

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

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum
Internationales Büro



(43) Internationales Veröffentlichungsdatum
14. Juni 2007 (14.06.2007)

PCT

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer
WO 2007/065678 A1

(51) Internationale Patentklassifikation:

C09K 11/06 (2006.01) **C07C 15/28** (2006.01)
H05B 33/14 (2006.01) **H01L 51/00** (2006.01)
C07C 211/54 (2006.01)

(74) **Gemeinsamer Vertreter:** MERCK PATENT GMBH;
Frankfurter Strasse 250, 64293 Darmstadt (DE).

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2006/011758

(22) Internationales Anmeldedatum:

7. Dezember 2006 (07.12.2006)

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

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:

10 2005 058 557.4
8. Dezember 2005 (08.12.2005) DE

(84) **Bestimmungsstaaten** (*soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare regionale Schutzrechtsart*): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

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

(72) Erfinder; und

(75) **Erfinder/Anmelder** (*nur für US*): HEIL, Holger [DE/DE]; Weinbergstrasse 49, 64285 Darmstadt (DE). BUESING, Arne [DE/DE]; Liederbacherstrasse 5, 65929 Frankfurt/Main (DE). STOESSEL, Philipp [DE/DE]; Sophienstrasse 30, 60487 Frankfurt/Main (DE).

Veröffentlicht:

— mit internationalem Recherchenbericht

Zur Erklärung der Zweibuchstaben-Codes und der anderen Abkürzungen wird auf die Erklärungen ("Guidance Notes on Codes and Abbreviations") am Anfang jeder regulären Ausgabe der PCT-Gazette verwiesen.

(54) **Title:** NOVEL MATERIALS FOR ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DEVICES

(54) **Bezeichnung:** NEUE MATERIALIEN FÜR ORGANISCHE ELEKTROLUMINESZENZVORRICHTUNGEN

(57) **Abstract:** The invention relates to anthracene derivatives which can be used in organic electroluminescent devices, and to organic electroluminescent devices containing said anthracene derivatives.

(57) **Zusammenfassung:** Die vorliegende Erfindung betrifft Anthracenderivate, welche sich für die Verwendung in organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen eignen, sowie organische Elektrolumineszenzvorrichtungen enthaltend diese Anthracenderivate.



WO 2007/065678 A1

- 1 -

Neue Materialien für organische Elektrolumineszenzvorrichtungen

Die vorliegende Erfindung betrifft neue Materialien für organische Elektrolumineszenzvorrichtungen, deren Verwendung, sowie organische Elektrolumineszenzvorrichtungen enthaltend diese Materialien.

Der allgemeine Aufbau organischer Elektrolumineszenzvorrichtungen, die zur Emission von Licht im sichtbaren Spektralbereich befähigt sind und die halbleitende organische Verbindungen enthalten, ist beispielsweise in US 4539507, US 5151629, EP 0676461 und WO 98/27136 beschrieben.

Allerdings zeigen diese Vorrichtungen immer noch erhebliche Probleme, die für die Verwendung in hochwertigen Vollfarbdisplays einer dringenden Verbesserung bedürfen:

1. Die operative Lebensdauer ist insbesondere bei blauer Emission immer noch gering, so dass bis dato nur einfache Anwendungen kommerziell realisiert werden konnten.
2. Auch die Effizienz ist insbesondere bei blauer Emission noch nicht ausreichend und muss für hochwertige Anwendungen weiter verbessert werden.
3. Einige Verbindungen, die als Hostmaterialien für blau emittierende Elektrolumineszenzvorrichtungen verwendet werden, neigen beim Aufdampfen zur Kristallisation statt zur Bildung glasartiger Filme und weisen keine ausreichend hohe Glasübergangstemperatur auf. Hier sind weitere Verbesserungen erforderlich.

Es war daher die Aufgabe der vorliegenden Erfindung, hierfür Verbesserungen anzubieten, insbesondere Verbindungen, welche in organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen zu verbesserter Effizienz und verbesserter Lebensdauer führen. Weiterhin war es die Aufgabe der vorliegenden Erfindung, Verbindungen bereitzustellen, welche eine höhere Glasübergangstemperatur und eine geringere Kristallisationsneigung aufweisen.

BESTÄTIGUNGSKOPIE

- 2 -

Aus dem Stand der Technik sind Phenylanthracen-Derivate bekannt, in denen zwei Phenylanthracengruppen über eine bivalente Gruppe verknüpft sind (EP 0681019). Als bivalente Gruppen sind Einfachbindungen und Arylengruppen offenbart, insbesondere Phenylengruppen und Phenylengruppen, welche durch eine Alkylengruppe, -O-, -S- oder -NR- unterbrochen sind. Aus dieser Anmeldung geht nicht hervor, dass andere bivalente Gruppen zur Verknüpfung der beiden Anthracen besonders geeignet sein könnten. Ebenso wenig geht aus dieser Anmeldung hervor, dass Anthracenderivate, welche statt der Phenylgruppe andere Gruppen gebunden enthalten, besonders geeignet sein könnten.

Aus dem Stand der Technik sind weiterhin dimere Anthracenderivate der Formel Anthracen-X-Anthracen bekannt, wobei X eine heterocyclische Verbindung mit mindestens zwei Ringen darstellt (JP 2004/002351). Aus dieser Anmeldung geht nicht hervor, dass derartige Anthracenderivate, welche in 9- und 9'-Position eine Heteroarylgruppe gebunden enthalten, besonders geeignet sind.

EP 1221434 offenbart Verbindungen, in denen zwei Anthraceneinheiten über eine Fluoreneinheit verknüpft sind. Unter anderem ist auch eine Verbindung offenbart, welche zusätzlich in 9- und 9'-Position der beiden Anthraceneinheiten jeweils eine Pyridingruppe enthält. Allerdings lehrt dieses Dokument, dass die Fluoreneinheit erforderlich ist, um besonders gute Ergebnisse in organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen zu erzielen.

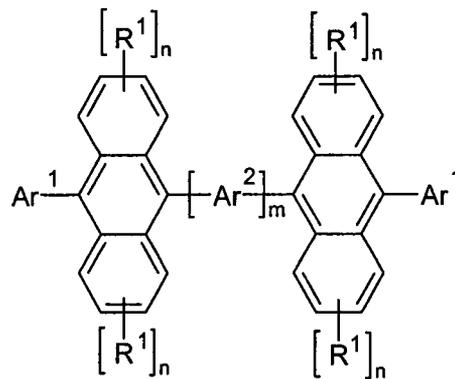
Überraschend wurde gefunden, dass bestimmte, unten beschriebene, Anthracenderivate deutliche Verbesserungen gegenüber dem oben beschriebenen Stand der Technik aufweisen. Mit diesen Verbindungen können höhere Effizienzen und verbesserte Lebensdauern erhalten werden. Außerdem weisen diese Verbindungen eine geringere Kristallisationsneigung und eine höhere Glasübergangstemperatur auf als Verbindungen gemäß dem Stand der Technik. Diese Verbindungen und deren Verwendung in OLEDs sind daher der Gegenstand der vorliegenden Erfindung.

- 3 -

Gegenstand der Erfindung sind Verbindungen gemäß Formel (1),

5

10



Formel (1)

15

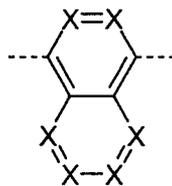
wobei für die verwendeten Symbole und Indizes gilt:

Ar^1 ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 30 aromatischen Ringatomen, welches durch einen oder mehrere Reste R^1 substituiert sein kann;

20

Ar^2 ist, wenn beide Gruppen Ar^1 ein aromatisches Ringsystem darstellen, eine Gruppe der Formel (2),

25



Formel (2)

30

wobei X gleich oder verschieden bei jedem Auftreten für CR^1 oder N steht,

oder

ist, wenn mindestens eine Gruppe Ar^1 ein heteroaromatisches Ringsystem darstellt, gleich oder verschieden bei jedem Auftreten eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 5 bis 20 aromatischen Ring-

35

- 4 -

atomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^1 substituiert sein kann;

5 R^1 ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, $N(R^2)_2$, eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^2 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH₂-Gruppen durch
10 $-R^2C=CR^2-$, $-C\equiv C-$, $Ge(R^2)_2$, $Sn(R^2)_2$, C=O, C=S, C=Se, C=NR², -O-, -S-, -N(R²)- oder -CONR²- ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch F, Cl, Br, I, CN oder NO₂ ersetzt sein können, oder eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 5 bis 30 aromatischen Ringatomen, die mit einem oder mehreren Resten
15 R^2 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 24 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Kombination aus zwei, drei, vier oder fünf dieser Systeme; dabei können auch zwei oder mehrere benachbarte Substituenten R^1 miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem
20 bilden;

R^2 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H oder ein Kohlenwasserstoffrest mit 1 bis 20 C-Atomen, welcher aliphatisch, aromatisch oder eine Kombination aus aliphatisch und aromatisch
25 sein kann und worin ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können; dabei können auch zwei oder mehrere Reste R^2 miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden;

30 n ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten 0, 1, 2, 3 oder 4;

m ist 1, 2, 3, 4 oder 5.

35

Unter einer cyclischen Alkylgruppe im Sinne dieser Erfindung werden sowohl monocyclische wie auch bi- und polycyclische Alkylgruppen verstanden.

- 5 Unter benachbarten Substituenten im Sinne dieser Erfindung werden Substituenten verstanden, die an direkt benachbarten C-Atomen gebunden sind, also an C-Atomen, welche eine direkte Bindung aufweisen.
- 10 Unter einer Arylgruppe bzw. einer Heteroarylgruppe im Sinne dieser Erfindung wird eine aromatische Gruppe bzw. heteroaromatische Gruppe mit einem gemeinsamen aromatischen π -Elektronensystem verstanden. Dies kann im Sinne dieser Erfindung ein einfacher Homo- oder Hetero-
- 15 cyclus sein, beispielsweise Benzol, Pyridin, Thiophen, etc., oder es kann ein kondensiertes aromatisches Ringsystem sein, in dem mindestens zwei aromatische oder heteroaromatische Ringe, beispielsweise Benzolringe, miteinander „verschmolzen“, d. h. durch Anellierung einander ankondensiert sind, also mindestens eine gemeinsame Kante und dadurch auch ein
- 20 gemeinsames aromatisches π -Elektronensystem aufweisen. Diese Aryl- oder Heteroarylgruppen können substituiert oder unsubstituiert sein. So sind beispielsweise Systeme wie Naphthalin, Anthracen, Phenanthren, Pyren, etc. als Arylgruppen und Chinolin, Acridin, Benzothiophen, Carbazol, etc. als Heteroarylgruppen im Sinne dieser Erfindung zu sehen, während beispielsweise Biphenyl, Fluoren, Spirobifluoren, etc. keine
- 25 Arylgruppen darstellen, da es sich hierbei um separate aromatische Elektronensysteme handelt.

- Ein aromatisches Ringsystem im Sinne dieser Erfindung enthält 6 bis 30 C-Atome im Ringsystem. Ein heteroaromatisches Ringsystem im Sinne
- 30 dieser Erfindung enthält 2 bis 30 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 hetero-
- 35 aromatischen 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 Heteroaryl-

gruppen durch eine kurze, nicht-aromatische Einheit (weniger als 10 % der von H verschiedenen Atome, bevorzugt weniger als 5 % der von H verschiedenen Atome), wie z. B. ein sp^3 -hybridisiertes C-, N- oder O-Atom, unterbrochen sein können. So sollen beispielsweise auch Systeme wie
5 9,9'-Spirobifluoren, Fluoren, Triarylammin, Diarylether, etc. als aromatische Ringsysteme im Sinne dieser Erfindung verstanden werden. Dabei kann ein Teil des aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystems auch eine kondensierte Gruppe sein.

10 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, besonders bevorzugt die Reste Methyl, Ethyl, n-Propyl, i-Propyl, n-Butyl, i-Butyl, s-Butyl, t-Butyl, 2-Methylbutyl, n-Pentyl, s-Pentyl, Cyclopentyl, n-Hexyl, Cyclohexyl, n-
15 Heptyl, Cycloheptyl, n-Octyl, Cyclooctyl, 2-Ethylhexyl, Trifluormethyl, Pentafluorethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, Ethenyl, Propenyl, Butenyl, Pentenyl, Cyclopentenyl, Hexenyl, Cyclohexenyl, Heptenyl, Cycloheptenyl, Octenyl, Cyclooctenyl, Ethinyl, Propinyl, Butinyl, Pentinyl, Hexinyl oder Octinyl verstanden. Unter einer C_1 - bis C_{40} -Alkoxygruppe werden besonders
20 bevorzugt Methoxy, Ethoxy, n-Propoxy, i-Propoxy, n-Butoxy, i-Butoxy, s-Butoxy, t-Butoxy oder 2-Methylbutoxy verstanden. Unter einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem mit 1 bis 30 aromatischen Ringatomen, welches noch jeweils mit den oben genannten Resten R^1 bzw. R^2 substituiert sein kann und welches über beliebige
25 Positionen am Aromaten bzw. Heteroaromaten verknüpft sein kann, werden insbesondere Gruppen verstanden, die abgeleitet sind von Benzol, Naphthalin, Anthracen, Phenanthren, Pyren, Chrysen, Perylen, Fluoranthren, Tetracen, Pentacen, Benzopyren, Biphenyl, Biphenylen, Terphenyl, Terphenylen, Fluoren, Spirobifluoren, Truxen, Isotruxen,
30 Dihydrophenanthren, Dihydropyren, Tetrahydropyren, cis- oder trans-Indenofluoren, 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,
35 Phenothiazin, Phenoxazin, Pyrazol, Indazol, Imidazol, Benzimidazol, Naphthimidazol, Phenanthrimidazol, Pyridimidazol, Pyrazinimidazol,

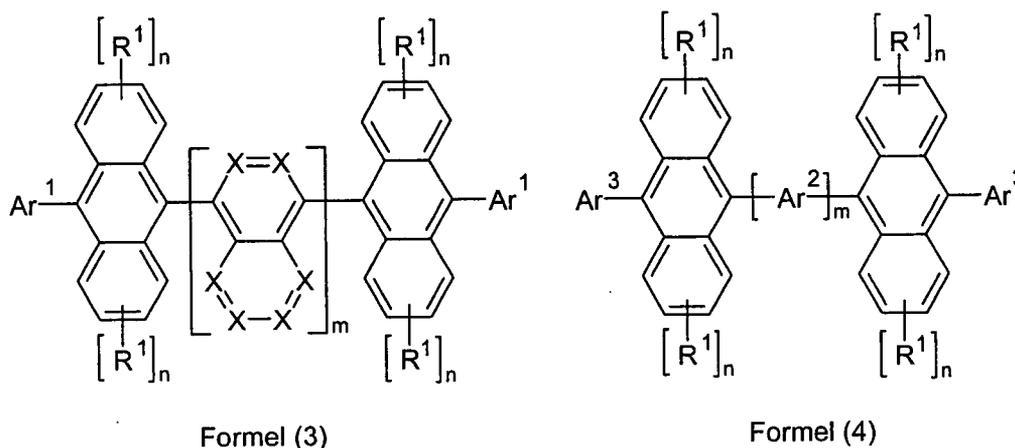
Chinoxalinimidazol, Oxazol, Benzoxazol, Naphthoxazol, Anthroxazol,
 Phenanthroxazol, Isoxazol, 1,2-Thiazol, 1,3-Thiazol, Benzothiazol,
 Pyridazin, Benzopyridazin, Pyrimidin, Benzpyrimidin, Chinoxalin, Pyrazin,
 Phenazin, Naphthyridin, Azacarbazol, Benzocarbolin, Phenanthrolin,
 5 1,2,3-Triazol, 1,2,4-Triazol, 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.

10

Bevorzugte Ausführungsformen für die Verbindungen der Formel (1) sind
 die Verbindungen der Formel (3) oder (4),

15

20



25

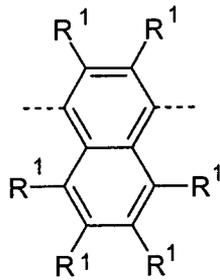
wobei Ar^3 , gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für ein hetero-
 aromatisches Ringsystem mit 5 bis 30 aromatischen Ringatomen steht,
 welches durch einen oder mehrere Reste R^1 substituiert sein kann, und die
 weiteren Symbole und Indizes dieselbe Bedeutung haben, wie oben
 beschrieben.

30

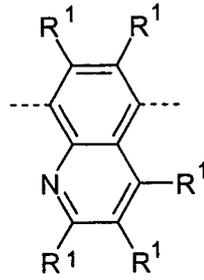
In einer bevorzugten Ausführungsform der Verbindung gemäß Formel (3)
 stehen maximal zwei Symbole X für N und die anderen Symbole X für
 CR^1 . Bevorzugte Gruppen Ar^2 , bzw. zentrale Einheiten in der Verbindung
 gemäß Formel (3), sind die Gruppen der folgenden Formeln (5) bis (10).
 Besonders bevorzugt sind darunter die Gruppen der Formeln (5) und (9),
 35 ganz besonders bevorzugt ist die Gruppe der Formel (5).

- 8 -

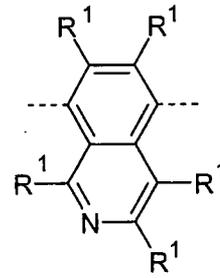
5



Formel (5)

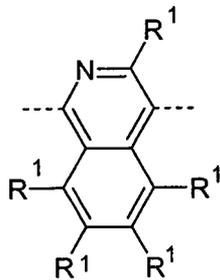


Formel (6)

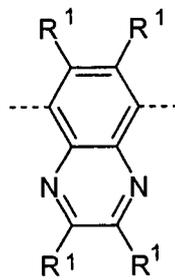


Formel (7)

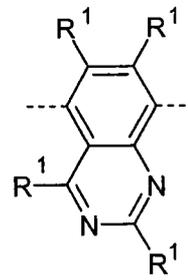
10



Formel (8)



Formel (9)



Formel (10)

15

In nochmals einer bevorzugten Ausführungsform der Verbindung gemäß Formel (3) stehen die Symbole Ar^1 , gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 9 bis 25 aromatischen Ringatomen steht, welches durch einen oder mehrere Reste R^1 substituiert sein kann. Besonders bevorzugt sind Verbindungen der Formel (3), in denen das Symbol Ar^1 , gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für eine kondensierte Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 10 bis 16 aromatischen Ringatomen oder für eine aromatische, gegebenenfalls überbrückte, Biarylgruppe steht, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein können. Besonders bevorzugt sind weiterhin Verbindungen der Formel (3), in denen das Symbol Ar^1 , gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für eine 1-Naphthyl-, 2-Naphthyl-, 9-Anthryl-, 2-Phenanthrenyl-, 9-Phenanthrenyl-, Chinolinyl-, Isochinolinyl-, Thienyl-, Benzothienyl-, Dibenzothienyl-, Furanyl-, Benzofuranyl-, Dibenzofuranyl-, Pyrrolyl-, Indolyl-, Carbazolyl-, welches jeweils über C oder N verknüpft sein kann, Imidazolyl-, welches über C oder N verknüpft sein kann, Benzimidazolyl-, welches über C oder N verknüpft sein kann, 2-, 3- oder 4-Pyridyl-, Pyrazinyl-, 2-, 4- oder 5-Pyrimidinyl-, 3- oder 4-Pyridazinyl-, Chinolinyl-, Isochinolinyl-, ortho-Biphenyl- oder 2-Fluorenylgruppe steht,

35

die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann, insbesondere für 1-Naphthyl, 2-Naphthyl, 9-Phenanthrenyl, Thienyl, Benzothienyl, Carbazolyl, Benzimidazolyl, 3-Pyridyl, Chinolinyl, ortho-Biphenyl oder 2-Fluorenyl, welches jeweils mit einem oder mehreren
5 Resten R^1 substituiert sein kann. Bevorzugt sind die beiden Gruppen Ar^1 identisch.

In einer bevorzugten Ausführungsform der Verbindung gemäß Formel (4) bindet die Heteroarylgruppe des heteroaromatischen Ringsystems Ar^3
10 direkt an das Anthracen. Bevorzugt stehen die Symbole Ar^3 , gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für ein heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 20 aromatischen Ringatomen, welches durch einen oder mehrere Reste R^1 substituiert sein kann. Besonders bevorzugt sind Verbindungen der Formel (4), in denen das Symbol Ar^3 , gleich oder verschieden bei
15 jedem Auftreten, für eine Heteroarylgruppe mit 5 bis 14 aromatischen Ringatomen steht, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann. Ganz besonders bevorzugt sind Verbindungen der Formel (4), in denen das Symbol Ar^3 , gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für eine Thienyl-, Benzothienyl-, Dibenzothienyl-, Furanyl-,
20 Benzofuranyl-, Dibenzofuranyl-, Pyrrolyl-, Indolyl- oder Carbazolyl-, welches jeweils über C oder N verknüpft sein kann, Imidazolyl-, welches über C oder N verknüpft sein kann, Benzimidazolyl, welches über C oder N verknüpft sein kann, 2-, 3- oder 4-Pyridyl-, Pyrazinyl-, 2-, 4- oder
25 5-Pyrimidinyl-, 3- oder 4-Pyridazinyl-, Chinolinyl- oder Isochinolinylgruppe steht, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann, insbesondere für Thienyl, Benzothienyl, Carbazolyl, Benzimidazolyl, 3-Pyridyl oder Chinolinyl, welches jeweils mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann. Bevorzugt sind die beiden Gruppen Ar^3 identisch.

30 In nochmals einer bevorzugten Ausführungsform der Verbindung gemäß Formel (4) steht das Symbol Ar^2 , gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 5 bis 14 aromatischen Ringatomen, welche mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann. Besonders bevorzugt steht das Symbol Ar^2 , gleich oder verschieden
35 bei jedem Auftreten, für 1,4-Naphthylen, 1,5-Naphthylen, 2,6-Naphthylen, 1,2-, 1,3- oder 1,4-Phenylen oder 2,7-Phenanthrenylen.

5 Bevorzugt sind weiterhin Verbindungen gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4), in denen das Symbol R^1 , gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für H, F, eine geradkettige Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 1 bis 6 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 3 bis 10 C-Atomen, wobei jeweils ein oder mehrere CH_2 -Gruppen durch $-R^2C=CR^2-$, $-O-$, $-S-$ oder $-N(R^2)-$ ersetzt sein können und wobei jeweils ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können, oder eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 5 bis 14 aromatischen Ringatomen, oder eine Kombination aus zwei oder drei dieser Systeme steht; dabei können auch zwei oder mehrere Reste R^1 miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden. Besonders bevorzugte Reste R^1 sind ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus H, F, geradkettigen Alkylgruppen mit 1 bis 4 C-Atomen, verzweigten Alkylgruppen mit 3 bis 5 C-Atomen oder cyclischen Alkylgruppen mit 5 bis 10 C-Atomen, wobei jeweils ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können, oder Aryl- oder Heteroarylgruppen mit 6 bis 10 aromatischen Ringatomen oder eine Kombination aus zwei dieser Systeme; dabei können auch zwei oder mehrere benachbarte Reste R^1 miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden.

25 Bevorzugt sind weiterhin Verbindungen gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4), in denen der Index n für 0, 1 oder 2 steht, besonders bevorzugt für 0 oder 1, ganz besonders bevorzugt für 0. Falls der Index n für 1 steht, ist der Substituent R^1 bevorzugt in 2-Position und/oder in 6-Position des Anthracens gebunden.

30 Bevorzugt sind weiterhin Verbindungen gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4), in denen der Index m für 1, 2 oder 3 steht, besonders bevorzugt für 1 oder 2.

35 Bevorzugt sind weiterhin Verbindungen gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4), deren Molekulargewicht zwischen 600 und 2000 g/mol liegt, besonders bevorzugt zwischen 700 und 1500 g/mol.

Dabei sei betont, dass sowohl Verbindungen gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4) erfindungsgemäß sind, in denen die beiden Gruppen Ar^1 bzw. die beiden Gruppen Ar^3 gleich gewählt sind, wie auch Verbindungen, in denen die beiden Gruppen Ar^1 bzw. die beiden Gruppen Ar^3 unterschiedlich sind. Bevorzugt sind Verbindungen, in denen die beiden Gruppen Ar^1 gleich sind und auch gleich substituiert sind, bzw. in denen die beiden Gruppen Ar^3 gleich sind und auch gleich substituiert sind.

Je nach Wahl von Ar^1 , Ar^2 und Ar^3 weisen die Verbindungen gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4), gehinderte Rotation um eine oder mehrere Bindungen (Bindungen zwischen Ar^1 bzw. Ar^2 bzw. Ar^3 und Anthracen) auf und sind dadurch zur Bildung von Atropisomeren befähigt, also zur Bildung von Stereoisomeren, welche bei Raumtemperatur stabil sind. Wenn die Verbindung gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4), Atropisomerie um eine oder um mehrere Bindungen zeigt, so sind jeweils auch die entsprechenden angereicherten oder isolierten Atropisomere Gegenstand der Erfindung. Dies bezieht sich sowohl auf Enantiomere wie auch auf Diastereomere. Durch die Wahl geeigneter Atropisomere lassen sich beispielsweise die Löslichkeit der Verbindung, die Glasübergangstemperatur und die elektrooptischen Eigenschaften beeinflussen. Bevorzugt sind Verbindungen, die keine Atropisomerie aufweisen.

Beispiele für bevorzugte Verbindungen gemäß Formel (3) sind die in der folgenden Tabelle 1 aufgeführten Verbindungen. Ph steht für eine Phenylgruppe. Die in die Tabelle eingetragenen Abkürzungen stehen für die folgenden Gruppen, wobei die gestrichelte Linie jeweils die Verknüpfung mit dem Anthracen andeutet:

30

35

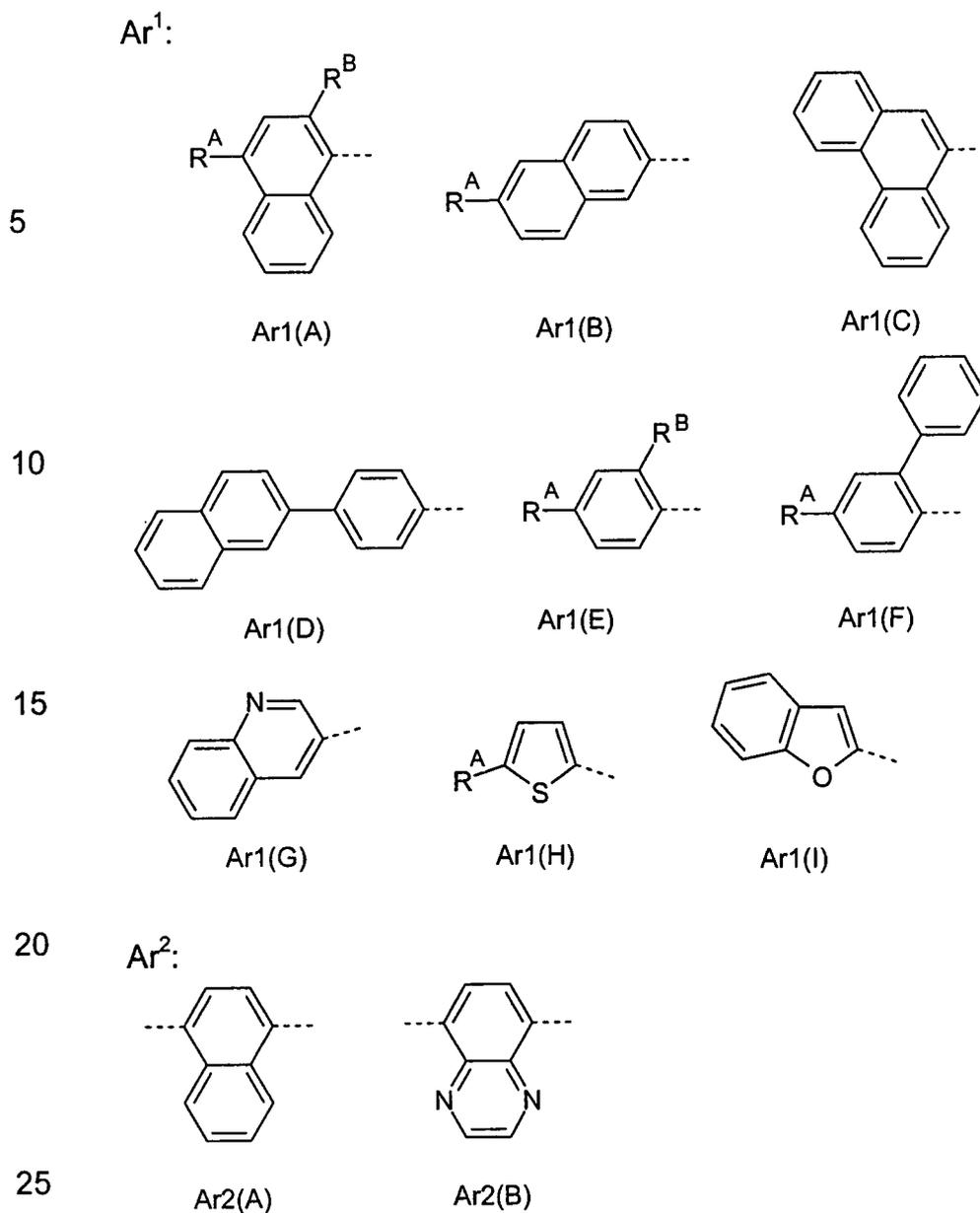


Tabelle 1:

30

Nr.	Ar ¹	Ar ²	m	Ar ¹	
				R ^A	R ^B
1	Ar1(A)	Ar2(A)	1	H	H
2	Ar1(A)	Ar2(A)	2	H	H
3	Ar1(A)	Ar2(B)	1	H	H
4	Ar1(A)	Ar2(B)	2	H	H
5	Ar1(A)	Ar2(A)	1	H	F
6	Ar1(A)	Ar2(A)	2	H	F
7	Ar1(A)	Ar2(B)	1	H	F
8	Ar1(A)	Ar2(B)	2	H	F

35

- 13 -

	9	Ar1(A)	Ar2(A)	1	H	CH3
	10	Ar1(A)	Ar2(A)	2	H	CH3
	11	Ar1(A)	Ar2(B)	1	H	CH3
	12	Ar1(A)	Ar2(B)	2	H	CH3
5	13	Ar1(A)	Ar2(A)	1	H	Ph
	14	Ar1(A)	Ar2(A)	2	H	Ph
	15	Ar1(A)	Ar2(B)	1	H	Ph
	16	Ar1(A)	Ar2(B)	2	H	Ph
	17	Ar1(A)	Ar2(A)	1	F	H
	18	Ar1(A)	Ar2(A)	2	F	H
	19	Ar1(A)	Ar2(B)	1	F	H
	20	Ar1(A)	Ar2(B)	2	F	H
10	21	Ar1(A)	Ar2(A)	1	F	F
	22	Ar1(A)	Ar2(A)	2	F	F
	23	Ar1(A)	Ar2(B)	1	F	F
	24	Ar1(A)	Ar2(B)	2	F	F
	25	Ar1(A)	Ar2(A)	1	F	CH3
	26	Ar1(A)	Ar2(A)	2	F	CH3
	27	Ar1(A)	Ar2(B)	1	F	CH3
15	28	Ar1(A)	Ar2(B)	2	F	CH3
	29	Ar1(A)	Ar2(A)	1	F	Ph
	30	Ar1(A)	Ar2(A)	2	F	Ph
	31	Ar1(A)	Ar2(B)	1	F	Ph
	32	Ar1(A)	Ar2(B)	2	F	Ph
	33	Ar1(A)	Ar2(A)	1	CH3	H
	34	Ar1(A)	Ar2(A)	2	CH3	H
20	35	Ar1(A)	Ar2(B)	1	CH3	H
	36	Ar1(A)	Ar2(B)	2	CH3	H
	37	Ar1(A)	Ar2(A)	1	CH3	F
	38	Ar1(A)	Ar2(A)	2	CH3	F
	39	Ar1(A)	Ar2(B)	1	CH3	F
	40	Ar1(A)	Ar2(B)	2	CH3	F
	41	Ar1(A)	Ar2(A)	1	CH3	CH3
25	42	Ar1(A)	Ar2(A)	2	CH3	CH3
	43	Ar1(A)	Ar2(B)	1	CH3	CH3
	44	Ar1(A)	Ar2(B)	2	CH3	CH3
	45	Ar1(A)	Ar2(A)	1	CH3	Ph
	46	Ar1(A)	Ar2(A)	2	CH3	Ph
	47	Ar1(A)	Ar2(B)	1	CH3	Ph
	48	Ar1(A)	Ar2(B)	2	CH3	Ph
30	49	Ar1(A)	Ar2(A)	1	Ph	H
	50	Ar1(A)	Ar2(A)	2	Ph	H
	51	Ar1(A)	Ar2(B)	1	Ph	H
	52	Ar1(A)	Ar2(B)	2	Ph	H
	53	Ar1(A)	Ar2(A)	1	Ph	F
	54	Ar1(A)	Ar2(A)	2	Ph	F
35	55	Ar1(A)	Ar2(B)	1	Ph	F
	56	Ar1(A)	Ar2(B)	2	Ph	F
	57	Ar1(A)	Ar2(A)	1	Ph	CH3

- 14 -

	58	Ar1(A)	Ar2(A)	2	Ph	CH3
	59	Ar1(A)	Ar2(B)	1	Ph	CH3
	60	Ar1(A)	Ar2(B)	2	Ph	CH3
	61	Ar1(A)	Ar2(A)	1	Ph	Ph
	62	Ar1(A)	Ar2(A)	2	Ph	Ph
5	63	Ar1(A)	Ar2(B)	1	Ph	Ph
	64	Ar1(A)	Ar2(B)	2	Ph	Ph
	65	Ar1(B)	Ar2(A)	1	H	-
	66	Ar1(B)	Ar2(A)	2	H	-
	67	Ar1(B)	Ar2(B)	1	H	-
	68	Ar1(B)	Ar2(B)	2	H	-
10	69	Ar1(B)	Ar2(A)	1	F	-
	70	Ar1(B)	Ar2(A)	2	F	-
	71	Ar1(B)	Ar2(B)	1	F	-
	72	Ar1(B)	Ar2(B)	2	F	-
	73	Ar1(B)	Ar2(A)	1	CH3	-
	74	Ar1(B)	Ar2(A)	2	CH3	-
	75	Ar1(B)	Ar2(B)	1	CH3	-
15	76	Ar1(B)	Ar2(B)	2	CH3	-
	77	Ar1(B)	Ar2(A)	1	Ph	-
	78	Ar1(B)	Ar2(A)	2	Ph	-
	79	Ar1(B)	Ar2(B)	1	Ph	-
	80	Ar1(B)	Ar2(B)	2	Ph	-
	81	Ar1(C)	Ar2(A)	1	-	-
	82	Ar1(C)	Ar2(A)	2	-	-
20	83	Ar1(C)	Ar2(B)	1	-	-
	84	Ar1(C)	Ar2(B)	2	-	-
	85	Ar1(D)	Ar2(A)	1	H	-
	86	Ar1(D)	Ar2(A)	2	H	-
	87	Ar1(D)	Ar2(B)	1	H	-
	88	Ar1(D)	Ar2(B)	2	H	-
	89	Ar1(D)	Ar2(A)	1	F	-
25	90	Ar1(D)	Ar2(A)	2	F	-
	91	Ar1(D)	Ar2(B)	1	F	-
	92	Ar1(D)	Ar2(B)	2	F	-
	93	Ar1(D)	Ar2(A)	1	CH3	-
	94	Ar1(D)	Ar2(A)	2	CH3	-
	95	Ar1(D)	Ar2(B)	1	CH3	-
	96	Ar1(D)	Ar2(B)	2	CH3	-
30	97	Ar1(D)	Ar2(A)	1	Ph	-
	98	Ar1(D)	Ar2(A)	2	Ph	-
	99	Ar1(D)	Ar2(B)	1	Ph	-
	100	Ar1(D)	Ar2(B)	2	Ph	-
	101	Ar1(E)	Ar2(A)	1	H	H
	102	Ar1(E)	Ar2(A)	2	H	H
	103	Ar1(E)	Ar2(B)	1	H	H
35	104	Ar1(E)	Ar2(B)	2	H	H
	105	Ar1(E)	Ar2(A)	1	H	F
	106	Ar1(E)	Ar2(A)	2	H	F

- 15 -

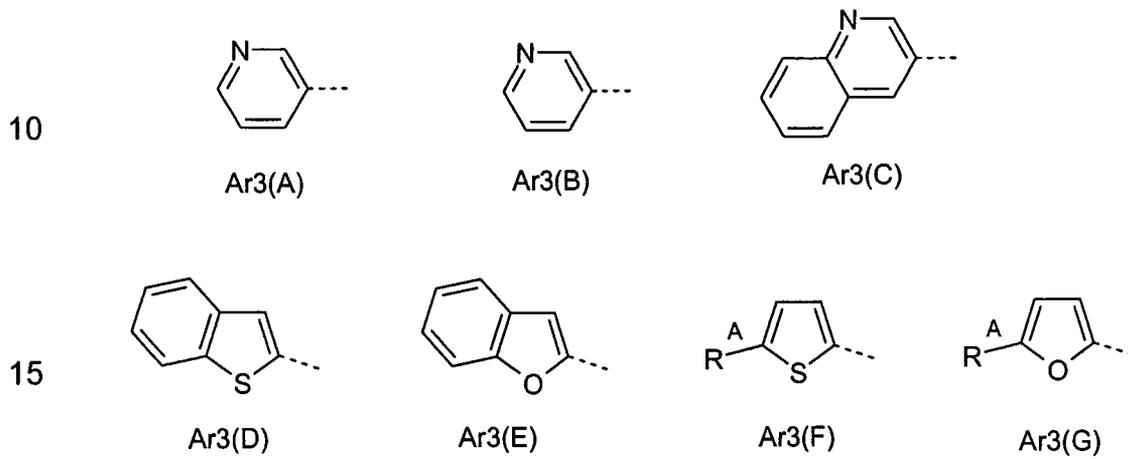
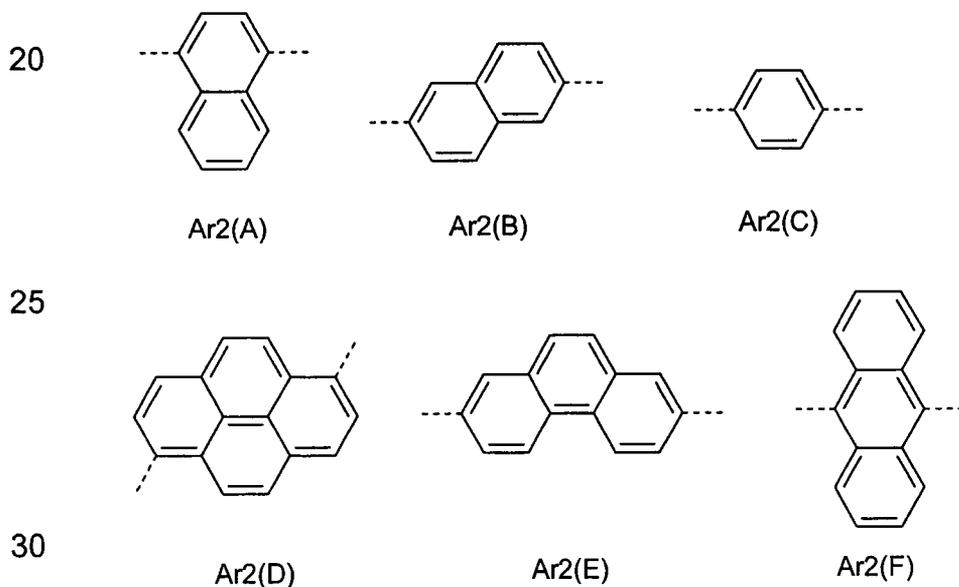
	107	Ar1(E)	Ar2(B)	1	H	F
	108	Ar1(E)	Ar2(B)	2	H	F
	109	Ar1(E)	Ar2(A)	1	H	CH3
	110	Ar1(E)	Ar2(A)	2	H	CH3
	111	Ar1(E)	Ar2(B)	1	H	CH3
5	112	Ar1(E)	Ar2(B)	2	H	CH3
	113	Ar1(E)	Ar2(A)	1	H	Ph
	114	Ar1(E)	Ar2(A)	2	H	Ph
	115	Ar1(E)	Ar2(B)	1	H	Ph
	116	Ar1(E)	Ar2(B)	2	H	Ph
	117	Ar1(E)	Ar2(A)	1	F	H
	118	Ar1(E)	Ar2(A)	2	F	H
10	119	Ar1(E)	Ar2(B)	1	F	H
	120	Ar1(E)	Ar2(B)	2	F	H
	121	Ar1(E)	Ar2(A)	1	F	F
	122	Ar1(E)	Ar2(A)	2	F	F
	123	Ar1(E)	Ar2(B)	1	F	F
	124	Ar1(E)	Ar2(B)	2	F	F
	125	Ar1(E)	Ar2(A)	1	F	CH3
15	126	Ar1(E)	Ar2(A)	2	F	CH3
	127	Ar1(E)	Ar2(B)	1	F	CH3
	128	Ar1(E)	Ar2(B)	2	F	CH3
	129	Ar1(E)	Ar2(A)	1	F	Ph
	130	Ar1(E)	Ar2(A)	2	F	Ph
	131	Ar1(E)	Ar2(B)	1	F	Ph
	132	Ar1(E)	Ar2(B)	2	F	Ph
20	133	Ar1(E)	Ar2(A)	1	CH3	H
	134	Ar1(E)	Ar2(A)	2	CH3	H
	135	Ar1(E)	Ar2(B)	1	CH3	H
	136	Ar1(E)	Ar2(B)	2	CH3	H
	137	Ar1(E)	Ar2(A)	1	CH3	F
	138	Ar1(E)	Ar2(A)	2	CH3	F
	139	Ar1(E)	Ar2(B)	1	CH3	F
25	140	Ar1(E)	Ar2(B)	2	CH3	F
	141	Ar1(E)	Ar2(A)	1	CH3	CH3
	142	Ar1(E)	Ar2(A)	2	CH3	CH3
	143	Ar1(E)	Ar2(B)	1	CH3	CH3
	144	Ar1(E)	Ar2(B)	2	CH3	CH3
	145	Ar1(E)	Ar2(A)	1	CH3	Ph
	146	Ar1(E)	Ar2(A)	2	CH3	Ph
30	147	Ar1(E)	Ar2(B)	1	CH3	Ph
	148	Ar1(E)	Ar2(B)	2	CH3	Ph
	149	Ar1(E)	Ar2(A)	1	Ph	H
	150	Ar1(E)	Ar2(A)	2	Ph	H
	151	Ar1(E)	Ar2(B)	1	Ph	H
	152	Ar1(E)	Ar2(B)	2	Ph	H
35	153	Ar1(E)	Ar2(A)	1	Ph	F
	154	Ar1(E)	Ar2(A)	2	Ph	F
	155	Ar1(E)	Ar2(B)	1	Ph	F

- 16 -

	156	Ar1(E)	Ar2(B)	2	Ph	F
	157	Ar1(E)	Ar2(A)	1	Ph	CH3
	158	Ar1(E)	Ar2(A)	2	Ph	CH3
	159	Ar1(E)	Ar2(B)	1	Ph	CH3
	160	Ar1(E)	Ar2(B)	2	Ph	CH3
5	161	Ar1(E)	Ar2(A)	1	Ph	Ph
	162	Ar1(E)	Ar2(A)	2	Ph	Ph
	163	Ar1(E)	Ar2(B)	1	Ph	Ph
	164	Ar1(E)	Ar2(B)	2	Ph	Ph
	165	Ar1(F)	Ar2(A)	1	H	-
	166	Ar1(F)	Ar2(A)	2	H	-
	167	Ar1(F)	Ar2(B)	1	H	-
10	168	Ar1(F)	Ar2(B)	2	H	-
	169	Ar1(F)	Ar2(A)	1	F	-
	170	Ar1(F)	Ar2(A)	2	F	-
	171	Ar1(F)	Ar2(B)	1	F	-
	172	Ar1(F)	Ar2(B)	2	F	-
	173	Ar1(F)	Ar2(A)	1	CH3	-
	174	Ar1(F)	Ar2(A)	2	CH3	-
15	175	Ar1(F)	Ar2(B)	1	CH3	-
	176	Ar1(F)	Ar2(B)	2	CH3	-
	177	Ar1(F)	Ar2(A)	1	Ph	-
	178	Ar1(F)	Ar2(A)	2	Ph	-
	179	Ar1(F)	Ar2(B)	1	Ph	-
	180	Ar1(F)	Ar2(B)	2	Ph	-
20	181	Ar1(G)	Ar2(A)	1	-	-
	182	Ar1(G)	Ar2(A)	2	-	-
	183	Ar1(G)	Ar2(B)	1	-	-
	184	Ar1(G)	Ar2(B)	2	-	-
	185	Ar1(H)	Ar2(A)	1	H	-
	186	Ar1(H)	Ar2(A)	2	H	-
	187	Ar1(H)	Ar2(B)	1	H	-
25	188	Ar1(H)	Ar2(B)	2	H	-
	189	Ar1(H)	Ar2(A)	1	F	-
	190	Ar1(H)	Ar2(A)	2	F	-
	191	Ar1(H)	Ar2(B)	1	F	-
	192	Ar1(H)	Ar2(B)	2	F	-
	193	Ar1(H)	Ar2(A)	1	CH3	-
	194	Ar1(H)	Ar2(A)	2	CH3	-
30	195	Ar1(H)	Ar2(B)	1	CH3	-
	196	Ar1(H)	Ar2(B)	2	CH3	-
	197	Ar1(H)	Ar2(A)	1	Ph	-
	198	Ar1(H)	Ar2(A)	2	Ph	-
	199	Ar1(H)	Ar2(B)	1	Ph	-
	200	Ar1(H)	Ar2(B)	2	Ph	-
35	201	Ar1(I)	Ar2(A)	1	-	-
	202	Ar1(I)	Ar2(A)	2	-	-
	203	Ar1(I)	Ar2(B)	1	-	-
	204	Ar1(I)	Ar2(B)	2	-	-

Beispiele für bevorzugte Verbindungen gemäß Formel (4) sind die in der folgenden Tabelle 2 aufgeführten Verbindungen. Ph steht für eine Phenylgruppe. Die in die Tabelle eingetragenen Abkürzungen stehen für die folgenden Gruppen, wobei die gestrichelte Linie jeweils die Verknüpfung mit dem Anthracen andeutet:

5

Ar³:Ar²:

35

Tabelle 2:

	Nr.	Ar ³	Ar ²	m	Ar3
					R1
5	1	Ar3(A)	Ar2(A)	1	-
	2	Ar3(A)	Ar2(A)	2	-
	3	Ar3(A)	Ar2(B)	1	-
	4	Ar3(A)	Ar2(B)	2	-
	5	Ar3(A)	Ar2(C)	1	-
	6	Ar3(A)	Ar2(C)	2	-
	7	Ar3(A)	Ar2(D)	1	-
10	8	Ar3(A)	Ar2(D)	2	-
	9	Ar3(A)	Ar2(E)	1	-
	10	Ar3(A)	Ar2(E)	2	-
	11	Ar3(A)	Ar2(F)	1	-
	12	Ar3(A)	Ar2(F)	2	-
	13	Ar3(B)	Ar2(A)	1	-
15	14	Ar3(B)	Ar2(A)	2	-
	15	Ar3(B)	Ar2(B)	1	-
	16	Ar3(B)	Ar2(B)	2	-
	17	Ar3(B)	Ar2(C)	1	-
	18	Ar3(B)	Ar2(C)	2	-
	19	Ar3(B)	Ar2(D)	1	-
20	20	Ar3(B)	Ar2(D)	2	-
	21	Ar3(B)	Ar2(E)	1	-
	22	Ar3(B)	Ar2(E)	2	-
	23	Ar3(B)	Ar2(F)	1	-
	24	Ar3(B)	Ar2(F)	2	-
	25	Ar3(C)	Ar2(A)	1	-
25	26	Ar3(C)	Ar2(A)	2	-
	27	Ar3(C)	Ar2(B)	1	-
	28	Ar3(C)	Ar2(B)	2	-
	29	Ar3(C)	Ar2(C)	1	-
	30	Ar3(C)	Ar2(C)	2	-
	31	Ar3(C)	Ar2(D)	1	-
30	32	Ar3(C)	Ar2(D)	2	-
	33	Ar3(C)	Ar2(E)	1	-
	34	Ar3(C)	Ar2(E)	2	-
	35	Ar3(C)	Ar2(F)	1	-
	36	Ar3(C)	Ar2(F)	2	-
	37	Ar3(D)	Ar2(A)	1	-
35	38	Ar3(D)	Ar2(A)	2	-
	39	Ar3(D)	Ar2(B)	1	-
	40	Ar3(D)	Ar2(B)	2	-
	41	Ar3(D)	Ar2(C)	1	-
	42	Ar3(D)	Ar2(C)	2	-
	43	Ar3(D)	Ar2(D)	1	-
	44	Ar3(D)	Ar2(D)	2	-
	45	Ar3(D)	Ar2(E)	1	-

- 19 -

	46	Ar3(D)	Ar2(E)	2	-
	47	Ar3(D)	Ar2(F)	1	-
	48	Ar3(D)	Ar2(F)	2	-
	49	Ar3(E)	Ar2(A)	1	-
	50	Ar3(E)	Ar2(A)	2	-
5	51	Ar3(E)	Ar2(B)	1	-
	52	Ar3(E)	Ar2(B)	2	-
	53	Ar3(E)	Ar2(C)	1	-
	54	Ar3(E)	Ar2(C)	2	-
	55	Ar3(E)	Ar2(D)	1	-
	56	Ar3(E)	Ar2(D)	2	-
	57	Ar3(E)	Ar2(E)	1	-
10	58	Ar3(E)	Ar2(E)	2	-
	59	Ar3(E)	Ar2(F)	1	-
	60	Ar3(E)	Ar2(F)	2	-
	61	Ar3(F)	Ar2(A)	1	H
	62	Ar3(F)	Ar2(A)	2	H
	63	Ar3(F)	Ar2(B)	1	H
	64	Ar3(F)	Ar2(B)	2	H
15	65	Ar3(F)	Ar2(C)	1	H
	66	Ar3(F)	Ar2(C)	2	H
	67	Ar3(F)	Ar2(D)	1	H
	68	Ar3(F)	Ar2(D)	2	H
	69	Ar3(F)	Ar2(E)	1	H
	70	Ar3(F)	Ar2(E)	2	H
	71	Ar3(F)	Ar2(F)	1	H
20	72	Ar3(F)	Ar2(F)	2	H
	73	Ar3(F)	Ar2(A)	1	F
	74	Ar3(F)	Ar2(A)	2	F
	75	Ar3(F)	Ar2(B)	1	F
	76	Ar3(F)	Ar2(B)	2	F
	77	Ar3(F)	Ar2(C)	1	F
	78	Ar3(F)	Ar2(C)	2	F
25	79	Ar3(F)	Ar2(D)	1	F
	80	Ar3(F)	Ar2(D)	2	F
	81	Ar3(F)	Ar2(E)	1	F
	82	Ar3(F)	Ar2(E)	2	F
	83	Ar3(F)	Ar2(F)	1	F
	84	Ar3(F)	Ar2(F)	2	F
30	85	Ar3(F)	Ar2(A)	1	CH3
	86	Ar3(F)	Ar2(A)	2	CH3
	87	Ar3(F)	Ar2(B)	1	CH3
	88	Ar3(F)	Ar2(B)	2	CH3
	89	Ar3(F)	Ar2(C)	1	CH3
	90	Ar3(F)	Ar2(C)	2	CH3
	91	Ar3(F)	Ar2(D)	1	CH3
35	92	Ar3(F)	Ar2(D)	2	CH3
	93	Ar3(F)	Ar2(E)	1	CH3
	94	Ar3(F)	Ar2(E)	2	CH3

- 20 -

	95	Ar3(F)	Ar2(F)	1	CH3
	96	Ar3(F)	Ar2(F)	2	CH3
	97	Ar3(F)	Ar2(A)	1	Ph
	98	Ar3(F)	Ar2(A)	2	Ph
	99	Ar3(F)	Ar2(B)	1	Ph
5	100	Ar3(F)	Ar2(B)	2	Ph
	101	Ar3(F)	Ar2(C)	1	Ph
	102	Ar3(F)	Ar2(C)	2	Ph
	103	Ar3(F)	Ar2(D)	1	Ph
	104	Ar3(F)	Ar2(D)	2	Ph
	105	Ar3(F)	Ar2(E)	1	Ph
	106	Ar3(F)	Ar2(E)	2	Ph
10	107	Ar3(F)	Ar2(F)	1	Ph
	108	Ar3(F)	Ar2(F)	2	Ph
	109	Ar3(G)	Ar2(A)	1	H
	110	Ar3(G)	Ar2(A)	2	H
	111	Ar3(G)	Ar2(B)	1	H
	112	Ar3(G)	Ar2(B)	2	H
	113	Ar3(G)	Ar2(C)	1	H
15	114	Ar3(G)	Ar2(C)	2	H
	115	Ar3(G)	Ar2(D)	1	H
	116	Ar3(G)	Ar2(D)	2	H
	117	Ar3(G)	Ar2(E)	1	H
	118	Ar3(G)	Ar2(E)	2	H
	119	Ar3(G)	Ar2(F)	1	H
	120	Ar3(G)	Ar2(F)	2	H
20	121	Ar3(G)	Ar2(A)	1	F
	122	Ar3(G)	Ar2(A)	2	F
	123	Ar3(G)	Ar2(B)	1	F
	124	Ar3(G)	Ar2(B)	2	F
	125	Ar3(G)	Ar2(C)	1	F
	126	Ar3(G)	Ar2(C)	2	F
	127	Ar3(G)	Ar2(D)	1	F
25	128	Ar3(G)	Ar2(D)	2	F
	129	Ar3(G)	Ar2(E)	1	F
	130	Ar3(G)	Ar2(E)	2	F
	131	Ar3(G)	Ar2(F)	1	F
	132	Ar3(G)	Ar2(F)	2	F
	133	Ar3(G)	Ar2(A)	1	CH3
	134	Ar3(G)	Ar2(A)	2	CH3
30	135	Ar3(G)	Ar2(B)	1	CH3
	136	Ar3(G)	Ar2(B)	2	CH3
	137	Ar3(G)	Ar2(C)	1	CH3
	138	Ar3(G)	Ar2(C)	2	CH3
	139	Ar3(G)	Ar2(D)	1	CH3
	140	Ar3(G)	Ar2(D)	2	CH3
35	141	Ar3(G)	Ar2(E)	1	CH3
	142	Ar3(G)	Ar2(E)	2	CH3
	143	Ar3(G)	Ar2(F)	1	CH3

- 21 -

	144	Ar3(G)	Ar2(F)	2	CH3
	145	Ar3(G)	Ar2(A)	1	Ph
	146	Ar3(G)	Ar2(A)	2	Ph
	147	Ar3(G)	Ar2(B)	1	Ph
	148	Ar3(G)	Ar2(B)	2	Ph
5	149	Ar3(G)	Ar2(C)	1	Ph
	150	Ar3(G)	Ar2(C)	2	Ph
	151	Ar3(G)	Ar2(D)	1	Ph
	152	Ar3(G)	Ar2(D)	2	Ph
	153	Ar3(G)	Ar2(E)	1	Ph
	154	Ar3(G)	Ar2(E)	2	Ph
	155	Ar3(G)	Ar2(F)	1	Ph
10	156	Ar3(G)	Ar2(F)	2	Ph

Die erfindungsgemäßen Verbindungen können durch eine Folge von Übergangsmetall-katalysierten Kupplungsreaktionen synthetisiert werden. Als Kupplungsreaktion hat sich insbesondere die Suzuki-Kupplung von Arylboronsäurederivaten, beispielsweise Arylboronsäuren oder Arylboronsäureestern, und aromatischen Halogeniden bewährt, insbesondere unter Palladium-Katalyse. Die typischen Reaktionsbedingungen für die Suzuki-Kupplung sind dem Fachmann bekannt. Ebenso ist dem Fachmann bekannt, dass sich als Halogenide insbesondere die Bromide und Iodide eignen, dass aber auch andere Abgangsgruppen, wie beispielsweise Tosylat, Triflat oder allgemein Sulfonate verwendet werden können. So kann beispielsweise ein Diboronsäurederivat der zentralen aromatischen Einheit Ar² synthetisiert werden, welches in einer Suzuki-Kupplung mit einem, gegebenenfalls substituierten, 9-Halogenanthracen gekuppelt wird. In einem weiteren Schritt kann das Anthracen in 10-Position halogeniert, beispielsweise mit NBS bromiert, werden. Die halogenierte Verbindung kann in einem weiteren Schritt mit einem Boronsäurederivat der Gruppe Ar¹ in einer Suzuki-Kupplung zur Verbindung gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4), gekuppelt werden. Ebenso kann umgekehrt zunächst ein Boronsäurederivat der Gruppe Ar¹ in einer Suzuki-Kupplung mit einem gegebenenfalls substituierten 9-Halogenanthracen gekuppelt werden, welches in einem weiteren Schritt in 10-Position, beispielsweise mit NBS, halogeniert werden kann. Die halogenierte Verbindung kann in einem weiteren Schritt mit einem Diboronsäurederivat der Gruppe Ar² in einer Suzuki-Kupplung zur Verbindung gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4),

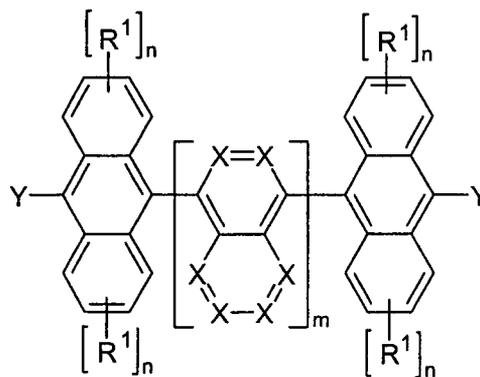
- 22 -

gekuppelt werden oder kann, nach Umsetzung zu einem Boronsäurederivat, mit einem Dihalogenid der Gruppe Ar^2 gekuppelt werden. Diese Verfahren sind unabhängig von der genauen Struktur der Gruppen Ar^1 und Ar^2 und finden gleichermaßen für aromatische und heteroaromatische Gruppen Ar^1 , Ar^2 und Ar^3 Anwendung. Statt der Suzuki-Kupplung kommen auch weitere metallkatalysierte Kupplungsreaktionen in Frage, wie beispielsweise die Stille-Kupplung, also die Kupplung von Organozinnverbindungen unter Palladium-Katalyse.

Ein weiterer Gegenstand der Erfindung ist ein Verfahren zur Synthese von Verbindungen gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4), dadurch gekennzeichnet, dass die Bindungen zwischen dem Anthracen und den Gruppen Ar^1 bzw. Ar^2 bzw. Ar^3 durch Suzuki-Kupplung geknüpft werden.

Die Verbindung gemäß der folgenden Formel (11) ist eine wertvolle Zwischenstufe zur Synthese von Verbindungen gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4), nach dem oben aufgeführten Verfahren.

Ein weiterer Gegenstand der Erfindung ist daher eine Verbindung gemäß Formel (11),



Formel (11)

wobei Y , gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für Chlor, Brom, Iod oder eine Gruppe der Formel OSO_2R^3 steht, wobei R^3 eine organische Gruppe mit 1 bis 20 C-Atomen darstellt, in der auch einzelne H-Atome

durch Fluor ersetzt sein können, insbesondere für Brom, und die weiteren Symbole und Indizes die oben aufgeführte Bedeutung haben.

5 Die Verbindungen gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4), eignen sich für den Einsatz in organischen elektronischen Vorrichtungen, insbesondere in organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen.

10 Ein weiterer Gegenstand der Erfindung ist daher die Verwendung der Verbindungen gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4), in organischen elektronischen Vorrichtungen, insbesondere in organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen.

15 Nochmals ein weiterer Gegenstand der Erfindung sind organische elektronische Vorrichtungen, enthaltend mindestens eine Verbindung gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4). Die organischen elektronischen Vorrichtungen sind bevorzugt ausgewählt aus organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen (OLED, PLED),
20 organischen Feld-Effekt-Transistoren (O-FETs), organischen Dünnschichttransistoren (O-TFTs), organischen lichtemittierenden Transistoren (O-LETs), organischen integrierten Schaltungen (O-ICs), organischen Solarzellen (O-SCs), organischen Feld-Quench-Devices (O-FQDs), organischen Photorezeptoren oder organischen Laserdioden (O-Laser);
25 besonders bevorzugt sind organische Elektrolumineszenzvorrichtungen (OLEDs, PLEDs).

Die organische Elektrolumineszenzvorrichtung enthält Anode, Kathode und mindestens eine emittierende Schicht und kann noch weitere Schichten enthalten. Diese können beispielsweise sein: Lochinjektionsschicht, Lochtransportschicht, Elektronentransportschicht, Elektroneninjektionsschicht und/oder eine Charge-Generation Layer (T. Matsumoto *et al.*, *Multiphoton Organic EL Device Having Charge Generation Layer*, IDMC 2003, Taiwan; Session 21 OLED (5)). Die Materialien in diesen Schichten können auch dotiert sein. Es muss aber nicht notwendigerweise
30 jede dieser Schichten vorhanden sein muss. Als Lochtransportmaterialien eignen sich beispielsweise aromatische Amine, wie sie üblicherweise
35

gemäß dem Stand der Technik verwendet werden, welche auch p-dotiert sein können. Als Elektronentransportmaterialien eignen sich beispielsweise Metallchelatkomplexe, z. B. AlQ_3 , Verbindungen auf Basis elektronenarmer Heterocyclen, z. B. Triazinderivate, Verbindungen
5 enthaltend aromatische Carbonyle oder Phosphinoxide, wie z. B. beschrieben in WO 05/084081 und WO 05/084082, oder auch weitere Elektronentransportmaterialien gemäß dem Stand der Technik, welche jeweils auch n-dotiert sein können. Als Elektroneninjektionsmaterialien eignen sich insbesondere Fluoride und Oxide der Alkali- und Erdalkali-
10 metalle, beispielsweise NaF, BaF_2 , CaF_2 , LiF oder Li_2O .

Die Verbindung gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4), wird bevorzugt in einer emittierenden Schicht eingesetzt. Dabei wird sie bevorzugt als Hostmaterial zusammen mit einem Dotanden eingesetzt.
15 Unter einem Hostmaterial wird in einem System aus Host und Dotand (binäre Mischung) diejenige Komponente verstanden, die in dem System im höheren Anteil vorliegt. Bei einem System aus einem Host und mehreren Dotanden (ternäre und höhere Mischungen) wird als Host diejenige Komponente verstanden, deren Anteil der höchste in der
20 Mischung ist. Dabei eignet sich die Verbindung gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder (4), insbesondere als Hostmaterial für blaue Singulettmitter, aber auch für grün oder rot emittierende Verbindungen.

Der Anteil der Verbindung gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4) in der Mischung beträgt zwischen 50.0 und 99.9 Gew.-%, bevorzugt zwischen 80.0 und 99.5 Gew.-%, besonders bevorzugt zwischen 90.0 und 99.0 Gew.-%. Der Anteil des bzw. der Dotanden in der Mischung beträgt entsprechend zwischen 0.1 und 50.0 Gew.-%, bevorzugt zwischen 0.5 und 20.0 Gew.-%, besonders bevorzugt zwischen 1.0 und
30 10.0 Gew.-%.

Bevorzugte Dotanden sind ausgewählt aus der Klasse der Monostyrylamine, der Distyrylamine, der Tristyrylamine, der Tetrastyrylamine, der Styrylphosphine, der Styrylether und der Arylamine. Unter einem Monostyrylamin wird eine Verbindung verstanden, die eine substituierte oder
35 unsubstituierte Styrylgruppe und mindestens ein, bevorzugt aromatisches,

- 25 -

Amin enthält. Unter einem Distyrylamin wird eine Verbindung verstanden, die zwei substituierte oder unsubstituierte Styrylgruppen und mindestens ein, bevorzugt aromatisches, Amin enthält. Unter einem Tristyrylamin wird eine Verbindung verstanden, die drei substituierte oder unsubstituierte Styrylgruppen und mindestens ein, bevorzugt aromatisches, Amin enthält.

5 Unter einem Tetrastyrylamin wird eine Verbindung verstanden, die vier substituierte oder unsubstituierte Styrylgruppen und mindestens ein, bevorzugt aromatisches, Amin enthält. Die Styrylgruppen sind besonders bevorzugt Stilbene, die auch noch weiter substituiert sein können.

10 Entsprechende Phosphine und Ether sind in Analogie zu den Aminen definiert. Unter einem Arylamin bzw. einem aromatischen Amin im Sinne dieser Erfindung wird eine Verbindung verstanden, die drei substituierte oder unsubstituierte aromatische oder heteroaromatische Ringsysteme direkt an den Stickstoff gebunden enthält. Bevorzugt ist mindestens eines

15 dieser aromatischen oder heteroaromatischen Ringsysteme ein kondensiertes Ringsystem, bevorzugt mit mindestens 14 aromatischen Ringatomen. Beispiele hierfür sind aromatische Anthracenamine, aromatische Anthracendiamine, aromatische Pyrenamine, aromatische Pyrendiamine, aromatische Chrysenamine oder aromatische Chrysendiamine. Unter

20 einem aromatischen Anthracenamin wird eine Verbindung verstanden, in der eine Diarylaminogruppe direkt an eine Anthracengruppe gebunden ist, vorzugsweise in 9-Position. Unter einem aromatischen Anthracendiamin wird eine Verbindung verstanden, in der zwei Diarylaminogruppen direkt an eine Anthracengruppe gebunden sind, vorzugsweise in 9,10-Position.

25 Aromatische Pyrenamine, Pyrendiamine, Chrysenamine und Chrysendiamine sind analog dazu definiert, wobei die Diarylaminogruppen am Pyren bevorzugt in 1-Position bzw. in 1,6-Position gebunden sind. Besonders bevorzugte Dotanden sind gewählt aus den Klassen der Tristilbenamine, der aromatischen Stilbendiamine, der Anthracendiamine,

30 der Pyrendiamine und der Chrysendiamine. Beispiele für derartige Dotanden sind substituierte oder unsubstituierte Tristilbenamine oder die Dotanden, die in WO 06/000388, WO 06/058737 und WO 06/000389 beschrieben sind.

35 Weiterhin bevorzugt sind organische Elektrolumineszenzvorrichtungen, dadurch gekennzeichnet, dass mehrere emittierende Schichten verwendet

werden, wobei mindestens eine dieser Schichten mindestens eine Verbindung gemäß Formel (1), bzw. Formel (3) oder Formel (4) enthält. Besonders bevorzugt weisen diese Emissionsschichten insgesamt mehrere Emissionsmaxima zwischen 380 nm und 750 nm auf, so dass insgesamt weiße Emission resultiert, d. h. in der bzw. den weiteren emittierenden Schichten wird noch mindestens eine weitere emittierende Verbindung verwendet, die fluoreszieren oder phosphoreszieren kann. 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).

Außer der Verbindung gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4), und dem bzw. den Dotanden können in der emittierenden Schicht auch weitere Substanzen vorhanden sein, beispielsweise Loch- oder Elektronentransportmaterialien.

In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung werden die Verbindungen gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder (4) als emittierende Materialien eingesetzt, insbesondere als blau oder grün emittierende Materialien. Der Anteil der Verbindung gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder (4) in der Mischung der emittierenden Schicht beträgt dann zwischen 0.1 und 50.0 Gew.-%, bevorzugt zwischen 0.5 und 20.0 Gew.-%, besonders bevorzugt zwischen 1.0 und 10.0 Gew.-%. Entsprechend beträgt der Anteil des Hostmaterials zwischen 50.0 und 99.9 Gew.-%, bevorzugt zwischen 80.0 und 99.5 Gew.-%, besonders bevorzugt zwischen 90.0 und 99.0 Gew.-%.

Als Hostmaterialien kommen hierfür Materialien verschiedene Stoffklassen in Frage. Bevorzugte Hostmaterialien sind ausgewählt aus den Klassen der Oligoarylene (z. B. 2,2',7,7'-Tetraphenylspirobifluoren gemäß EP 676461 oder Dinaphthylanthracen), insbesondere der Oligoarylene enthaltend kondensierte aromatische Gruppen, der Oligoarylenvinylene (z. B. DPVBi oder Spiro-DPVBi gemäß EP 676461), der polypodalen Metallkomplexe (z. B. gemäß WO 04/081017), der lochleitenden Verbindungen (z. B. gemäß WO 04/058911), der elektronenleitenden Verbindungen, insbesondere Ketone, Phosphinoxide, Sulfoxide, etc. (z. B.

gemäß WO 05/084081 und WO 05/084082), der Atropisomere (z. B. gemäß WO 06/048268) oder der Boronsäurederivate (z. B. gemäß WO 06/117052). Weiterhin kommen als Hostmaterialien auch die oben beschriebenen erfindungsgemäßen Verbindungen in Frage. Besonders bevorzugte Hostmaterialien sind außer den erfindungsgemäßen Verbindungen ausgewählt aus den Klassen der Oligoarylene, enthaltend Naphthalin, Anthracen und/oder Pyren oder Atropisomere dieser Verbindungen, der Oligoarylenvinylene, der Ketone, der Phosphinoxide und der Sulfoxide. Ganz besonders bevorzugte Hostmaterialien sind außer den erfindungsgemäßen Verbindungen ausgewählt aus den Klassen der Oligoarylene, enthaltend Anthracen und/oder Pyren oder Atropisomere dieser Verbindungen, der Phosphinoxide und der Sulfoxide. Unter einem Oligoarylen im Sinne dieser Erfindung soll eine Verbindung verstanden werden, in der mindestens drei Aryl- bzw. Arylengruppen aneinander gebunden sind.

In nochmals einer weiteren Ausführungsform der Erfindung werden die Verbindungen gemäß Formel (1), bzw. gemäß der Formel (3) oder (4), als Elektronentransportmaterial eingesetzt. Hier ist es bevorzugt, wenn eine oder mehrere Gruppen Ar^1 bzw. Ar^2 bzw. Ar^3 mindestens eine elektronenarme heterocyclische Verbindung enthalten, beispielsweise Stickstoffheterocyclen wie Pyridin, Pyrimidin, Chinolin etc. Weiterhin kann es bevorzugt sein, wenn die Verbindung mit Elektronendonator-Verbindungen dotiert ist.

Die Herstellung der organischen Elektrolumineszenzvorrichtung kann durch Aufbringen einer oder mehrerer Schichten durch ein Sublimationsverfahren erfolgen. Dabei werden die Materialien in Vakuum-Sublimationsanlagen bei einem Druck kleiner 10^{-5} mbar, bevorzugt kleiner 10^{-6} mbar, besonders bevorzugt kleiner 10^{-7} mbar aufgedampft.

Die Herstellung kann weiterhin durch Aufbringen einer oder mehrerer Schichten mit dem OVPD (Organic Vapour Phase Deposition) Verfahren oder mit Hilfe einer Trägergassublimation erfolgen. Dabei werden die Materialien bei einem Druck zwischen 10^{-5} mbar und 1 bar aufgebracht.

- 28 -

Die Herstellung kann nochmals weiterhin durch Aufbringen einer oder mehrerer Schichten aus Lösung, wie z. B. durch Spincoating, oder mit einem beliebigen Druckverfahren, wie z. B. Siebdruck, Flexodruck oder Offsetdruck, bevorzugt aber LITI (Light Induced Thermal Imaging, Thermo-
5 transferdruck) oder Ink-Jet Druck (Tintenstrahldruck), erfolgen. Hierfür sind lösliche Verbindungen gemäß Formel (1), bzw. Formel (3) oder Formel (4), nötig. Hohe Löslichkeit lässt sich entweder durch geeignete Substitution der Verbindungen oder auch durch die Wahl geeigneter Atropisomere erreichen.

10

Ein weiterer Gegenstand der Erfindung ist daher ein Verfahren zur Herstellung organischer Elektrolumineszenzvorrichtungen, dadurch gekennzeichnet, dass mindestens eine Verbindung gemäß Formel (1), bzw. gemäß Formel (3) oder Formel (4), gegebenenfalls zusammen mit
15 einem Dotanden und/oder anderen Verbindungen, durch ein Sublimationsverfahren oder aus Lösung, beispielsweise durch ein Druckverfahren, aufgebracht werden.

Die erfindungsgemäßen organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen
20 folgende überraschende Vorteile gegenüber dem Stand der Technik auf:

1. Die Stabilität der Vorrichtungen wird höher im Vergleich zu Systemen gemäß dem Stand der Technik, was sich vor allem in einer deutlich höheren Lebensdauer zeigt.
25
2. Die organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen weisen eine deutlich höhere Effizienz auf, insbesondere bei blauer Lumineszenz, im Vergleich zu Systemen gemäß dem Stand der Technik.
- 30 3. Die erfindungsgemäßen Verbindungen weisen eine hohe Glasübergangstemperatur und eine geringe Kristallisationsneigung auf und eignen sich daher besonders zur Verwendung in organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen.

35 Im vorliegenden Anmeldetext und auch in den im Weiteren folgenden Beispielen wird auf die Verwendung erfindungsgemäßer Mischungen in

- 29 -

Bezug auf OLEDs und die entsprechenden Displays abgezielt. Trotz dieser Beschränkung der Beschreibung ist es für den Fachmann ohne erfinderisches Zutun möglich, die erfindungsgemäßen Verbindungen auch für die weiteren oben aufgeführten elektronischen Vorrichtungen zu verwenden.

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

10 **Beispiele:**

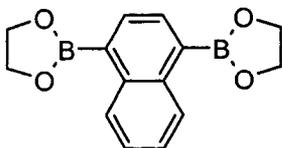
Die nachfolgenden Synthesen werden, sofern nicht anders angegeben, unter einer Schutzgasatmosphäre durchgeführt. Die Edukte können von den Firmen ALDRICH bzw. ABCR bezogen bzw. nach literaturbekannten Synthesen dargestellt werden.

15

Beispiel 1: Herstellung von 1,4-Bis-[9-(2-naphthyl)]-10-anthrylnaphthalin

a) Naphthalin-1,4-diboronsäureethylenglycolester

20



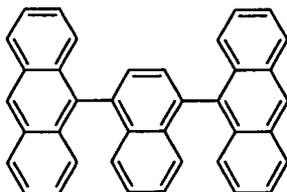
25

Eine Grignard-Lösung, hergestellt aus 223.5 g (780 mmol) Dibromnaphthalin und 41.5 g (1.6 mol) Magnesium in 1500 mL getrocknetem THF wird bei -75 °C zu 260 mL (2.34 mol) Trimethylborat in 500 mL THF getropft, 1 h bei -50 °C gerührt, danach auf RT erwärmt, mit 500 mL Wasser und 50 mL konz. Essigsäure hydrolysiert und extraktiv aufgearbeitet. Der nach Entfernen des Lösungsmittels erhaltene Rückstand wird mit 110 ml (1.6 mol) Ethylenglycol in 1000 mL Toluol am Wasserabscheider gekocht, das Lösungsmittel entfernt und der Rückstand aus Ethylacetat/Heptan umkristallisiert. Es verbleiben 157.1 g (75 %) Diester als hellgelber, kristalliner Feststoff.

35

b) Herstellung von 1,4-Bis-(9-anthryl)-naphthalin

5



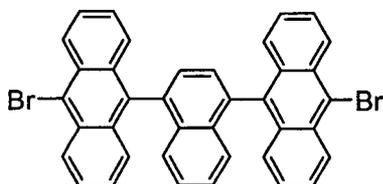
10

22.8 g (90 mmol) 9-Bromanthracen und 11.9 g (45 mmol) Naphthalin-1,4-diboronsäureethylenglycolester werden in 550 mL Dimethoxyethan und 140 mL Ethanol vorgelegt, 440 mL 2 M Na₂CO₃-Lösung zugegeben und das Gemisch mit Stickstoff gesättigt. Im Anschluss werden 3.2 g (10.7 mmol) Tris-*ortho*-tolylphosphin und 400 mg (1.8 mmol) Palladium(II)-acetat zugegeben und das Gemisch für 48 h zum Sieden erhitzt. Nach beendeter Reaktion werden 400 mL Wasser zugegeben, der Feststoff abgesaugt, mehrfach mit Wasser und EtOH gewaschen und im Vakuum getrocknet. Filtration und Umkristallisation aus 1,4-Dioxan liefert einen farblosen Feststoff (18.4 g, 87 %).

15

c) Herstellung von 1,4-Bis-[(10-(9-bromanthryl)]-naphthalin

20



25

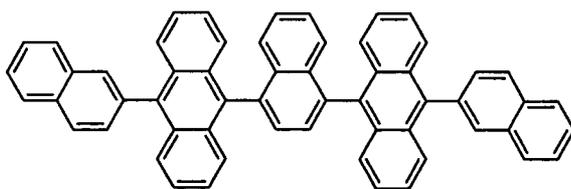
9.1 g (18.9 mmol) 1,4-Bis-(9-anthryl)-naphthalin werden in 150 mL Dichlormethan suspendiert, 7.1 g NBS zugegeben und die resultierende Suspension für 24 h bei RT gerührt. Das Reaktionsgemisch wird einrotiert, in EtOH/H₂O (1:1) ausgekocht und anschließend aus Dioxan umkristallisiert. Man erhält 11.2 g (93 %) eines fahlgelben Feststoffes mit einer Reinheit von > 98 % (RP-HPLC).

30

35

d) Herstellung von 1,4-bis-[9-(2-Naphthyl)-10-anthryl]-naphthalin

5



10

30.0 g (44.4 mmol) 1,4-Bis-[(10-(9-bromanthryl)]-naphthalin, 19.1 g (110.9 mmol) Naphthalin-2-boronsäure, 4.4 g (3.84 mmol) Palladium-tetrakis-triphenylphosphin und 440 mL 2 M Na₂CO₃-Lösung werden in 550 mL Dimethoxyethan und 140 mL Ethanol suspendiert und 48 h zum Sieden erhitzt. Der Feststoff wird abfiltriert, mit Wasser und Ethanol gewaschen, in Chloroform gelöst und filtriert. Anschließende Umkristallisation aus Toluol und Sublimation liefert einen fahlgelben Feststoff, der eine Reinheit von > 99.9 % aufweist (bestimmt durch RP-HPLC). Ausbeute: 20 g (68 %). T_G = 195 °C.

15

Beispiele 2 – 14:

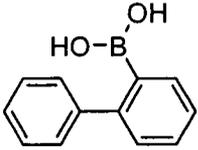
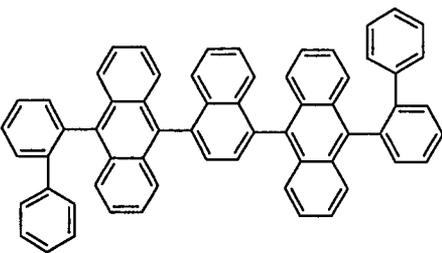
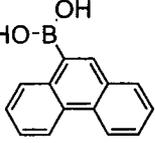
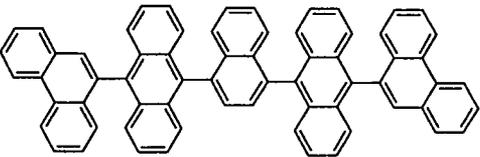
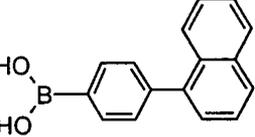
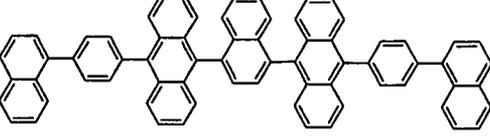
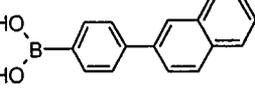
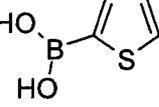
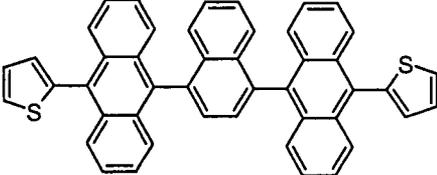
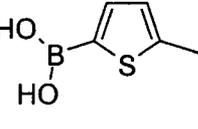
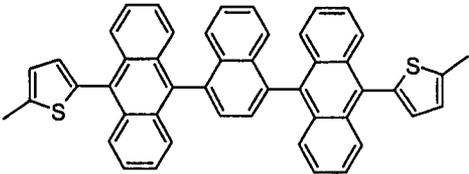
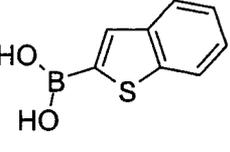
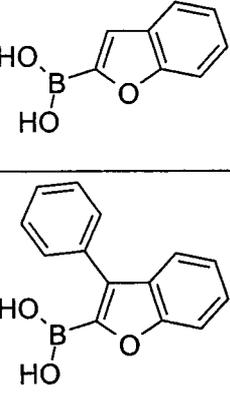
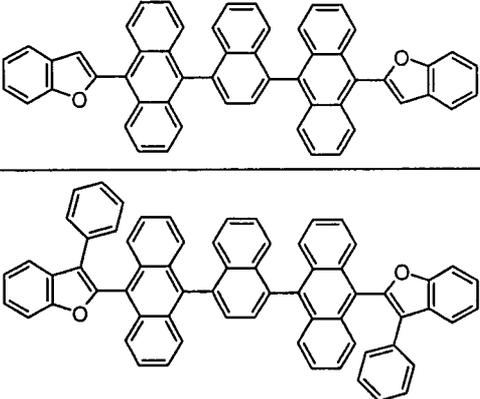
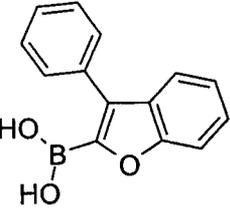
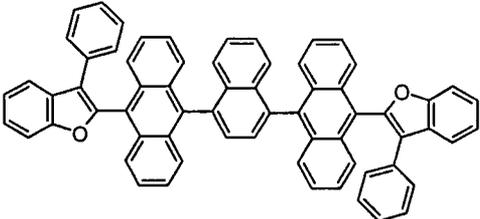
20

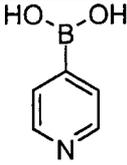
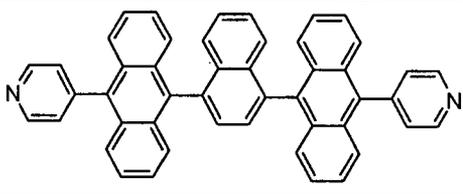
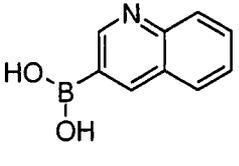
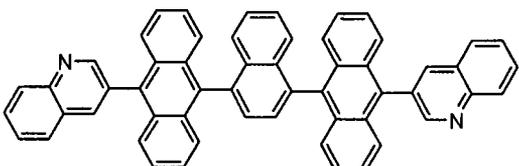
Analog zu Beispiel 1 werden folgende Verbindungen ausgehend von den aufgeführten Boronsäuren durch Kupplung nach dem in 1d) beschriebenen Verfahren mit dem in 1c) dargestellten Dibromid in den angegebenen Ausbeuten bei einer Reinheit von 99.9 % nach RP-HPLC dargestellt.

25

Bsp.	Boronsäure Kupplung analog 1c)	Produkt	Ausbeute
2			78%*
3			73%

35

5	4			55%*
10	5			81%*
15	6			66%
20	7			60%
25	8			79%
30	9			65%
35	10			71%
35	11			68%
35	12			47%

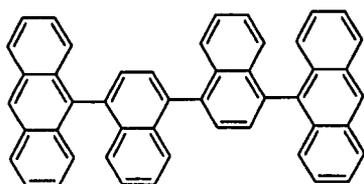
13			43%
5 14			58%

10 *: Atropisomerengemisch, Reinheit einschließlich aller Isomere

Beispiel 15: Herstellung von 4,4'-Bis-[9-(2-naphthyl)]-10-anthryl-1,1'-dinaphthalin

a) Herstellung von 4,4'-Bis-(9-anthryl)-1,1'-dinaphthalin

15



20

22.8 g (90 mmol) 9-Bromantracen und 17.7 g (45 mmol) 1,1'-Binaphthyl-4,4'-diboronsäureethylenglycolester werden in 500 mL Toluol und 100 mL Dioxan vorgelegt, 500 mL 2 M Na₂CO₃-Lösung zugegeben und das Gemisch mit Stickstoff gesättigt. Im Anschluss werden 3.2 g (10.7 mmol) Tris-*ortho*-tolylphosphin und 400 mg (1.8 mmol) Palladium(II)acetat zugegeben und das Gemisch für 12 h zum Sieden erhitzt. Nach beendeter Reaktion werden 500 mL Wasser zugegeben, der Feststoff abgesaugt, mehrfach mit Wasser und EtOH gewaschen und im Vakuum getrocknet. Filtration und Umkristallisation aus 1,4-Dioxan liefert einen farblosen Feststoff (42.6 g, 78 %).

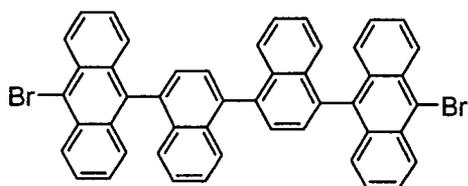
25

30

35

b) Herstellung von 4,4'-Bis-[(10-(9-bromanthryl))-1,1'-dinaphthalin

5



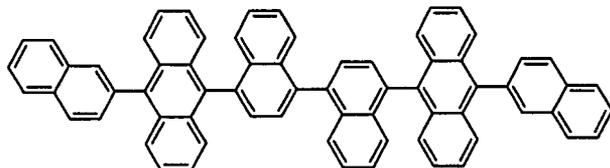
10

19.7 g (50 mmol) 4,4'-Bis-(9-anthryl)-1,1'-dinaphthalin werden in 500 mL Dichlormethan suspendiert, 18.7 g (105 mmol) NBS zugegeben und die resultierende Suspension für 18 h bei RT gerührt. Das Reaktionsgemisch wird einrotiert, in 500 ml EtOH/H₂O (1:1) ausgekocht und anschließend aus Dioxan umkristallisiert. Man erhält 36.7 g (96 %) eines fahlgelben Feststoffes mit einer Reinheit von > 98 % (RP-HPLC).

15

c) Herstellung von 4,4'-Bis-[9-(2-Naphthyl)-10-anthryl]-1,1'-dinaphthalin

20



25

30.6 g (40 mmol) 1,4-Bis-[(10-(9-bromanthryl))-naphthalin und 17.2 g (100 mmol) Naphthalin-2-boronsäure werden in 500 mL Toluol und 100 mL Dioxan vorgelegt, 500 mL 2 M Na₂CO₃-Lösung zugegeben und das Gemisch mit Stickstoff gesättigt. Im Anschluss werden 3.2 g (10.7 mmol) Tris-*ortho*-tolylphosphin und 400 mg (1.8 mmol) Palladium(II)-acetat zugegeben und das Gemisch für 12 h zum Sieden erhitzt. Der Feststoff wird abfiltriert, mit Wasser und Ethanol gewaschen, in Chloroform gelöst und filtriert. Anschließende Umkristallisation aus Toluol und Sublimation liefert einen fahlgelben Feststoff, der eine Reinheit von > 99.9 % aufweist (bestimmt durch RP-HPLC). Ausbeute: 24.4 g (71 %). T_G = 244 °C.

35

Beispiele 16 – 28:

Analog zu Beispiel 15 werden folgende Verbindungen ausgehend von den aufgeführten Boronsäuren durch Kupplung nach dem in 15c)

beschriebenen Verfahren mit dem in 15b) dargestellten Dibromid in den angegebenen Ausbeuten bei einer Reinheit von 99.9 % nach RP-HPLC dargestellt.

5

10

15

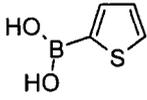
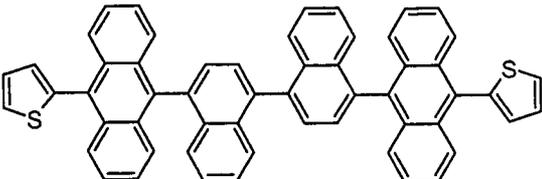
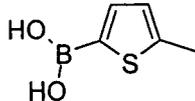
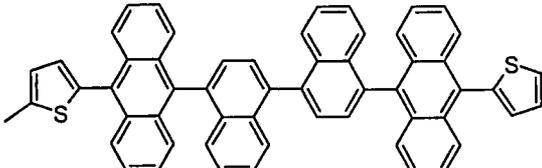
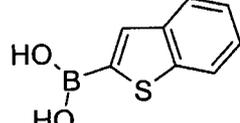
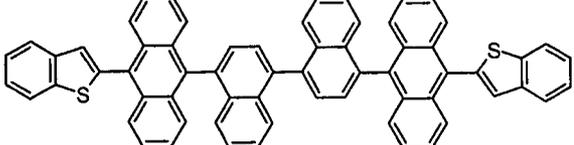
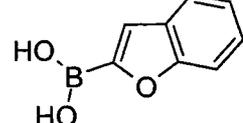
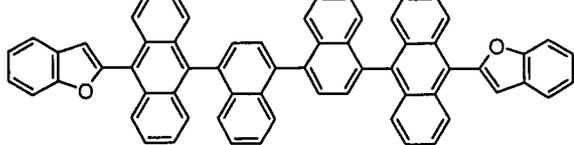
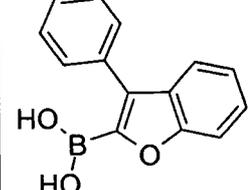
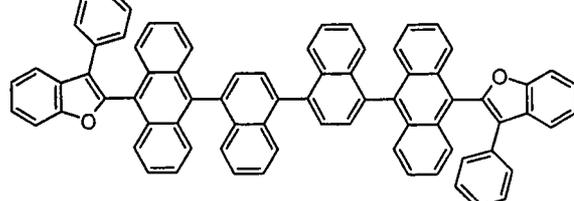
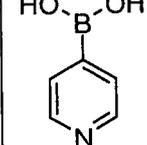
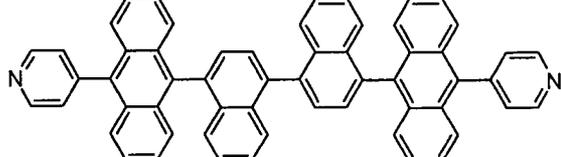
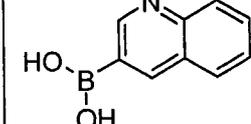
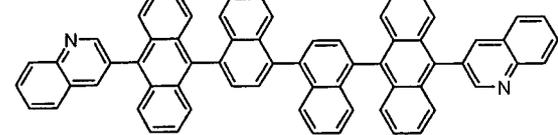
20

25

30

35

Bsp.	Boronsäure Kupplung analog 15c)	Produkt	Aus- beute
16			68%*
17			80%
18			54%*
19			79%*
20			77%
21			76%

	<p>22</p> 		<p>81%</p>
<p>5</p>	<p>23</p> 		<p>60%</p>
<p>10</p>	<p>24</p> 		<p>75%</p>
<p>15</p>	<p>25</p> 		<p>63%</p>
<p>20</p>	<p>26</p> 		<p>43%</p>
<p>25</p>	<p>27</p> 		<p>51%</p>
<p>30</p>	<p>28</p> 		<p>74%</p>

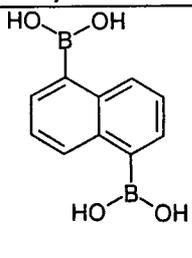
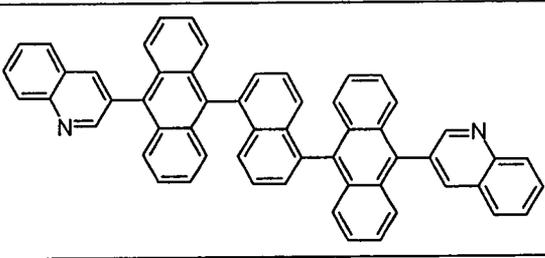
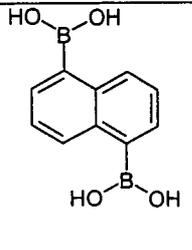
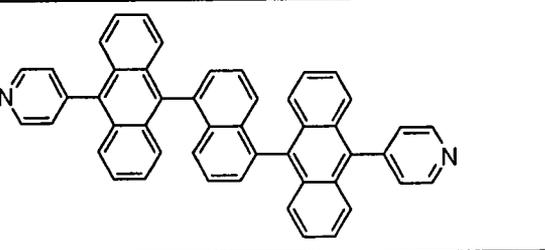
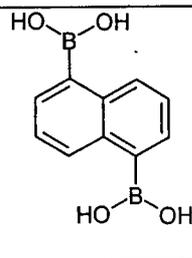
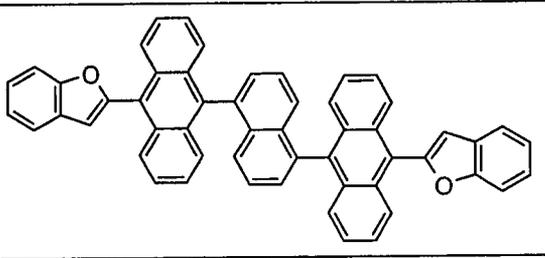
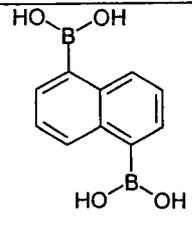
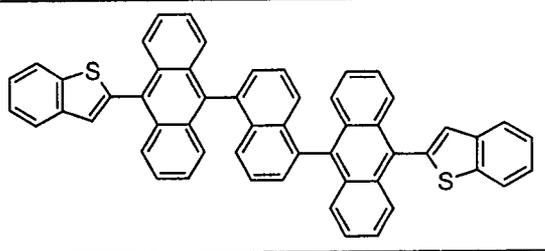
*: Atropisomerengemisch, Reinheit einschließlich aller Isomere

Beispiele 29 – 40:

Analog zu Beispiel 15 werden folgende Verbindungen ausgehend von den aufgeführten Boronsäuren durch Kupplung nach dem in 15a)

beschriebenen Verfahren, anschließender Bromierung nach dem in 15b)

5 beschriebenen Verfahren und anschließender erneuter Kupplung mit Chinolin-3-, Pyridin-4-, Benzothiophen-2- bzw. Benzofuran-2-boronsäure nach dem in 15c) beschriebenen Verfahren in den angegebenen Ausbeuten bei einer Reinheit von 99.9 % nach RP-HPLC dargestellt.

10 Bsp.	Boronsäure Kupplung analog 15a)	Produkt	Aus- beute
15 29			70%
20 30			69%
25 31			48%
30 32			52%

5

10

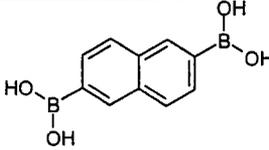
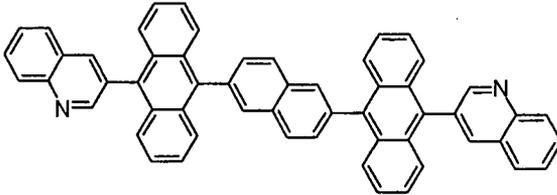
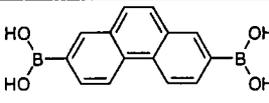
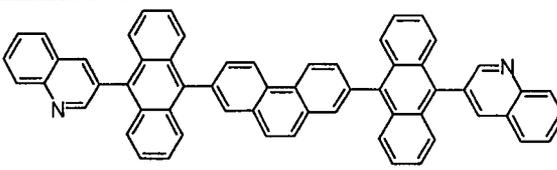
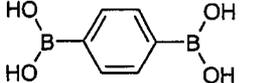
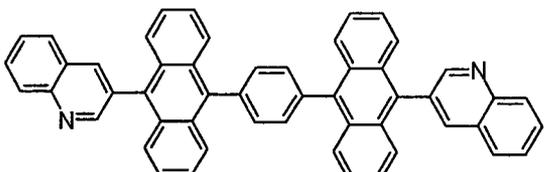
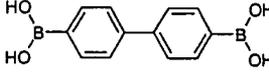
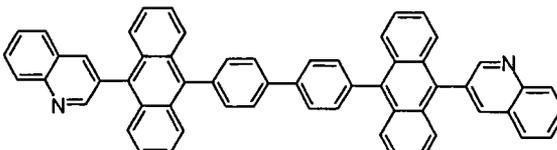
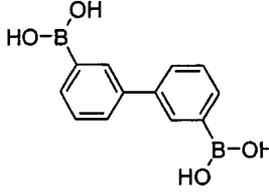
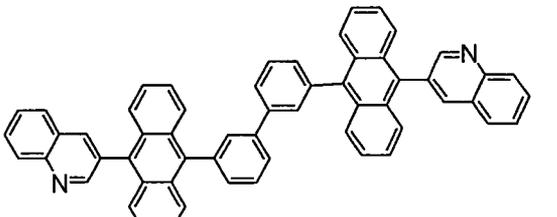
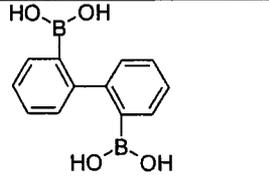
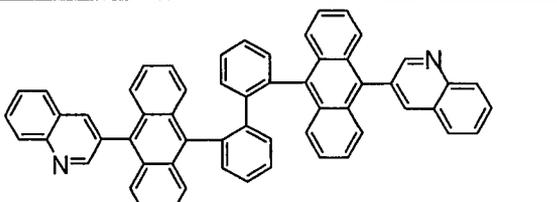
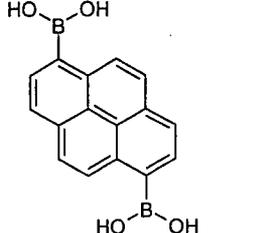
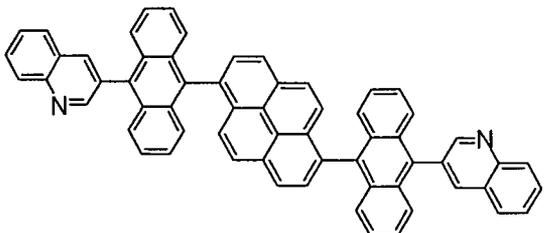
15

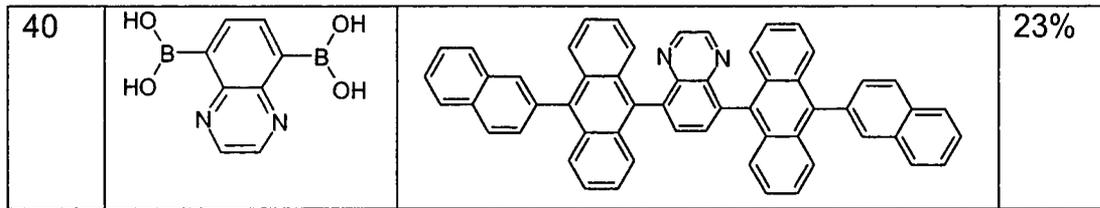
20

25

30

35

33			64%
34			83%
35			78%
36			65%
37			66%
38			54%
39			43%



5

Beispiel 41: Herstellung der OLEDs

Die Herstellung von OLEDs erfolgt nach einem allgemeinen Verfahren gemäß WO 04/058911, das im Einzelfall auf die jeweiligen Gegebenheiten (z. B. Schichtdickenvariation, um optimale Effizienz bzw. Farbe zu erreichen) angepasst wird.

10

In den folgenden Beispielen 42 bis 63 werden die Ergebnisse verschiedener OLEDs vorgestellt. Glasplatten, die mit strukturiertem ITO (Indium-Zinn-Oxid) beschichtet sind, bilden die Substrate der OLEDs. Zur verbesserten Prozessierung wird PEDOT (aus Wasser aufgeschleudert; bezogen von H. C. Starck, Goslar, Deutschland; Poly(3,4-ethylenedioxy-2,5-thiophen)) auf das Substrat aufgebracht. Die OLEDs bestehen aus folgender Schichtenfolge: Substrat / PEDOT 20 nm / Lochinjektionsschicht (HIL) aus dem Lochinjektionsmaterial HIL1 20nm / Lochtransportschicht (HTM) 20 nm / Emissionsschicht (EML) 30 nm / Elektronentransportschicht (ETM) 20 nm und abschließend eine Kathode. Die Materialien bis auf PEDOT werden in einer Vakuumkammer thermisch aufgedampft. Dabei besteht die Emissionsschicht immer aus einem Matrixmaterial (Host) und einem Dotierstoff (Dotand), der durch Coverdampfung dem Host beige-mischt wird. Die Kathode wird durch eine 1 nm dünne LiF-Schicht und einer darauf abgeschiedenen 150 nm Al-Schicht gebildet. Die Tabelle 3 zeigt die chemischen Strukturen der zum Aufbau der OLEDs verwendeten Materialien.

15

20

25

30

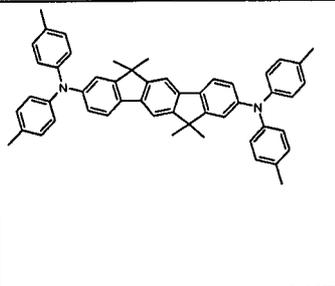
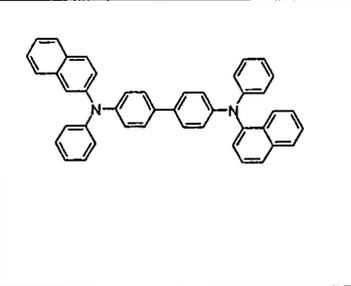
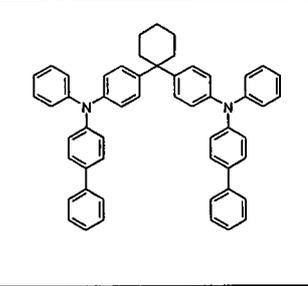
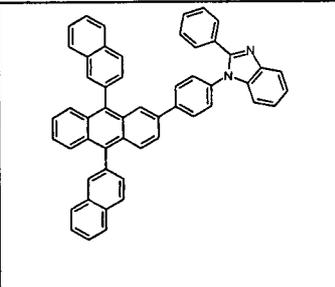
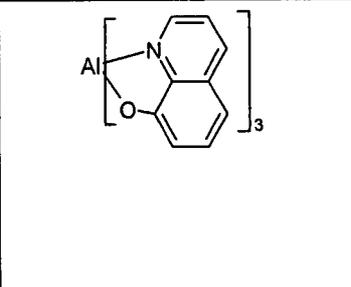
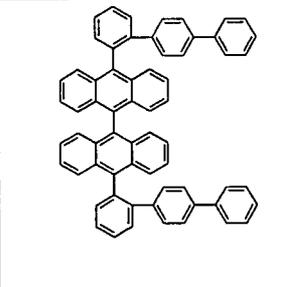
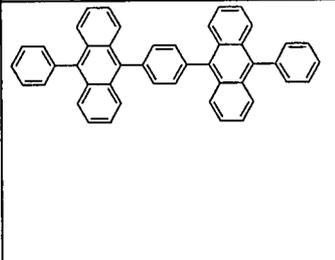
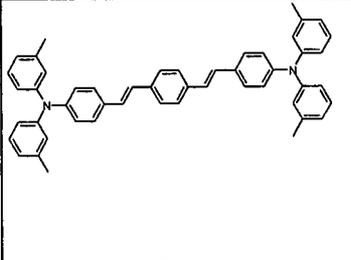
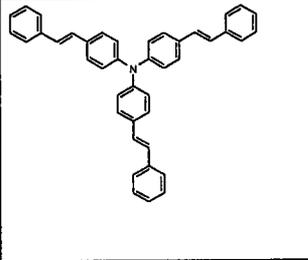
Diese OLEDs werden standardmäßig charakterisiert; hierfür werden die Elektrolumineszenzspektren, die Effizienz (gemessen in cd/A), die Leistungseffizienz (gemessen in lm/W) in Abhängigkeit der Helligkeit, berechnet aus Strom-Spannungs-Helligkeit-Kennlinien (IUL-Kennlinien), und die Lebensdauer bestimmt. Als Lebensdauer wird die Zeit definiert, nach der die Anfangshelligkeit von 2000 cd/m² auf die Hälfte gesunken ist.

35

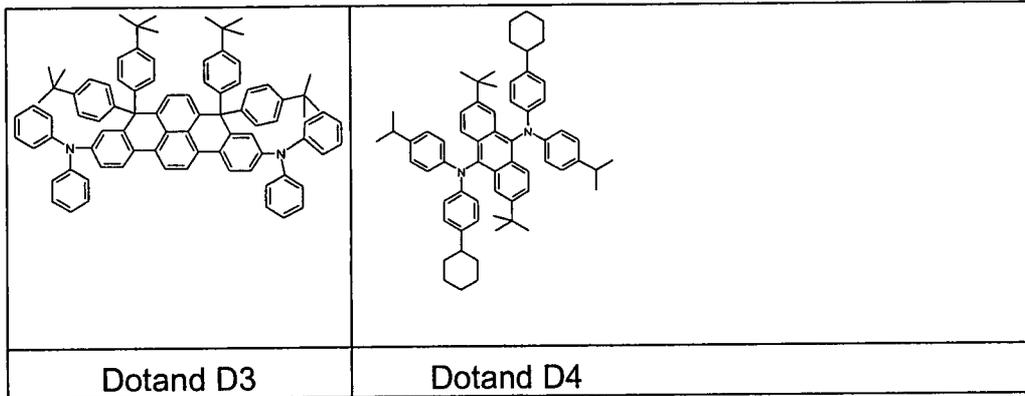
In Tabelle 4 sind die Ergebnisse einiger OLEDs (Beispiele 42 bis 63) zusammengefasst. Als erfindungsgemäße Hostmaterialien wurden die Verbindungen der Beispiele 1, 6, 10, 13, 14, 16, 19, 35, 37 und 40 verwendet. Als Vergleichsbeispiele werden die Hosts H1 und H2 gemäß dem Stand der Technik verwendet.

5

Tabelle 3

10			
15	HIL1	HTM1	HTM2
20			
25	ETM1	ETM2	Host H1
30			
35	Host H2	Dotand D1	Dotand D2

5



10

15

20

25

30

35

Tabelle 4

Beispiel	HTM	EML	ETM	Max. Effizienz (cd/A)	Spannung (V) bei 1000 cd/m ²	CIE	Lebensdauer bei 2000 cd/m ² (h)
42 (Vergleich)	HTM1	H1 + 5% D1	ETM1	10.9	5.8	x=0.17 / y=0.33	3200
43 (Vergleich)	HTM1	H2 + 5% D1	ETM1	11.2	5.7	x=0.17 / y=0.33	2500
44 (Vergleich)	HTM1	H1 + 5% D2	ETM1	3.6	6.3	x=0.15 / y=0.13	700
45 (Vergleich)	HTM2	H2 + 5% D2	ETM1	3.2	6.5	x=0.15 / y=0.17	300
46 (Vergleich)	HTM2	H1 + 5% D3	ETM2	20.4	5.4	x=0.31 / y=0.63	7300
47 (Vergleich)	HTM2	H1 + 5% D4	ETM2	19.7	5.3	x=0.28 / y=0.60	8500
48	HTM1	Bsp. 1 + 5% D1	ETM1	12.3	5.5	x=0.17 / y=0.33	5100
49	HTM1	Bsp. 6 + 5% D1	ETM1	13.0	5.7	x=0.17 / y=0.33	5800
50	HTM1	Bsp. 16 + 5% D1	ETM1	11.0	5.1	x=0.17 / y=0.33	4900
51	HTM1	Bsp. 1 + 5% D2	ETM1	4.1	5.5	x=0.15 / y=0.15	2100
52	HTM1	Bsp. 6 + 5% D2	ETM1	4.2	5.7	x=0.15 / y=0.14	2500
53	HTM1	Bsp. 19 + 5% D2	ETM1	4.5	5.6	x=0.15 / y=0.12	2800
54	HTM2	Bsp. 10 + 5% D3	ETM2	24.4	5.8	x=0.30 / y=0.63	7000
55	HTM2	Bsp. 14 + 5% D3	ETM2	21.6	5.5	x=0.30 / y=0.63	8100
56	HTM2	Bsp. 16 + 5% D3	ETM2	21.3	5.6	x=0.31 / y=0.63	8800
57	HTM2	Bsp. 35 + 5% D4	ETM2	23.7	5.1	x=0.28 / y=0.60	9000

5

10

15

20

58	HTM2	Bsp. 37 + 5% D4	ETM2	26.1	5.2	$x=0.29 / y=0.59$	8700
59	HTM2	Bsp. 40 + 5% D4	ETM2	19.7	5.3	$x=0.28 / y=0.59$	9300
60	HTM2	Bsp. 6 + 5% D4	ETM2	24.3	5.0	$x=0.31 / y=0.61$	9100
61	HTM2	Bsp. 6 + 5% D4	Bsp. 14	26.4	5.2	$x=0.31 / y=0.62$	10300
62	HTM2	Bsp. 6 + 5% D4	Bsp. 37	25.1	5.1	$x=0.30 / y=0.61$	11000
63	HTM2	Bsp. 6 + 5% D4	Bsp. 40	24.6	5.1	$x=0.30 / y=0.62$	10800

5

10

15

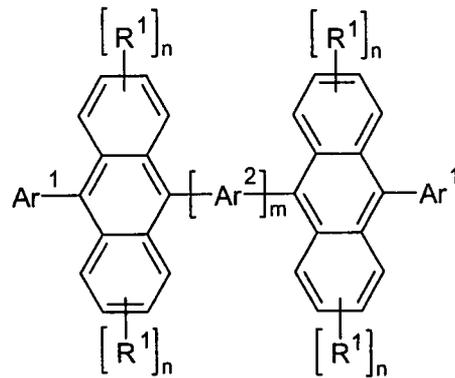
20

Patentansprüche

1. Verbindung gemäß Formel (1),

5

10



Formel (1)

15

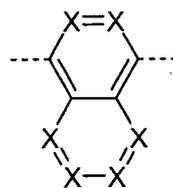
wobei für die verwendeten Symbole und Indizes gilt:

20

Ar^1 ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 30 aromatischen Ringatomen, welches durch einen oder mehrere Reste R^1 substituiert sein kann;

Ar^2 ist, wenn beide Gruppen Ar^1 ein aromatisches Ringsystem darstellen, eine Gruppe der Formel (2),

25



Formel (2)

30

wobei X gleich oder verschieden bei jedem Auftreten für CR^1 oder N steht,

oder

35

ist, wenn mindestens eine Gruppe Ar^1 ein heteroaromatisches Ringsystem darstellt, gleich oder verschieden bei jedem Auftreten eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 5 bis 20

aromatischen Ringatomen, welche durch einen oder mehrere Reste R^1 substituiert sein kann;

5 R^1 ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten H, F, Cl, Br, I, CN, NO_2 , $N(R^2)_2$, eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^2 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benach-
10 barte CH_2 -Gruppen durch $-R^2C=CR^2-$, $-C\equiv C-$, $Ge(R^2)_2$, $Sn(R^2)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^2$, $-O-$, $-S-$, $-N(R^2)-$ oder $-CONR^2-$ ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch F, Cl, Br, I, CN oder NO_2 ersetzt sein können, oder eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 5 bis 30 aromatischen Ringatomen,
15 die mit einem oder mehreren Resten R^2 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 24 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^2 substituiert sein kann, oder eine Kombination aus zwei, drei, vier oder fünf dieser Systeme; dabei können auch zwei oder
20 mehrere benachbarte Substituenten R^1 miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden;

R^2 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H oder ein Kohlenwasserstoffrest mit 1 bis 20 C-Atomen, welcher
25 aliphatisch, aromatisch oder eine Kombination aus aliphatisch und aromatisch sein kann und worin auch ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können; dabei können auch zwei oder mehrere Reste R^2 miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden;

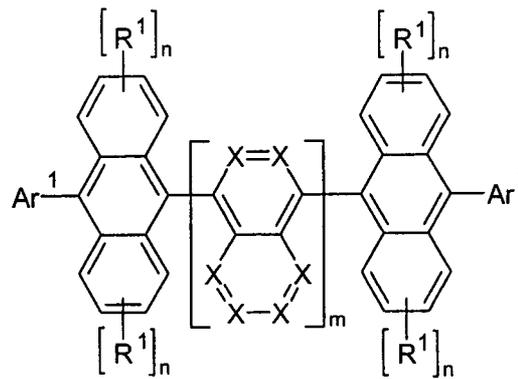
30 n ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten 0, 1, 2, 3 oder 4;

m ist 1, 2, 3, 4 oder 5.

2. Verbindung nach Anspruch 1 gemäß Formel (3),

5

10



Formel (3)

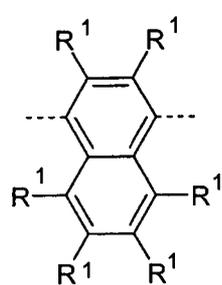
wobei die Symbole und Indizes dieselbe Bedeutung haben, wie in
Anspruch 1 beschrieben.

15

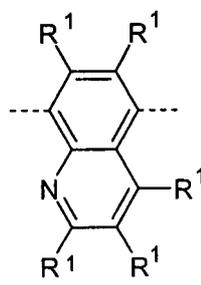
3. Verbindung nach Anspruch 1 oder 2, dadurch gekennzeichnet, dass
die Gruppe gemäß Formel (2) ausgewählt ist aus den Gruppen der
Formeln (5) bis (10),

20

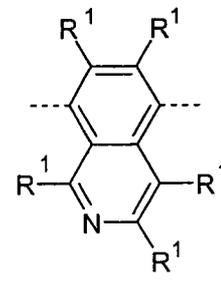
25



Formel (5)

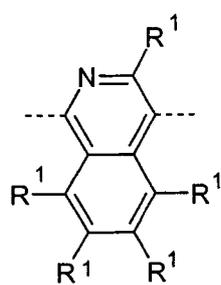


Formel (6)

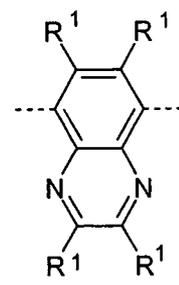


Formel (7)

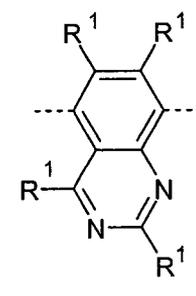
30



Formel (8)



Formel (9)



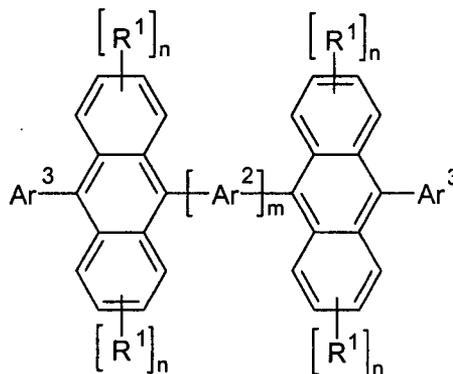
Formel (10)

35

- 47 -

wobei die Symbole und Indizes dieselbe Bedeutung haben wie in Anspruch 1.

4. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 3,
 5 dadurch gekennzeichnet, dass das Symbol Ar^1 , gleich oder
 verschieden bei jedem Auftreten, für ein aromatisches oder hetero-
 aromatisches Ringsystem mit 9 bis 25 Ringatomen steht, welches
 durch einen oder mehrere Reste R^1 substituiert sein kann, bevorzugt
 10 für eine kondensierte Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 10 bis 16
 aromatischen Ringatomen oder eine gegebenenfalls überbrückte
 Biarylgruppe, welche durch einen oder mehrere Reste R^1 substituiert
 sein kann.
5. Verbindung nach Anspruch 1 gemäß Formel (4),



Formel (4)

- wobei Ar^3 , gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für ein
 heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 30 aromatischen Ring-
 atomen steht, welches durch einen oder mehrere Reste R^1
 30 substituiert sein kann, und die weiteren Symbole und Indizes
 dieselbe Bedeutung haben, wie in Anspruch 1 beschrieben.

6. Verbindung nach Anspruch 5, dadurch gekennzeichnet, dass das
 Symbol Ar^3 , gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für ein
 heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 20 aromatischen Ring-
 35 atomen steht, welches durch einen oder mehrere Reste R^1
 substituiert sein kann, bevorzugt für eine Heteroarylgruppe mit 5 bis

14 aromatischen Ringatomen steht, die mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann.

- 5 7. Verbindung nach Anspruch 5 oder 6, dadurch gekennzeichnet, dass das Symbol Ar^2 , gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 5 bis 14 aromatischen Ringatomen steht, welche mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann, bevorzugt gleich oder verschieden für 1,4-Naphthylen, 1,5-Naphthylen, 2,6-Naphthylen, 1,2-, 1,3- oder 1,4-Phenylen oder 2,7-Phenanthrenylen.
- 10
- 15 8. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 7, dadurch gekennzeichnet, dass das Symbol R^1 , gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für H, F, eine geradkettige Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 1 bis 6 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 3 bis 10 C-Atomen, wobei jeweils ein oder mehrere CH_2 -Gruppen durch $-R^2C=CR^2-$, $-O-$, $-S-$ oder $-N(R^2)-$ ersetzt sein können und wobei jeweils ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können, oder eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 5 bis 14 aromatischen Ringatomen, oder eine Kombination aus zwei oder drei dieser Systeme steht; dabei können auch zwei oder mehrere Reste R^1 miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden.
- 20
- 25 9. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 8, dadurch gekennzeichnet, dass der Index n für 0, 1 oder 2 steht, bevorzugt für 0 oder 1.
- 30 10. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 9, dadurch gekennzeichnet, dass der Index m für 1, 2 oder 3 steht, bevorzugt für 1 oder 2.
- 35 11. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 10, dadurch gekennzeichnet, dass die beiden Gruppen Ar^1 gleich sind und gleich substituiert sind bzw. die beiden Gruppen Ar^3 gleich sind

- 49 -

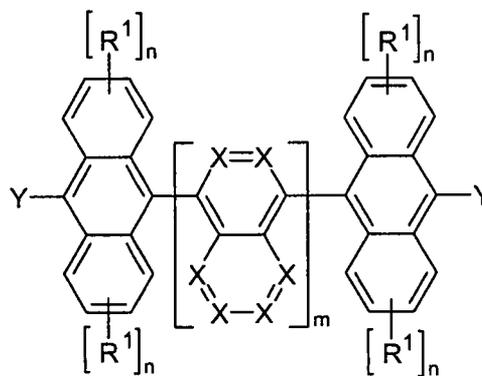
und gleich substituiert sind.

12. Verfahren zur Synthese von Verbindungen nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 11, dadurch gekennzeichnet, dass die Bindungen zwischen dem Anthracen und den Gruppen Ar^1 bzw. Ar^2 bzw. Ar^3 durch Suzuki-Kupplung geknüpft werden.

13. Verbindung gemäß Formel (11),

10

15



Formel (11)

20

wobei gilt:

Y ist, gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, Chlor, Brom, Iod oder eine Gruppe der Formel OSO_2R^3 , insbesondere Brom;

25

R^3 ist eine organische Gruppe mit 1 bis 20 C-Atomen, in der auch einzelne H-Atome durch Fluor ersetzt sein können;

die weiteren Symbole und Indizes haben die in Anspruch 1 aufgeführte Bedeutung.

30

35

14. Verwendung von Verbindungen nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 11 in organischen elektronischen Vorrichtungen, insbesondere in organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen.

15. Organische elektronische Vorrichtung, enthaltend mindestens eine Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 11,

- 50 -

insbesondere ausgewählt aus organischen Elektrolumineszenz-
vorrichtungen (OLED, PLED), organischen Feld-Effekt-Transistoren
(O-FETs), organischen Dünnschichttransistoren (O-TFTs), organischen
lichtemittierenden Transistoren (O-LETs), organischen integrierten
5 Schaltungen (O-ICs), organischen Solarzellen (O-SCs), organischen
Feld-Quench-Devices (O-FQDs), organischen Photorezeptoren oder
organischen Laserdioden (O-Laser).

- 10 16. Organische Elektrolumineszenzvorrichtung nach Anspruch 15,
enthaltend Anode, Kathode und mindestens eine emittierende
Schicht und gegebenenfalls weitere Schichten, ausgewählt aus Loch-
injektionsschicht, Lochtransportschicht, Elektronentransportschicht,
Elektroneninjektionsschicht und/oder eine Charge-Generation Layer.
- 15 17. Organische Elektrolumineszenzvorrichtung nach Anspruch 15 oder
16, dadurch gekennzeichnet, dass die Verbindung nach einem oder
mehreren der Ansprüche 1 bis 11 als Hostmaterial zusammen mit
einem Dotanden eingesetzt wird oder dass sie als Emitter oder als
Elektronentransportverbindung eingesetzt wird.
- 20 18. Verfahren zur Herstellung einer organischen Elektrolumineszenz-
vorrichtung nach einem oder mehreren der Ansprüche 15 bis 17,
dadurch gekennzeichnet, dass mindestens eine Verbindung nach
einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 11, gegebenenfalls
25 zusammen mit einem Dotanden und/oder anderen Verbindungen,
durch ein Sublimationsverfahren oder aus Lösung oder durch ein
Druckverfahren aufgebracht werden.

30

35

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2006/011758

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
INV. C09K11/06 H05B33/14 C07C211/54 C07C15/28 H01L51/00

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
C09K H05B H01L C07C

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used)

EPO-Internal, CHEM ABS Data, WPI Data

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
P,X	WO 2006/117052 A (MERCK PATENT GMBH [DE]; STOESSEL PHILIPP [DE]; BREUNING ESTHER [DE]; B) 9 November 2006 (2006-11-09) Verbindungen (120), (121) page 46 - page 47 Verbindungen (151) bis (158) page 53 - page 54	1-18
P,X	EP 1 717 875 A (SAMSUNG SDI CO LTD [KR]) 2 November 2006 (2006-11-02) Formula 5; claims 1-5	1-18
X	JP 11 111460 A (TOYO INK MFG CO) 23 April 1999 (1999-04-23) Verbindungen (10), (18), (26), (27), (33), (38) paragraphs [0035], [0037] - [0039], [0042], [0043]	1-18
	----- -/-- -----	

Further documents are listed in the continuation of Box C. See patent family annex.

* Special categories of cited documents :

A document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance	*T* later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
E earlier document but published on or after the international filing date	*X* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
L document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)	*Y* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art.
O document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means	*Z* document member of the same patent family
P document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	

Date of the actual completion of the international search 21 February 2007	Date of mailing of the international search report 27/02/2007
---	--

Name and mailing address of the ISA/ European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl, Fax: (+31-70) 340-3016	Authorized officer Lehnert, Andreas
---	--

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2006/011758

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	JP 2000 007604 A (IDEMITSU KOSAN CO) 11 January 2000 (2000-01-11) Verbindungen (7), (11), (12) -----	1-18
X	US 2003/111692 A1 (TOGUCHI SATORU [JP] ET AL) 19 June 2003 (2003-06-19) Verbindung (18') page 11 -----	1-18
X	JP 2005 008587 A (MITSUI CHEMICALS INC) 13 January 2005 (2005-01-13) the whole document -----	1-18
X	EP 1 553 154 A (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 13 July 2005 (2005-07-13) cited in the application Verbindungen AN43 bis AN48; claims 1-12 -----	1-18
X	US 2004/263067 A1 (SAITOH AKIHITO [JP] ET AL) 30 December 2004 (2004-12-30) page 18, paragraph 81 -----	1-18
X	EP 1 182 183 A1 (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 27 February 2002 (2002-02-27) claims 1,2 -----	1-18
X	EP 0 681 019 A2 (TDK CORP [JP] TDK CORP) 8 November 1995 (1995-11-08) page 17 - page 18; claims 1-9 -----	1-18
X	EP 1 167 488 A1 (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 2 January 2002 (2002-01-02) Verbindung EM24claims 1,2 -----	1-18

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No

PCT/EP2006/011758

Patent document cited in search report		Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 2006117052	A	09-11-2006	NONE	
EP 1717875	A	02-11-2006	CN 1881649 A JP 2006287218 A KR 20060104670 A US 2006222888 A1	20-12-2006 19-10-2006 09-10-2006 05-10-2006
JP 11111460	A	23-04-1999	JP 3633236 B2	30-03-2005
JP 2000007604	A	11-01-2000	NONE	
US 2003111692	A1	19-06-2003	CN 1433095 A JP 3856202 B2 JP 2003115624 A	30-07-2003 13-12-2006 18-04-2003
JP 2005008587	A	13-01-2005	NONE	
EP 1553154	A	13-07-2005	CN 1678711 A WO 2004018587 A1 KR 20050058465 A US 2006043858 A1	05-10-2005 04-03-2004 16-06-2005 02-03-2006
US 2004263067	A1	30-12-2004	JP 3848306 B2 JP 2005015418 A US 2006267488 A1	22-11-2006 20-01-2005 30-11-2006
EP 1182183	A1	27-02-2002	CN 1365347 A WO 0172673 A1 TW 574342 B US 2002048687 A1	21-08-2002 04-10-2001 01-02-2004 25-04-2002
EP 0681019	A2	08-11-1995	DE 69511755 D1 DE 69511755 T2 US 5635308 A	07-10-1999 13-01-2000 03-06-1997
EP 1167488	A1	02-01-2002	CN 1322232 A WO 0121729 A1 KR 20050100708 A TW 474113 B US 6534199 B1	14-11-2001 29-03-2001 19-10-2005 21-01-2002 18-03-2003

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES
 INV. C09K11/06 H05B33/14 C07C211/54 C07C15/28 H01L51/00

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

B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchiertes Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)

C09K H05B H01L C07C

Recherchierte, aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen

Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe)

EPO-Internal, CHEM ABS Data, WPI Data

C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
P, X	WO 2006/117052 A (MERCK PATENT GMBH [DE]; STOESSEL PHILIPP [DE]; BREUNING ESTHER [DE]; B) 9. November 2006 (2006-11-09) Verbindungen (120), (121) Seite 46 - Seite 47 Verbindungen (151) bis (158) Seite 53 - Seite 54 -----	1-18
P, X	EP 1 717 875 A (SAMSUNG SDI CO LTD [KR]) 2. November 2006 (2006-11-02) Formula 5; Ansprüche 1-5 -----	1-18
X	JP 11 111460 A (TOYO INK MFG CO) 23. April 1999 (1999-04-23) Verbindungen (10), (18), (26), (27), (33), (38) Absätze [0035], [0037] - [0039], [0042], [0043] -----	1-18
	-/--	

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

- * Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen :
- *A* Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist
 - *E* älteres Dokument, das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist
 - *L* Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt)
 - *O* Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht
 - *P* Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist
 - *T* Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist
 - *X* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden
 - *Y* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren anderen Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist
 - *Z* Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist

Datum des Abschlusses der internationalen Recherche	Absenddatum des internationalen Recherchenberichts
21. Februar 2007	27/02/2007

Name und Postanschrift der internationalen Recherchenbehörde Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl, Fax: (+31-70) 340-3016	Bevollmächtigter Bediensteter Lehnert, Andreas
---	---

C. (Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	JP 2000 007604 A (IDEMITSU KOSAN CO) 11. Januar 2000 (2000-01-11) Verbindungen (7), (11), (12) -----	1-18
X	US 2003/111692 A1 (TOGUCHI SATORU [JP] ET AL) 19. Juni 2003 (2003-06-19) Verbindung (18') Seite 11 -----	1-18
X	JP 2005 008587 A (MITSUI CHEMICALS INC) 13. Januar 2005 (2005-01-13) das ganze Dokument -----	1-18
X	EP 1 553 154 A (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 13. Juli 2005 (2005-07-13) in der Anmeldung erwähnt Verbindungen AN43 bis AN48; Ansprüche 1-12 -----	1-18
X	US 2004/263067 A1 (SAITOH AKIHITO [JP] ET AL) 30. Dezember 2004 (2004-12-30) Seite 18, Absatz 81 -----	1-18
X	EP 1 182 183 A1 (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 27. Februar 2002 (2002-02-27) Ansprüche 1,2 -----	1-18
X	EP 0 681 019 A2 (TDK CORP [JP] TDK CORP) 8. November 1995 (1995-11-08) Seite 17 - Seite 18; Ansprüche 1-9 -----	1-18
X	EP 1 167 488 A1 (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 2. Januar 2002 (2002-01-02) Verbindung EM24Ansprüche 1,2 -----	1-18

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2006/011758

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument		Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 2006117052	A	09-11-2006	KEINE	
EP 1717875	A	02-11-2006	CN 1881649 A JP 2006287218 A KR 20060104670 A US 2006222888 A1	20-12-2006 19-10-2006 09-10-2006 05-10-2006
JP 11111460	A	23-04-1999	JP 3633236 B2	30-03-2005
JP 2000007604	A	11-01-2000	KEINE	
US 2003111692	A1	19-06-2003	CN 1433095 A JP 3856202 B2 JP 2003115624 A	30-07-2003 13-12-2006 18-04-2003
JP 2005008587	A	13-01-2005	KEINE	
EP 1553154	A	13-07-2005	CN 1678711 A WO 2004018587 A1 KR 20050058465 A US 2006043858 A1	05-10-2005 04-03-2004 16-06-2005 02-03-2006
US 2004263067	A1	30-12-2004	JP 3848306 B2 JP 2005015418 A US 2006267488 A1	22-11-2006 20-01-2005 30-11-2006
EP 1182183	A1	27-02-2002	CN 1365347 A WO 0172673 A1 TW 574342 B US 2002048687 A1	21-08-2002 04-10-2001 01-02-2004 25-04-2002
EP 0681019	A2	08-11-1995	DE 69511755 D1 DE 69511755 T2 US 5635308 A	07-10-1999 13-01-2000 03-06-1997
EP 1167488	A1	02-01-2002	CN 1322232 A WO 0121729 A1 KR 20050100708 A TW 474113 B US 6534199 B1	14-11-2001 29-03-2001 19-10-2005 21-01-2002 18-03-2003