



(12)

## Offenlegungsschrift

(21) Aktenzeichen: **10 2009 007 038.9**

(22) Anmeldetag: **02.02.2009**

(43) Offenlegungstag: **05.08.2010**

(51) Int Cl.<sup>8</sup>: **C07F 15/00** (2006.01)

**C07F 19/00** (2006.01)

**C09K 11/06** (2006.01)

**H01L 51/30** (2006.01)

(71) Anmelder:  
**Merck Patent GmbH, 64293 Darmstadt, DE**

(72) Erfinder:  
**Stößel, Philipp, Dr., 60487 Frankfurt, DE; Heil,  
Holger, Dr., 60389 Frankfurt, DE; Joosten,  
Dominik, Dr., 60487 Frankfurt, DE; Pflumm,  
Christof, Dr., 60316 Frankfurt, DE; Gerhard, Anja,  
Dr., 63329 Egelsbach, DE; Breuning, Esther, Dr.,  
64372 Ober-Ramstadt, DE**

**Die folgenden Angaben sind den vom Anmelder eingereichten Unterlagen entnommen**

(54) Bezeichnung: **Metallkomplexe**

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

## Beschreibung

**[0001]** Der Aufbau organischer Elektrolumineszenzvorrichtungen (OLEDs), in denen organische Halbleiter als funktionelle Materialien eingesetzt werden, ist beispielsweise in US 4539507, US 5151629, EP 0676461 und WO 98/27136 beschrieben. Dabei werden als emittierende Materialien zunehmend metallorganische Komplexe eingesetzt, die Phosphoreszenz statt Fluoreszenz zeigen (M. A. Baldo et al., Appl. Phys. Lett. 1999, 75, 4–6). Aus quantenmechanischen Gründen ist unter Verwendung metall-organischer Verbindungen als Phosphoreszenzemitter eine bis zu vierfache Energie- und Leistungseffizienz möglich. Generell gibt es bei OLEDs, die Triplettmission zeigen, jedoch immer noch Verbesserungsbedarf, insbesondere im Hinblick auf Effizienz, Betriebsspannung und Lebensdauer. Dies gilt insbesondere für OLEDs, welche im kürzerwelligen Bereich, also grün und insbesondere blau, emittieren. So sind bislang keine blau emittierenden Triplettmitter bekannt, welche die technischen Anforderungen für eine industrielle Anwendung erfüllen.

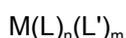
**[0002]** Gemäß dem Stand der Technik werden in phosphoreszierenden OLEDs als Triplettmitter insbesondere Iridiumkomplexe eingesetzt. Eine Verbesserung dieser OLEDs konnte dadurch erzielt werden, dass Metallkomplexe mit polypodalem Liganden bzw. Kryptate eingesetzt wurden, wodurch die Komplexe eine höhere thermische Stabilität aufweisen, was zu einer höheren Lebensdauer der OLEDs führt (WO 04/081017, WO 05/113563, WO 06/008069). Für blaue Emission, insbesondere für gesättigte tiefblaue Emission, sind diese Komplexe jedoch nicht geeignet.

**[0003]** Aus dem Stand der Technik sind weiterhin Iridiumkomplexe bekannt, welche als Liganden Imidazophenanthridin-Derivate bzw. Diimidazochinazolin-Derivate enthalten (WO 07/095118). Diese Komplexe können bei Anwendung in organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen, je nach genauer Struktur des Liganden, zu blauer Phosphoreszenz führen. Auch hier sind noch weitere Verbesserungen hinsichtlich Effizienz, Betriebsspannung und Lebensdauer, wünschenswert. Insbesondere besteht hier auch noch Verbesserungsbedarf in Bezug auf die Farbkoordinaten, um tiefblaue Emission erzielen zu können.

**[0004]** Aufgabe der vorliegenden Erfindung ist daher die Bereitstellung neuer Metallkomplexe, welche sich als Emittier für die Verwendung in OLEDs eignen. Insbesondere ist die Aufgabe, Emittier bereitzustellen, welche sich für blau phosphoreszierende OLEDs eignen.

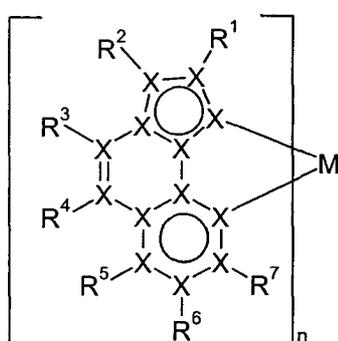
**[0005]** Überraschend wurde gefunden, dass bestimmte, unten näher beschriebene Metallchelatkomplexe diese Aufgabe lösen und zu Verbesserungen der organischen Elektrolumineszenzvorrichtung führen, insbesondere hinsichtlich der Betriebsspannung, der Effizienz und der Emissionsfarbe. Diese Metallkomplexe und organische Elektrolumineszenzvorrichtungen, welche diese Komplexe enthalten, sind daher der Gegenstand der vorliegenden Erfindung.

**[0006]** Gegenstand der Erfindung ist somit eine Verbindung gemäß Formel (1),

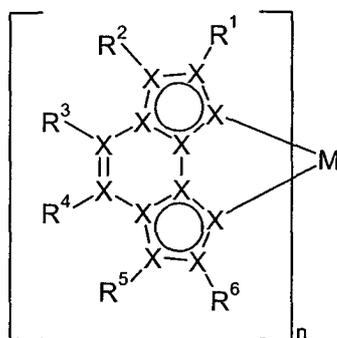


Formel (1)

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



Formel (2)



Formel (3)

wobei für die verwendeten Symbole und Indizes gilt:

M ist ein Metall;

X ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden gewählt aus der Gruppe bestehend aus C, N und B; und alle

X gemeinsam stellen ein 14  $\pi$ -Elektronensystem dar;

$R^1$  bis  $R^7$  ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, D, F, Cl, Br, I,  $N(R^8)_2$ , CN,  $NO_2$ ,  $Si(R^8)_3$ ,  $B(OR^8)_2$ ,  $C(=O)R^8$ ,  $P(=O)(R^8)_2$ ,  $S(O)R^8$ ,  $S(=O)_2R^8$ ,  $OSO_2R^8$ , eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine geradkettige Alkenyl- oder Alkinylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkinyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^8$  substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $CH_2$ -Gruppen durch  $R^8C=CR^8$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^8)_2$ ,  $Ge(R^8)_2$ ,  $Sn(R^8)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^8$ ,  $P(=O)(R^8)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^8$ , O, S oder  $CONR^8$  ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch D, F, Cl, Br, I, CN oder  $NO_2$  ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^8$  substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste  $R^8$  substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste  $R^8$  substituiert sein kann; dabei können  $R^1$  und  $R^2$  und/oder  $R^2$  und  $R^3$  und/oder  $R^4$  und  $R^5$  und/oder  $R^5$  und  $R^6$  und/oder  $R^6$  und  $R^7$  auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden; weiterhin können  $R^3$  und  $R^4$  miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden;

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

$R^8$  ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, D, F, Cl, Br, I,  $N(R^9)_2$ , CN,  $NO_2$ ,  $Si(R^9)_3$ ,  $B(OR^9)_2$ ,  $C(=O)R^9$ ,  $P(=O)(R^9)_2$ ,  $S(=O)R^9$ ,  $S(=O)_2R^9$ ,  $OSO_2R^9$ , eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine geradkettige Alkenyl- oder Alkinylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkinyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^9$  substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $CH_2$ -Gruppen durch  $R^9C=CR^9$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^9)_2$ ,  $Ge(R^9)_2$ ,  $Sn(R^9)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^9$ ,  $P(=O)(R^9)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^9$ , O, S oder  $CONR^9$  ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch D, F, Cl, Br, I, CN oder  $NO_2$  ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^9$  substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste  $R^9$  substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste  $R^9$  substituiert sein kann; dabei können zwei oder mehrere benachbarte Reste  $R^8$  miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden;

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

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

n ist 1, 2, 3 oder 4;

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

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

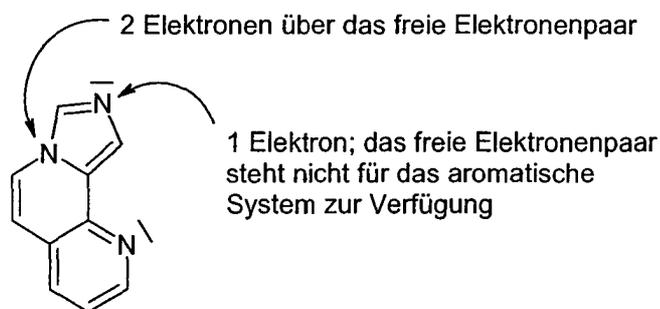
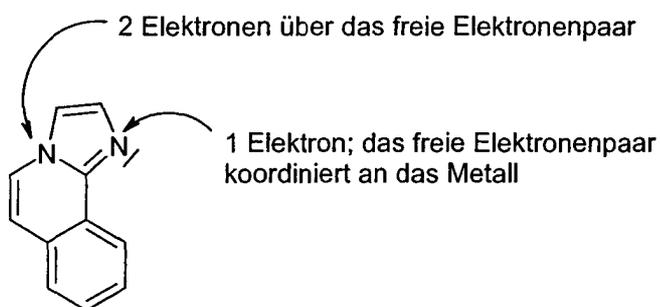
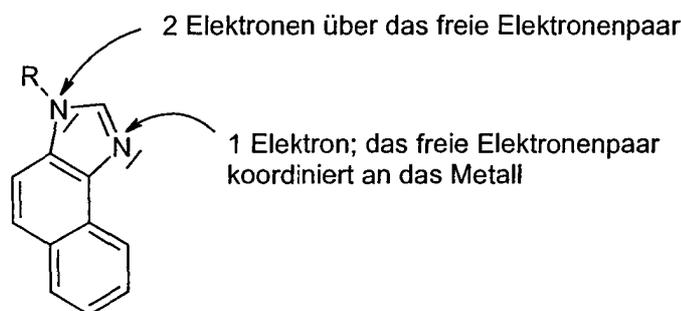
**[0007]** Sowohl der Ligand L als ganzes wie auch einzelne Atome X im Liganden L können dabei auch geladen sein.

**[0008]** Dabei werden die Indizes n und m so gewählt, dass die Koordinationszahl am Metall M insgesamt, je nach Metall, der für dieses Metall üblichen Koordinationszahl entspricht. Dies ist für Übergangsmetalle je nach Metall üblicherweise die Koordinationszahl 4, 5 oder 6. Es ist generell bekannt, dass Metallkoordinationsverbindungen abhängig vom Metall und von der Oxidationsstufe des Metalls unterschiedliche Koordinationszahlen aufweisen, also eine unterschiedliche Anzahl von Liganden binden. Da die bevorzugten Koordinationszahlen von Metallen bzw. Metallionen in verschiedenen Oxidationsstufen zum allgemeinen Fachwissen des Fachmanns auf dem Gebiet der metallorganischen Chemie bzw. der Koordinationschemie gehören, ist es für den Fachmann ein Leichtes, je nach Metall und dessen Oxidationsstufe und je nach genauer Struktur des Liganden L eine geeignete Anzahl Liganden zu verwenden und somit die Indizes n und m geeignet zu wählen.

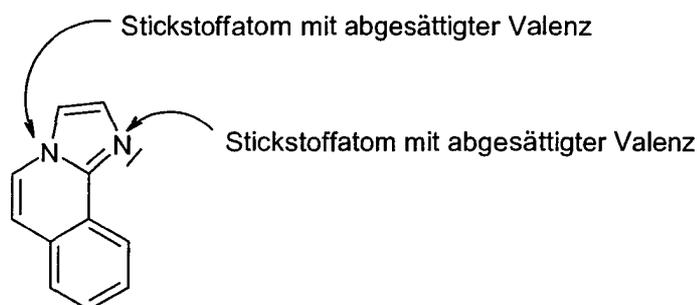
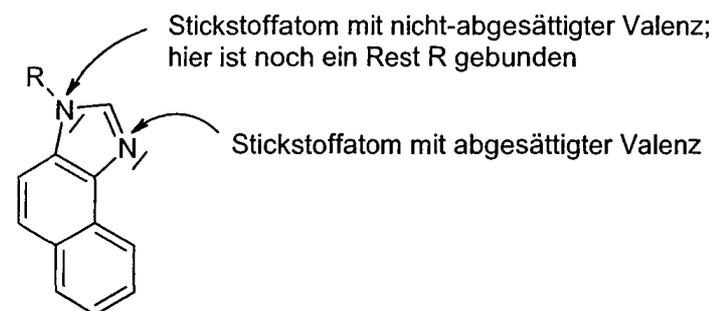
**[0009]** Die Liganden L sind bidentate Liganden, welche über ein Kohlenstoffatom und ein Stickstoffatom oder über zwei Kohlenstoffatome oder über zwei Stickstoffatome an das Metall M binden.

**[0010]** Alle Atome X bilden zusammen ein 14  $\pi$ -Elektronensystem. Dabei trägt jedes Kohlenstoffatom 1

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



**[0011]** Unter einem Stickstoffatom mit abgesättigter Valenz im Sinne dieser Erfindung wird ein Stickstoffatom verstanden, welches innerhalb des aromatischen Grundgerüsts entweder formal eine Einfachbindung und eine Doppelbindung oder drei Einfachbindungen eingeht. In diesen Fällen stellt der Rest  $R^1$  bis  $R^7$ , welcher an dieses Stickstoffatom gebunden ist, ein freies Elektronenpaar dar. Unter einem Stickstoffatom mit nicht abgesättigter Valenz im Sinne dieser Erfindung wird dagegen ein Stickstoffatom verstanden, welches innerhalb des aromatischen Grundgerüsts formal nur zwei Einfachbindungen eingeht. In diesen Fällen stellt der Rest  $R^1$  bis  $R^7$ , welcher an dieses Stickstoffatom gebunden ist, einen Rest dar, wie er oben definiert ist, und kein freies Elektronenpaar. Die folgenden Strukturen erläutern nochmals, was unter einem Stickstoffatom mit abgesättigter Valenz verstanden wird:



**[0012]** Eine Arylgruppe im Sinne dieser Erfindung enthält 6 bis 40 C-Atome; eine Heteroarylgruppe im Sinne dieser Erfindung enthält 2 bis 40 C-Atome und mindestens ein Heteroatom, mit der Maßgabe, dass die Summe aus C-Atomen und Heteroatomen mindestens 5 ergibt. Die Heteroatome sind bevorzugt ausgewählt aus N, O und/oder S. Dabei wird unter einer Arylgruppe bzw. Heteroarylgruppe entweder ein einfacher aromatischer Cyclus, also Benzol, bzw. ein einfacher heteroaromatischer Cyclus, beispielsweise Pyridin, Pyrimidin, Thiophen, etc., oder eine kondensierte Aryl- oder Heteroarylgruppe, beispielsweise Naphthalin, Anthracen, Phenanthren, Chinolin, Isochinolin, etc., verstanden.

**[0013]** Die Liganden können auch über ein Carben-Kohlenstoffatom an das Metall binden. Ein cyclisches Carben im Sinne dieser Erfindung ist eine cyclische Gruppe, welche über ein neutrales C-Atom an das Metall bindet. Dabei kann die cyclische Gruppe gesättigt oder ungesättigt sein. Bevorzugt sind hierbei Arduengo-Carbene, also solche Carbene, bei welchen an das Carben-C-Atom zwei Stickstoffatome gebunden sind. Dabei wird ein Fünfring-Arduengo-Carben bzw. ein anderes ungesättigtes Fünfring-Carben ebenfalls als eine Arylgruppe im Sinne dieser Erfindung angesehen.

**[0014]** Ein aromatisches Ringsystem im Sinne dieser Erfindung enthält 6 bis 60 C-Atome im Ringsystem. Ein heteroaromatisches Ringsystem im Sinne dieser Erfindung enthält 2 bis 60 C-Atome und mindestens ein Heteroatom im Ringsystem, mit der Maßgabe, dass die Summe aus C-Atomen und Heteroatomen mindestens 5 ergibt. Die Heteroatome sind bevorzugt ausgewählt aus N, O und/oder S. Unter einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem im Sinne dieser Erfindung soll ein System verstanden werden, das nicht notwendigerweise nur Aryl- oder Heteroarylgruppen enthält, sondern in dem auch mehrere Aryl- oder Heteroarylgruppen durch eine nicht-aromatische Einheit (bevorzugt weniger als 10% der von H verschiedenen Atome), wie z. B. ein  $sp^3$ -hybridisiertes C-, N- oder O-Atom oder eine Carbonylgruppe, unterbrochen sein können. So sollen beispielsweise auch Systeme wie 9,9'-Spirobifluoren, 9,9-Diarylfuoren, Triarylamine, Diarylether, Stilben, etc. als aromatische Ringsysteme im Sinne dieser Erfindung verstanden werden, und ebenso Systeme, in denen zwei oder mehrere Arylgruppen beispielsweise durch eine lineare oder cyclische Alkylgruppe oder durch eine Silylgruppe unterbrochen sind.

**[0015]** Unter einer cyclischen Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe im Sinne dieser Erfindung wird eine monocyclische, eine bicyclische oder eine polycyclische Gruppe verstanden.

**[0016]** Im Rahmen der vorliegenden Erfindung werden unter einer  $C_1$ - bis  $C_{40}$ -Alkylgruppe, in der auch einzelne H-Atome oder  $CH_2$ -Gruppen durch die oben genannten Gruppen substituiert sein können, beispielsweise die Reste Methyl, Ethyl, n-Propyl, i-Propyl, n-Butyl, i-Butyl, s-Butyl, t-Butyl, 2-Methylbutyl, n-Pentyl, s-Pentyl, tert-Pentyl, 2-Pentyl, Cyclopentyl, n-Hexyl, s-Hexyl, tert-Hexyl, 2-Hexyl, 3-Hexyl, Cyclohexyl, 2-Methylpentyl, n-Heptyl, 2-Heptyl, 3-Heptyl, 4-Heptyl, Cycloheptyl, 1-Methylcyclohexyl, n-Octyl, 2-Ethylhexyl, Cyclooctyl, 1-Bicyclo[2,2,2]octyl, 2-Bicyclo[2,2,2]octyl, 2-(2,6-Dimethyl)octyl, 3-(3,7-Dimethyl)octyl, Trifluormethyl, Pentafluorethyl oder 2,2,2-Trifluorethyl verstanden. Unter einer Alkenylgruppe werden beispielsweise Ethenyl, Propenyl,

Butenyl, Pentenyl, Cyclopentenyl, Hexenyl, Cyclohexenyl, Heptenyl, Cycloheptenyl, Octenyl, Cyclooctenyl oder Cyclooctadienyl verstanden. Unter einer Alkylgruppe werden beispielsweise Ethyl-, Propyl-, Butyl-, Pentyl-, Hexyl-, Heptyl- oder Octyl- verstanden. Unter einer C<sub>1</sub>- bis C<sub>40</sub>-Alkoxygruppe werden beispielsweise Methoxy, Trifluormethoxy, Ethoxy, n-Propoxy, i-Propoxy, n-Butoxy, i-Butoxy, s-Butoxy, t-Butoxy oder 2-Methylbutoxy verstanden. Unter einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem mit 5–60 aromatischen Ringatomen, welches noch jeweils mit den oben genannten Resten R substituiert sein kann und welches über beliebige Positionen am Aromaten bzw. Heteroaromaten verknüpft sein kann, werden beispielsweise Gruppen verstanden, die abgeleitet sind von Benzol, Naphthalin, Anthracen, Benzanthracen, Phenanthren, Benzophenanthren, Pyren, Chrysen, Perylen, Fluoranthren, Benzfluoranthren, Naphthacen, Pentacen, Benzpyren, Biphenyl, Biphenylen, Terphenyl, Terphenylen, Fluoren, Spirobifluoren, Dihydrophenanthren, Dihydropyren, Tetrahydropyren, cis- oder trans-Indenofluoren, cis- oder trans-Monobenzoindenofluoren, cis- oder trans-Dibenzoindenofluoren, Truxen, Isotruxen, Spirotruxen, Spiroisotruxen, Furan, Benzofuran, Isobenzofuran, Dibenzofuran, Thiophen, Benzothiophen, Isobenzothiophen, Dibenzothiophen, Pyrrol, Indol, Isoindol, Carbazol, Pyridin, Chinolin, Isochinolin, Acridin, Phenanthridin, Benzo-5,6-chinolin, Benzo-6,7-chinolin, Benzo-7,8-chinolin, Phenothiazin, Phenoxazin, Pyrazol, Indazol, Imidazol, Benzimidazol, Naphthimidazol, Phenanthrimidazol, Pyridimidazol, Pyrazinimidazol, Chinoxalinimidazol, Oxazol, Benzoxazol, Naphthoxazol, Anthroxazol, Phenanthroxazol, Isoxazol, 1,2-Thiazol, 1,3-Thiazol, Benzothiazol, Pyridazin, Benzopyridazin, Pyrimidin, Benzpyrimidin, Chinoxalin, 1,5-Diazaanthracen, 2,7-Diazapyren, 2,3-Diazapyren, 1,6-Diazapyren, 1,8-Diazapyren, 4,5-Diazapyren, 4,5,9,10-Tetraazaperylen, Pyrazin, Phenazin, Phenoxazin, Phenothiazin, Fluorubin, Naphthyridin, Azacarbazol, Benzocarbolin, Phenanthrolin, 1,2,3-Triazol, 1,2,4-Triazol, Benzotriazol, 1,2,3-Oxadiazol, 1,2,4-Oxadiazol, 1,2,5-Oxadiazol, 1,3,4-Oxadiazol, 1,2,3-Thiadiazol, 1,2,4-Thiadiazol, 1,2,5-Thiadiazol, 1,3,4-Thiadiazol, 1,3,5-Triazin, 1,2,4-Triazin, 1,2,3-Triazin, Tetrazol, 1,2,4,5-Tetrazin, 1,2,3,4-Tetrazin, 1,2,3,5-Tetrazin, Purin, Pteridin, Indolizin und Benzothiadiazol.

**[0017]** Bevorzugt sind Verbindungen gemäß Formel (1), dadurch gekennzeichnet, dass diese nicht geladen, d. h. elektrisch neutral, sind. Dies wird auf einfache Weise dadurch erreicht, dass die Ladung der Liganden L und L' so gewählt werden, dass sie die Ladung des komplexierten Metallatoms M kompensieren.

**[0018]** Bevorzugt sind weiterhin Verbindungen gemäß Formel (1), dadurch gekennzeichnet, dass die Summe der Valenzelektronen um das Metallatom in vierfach koordinierten Komplexen 16 und in fünffach koordinierten Komplexen 16 oder 18 und in sechsfach koordinierten Komplexen 18 beträgt. Diese Bevorzugung ist durch die besondere Stabilität dieser Metallkomplexe begründet (siehe z. B. Elschenbroich, Salzer, Organometallic Chemie, Teubner Studienbücher, Stuttgart 1993).

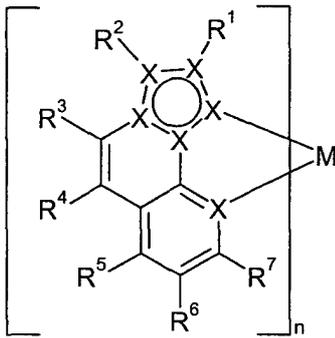
**[0019]** In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung steht M für ein Übergangsmetall oder für ein Hauptgruppenmetall. Wenn M für ein Hauptgruppenmetall steht, dann steht es bevorzugt für ein Metall der dritten, vierten oder fünften Hauptgruppe, insbesondere für Zinn.

**[0020]** Bevorzugt sind Verbindungen gemäß Formel (1), in denen M für ein Übergangsmetall, insbesondere für ein tetrakoordiniertes, ein pentakoordiniertes oder ein hexakoordiniertes Übergangsmetall steht, besonders bevorzugt ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Chrom, Molybdän, Wolfram, Rhenium, Ruthenium, Osmium, Rhodium, Iridium, Nickel, Palladium, Platin, Kupfer, Silber und Gold, insbesondere Molybdän, Wolfram, Rhenium, Ruthenium, Osmium, Iridium, Platin und Gold. Ganz besonders bevorzugt sind Iridium und Platin. Die Metalle können dabei in verschiedenen Oxidationsstufen vorliegen. Bevorzugt sind dabei die oben genannten Metalle in den Oxidationsstufen Cr(0), Cr(II), Cr(III), Cr(IV), Cr(VI), Mo(0), Mo(II), Mo(III), Mo(IV), Mo(VI), W(0), W(II), W(III), W(IV), W(VI), Re(I), Re(II), Re(III), Re(IV), Ru(II), Ru(III), Os(II), Os(III), Os(IV), Rh(I), Rh(III), Ir(I), Ir(III), Ir(IV), Ni(0), Ni(II), Ni(IV), Pd(II), Pt(II), Pt(IV), Cu(I), Cu(II), Cu(III), Ag(I), Ag(II), Au(I), Au(III) und Au(V); ganz besonders bevorzugt sind Mo(0), W(0), Re(I), Ru(II), Os(II), Rh(III), Ir(III) und Pt(II).

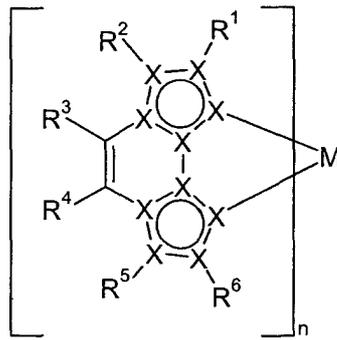
**[0021]** In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung ist M ein tetrakoordiniertes Metall, und der Index n steht für 1 oder 2. Wenn der Index n = 1 ist, sind noch ein bidentater oder zwei monodentate Liganden L', bevorzugt ein bidentater Ligand L', an das Metall M koordiniert. Wenn der Index n = 2 ist, ist der Index m = 0.

**[0022]** In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform der Erfindung ist M ein hexakoordiniertes Metall, und der Index n steht für 1, 2 oder 3, bevorzugt für 2 oder 3. Wenn der Index n = 1 ist, sind noch vier monodentate oder zwei bidentate oder ein bidentater und zwei monodentate oder ein tridentater und ein monodentater oder ein tetradentater Ligand L', bevorzugt zwei bidentate Liganden L', an das Metall koordiniert. Wenn der Index n = 2 ist, sind noch ein bidentater oder zwei monodentate Liganden L', bevorzugt ein bidentater Ligand L', an das Metall koordiniert. Wenn der Index n = 3 ist, ist der Index m = 0.

**[0023]** In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung sind die Teilstrukturen der Formel (2) gewählt aus den Strukturen der folgenden Formel (4) und die Teilstrukturen der Formel (3) aus den Strukturen der folgenden Formel (5),



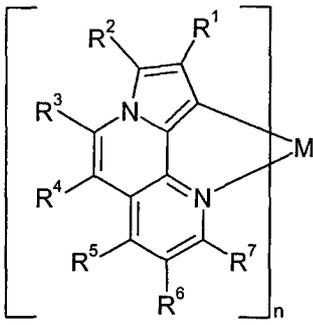
Formel (4)



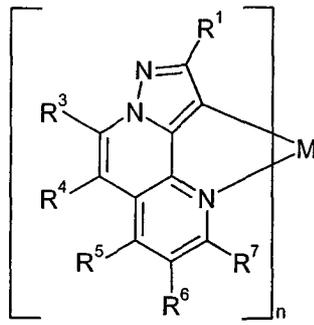
Formel (5)

wobei die Symbole und Indizes die oben angegebenen Bedeutungen haben.

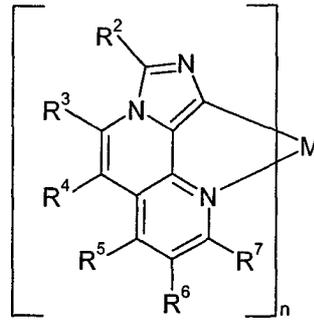
**[0024]** Eine besonders bevorzugte Ausführungsform der Teilstrukturen gemäß den Formeln (4) und (5) sind die Strukturen gemäß den folgenden Formeln (6) bis (24),



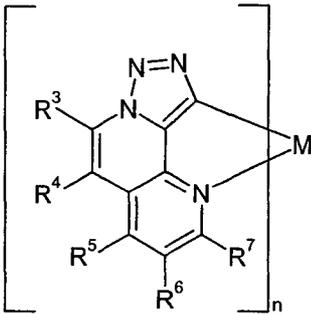
Formel (6)



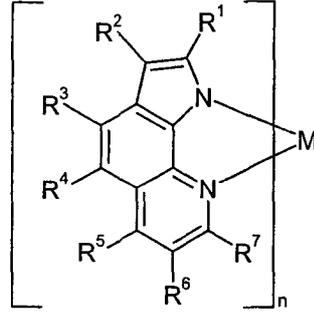
Formel (7)



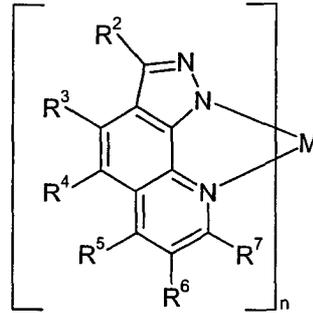
Formel (8)



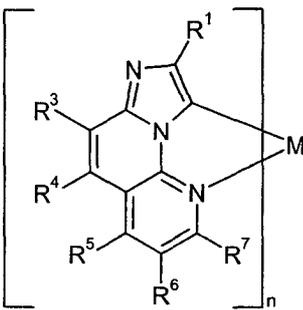
Formel (9)



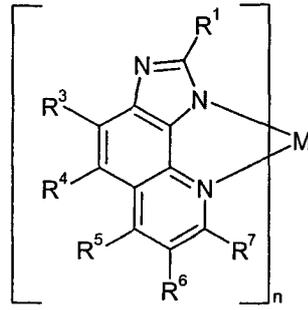
Formel (10)



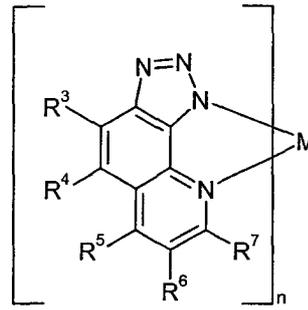
Formel (11)



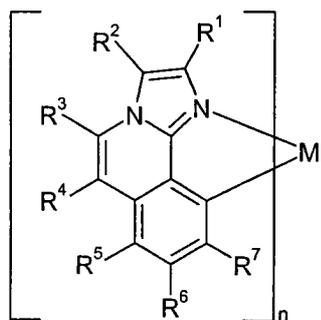
Formel (12)



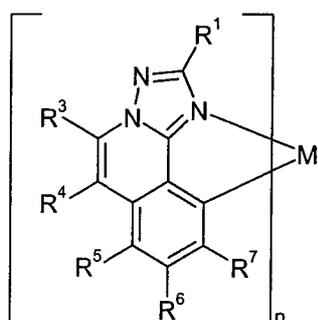
Formel (13)



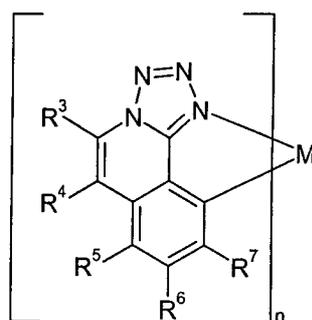
Formel (14)



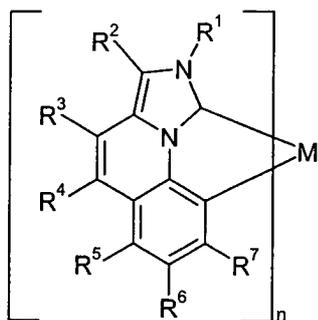
Formel (15)



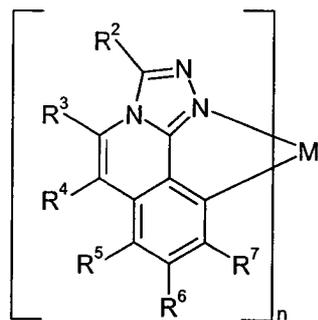
Formel (16)



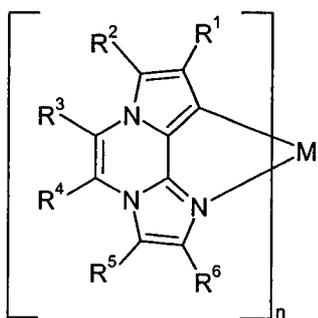
Formel (17)



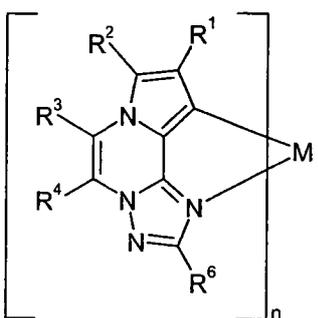
Formel (18)



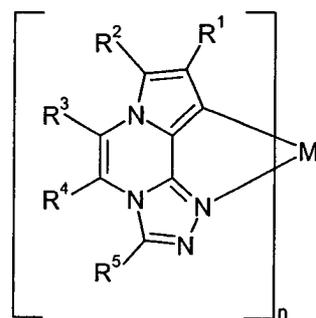
Formel (19)



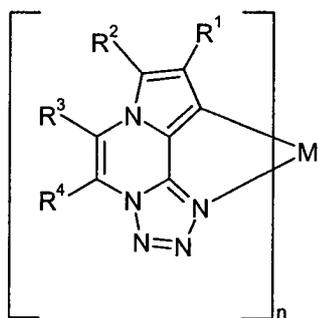
Formel (20)



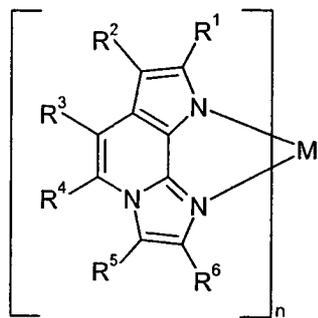
Formel (21)



Formel (22)



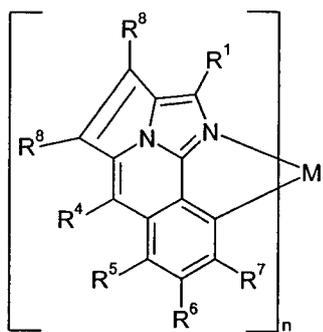
Formel (23)



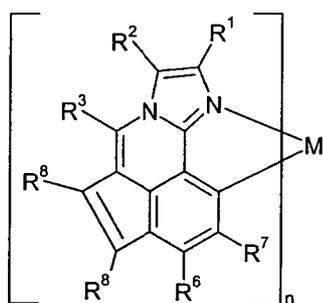
Formel (24)

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

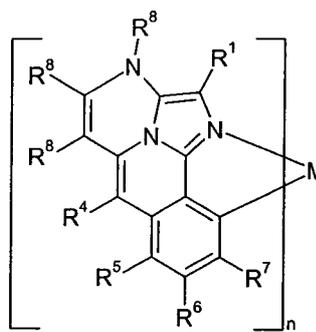
**[0025]** Weiterhin sind größere kondensierte Strukturen durch Ringbildung der Substituenten möglich. Dadurch sind beispielsweise Strukturen der folgenden Formeln (25) bis (33) erhältlich,



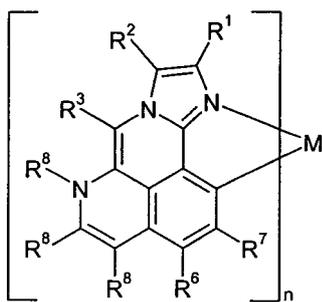
Formel (25)



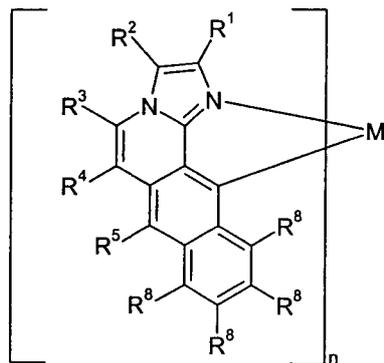
Formel (26)



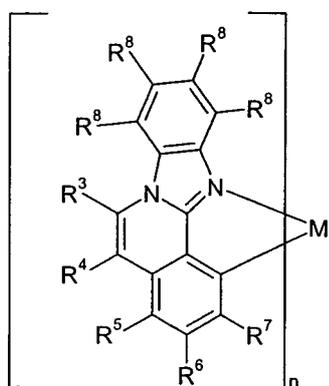
Formel (27)



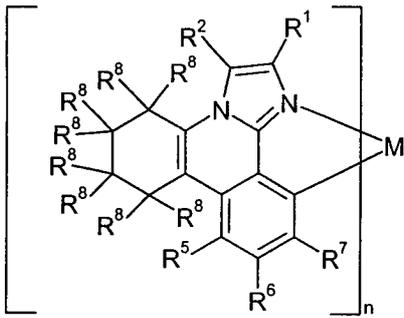
Formel (28)



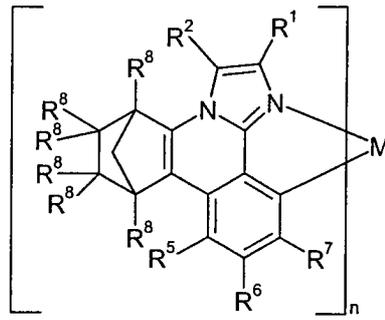
Formel (29)



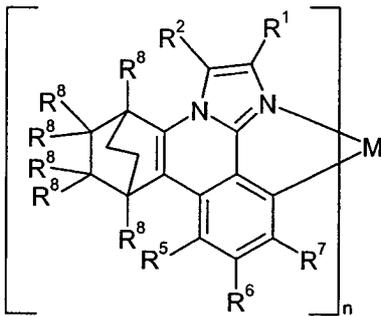
Formel (30)



Formel (31)



Formel (32)

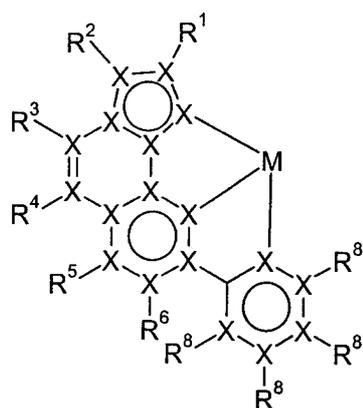


Formel (33)

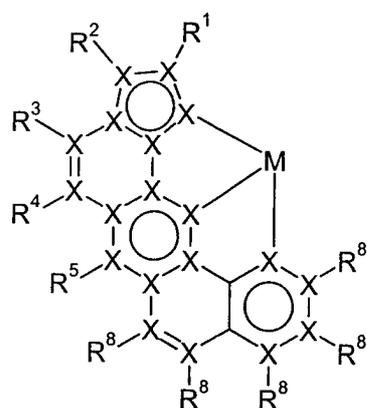
wobei die verwendeten Symbole und Indizes die oben genannten Bedeutungen haben. Dabei steht  $R^8$  in den Formeln (31) bis (33) bevorzugt für H oder eine Alkylgruppe mit 1 bis 5 C-Atomen, insbesondere für H oder Methyl.

**[0026]** Die Formeln (25) bis (33) zeigen nur exemplarisch an einem spezifischen Liganden, wie durch die Ringbildung entsprechende größere kondensierte Ringsysteme zugänglich sind. Ganz analog ist die Ringbildung mit den anderen erfindungsgemäßen Strukturen möglich, beispielsweise mit den Strukturen der Formeln (6) bis (24).

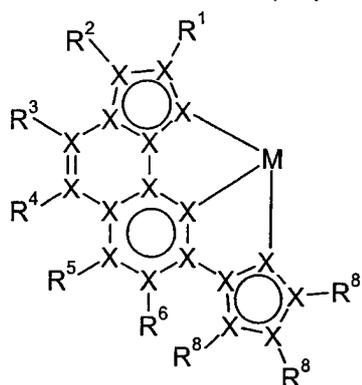
**[0027]** Weiterhin ist es möglich, dass der Substituent  $R^7$  eine koordinierende Gruppe darstellt, die ebenfalls an das Metall M koordiniert. Bevorzugte koordinierende Gruppen  $R^7$  sind Aryl- bzw. Heteroarylgruppen, beispielsweise Phenyl oder Pyridyl, Aryl- oder Alkylcyanide, Aryl- oder Alkylisocyanide, Amine oder Amide, Alkohole oder Alkoholate, Thioalkohole oder Thioalkoholate, Phosphine, Phosphite, Carbonylfunktionen, Carboxylate, Carbamide oder Aryl- oder Alkylacetylde. Hier sind beispielsweise die Teilstrukturen ML der folgenden Formeln (34) bis (41) zugänglich:



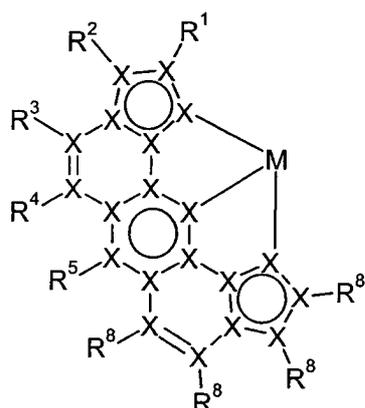
Formel (34)



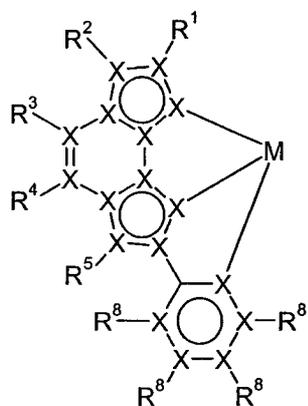
Formel (35)



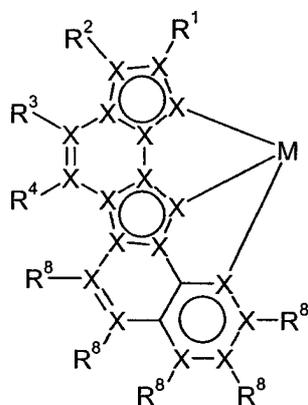
Formel (36)



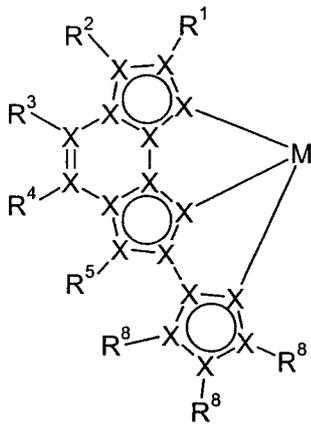
Formel (37)



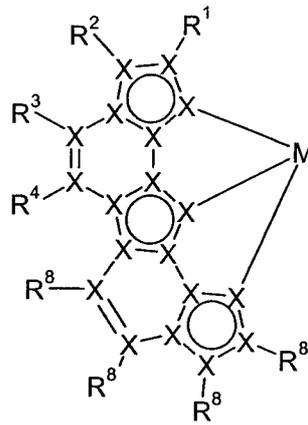
Formel (38)



Formel (39)



Formel (40)

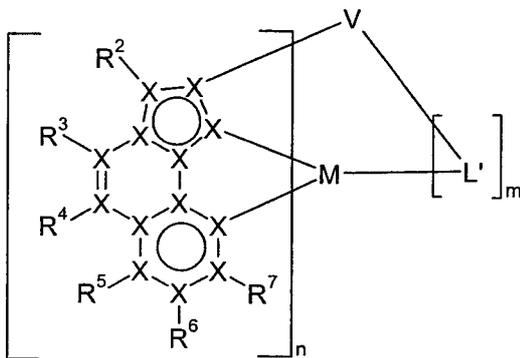


Formel (41)

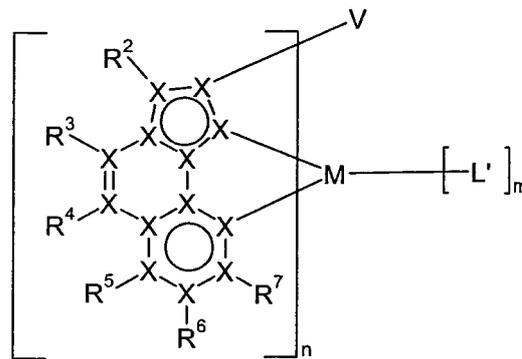
wobei die verwendeten Symbole die oben genannten Bedeutungen haben.

**[0028]** Wie oben beschrieben, kann auch statt einem der Reste R<sup>1</sup> bis R<sup>7</sup> eine verbrückende Einheit V vorhanden sein, die diesen Liganden L mit einem oder mehreren weiteren Liganden L bzw. L' verknüpft. In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung ist statt einem der Reste R<sup>1</sup> bis R<sup>7</sup>, insbesondere statt R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>6</sup> oder R<sup>7</sup>, eine verbrückende Einheit V vorhanden, so dass die Liganden dreizähligen oder mehrzähligen oder polypodalen Charakter aufweisen. Es können auch zwei solcher verbrückenden Einheiten V vorhanden sein. Dies führt zur Bildung makrocyclischer Liganden bzw. zur Bildung von Kryptaten.

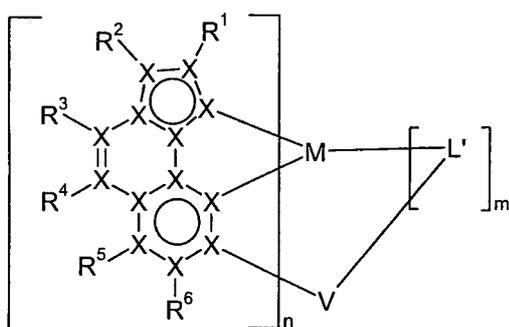
**[0029]** Bevorzugte Strukturen mit mehrzähligen Liganden bzw. mit polydentaten Liganden sind die Metallkomplexe der folgenden Formeln (42) bis (49),



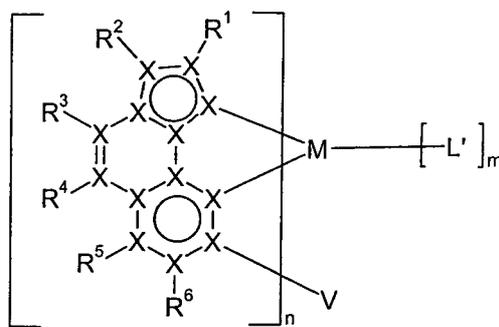
Formel (42)



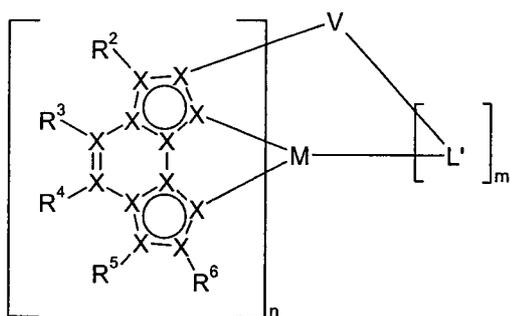
Formel (43)



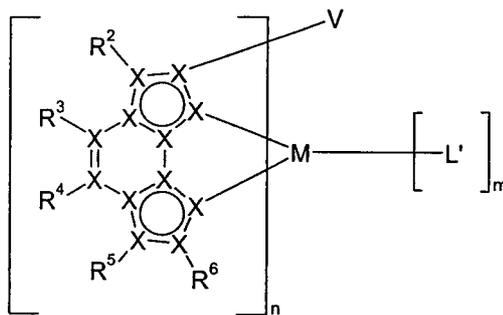
Formel (44)



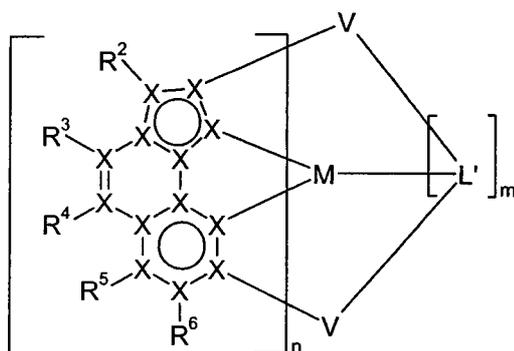
Formel (45)



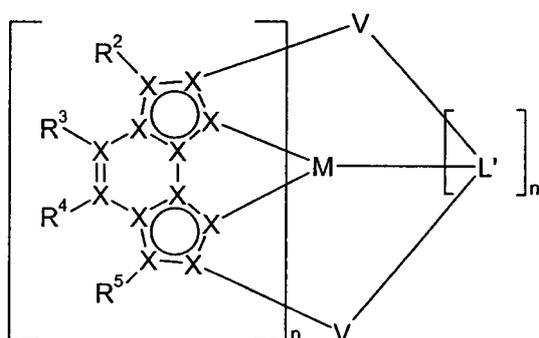
Formel (46)



Formel (47)



Formel (48)

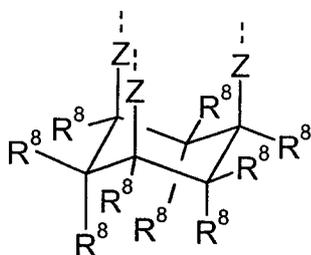


Formel (49)

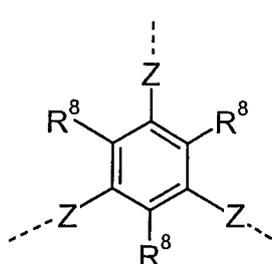
wobei die verwendeten Symbole die oben genannten Bedeutungen aufweisen und V bevorzugt eine verbrückende Einheit darstellt, enthaltend 1 bis 80 Atome aus der dritten, vierten, fünften und/oder sechsten Hauptgruppe (Gruppe 13, 14, 15 oder 16 gemäß IUPAC) oder einen 3- bis 6-gliedrigen Homo- oder Heterocyclus, die die Teilliganden L miteinander oder L mit L' miteinander kovalent verbindet. Dabei kann die verbrückende Einheit V auch unsymmetrisch aufgebaut sein, d. h. die Verknüpfung von V zu L bzw. L' muss nicht identisch sein. Die verbrückende Einheit V kann neutral, einfach, zweifach oder dreifach negativ oder einfach, zweifach oder dreifach positiv geladen sein. Bevorzugt ist V neutral oder einfach negativ oder einfach positiv geladen. Dabei wird die Ladung von V bevorzugt so gewählt, dass insgesamt ein neutraler Komplex entsteht.

**[0030]** Wenn V eine trivalente Gruppe ist, also drei Liganden L miteinander bzw. zwei Liganden L mit L' oder einen Liganden L mit zwei Liganden L' verbrückt, ist V bevorzugt gleich oder verschieden bei jedem Auftreten gewählt aus der Gruppe bestehend aus B, B(R<sup>8</sup>)<sup>-</sup>, B(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)B(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, B(O)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)B(O)<sub>3</sub><sup>-</sup>, B(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)B(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub><sup>-</sup>, B(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>O)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)B(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>O)<sub>3</sub><sup>-</sup>, B(OC(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)B(OC(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub><sup>-</sup>, C(R<sup>8</sup>)<sub>3</sub>, CO<sup>-</sup>, CN(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, (R<sup>8</sup>)C(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)C(O)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)C(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)C(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>O)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)C(Si(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)C(Si(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)C(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>Si(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)C(Si(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>Si(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, Si(R<sup>8</sup>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)Si(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)Si(O)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)Si(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)Si(OC(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)Si(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>O)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)Si(Si(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)Si(Si(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)Si(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>Si(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, N, NO, N(R<sup>8</sup>)<sup>+</sup>, N(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)N(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub><sup>+</sup>, N(C=O)<sub>3</sub>, N(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, (R<sup>8</sup>)N(C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub><sup>+</sup>, P, P(R<sup>8</sup>)<sup>+</sup>, PO, PS, PSe, PTe, P(O)<sub>3</sub>, PO(O)<sub>3</sub>, P(OC(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>,

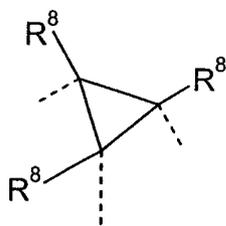
$\text{PO}(\text{OC}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{P}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{P}(\text{R}^8)(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{PO}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{P}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{P}(\text{R}^8)(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  
 $\text{PO}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{As}$ ,  $\text{As}(\text{R}^8)^+$ ,  $\text{AsO}$ ,  $\text{AsS}$ ,  $\text{AsSe}$ ,  $\text{AsTe}$ ,  $\text{As}(\text{O})_3$ ,  $\text{AsO}(\text{O})_3$ ,  $\text{As}(\text{OC}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{AsO}(\text{OC}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  
 $\text{As}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{As}(\text{R}^8)(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{AsO}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{As}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{As}(\text{R}^8)(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{AsO}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Sb}$ ,  
 $\text{Sb}(\text{R}^8)^+$ ,  $\text{SbO}$ ,  $\text{SbS}$ ,  $\text{SbSe}$ ,  $\text{SbTe}$ ,  $\text{Sb}(\text{O})_3$ ,  $\text{SbO}(\text{O})_3$ ,  $\text{Sb}(\text{OC}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{SbO}(\text{OC}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Sb}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  
 $\text{Sb}(\text{R}^8)(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{SbO}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Sb}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Sb}(\text{R}^8)(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{SbO}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Bi}$ ,  $\text{Bi}(\text{R}^8)^+$ ,  
 $\text{BiO}$ ,  $\text{BiS}$ ,  $\text{BiSe}$ ,  $\text{BiTe}$ ,  $\text{Bi}(\text{O})_3$ ,  $\text{BiO}(\text{O})_3$ ,  $\text{Bi}(\text{OC}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{BiO}(\text{OC}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Bi}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Bi}(\text{R}^8)(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{BiO}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  
 $\text{Bi}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{Bi}(\text{R}^8)(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{BiO}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3$ ,  $\text{S}^+$ ,  $\text{S}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{S}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{Se}^+$ ,  
 $\text{Se}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{Se}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{Te}^+$ ,  $\text{Te}(\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  $\text{Te}(\text{C}(\text{R}^8)_2\text{C}(\text{R}^8)_2)_3^+$ ,  
 oder eine Einheit gemäß Formel (50), (51), (52) oder (53),



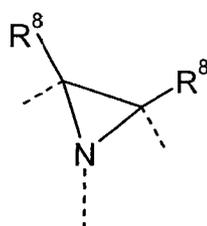
Formel (50)



Formel (51)



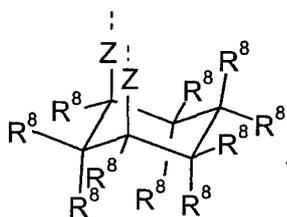
Formel (52)



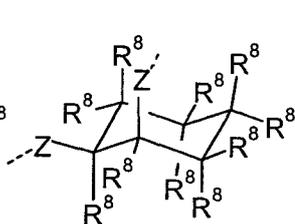
Formel (53)

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

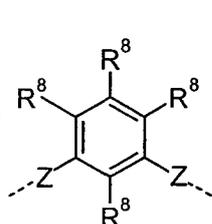
**[0031]** Wenn V eine bivalente Gruppe ist, also zwei Liganden L miteinander bzw. einen Liganden L mit L' verbrückt, ist V bevorzugt gleich oder verschieden bei jedem Auftreten gewählt aus der Gruppe bestehend aus BR<sup>8</sup>, B(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub><sup>-</sup>, C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, C(=O), Si(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, NR<sup>8</sup>, PR<sup>8</sup>, P(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub><sup>+</sup>, P(=O)(R<sup>8</sup>), P(=S)(R<sup>8</sup>), AsR<sup>8</sup>, As(=O)(R<sup>8</sup>), As(=S)(R<sup>8</sup>), O, S, Se, oder eine Einheit gemäß Formel (54) bis (63),



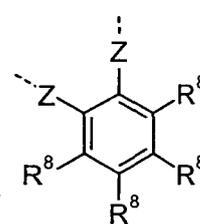
Formel (54)



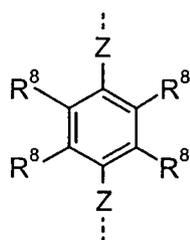
Formel (55)



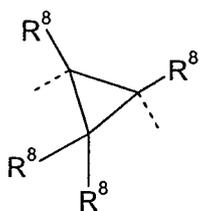
Formel (56)



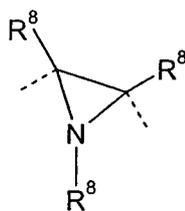
Formel (57)



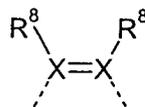
Formel (58)



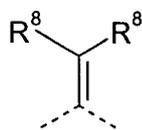
Formel (59)



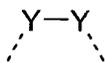
Formel (60)



Formel (61)



Formel (62)



Formel (63)

wobei die gestrichelten Bindungen jeweils die Bindung zu den Teilliganden L bzw. L' andeuten, Y bei jedem Auftreten gleich oder verschieden für  $C(R^8)_2$ ,  $N(R^8)$ , O oder S steht und die weiteren verwendeten Symbole jeweils die oben aufgeführten Bedeutungen haben.

**[0032]** Im Folgenden werden bevorzugte Liganden L' beschrieben, wie sie in Formel (1) vorkommen. Entsprechend können auch die Ligandengruppen L' gewählt sein, wenn diese über eine verbrückende Einheit V an L gebunden sind.

**[0033]** Die Liganden L' sind bevorzugt neutrale, monoanionische, dianionische oder trianionische Liganden, besonders bevorzugt neutrale oder monoanionische Liganden. Sie können monodentat, bidentat, tridentat oder tetradentat sein und sind bevorzugt bidentat, weisen also bevorzugt zwei Koordinationsstellen auf. Wie oben beschrieben, können die Liganden L' auch über eine verbrückende Gruppe V an L gebunden sein.

**[0034]** Bevorzugte neutrale, monodentate Liganden L' sind ausgewählt aus Kohlenmonoxid, Alkylcyaniden, wie z. B. Acetonitril, Arylcyaniden, wie z. B. Benzonitril, Alkylisocyaniden, wie z. B. Methylisocyanid, Arylisocyaniden, wie z. B. Benzoisocyanid, Aminen, wie z. B. Trimethylamin, Triethylamin, Morpholin, Phosphinen, insbesondere Halogenphosphine, Trialkylphosphine, Triarylphosphine oder Alkylarylphosphine, wie z. B. Trifluorphosphin, Trimethylphosphin, Tricyclohexylphosphin, Tri-tert-butylphosphin, Triphenylphosphin, Tris(pentafluorphenyl)phosphin, Phosphiten, wie z. B. Trimethylphosphit, Triethylphosphit, Arsinen, wie z. B. Trifluorarsin, Trimethylarsin, Tricyclohexylarsin, Tri-tert-butylarsin, Triphenylarsin, Tris(pentafluorphenyl)arsin, Stibinen, wie z. B. Trifluorstibin, Trimethylstibin, Tricyclohexylstibin, Tri-tert-butylstibin, Triphenylstibin, Tris(pentafluorphenyl)stibin, stickstoffhaltigen Heterocyclen, wie z. B. Pyridin, Pyridazin, Pyrazin, Pyrimidin, Triazin, und Carbenen, insbesondere Arduengo-Carbenen.

**[0035]** Bevorzugte monoanionische, monodentate Liganden L sind ausgewählt aus Hydrid, Deuterid, den Halogeniden  $F^-$ ,  $Cl^-$ ,  $Br^-$  und  $I^-$ , Alkylacetyliden, wie z. B. Methyl- $C\equiv C^-$ , tert-Butyl- $C\equiv C^-$ , Arylacetyliden, wie z. B. Phenyl- $C\equiv C^-$ , Cyanid, Cyanat, Isocyanat, Thiocyanat, Isothiocyanat, aliphatischen oder aromatischen Alkoholaten, wie z. B. Methanolat, Ethanolat, Propanolat, iso-Propanolat, tert-Butylat, Phenolat, aliphatischen oder aromatischen Thioalkoholaten, wie z. B. Methanthiolat, Ethanthiolat, Propanthiolat, iso-Propanthiolat, tert-Thiobutylat, Thiophenolat, Amidien, wie z. B. Dimethylamid, Diethylamid, Di-iso-propylamid, Morpholid, Carboxylaten, wie z. B. Acetat, Trifluoracetat, Propionat, Benzoat, Arylgruppen, wie z. B. Phenyl, Naphthyl, und anionischen, stickstoffhaltigen Heterocyclen, wie Pyrrolid, Imidazolid, Pyrazolid. Dabei sind die Alkylgruppen in diesen Gruppen bevorzugt  $C_1$ - $C_{20}$ -Alkylgruppen, besonders bevorzugt  $C_1$ - $C_{10}$ -Alkylgruppen, ganz besonders bevorzugt  $C_1$ - $C_4$ -Alkylgruppen. Unter einer Arylgruppe werden auch Heteroarylgruppen verstanden. Diese Gruppen sind wie oben definiert.

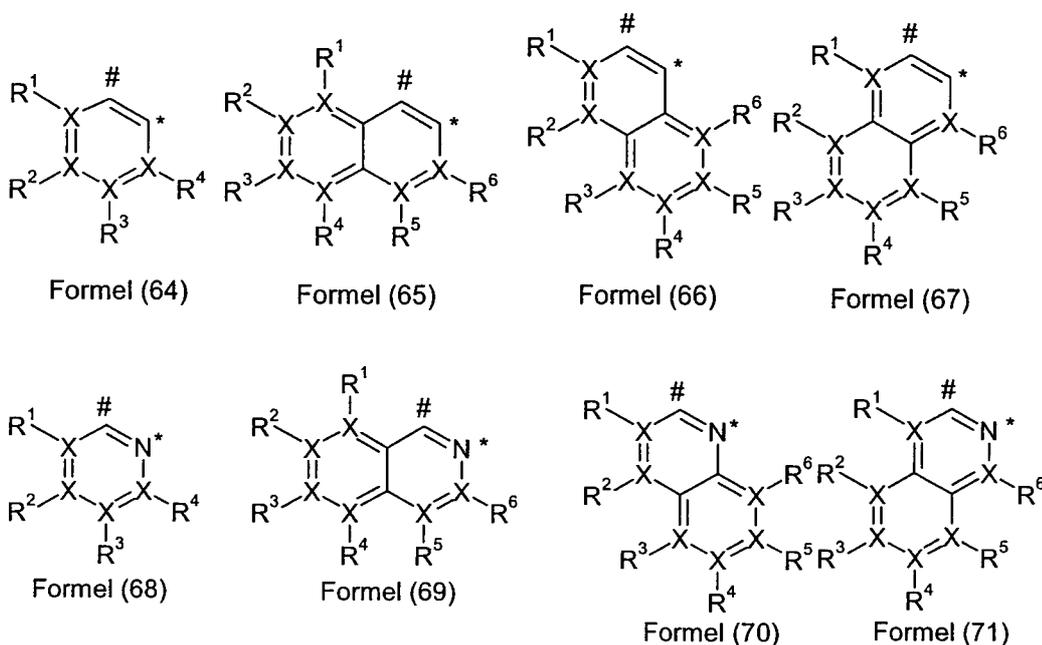
**[0036]** Bevorzugte di- bzw. trianionische Liganden sind  $O^{2-}$ ,  $S^{2-}$ , Carbide, welche zu einer Koordination der Form  $R-C\equiv M$  führen, und Nitrene, welche zu einer Koordination der Form  $R-N=M$  führen, wobei R allgemein für einen Substituenten steht, oder  $N^{3-}$ .

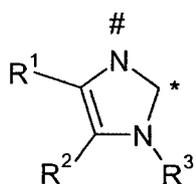
**[0037]** Bevorzugte neutrale oder mono- oder dianionische, bidentate oder höherdentate Liganden L' sind ausgewählt aus Diaminen, wie z. B. Ethylendiamin, N,N,N',N'-Tetramethylethylendiamin, Propylendiamin, N,N,N',N'-Tetramethylpropylendiamin, cis- oder trans-Diaminocyclohexan, cis- oder trans-N,N,N',N'-Tetrame-

thylidiaminocyclohexan, Iminen, wie z. B. 2[(1-(Phenylimino)ethyl]pyridin, 2[(1-(2-Methylphenylimino)ethyl]pyridin, 2[(1-(2,6-Di-/so-propylphenylimino)ethyl]pyridin, 2[(1-(Methylimino)ethyl]pyridin, 2[(1-(ethylimino)ethyl]pyridin, 2[(1-(Iso-Propylimino)ethyl]pyridin, 2[(1-(Tert-Butylimino)ethyl]pyridin, Diminen, wie z. B. 1,2-Bis(methylimino)ethan, 1,2-Bis(ethylimino)ethan, 1,2-Bis(iso-propylimino)ethan, 1,2-Bis(tert-butylimino)ethan, 2,3-Bis(methylimino)butan, 2,3-Bis(ethylimino)butan, 2,3-Bis(iso-propylimino)butan, 2,3-Bis(tert-butylimino)butan, 1,2-Bis(phenylimino)ethan, 1,2-Bis(2-methylphenylimino)ethan, 1,2-Bis(2,6-di-iso-propylphenylimino)ethan, 1,2-Bis(2,6-di-tert-butylphenylimino)ethan, 2,3-Bis(phenylimino)butan, 2,3-Bis(2-methylphenylimino)butan, 2,3-Bis(2,6-di-iso-propylphenylimino)butan, 2,3-Bis(2,6-di-tert-butylphenylimino)butan, Heterocyclen enthaltend zwei Stickstoffatome, wie z. B. 2,2'-Bipyridin, o-Phenanthrolin, Diphosphinen, wie z. B. Bis-diphenylphosphinomethan, Bis-diphenylphosphinoethan, Bis(diphenylphosphino)propan, Bis(diphenylphosphino)butan, Bis(dimethylphosphino)methan, Bis(dimethylphosphino)ethan, Bis(dimethylphosphino)propan, Bis(diethylphosphino)methan, Bis(diethylphosphino)ethan, Bis(diethylphosphino)propan, Bis(di-tert-butylphosphino)methan, Bis(di-tert-butylphosphino)ethan, Bis(tert-butylphosphino)propan, 1,3-Diketonaten abgeleitet von 1,3-Diketonen, wie z. B. Acetylaceton, Benzoylaceton, 1,5-Diphenylacetylaceton, Dibenzoylmethan, Bis(1,1,1-trifluoracetyl)methan, 3-Ketonaten abgeleitet von 3-Ketoestern, wie z. B. Acetessigsäureethylester, Carboxylate, abgeleitet von Aminocarbonsäuren, wie z. B. Pyridin-2-carbonsäure, Chinolin-2-carbonsäure, Glycin, N,N-Dimethylglycin, Alanin, N,N-Dimethylaminoalanin, Salicyliminaten abgeleitet von Salicyliminen, wie z. B. Methylsalicylimin, Ethylsalicylimin, Phenylsalicylimin, Dialkoholaten abgeleitet von Dialkoholen, wie z. B. Ethylenglykol, 1,3-Propylenglykol und Dithiolaten abgeleitet von Dithiolen, wie z. B. 1,2-Ethylendithiol, 1,3-Propylendithiol.

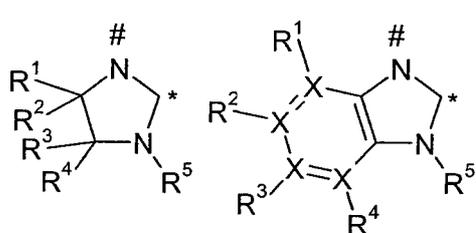
**[0038]** Bevorzugte tridentate Liganden sind Borste stickstoffhaltiger Heterocyclen, wie z. B. Tetrakis(1-imidazolyl)borat und Tetrakis(1-pyrazolyl)borat.

**[0039]** Bevorzugt sind weiterhin bidentate monoanionische Liganden L', welche mit dem Metall einen cyclometallierten Fünfring oder Sechsring mit mindestens einer Metall-Kohlenstoff-Bindung aufweisen, insbesondere einen cyclometallierten Fünfring. Dies sind insbesondere Liganden, wie sie allgemein im Gebiet der phosphoreszierenden Metallkomplexe für organische Elektrolumineszenzvorrichtungen verwendet werden, also Liganden vom Typ Phenylpyridin, Naphthylpyridin, Phenylchinolin, Phenylisochinolin, etc., welche jeweils durch einen oder mehrere Reste R<sup>1</sup> bis R<sup>7</sup> substituiert sein können. Dem Fachmann auf dem Gebiet der phosphoreszierenden Elektrolumineszenzvorrichtungen ist eine Vielzahl derartiger Liganden bekannt, und er kann ohne erfinderisches Zutun weitere derartige Liganden als Ligand L' für Verbindungen gemäß Formel (1) auswählen. Generell eignet sich dafür besonders die Kombination aus zwei Gruppen, wie sie durch die folgenden Formeln (64) bis (91) dargestellt sind, wobei eine Gruppe über ein neutrales Stickstoffatom oder ein Carbenatom bindet und die andere Gruppe über ein negativ geladenes Kohlenstoffatom oder ein negativ geladenes Stickstoffatom bindet. Der Ligand L' kann dann aus den Gruppen der Formeln (64) bis (91) gebildet werden, indem diese Gruppen jeweils an der durch # gekennzeichneten Position aneinander binden. Die Position, an der die Gruppen an das Metall koordinieren, sind durch \* gekennzeichnet. Diese Gruppen können auch über eine oder zwei verbrückende Einheiten V an den Liganden L gebunden sein.

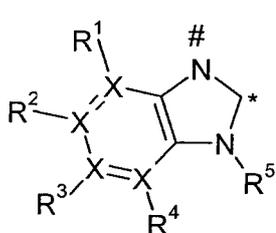




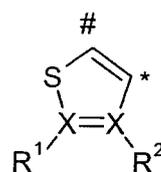
Formel (72)



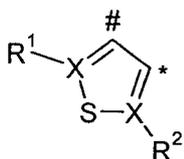
Formel (73)



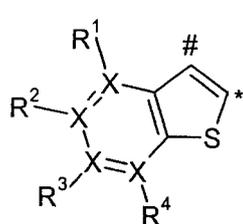
Formel (74)



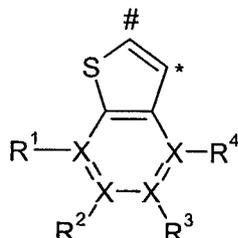
Formel (75)



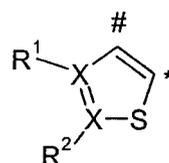
Formel (76)



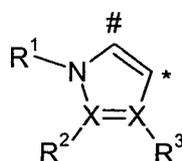
Formel (77)



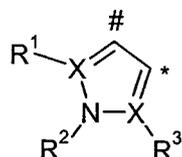
Formel (78)



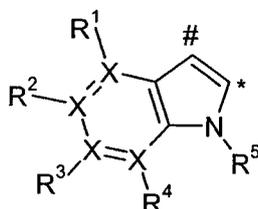
Formel (79)



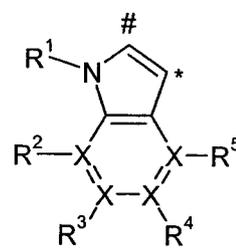
Formel (80)



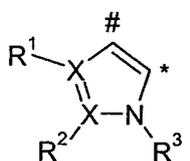
Formel (81)



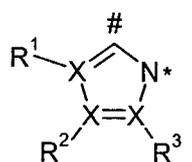
Formel (82)



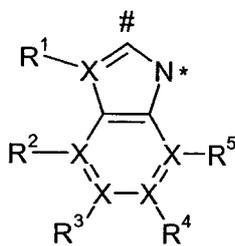
Formel (83)



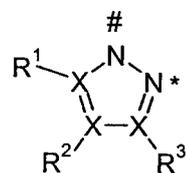
Formel (84)



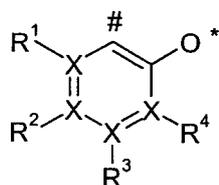
Formel (85)



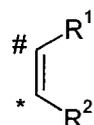
Formel (86)



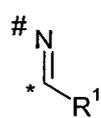
Formel (87)



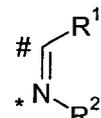
Formel (88)



Formel (89)



Formel (90)

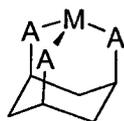


Formel (91)

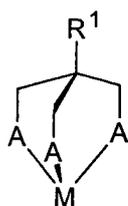
**[0040]** Dabei haben die verwendeten Symbole dieselbe Bedeutung wie oben beschrieben, und bevorzugt stehen maximal drei Symbole X in jeder Gruppe für N, besonders bevorzugt stehen maximal zwei Symbole X in jeder Gruppe für N, ganz besonders bevorzugt steht maximal ein Symbol X in jeder Gruppe für N. Insbesondere bevorzugt stehen alle Symbole X für C.

**[0041]** Ebenfalls bevorzugte Liganden L' sind  $\eta^5$ -Cyclopentadienyl,  $\eta^5$ -Pentamethylcyclopentadienyl,  $\eta^8$ -Benzol oder  $\eta^7$ -Cycloheptatrienyl, welche jeweils durch einen oder mehrere Reste R<sup>1</sup> substituiert sein können.

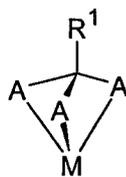
**[0042]** Ebenfalls bevorzugte Liganden L' sind 1,3,5-cis-Cyclohexanderivate, insbesondere der Formel (92), 1,1,1-Tri(methylen)methanderivate, insbesondere der Formel (93) und 1,1,1-trisubstituierte Methane, insbesondere der Formel (94) und (95),



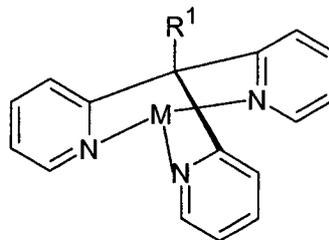
Formel (92)



Formel (93)



Formel (94)



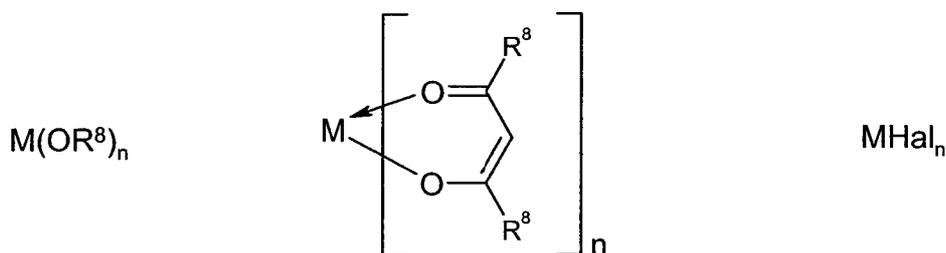
Formel (95)

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

**[0043]** Bevorzugte Reste  $R^1$  bis  $R^7$  in den oben aufgeführten Strukturen der Formeln (2) bis (49) und (64) bis (95) sind bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, D, F, Br,  $N(R^8)_2$ , CN,  $B(OR^8)_2$ ,  $C(=O)R^8$ ,  $P(=O)(R^8)_2$ , einer geradkettige Alkylgruppe mit 1 bis 10 C-Atomen oder einer geradkettige Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 10 C-Atomen oder einer verzweigten oder cyclischen Alkyl-, Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 3 bis 10 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^8$  substituiert sein kann, wobei ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 14 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^8$  substituiert sein kann; dabei können  $R^1$  und  $R^2$  und/oder  $R^2$  und  $R^3$  und/oder  $R^4$  und  $R^5$  und/oder  $R^5$  und  $R^6$  und/oder  $R^6$  und  $R^7$  auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden; weiterhin können  $R^3$  und  $R^4$  miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden. Besonders bevorzugte Reste  $R^1$  bis  $R^7$  sind bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, F, Br, CN,  $B(OR^8)_2$ , einer geradkettige Alkylgruppe mit 1 bis 50 C-Atomen, insbesondere Methyl, oder einer verzweigten oder cyclischen Alkylgruppe mit 3 bis 5 C-Atomen, insbesondere iso-Propyl oder tert-Butyl, wobei ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 12 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^8$  substituiert sein kann; dabei können  $R^1$  und  $R^2$  und/oder  $R^2$  und  $R^3$  und/oder  $R^4$  und  $R^5$  und/oder  $R^5$  und  $R^6$  und/oder  $R^6$  und  $R^7$  auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden; weiterhin können  $R^3$  und  $R^4$  miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden.

**[0044]** Die erfindungsgemäßen Metallkomplexe sind prinzipiell durch verschiedene Verfahren darstellbar. Es haben sich jedoch die im Folgenden beschriebenen Verfahren als besonders geeignet herausgestellt.

**[0045]** Daher ist ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ein Verfahren zur Herstellung der Metallkomplex-Verbindungen gemäß Formel (1) durch Umsetzung der entsprechenden freien Liganden mit Metallalkoholaten der Formel (96), mit Metallketoketonaten der Formel (97) oder mit Metallhalogeniden der Formel (98),



Formel (96)

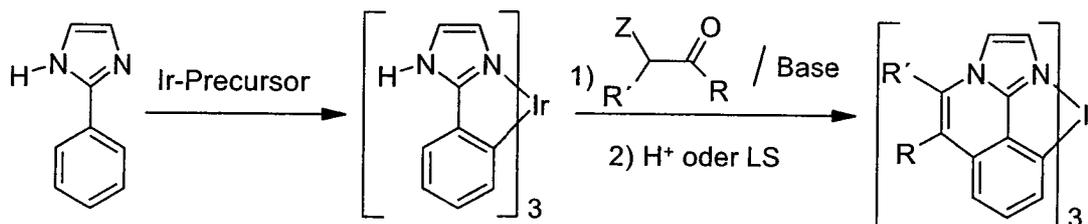
Formel (97)

Formel (98)

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

**[0046]** Es können ebenfalls Metallverbindungen, insbesondere Iridiumverbindungen, die sowohl Alkoholat- und/oder Halogenid- und/oder Hydroxy- wie auch Ketoketonatreste tragen, verwendet werden. Diese Verbindungen können auch geladen sein. Entsprechende Iridiumverbindungen, die als Edukte besonders geeignet sind, sind in WO 04/085449 offenbart. Besonders geeignet ist  $[IrCl_2(acac)_2]^-$ , beispielsweise  $Na[IrCl_2(acac)_2]$ .

**[0047]** Weiterhin ist es möglich, zunächst eine Vorstufe des Metallkomplexes darzustellen und in einem weiteren Schritt die Brücke zwischen den beiden koordinierenden Aryl- bzw. Heteroarylringen einzuführen. Dies ist exemplarisch für einen Komplex im folgenden Schema gezeigt:

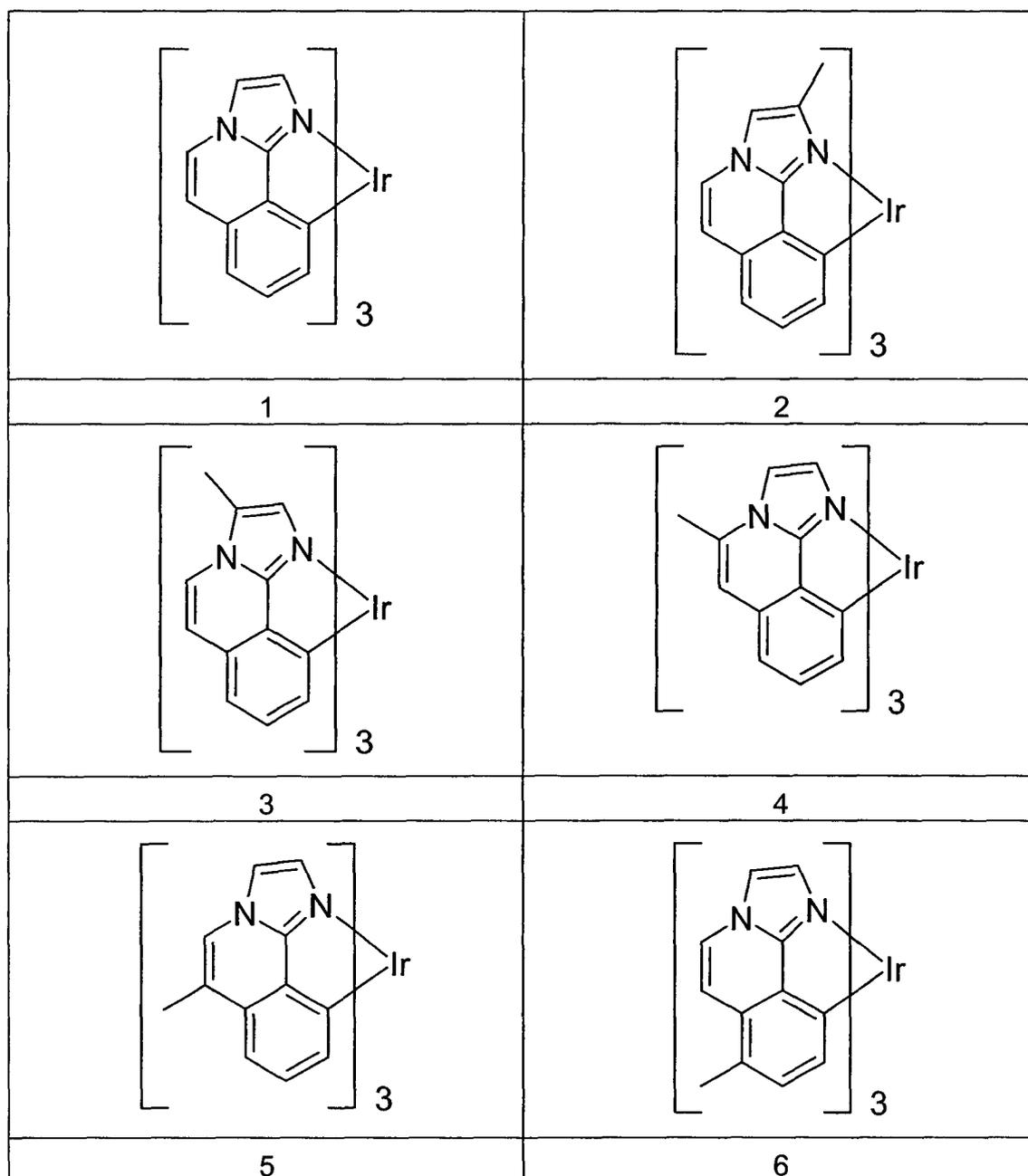


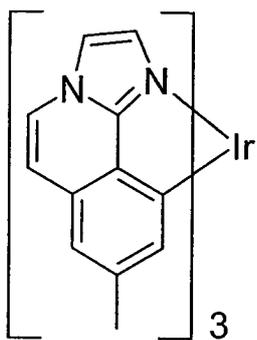
R, R' = Reste, wie definiert  
 Z = Cl, Br, I, OMe, O(F<sub>3</sub>Mes), OTos,  
 LS = Lewis-Säure wie BZ<sub>3</sub>, AlZ<sub>3</sub>

**[0048]** Die Synthese der Komplexe wird bevorzugt durchgeführt wie in WO 02/060910 und in WO 04/085449 beschrieben. Heteroleptische Komplexe können beispielsweise auch gemäß WO 05/042548 synthetisiert werden. Dabei kann die Synthese beispielsweise auch thermisch, photochemisch und/oder durch Mikrowellenstrahlung aktiviert werden.

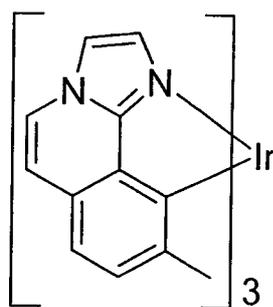
**[0049]** Durch diese Verfahren lassen sich die erfindungsgemäßen Verbindungen gemäß Formel (1) in hoher Reinheit, bevorzugt mehr als 99% (bestimmt mittels <sup>1</sup>H-NMR und/oder HPLC) erhalten.

**[0050]** Mit den hier erläuterten Synthesemethoden lassen sich unter anderem die im Folgenden dargestellten erfindungsgemäßen Strukturen 1 bis 351 herstellen.

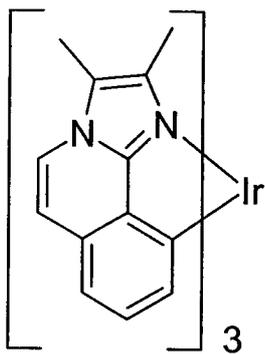




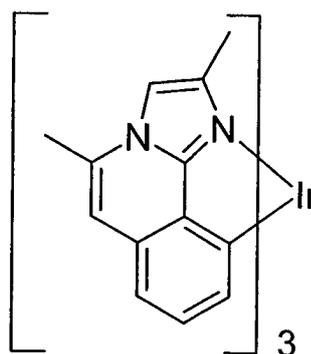
7



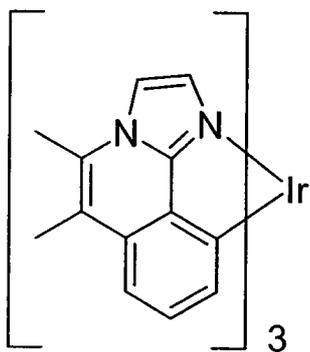
8



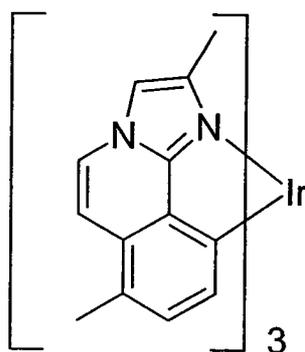
9



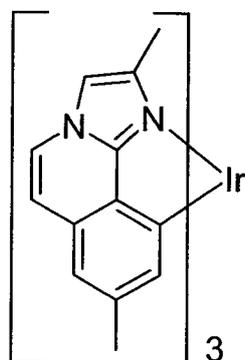
10



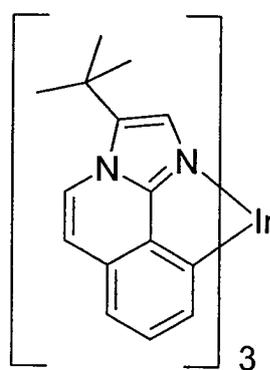
11



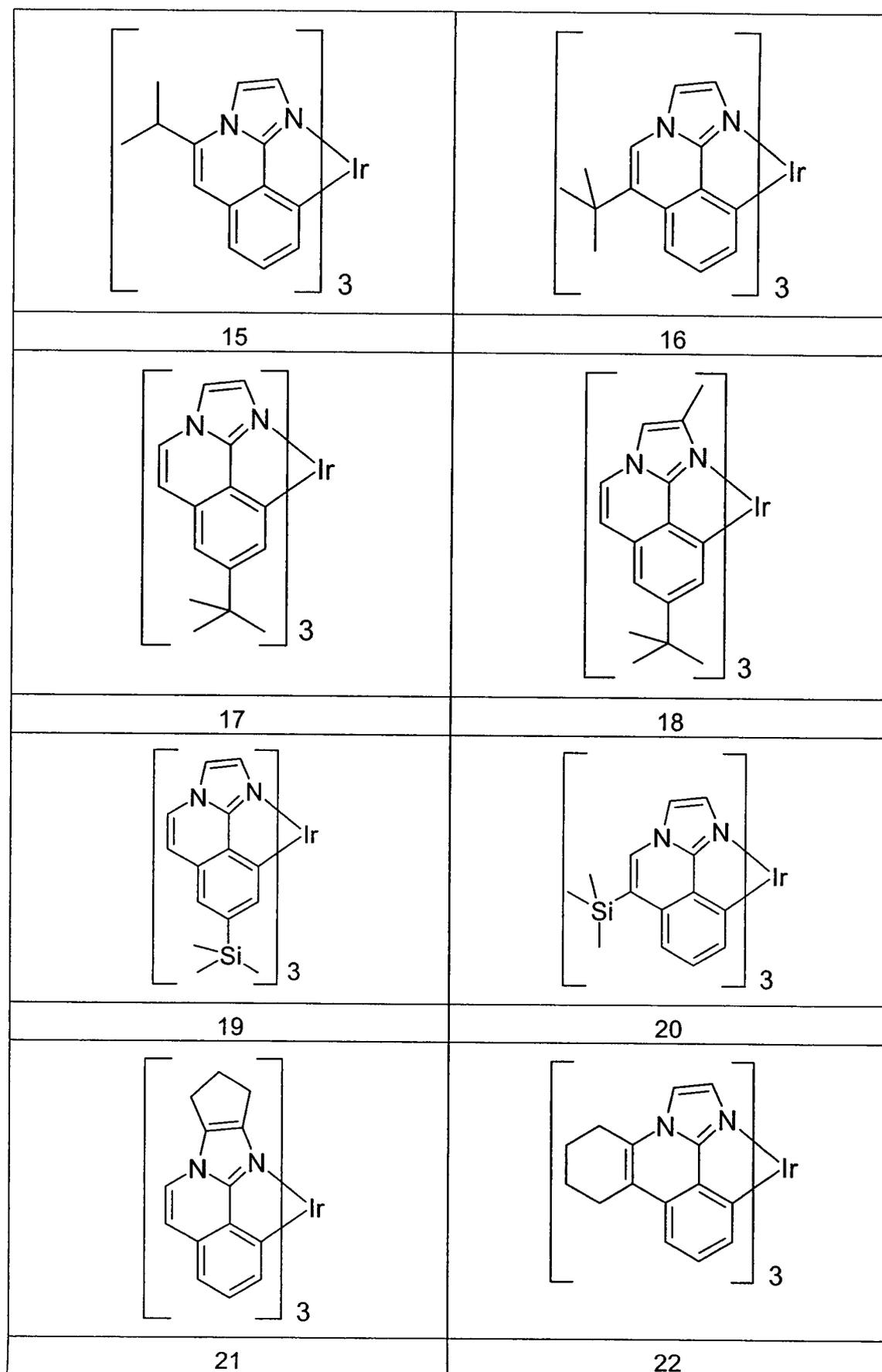
12

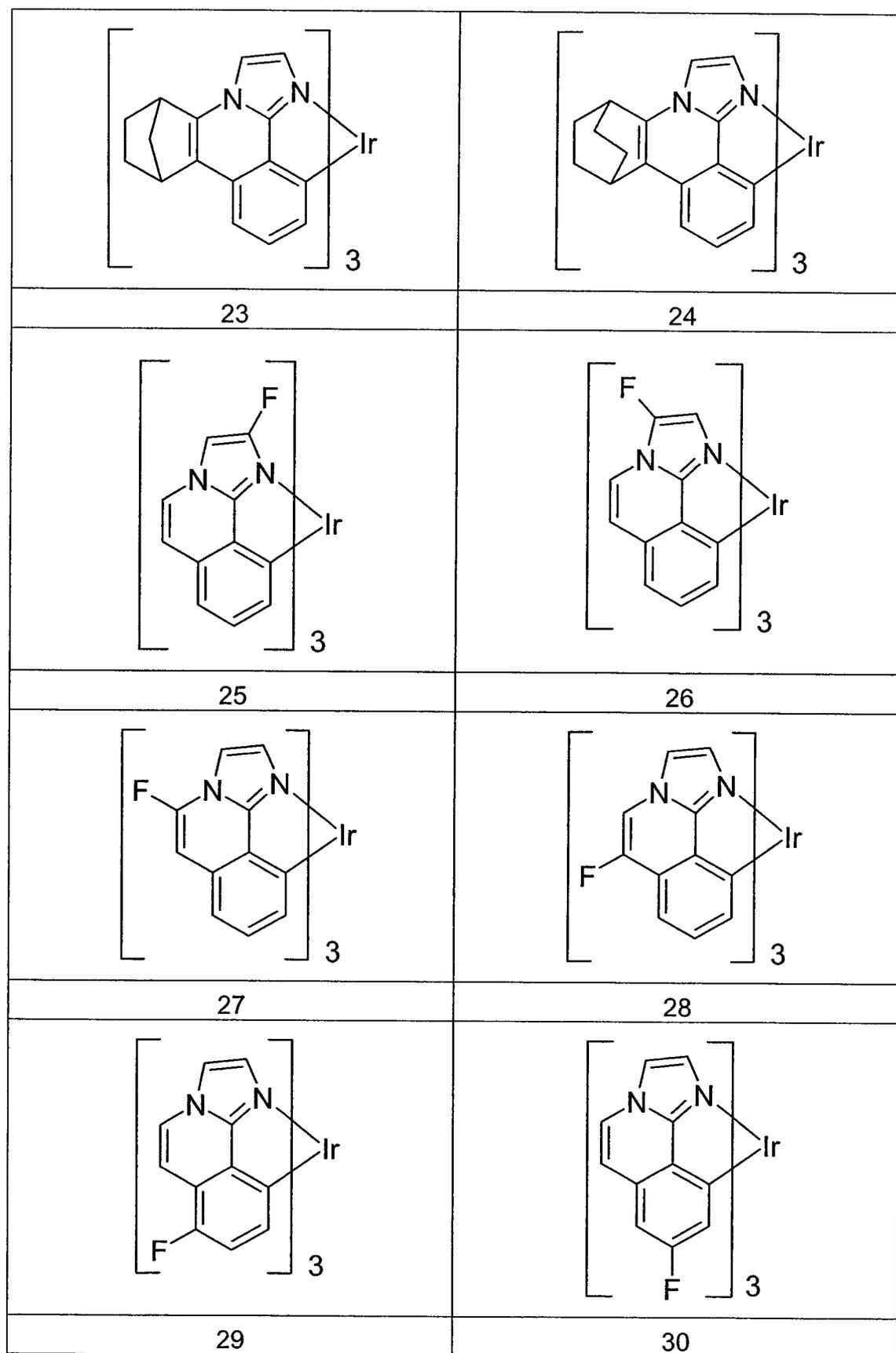


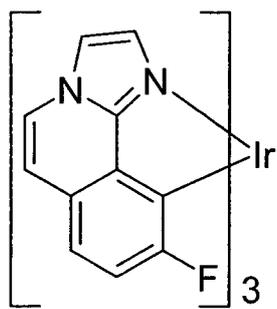
13



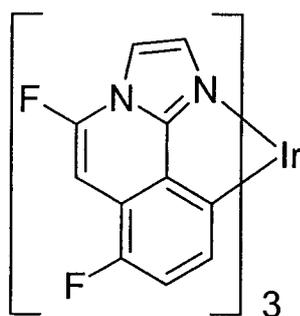
14



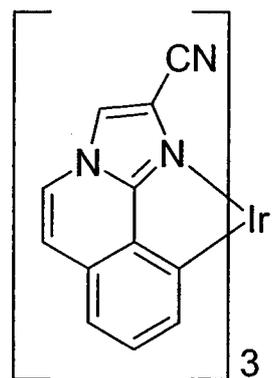




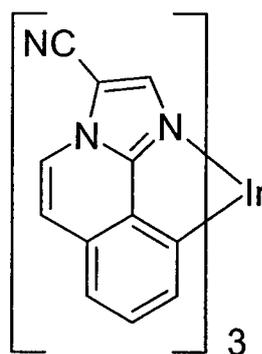
31



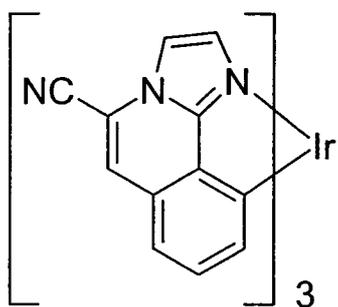
32



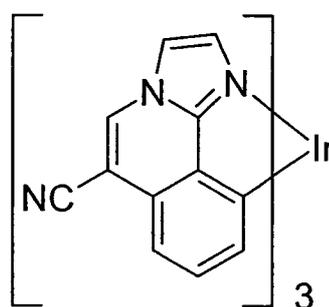
33



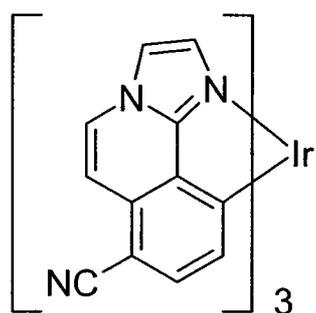
34



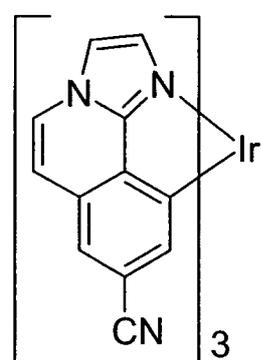
35



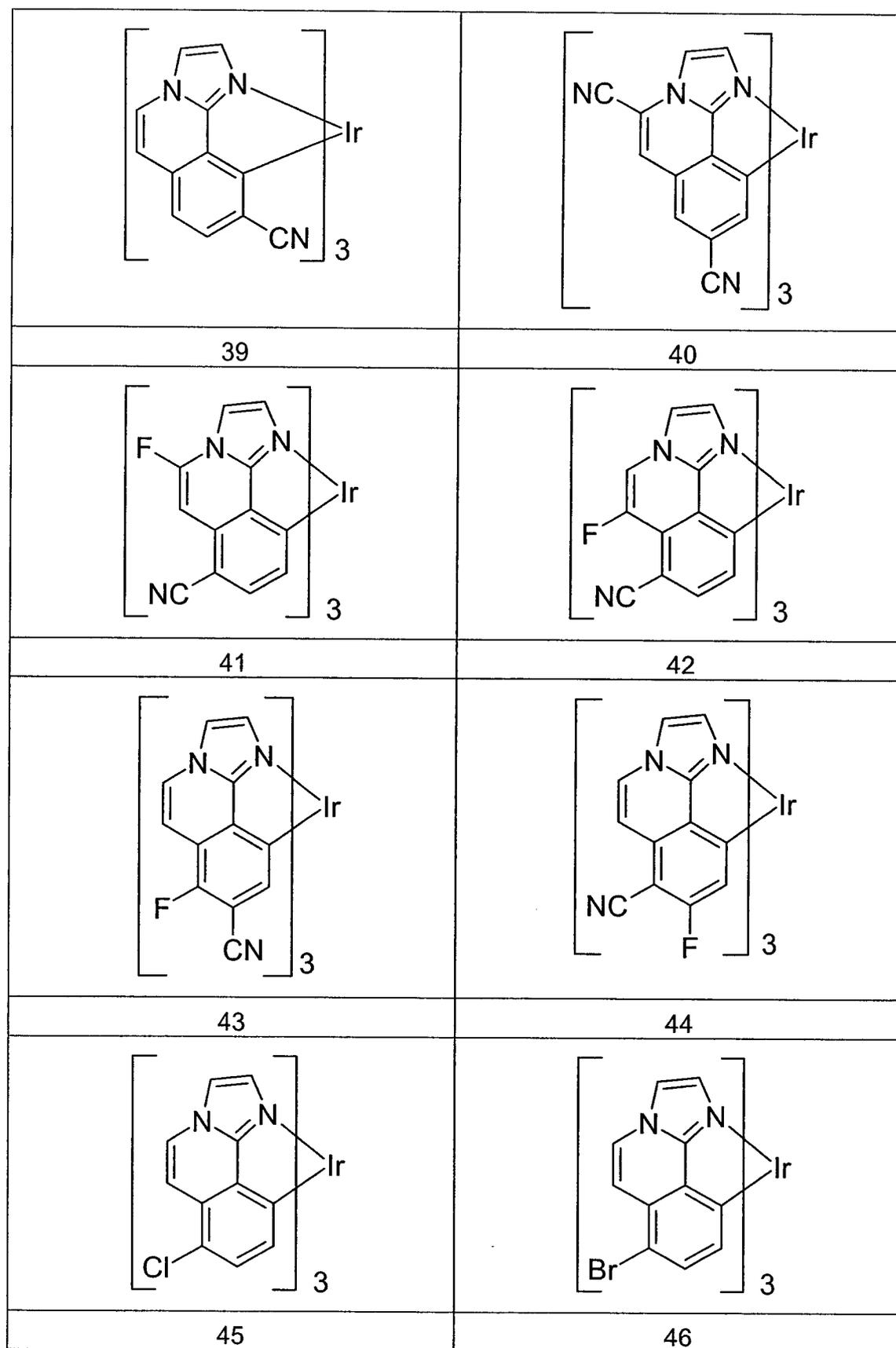
36

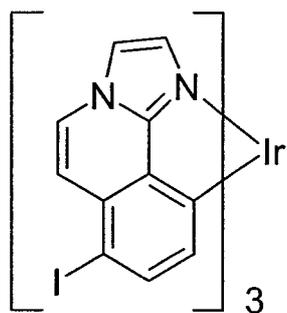


37

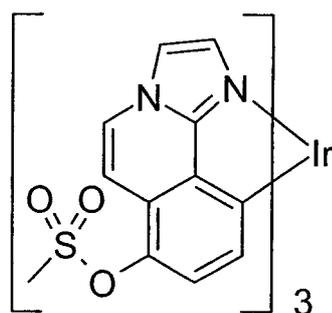


38

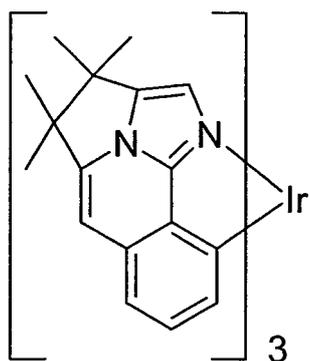




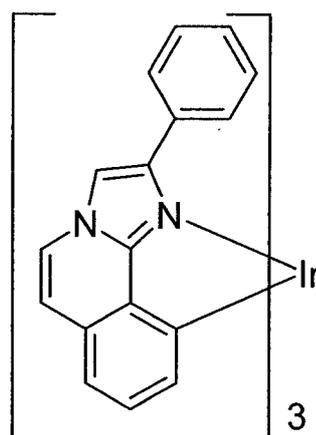
47



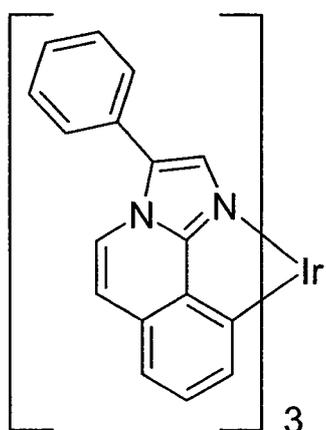
48



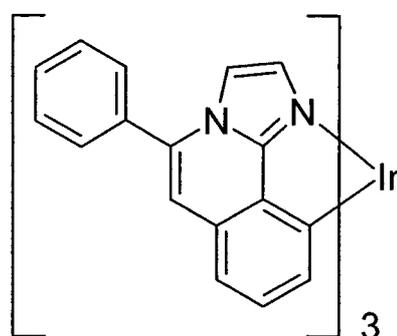
49



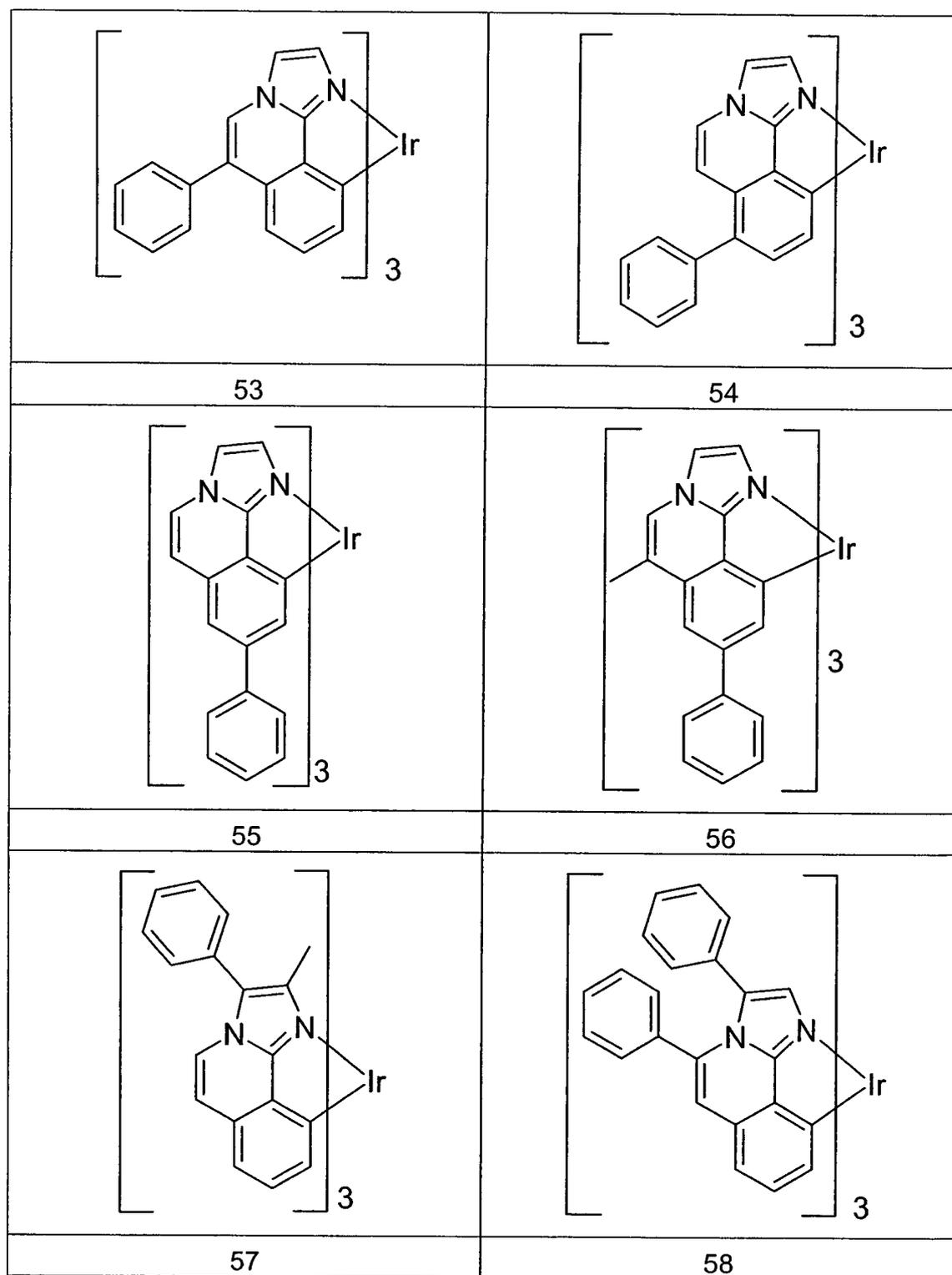
50

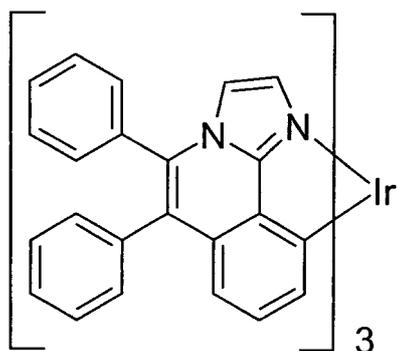


51

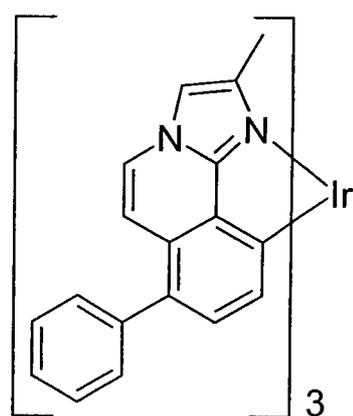


52

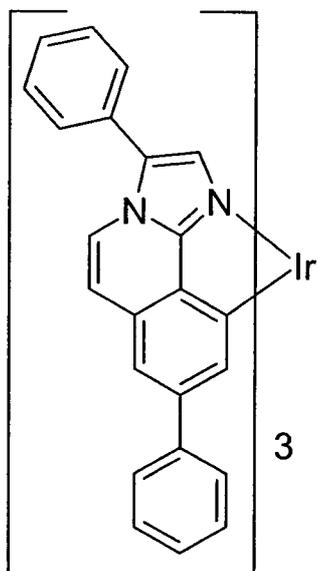




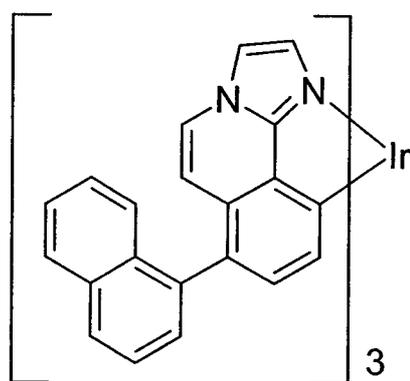
59



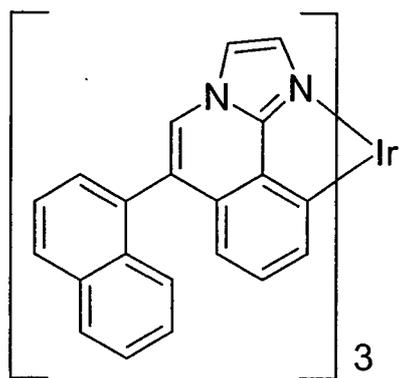
60



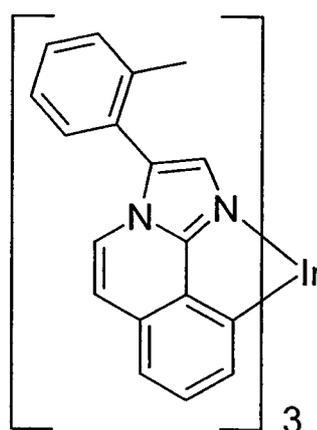
61



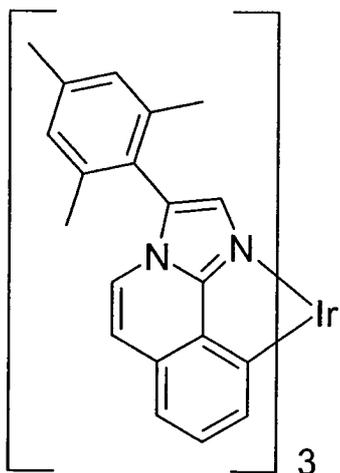
62



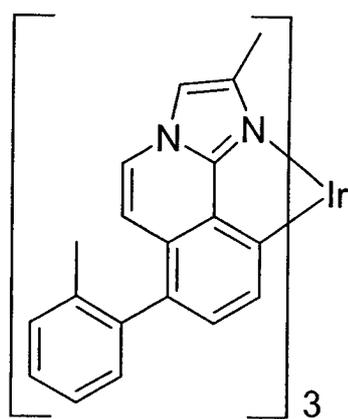
63



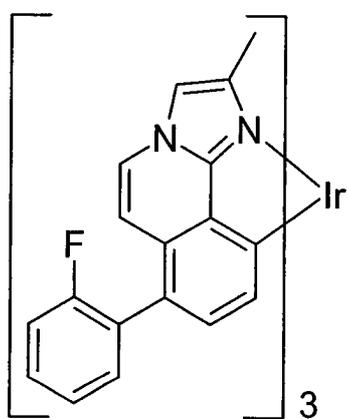
64



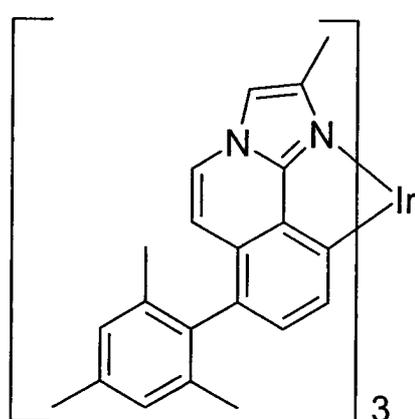
65



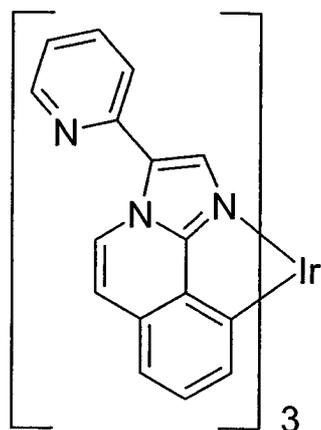
66



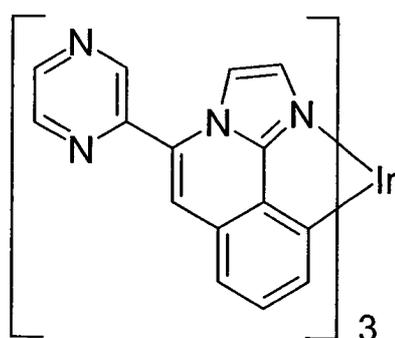
67



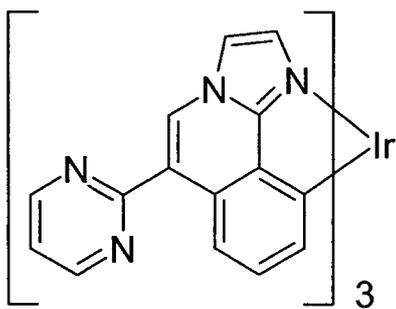
68



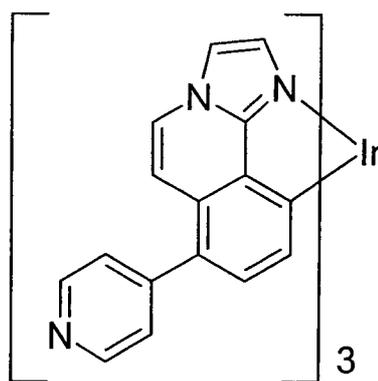
69



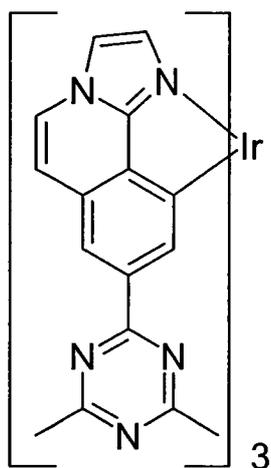
70



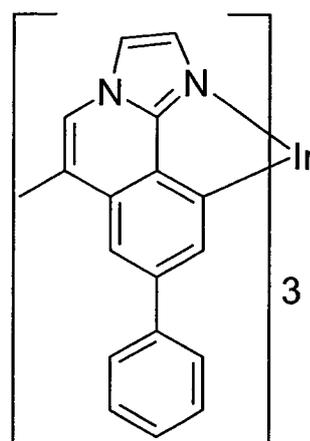
71



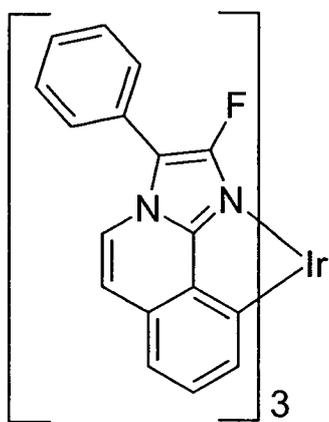
72



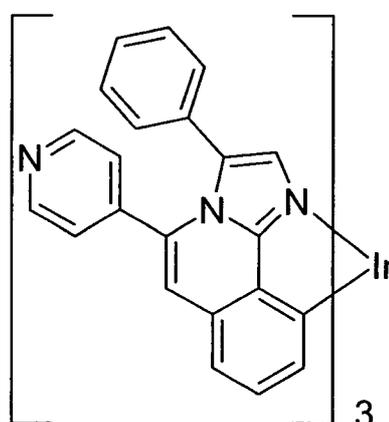
73



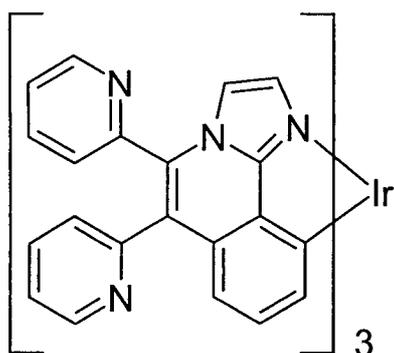
74



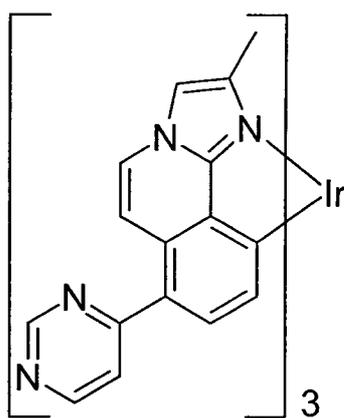
75



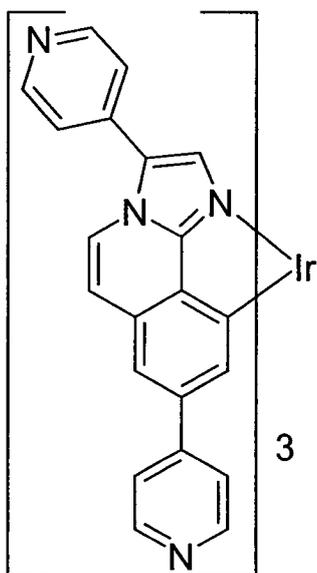
76



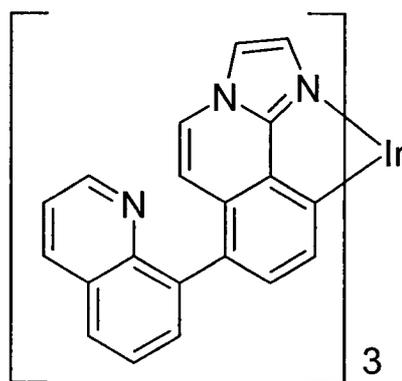
77



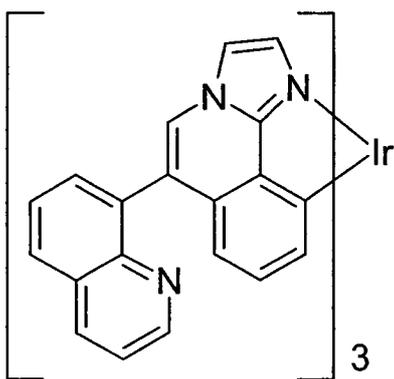
78



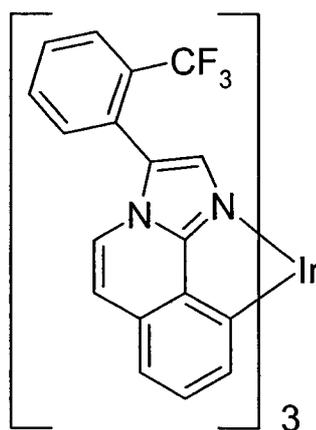
79



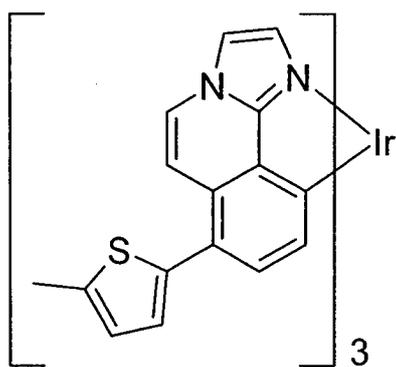
80



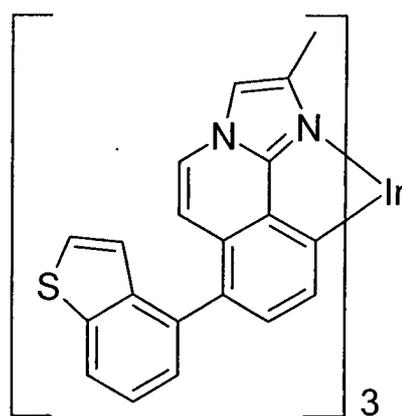
81



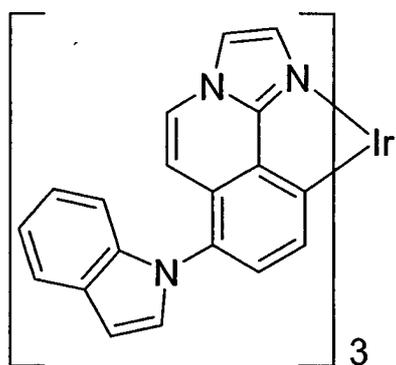
82



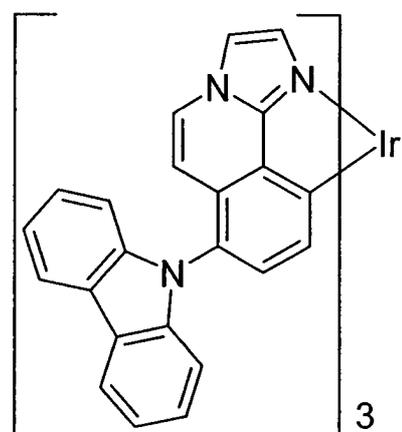
83



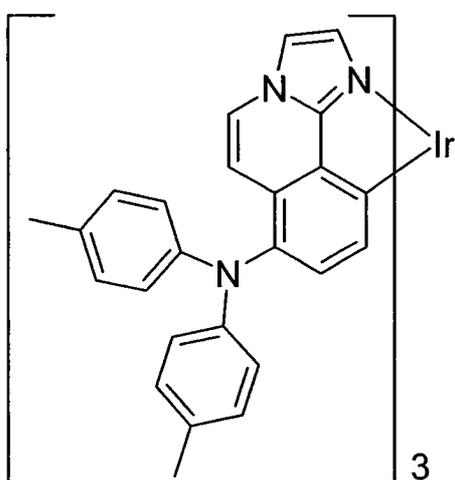
84



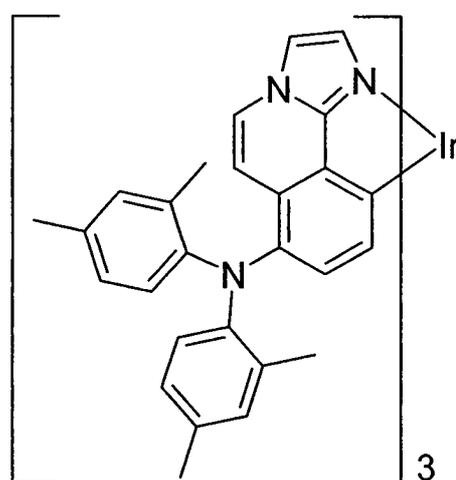
85



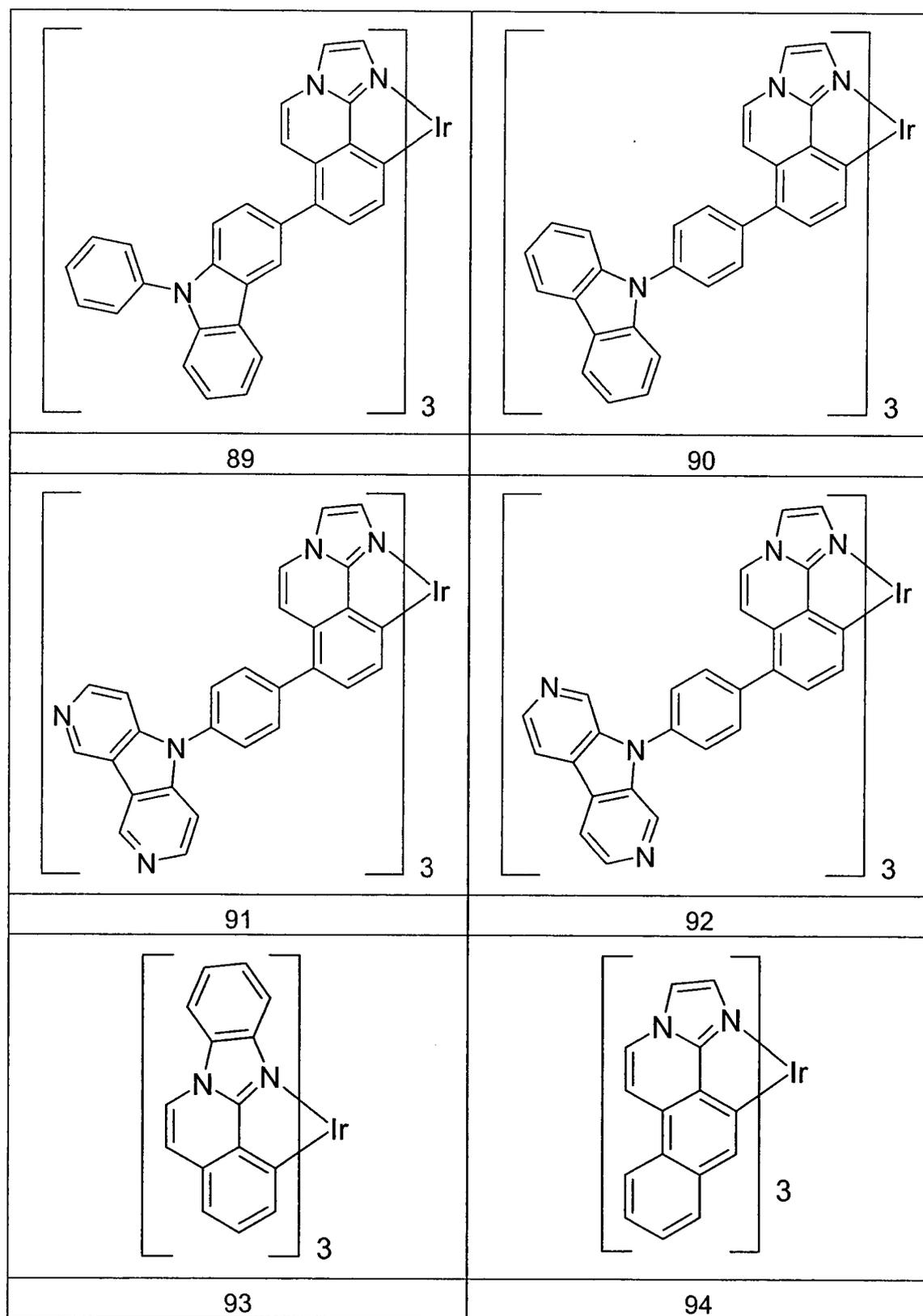
86

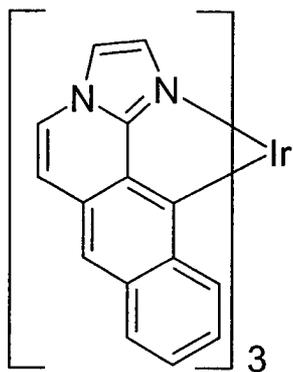


87

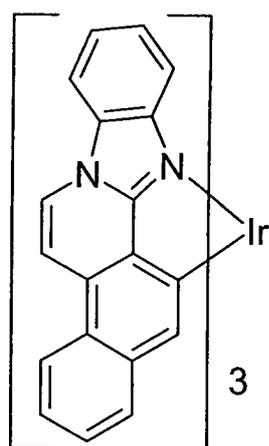


88

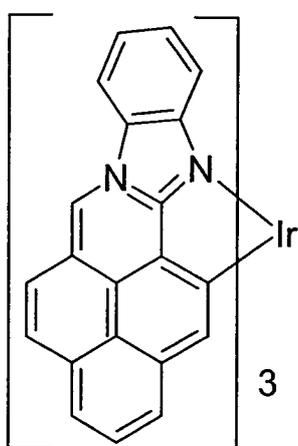




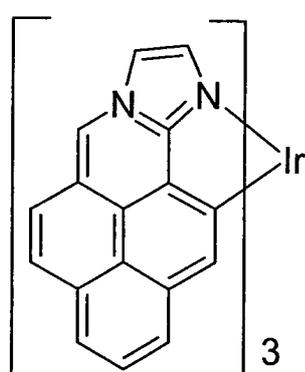
95



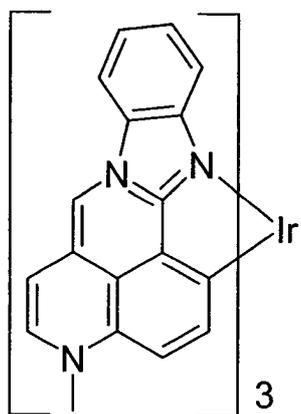
96



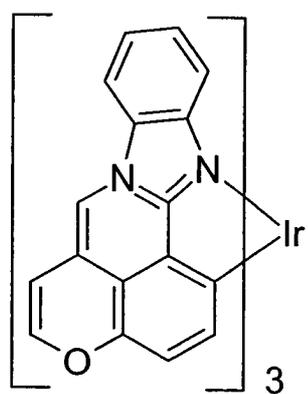
97



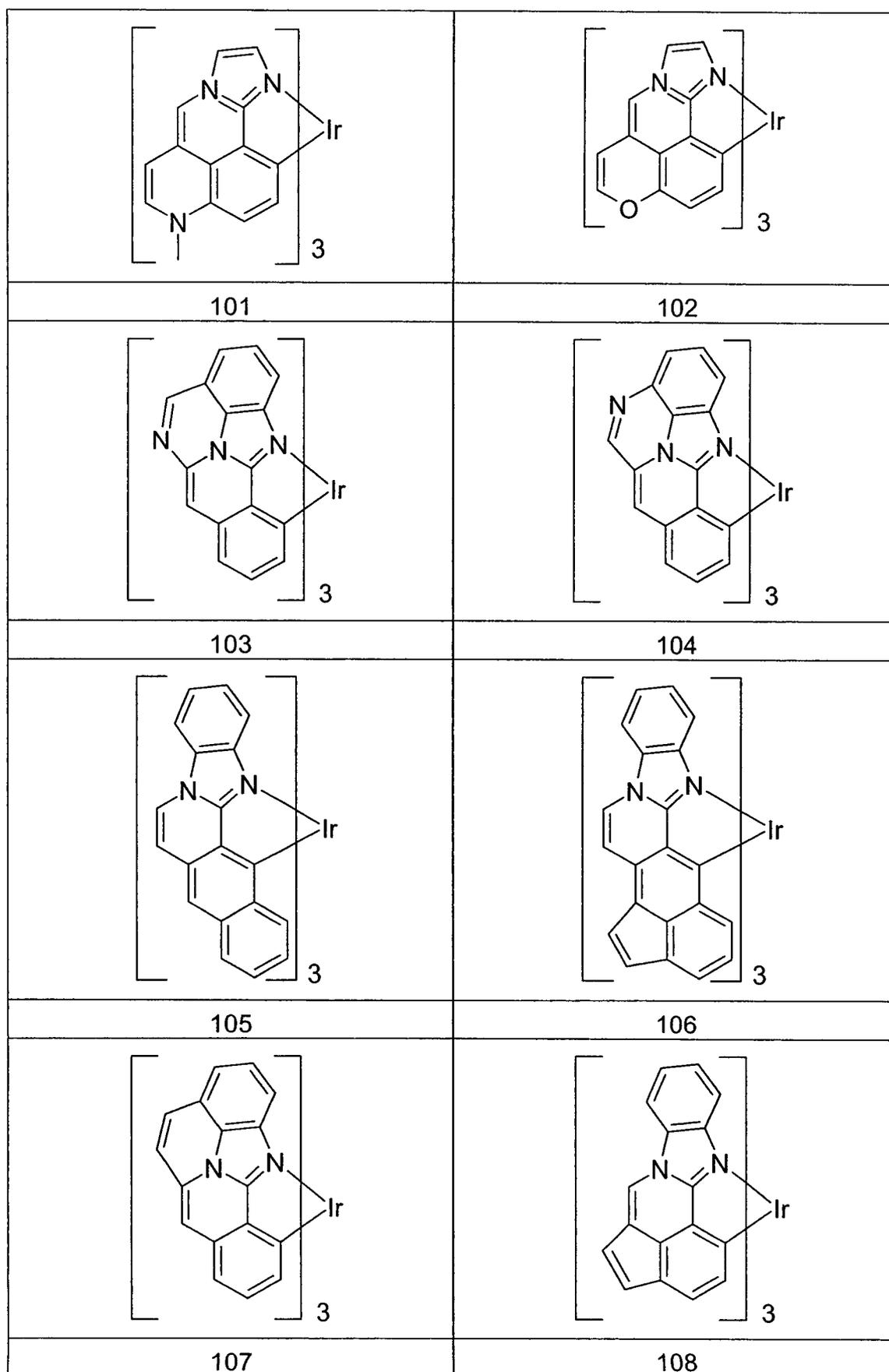
98

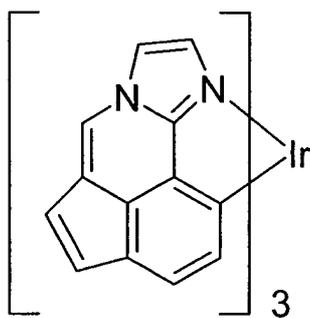


99

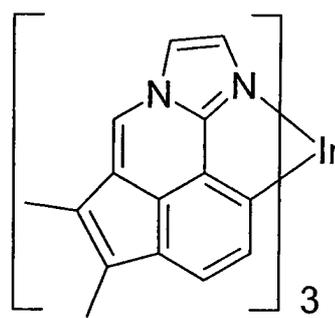


100

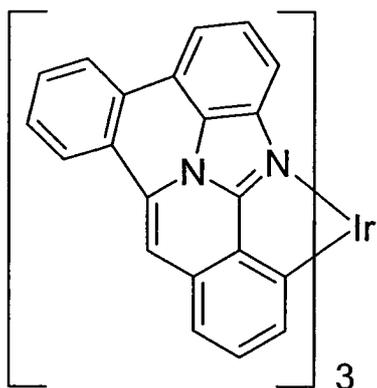




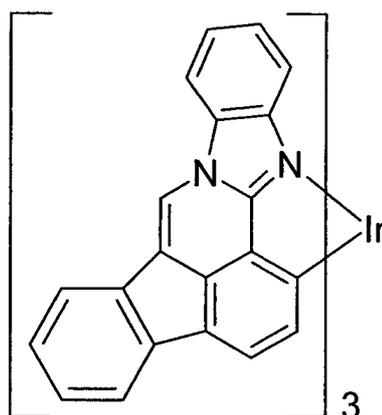
109



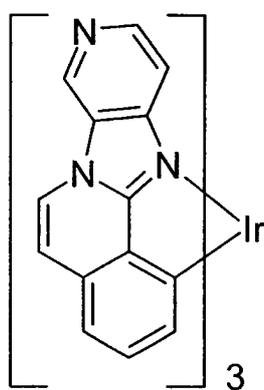
110



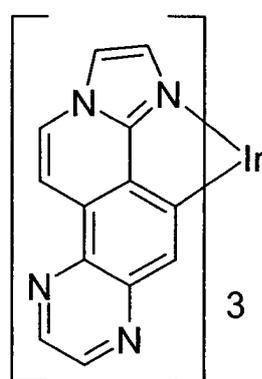
111



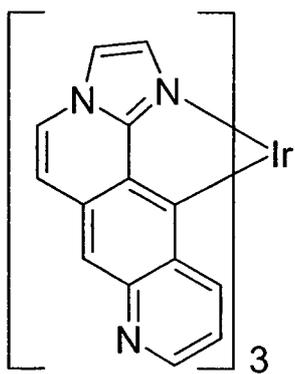
112



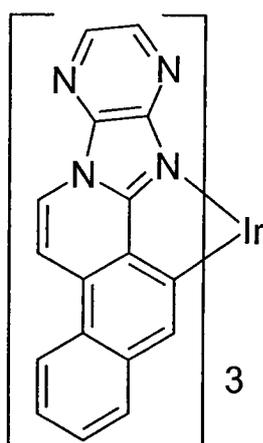
113



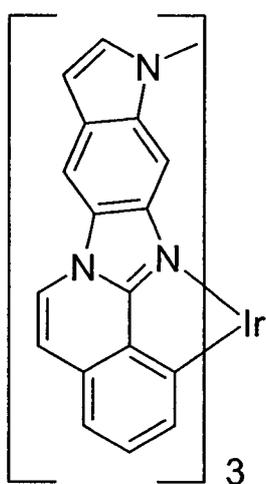
114



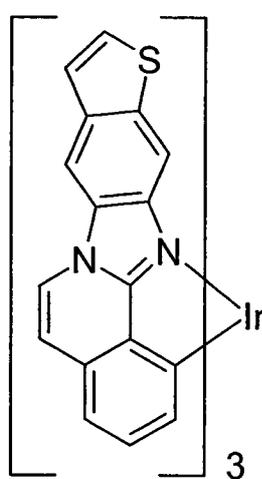
115



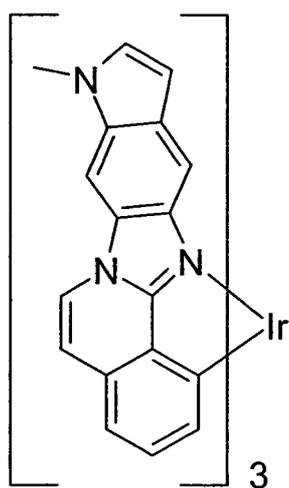
116



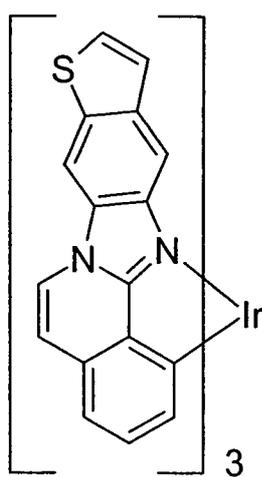
117



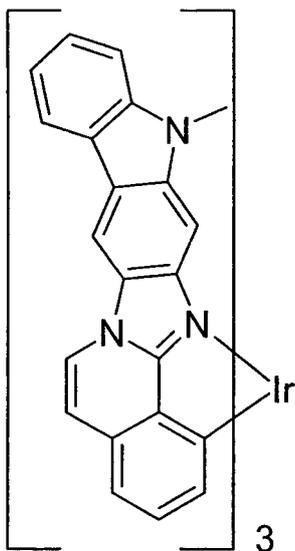
118



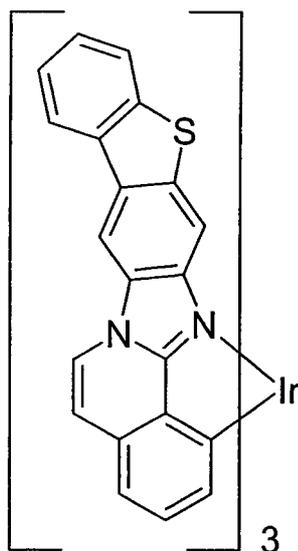
119



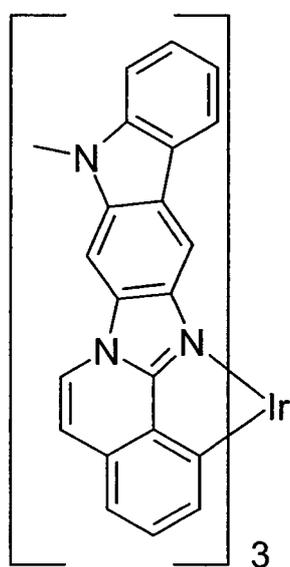
120



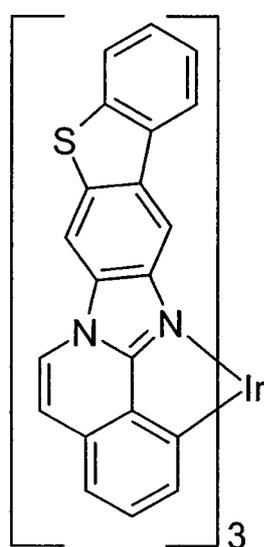
121



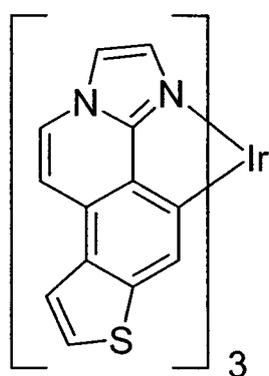
122



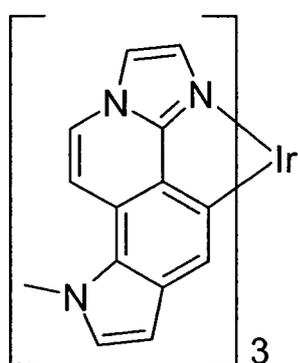
123



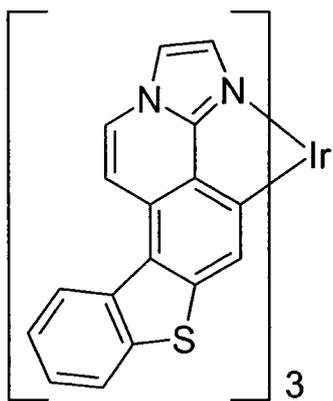
124



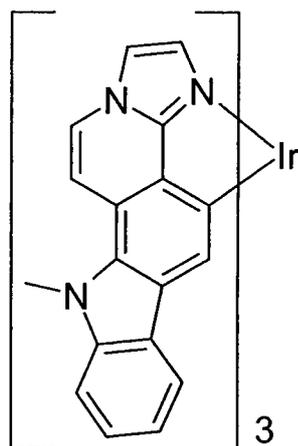
125



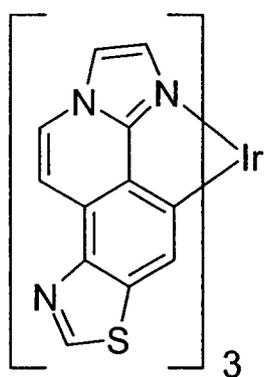
126



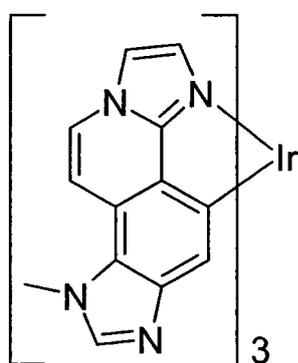
127



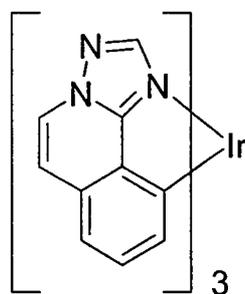
128



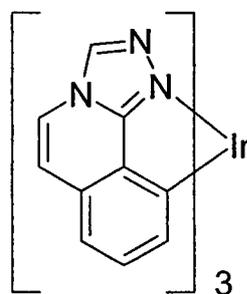
129



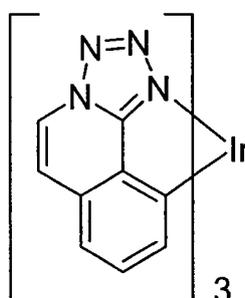
130



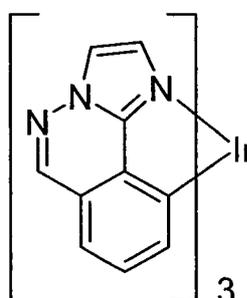
131



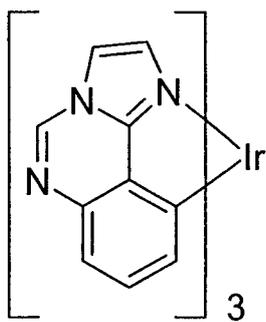
131



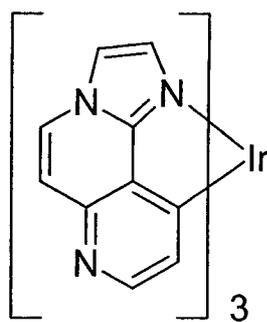
132



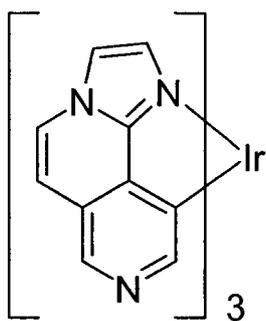
133



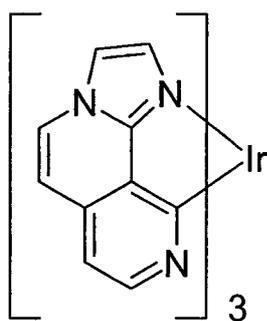
134



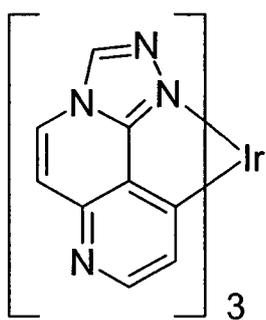
135



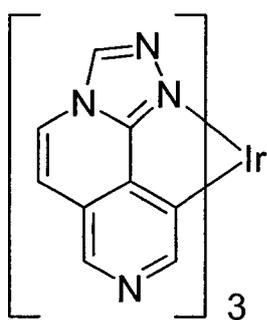
136



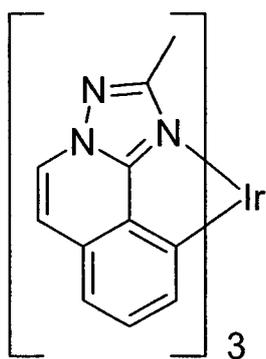
137



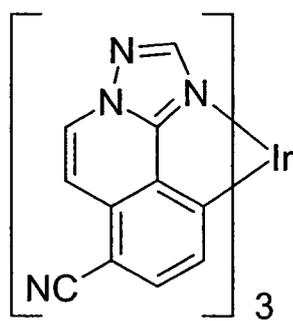
138



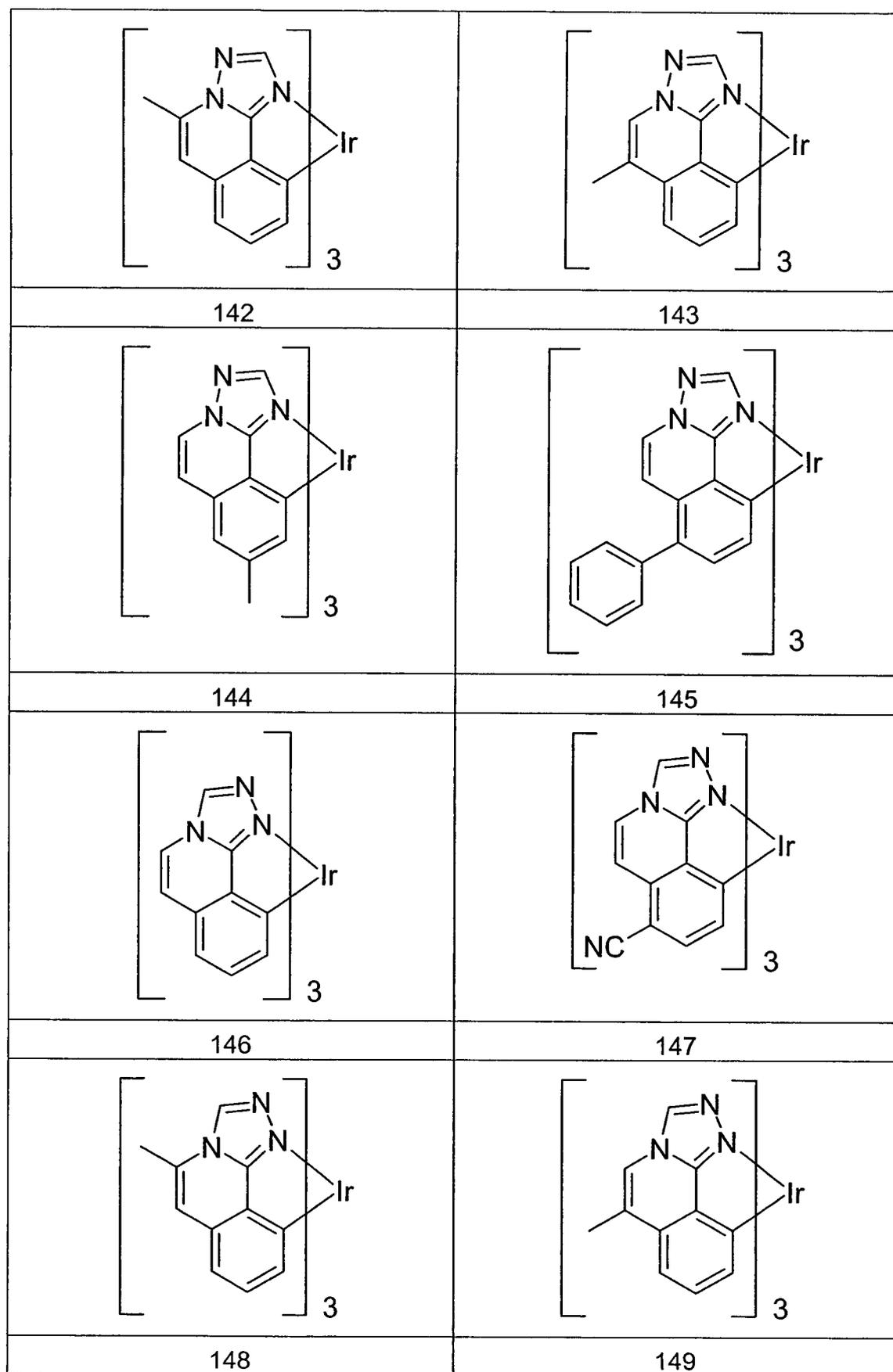
139

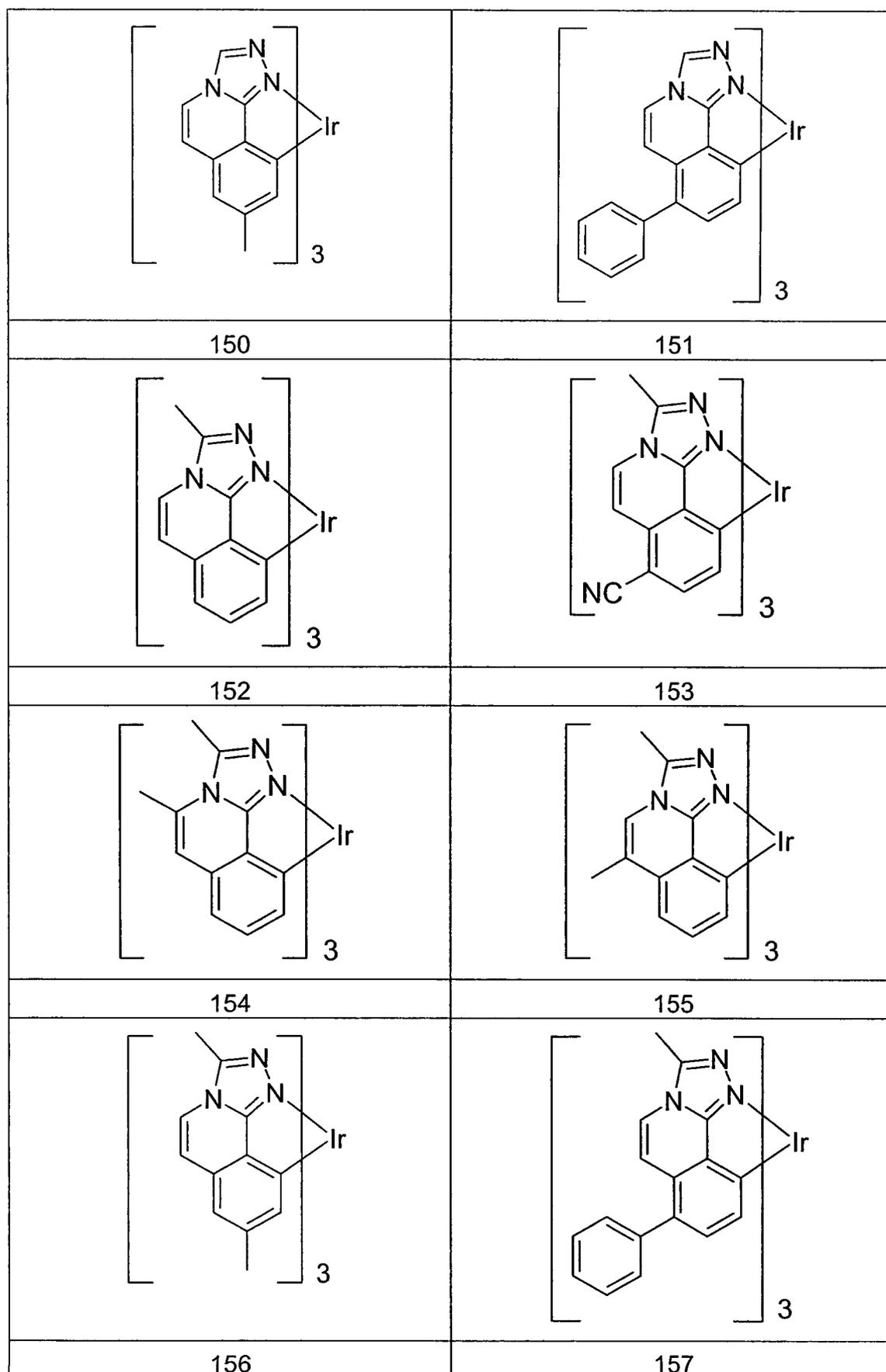


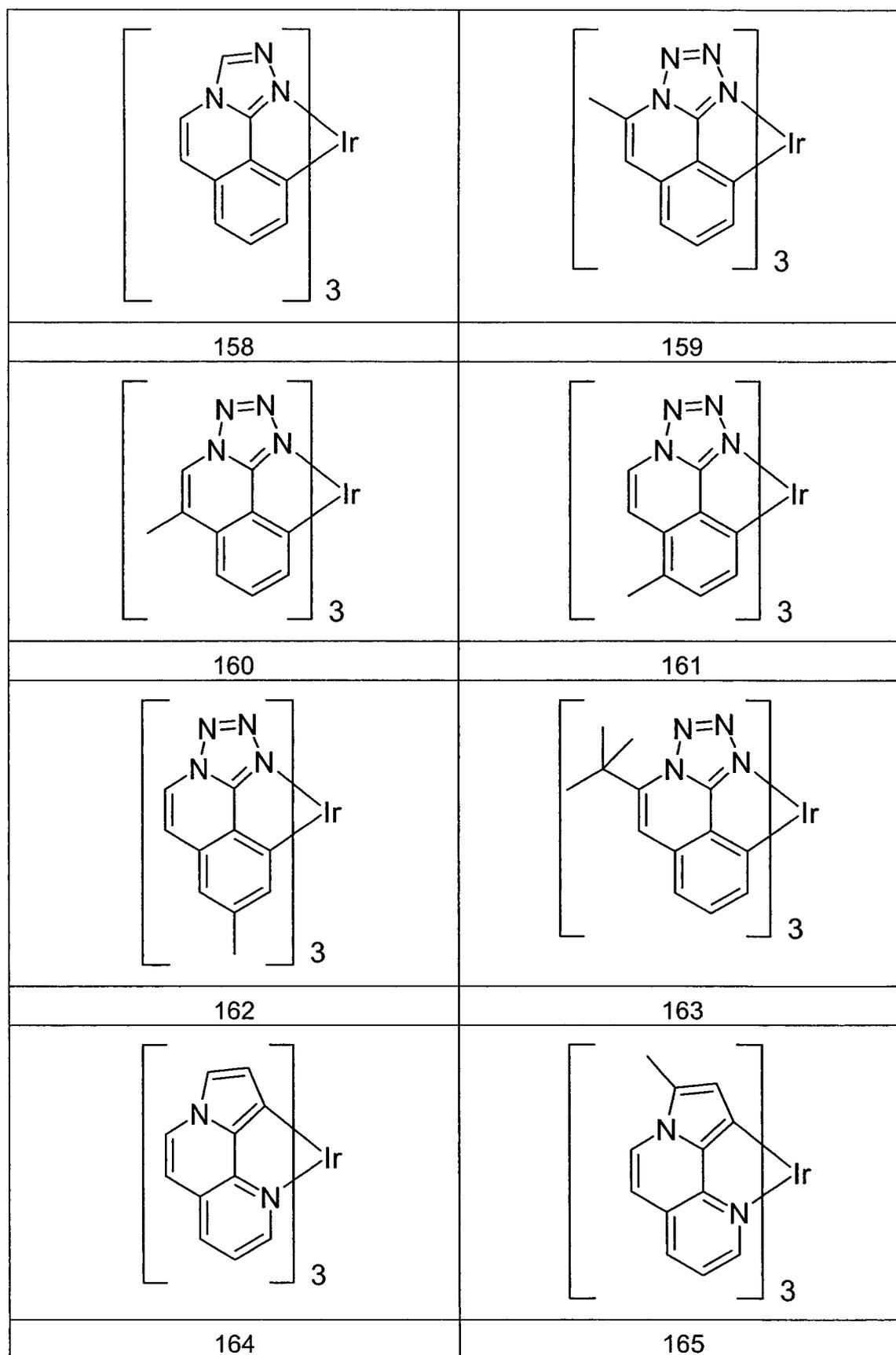
140

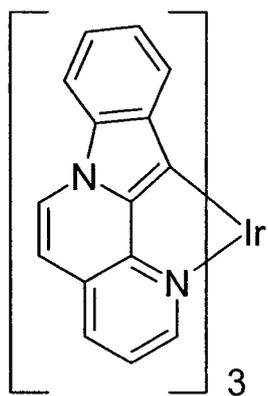


141

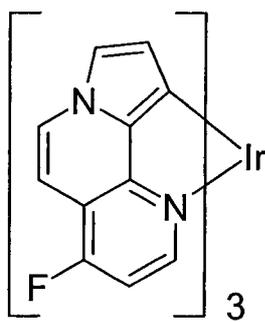




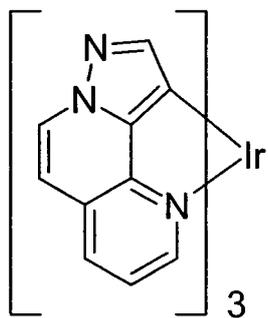




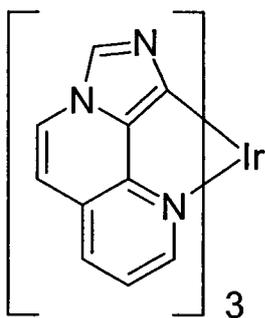
166



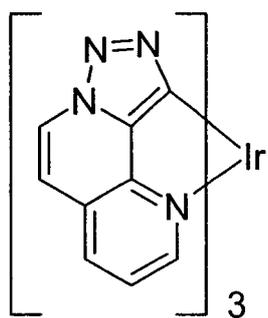
167



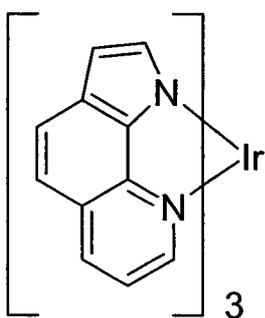
168



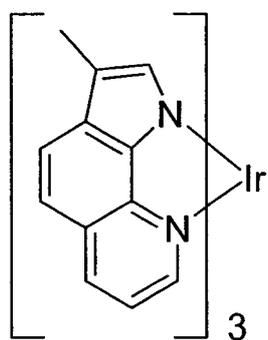
169



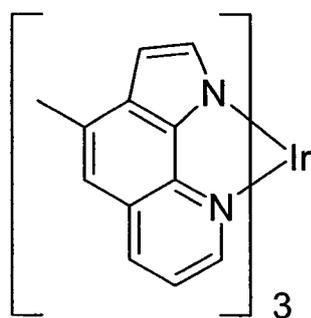
170



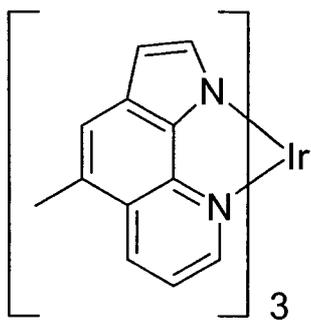
171



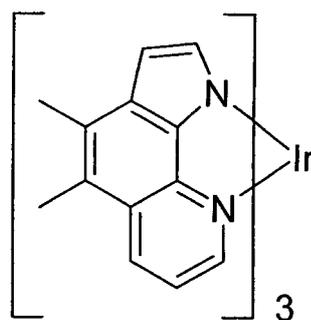
172



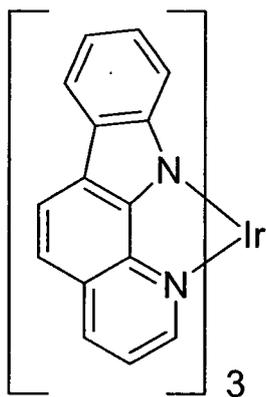
173



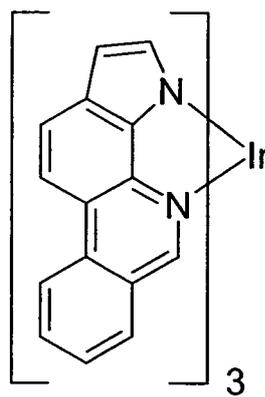
174



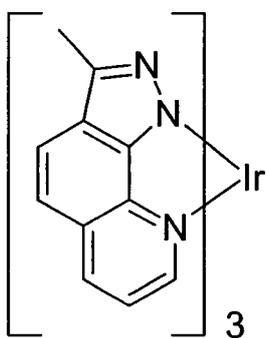
175



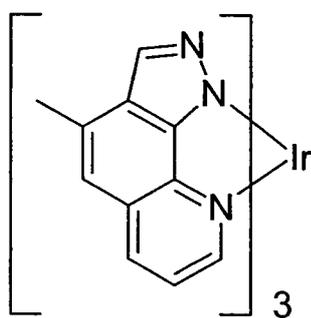
176



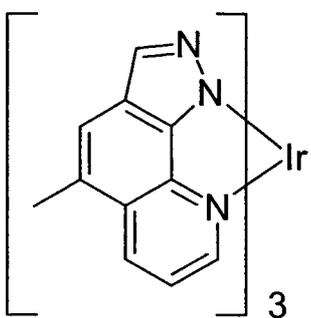
177



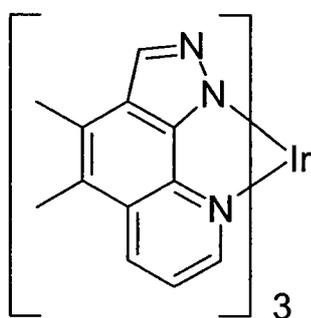
178



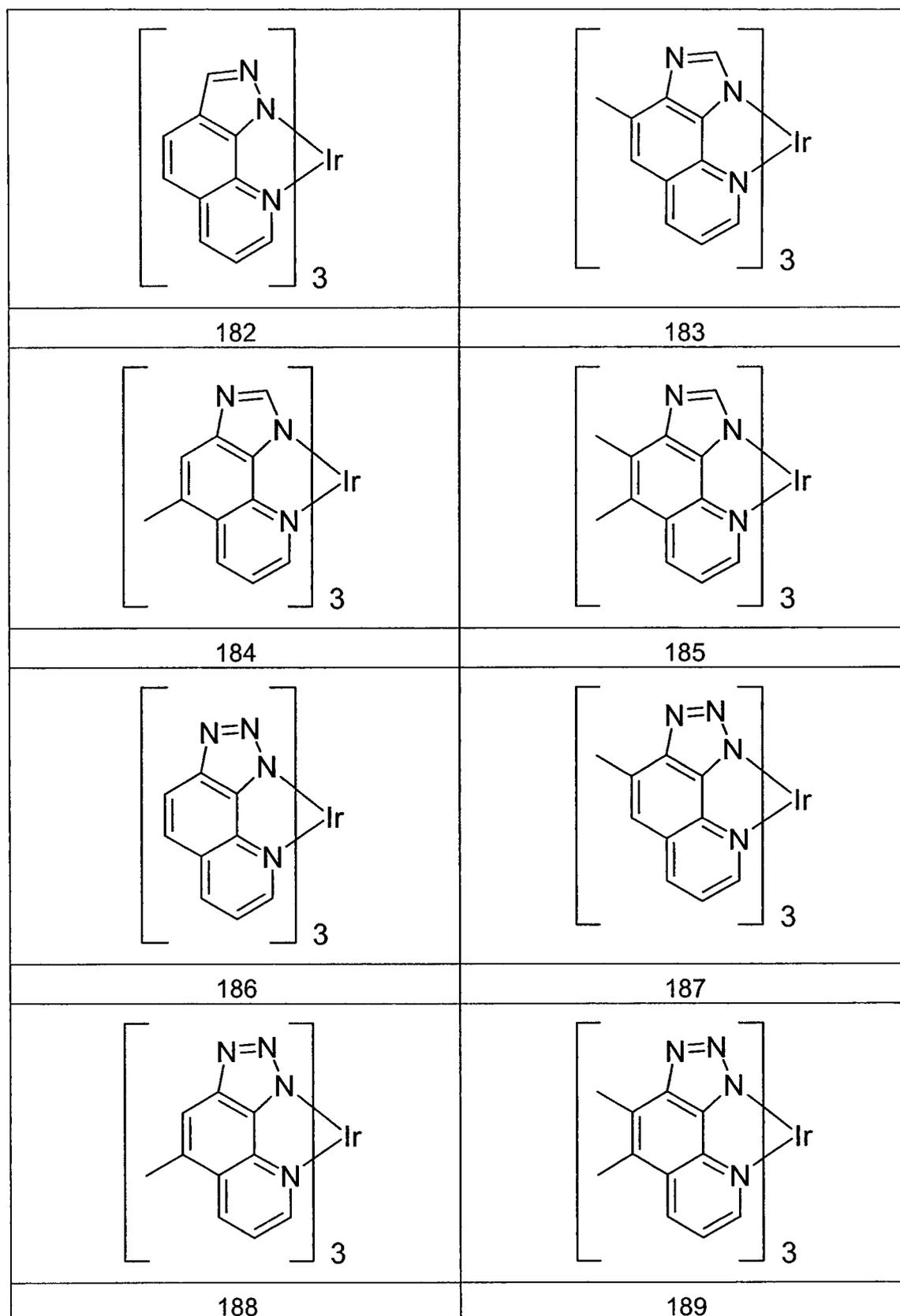
179

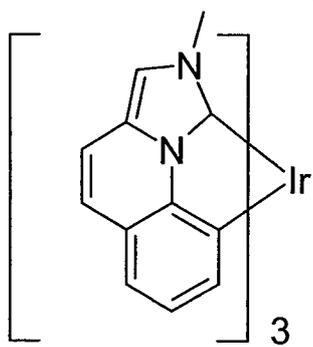


180

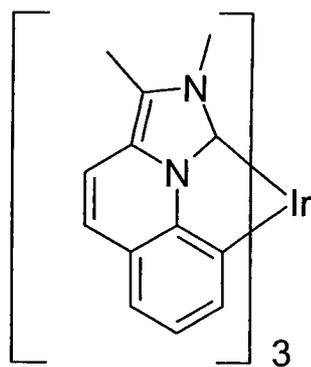


181

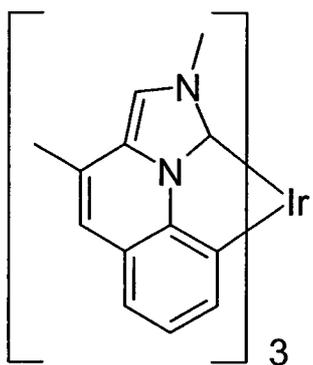




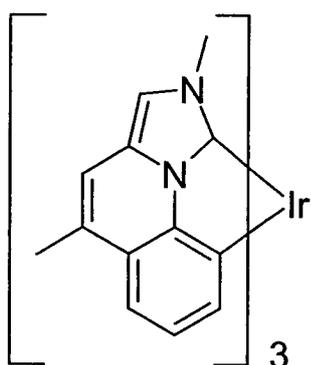
190



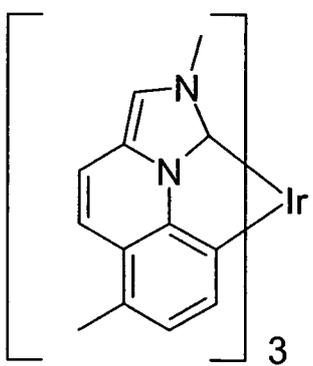
191



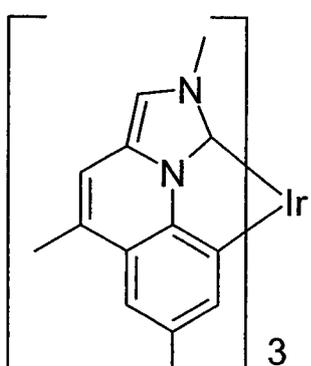
192



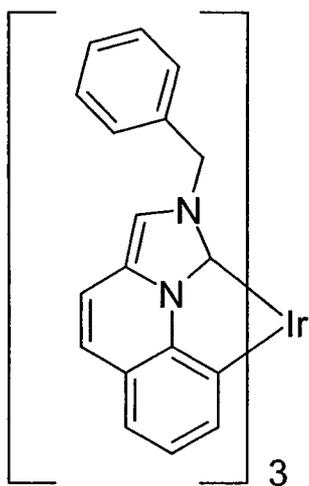
193



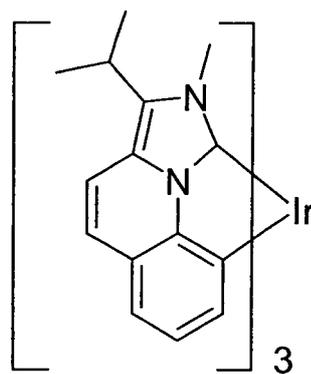
194



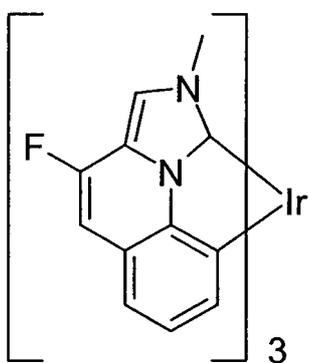
195



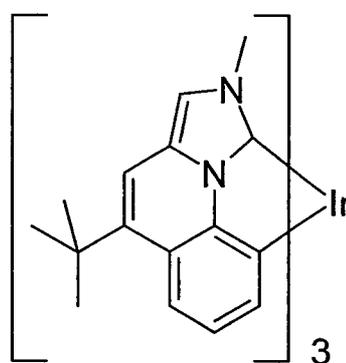
196



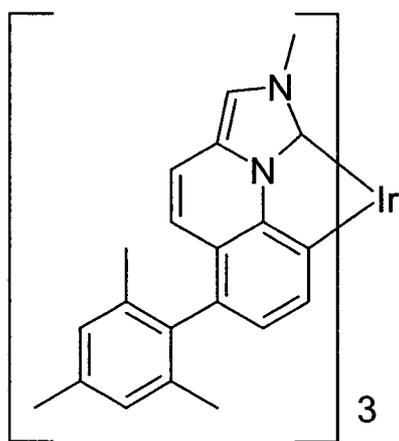
197



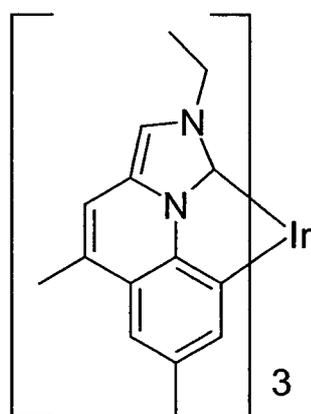
198



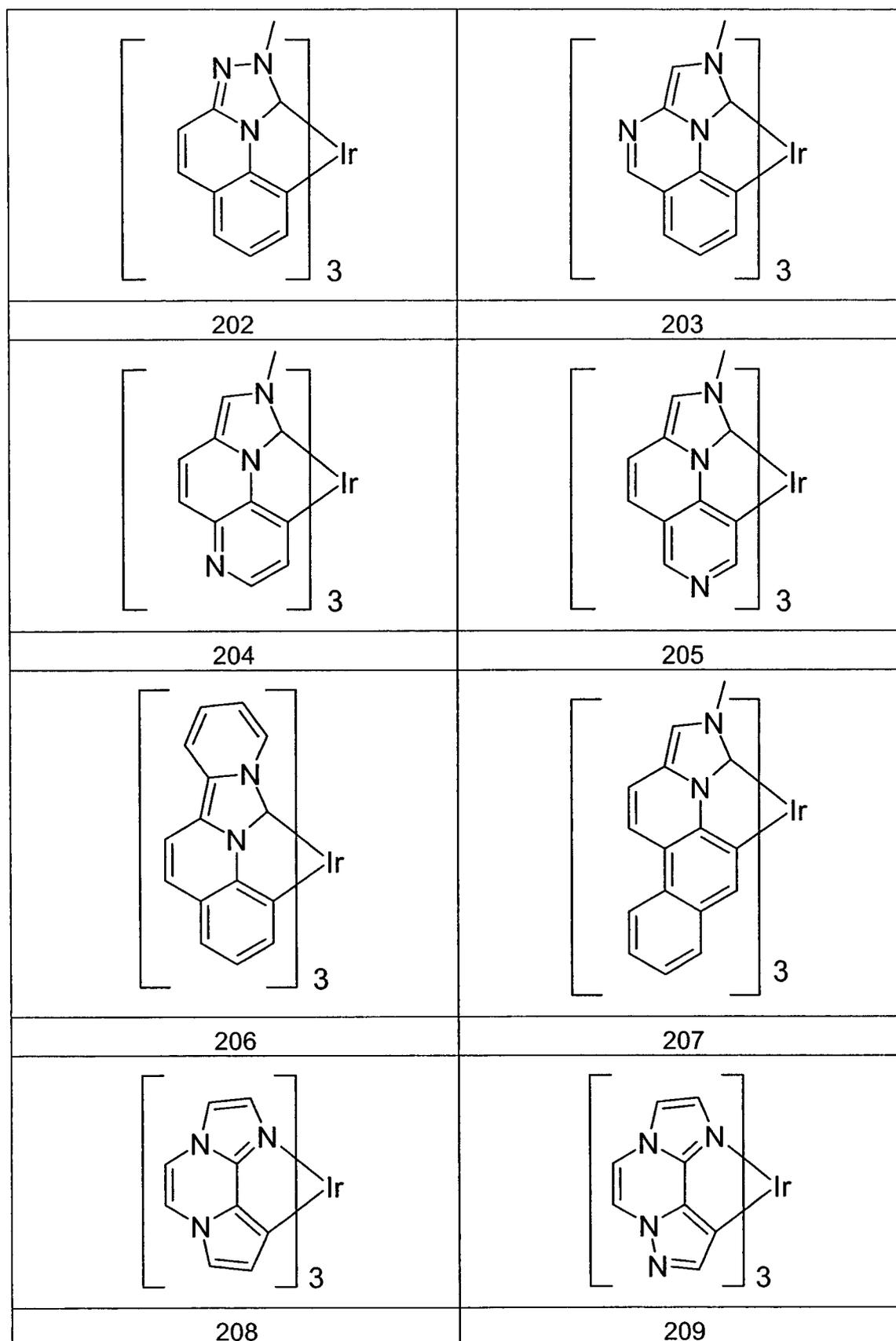
199

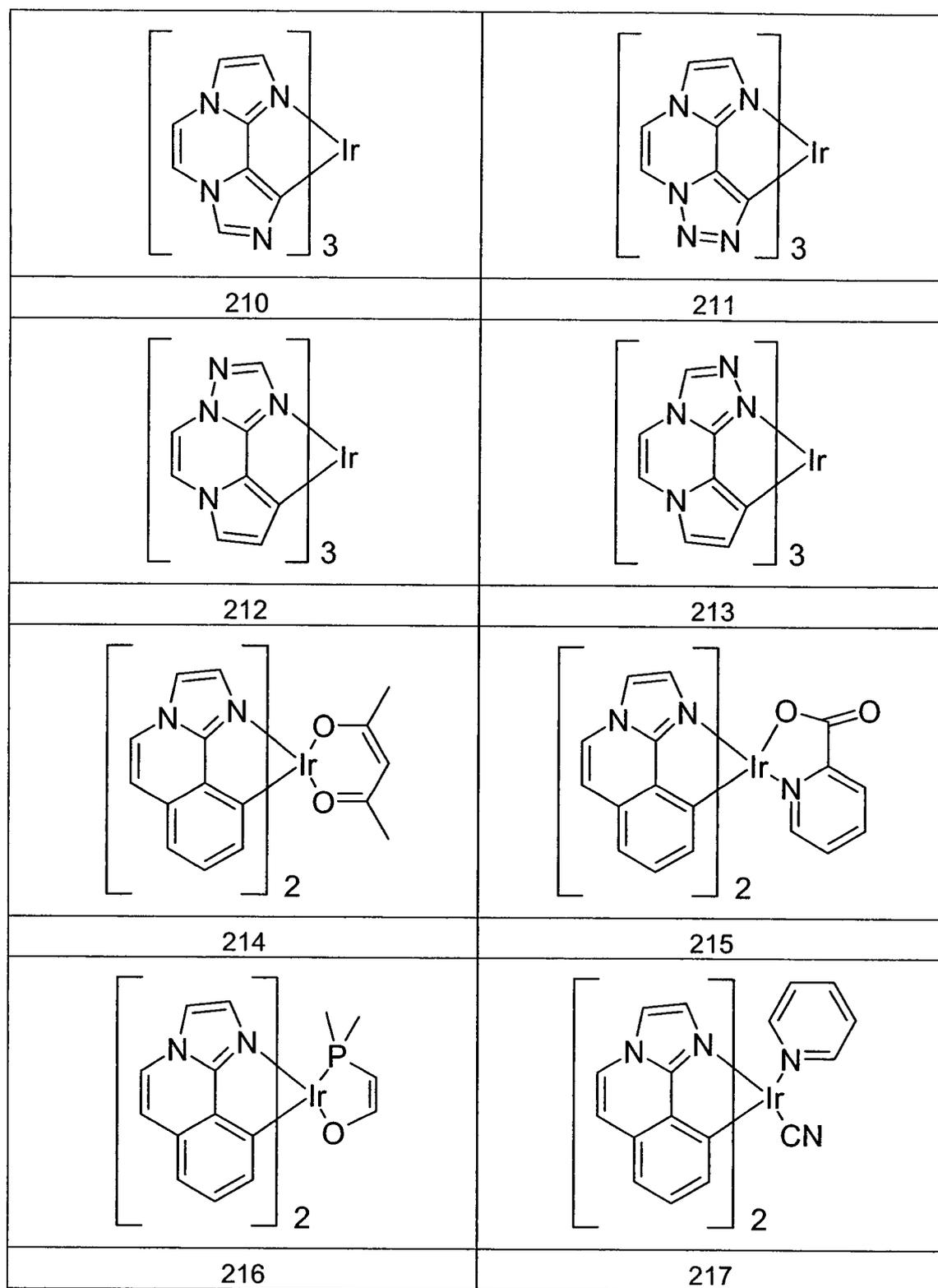


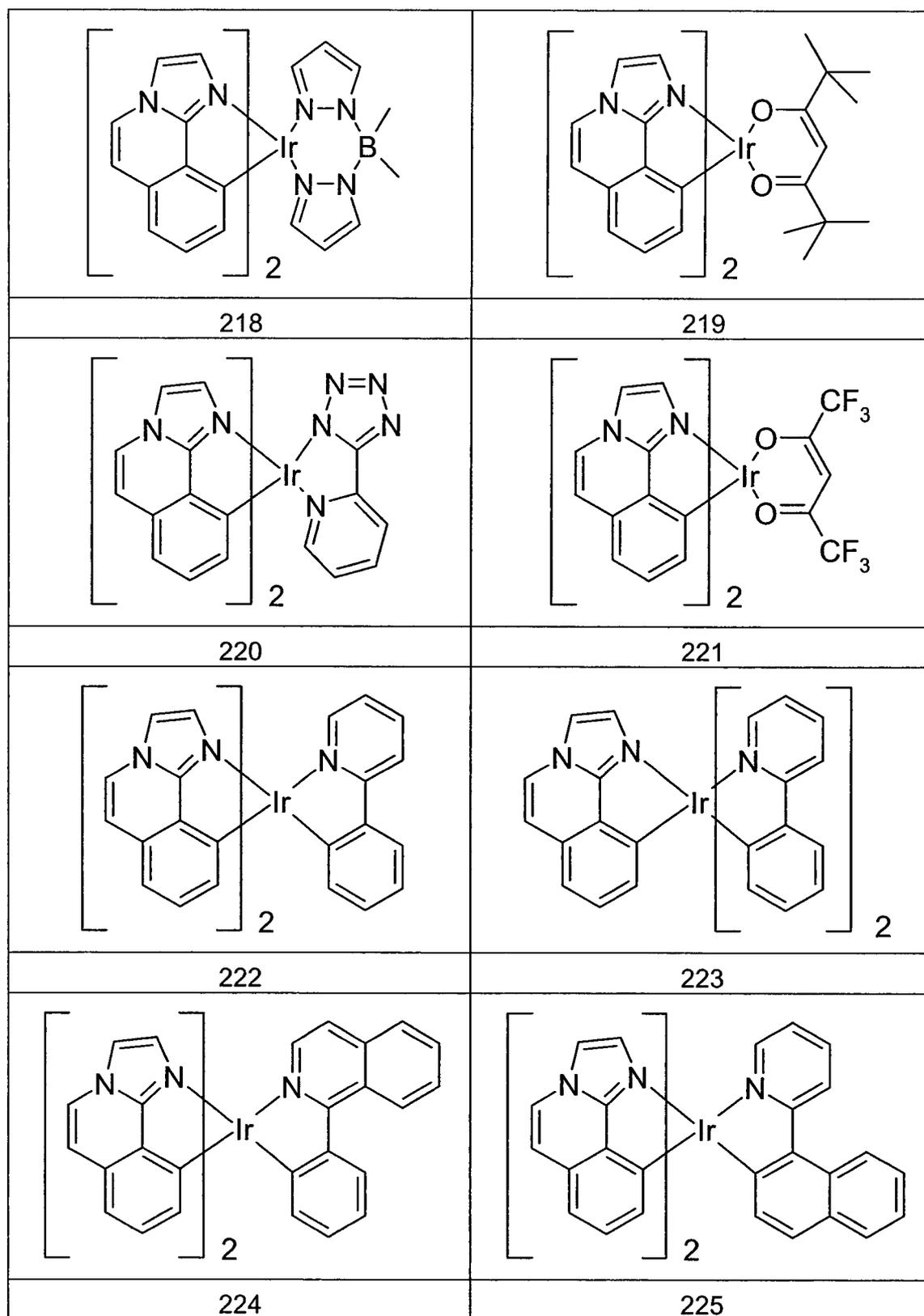
200

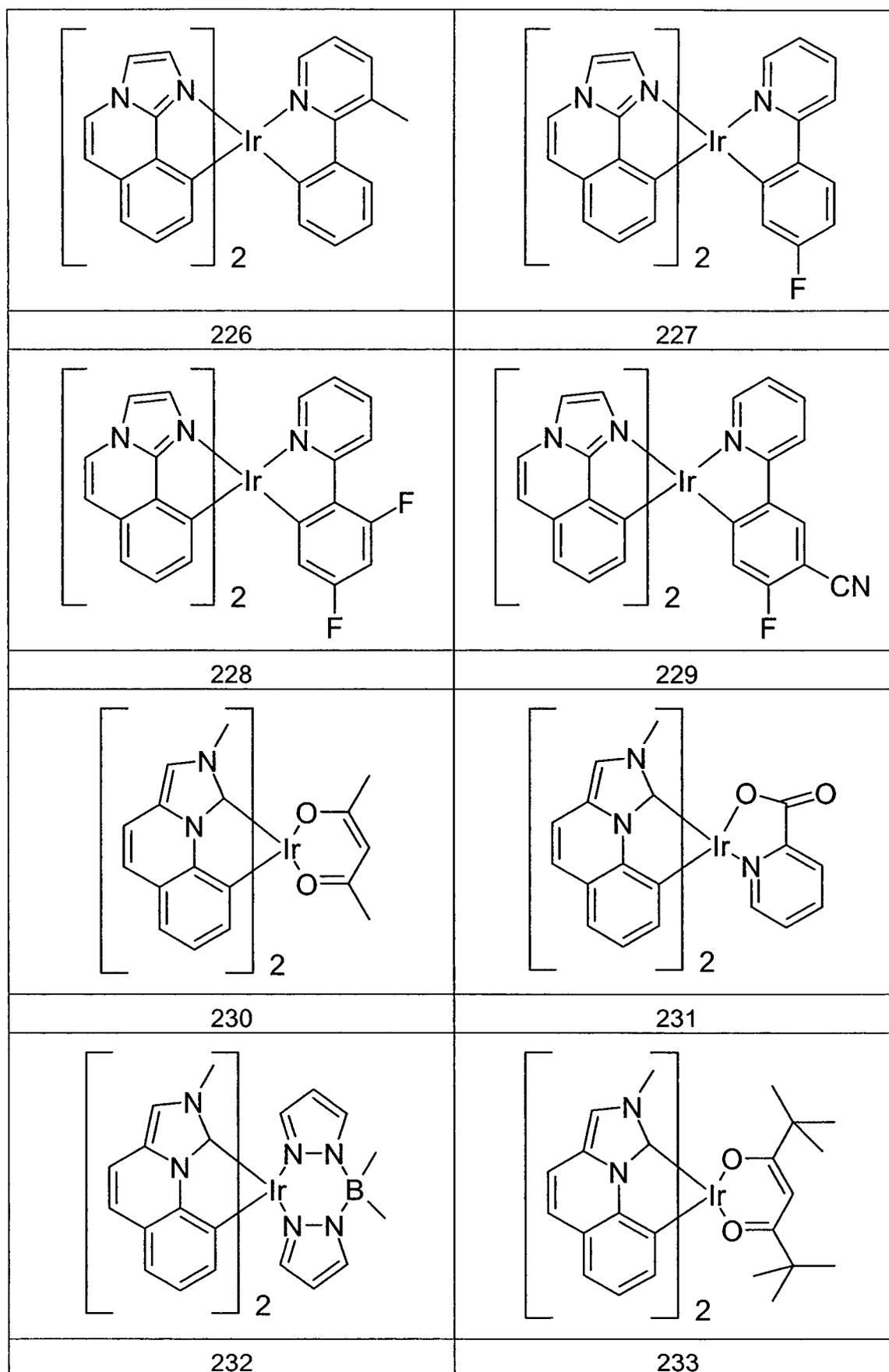


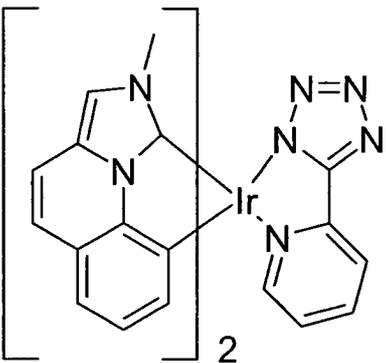
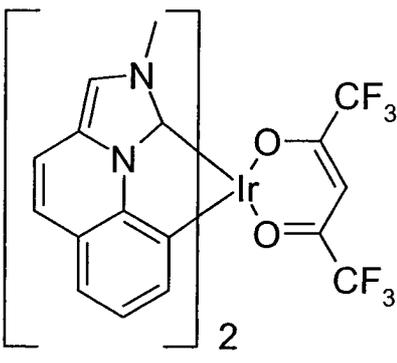
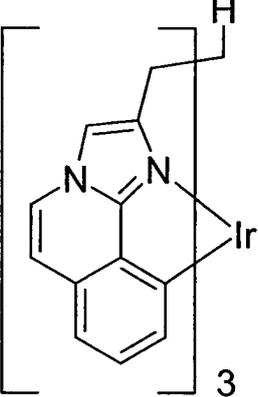
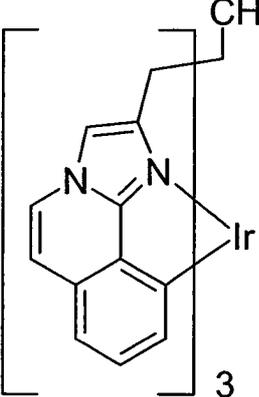
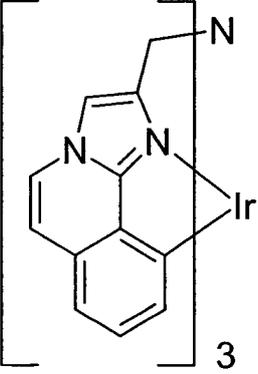
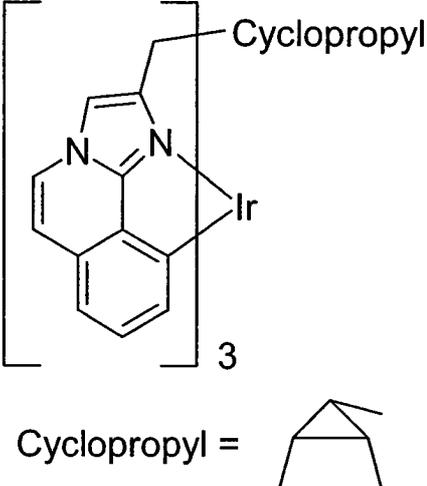
201

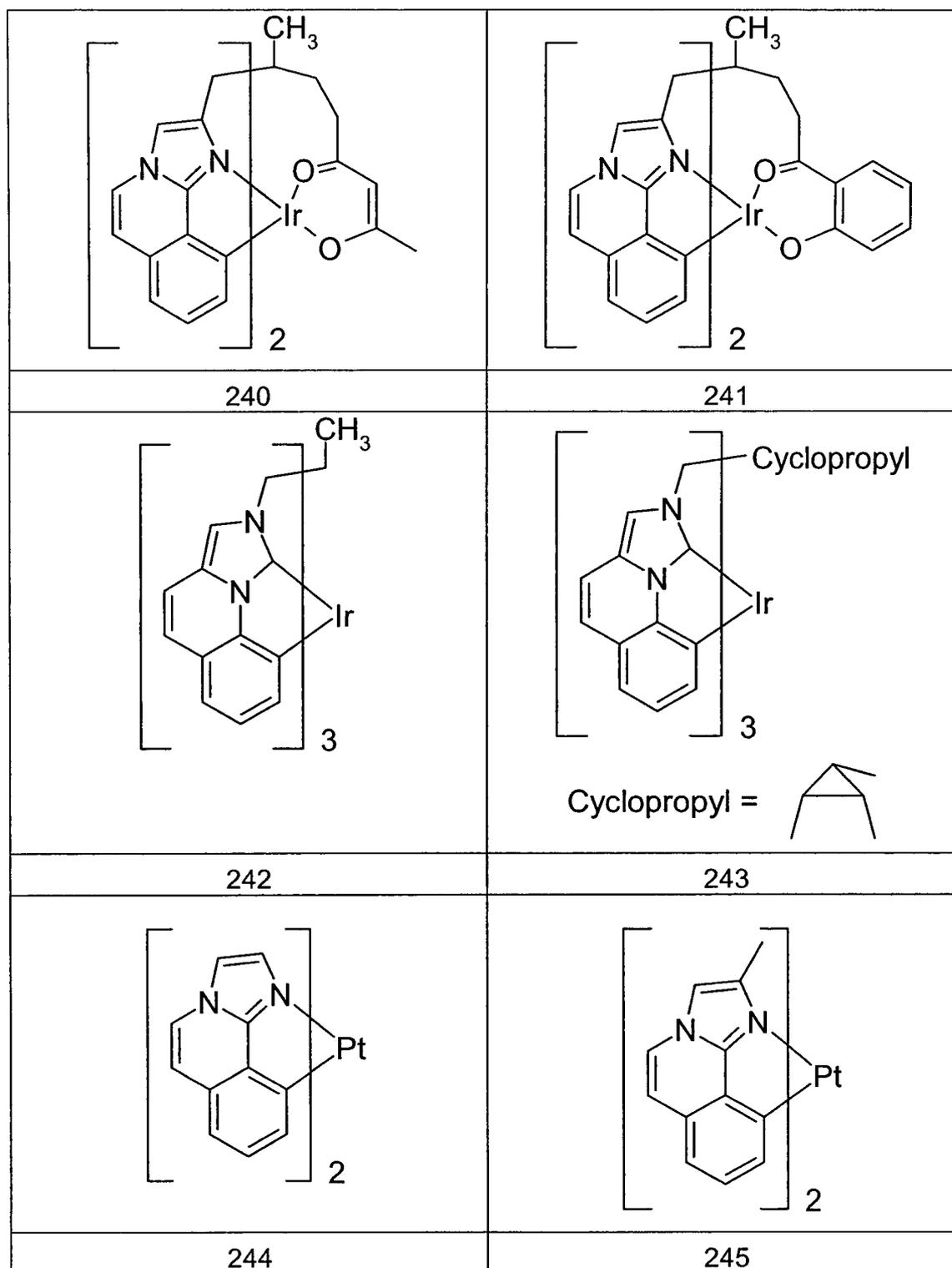


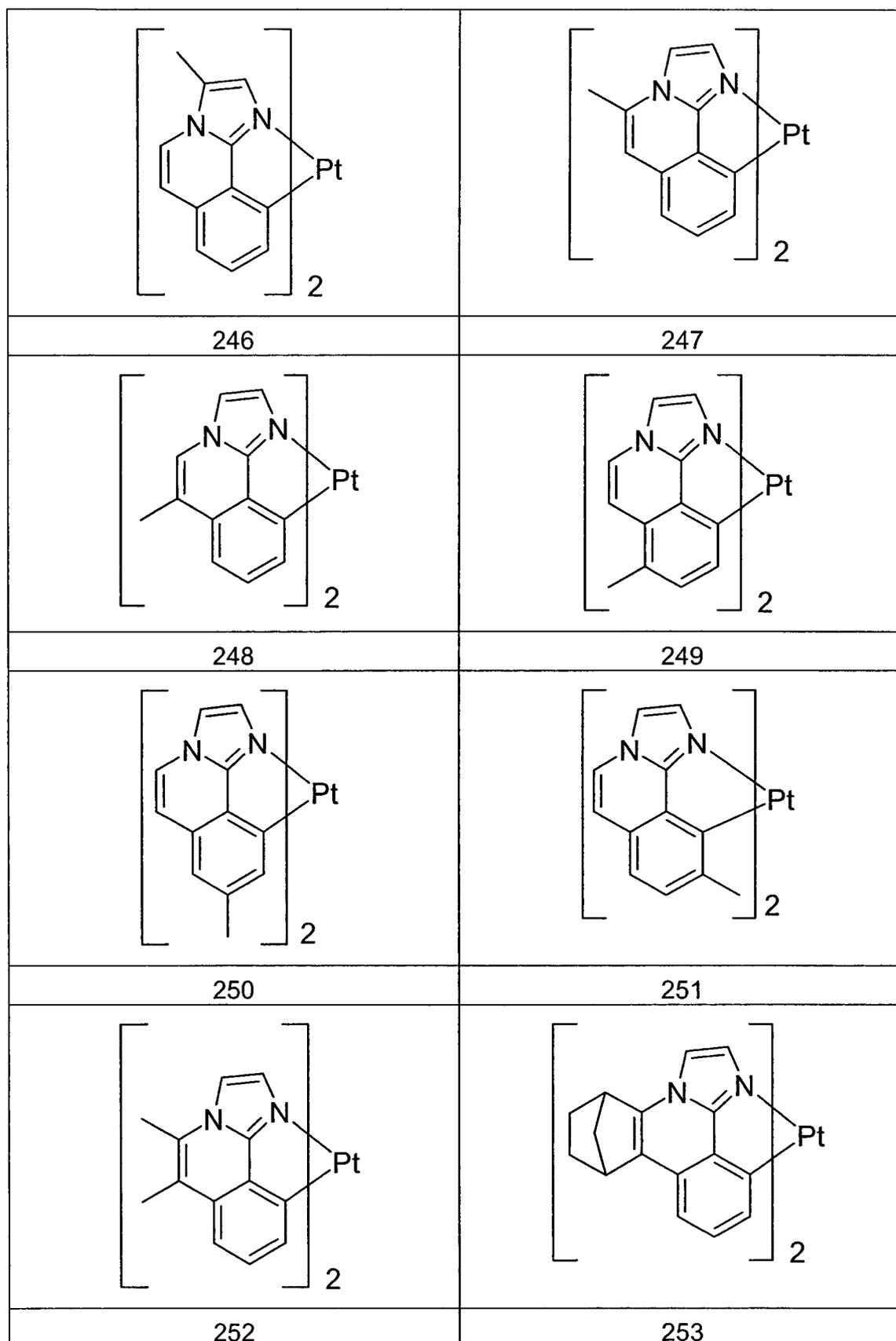


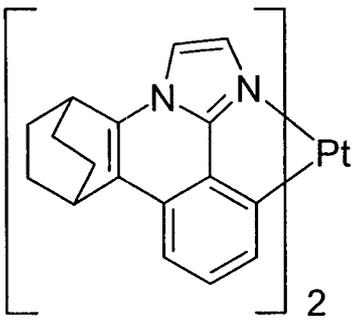
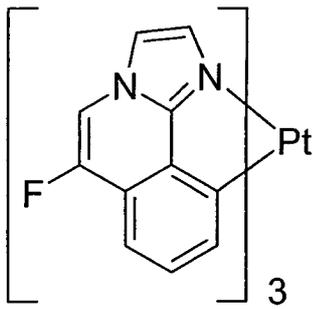
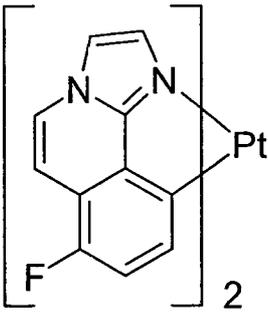
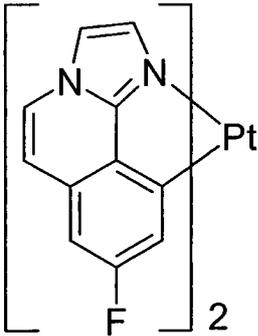
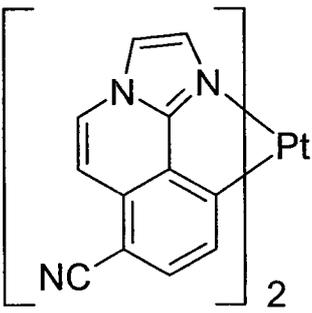
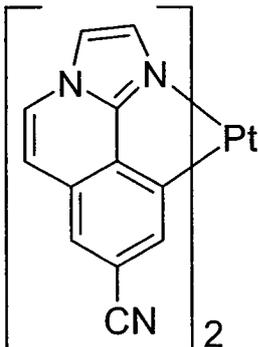
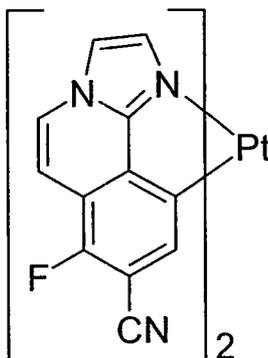
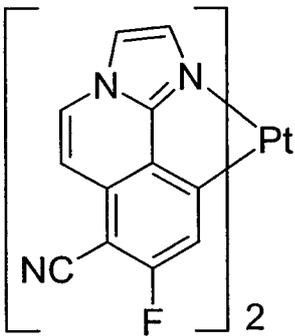


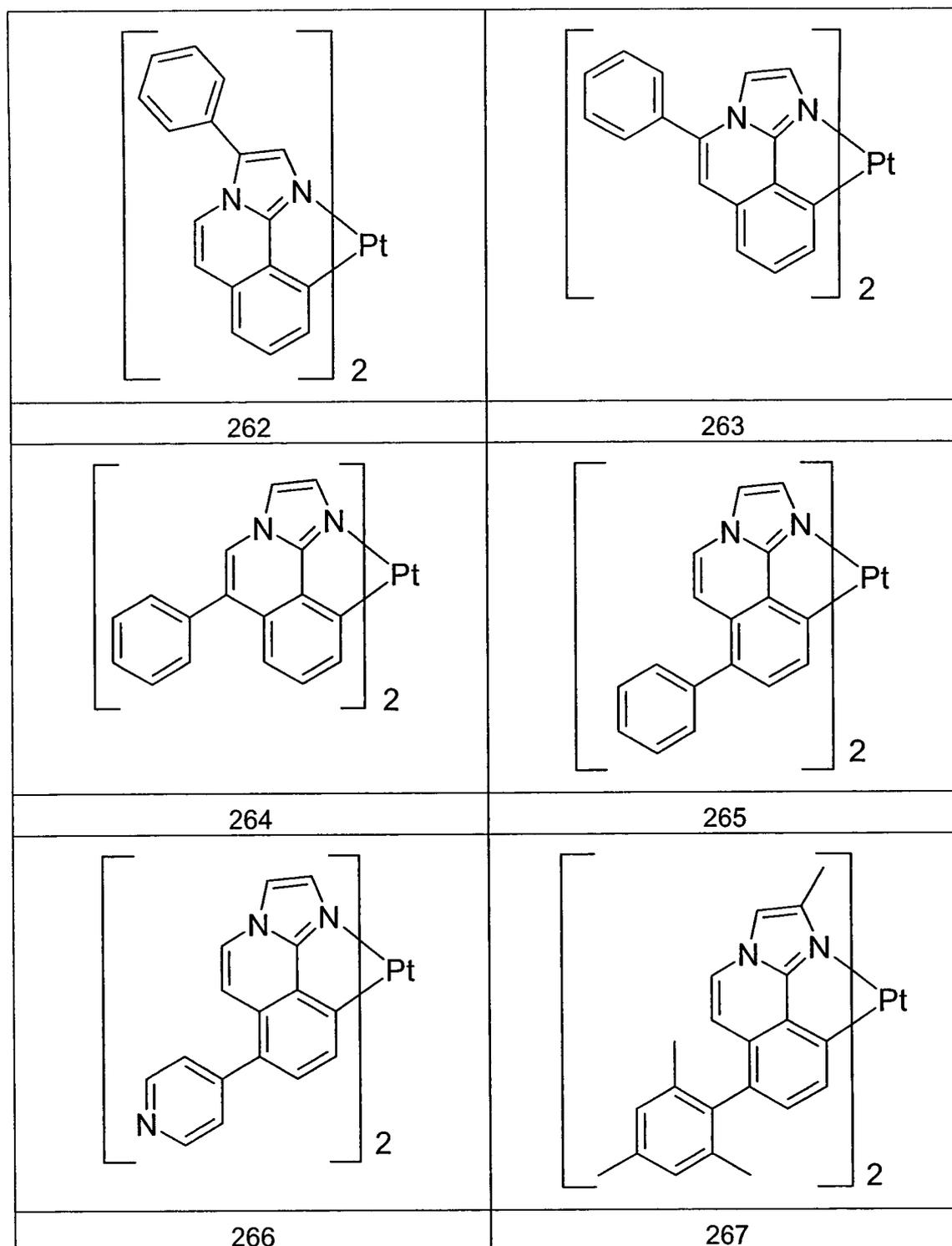


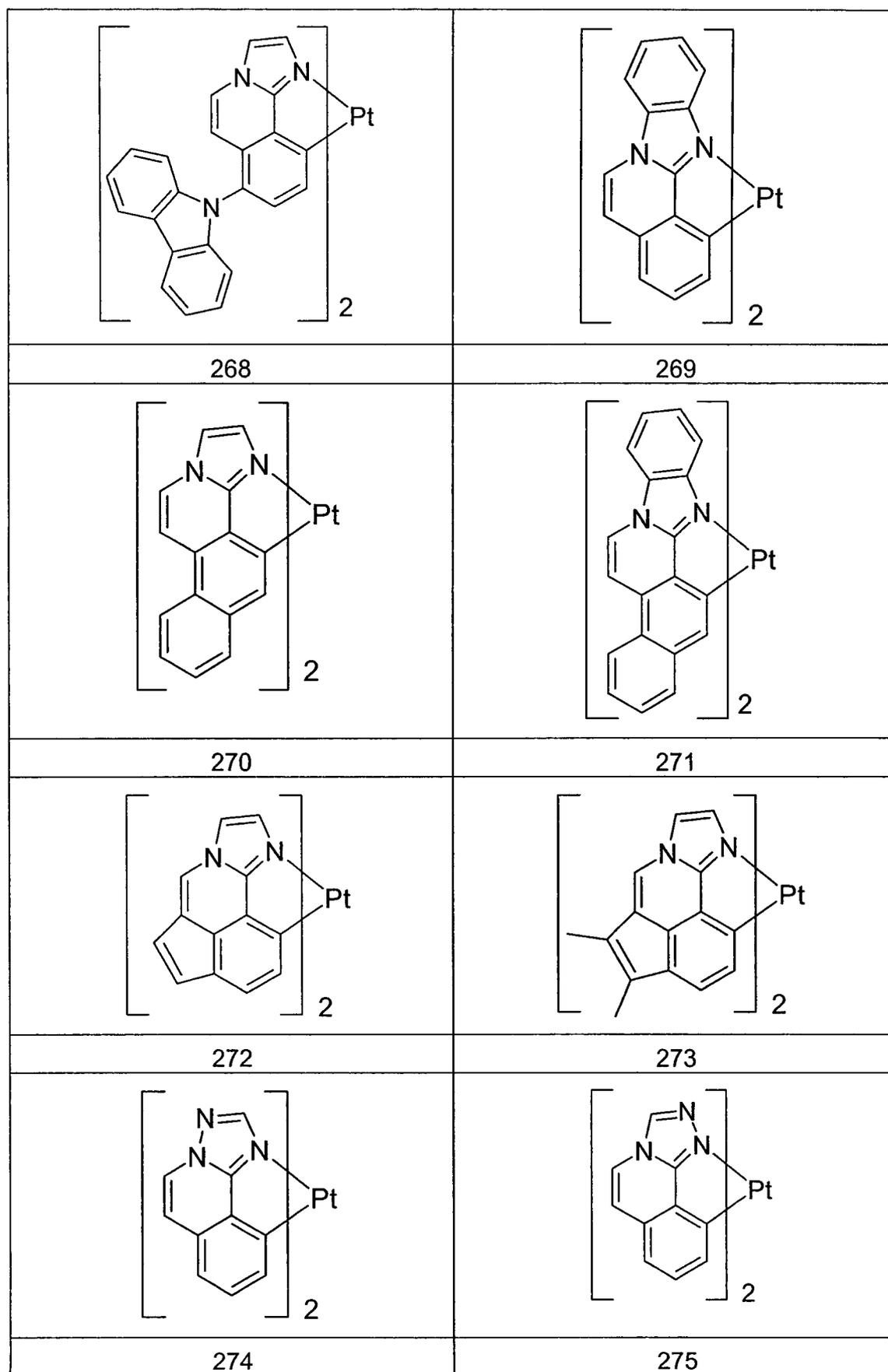
	
234	235
	
236	237
	
238	239

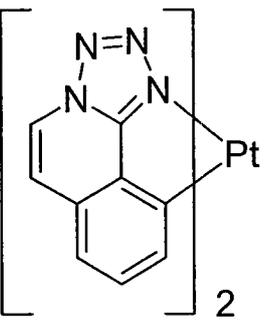
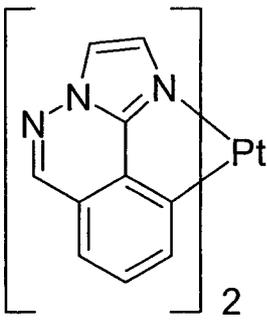
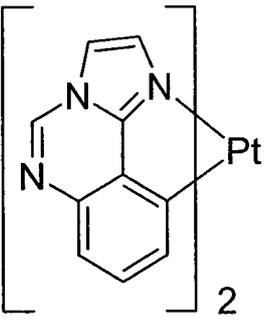
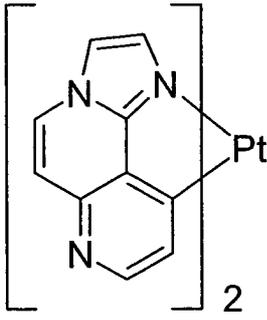
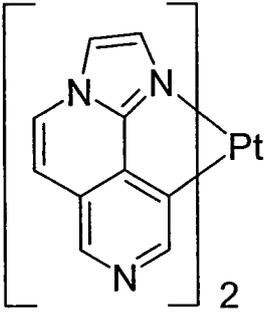
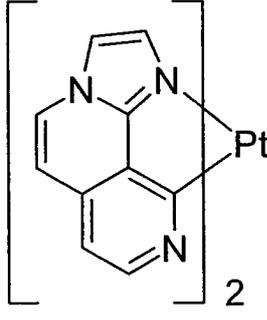
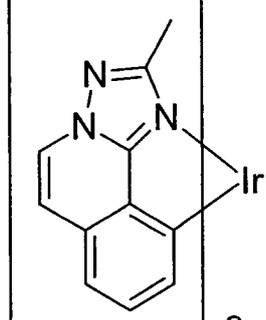
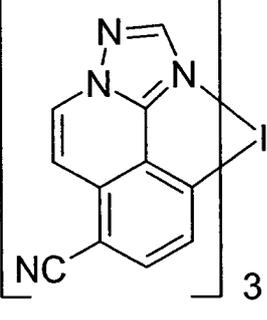


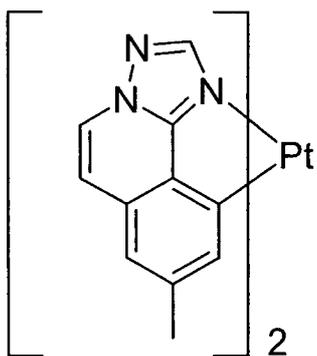


	
254	255
	
256	257
	
258	259
	
260	261

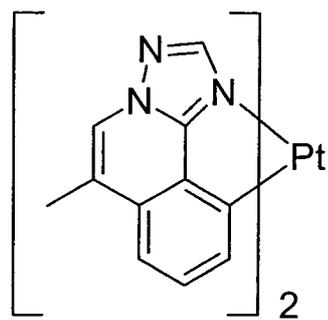




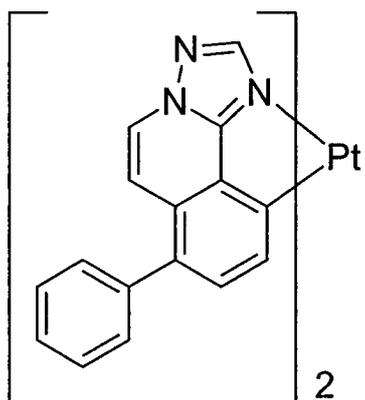
	
276	277
	
278	279
	
280	281
	
282	283



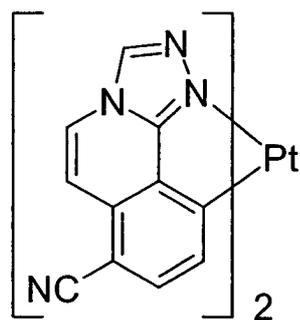
284



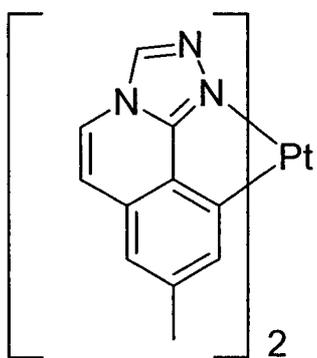
285



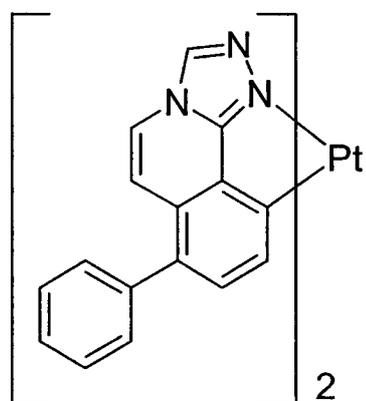
286



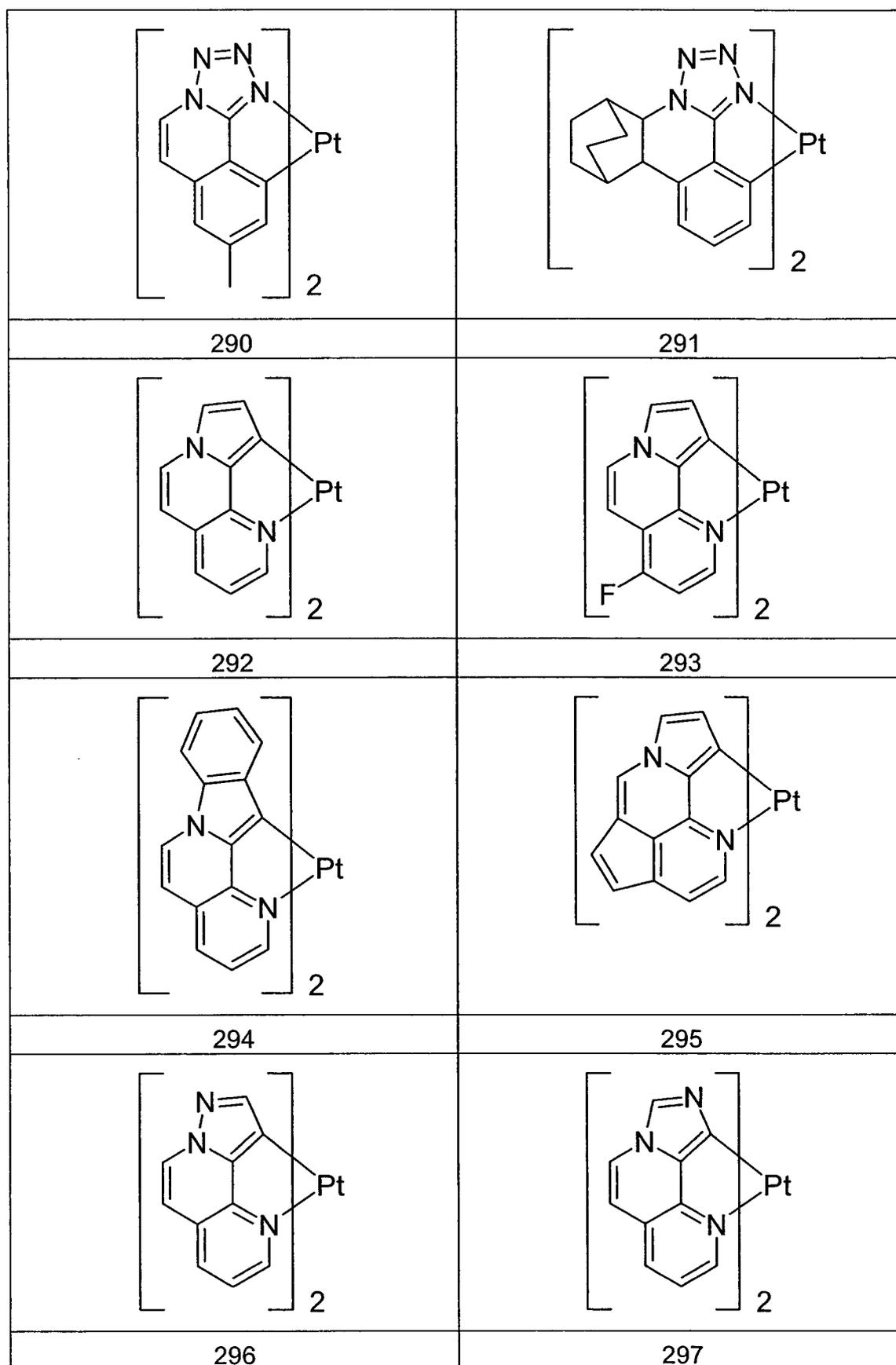
287

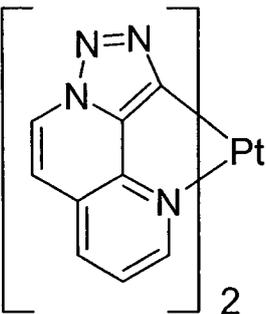
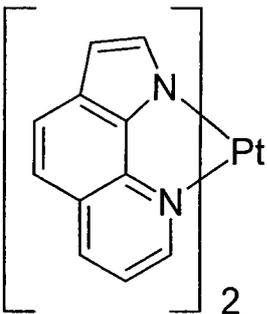
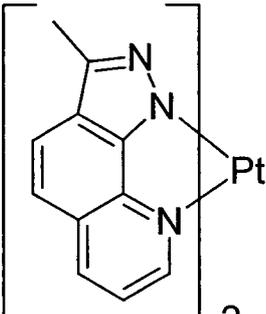
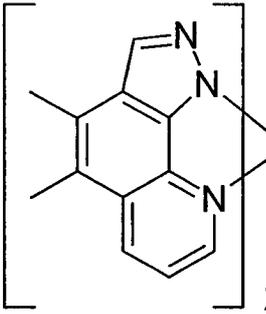
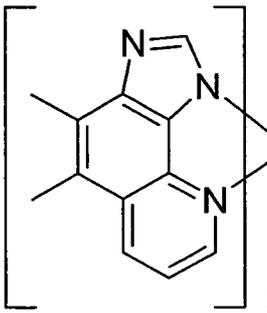
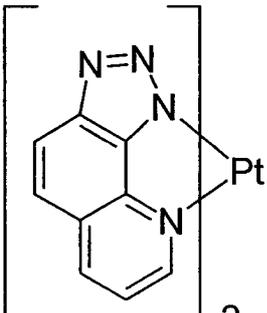
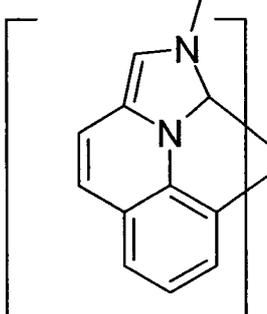
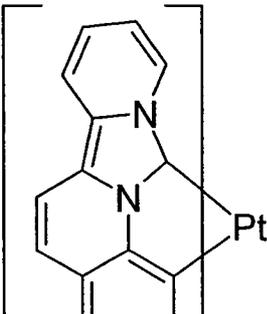


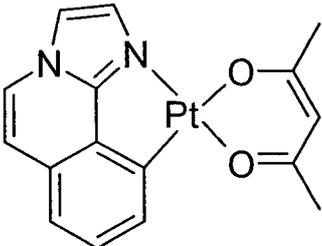
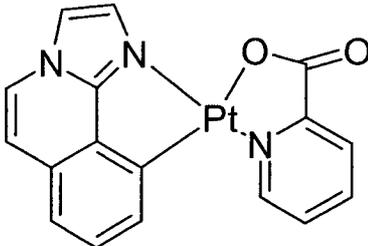
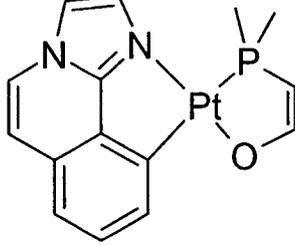
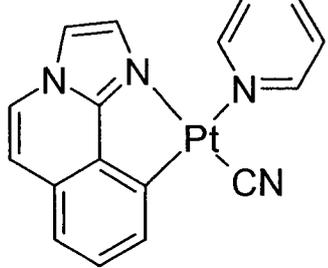
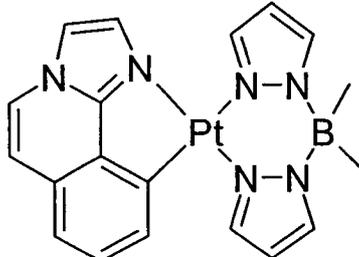
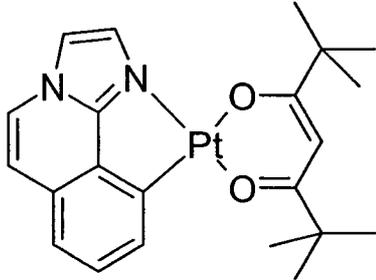
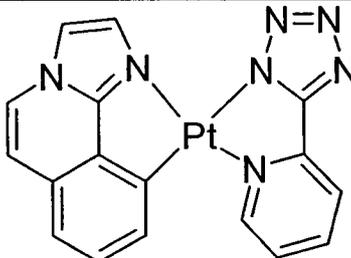
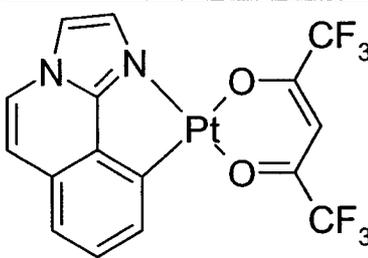
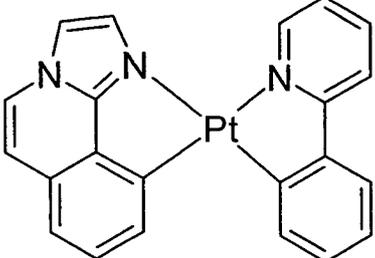
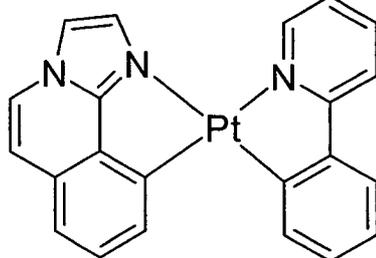
288

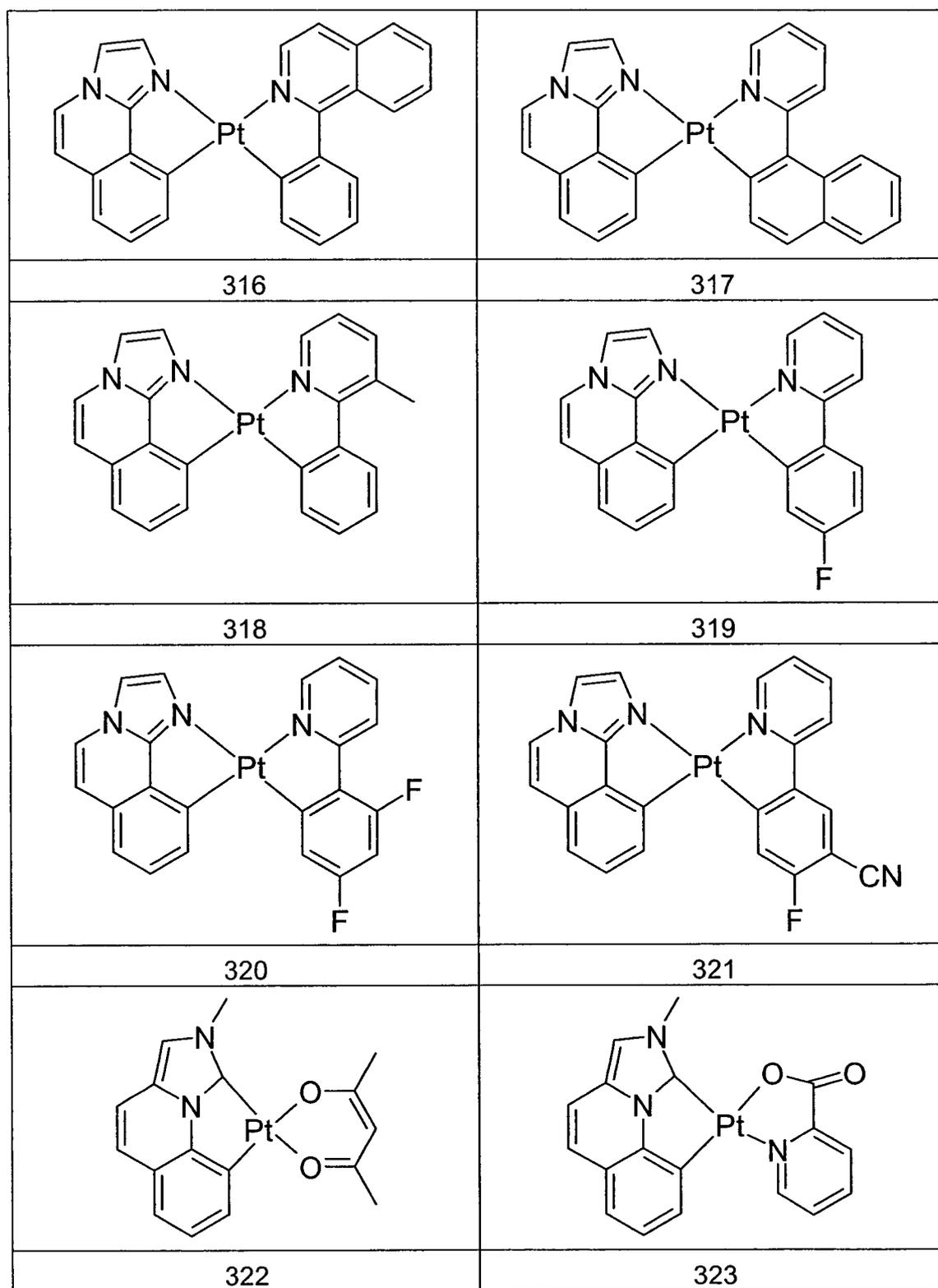


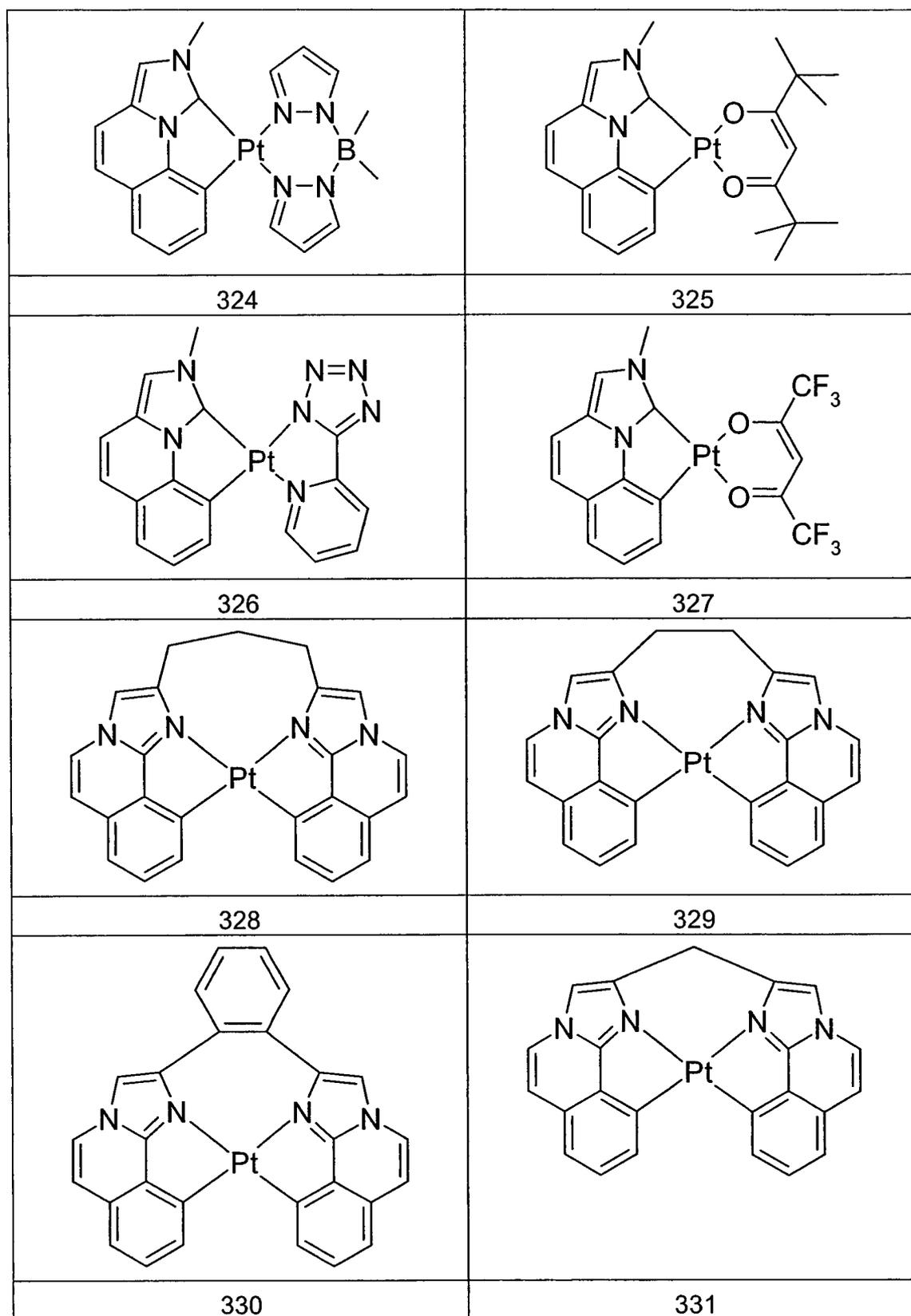
289

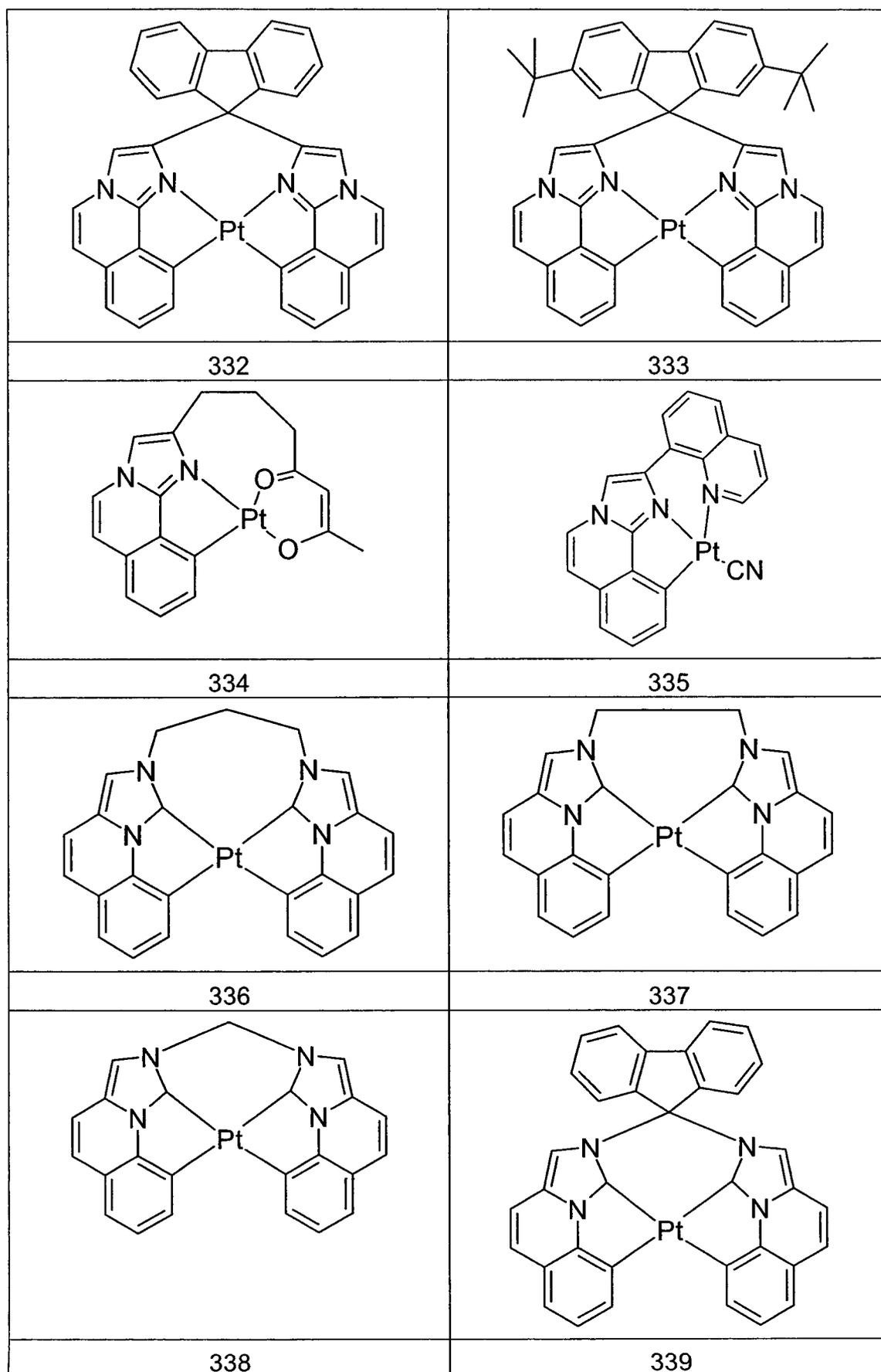


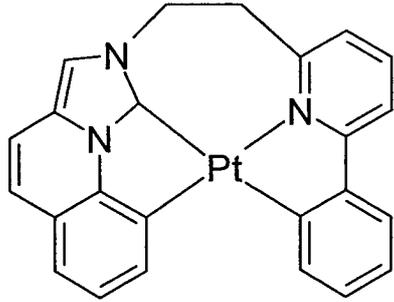
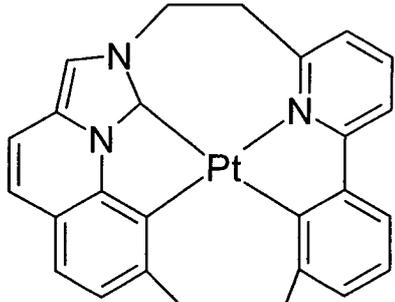
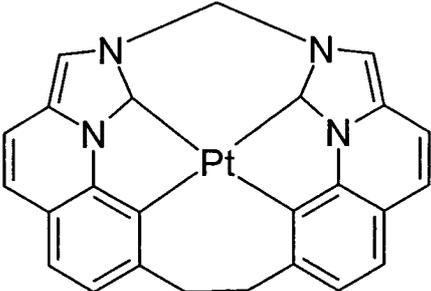
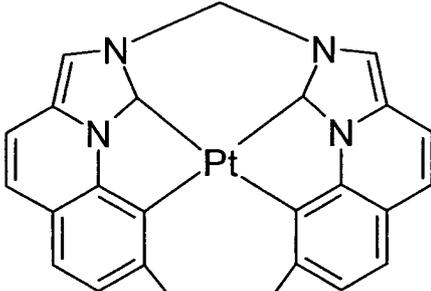
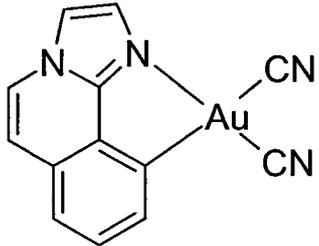
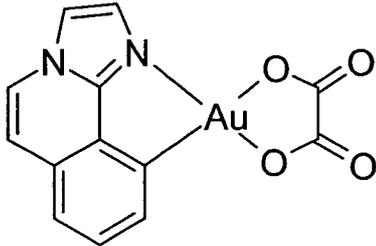
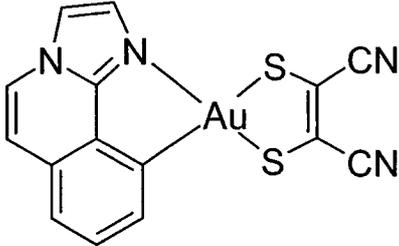
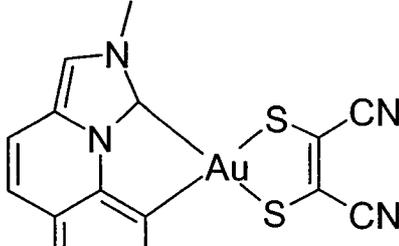
	
298	299
	
300	301
	
302	303
	
304	305

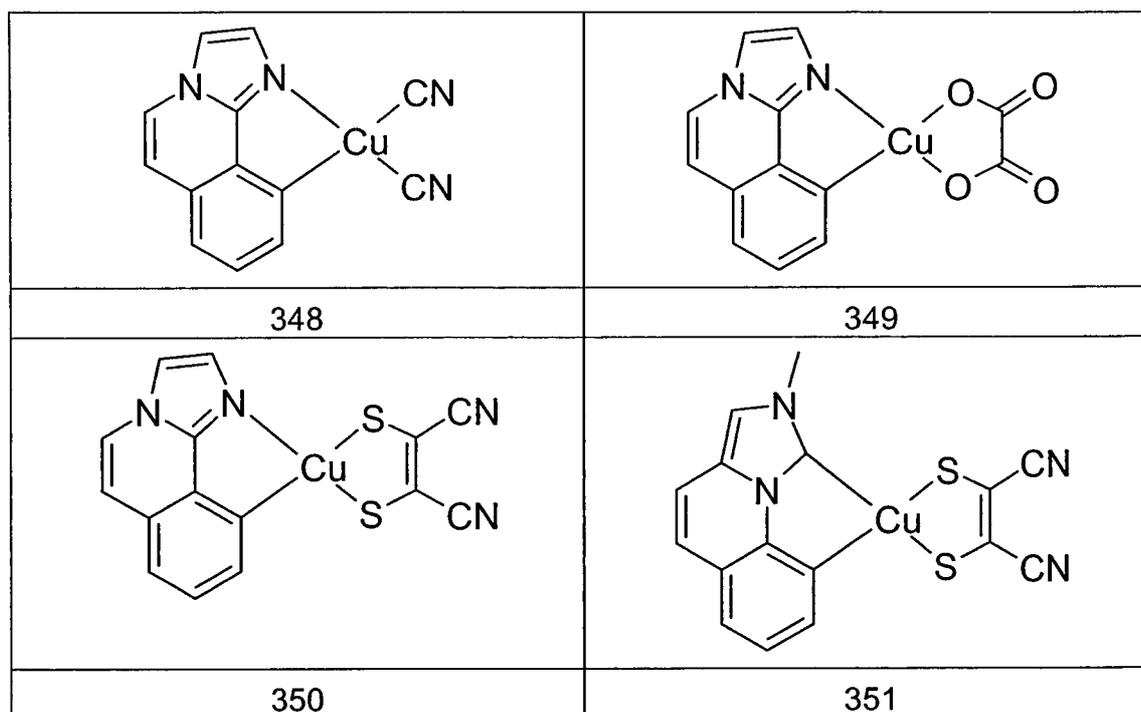
	
306	307
	
308	309
	
310	311
	
312	313
	
314	315







	
340	341
	
342	343
	
344	345
	
346	347



**[0051]** Die oben beschriebenen erfindungsgemäßen Verbindungen können auch als Wiederholeinheiten in konjugierten, teilkonjugierten oder nicht-konjugierten Oligomeren, Polymeren oder Dendrimern Verwendung finden. Unter einem Oligomer im Sinne dieser Erfindung wird eine Verbindung mit ca. 3 bis 10 Wiederholeinheiten, die gleich oder verschieden sein können, verstanden. Die Polymerisation erfolgt dabei bevorzugt über eine Brom- oder Boronsäurefunktionalität. So können derartige Verbindungen u. a. in Polyfluorene (z. B. gemäß EP 842208 oder WO 00/22026), Poly-spirobifluorene (z. B. gemäß EP 707020 oder EP 894107), Poly-dihydrophenanthrene (z. B. gemäß WO 05/014689), Polyindenofluorene (z. B. gemäß WO 04/041901 und WO 04/113468), Polyphenanthrene (z. B. gemäß WO 05/104264), Poly-para-phenylene (z. B. gemäß WO 92/18552), Polycarbazole (z. B. gemäß WO 04/070772 oder WO 04/113468), Polyketone (z. B. gemäß WO 05/040302), Polysilane (z. B. gemäß WO 05/111113) oder Polythiophene (z. B. gemäß EP 1028136) einpolymerisiert werden oder auch in Copolymeren, die verschiedene dieser Einheiten enthalten. Dabei können sie entweder in die Seitenkette oder in die Hauptkette des Polymers eingebaut werden oder können auch Verzweigungspunkte der Polymerketten (z. B. gemäß WO 06/003000) darstellen.

**[0052]** Weiterer Gegenstand der Erfindung sind somit konjugierte, teilkonjugierte oder nicht-konjugierte Oligomere, Polymere oder Dendrimere, enthaltend eine oder mehrere der Verbindungen gemäß Formel (1), wobei mindestens einer der oben definierten Reste R<sup>1</sup> bis R<sup>8</sup> eine Bindung zum Polymer oder Dendrimer darstellt. Für Einheiten gemäß Formel (1) gelten in Polymeren und Dendrimern dieselben Bevorzugungen, wie oben bereits beschrieben. Die Oligomere, Polymere oder Dendrimere können außer den oben aufgeführten Einheiten weitere Einheiten enthalten, die beispielsweise ausgewählt sind aus Wiederholeinheiten, die Lochtransporteigenschaften oder Elektronentransporteigenschaften aufweisen. Hierfür eignen sich die im Stand der Technik bekannten Materialien.

**[0053]** Die oben genannten Oligomere, Polymere, Copolymeren und Dendrimere zeichnen sich durch ihre gute Löslichkeit in organischen Lösemitteln und hohe Effizienz und Stabilität in organischen elektrolumineszierenden Vorrichtungen aus.

**[0054]** Weiterhin können die erfindungsgemäßen Verbindungen gemäß Formel (1), insbesondere solche, die durch Halogene funktionalisiert sind, auch durch gängige Reaktionstypen weiter funktionalisiert werden und so zu erweiterten Verbindungen gemäß Formel (1) umgesetzt werden. Hier ist als Beispiel die Funktionalisierung mit Arylboronsäuren gemäß Suzuki oder mit Aminen gemäß Hartwig-Buchwald zu nennen.

**[0055]** Die oben beschriebenen Komplexe gemäß Formel (1) bzw. die oben aufgeführten bevorzugten Ausführungsformen können in der elektronischen Vorrichtung als aktive Komponente verwendet werden. Unter einer elektronischen Vorrichtung wird eine Vorrichtung verstanden, welche Anode, Kathode und mindestens eine Schicht enthält, wobei diese Schicht mindestens eine organische bzw. metallorganische Verbindung enthält. Die erfindungsgemäße elektronische Vorrichtung enthält also Anode, Kathode und mindestens eine Schicht,

welche mindestens eine Verbindung der oben aufgeführten Formel (1) enthält. Dabei sind bevorzugte elektronische Vorrichtungen ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen (OLEDs, PLEDs), organischen integrierten Schaltungen (O-ICs), organischen Feld-Effekt-Transistoren (O-FETs), organischen Dünnschichttransistoren (O-TFTs), organischen lichtemittierenden Transistoren (O-LETs), organischen Solarzellen (O-SCs), organischen optischen Detektoren, organischen Photorezeptoren, organischen Feld-Quench-Devices (O-FQDs), lichtemittierenden elektrochemischen Zellen (LECs) oder organischen Laserdioden (O-Laser), enthaltend in mindestens einer Schicht mindestens eine Verbindung gemäß der oben aufgeführten Formel (1). Besonders bevorzugt sind organische Elektrolumineszenzvorrichtungen. Aktive Komponenten sind generell die organischen oder anorganischen Materialien, welche zwischen Anode und Kathode eingebracht sind, beispielsweise Ladungsinjektions-, Ladungstransport- oder Ladungsblockiermaterialien, insbesondere aber Emissionsmaterialien und Matrixmaterialien. Die erfindungsgemäßen Verbindungen zeigen besonders gute Eigenschaften als Emissionsmaterial in organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen. Eine bevorzugte Ausführungsform der Erfindung sind daher organische Elektrolumineszenzvorrichtungen.

**[0056]** Die organische Elektrolumineszenzvorrichtung enthält Kathode, Anode und mindestens eine emittierende Schicht. Außer diesen Schichten kann sie noch weitere Schichten enthalten, beispielsweise jeweils eine oder mehrere Lochinjektionsschichten, Lochtransportschichten, Lochblockierschichten, Elektronentransportschichten, Elektroneninjektionsschichten, Excitonenblockierschichten, Ladungserzeugungsschichten und/oder organische oder anorganische p/n-Übergänge. Ebenso können zwischen zwei emittierenden Schichten Interlayers eingebracht sein, welche beispielsweise eine Excitonen-blockierende Funktion aufweisen und/oder die Ladungsbalance in der Elektrolumineszenzvorrichtung steuern. Es sei aber darauf hingewiesen, dass nicht notwendigerweise jede dieser Schichten vorhanden sein muss. Dabei kann die organische Elektrolumineszenzvorrichtung eine emittierende Schicht enthalten, oder sie kann mehrere emittierende Schichten enthalten. Wenn mehrere Emissionsschichten vorhanden sind, weisen diese bevorzugt insgesamt mehrere Emissionsmaxima zwischen 380 nm und 750 nm auf, so dass insgesamt weiße Emission resultiert, d. h. in den emittierenden Schichten werden verschiedene emittierende Verbindungen verwendet, die fluoreszieren oder phosphoreszieren können. Insbesondere bevorzugt sind Dreischichtsysteme, wobei die drei Schichten blaue, grüne und orange oder rote Emission zeigen (für den prinzipiellen Aufbau siehe z. B. WO 05/011013) bzw. Systeme, welche mehr als drei emittierende Schichten aufweisen.

**[0057]** In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung enthält die organische Elektrolumineszenzvorrichtung die Verbindung gemäß Formel (1) bzw. die oben aufgeführten bevorzugten Ausführungsformen als emittierende Verbindung in einer oder mehreren emittierenden Schichten.

**[0058]** Wenn die Verbindung gemäß Formel (1) als emittierende Verbindung in einer emittierenden Schicht eingesetzt wird, wird sie bevorzugt in Kombination mit einem oder mehreren Matrixmaterialien eingesetzt. Die Mischung aus der Verbindung gemäß Formel (1) und dem Matrixmaterial enthält zwischen 1 und 99 Vol.-%, vorzugsweise zwischen 2 und 90 Vol.-%, besonders bevorzugt zwischen 3 und 40 Vol.-%, insbesondere zwischen 5 und 15 Vol.-% der Verbindung gemäß Formel (1) bezogen auf die Gesamtmischung aus Emitter und Matrixmaterial. Entsprechend enthält die Mischung zwischen 99 und 1 Vol.-%, vorzugsweise zwischen 98 und 10 Vol.-%, besonders bevorzugt zwischen 97 und 60 Vol.-%, insbesondere zwischen 95 und 85 Vol.-% des Matrixmaterials bezogen auf die Gesamtmischung aus Emitter und Matrixmaterial.

**[0059]** Geeignete Matrixmaterialien für die erfindungsgemäßen Verbindungen sind Ketone, Phosphinnoxide, Sulfoxide und Sulfone, z. B. gemäß WO 04/013080, WO 04/093207, WO 06/005627 oder der nicht offen gelegten Anmeldung DE 10 2008 033 943.1, Triarylamine, Carbazolderivate, z. B. CBP (N,N-Biscarbazolylbiphenyl) oder die in WO 05/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 oder WO 08/086851 offenbarten Carbazolderivate, Indolocarbazolderivate, z. B. gemäß WO 07/063754 oder WO 08/056746, Azacarbazole, z. B. gemäß EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160, bipolare Matrixmaterialien, z. B. gemäß WO 07/137725, Silane, z. B. gemäß WO 05/111172, Azaborole oder Boronester, z. B. gemäß WO 06/117052, Triazinderivate, z. B. gemäß der nicht offen gelegten Anmeldung DE 10 2008 036 982.9, WO 07/063754 oder WO 08/056746, oder Zinkkomplexe, z. B. gemäß EP 652273 oder gemäß der nicht offen gelegten Anmeldung DE 10 2007 053 771.0.

**[0060]** Es kann auch bevorzugt sein, mehrere verschiedene Matrixmaterialien als Mischung einzusetzen, insbesondere mindestens ein elektronenleitendes Matrixmaterial und mindestens ein lochleitendes Matrixmaterial. Eine bevorzugte Kombination ist beispielsweise die Verwendung eines aromatischen Ketons mit einem Triarylammin-Derivat oder einem Carbazol-Derivat als gemischte Matrix für den erfindungsgemäßen Metallkomplex.

**[0061]** Als Kathode sind Metalle mit geringer Austrittsarbeit, Metallegierungen oder mehrlagige Strukturen aus verschiedenen Metallen bevorzugt, wie beispielsweise Erdalkalimetalle, Alkalimetalle, Hauptgruppenmetalle oder Lanthanoide (z. B. Ca, Ba, Mg, Al, In, Mg, Yb, Sm, etc.). Weiterhin eignen sich Legierungen aus einem Alkali- oder Erdalkalimetall und Silber, beispielsweise eine Legierung aus Magnesium und Silber. Bei mehrlagigen Strukturen können auch zusätzlich zu den genannten Metallen weitere Metalle verwendet werden, die eine relativ hohe Austrittsarbeit aufweisen, wie z. B. Ag, wobei dann in der Regel Kombinationen der Metalle, wie beispielsweise Ca/Ag oder Ba/Ag verwendet werden. Es kann auch bevorzugt sein, zwischen einer metallischen Kathode und dem organischen Halbleiter eine dünne Zwischenschicht eines Materials mit einer hohen Dielektrizitätskonstante einzubringen. Hierfür kommen beispielsweise Alkalimetall- oder Erdalkalimetallfluoride, aber auch die entsprechenden Oxide oder Carbonate in Frage (z. B. LiF, Li<sub>2</sub>O, BaF<sub>2</sub>, MgO, NaF, CsF, Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, etc.). Die Schichtdicke dieser Schicht beträgt bevorzugt zwischen 0.5 und 5 nm.

**[0062]** Als Anode sind Materialien mit hoher Austrittsarbeit bevorzugt. Bevorzugt weist die Anode eine Austrittsarbeit größer 4.5 eV vs. Vakuum auf. Hierfür sind einerseits Metalle mit hohem Redoxpotential geeignet, wie beispielsweise Ag, Pt oder Au. Es können andererseits auch Metall/Metalloxid-Elektronen (z. B. Al/Ni/NiO<sub>x</sub>, Al/PtO<sub>x</sub>) bevorzugt sein. Für einige Anwendungen muss mindestens eine der Elektroden transparent sein, um entweder die Bestrahlung des organischen Materials (O-SC) oder die Auskopplung von Licht (OLED/PLED, O-LASER) zu ermöglichen. Ein bevorzugter Aufbau verwendet eine transparente Anode. Bevorzugte Anodenmaterialien sind hier leitfähige gemischte Metalloxide. Besonders bevorzugt sind Indium-Zinn-Oxid (ITO) oder Indium-Zink Oxid (IZO). Bevorzugt sind weiterhin leitfähige, dotierte organische Materialien, insbesondere leitfähige dotierte Polymere.

**[0063]** In den weiteren Schichten können generell alle Materialien verwendet werden, wie sie gemäß dem Stand der Technik für die Schichten verwendet werden und der Fachmann kann ohne erfinderisches Zutun jedes dieser Materialien in einer elektronischen Vorrichtung mit den erfindungsgemäßen Materialien kombinieren.

**[0064]** Die Vorrichtung wird entsprechend (je nach Anwendung) strukturiert, kontaktiert und schließlich hermetisch versiegelt, da sich die Lebensdauer derartiger Vorrichtungen bei Anwesenheit von Wasser und/oder Luft drastisch verkürzt.

**[0065]** Weiterhin bevorzugt ist eine organische Elektrolumineszenzvorrichtung, dadurch gekennzeichnet, dass eine oder mehrere Schichten mit einem Sublimationsverfahren beschichtet werden. Dabei werden die Materialien in Vakuum-Sublimationsanlagen bei einem Anfangsdruck von üblicherweise kleiner 10<sup>-5</sup> mbar, bevorzugt kleiner 10<sup>-6</sup> mbar aufgedampft. Es ist auch möglich, dass der Anfangsdruck noch geringer ist, beispielsweise kleiner 10<sup>-7</sup> mbar.

**[0066]** 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<sup>-5</sup> mbar und 1 bar aufgebracht. Ein Spezialfall dieses Verfahrens ist das OVJP (Organic Vapour Jet Printing) Verfahren, bei dem die Materialien direkt durch eine Düse aufgebracht und so strukturiert werden (z. B. M. S. Arnold et al., Appl. Phys. Lett. 2008, 92, 053301).

**[0067]** Weiterhin bevorzugt ist eine organische Elektrolumineszenzvorrichtung, dadurch gekennzeichnet, dass eine oder mehrere Schichten aus Lösung, wie z. B. durch Spincoating, oder mit einem beliebigen Druckverfahren, wie z. B. Siebdruck, Flexodruck oder Offsetdruck, besonders bevorzugt aber LITI (Light Induced Thermal Imaging, Thermotransferdruck) oder Ink-Jet Druck (Tintenstrahldruck), hergestellt werden. Hierfür sind lösliche Verbindungen nötig, welche beispielsweise durch geeignete Substitution erhalten werden.

**[0068]** Die organische Elektrolumineszenzvorrichtung kann auch als Hybridsystem hergestellt werden, indem eine oder mehrere Schichten aus Lösung aufgebracht werden und eine oder mehrere andere Schichten aufgedampft werden. So ist es beispielsweise möglich, eine emittierende Schicht enthaltend eine Verbindung gemäß Formel (1) und ein Matrixmaterial aus Lösung aufzubringen und darauf eine Lochblockierschicht und/oder eine Elektronentransportschicht im Vakuum aufzudampfen.

**[0069]** Diese Verfahren sind dem Fachmann generell bekannt und können von ihm ohne Probleme auf organische Elektrolumineszenzvorrichtungen enthaltend Verbindungen gemäß Formel (1) bzw. die oben aufgeführten bevorzugten Ausführungsformen angewandt werden.

**[0070]** Die erfindungsgemäßen elektronischen Vorrichtungen, insbesondere organische Elektrolumineszenzvorrichtungen, zeichnen sich durch folgende überraschende Vorteile gegenüber dem Stand der Technik aus:

1. Organische Elektrolumineszenzvorrichtungen enthaltend Verbindungen gemäß Formel (1) als emittierende Materialien weisen eine exzellente Lebensdauer auf.
2. Organische Elektrolumineszenzvorrichtungen enthaltend Verbindungen gemäß Formel (1) als emittierende Materialien weisen eine hervorragende Effizienz auf.
3. Mit den erfindungsgemäßen Metallkomplexen sind organische Elektrolumineszenzvorrichtungen zugänglich, welche im tiefblauen Farbbereich phosphoreszieren. Insbesondere tiefblaue Phosphoreszenz ist gemäß dem Stand der Technik nur sehr schwierig mit guten Effizienzen und Lebensdauern zu verwirklichen.

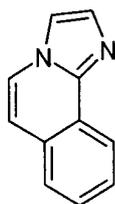
**[0071]** Diese oben genannten Vorteile gehen nicht mit einer Verschlechterung der weiteren elektronischen Eigenschaften einher.

**[0072]** Die Erfindung wird durch die nachfolgenden Beispiele näher erläutert, ohne sie dadurch einschränken zu wollen. Der Fachmann kann aus den Schilderungen ohne erfinderisches Zutun weitere erfindungsgemäße elektronische Vorrichtungen herstellen.

Beispiele:

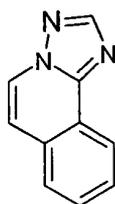
**[0073]** Die nachfolgenden Synthesen werden, sofern nicht anders angegeben, unter einer Schutzgasatmosphäre in getrockneten Lösungsmitteln durchgeführt. Die Lösungsmittel und Reagenzien können von ALDRICH bzw. ABCR bezogen werden. Die Synthesen der folgenden Liganden erfolgt gemäß der angegebenen Literatur:

Ligand 1:



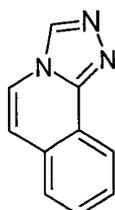
A. D. C. Parently et al., Synthesis 2008, 9, 1479.

Ligand 2:



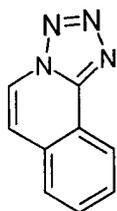
Y.-I. Lin, J. Org. Chem. 1981, 46(15), 3123.

Ligand 3:



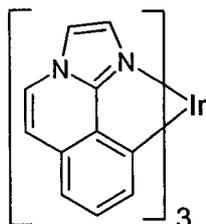
G. S. Sidhu, J. Heterocyclic Chem. 1966, 3(2), 158.

Ligand 4:



J. M. Keith, J. Org. Chem. 2006, 71(25), 9540.

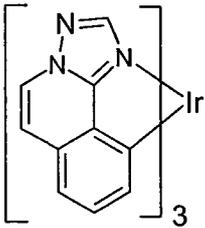
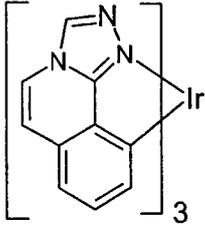
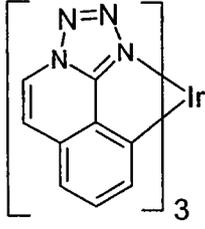
Beispiel 1: Synthese des Iridiumkomplexes mit Ligand 1 (Verbindung 1)



**[0074]** Eine Mischung aus 2.10 g (12.5 mmol) des Liganden 1 und 1.12 g (2.5 mmol) Natrium-bis-acetylacetonato-dichloro-iridat(III) in 5 ml Triethylenglycol wird unter Überleitung eines leichten Argonstromes 24 h bei 240°C gerührt. Nach Erkalten wird mit 100 ml 1 N Salzsäure verdünnt und fünfmal mit je 100 ml Dichlormethan extrahiert. Die organische Phase wird dreimal mit je 200 ml Wasser gewaschen, über einem Gemisch aus Natriumsulfat und Natriumcarbonat getrocknet und dann zur Trockene eingeeengt. Der Rückstand wird an Kieselgel (Laufmittel Dichlormethan) chromatographiert, anschließend aus Dichlormethan/Hexan umkristallisiert und dann im Vakuum ( $p = 1 \times 10^{-5}$  mbar,  $T = 340^\circ\text{C}$ ) sublimiert. Ausbeute: 0.33 g (0.47 mmol), 19.0%; Reinheit 99.9%ig nach HPLC.

Beispiele 2 bis 4:

**[0075]** Analog zu Beispiel 1 werden folgende Ir-Komplexe aus den Liganden 2, 3 und 4 dargestellt:

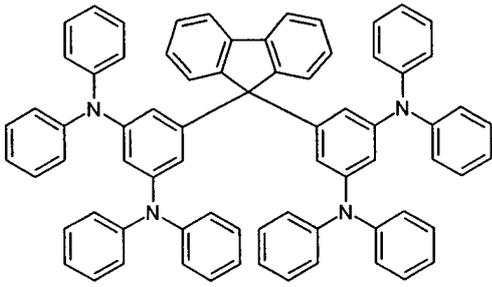
Bsp.	Ligand	Ir-Komplex	Ausbeute
2	2		23.9 %
3	3		12.0 %
4	4		3.4 %

Beispiel 5: Herstellung und Charakterisierung von organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen, enthaltend die erfindungsgemäßen Verbindungen

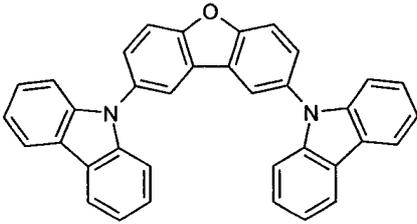
**[0076]** Erfindungsgemäße Elektrolumineszenzvorrichtungen können, wie beispielsweise in WO 05/003253 beschrieben, dargestellt werden. Hier werden die Ergebnisse verschiedener OLEDs gegenübergestellt. Der grundlegende Aufbau, die verwendeten Materialien, der Dotierungsgrad und ihre Schichtdicken sind zur besseren Vergleichbarkeit identisch. Die Devicebeispiele 6 und 7 beschreiben Vergleichsstandards nach dem Stand der Technik, bei dem die Emissionsschicht aus dem Wirtsmaterial (bzw. Matrix) 3,6-Bis-N-Carbazolyldibenzofuran M und dem blau emittierenden Gastmaterial (Dotanden) 10% fac-Tris[2-(2-pyridinyl)(5-cyanophenyl)]iridium(III) TEB 1 (Beispiel 6) bzw. TEB 2 (Beispiel 7) besteht. Des Weiteren werden OLEDs mit identischem Aufbau und erfindungsgemäßen Dotanden beschrieben (Beispiel 8). Dabei wird der folgende Device-Aufbau verwendet:

Lochinjektionsschicht (HIL)	20 nm 2,2',7,7'-Tetrakis(di-para-tolylamino)spiro-9,9'-bifluoren
Lochtransportschicht (HTL)	5 nm NPB (N-Naphthyl-N-phenyl-4,4'-diaminobiphenyl).
Elektronenblockierschicht (EBL)	15 nm EBL (9,9-Bis-(3,5-diphenylaminophenyl)fluoren)
Emissionsschicht (EML)	40 nm Wirtsmaterial: 3,6-Bis-N-Carbazolyldibenzofuran M Dotand: 10 Vol.% Dotierung; Verbindungen s. Tabelle 1.
Elektronenleiter (ETL)	20 nm BALq
Kathode	1 nm LiF, darauf 100 nm Al.

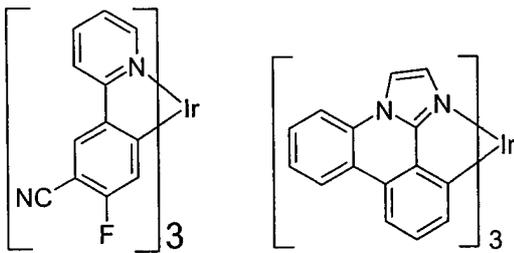
**[0077]** Die Strukturen von EBL, M und TEB sind der Übersichtlichkeit halber im Folgenden abgebildet.



EBL



M



TEB 1

TEB 2

**[0078]** Diese noch nicht optimierten OLEDs werden standardmäßig charakterisiert; hierfür werden die Elektrolumineszenzspektren, die externe Quanteneffizienz (gemessen in %) in Abhängigkeit von der Helligkeit, berechnet aus Strom-Spannungs-Helligkeit-Kennlinien (IUL-Kennlinien) bestimmt.

**[0079]** Wie man Tabelle 1 entnehmen kann, zeigen die erfindungsgemäßen Elektrolumineszenzvorrichtungen in den externen Quanteneffizienzen (EQE), Spannungen und Farbkoordinaten ein vergleichbares bzw. überlegenes Verhalten gegenüber den Vergleichsdevices mit dem Dotanden TEB 1 bzw. TEB 2 gemäß dem Stand der Technik.

Tabelle 1: Device-Ergebnisse

Bsp.	Dotand	EQE bei 100 cd/m <sup>2</sup> [%]	Spannung bei 100 cd/m <sup>2</sup> [V]	CIE x/y
6 (Vgl.)	TEB 1	8.3	6.6	0.16/0.25
7 (Vgl.)	TEB 2	6.9	6.9	0.15/0.22
8	Verbindung 1 (aus Bsp. 1)	8.5	6.2	0.14/0.21

**ZITATE ENTHALTEN IN DER BESCHREIBUNG**

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

**Zitierte Patentliteratur**

- US 4539507 [\[0001\]](#)
- US 5151629 [\[0001\]](#)
- EP 0676461 [\[0001\]](#)
- WO 98/27136 [\[0001\]](#)
- WO 04/081017 [\[0002\]](#)
- WO 05/113563 [\[0002\]](#)
- WO 06/008069 [\[0002\]](#)
- WO 07/095118 [\[0003\]](#)
- WO 04/085449 [\[0046, 0048\]](#)
- WO 02/060910 [\[0048\]](#)
- WO 05/042548 [\[0048\]](#)
- EP 842208 [\[0051\]](#)
- WO 00/22026 [\[0051\]](#)
- EP 707020 [\[0051\]](#)
- EP 894107 [\[0051\]](#)
- WO 05/014689 [\[0051\]](#)
- WO 04/041901 [\[0051\]](#)
- WO 04/113468 [\[0051, 0051\]](#)
- WO 05/104264 [\[0051\]](#)
- WO 92/18552 [\[0051\]](#)
- WO 04/070772 [\[0051\]](#)
- WO 05/040302 [\[0051\]](#)
- WO 05/111113 [\[0051\]](#)
- EP 1028136 [\[0051\]](#)
- WO 06/003000 [\[0051\]](#)
- WO 05/011013 [\[0056\]](#)
- WO 04/013080 [\[0059\]](#)
- WO 04/093207 [\[0059\]](#)
- WO 06/005627 [\[0059\]](#)
- DE 102008033943 [\[0059\]](#)
- WO 05/039246 [\[0059\]](#)
- US 2005/0069729 [\[0059\]](#)
- JP 2004/288381 [\[0059\]](#)
- EP 1205527 [\[0059\]](#)
- WO 08/086851 [\[0059\]](#)
- WO 07/063754 [\[0059, 0059\]](#)
- WO 08/056746 [\[0059, 0059\]](#)
- EP 1617710 [\[0059\]](#)
- EP 1617711 [\[0059\]](#)
- EP 1731584 [\[0059\]](#)
- JP 2005/347160 [\[0059\]](#)
- WO 07/137725 [\[0059\]](#)
- WO 05/111172 [\[0059\]](#)
- WO 06/117052 [\[0059\]](#)
- DE 102008036982 [\[0059\]](#)
- EP 652273 [\[0059\]](#)
- DE 102007053771 [\[0059\]](#)
- WO 05/003253 [\[0076\]](#)

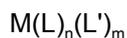
**Zitierte Nicht-Patentliteratur**

- M. A. Baldo et al., Appl. Phys. Lett. 1999, 75, 4–6 [\[0001\]](#)

- Elschenbroich, Salzer, Organometallic Chemie, Teubner Studienbücher, Stuttgart 1993 [\[0018\]](#)
- M. S. Arnold et al., Appl. Phys. Lett. 2008, 92, 053301 [\[0066\]](#)
- A. D. C. Parently et al., Synthesis 2008, 9, 1479. [\[0073\]](#)
- Y.-I. Lin, J. Org. Chem. 1981, 46(15), 3123. [\[0073\]](#)
- G. S. Sidhu, J. Heterocyclic Chem. 1966, 3(2), 158. [\[0073\]](#)
- J. M. Keith, J. Org. Chem. 2006, 71(25), 9540. [\[0073\]](#)

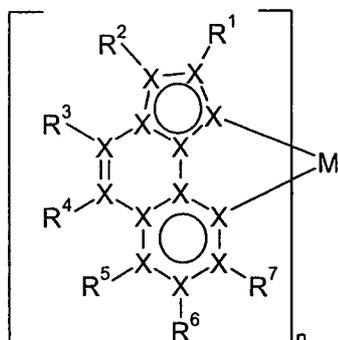
## Patentansprüche

1. Verbindung gemäß Formel (1),

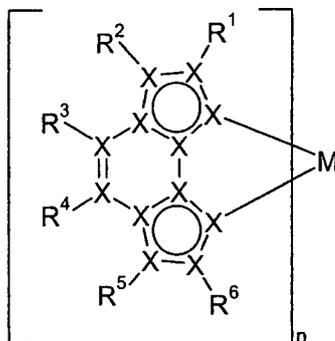


Formel (1)

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



Formel (2)



Formel (3)

wobei für die verwendeten Symbole und Indizes gilt:

M ist ein Metall;

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

$R^1$  bis  $R^7$  ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, D, F, Cl, Br, I,  $N(R^8)_2$ , CN,  $NO_2$ ,  $Si(R^8)_3$ ,  $B(OR^8)_2$ ,  $C(=O)R^8$ ,  $P(=O)(R^8)_2$ ,  $S(O)R^8$ ,  $S(=O)_2R^8$ ,  $OSO_2R^8$ , eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine geradkettige Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^8$  substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $CH_2$ -Gruppen durch  $R^8C=CR^8$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^8)_2$ ,  $Ge(R^8)_2$ ,  $Sn(R^8)_2$ , C=O, C=S, C=Se,  $C=NR^8$ ,  $P(=O)(R^8)$ , SO,  $SO_2$ ,  $NR^8$ , O, S oder  $CONR^8$  ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch D, F, Cl, Br, I, CN oder  $NO_2$  ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^8$  substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste  $R^8$  substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste  $R^8$  substituiert sein kann; dabei können  $R^1$  und  $R^2$  und/oder  $R^2$  und  $R^3$  und/oder  $R^4$  und  $R^5$  und/oder  $R^5$  und  $R^6$  und/oder  $R^6$  und  $R^7$  auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches, aromatisches und/oder benzoannelliertes Ringsystem bilden; weiterhin können  $R^3$  und  $R^4$  miteinander ein mono- oder polycyclisches aliphatisches Ringsystem bilden;

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

$R^8$  ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, D, F, Cl, Br, I,  $N(R^9)_2$ , CN,  $NO_2$ ,  $Si(R^9)_3$ ,  $B(OR^9)_2$ ,  $C(=O)R^9$ ,  $P(=O)(R^9)_2$ ,  $S(=O)R^9$ ,  $S(=O)_2R^9$ ,  $OSO_2R^9$ , eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine geradkettige Alkenyl- oder Alkynylgruppe mit 2 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten  $R^9$  substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $CH_2$ -Gruppen durch  $R^9C=CR^9$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^9)_2$ ,  $Ge(R^9)_2$ ,  $Sn(R^9)_2$ , C=O, C=S, C=Se,  $C=NR^9$ ,  $P(=O)(R^9)$ , SO,  $SO_2$ ,  $NR^9$ , O, S oder  $CONR^9$  ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch D, F, Cl, Br, I, CN oder  $NO_2$  ersetzt sein können, oder ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, das jeweils durch einen oder mehrere Reste  $R^9$  substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 60 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste  $R^9$  substituiert sein kann, oder eine Diarylaminogruppe, Diheteroarylaminogruppe oder Arylheteroarylaminogruppe mit 10 bis 40 aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste  $R^9$  substituiert sein kann; dabei können zwei oder mehrere benachbarte Reste  $R^8$  miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden;

$R^9$  ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, D, F oder ein aliphatischer, aromatischer und/oder heteroaromatischer Kohlenwasserstoffrest mit 1 bis 20 C-Atomen, in dem auch ein oder mehrere H-Atome durch

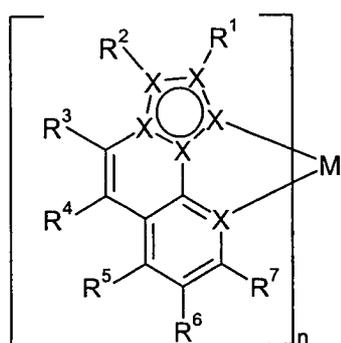
F ersetzt sein können; dabei können zwei oder mehrere Substituenten  $R^9$  auch miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden;  
 $L'$  ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten ein beliebiger Coligand;  
 $n$  ist 1, 2, 3 oder 4;  
 $m$  ist 0, 1, 2, 3, 4, 5 oder 6;  
dabei können auch mehrere Liganden  $L$  miteinander oder  $L$  mit  $L'$  über eine beliebige Brücke  $V$  verknüpft sein und so ein tridentates, tetradentates, pentadentates oder hexadentates Ligandensystem aufspannen.

2. Verbindung nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass diese nicht geladen, d. h. elektrisch neutral, ist.

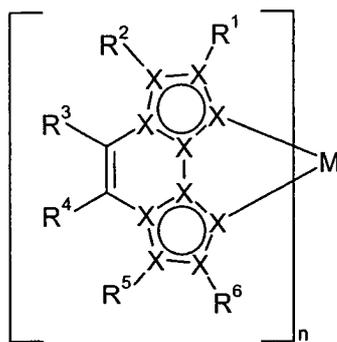
3. Verbindung nach Anspruch 1 oder 2, dadurch gekennzeichnet, dass das Metall  $M$  für ein Übergangsmetall, bevorzugt ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Chrom, Molybdän, Wolfram, Rhenium, Ruthenium, Osmium, Rhodium, Iridium, Nickel, Palladium, Platin, Kupfer, Silber und Gold, oder für ein Hauptgruppenmetall aus der dritten, der vierten oder der fünften Hauptgruppe steht.

4. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, dass  $M$  ein tetrakoordiniertes Metall ist und der Index  $n$  für 1 oder 2 steht oder dass  $M$  ein hexakoordiniertes Metall ist und der Index  $n$  für 1, 2 oder 3, bevorzugt für 2 oder 3 steht.

5. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 4, dadurch gekennzeichnet, dass die Teilstrukturen der Formel (2) gewählt aus den Strukturen der Formel (4) und die Teilstrukturen der Formel (3) aus den Strukturen der Formel (5),



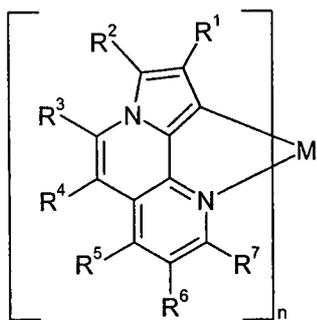
Formel (4)



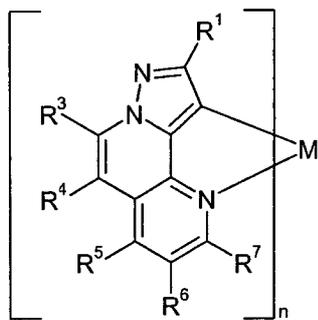
Formel (5)

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

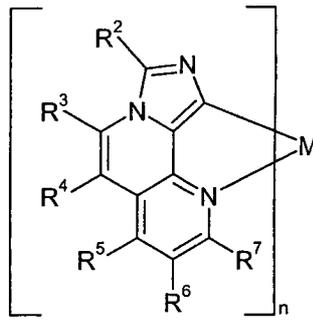
6. Verbindung nach Anspruch 5, dadurch gekennzeichnet, dass die Teilstrukturen gemäß den Formeln (4) und (5) ausgewählt sind aus Strukturen gemäß den Formeln (6) bis (24),



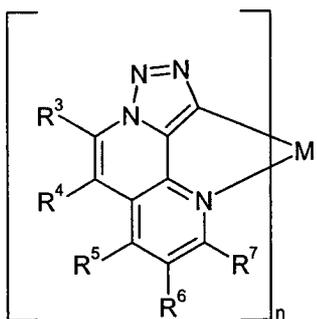
Formel (6)



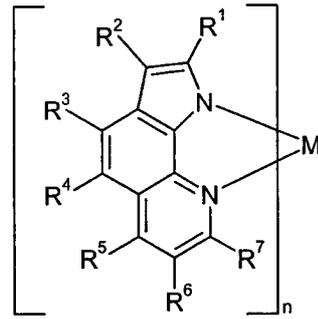
Formel (7)



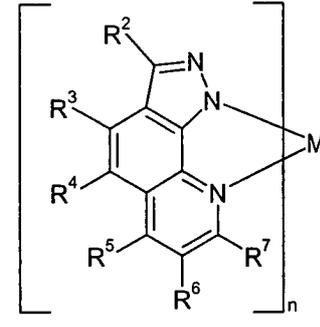
Formel (8)



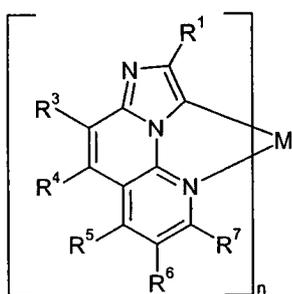
Formel (9)



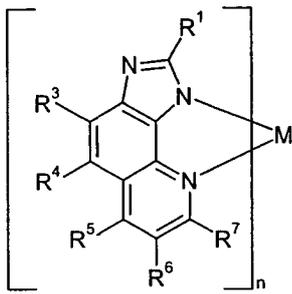
Formel (10)



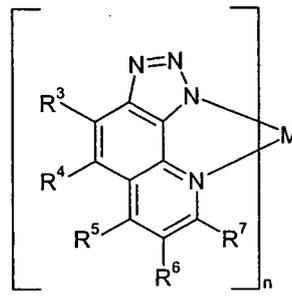
Formel (11)



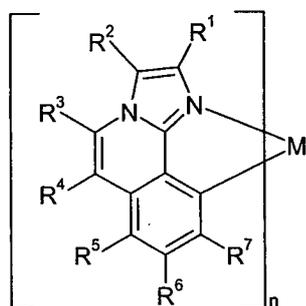
Formel (12)



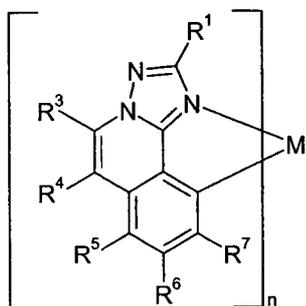
Formel (13)



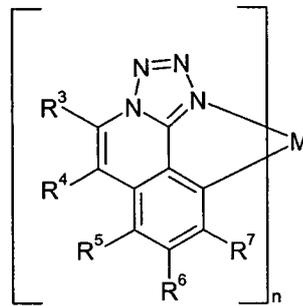
Formel (14)



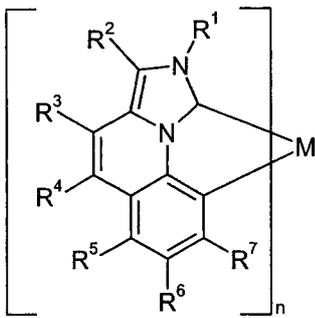
Formel (15)



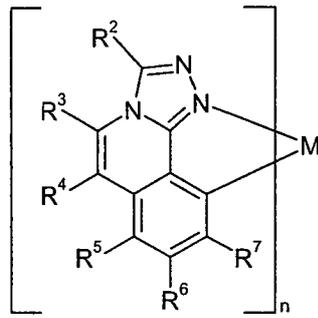
Formel (16)



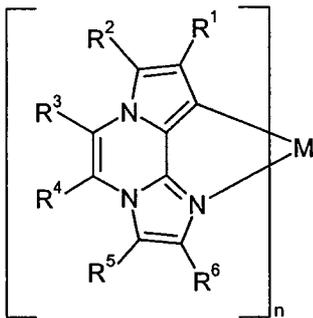
Formel (17)



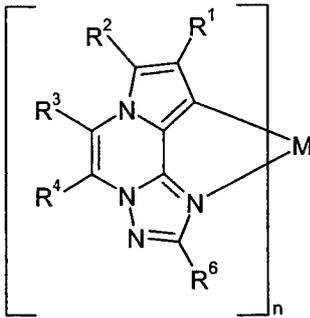
Formel (18)



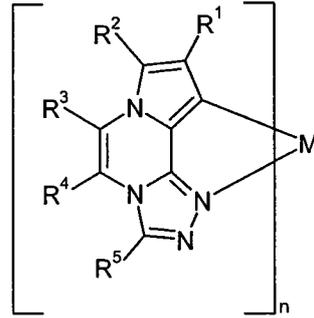
Formel (19)



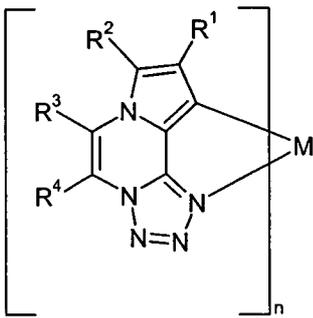
Formel (20)



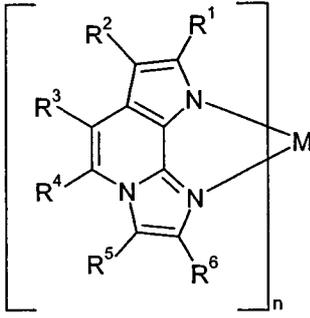
Formel (21)



Formel (22)



Formel (23)

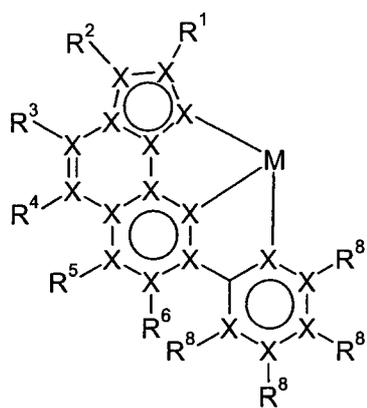


Formel (24)

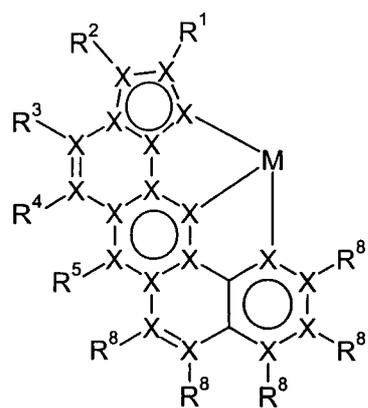
wobei die verwendeten Symbole und Indizes die in Anspruch 1 angegebenen Bedeutungen haben.

7. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 6, dadurch gekennzeichnet, dass der Substituent  $R^7$  eine koordinierende Gruppe darstellt, die an das Metall M koordiniert, bevorzugt ausgewählt aus Aryl- bzw. Heteroarylgruppen, Aryl- oder Alkylcyaniden, Aryl- oder Alkylisocyaniden, Aminen oder Amiden, Alkoholen oder Alkoholaten, Thioalkoholen oder Thioalkoholaten, Phosphinen, Phosphiten, Carbonylfunktionen, Carboxylaten, Carbamiden oder Aryl- oder Alkylacetyliden.

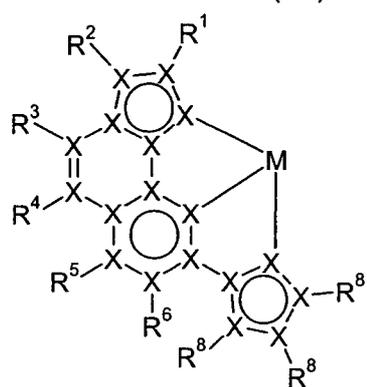
8. Verbindung nach Anspruch 7, dadurch gekennzeichnet, dass die Teilstruktur ML ausgewählt sind aus den Strukturen der Formeln (34) bis (41):



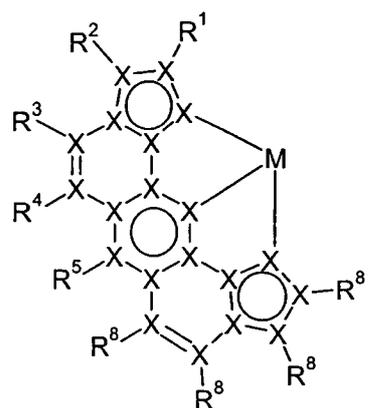
Formel (34)



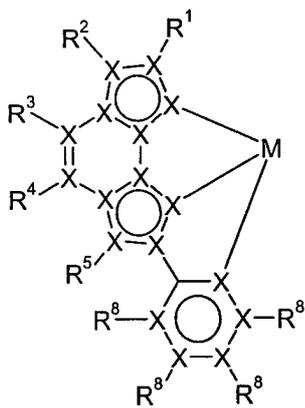
Formel (35)



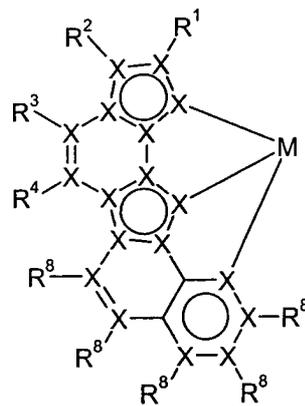
Formel (36)



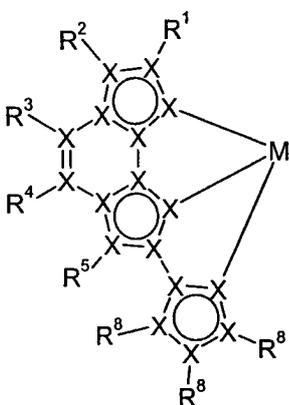
Formel (37)



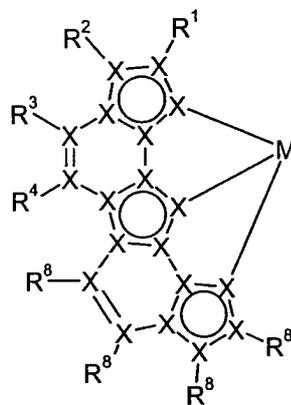
Formel (38)



Formel (39)



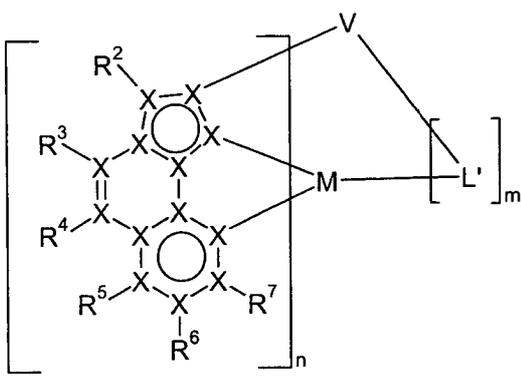
Formel (40)



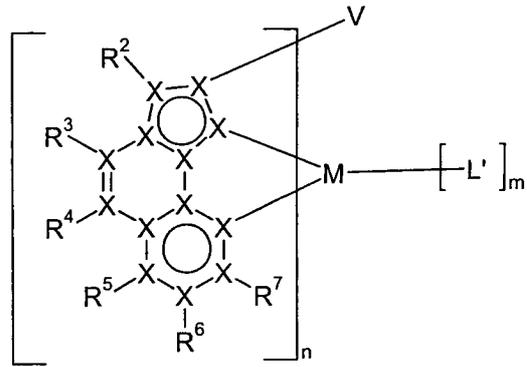
Formel (41)

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

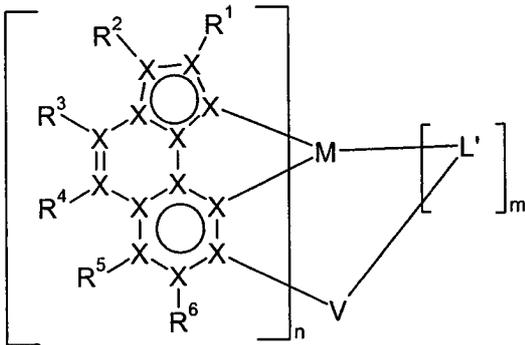
9. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 8, dadurch gekennzeichnet, dass die Komplexe einen mehrzähligen polydentaten Liganden enthalten, wobei die Metallkomplexe ausgewählt sind aus den Formeln (42) bis (49),



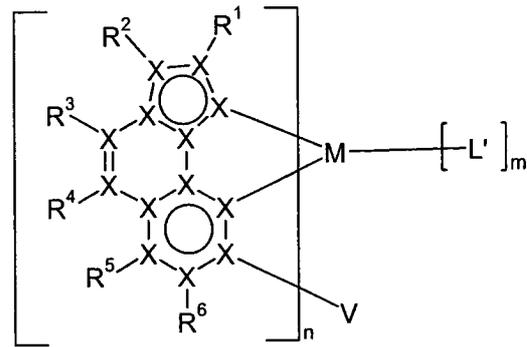
Formel (42)



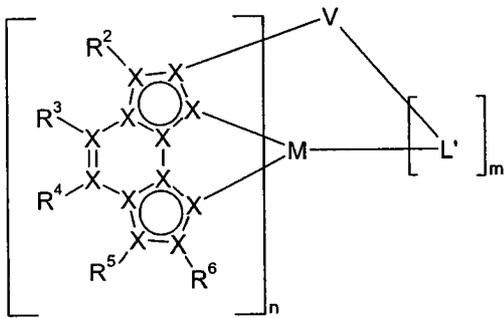
Formel (43)



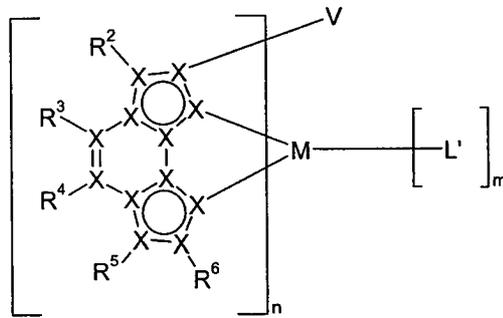
Formel (44)



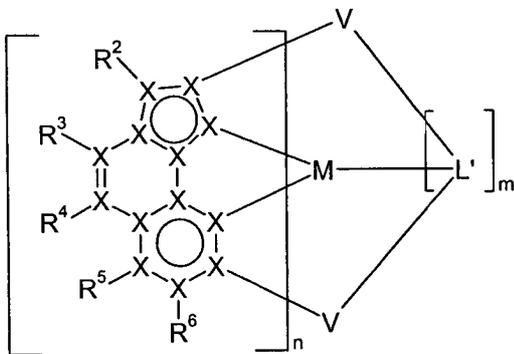
Formel (45)



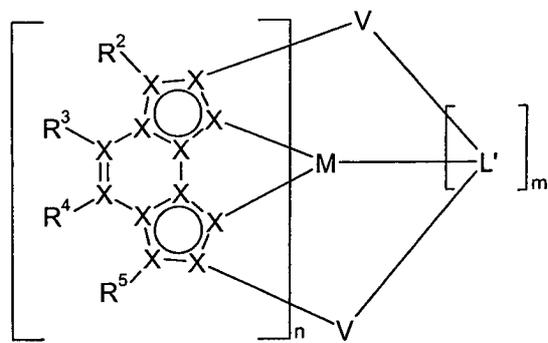
Formel (46)



Formel (47)



Formel (48)

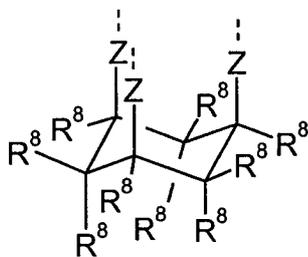


Formel (49)

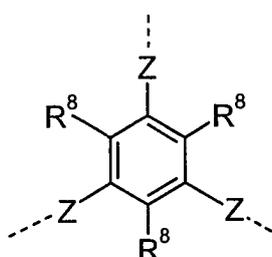
wobei die verwendeten Symbole die in Anspruch 1 genannten Bedeutungen aufweisen und V bevorzugt eine

verbrückende Einheit darstellt, enthaltend 1 bis 80 Atome aus der dritten, vierten, fünften und/oder sechsten Hauptgruppe (Gruppe 13, 14, 15 oder 16 gemäß IUPAC) oder einen 3- bis 6-gliedrigen Homo- oder Heterocyclus, die die Teilliganden L miteinander oder L mit L' miteinander kovalent verbindet.

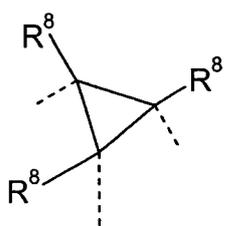
10. Verbindung nach Anspruch 9, dadurch gekennzeichnet, dass V, wenn es eine trivalente Gruppe ist, also drei Liganden L miteinander bzw. zwei Liganden L mit L' oder einen Liganden L mit zwei Liganden L' verbrückt, gleich oder verschieden bei jedem Auftreten gewählt aus der Gruppe bestehend aus B,  $B(R^8)^-$ ,  $B(C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)B(C(R^8)_2)_3^-$ ,  $B(O)_3$ ,  $(R^8)B(O)_3^-$ ,  $B(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)B(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^-$ ,  $B(C(R^8)_2O)_3$ ,  $(R^8)B(C(R^8)_2O)_3^-$ ,  $B(OC(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)B(OC(R^8)_2)_3^-$ ,  $O(R^8)$ ,  $CO^-$ ,  $CN(R^8)_2$ ,  $(R^8)C(C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(O)_3$ ,  $(R^8)C(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(C(R^8)_2O)_3$ ,  $(R^8)C(OC(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(Si(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(Si(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(C(R^8)_2Si(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)C(Si(R^8)_2Si(R^8)_2)_3$ ,  $Si(R^8)$ ,  $(R^8)Si(C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(O)_3$ ,  $(R^8)Si(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(OC(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(C(R^8)_2O)_3$ ,  $(R^8)Si(Si(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(Si(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(C(R^8)_2Si(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)Si(Si(R^8)_2Si(R^8)_2)_3$ , N, NO,  $N(R^8)^+$ ,  $N(C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)N(C(R^8)_2)_3^+$ ,  $N(C=O)_3$ ,  $N(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $(R^8)N(C(R^8)_2C(R^8)_2)^+$ , P,  $P(R^8)^+$ , PO, PS, PSe, PTe,  $P(O)_3$ ,  $PO(O)_3$ ,  $P(OC(R^8)_2)_3$ ,  $PO(OC(R^8)_2)_3$ ,  $P(C(R^8)_2)_3$ ,  $P(R^8)(C(R^8)_2)_3^+$ ,  $PO(C(R^8)_2)_3$ ,  $P(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $P(R^8)(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^+$ ,  $PO(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ , As,  $As(R^8)^+$ , AsO, AsS, AsSe, AsTe,  $As(O)_3$ ,  $AsO(O)_3$ ,  $As(OC(R^8)_2)_3$ ,  $AsO(OC(R^8)_2)_3$ ,  $As(C(R^8)_2)_3$ ,  $As(R^8)(C(R^8)_2)_3^+$ ,  $AsO(C(R^8)_2)_3$ ,  $As(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $As(R^8)(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^+$ ,  $AsO(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ , Sb,  $Sb(R^8)^+$ , SbO, SbS, SbSe, SbTe,  $Sb(O)_3$ ,  $SbO(O)_3$ ,  $Sb(OC(R^8)_2)_3$ ,  $SbO(OC(R^8)_2)_3$ ,  $Sb(C(R^8)_2)_3$ ,  $Sb(R^8)(C(R^8)_2)_3^+$ ,  $SbO(C(R^8)_2)_3$ ,  $Sb(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $Sb(R^8)(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^+$ ,  $SbO(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ , Bi,  $Bi(R^8)^+$ , BiO, BiS, BiSe, BiTe,  $Bi(O)_3$ ,  $BiO(O)_3$ ,  $Bi(OC(R^8)_2)_3$ ,  $BiO(OC(R^8)_2)_3$ ,  $Bi(C(R^8)_2)_3$ ,  $Bi(R^8)(C(R^8)_2)_3^+$ ,  $BiO(C(R^8)_2)_3$ ,  $Bi(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ ,  $Bi(R^8)(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^+$ ,  $BiO(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3$ , S+,  $S(C(R^8)_2)_3$ ,  $S(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^+$ ,  $Se^+$ ,  $Se(C(R^8)_2)_3$ ,  $Se(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^+$ ,  $Te^+$ ,  $Te(C(R^8)_2)_3^+$ ,  $Te(C(R^8)_2C(R^8)_2)_3^+$ ,  
oder eine Einheit gemäß Formel (50), (51), (52) oder (53),



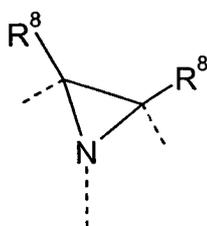
Formel (50)



Formel (51)



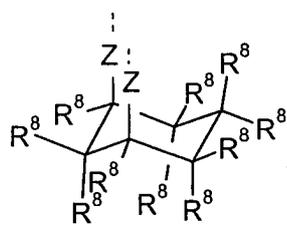
Formel (52)



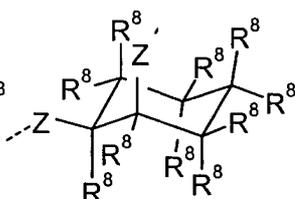
Formel (53)

wobei die gestrichelten Bindungen jeweils die Bindung zu den Teilliganden L bzw. L' andeuten und Z gleich oder verschieden bei jedem Auftreten ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus einer Einfachbindung, O, S,  $S(=O)$ ,  $S(=O)_2$ ,  $NR^8$ ,  $PR^8$ ,  $P(O)R^8$ ,  $P(=NR^8)$ ,  $C(R^8)_2$ ,  $C(=O)$ ,  $C(=NR^8)$ ,  $C(=C(R^8)_2)$ ,  $Si(R^8)_2$  oder  $BR^8$  und die weiteren verwendeten Symbole die in Anspruch 1 genannten Bedeutungen haben;

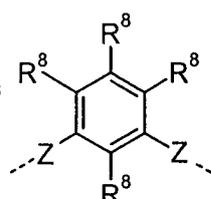
oder dass V, wenn V eine bivalente Gruppe ist, also zwei Liganden L miteinander bzw. einen Liganden L mit L' verbrückt, gleich oder verschieden bei jedem Auftreten gewählt ist aus der Gruppe bestehend aus  $BR^8$ ,  $B(R^8)_2^-$ ,  $C(R^8)_2$ ,  $C(=O)$ ,  $Si(R^8)_2$ ,  $NR^8$ ,  $PR^8$ ,  $P(R^8)_2^+$ ,  $P(=O)(R^8)$ ,  $P(=S)(R^8)$ ,  $AsR^8$ ,  $As(=O)(R^8)$ ,  $As(=S)(R^8)$ , O, S, Se, oder eine Einheit gemäß Formel (54) bis (63),



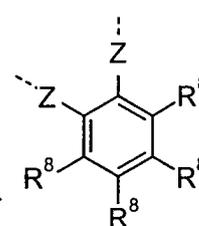
Formel (54)



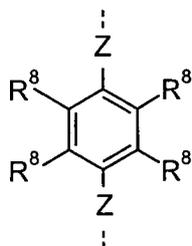
Formel (55)



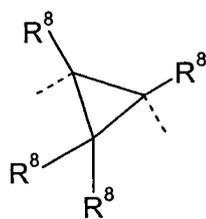
Formel (56)



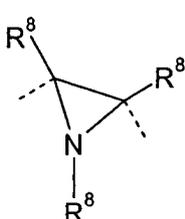
Formel (57)



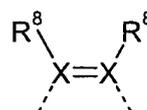
Formel (58)



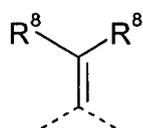
Formel (59)



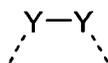
Formel (60)



Formel (61)



Formel (62)

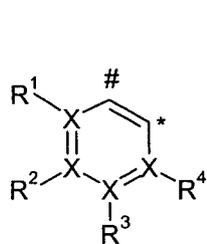


Formel (63)

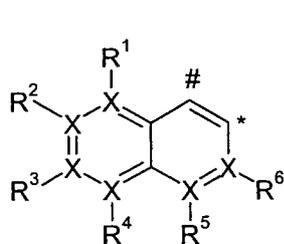
wobei die gestrichelten Bindungen jeweils die Bindung zu den Teilliganden L bzw. L' andeuten, Y bei jedem Auftreten gleich oder verschieden für C(R<sup>8</sup>)<sub>2</sub>, N(R<sup>8</sup>), O oder S steht, Z gleich oder verschieden bei jedem Auftreten ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus einer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

11. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 10, dadurch gekennzeichnet, dass die Liganden L' gleich oder verschieden bei jedem Auftreten ausgewählt sind aus der Gruppe der Liganden bestehend aus Kohlenmonoxid, Alkylcyaniden, Arylcyaniden, Alkylisocyaniden, Arylisocyaniden, Aminen, Phosphinen, Phosphiten, Arsinen, Stibinen, stickstoffhaltigen Heterocyclen, Carbenen, Hydrid, Deuterid, den Halogeniden F<sup>-</sup>, Cr<sup>-</sup>, Br<sup>-</sup> und I<sup>-</sup>, Alkylacetyliden, Arylacetyliden, Cyanid, Cyanat, Isocyanat, Thiocyanat, Isothiocyanat, aliphatischen oder aromatischen Alkoholaten, aliphatischen oder aromatischen Thioalkoholaten, Amidien, Carboxylaten, Arylgruppen, anionischen, stickstoffhaltigen Heterocyclen, O<sup>2-</sup>, S<sup>2-</sup>, Carbide, Nitrene, N<sup>3-</sup>, Diaminen, Iminen, Heterocyclen enthaltend zwei Stickstoffatome, Diphosphinen, 1,3-Diketonaten abgeleitet von 1,3-Diketonen, 3-Ketonaten abgeleitet von 3-Ketoestern, Carboxylaten abgeleitet von Aminocarbonsäuren, Salicyliminaten abgeleitet von Salicyliminen, Dialkoholaten abgeleitet von Dialkoholen, Dithiolaten abgeleitet von Dithiolen, Borste stickstoffhaltiger Heterocyclen, η<sup>5</sup>-Cyclopentadienyl, η<sup>5</sup>-Pentamethylcyclopentadienyl, η<sup>6</sup>-Benzol oder η<sup>7</sup>-Cycloheptatrienyl, welche jeweils durch einen oder mehrere Reste R<sup>1</sup> substituiert sein können;

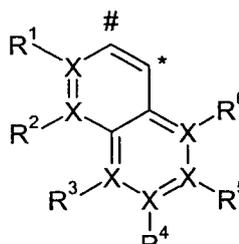
und/oder die Liganden L' sind gleich oder verschieden bei jedem Auftreten bidentate monoanionische Liganden L', welche mit dem Metall einen cyclometallierten Fünfring oder Sechsring mit mindestens einer Metall-Kohlenstoff-Bindung aufweisen, bevorzugt die Kombination aus zwei Gruppen, wie sie durch die folgenden Formeln (64) bis (91) dargestellt sind, wobei eine Gruppe über ein neutrales Stickstoffatom oder ein Carbenatom bindet und die andere Gruppe über ein negativ geladenes Kohlenstoffatom oder ein negativ geladenes Stickstoffatom bindet, wobei in diesen Gruppen die Aromaten jeweils an der durch # gekennzeichneten Position aneinander binden und die Position, an der die Gruppen an das Metall koordinieren, durch \* gekennzeichnet sind,



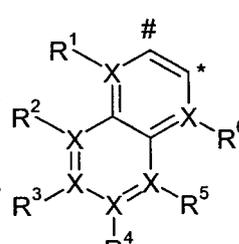
Formel (64)



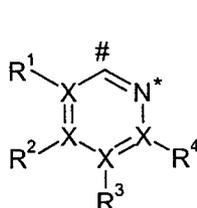
Formel (65)



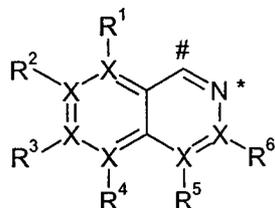
Formel (66)



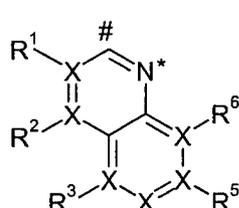
Formel (67)



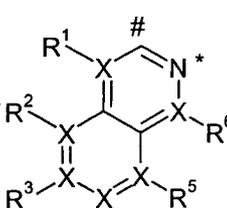
Formel (68)



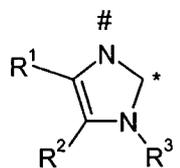
Formel (69)



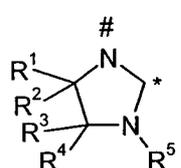
Formel (70)



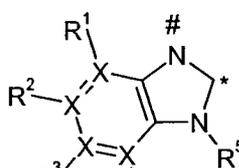
Formel (71)



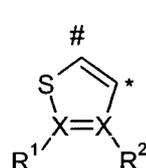
Formel (72)



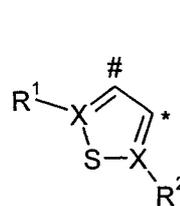
Formel (73)



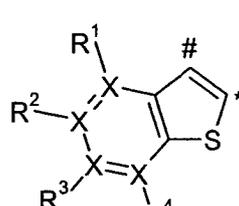
Formel (74)



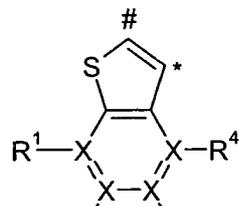
Formel (75)



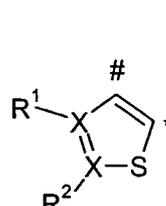
Formel (76)



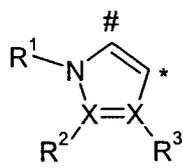
Formel (77)



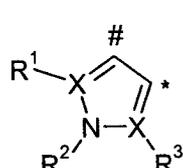
Formel (78)



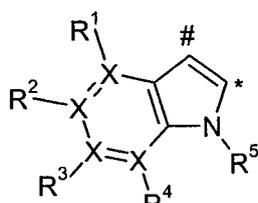
Formel (79)



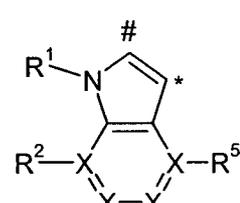
Formel (80)



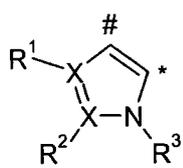
Formel (81)



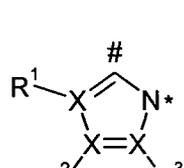
Formel (82)



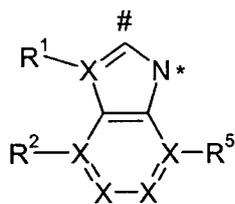
Formel (83)



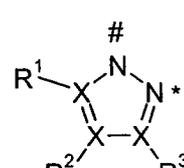
Formel (84)



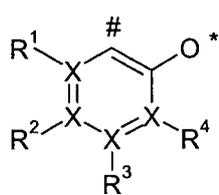
Formel (85)



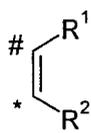
Formel (86)



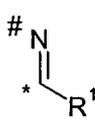
Formel (87)



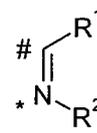
Formel (88)



Formel (89)

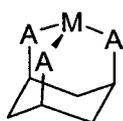


Formel (90)

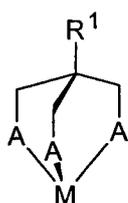


Formel (91)

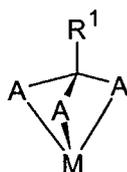
wobei die verwendeten Symbole dieselbe Bedeutung haben wie in Anspruch 1 beschrieben; und/oder die Liganden L' sind gleich oder verschieden bei jedem Auftreten 1,3,5-cis-Cyclohexanderivate der Formel (92), 1,1,1-Tri(methylen)methanderivate der Formel (93) und/oder 1,1,1-trisubstituierte Methane der Formel (94) oder (95),



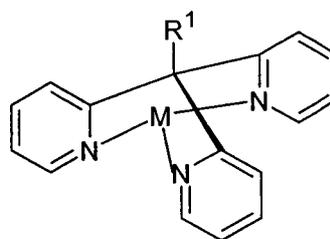
Formel (92)



Formel (93)



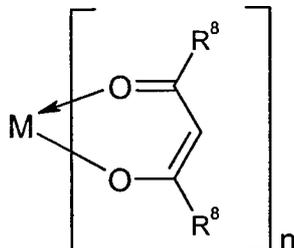
Formel (94)



Formel (95)

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

12. Verfahren zur Herstellung einer Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 11, dadurch gekennzeichnet, dass der entsprechende freie Ligand oder eine Vorstufe des Liganden mit Metallalkoholaten der Formel (96), mit Metallketoketonaten der Formel (97) oder mit Metallhalogeniden der Formel (98) umgesetzt wird,



Formel (97)



Formel (98)

Formel (96)

wobei die Symbole M, n und R<sup>8</sup> die in Anspruch 1 angegebenen Bedeutungen haben und Hal = F, Cl, Br oder I ist, oder mit Metallverbindungen, die sowohl Alkoholat- und/oder Halogenid- und/oder Hydroxy- wie auch Ketoketonatreste tragen und auch geladen sein können.

13. Oligomere, Polymere oder Dendrimere, enthaltend eine oder mehrere der Verbindungen nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 11, wobei mindestens einer der oben definierten Reste R<sup>1</sup> bis R<sup>8</sup> eine Bindung zum Polymer oder Dendrimer darstellt.

14. Verwendung einer Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 11 oder eines Oligomers, Polymers oder Dendrimers nach Anspruch 13 in einer elektronischen Vorrichtung.

15. Elektronische Vorrichtung, bevorzugt ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen (OLEDs, PLEDs), organischen integrierten Schaltungen (O-ICs), organischen Feld-Effekt-Transistoren (O-FETs), organischen Dünnschichttransistoren (O-TFTs), organischen lichtemittierenden Transistoren (O-LETs), organischen Solarzellen (O-SCs), organischen optischen Detektoren, organischen Photorezeptoren, organischen Feld-Quench-Devices (O-FQDs), lichtemittierenden elektrochemischen Zellen (LECs) und organischen Laserdioden (O-Laser), enthaltend in mindestens einer Schicht mindestens eine Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 11 oder ein Oligomer, Polymer oder Dendrimer nach

Anspruch 13, insbesondere eine organische Elektrolumineszenzvorrichtung.

16. Organische Elektrolumineszenzvorrichtung nach Anspruch 15, dadurch gekennzeichnet, dass die Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 11 bzw. das Oligomer, Polymer oder Dendrimer nach Anspruch 13 als emittierende Verbindung in einer oder mehreren emittierenden Schichten eingesetzt wird.

17. Organische Elektrolumineszenzvorrichtung nach Anspruch 16, dadurch gekennzeichnet, dass das Matrixmaterial für die Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 11 ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus Ketonen, Phosphinoxiden, Sulfoxiden, Sulfonen, Triarylaminen, Carbazolderivaten, Indolocarbazolderivaten, Azacarbazolen, bipolaren Matrixmaterialien, Silanen, Azaborolen, Boronestern, Triazinderivaten oder Zinkkomplexen oder dass Mischungen dieser Matrixmaterialien miteinander eingesetzt werden.

Es folgt kein Blatt Zeichnungen