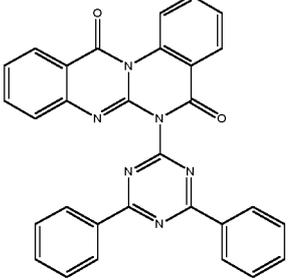
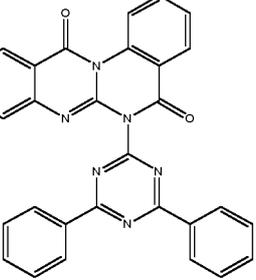
15

20

25

30



	<p style="text-align: center;">IC3</p>		<p style="text-align: center;">IC4</p>
<p>5</p>		<p style="text-align: center;">ST2</p>	<p style="text-align: center;">LiQ</p>
<p>10</p>		<p style="text-align: center;">SpA1</p>	<p style="text-align: center;">EG1 (1C)</p>
<p>15</p>		<p style="text-align: center;">EG2 (6c)</p>	<p style="text-align: center;">EG3 (1a)</p>
<p>20</p>		<p>25</p>	
<p>30</p>			

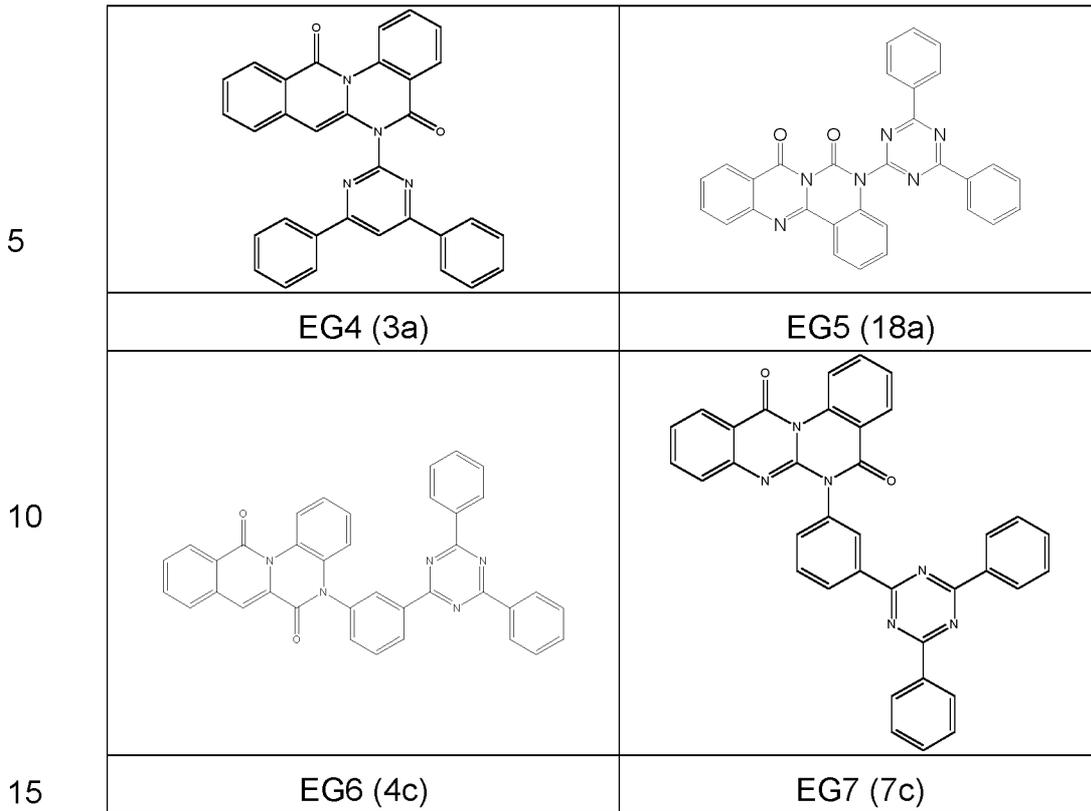


Tabelle 3: Daten der OLEDs

Bsp.	U1000 (V)	SE1000 (cd/A)	EQE 1000 (%)	CIE x/y bei 1000 cd/m ²
E1	3.6	71	15	0.35/0.61
E2	3.8	68	17	0.34/0.62
E3	3.2	67	17	0.35/0.61
E4	3.1	72	15,5	0.35/0.60
E5	3.1	68	16	0.34/0.62
E6	3.2	67	17	0.35/0.61
E7	3.1	72	18	0.35/0.62
E8	3.1	68	18	0.34/0.61

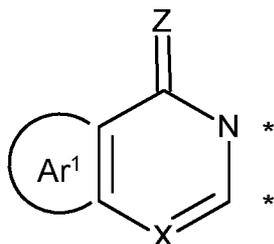
Tabelle 4: Daten der OLEDs

Bsp	U1000 (V)	CE1000 (cd/A)	LE1000 (lm/W)	EQE 1000 (%)	CIE x/y at 1000 cd/m ²
E9	3.7	62	51	17	0.31/0.64

Ansprüche

1. Verbindung einer Formel (I)

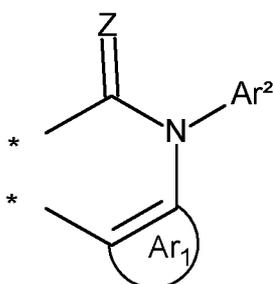
5



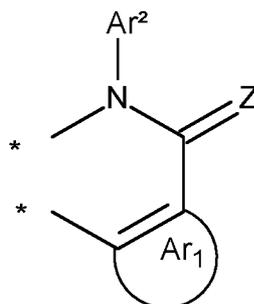
10

wobei an den mit * markierten Bindungspunkten am Ring eine Einheit gemäß Formel (II) oder Formel (III) jeweils über die mit * markierten Bindungen gebunden ist

15



Formel (II)



Formel (III),

20

und wobei für die auftretenden Variablen gilt:

X ist gleich N oder CAr³;

25

Z ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus O oder S;

Ar¹ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus

30

ankondensierten aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und ankondensierten heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen

Ringatomen; wobei die aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^1 substituiert sind;

5 Ar^2 ist gewählt aus verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei die genannten
10 Gruppen jeweils mit einem oder mehreren Resten R^2 substituiert sind;

Ar^3 ist gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^3$, CN, $Si(R^3)_3$, $N(R^3)_2$, $P(=O)(R^3)_2$, OR^3 , $S(=O)R^3$, $S(=O)_2R^3$, geradkettigen Alkyl- oder
15 Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei die
20 genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^3 substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch $-R^3C=CR^3-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^3)_2$, $C=O$,
25 $C=NR^3$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^3-$, NR^3 , $P(=O)(R^3)$, $-O-$, $-S-$, SO oder SO_2 ersetzt sein können;

R^1 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-
30 Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-

Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R¹ miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkinylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R⁴ substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH₂-Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkinylgruppen durch -R⁴C=CR⁴-, -C≡C-, Si(R⁴)₂, C=O, C=NR⁴, -C(=O)O-, -C(=O)NR⁴-, NR⁴, P(=O)(R⁴), -O-, -S-, SO oder SO₂ ersetzt sein können;

R² ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R⁴, CN, Si(R⁴)₃, N(R⁴)₂, P(=O)(R⁴)₂, OR⁴, S(=O)R⁴, S(=O)₂R⁴, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkinylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R² miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkinylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R⁴ substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH₂-Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkinylgruppen durch -R⁴C=CR⁴-, -C≡C-, Si(R⁴)₂, C=O, C=NR⁴, -C(=O)O-, -C(=O)NR⁴-, NR⁴, P(=O)(R⁴), -O-, -S-, SO oder SO₂ ersetzt sein können;

R³ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R⁴, CN, Si(R⁴)₃, N(R⁴)₂, P(=O)(R⁴)₂, OR⁴, S(=O)R⁴, S(=O)₂R⁴, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-

5 Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R³ miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R⁴ substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH₂-Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch -R⁴C=CR⁴-, -C≡C-, Si(R⁴)₂, C=O, C=NR⁴, -C(=O)O-, -C(=O)NR⁴-, NR⁴, P(=O)(R⁴), -O-, -S-, SO oder SO₂ ersetzt sein können;

10

15 R⁴ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R⁵, CN, Si(R⁵)₃, N(R⁵)₂, P(=O)(R⁵)₂, OR⁵, S(=O)R⁵, S(=O)₂R⁵, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R⁴ miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R⁵ substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH₂-Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch -R⁵C=CR⁵-, -C≡C-, Si(R⁵)₂, C=O, C=NR⁵, -C(=O)O-, -C(=O)NR⁵-, NR⁵, P(=O)(R⁵), -O-, -S-, SO oder SO₂ ersetzt sein können;

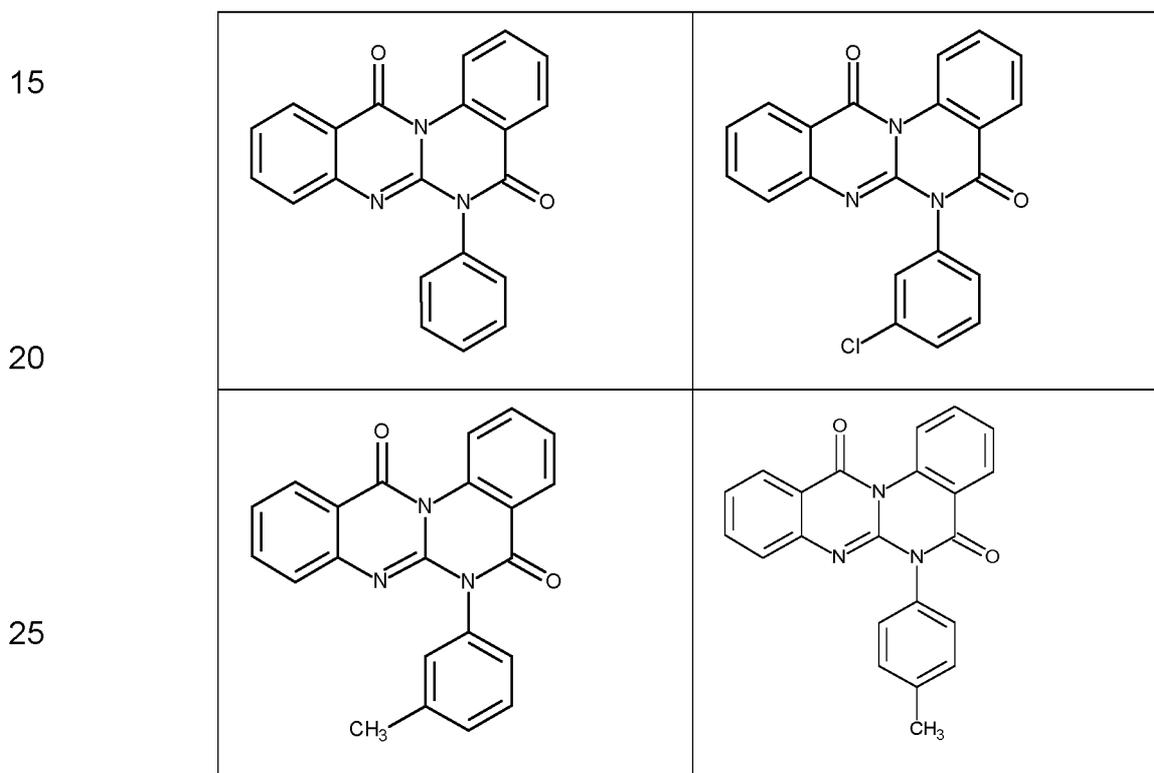
20

25

30

R⁵ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, CN, Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkinygruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R⁵ miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; und wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkinygruppen, aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme mit einem oder mehreren Resten gewählt aus F und CN substituiert sein können;

wobei die folgenden Verbindungen ausgeschlossen sind:



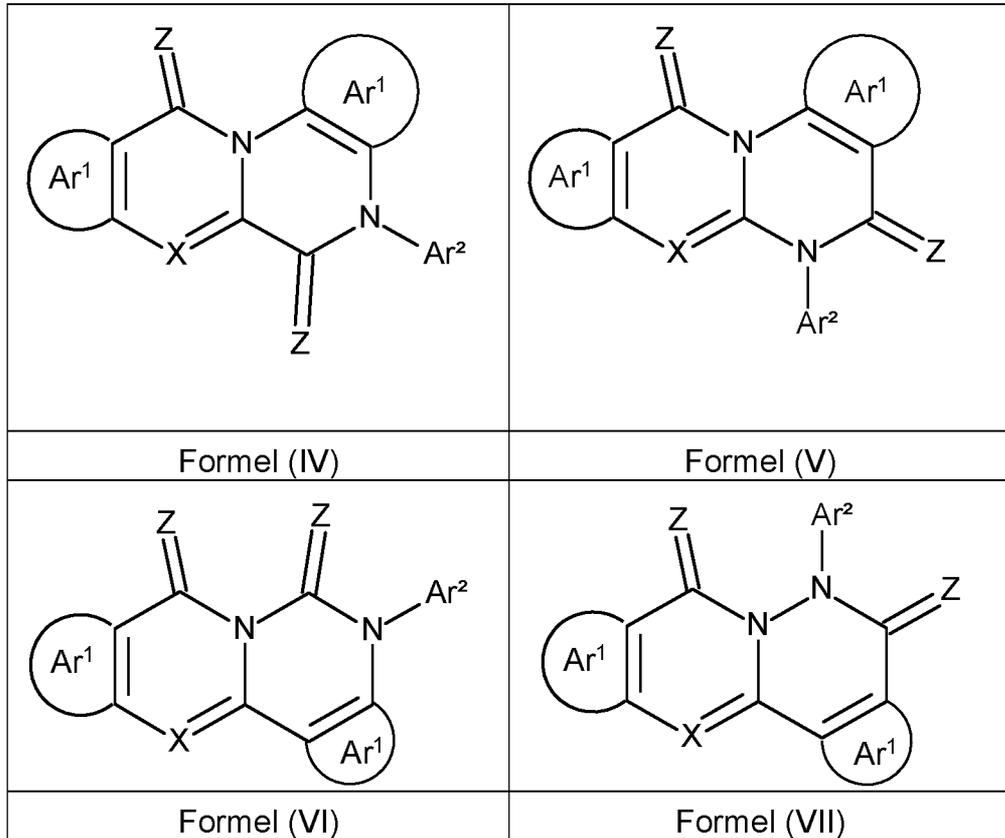
2. Verbindung gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass Z gleich O ist.

30

3. Verbindung gemäß Anspruch 1 oder 2, dadurch gekennzeichnet, dass X gleich N ist.
- 5 4. Verbindung gemäß einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, dass Ar¹ bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt ist aus ankondensierten Gruppen gewählt aus Benzol, Biphenyl, Pyridin, Pyrimidin, Pyridazin, Naphthalin, Chinolin, Chinazolin, Phenanthren, Anthracen, Fluoren, Carbazol, Furan, Dibenzofuran, Thiophen und Dibenzothiophen, bevorzugt Benzol, 10 Pyridin, Furan und Thiophen, besonders bevorzugt Benzol, die jeweils mit Resten R¹ substituiert sind.
- 15 5. Verbindung gemäß einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 4, dadurch gekennzeichnet, dass Ar² gewählt ist aus Benzol, Pyridin, Pyrimidin, Pyridazin, Naphthalin, Chinolin, Chinazolin, Phenanthren, Anthracen, Fluoren, Carbazol, Dibenzofuran, Dibenzothiophen, Biphenyl, Terphenyl, Quaterphenyl, Fluoren, Spirobifluoren, Dihydrophenanthren, Dihydropyren, Tetrahydropyren, Indenofluoren, Truxen, Isotruxen, Spirotruxen, Spiroisotruxen, Indenocarbazol, die 20 jeweils mit Resten R² substituiert sind, oder aus Kombinationen dieser Gruppen, bevorzugt gewählt ist aus Phenyl, Pyridin, Naphthalin, Triphenylen, Carbazol, Pyrimidin, Triazin, Triazinyl-Phenylen und Biphenyl, die jeweils mit Resten R² substituiert sind.
- 25 6. Verbindung gemäß einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 5, dadurch gekennzeichnet, dass Ar³ bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt ist aus aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, die mit Resten R³ substituiert sind, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen 30 Ringatomen, die mit Resten R³ substituiert sind.

7. Verbindung gemäß einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 6, dadurch gekennzeichnet, dass die Verbindung einer der Formeln (IV) und (VII) entspricht,

5



10

15

20

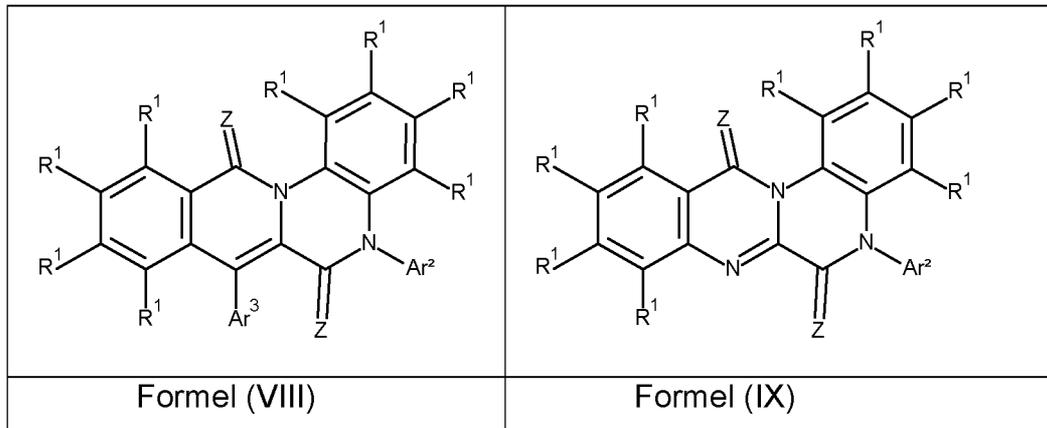
wobei die Variablen definiert sind wie in einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 6.

25

8. Verbindung gemäß einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 7, dadurch gekennzeichnet, dass die Verbindung einer der Formeln (VIII) und (IX) entspricht

30

5

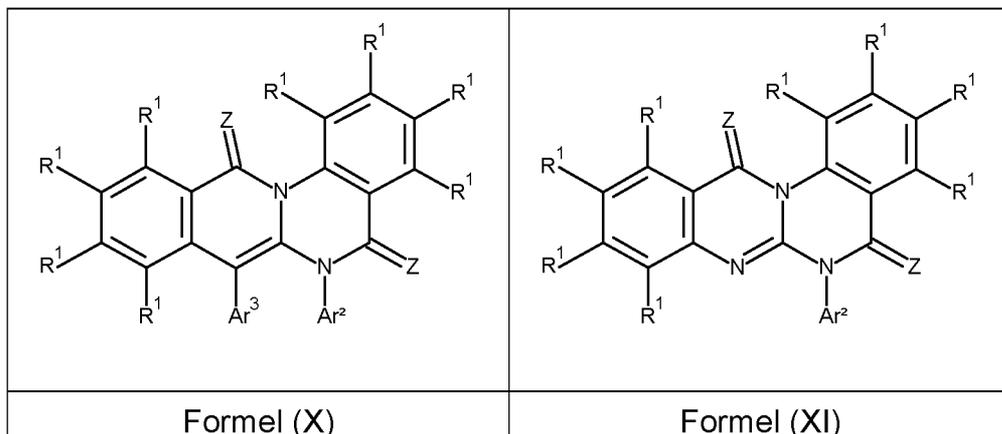


10

wobei die Variablen definiert sind wie in einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 7.

9. Verbindung gemäß einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 8, dadurch gekennzeichnet, dass die Verbindung einer der Formeln (X) und (XI) entspricht

15



20

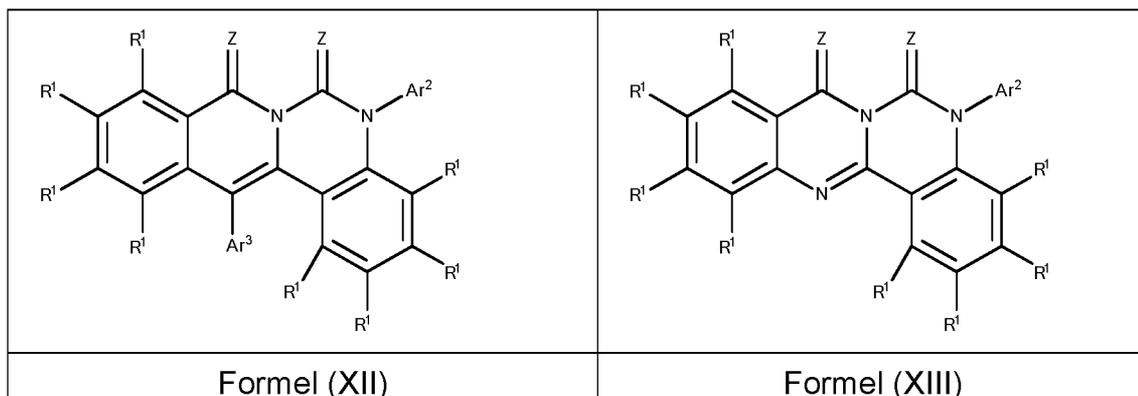
25

wobei die Variablen definiert sind wie in einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 8.

10. Verbindung gemäß einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 9, dadurch gekennzeichnet, dass die Verbindung einer der Formeln (XII) und (XIII) entspricht

30

5



10

wobei die Variablen definiert sind wie in einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 9.

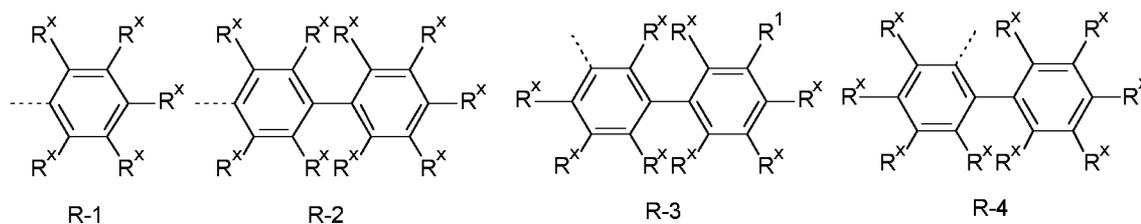
15

11. Verbindung gemäß einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 10, dadurch gekennzeichnet, dass mindestens eine, bevorzugt zwei Gruppen gewählt aus R^1 , Ar^2 und Ar^3 gewählt sind aus aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen enthält, die mit Resten R^4 bzw. R^2 bzw. R^3 substituiert sind, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen, die mit Resten R^4 bzw. R^2 bzw. R^3 substituiert sind.

20

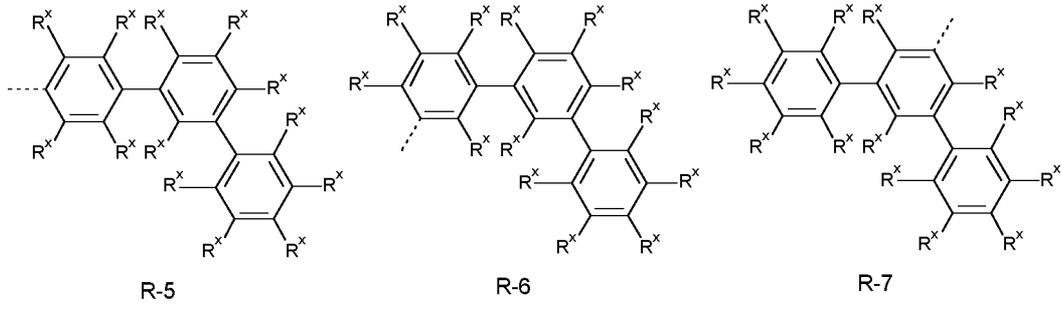
12. Verbindung gemäß Anspruch 11, dadurch gekennzeichnet, dass die aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme bevorzugt gewählt sind aus den Gruppen R-1 bis R-84:

25

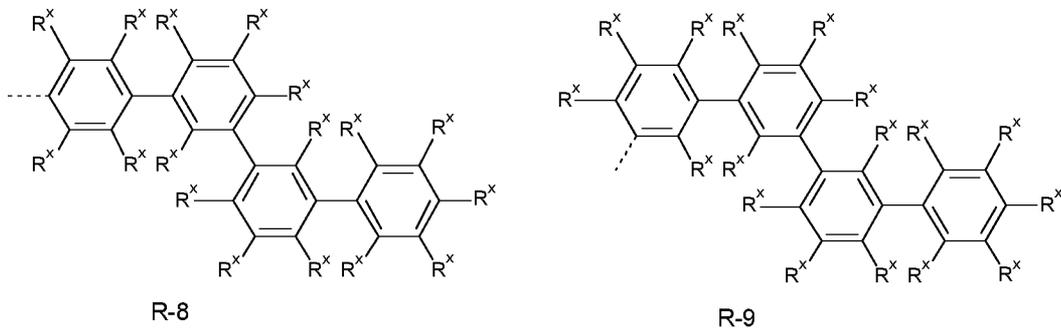


30

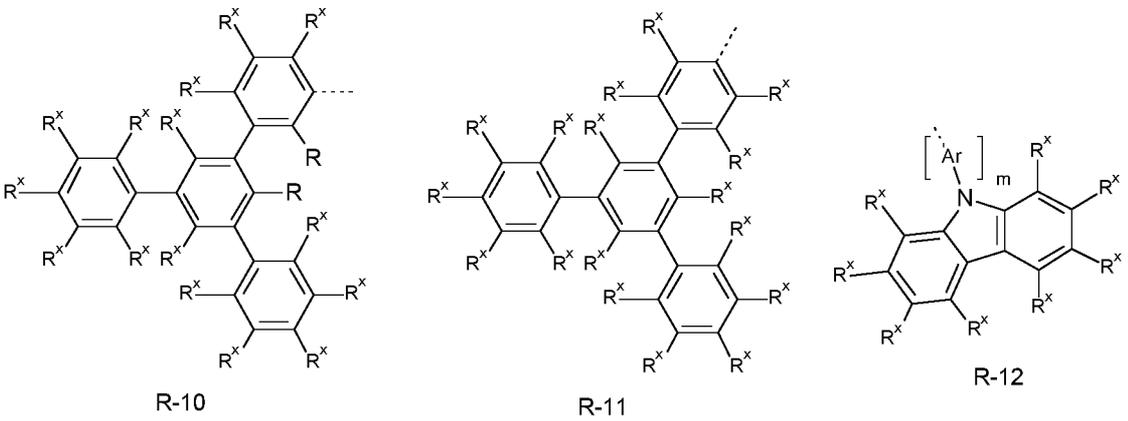
5



10

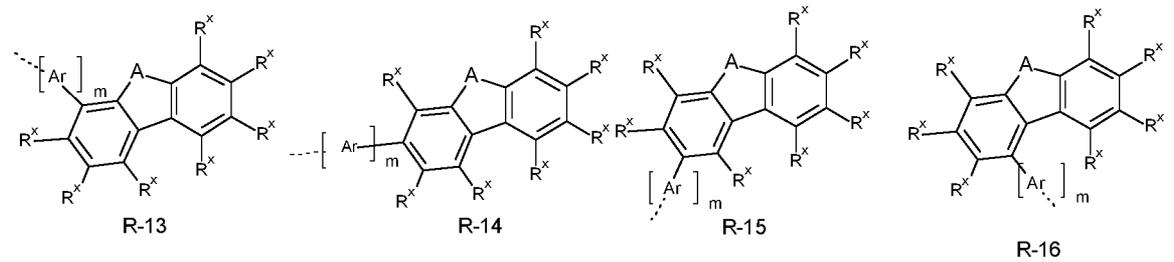


15



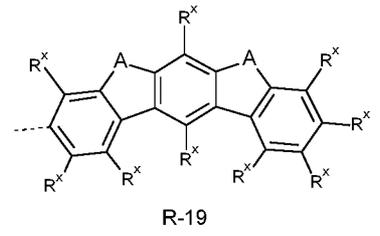
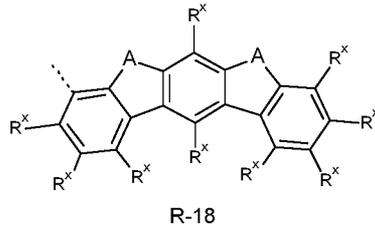
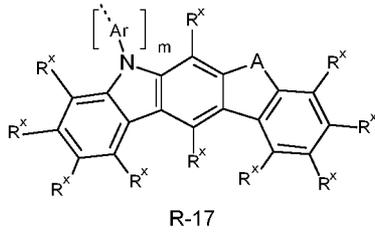
20

25

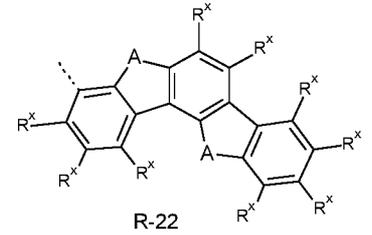
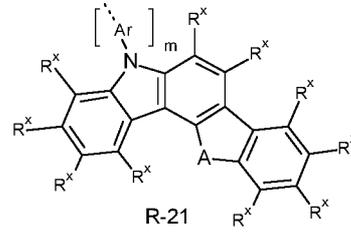
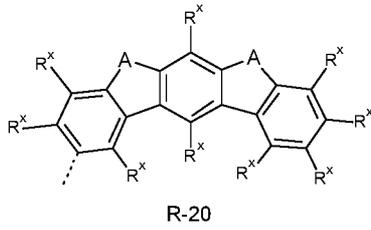


30

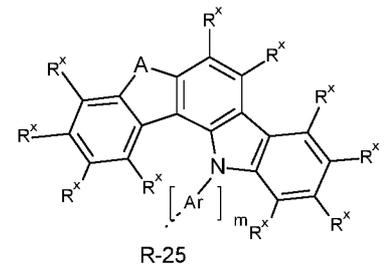
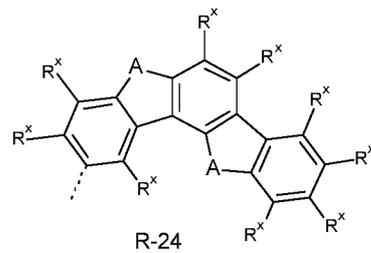
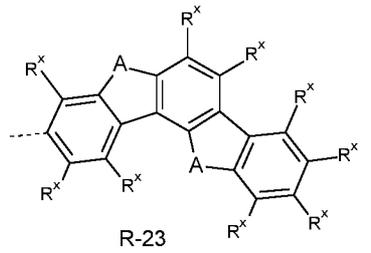
5



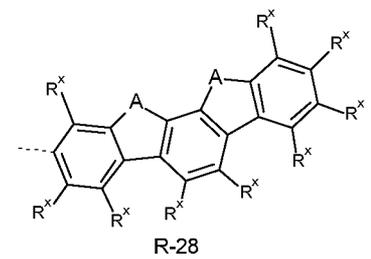
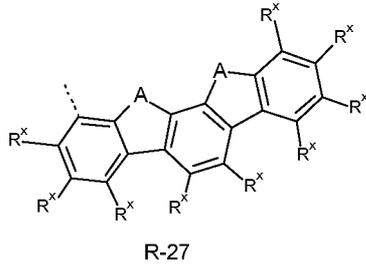
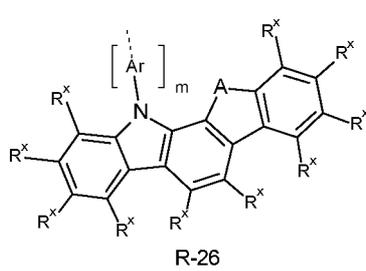
10



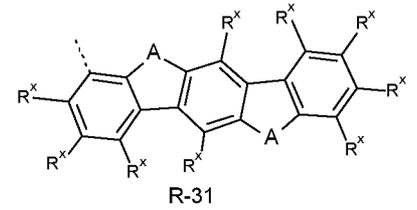
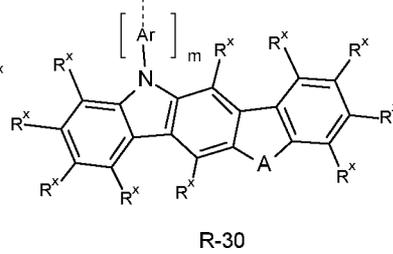
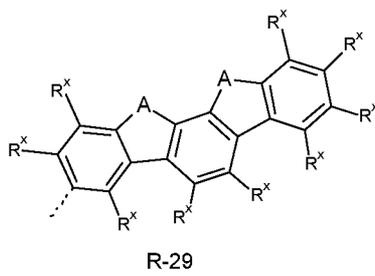
15



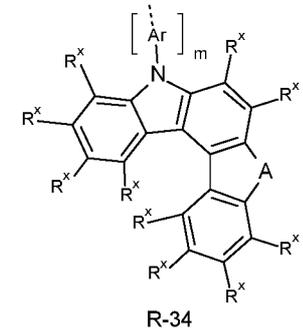
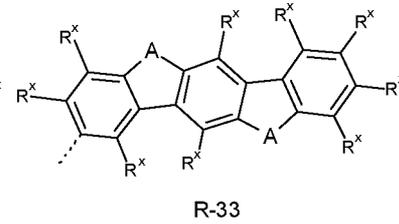
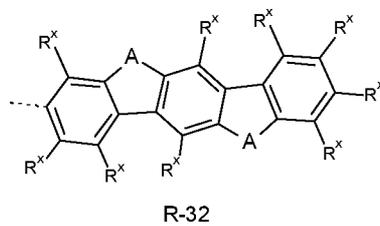
20



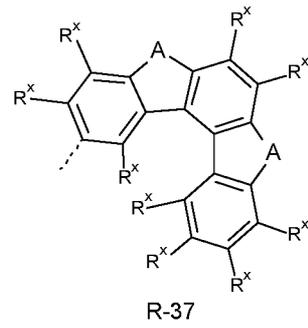
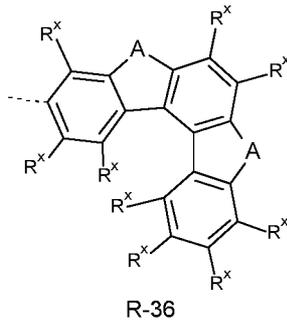
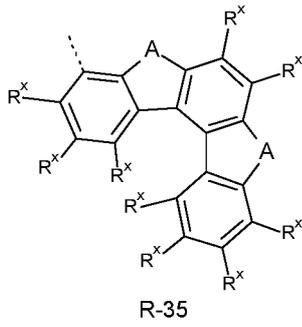
25



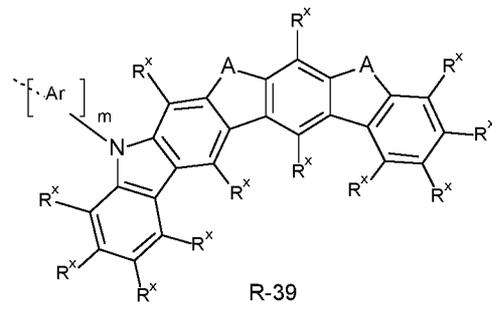
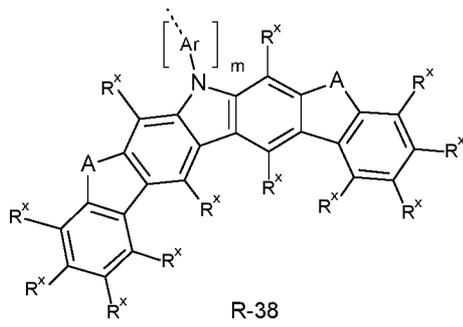
30



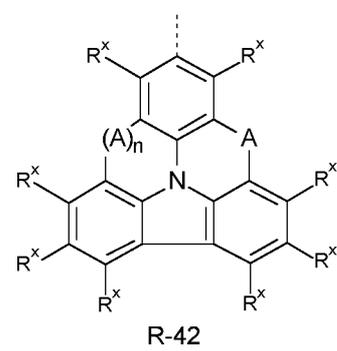
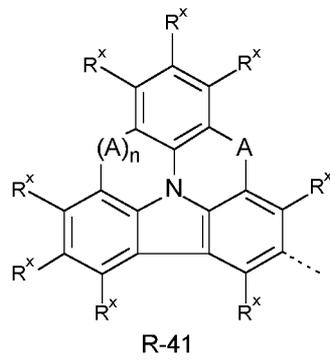
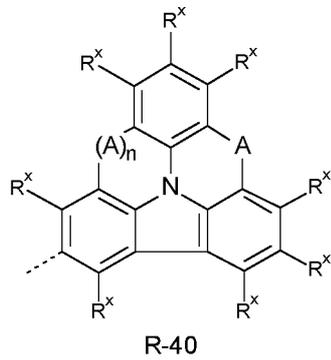
5



10



15

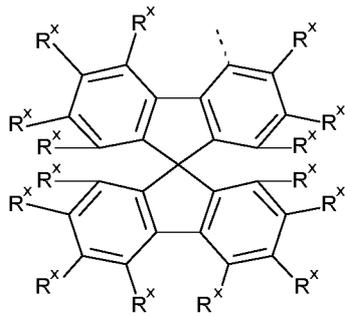


20

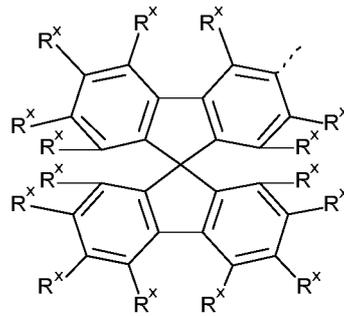
25

30

5

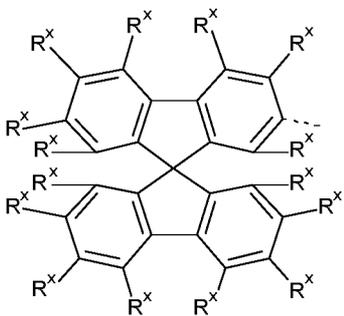


R-43

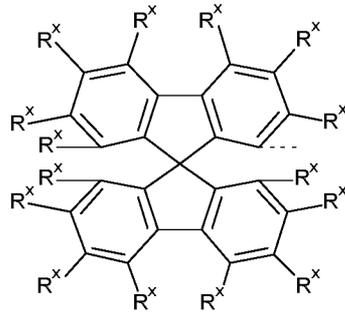


R-44

10

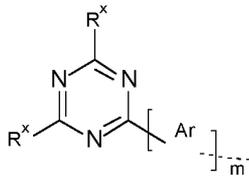


R-45

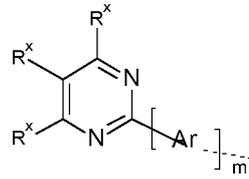


R-46

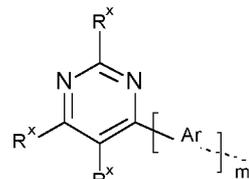
15



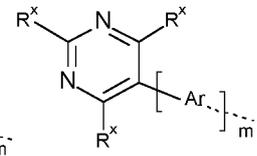
R-47



R-48

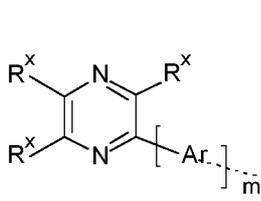


R-49

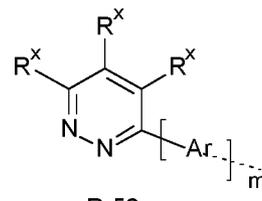


R-50

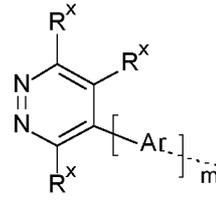
20



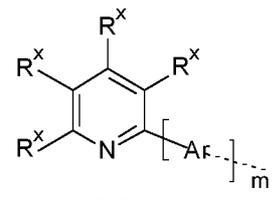
R-51



R-52



R-53

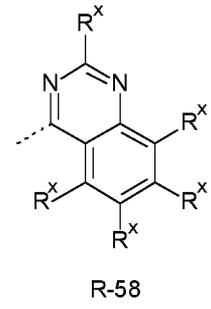
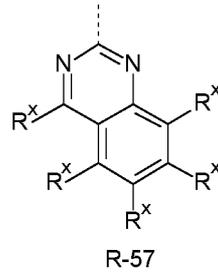
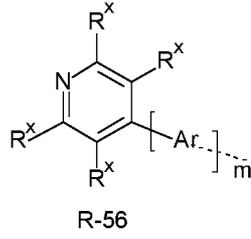
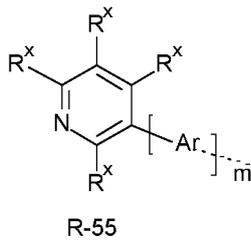


R-54

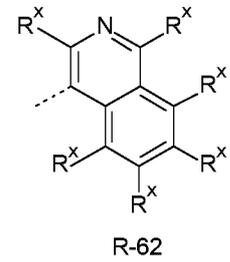
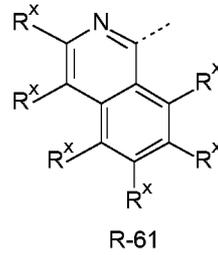
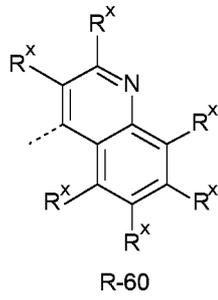
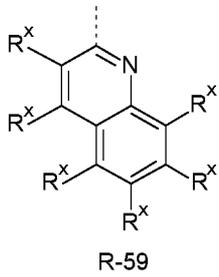
25

30

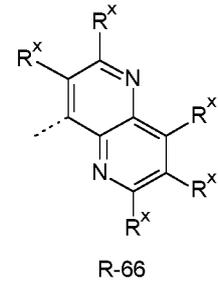
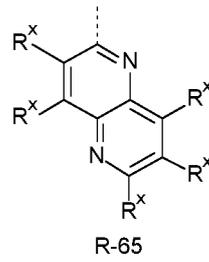
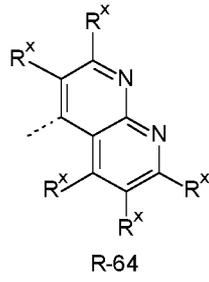
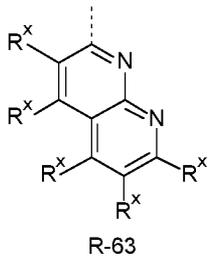
5



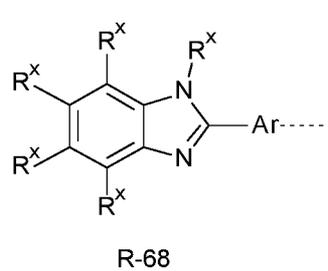
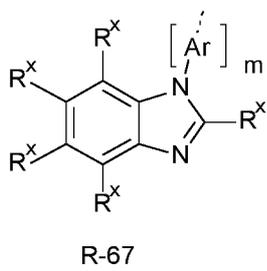
10



15

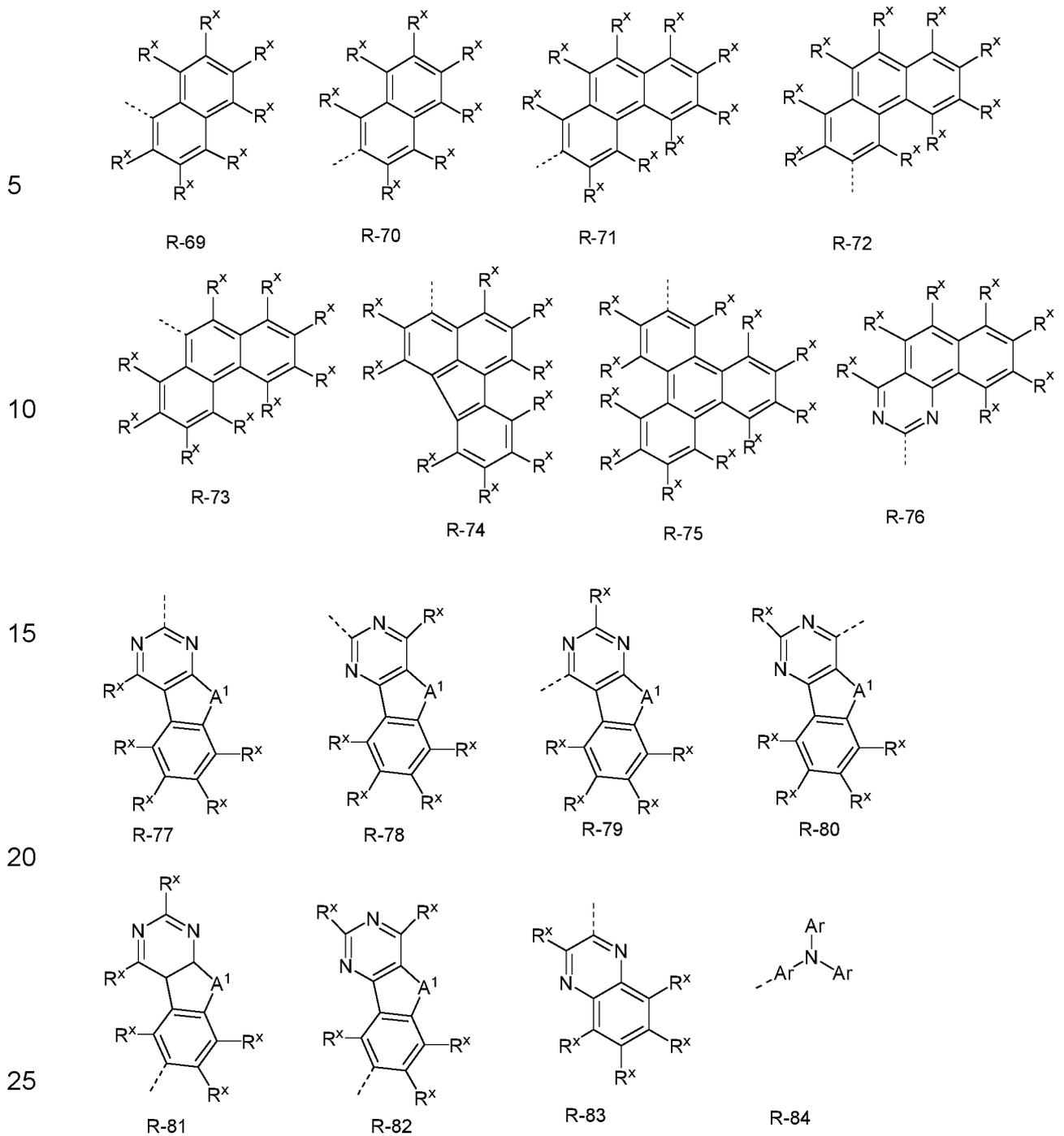


20



25

30



wobei die gestrichelte Bindung die Bindung an ein Kohlenstoffatom
des Grundgerüsts in Formel (I) darstellt und wobei weiterhin gilt:

- Ar steht in den Gruppen R-1 bis R-84 für ein aromatisches
Ringsystem mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, das mit einem
oder mehreren Resten R^x substituiert ist oder für ein
heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 40 aromatischen

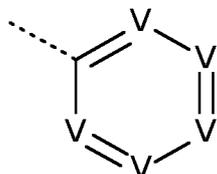
Ringatomen, das mit einem oder mehreren Resten R^x substituiert ist;

- 5
- A ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus $C(R^x)_2$, NR^x , S und O;
 - A^1 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus $C(R^x)_2$, NR^x , S und O;
 - m ist 0 oder 1; wobei m=0 bedeutet, dass die betreffende Gruppe nicht vorhanden ist und die an die betreffende Gruppe bindenden Gruppen direkt miteinander verbunden sind;
 - n ist 0 oder 1, wobei n=0 bedeutet, dass an dieser Position keine Gruppe A gebunden ist und an den entsprechenden Kohlenstoffatomen stattdessen Reste R^x gebunden sind;
- 10

wobei für R^x gilt,

- 15
- Wenn für R^1 eine Gruppe aus R-1 bis R-84 gewählt wird, dann steht R^x für R^4 ;
 - Wenn für Ar^2 eine Gruppe aus R-1 bis R-84 gewählt wird, dann steht R^x für R^2 ;
 - Wenn für Ar^3 eine Gruppe aus R-1 bis R-84 gewählt wird, dann steht R^x für R^3 .

- 20
- 13.** Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 12, dadurch gekennzeichnet, dass sie einer der Formeln (IV) bis (VII), bevorzugt einer der Formeln (IV) bis (VI) entspricht, wobei:
- Z gleich oder verschieden gewählt ist aus O und S ;
 - X gleich N oder CAr^3 ist;
 - Ar^1 gleich Phenyl ist, das mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert ist; und
 - Ar^2 gleich
- 25



ist;

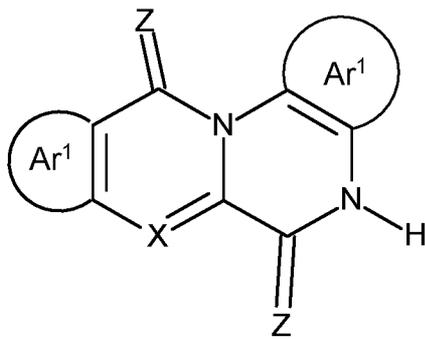
- 30
- wobei V gleich oder verschieden N oder CR^2 ist, und wobei:
 - bevorzugt maximal 3 V gleich N sind;

- bevorzugt nicht zwei oder mehr benachbarte V gleich N sind;
und
- wobei bevorzugt Ar² eine Phenylgruppe oder eine
Triazingruppe ist, die jeweils mit einem oder mehreren Resten
R² substituiert ist.

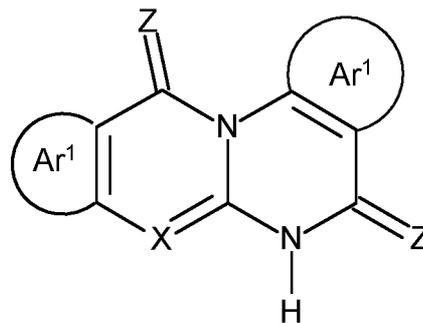
5

- 14.** Verfahren zur Herstellung einer Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 13, dadurch gekennzeichnet, dass zunächst ein Intermediat gemäß einer der Formeln (IV-Int) bis (VII-Int) hergestellt wird,

10



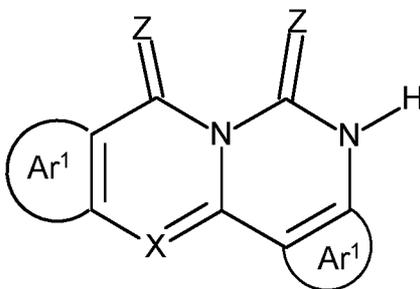
Formel (IV-Int)



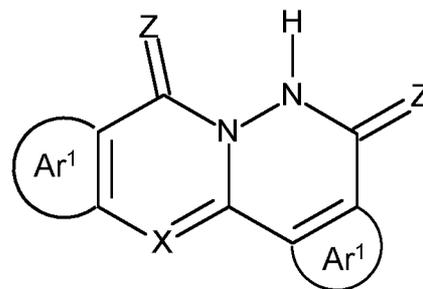
Formel (V-Int)

15

20



Formel (VI-Int)



Formel (VII-Int)

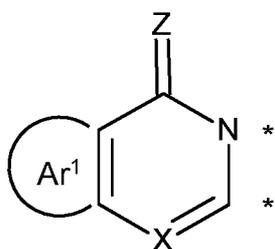
25

bevorzugt durch eine Ringschlussreaktion, und dass anschließend in einer Ullmann-Reaktion oder einer Buchwald-Reaktion ein Aromat oder Heteroaromat in der Position der Gruppe Ar² der Formel (I) eingeführt wird, und anschließend eine Halogenierungsreaktion, bevorzugt eine Bromierungsreaktion, an einem der Ringe Ar¹ durchgeführt wird, wodurch ein Halogensubstituent, bevorzugt ein Bromsubstituent an einem der Ringe Ar¹ eingeführt wird, und daran

30

anschließend eine Suzuki-Reaktion durchgeführt wird, in der in der Position des Halogensubstituenten, bevorzugt des Bromsubstituenten, ein Aromat eingeführt wird.

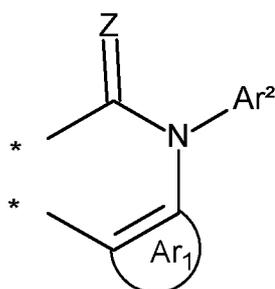
5 **15.** Formulierung, enthaltend eine Verbindung einer Formel (I),



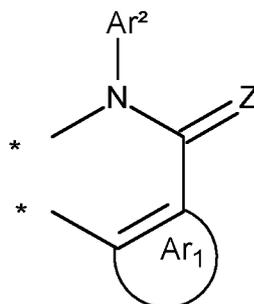
10

wobei an den mit * markierten Bindungspunkten am Ring eine Einheit gemäß Formel (II) oder Formel (III) jeweils über die mit * markierten Bindungen gebunden ist

15



Formel (II)



Formel (III),

20

und wobei für die auftretenden Variablen gilt:

25

X ist gleich N oder $C\text{Ar}^3$;

Z ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus O oder S;

30

Ar^1 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus ankondensierten aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40

aromatischen Ringatomen, und ankondensierten heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei die aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^1 substituiert sind;

5

Ar^2 ist gewählt aus verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei die genannten Gruppen jeweils mit einem oder mehreren Resten R^2 substituiert sind;

10

Ar^3 ist gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^3$, CN, $Si(R^3)_3$, $N(R^3)_2$, $P(=O)(R^3)_2$, OR^3 , $S(=O)R^3$, $S(=O)_2R^3$, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^3 substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch $-R^3C=CR^3-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^3)_2$, $C=O$, $C=NR^3$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^3-$, NR^3 , $P(=O)(R^3)$, $-O-$, $-S-$, SO oder SO_2 ersetzt sein können;

15

20

25

R^1 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen,

30

aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R^1 miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkinyllgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^4 substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkinyllgruppen durch $-\text{R}^4\text{C}=\text{CR}^4-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $\text{Si}(\text{R}^4)_2$, $\text{C}=\text{O}$, $\text{C}=\text{NR}^4$, $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$, $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^4-$, NR^4 , $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^4)$, $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, SO oder SO_2 ersetzt sein können;

R^2 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $\text{C}(=\text{O})\text{R}^4$, CN, $\text{Si}(\text{R}^4)_3$, $\text{N}(\text{R}^4)_2$, $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^4)_2$, OR^4 , $\text{S}(=\text{O})\text{R}^4$, $\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^4$, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkinyllgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R^2 miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkinyllgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^4 substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkinyllgruppen durch $-\text{R}^4\text{C}=\text{CR}^4-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $\text{Si}(\text{R}^4)_2$, $\text{C}=\text{O}$, $\text{C}=\text{NR}^4$, $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$, $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^4-$, NR^4 , $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^4)$, $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, SO oder SO_2 ersetzt sein können;

R^3 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $\text{C}(=\text{O})\text{R}^4$, CN, $\text{Si}(\text{R}^4)_3$, $\text{N}(\text{R}^4)_2$, $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^4)_2$, OR^4 , $\text{S}(=\text{O})\text{R}^4$, $\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^4$, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-

- Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R^3 miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^4 substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch $-\text{R}^4\text{C}=\text{CR}^4-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $\text{Si}(\text{R}^4)_2$, $\text{C}=\text{O}$, $\text{C}=\text{NR}^4$, $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$, $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^4-$, NR^4 , $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^4)$, $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, SO oder SO_2 ersetzt sein können;
- R^4 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, $\text{C}(=\text{O})\text{R}^5$, CN, $\text{Si}(\text{R}^5)_3$, $\text{N}(\text{R}^5)_2$, $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^5)_2$, OR^5 , $\text{S}(=\text{O})\text{R}^5$, $\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^5$, geradkettigen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, verzweigten oder cyclischen Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 3 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen, und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R^4 miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen und die genannten aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme jeweils mit Resten R^5 substituiert sind; und wobei eine oder mehrere CH_2 -Gruppen in den genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen durch $-\text{R}^5\text{C}=\text{CR}^5-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $\text{Si}(\text{R}^5)_2$, $\text{C}=\text{O}$, $\text{C}=\text{NR}^5$, $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$, $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^5-$, NR^5 , $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^5)$, $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, SO oder SO_2 ersetzt sein können;

- 5
10
- R⁵ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus H, D, F, Cl, Br, I, CN, Alkyl- oder Alkoxygruppen mit 1 bis 20 C-Atomen, Alkenyl- oder Alkynylgruppen mit 2 bis 20 C-Atomen, aromatischen Ringsystemen mit 6 bis 40 aromatischen Ringatomen und heteroaromatischen Ringsystemen mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen; wobei zwei oder mehr Reste R⁵ miteinander verknüpft sein können und einen Ring bilden können; und wobei die genannten Alkyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkynylgruppen, aromatischen Ringsysteme und heteroaromatischen Ringsysteme mit einem oder mehreren Resten gewählt aus F und CN substituiert sein können; und mindestens eine weitere Verbindung.
- 15
- 16.** Verwendung einer Verbindung einer Formel (I), definiert wie in Anspruch 15, in einer elektronischen Vorrichtung.
- 17.** Elektronische Vorrichtung, enthaltend mindestens eine Verbindung einer Formel (I), definiert wie in Anspruch 15.
- 20
- 18.** Elektronische Vorrichtung nach Anspruch 17, dadurch gekennzeichnet, dass sie eine organische Elektrolumineszenzvorrichtung ist, und dadurch gekennzeichnet, dass die Verbindung in einer emittierenden Schicht als Matrixmaterial für einen oder mehrere phosphoreszierende Emitter oder für Emitter, die TADF (thermally activated delayed fluorescence) zeigen, eingesetzt wird, und/ oder in einer Elektronentransportschicht eingesetzt wird
- 25
- und/ oder in einer Lochblockierschicht eingesetzt wird.
- 30

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/EP2021/057202

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER		
C07D 487/04(2006.01)i; C07D 471/04(2006.01)i; C07D 495/14(2006.01)i; C09K 11/06(2006.01)i; H01L 51/50(2006.01)i		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C07D; C09K; H01L		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) EPO-Internal, WPI Data		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	MOLINA PEDRO ET AL. "New methodology for the preparation of quinazoline derivatives via tandem aza-wittig/heterocumulene-mediated annulation. Synthesis of ..." <i>TETRAHEDRON</i> , Vol. 45, No. 13, 1989, pages 4263-4286 DOI: 10.1016/S0040-4020(01)81321-1 ISSN: 0040-4020, XP055803673 compounds 34b-34e	1-7,9,11-13,15
X	FANLONG ZENG ET AL. "One-Step Synthesis of Quinazolino[3,2-a]quinazolinones via Palladium-Catalyzed Domino Addition/Carboxamidation Reactions" <i>ORGANIC LETTERS</i> , Vol. 12, No. 16, 2010, pages 3642-3644 DOI: 10.1021/ol101428v ISSN: 1523-7060, XP055078031 compounds 6b-d,i,j,m,o,p,p'	1-4,6,7,9,15
X	MAHMOUD R. MAHMOUD ET AL. "Synthesis and antitumor evaluation of novel tetrahydrobenzo[4',5']thieno[3',2':5,6]pyrimido[1,2-b]isoquinoline derivatives" <i>SYNTHETIC COMMUNICATIONS</i> , Vol. 48, No. 4, 2018, pages 428-438 DOI: 10.1080/00397911.2017.1406520 ISSN: 0039-7911, XP055711163 compound 14	1,2,4,5,7,11,12,15
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 14 May 2021		Date of mailing of the international search report 31 May 2021
Name and mailing address of the ISA/EP European Patent Office p.b. 5818, Patentlaan 2, 2280 HV Rijswijk Netherlands Telephone No. (+31-70)340-2040 Facsimile No. (+31-70)340-3016		Authorized officer Ladenburger, Claude Telephone No.

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	VITTORIO PESTELLINI ET AL. "Anti-inflammatory and antalgic activity of fused ring polycyclic compounds : 2,10-dioxo-pyridazino(3,2-b)quinazolines" <i>EUROPEAN JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY</i> , Vol. 13, No. 3, 1978, pages 296-296 ISSN: 0223-5234, XP009527454 compounds 22,23	1-7,11-13,15
X	ABDEL-RAHMAN TAHA M. "Heterocyclic compounds from 4H-3,1-benzoxazin-4-one derivatives as anticancer agent" <i>JOURNAL OF HETEROCYCLIC CHEMISTRY</i> , Vol. 42, No. 7, 2005, pages 1257-1265 DOI: 10.1002/jhet.5570420703 ISSN: 0022-152X, XP055803501 compounds 6a-d, 7a-c, 16-18, 19a-21a, 22-24	1-4,6,7,15
X	NASSAR I. F. "Synthesis of some quinazolines derived from 6,8-dibromo-2-(2-carboxyphenyl)-4H-3,1-benzoxazin-4-one as antimicrobial agents" <i>CHEMISTRY OF HETEROCYCLIC COMPOUNDS</i> , Vol. 45, No. 12, 2009, pages 1515-1522 DOI: 10.1007/s10593-010-0459-4 ISSN: 0009-3122, XP055803492 compounds 10a-c, 11a-c, 12-15	1-4,6,7,11,15
X	EL-HASHASH MAHER A. ET AL. "Regiospecific Isomerization of 2-Benzoxazinon-2-yl Benzoic Acid Toward Some Nitrogen Nucleophiles as Environmental Insecticide" <i>JOURNAL OF HETEROCYCLIC CHEMISTRY</i> , Vol. 54, No. 6, 2017, pages 3716-3724 DOI: 10.1002/jhet.2991 ISSN: 1943-5193, XP055803572 compound 17 (10-Iodo)	1-4,6,7,15
X	EL-HASHASH MAHER A. ET AL. "Ultrasonic Aptitude of Regioselective Reaction of 6-bromo-spiro-3,1-benzoxazinone-2,1'-isobenzofuran-3',4'-dione Towards Some Electrophilic and Nucleophilic Reagents" <i>JOURNAL OF HETEROCYCLIC CHEMISTRY</i> , Vol. 55, No. 9, 2018, pages 2090-2098 DOI: 10.1002/jhet.3250 ISSN: 0022-152X, XP055803576 compound 19a	1-4,6,7,15
A	WO 2013064206 A1 (MERCK PATENT GMBH [DE]) 10 May 2013 (2013-05-10) page 2, lines 14-34; claims 1, 11, 13; examples 3a, 19, 19a, E23-E27	1-18
A	WO 2015000542 A1 (MERCK PATENT GMBH [DE]) 08 January 2015 (2015-01-08) page 1, line 34 - page 2, line 19; claims 1, 9, 12-14; examples 4, 6, 7	1-18

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/EP2021/057202

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
WO	2013064206	A1	10 May 2013	CN	104024371	A	03 September 2014
				EP	2773721	A1	10 September 2014
				JP	6239522	B2	29 November 2017
				JP	2014533435	A	11 December 2014
				KR	20140097275	A	06 August 2014
				US	2014249308	A1	04 September 2014
				WO	2013064206	A1	10 May 2013
				-----	-----	-----	-----
WO	2015000542	A1	08 January 2015	CN	105593228	A	18 May 2016
				EP	3016952	A1	11 May 2016
				JP	6416244	B2	31 October 2018
				JP	2016523869	A	12 August 2016
				KR	20160027155	A	09 March 2016
				US	2016372681	A1	22 December 2016
				WO	2015000542	A1	08 January 2015
				-----	-----	-----	-----

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES INV. C07D487/04 C07D471/04 C07D495/14 C09K11/06 H01L51/50 ADD.		
Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPC) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPC		
B. RECHERCHIERTE GEBIETE Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole) C07D C09K H01L		
Recherchierte, aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen		
Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe) EPO-Internal, WPI Data		
C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	MOLINA PEDRO ET AL: "New methodology for the preparation of quinazoline derivatives via tandem aza-wittig/heterocumulene-mediated annulation. Synthesis of ...", TETRAHEDRON, Bd. 45, Nr. 13, 1989, Seiten 4263-4286, XP055803673, ISSN: 0040-4020, DOI: 10.1016/S0040-4020(01)81321-1 Verbindungen 34b-34e ----- -/--	1-7,9, 11-13,15
<input checked="" type="checkbox"/> Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen <input checked="" type="checkbox"/> Siehe Anhang Patentfamilie		
* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen : "A" Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist "E" frühere Anmeldung oder Patent, die bzw. das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist "L" Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt) "O" Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht "P" Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist "T" Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist "X" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden "Y" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist "&" Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist		
Datum des Abschlusses der internationalen Recherche	Absendedatum des internationalen Recherchenberichts	
14. Mai 2021	31/05/2021	
Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016	Bevollmächtigter Bediensteter Ladenburger, Claude	

C. (Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	FANLONG ZENG ET AL: "One-Step Synthesis of Quinazolino[3,2-a]quinazolinones via Palladium-Catalyzed Domino Addition/Carboxamidation Reactions", ORGANIC LETTERS, Bd. 12, Nr. 16, 2010, Seiten 3642-3644, XP055078031, ISSN: 1523-7060, DOI: 10.1021/ol101428v Verbindungen 6b-d,i,j,m,o,p' -----	1-4,6,7, 9,15
X	MAHMOUD R. MAHMOUD ET AL: "Synthesis and antitumor evaluation of novel tetrahydrobenzo[4',5']thieno[3',2':5,6]pyrimido[1,2-b]isoquinoline derivatives", SYNTHETIC COMMUNICATIONS, Bd. 48, Nr. 4, 2018, Seiten 428-438, XP055711163, ISSN: 0039-7911, DOI: 10.1080/00397911.2017.1406520 Verbindung 14 -----	1,2,4,5, 7,11,12, 15
X	VITTORIO PESTELLINI ET AL: "Anti-inflammatory and antalgic activity of fused ring polycyclic compounds : 2,10-dioxo-pyridazino(3,2-b)quinazolines", EUROPEAN JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY, Bd. 13, Nr. 3, 1978, Seiten 296-296, XP009527454, ISSN: 0223-5234 Verbindungen 22, 23 -----	1-7, 11-13,15
X	ABDEL-RAHMAN TAHA M: "Heterocyclic compounds from 4H-3,1-benzoxazin-4-one derivatives as anticancer agent", JOURNAL OF HETEROCYCLIC CHEMISTRY, Bd. 42, Nr. 7, 2005, Seiten 1257-1265, XP055803501, ISSN: 0022-152X, DOI: 10.1002/jhet.5570420703 Verbindungen 6a-d, 7a-c, 16-18, 19a-21a, 22-24 -----	1-4,6,7, 15
X	NASSAR I. F.: "Synthesis of some quinazolines derived from 6,8-dibromo-2-(2-carboxyphenyl)-4H-3,1-benzoxazin-4-one as antimicrobial agents", CHEMISTRY OF HETEROCYCLIC COMPOUNDS, Bd. 45, Nr. 12, 2009, Seiten 1515-1522, XP055803492, ISSN: 0009-3122, DOI: 10.1007/s10593-010-0459-4 Verbindungen 10a-c, 11a-c, 12-15 -----	1-4,6,7, 11,15
	-/--	

C. (Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	<p>EL-HASHASH MAHER A. ET AL: "Regiospecific Isomerization of 2-Benzoxazinon-2-yl Benzoic Acid Toward Some Nitrogen Nucleophiles as Environmental Insecticide", JOURNAL OF HETEROCYCLIC CHEMISTRY, Bd. 54, Nr. 6, 2017, Seiten 3716-3724, XP055803572, ISSN: 1943-5193, DOI: 10.1002/jhet.2991 Verbindung 17 (10-Iodo)</p> <p style="text-align: center;">-----</p>	1-4,6,7, 15
X	<p>EL-HASHASH MAHER A. ET AL: "Ultrasonic Aptitude of Regioselective Reaction of 6-bromo-spiro-3,1-benzoxazinone-2,1'-isobenzofuran-3',4-dione Towards Some Electrophilic and Nucleophilic Reagents", JOURNAL OF HETEROCYCLIC CHEMISTRY, Bd. 55, Nr. 9, 2018, Seiten 2090-2098, XP055803576, ISSN: 0022-152X, DOI: 10.1002/jhet.3250 Verbindung 19a</p> <p style="text-align: center;">-----</p>	1-4,6,7, 15
A	<p>WO 2013/064206 A1 (MERCK PATENT GMBH [DE]) 10. Mai 2013 (2013-05-10) Seite 2, Zeilen 14-34; Ansprüche 1, 11, 13; Beispiele 3a, 19, 19a, E23-E27</p> <p style="text-align: center;">-----</p>	1-18
A	<p>WO 2015/000542 A1 (MERCK PATENT GMBH [DE]) 8. Januar 2015 (2015-01-08) Seite 1, Zeile 34 - Seite 2, Zeile 19; Ansprüche 1, 9, 12-14; Beispiele 4, 6, 7</p> <p style="text-align: center;">-----</p>	1-18

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2021/057202

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 2013064206 A1	10-05-2013	CN 104024371 A	03-09-2014
		EP 2773721 A1	10-09-2014
		JP 6239522 B2	29-11-2017
		JP 2014533435 A	11-12-2014
		KR 20140097275 A	06-08-2014
		US 2014249308 A1	04-09-2014
		WO 2013064206 A1	10-05-2013

WO 2015000542 A1	08-01-2015	CN 105593228 A	18-05-2016
		EP 3016952 A1	11-05-2016
		JP 6416244 B2	31-10-2018
		JP 2016523869 A	12-08-2016
		KR 20160027155 A	09-03-2016
		US 2016372681 A1	22-12-2016
		WO 2015000542 A1	08-01-2015
