

(19)



(11)

EP 3 132 478 B1

(12)

EUROPÄISCHE PATENTSCHRIFT

(45) Veröffentlichungstag und Bekanntmachung des
Hinweises auf die Patenterteilung:
27.11.2019 Patentblatt 2019/48

(51) Int Cl.:
H01L 51/54^(2006.01)

(21) Anmeldenummer: **15718823.6**

(86) Internationale Anmeldenummer:
PCT/EP2015/058028

(22) Anmeldetag: **14.04.2015**

(87) Internationale Veröffentlichungsnummer:
WO 2015/158689 (22.10.2015 Gazette 2015/42)

(54) HOSTMATERIALIEN FÜR OLEDs

HOST MATERIALS FOR OLEDs

MATÉRIAUX HÔTES POUR DES OLEDs

(84) Benannte Vertragsstaaten:
**AL AT BE BG CH CY CZ DE DK EE ES FI FR GB
GR HR HU IE IS IT LI LT LU LV MC MK MT NL NO
PL PT RO RS SE SI SK SM TR**

(30) Priorität: **15.04.2014 EP 14164796**
11.12.2014 EP 14197513

(43) Veröffentlichungstag der Anmeldung:
22.02.2017 Patentblatt 2017/08

(73) Patentinhaber: **cynora GmbH**
76646 Bruchsal (DE)

(72) Erfinder:
• **VOLZ, Daniel**
76137 Karlsruhe (DE)
• **ABMROSEK, David**
10437 Berlin (DE)

(74) Vertreter: **Hoppe, Georg Johannes**
Darani Anwaltskanzlei
Beuckestrasse 20
14163 Berlin (DE)

(56) Entgegenhaltungen:
WO-A1-2012/149999 JP-A- 2012 046 741
KR-A- 20130 075 949 KR-A- 20130 142 967
KR-A- 20140 020 208 US-A1- 2010 171 417
US-A1- 2012 068 170 US-A1- 2014 001 443

- **DONGWOOK KIM ET AL: "Design of Efficient Ambipolar Host Materials for Organic Blue Electrophosphorescence: Theoretical Characterization of Hosts Based on Carbazole Derivatives", JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, Bd. 133, Nr. 44, 25. September 2011 (2011-09-25), Seiten 17895-17900, XP055122541, ISSN: 0002-7863, DOI: 10.1021/ja207554h**

EP 3 132 478 B1

Anmerkung: Innerhalb von neun Monaten nach Bekanntmachung des Hinweises auf die Erteilung des europäischen Patents im Europäischen Patentblatt kann jedermann nach Maßgabe der Ausführungsordnung beim Europäischen Patentamt gegen dieses Patent Einspruch einlegen. Der Einspruch gilt erst als eingelegt, wenn die Einspruchsgebühr entrichtet worden ist. (Art. 99(1) Europäisches Patentübereinkommen).

Beschreibung

[0001] Die Erfindung betrifft Moleküle der allgemeinen Formel 1, die für die Verwendung als Hostmaterialien in OLEDs (organic light emitting diodes) und anderen optoelektronischen Bauelementen (optoelektronischen Vorrichtungen) geeignet sind.

Einleitung

[0002] Die auf OLED (Organic Light Emitting Diodes) basierende Technologie hat sich in den letzten Jahren im Bereich von Beleuchtungs- und Displayapplikationen als kostengünstige und energieeffiziente Technik durchgesetzt. Entsprechende Produkte sind bereits heute kommerziell erhältlich und werden in verschiedensten Arten von opto-elektronischen Bauelementen eingesetzt.

[0003] In der Regel sind derartige Bauteile in Schichtstrukturen realisiert, welche überwiegend aus organischen Materialien bestehen. Zum besseren Verständnis ist in Figur 1 ein vereinfachter Aufbau exemplarisch dargestellt. Herzstück solcher Bauteile ist die Emitterschicht, welche typischerweise zwischen einer Anode und einer Kathode angeordnet ist und die in der Regel aus einem Hostmaterial besteht, in welches die emittierenden Moleküle eingebettet sind. Weitere Schichten, wie die Lochinjektionsschicht, die Lochtransportschicht, die Elektronenleitschicht und die Zwischenschicht bewirken im Allgemeinen eine dramatisch verbesserte Effizienz der Bauteile. Bei Anlegen eines Stroms/einer Spannung treffen sich negative Ladungsträger (Elektronen) und positive Ladungsträger (Löcher), die zu sogenannten Exzitonen (= angeregte Zustände) rekombinieren. Die in den Exzitonen enthaltene Energie kann von den entsprechenden Emitttern in Form von Licht abgegeben werden, wobei man in diesem Fall von Elektrolumineszenz spricht. Einen Überblick über die Funktion von OLEDs findet sich beispielsweise bei H. Yersin, Top. Curr. Chem. 2004, 241, 1 und H. Yersin, "Highly Efficient OLEDs with Phosphorescent Materials"; Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2008.

[0004] Alle Materialien eines opto-elektronischen Bauelements müssen so gewählt werden, dass eine optimale Injektion der Ladungen (Löcher und Elektronen) von den Elektroden und Ausbildung der Exzitonen in der Emitterschicht ermöglicht wird. Die Entwicklung effektiver Hostmaterialien ist für die Produktion effizienter opto-elektronischer Bauelemente hierbei genau so wichtig wie die Entwicklung neuer Emitttermaterialien.

[0005] Hostmaterialien müssen eine effiziente Energieniveau-Nivellierung ermöglichen, um die Energieniveaus der verwendeten Elektroden stufenweisen an die Energieniveaus der Emitttermoleküle anzupassen. Weiterhin sollten die verwendeten Hostmaterialien idealerweise einen ausgeglichenen Ladungstransport (eine Ladungsträgerbalance von positiven und negativen Ladungsträgern) gewährleisten. Gängige Hostmaterialien, wie CBP, mCP, TPBi und TCTA sind jedoch nur in der Lage entweder bevorzugt Löcher oder bevorzugt Elektronen zu transportieren. Beim Einsatz solcher unipolaren Materialien findet die Ladungsträgerrekombination und Bildung der Exzitonen meist nahe der Grenzfläche zur Ladungstransport-Schicht statt. Diese räumliche Beschränkung kann bei wachsender Helligkeit oder Stromdichte zu einer Effizienz-Abnahme der optoelektronischen Bauteile ("roll-off") führen. Durch die schmale Rekombinationszone trägt außerdem nur ein geringer Teil der Moleküle zum Ladungstransport, zur Exzitonbildung und schließlich zur Lichtemission bei, wodurch das Bauteil keine optimale Betriebsdauer erreichen kann. Dieses Problem kann durch den Einsatz von ambipolaren Hosts für OLEDs in der Emissionsschicht umgangen werden. Dabei werden zum einen Donor- und Akzeptormoleküle als Mischungen eingesetzt (K. Goushi, K. Yoshida, K. Sato, C. Adachi, Nat. Photonics 2012, 6, 253-258), welche die Effizienz der Bauteile vor allem bei hohen Stromdichten nachhaltig verbessern. Allerdings führen die benötigten hohen Konzentrationen des zusätzlichen Ladungstransportmaterials häufig zu Phasentrennungen und dadurch zu Verschlechterungen der Langzeitstabilitäten der optoelektronischen Bauteile. Geeigneter sind hier sogenannte ambipolare Materialien, bei denen beide Funktionalitäten von ein und demselben Molekül erfüllt werden.

[0006] Als lochtransportierende Einheiten (Donoren) der ambipolaren Moleküle werden vor allem Diarylamine oder Carbazol-Strukturen verwendet. Die hiermit hergestellten optoelektronischen Bauteile zeigen jedoch häufig Stabilitätsprobleme bzw. es ist eine geringe Langzeitstabilität festzustellen. Dies kann auf bekannte Degradationsmechanismen zurückgeführt werden, die auf der Abspaltung von Resten bei Diarylamin-Gruppen oder der Oligomerisierung/Knüpfung neuer Bindungen bei Verwendung von Carbazol-Gruppen beruhen. Die Eigenschaften der Bauteile werden durch diese Prozesse derart verändert, dass sich ihre Energieniveaus verschieben und es mittelfristig zu einer Zerstörung des Bauteils kommt. Durch Absättigung der reaktiven Positionen der lochtransportierenden Einheiten, z. B. durch tert-Butylgruppen, wurde versucht, dieses Problem zu umgehen (F. So, D. Kondakov, Adv. Mater. 2010, 22, 3762-3777). Allerdings hat dieses Vorgehen wiederum den Nachteil, dass sich zum einen Parameter wie die Ladungsträgermobilität negativ verändern, was zu Morphologie-Problemen, insbesondere Phasenseparation also z. B. dem Auskristallisieren der Hostmaterialien und/oder der darin enthaltenen Emitttermoleküle führen kann. Zum anderen können auch diese Schutzgruppen im Langzeitbetrieb der Bauteile abgespalten werden, was zu den eben beschriebenen Problemen führt.

[0007] Die Aufgabe der vorliegenden Erfindung besteht somit in der Bereitstellung neuer ambipolarer Hostmaterialien mit verbesserten Eigenschaften.

[0008] US 2012/0068170 A1 beschreibt Indenocarbazolderivate mit elektronen- und lochtransportierenden Eigen-

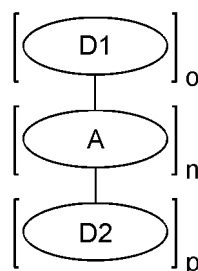
schaften. Verbindungen für elektronische Vorrichtungen sind aus der WO 2012/149999 A1 bekannt. DONGWOOK KIM et al. (JACS, Band 133, Nr. 44, Seiten 17895-17900) beschreibt das Design von ambipolaren Hostmaterialien für organische blaue Elektrophosphoreszenz. Die US 2014/0001443 A1 offenbart organische lichtemittierende Verbindungen und organische lichtemittierende Vorrichtungen enthaltend derartige Verbindungen. Aus der KR 2014/0020208 sind organische elektrolumineszente Verbindungen umfassend Acridinderivative bekannt. Die KR 2013/0142967 beschreibt heterocyclische Verbindungen und organische lichtemittierende Dioden mit derartigen Verbindungen. Ladungstransportmaterialien und organische elektrolumineszente Vorrichtungen werden in der US 2010/0171417 A1 beschrieben. Die KR 2013/0075949 A offenbart organische elektrolumineszente Verbindungen und organische elektrolumineszente Vorrichtungen mit derartigen Verbindungen.

Beschreibung

[0009] Es wurde überraschend gefunden, dass optoelektronische Bauelemente, die organische Moleküle gemäß nachstehender Formel 1 enthalten, deutliche Verbesserungen gegenüber dem Stand der Technik aufweisen, insbesondere beim Einsatz als Matrixmaterialien für lumineszierende Emmitter, aber auch bei Verwendung als Elektronentransportmaterial oder als Lochinjektionsmaterial oder als Lochblockiermaterial.

[0010] Die erfindungsgemäßen organischen Moleküle umfassen mindestens eine Akzeptoreinheit, also eine Einheit mit elektronenziehenden Eigenschaften, an die bis zu fünf, insbesondere bis zu vier, bevorzugt bis zu zwei Donoreinheiten, also Einheiten mit elektronenschiebenden Eigenschaften, kovalent gebunden sind. Bei den Donoreinheiten handelt es sich um sechs- oder fünfgliedrige Ringsysteme, wobei mindestens eine Donoreinheit sechsgliedrig sein muss. Je nach Akzeptoreinheit können an diese bis zu vier weitere Akzeptoreinheiten kovalent gebunden sein.

[0011] Die Erfindung stellt organische Moleküle der allgemeinen Formel 1 bereit,



Formel 1

mit

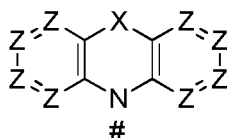
A = eine Akzeptorgruppe mit elektronenziehenden Eigenschaften unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe aus Pyridazin, Pyrimidin, Pyrazin, Triazin, Oxazol, Thiazol, Imidazol, Pyrazol, Isoxazol, Isothiazol, 1,2,3-Triazol, 1,2,4-Triazol, 1,2,4-Oxadiazol, 1,2,4-Thiadiazol, Tetrazol, 1,2,3,4-Oxatriazol, 1,2,3,4-Thiatriazol, P(=O)R¹, P(=S)R¹, P(=S)R², P(=Se)R¹, P(=Se)R², SO₂, Benzimidazol, Benzoxazol, Benzothiazol; wobei gilt

R¹ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden Wasserstoff, Halogen, Deuterium, Gruppen, die über Stickstoff (-NR₂²) oder Sauerstoff (-OR²) gebunden sind, Alkyl- (linear, verzweigt oder zyklisch), Heteroalkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkenyl-, Alkynyl-Gruppen oder substituierte Alkyl- (linear, verzweigt oder zyklisch), Heteroalkyl-, Aryl-, Heteroaryl- und Alkenyl-Gruppen mit Substituenten wie Halogene oder Deuterium, Alkylgruppen (linear, verzweigt oder zyklisch);

R² ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden Wasserstoff, Deuterium, Alkyl- (linear, verzweigt oder zyklisch), Aryl-, Heteroaryl-, Alkenyl-, Alkynyl-Gruppen oder substituierte Alkyl- (linear, verzweigt oder zyklisch), Heteroalkyl-, Aryl- und Alkenyl-Gruppen mit Substituenten wie Halogene oder Deuterium, Alkylgruppen (linear, verzweigt oder zyklisch);

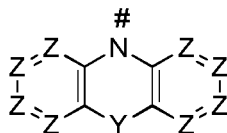
und

D1 = eine Donorgruppe mit elektronenschiebenden Eigenschaften, aufweisend eine Struktur der Formel 1a;



Formel 1a

D2 = eine Donorgruppe mit elektronenschiebenden Eigenschaften, aufweisend eine Struktur der Formel 1b;



Formel 1b

wobei für die verwendeten Symbole und Indizes gilt:

n ist 1;

o ist eine ganze Zahl zwischen 1 und 5;

p eine ganze Zahl zwischen 0 und 4;

wobei $o + p \leq 5$;

X ist gleich oder verschieden eine bivalente Brücke ausgewählt aus O, S, S=O, SO₂, Se, Se=O, SeO₂, C(R³)₂, C=NR³, C=C(R³)₂, Si(R³)₂, N(R³), P(R³), P(=O)R³ oder B(R³);

Y ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden eine kovalente Einfachbindung oder eine bivalente Brücke ausgewählt aus O, S, S=O, SO₂, Se, Se=O, SeO₂, C(R³)₂, C=NR³, C=C(R³)₂, Si(R³)₂, N(R³), P(R³), P(=O)R³ oder B(R³);

Z ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden CR² oder N;

R³ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, D, OR⁵, SR⁵ oder C(R⁵)₃;

R⁵ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden Wasserstoff, eine Alkylgruppe oder eine Arylgruppe;

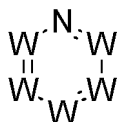
und wobei die Verknüpfung mit A jeweils an der mit # gekennzeichneten Stelle in Form einer Einfachbindung stattfindet.

[0012] Die Strukturen der ambipolaren organischen Moleküle gemäß Formel 1 weisen, im Vergleich zu offenen Diarylsystemen bzw. Carbazol-artigen Systemen bei denen zentrale Fünfringe verwendet werden, eine erhöhte chemische und elektrochemische Stabilität auf. So werden die beiden in Diarylaminen verwendeten Arylreste miteinander verknüpft und ihre Abspaltung wird verhindert. Im Vergleich zu Materialien, die ausschließlich fünfgliedrige Ringsysteme enthalten, wird die Anzahl der reaktiven Positionen verringert bzw. bei ausschließlicher Verwendung von sechsgliedrigen Ringsystemen sogar komplett eliminiert. Die elektrochemische Stabilität verbessert sich vor allem durch die veränderten elektronischen Zustände. Das HOMO (highest occupied molecule orbital) von ambipolaren Molekülen ist auf der Donor-einheit lokalisiert, während das LUMO (lowest unoccupied molecule orbital) sich auf der Akzeptoreinheit befindet. So sitzt das HOMO bei literaturbekannten Verbindungen meist auf dem Fünfring. Dadurch wird der Zerfall solcher Moleküle begünstigt. Bei Vorhandensein eines Sechsrings liegt das HOMO aufgrund der niedrigeren Energie von beispielsweise Phenoxazin und Phenothiazin gegenüber Carbazol eher auf diesem (Figur 2). Die erhöhte Stabilität konnte für die erfindungsgemäßen organischen Moleküle durch Cyclovoltammetrie-Experimente bestätigt werden (Figur 3). Der Zerfall wird unterdrückt. Durch das optionale Vorhandensein von fünfgliedrigen Einheiten in den erfindungsgemäßen organischen Molekülen können deren bekannte positive Eigenschaften, wie die gute Stapelung im amorphen Festkörper oder der gute Ladungstransport im Bauteil, weiterhin ausgenutzt werden.

[0013] Die erfindungsgemäßen organischen Moleküle gemäß Formel 1 weisen zudem eine hohe Triplett-Energie auf. Diese ist vor allem für die Kombination mit blauen Emittern vorteilhaft. Verursacht wird diese Eigenschaft durch die direkte Bindung von Donor- und Akzeptoreinheiten. Überraschend wurde dabei im Vergleich zu Molekülen des Stands der Technik eine signifikante Erhöhung der Triplet-Energie festgestellt. Bekannte Moleküle, bei denen die beiden Teile

durch Brückeneinheiten miteinander verbunden sind, weisen deutlich geringere Triplett-Energien auf. Die Triplett-Energie ist insbesondere im Vergleich zu bereits bekannten Molekülen, bei denen Donor und Akzeptor über Spacereinheiten wie beispielsweise Phenylreste miteinander verknüpft sind, signifikant höher, sodass eine Verwendung der erfindungsgemäßen Moleküle in Kombination mit blauen und tiefblauen Emittern sowie solchen Emittern anderer Leuchtfarbe, die eine hohe Triplettenergie erfordern (etwa grün-emittierende TADF-Emitter). Ein Vergleich des erfindungsgemäßen Anknüpfungsmusters mit dem Anknüpfungsmuster des Standes der Technik ist in Beispiel 11 angegeben.

[0014] In einer Ausführungsform weist in dem erfindungsgemäßen organischen Molekül der Formel 1 die Akzeptorgruppe A eine Struktur der Formel 2a auf und n ist gleich 1.

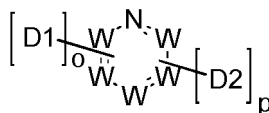


Formel 2a

mit

W ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden CR¹ oder N, wobei mindestens eine Gruppe W gleich N ist.

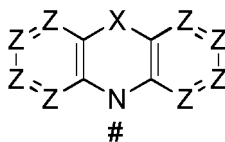
[0015] Somit weist das erfindungsgemäße organische Molekül in dieser Ausführungsform eine Struktur der Formel 2 auf.



Formel 2

mit

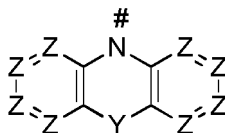
D1 = eine Donorgruppe mit elektronenschiebenden Eigenschaften, aufweisend eine Struktur der Formel 1a;



Formel 1a

und

D2 = eine Donorgruppe mit elektronenschiebenden Eigenschaften, aufweisend eine Struktur der Formel 1b;



Formel 1b

wobei mindestens zwei verschiedene Donorgruppen D1 und D2 verwendet werden und für die verwendeten Symbole und Indizes gilt:

o ist eine ganze Zahl zwischen 1 und 5;

p eine ganze Zahl zwischen 0 und 4;

wobei $o + p \leq 5$;

X ist gleich oder verschieden eine bivalente Brücke ausgewählt aus O, S, S=O, SO₂, Se, Se=O, SeO₂, C(R³)₂, C=NR³, C=C(R³)₂, Si(R³)₂, N(R³), P(R³), P(=O)R³ oder B(R³);

Y ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden eine kovalente Einfachbindung oder eine bivalente Brücke aus-

gewählt aus O, S, S=O, SO₂, Se, Se=O, SeO₂, C(R³)₂, C=NR³, C=C(R³)₂, Si(R³)₂, N(R³), P(R³), P(=O)R³ oder B(R³);
W ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden CR¹ oder N, wobei mindestens eine Gruppe W gleich N ist;
Z ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden CR² oder N;

R¹ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden Wasserstoff, Halogen, Deuterium, Gruppen, die über Stickstoff (-NR₂²) oder Sauerstoff- (-OR²) gebunden sind, Alkyl- (linear, verzweigt oder zyklisch), Heteroalkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkenyl-, Alkynyl-Gruppen oder substituierte Alkyl- (linear, verzweigt oder zyklisch), Heteroalkyl-, Aryl-, Heteroaryl- und Alkenyl-Gruppen mit Substituenten wie Halogene oder Deuterium, Alkylgruppen (linear, verzweigt oder zyklisch);

R² ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden Wasserstoff, Deuterium, Alkyl- (linear, verzweigt oder zyklisch), Heteroalkyl-, Aryl-, Alkenyl-, Alkynyl-Gruppen oder substituierte Alkyl- (linear, verzweigt oder zyklisch), Heteroalkyl-, Aryl- und Alkenyl-Gruppen mit Substituenten wie Halogene oder Deuterium, Alkylgruppen (linear, verzweigt oder zyklisch);

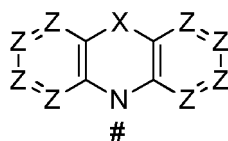
R³ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, D, OR⁵, SR⁵ oder C(R⁵)₃;

R⁵ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden Wasserstoff, eine Alkylgruppe oder eine Arylgruppe; und wobei die Verknüpfung mit der Akzeptorgruppe W₅N jeweils an der mit # gekennzeichneten Stelle in Form einer Einfachbindung stattfindet.

[0016] In einem weiteren Aspekt betrifft die Erfindung ein Verfahren zur Herstellung eines hierin beschriebenen organischen Moleküls. Dieses erfindungsgemäße Verfahren weist den Schritt des Durchführens einer Reaktion von einem Difluor-substituierten Derivat von A mit D1 oder von einem Difluor-substituierten Derivat von A mit D1 und D2 auf, mit

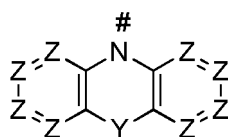
A = eine Akzeptorgruppe mit elektronenziehenden Eigenschaften, unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe aus Pyridazin, Pyrimidin, Pyrazin, Triazin, Oxazol, Thiazol, Imidazol, Pyrazol, Isoxazol, Isothiazol, 1,2,3-Triazol, 1,2,4-Triazol, 1,2,4-Oxadiazol, 1,2,4-Thiadiazol, Tetrazol, 1,2,3,4-Oxatriazol, 1,2,3,4-Thiatriazol, P(=O)R¹, P(=S)R¹, P(=S)R², P(=Se)R¹, P(=Se)R², SO₂, Benzimidazol, Benzoxazol, Benzothiazol;

D1 = eine Donorgruppe mit elektronenschiebenden Eigenschaften, aufweisend eine Struktur der Formel 1a;



Formel 1a

D2 = eine Donorgruppe mit elektronenschiebenden Eigenschaften, aufweisend eine Struktur der Formel 1b;



Formel 1b

wobei die Verknüpfung mit A jeweils an der mit # gekennzeichneten Stelle in Form einer Einfachbindung stattfindet;

und wobei die weiteren Symbole die oben angegebenen Bedeutungen haben.

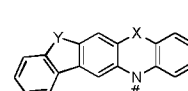
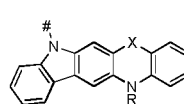
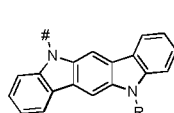
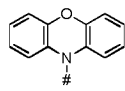
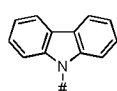
[0017] Hinsichtlich der Auswahl der Akzeptorgruppen eignen sich alle unten aufgeführten Beispiele. Um eine hinreichend große Ambipolarität zu gewährleisten wird Pyridin als Akzeptor-Gruppe explizit ausgeschlossen: Wie aus den DFT-Berechnungen in Beispiel 11 und Figur 7 deutlich wird, ist die Akzeptorstärke des Pyridin-Restes auch bei starken Donorgruppen wie Phenothiazin nicht stark genug um eine vollständige Lokalisierung des LUMOs auf der Akzeptorgruppe zu gewährleisten. Bei schwächeren Donoren wie Carbazol sind sogar erhebliche Teile des LUMOs auch auf der Donorgruppe lokalisiert.

[0018] Zur Identifikation von geeigneten Akzeptorgruppen lässt entweder auf bereits dem Fachmann bekannte Akzeptorgruppen wie sie in der unten stehenden Liste gezeigt sind zurück greifen oder aber für den Fall von N-Heteroaromaten auf die Brönstedt-Säurestärke der konjugierten Säuren H-[N-Heteroaromat]⁺ zurückgreifen. Eine geeignete

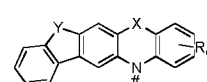
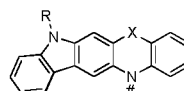
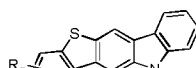
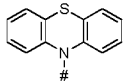
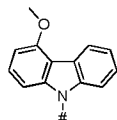
10

15

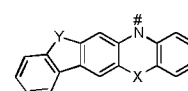
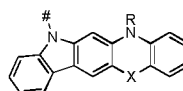
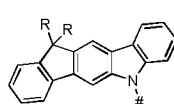
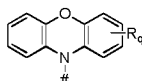
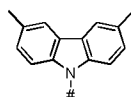
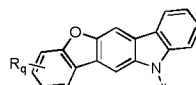
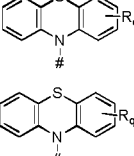
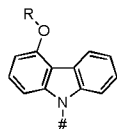
20


$$X = O, S, NR_1, C(R_1)(R_1)$$

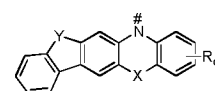
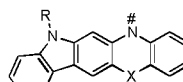
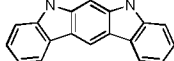
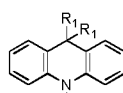
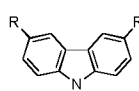
X = O, S, NR₁, C(R₁)(R₁)
Y = O, S, NR₁, C(R₁)(R₁)


$$X = O, S, NR_1, C(R_1)(R_1)$$

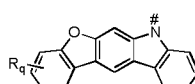
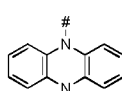
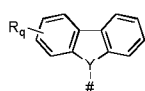
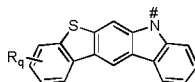
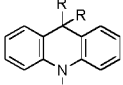
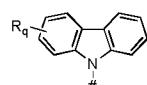
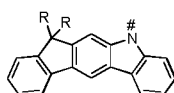
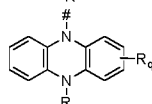
X = O, S, NR₁, C(R₁)(R₁)
Y = O, S, NR₁, C(R₁)(R₁)


$$X = O, S, NR_1, C(R_1)(R_1)$$

X = O, S, NR₁, C(R₁)(R₁)
Y = O, S, NR₁, C(R₁)(R₁)


$$X = O, S, NR_1, C(R_1)(R_1)$$

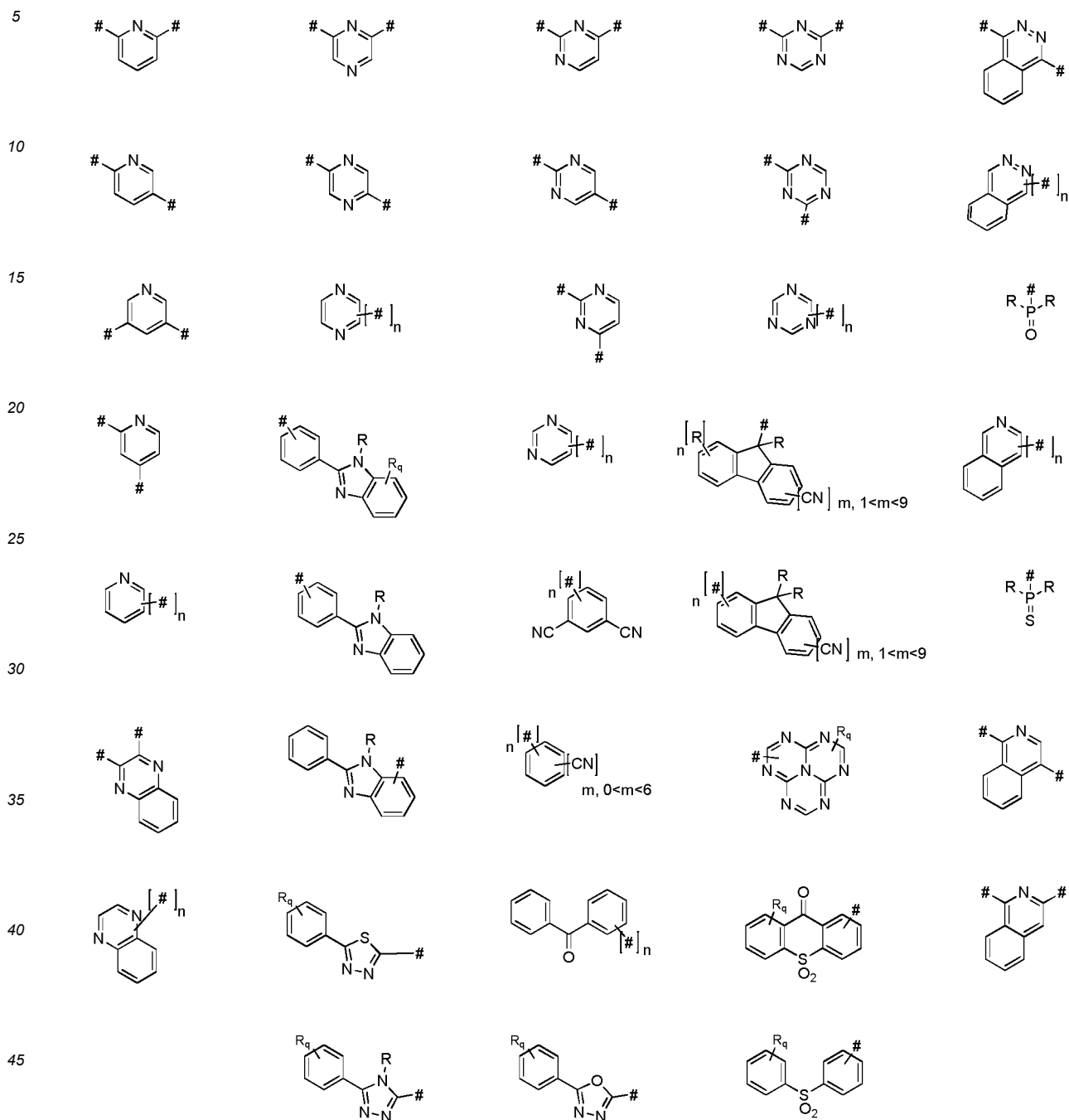
X = O, S, NR₁, C(R₁)(R₁)
Y = O, S, NR₁, C(R₁)(R₁)


$$Y = O, S, CR_2$$


55

7

substituierte Alkyl- (auch verzweigt oder zyklisch), Heteroalkyl-, Aryl-, Heteroaryl- und Alkenyl-Gruppen mit Substituenten wie Halogene oder Deuterium, Alkylgruppen (auch verzweigt oder zyklisch). Die Liste ist nicht erschöpfend gemeint und schließt keine Akzeptoren aus.

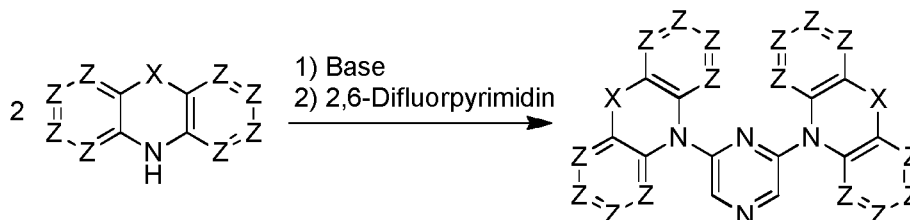


[0022] Die Reaktion wird insbesondere unter Zugabe einer starken Base durchgeführt. Zur Darstellung der Akzeptor-einheiten $P(=O)R_2$ oder $P(=O)R^1$ wird die Reaktion in einer weiteren Ausführungsform unter darauffolgender Zugabe eines Oxidationsmittels unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe aus Wasserstoffperoxid, Wasserstoffperoxid-Harnstoff-Addukt, Sauerstoff oder Ozon durchgeführt. Zur Darstellung der Akzeptoreinheiten $P(=S)R_2$, $P(=S)R^1$, $P(=Se)R_2$ oder $P(=Se)R^1$ erfolgt zudem die weitere Umsetzung mit Schwefel oder Lawessons Reagenz bzw. mit Selen.

Beispielhaft lassen sich folgende zwei allgemeine Syntheserouten formulieren:

Variante 1:

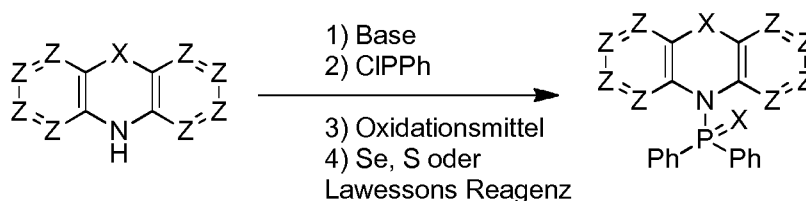
[0023]



[0024] Dieses Verfahren kommt so oder in vergleichbarer Art zum Einsatz, wenn Triazin, Pyrimidin, Benzimidazol, 1,2,4-oxadiazol, 1,2,4-triazol, oder 1,2,3-Triazol als Akzeptoreinheit A gewählt werden. Dem Fachmann ist hierbei bekannt, welche Substituenten an der Akzeptoreinheit jeweils zur Umsetzung mit der Donoreinheit geeignet sind.

Variante 2:

[0025]



[0026] Dieses Verfahren kommt bis zu Schritt 3) zum Einsatz, wenn $P(=O)R^4_2$ oder $P(=O)R^4$ als Akzeptoreinheit A gewählt werden. Im Falle von $P(=S)R^4_2$, $P(=S)R^4$ bzw. $P(=Se)R^4_2$, $P(=Se)R^4$ werden alle vier Schritte durchgeführt. Dem Fachmann ist hierbei bekannt, welche Substituenten an der Akzeptoreinheit jeweils zur Umsetzung mit der Donoreinheit geeignet sind.

[0027] Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ist die Verwendung eines organischen Moleküls der hierin beschriebenen Art in einer emittierenden Schicht als Matrixmaterial (Hostmaterial) für lumineszierende Emitter und/oder als Elektronentransportmaterial und/oder als Lochinjektionsmaterial und/oder als Lochblockiermaterial in einem optoelektronischen Bauelement.

[0028] In einer Ausführungsform der Erfindung wird das organische Molekül der hierin beschriebenen Art in einer emittierenden Schicht eines optoelektronischen Bauelementes, insbesondere in Mischung mit mindestens einer weiteren Verbindung verwendet. Hierbei ist das organische Molekül der hierin beschriebenen Art in der Mischung insbesondere das Matrixmaterial.

[0029] In einer Ausführungsform der Erfindung wird ein organisches Molekül der hierin beschriebenen Art entsprechend als Matrixmaterial für lumineszierende Emitter in einem optoelektronischen Bauelement eingesetzt.

[0030] Ein optoelektronisches Bauelement gemäß der vorliegenden Erfindung ist insbesondere ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus:

- Organischen Licht-emittierenden Bauteilen (OLEDs),
- Licht-emittierenden elektrochemischen Zellen,
- OLED-Sensoren, insbesondere in nicht hermetisch nach außen abgeschirmten Gas- und Dampf-Sensoren,
- organischen Solarzellen,
- Organischen Feldeffekttransistoren,
- Organischen Lasern und
- Down-Konversions-Elementen.

[0031] Ein weiterer Erfindungsaspekt betrifft Mischungen, enthaltend mindestens ein organisches Molekül der hierin beschriebenen Art und mindestens einen lumineszierenden Emitter.

[0032] In einem weiteren Aspekt betrifft die Erfindung Formulierungen enthaltend mindestens ein organisches Molekül der hierin beschriebenen Art oder eine hier beschriebene Mischung und mindestens ein Lösemittel.

[0033] In einer Ausführungsform beträgt der Anteil des organischen Materials als Matrixmaterial in optischen lichtemittierenden Bauelementen, insbesondere in OLEDs, zwischen 50 % und 99 %.

[0034] In einem weiteren Aspekt betrifft die Erfindung ein optoelektronisches Bauelement aufweisend ein organisches Molekül der hierin beschriebenen Art. Hierbei enthält ein erfindungsgemäßes optoelektronisches Bauelement mindestens eine Schicht zwischen Anode und Kathode, die ein organisches Molekül der hierin beschriebenen Art beispielsweise als Matrixmaterial (Hostmaterial) für lumineszierende Emitter und/oder als Elektronentransportmaterial und/oder als Lochinjektionsmaterial und/oder als Lochblockiermaterial enthält. Hierbei kann das optoelektronische Bauelement ausgewählt sein aus der Gruppe bestehend aus organischem lichtemittierendem Bauelement, organischer Diode, organischer Solarzelle, organischem Transistor, organischer Licht-emittierender Diode, Licht-emittierender elektrochemischer Zelle, organischem Feldeffekttransistor und organischem Laser.

[0035] In einem weiteren Aspekt betrifft die Erfindung ein Verfahren zur Herstellung eines optoelektronischen Bauelements, wobei ein organisches Molekül der hierin beschriebenen Art verwendet wird.

[0036] Teil eines derartigen Verfahrens kann das Aufbringen eines erfindungsgemäßen organischen Moleküls auf einen Träger sein. Das Aufbringen kann optional durch Verdampfung im Vakuum oder nass-chemisch erfolgen.

[0037] Die hierfür gängigen Verfahren sind dem Fachmann bekannt und können von ihm ohne Probleme auf optoelektronische Bauelemente enthaltend ein organisches Molekül der hierin beschriebenen Art angewandt werden.

[0038] Die erfindungsgemäßen organischen Moleküle weisen bei Verwendung in optoelektronischen Bauteilen folgende überraschende Vorteile gegenüber dem Stand der Technik auf:

- a. Die Ladungsträgermobilität im Bauteil wird verbessert im Vergleich zu Systemen gemäß dem Stand der Technik.
- b. Die Effizienz der Bauteile ist höher im Vergleich zu Systemen gemäß dem Stand der Technik.
- c. Die Stabilität der Bauteile ist höher im Vergleich zu Systemen gemäß dem Stand der Technik.
- d. Die Lebensdauer der Bauteile ist höher im Vergleich zu Systemen gemäß dem Stand der Technik.

[0039] In der Beschreibung und in den Beispielen wird hier in erster Linie auf die Verwendung der erfindungsgemäßen organischen Moleküle in OLEDs und den entsprechenden Displays und Beleuchtungselementen verwiesen. Trotzdem ist es dem Fachmann möglich, die organischen Moleküle der hierin beschriebenen Art auch für weitere Verwendungen in anderen optoelektronischen Bauelementen einzusetzen.

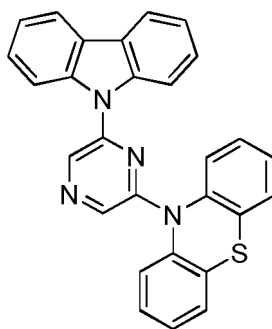
[0040] Durch die nachfolgenden Beispiele wird die Erfindung näher erläutert, ohne sie dadurch einschränken zu wollen.

Beispiele

Beispiel 1:

2-carbazoyl-6-(1-phenothiazinyl)-pyrimidin)

[0041]

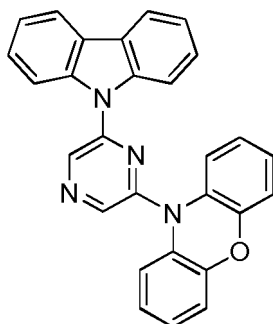


[0042] Das Cyclovoltammogramm ist in Figur 3 gezeigt.

Beispiel 2:

2-carbazoyl-6-(1-phenoxazinyl)-pyrimidin)

[0043]

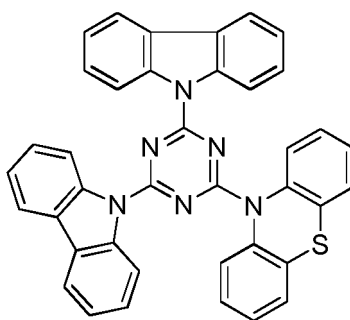


[0044] Das Cyclovoltammogramm ist in Figur 4 gezeigt.

Beispiel 3:

2,4-biscarbazoyl-6-(1-phenothiazinyl)-triazin)

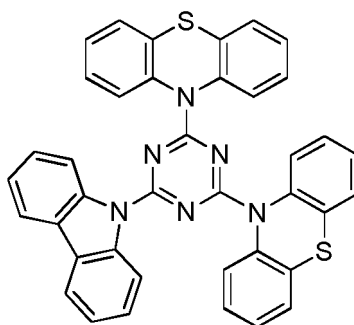
[0045]



Beispiel 4:

2-carbazoyl-4,6-bis-(1-phenothiazinyl)-triazin)

[0046]

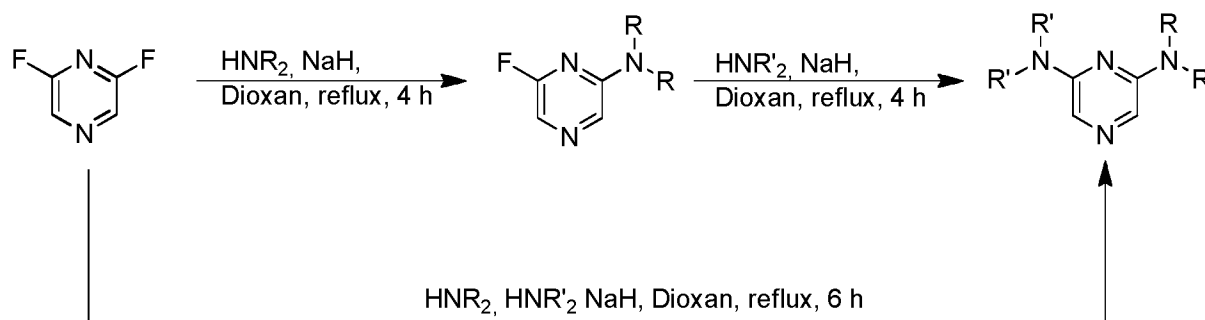


Beispiel 5:

Allgemeine Arbeitsvorschrift zur Synthese symmetrischer und unsymmetrischer 2,6-disubstituierter 1,4-Pyrazine

[0047]

Unsymmetrische Substitution: Stufenweise Substitution



Symmetrische oder unsymmetrische Substitution: per Eintopf-Substitution

Stufenweise Substitution: erster Substitutionsschritt:

[0048] Das Carbazolderivat (10 mmol, 1.00 Äquiv.) wird mit Natriumhydrid (60% mit Paraffin, 500 mg, 13 mmol, 1.3 Äquiv.) versetzt und unter Stickstoff portionsweise mit insgesamt 110 mL Dioxan gelöst. Die Zugabegeschwindigkeit wird dabei an die Wasserstoffbildung angepasst um ein Übersäumen zu vermeiden. Nach vollständiger Zugabe wurde die Reaktion für 15 min bei Raumtemperatur gerührt und anschließend für 15 min unter Rückfluss erhitzt. 2,6-Difluorpyrazin (1.15 g, 10 mmol, 1.00 Äquiv.) wird tropfenweise zur Reaktionsmischung zugegeben. Dabei schwächt sich die Fluoreszenz unter UV-Licht merklich ab. Die Reaktionsmischung wird bis zu vollständigem Umsatz der Edukte (Reaktionskontrolle per HPLC, GC-MS oder DC; typischerweise 4 h) am Rückfluss erhitzt. Nach Abkühlen auf Raumtemperatur wird überschüssige Base durch tropfenweise Zugabe von 10 mL Wasser unter Stickstoff gequencht. Die Reaktionsmischung wurde in 200 mL gesättigte Natriumchloridlösung gegeben und das Rohprodukt durch Absaugen abgetrennt und mit Wasser (300 mL) sowie Methanol (60 mL) gewaschen. Der so erhaltene Feststoff wurde mit 200 mL heißem Toluol digeriert und der unlösliche Rückstand verworfen. Das Lösungsmittel wurde unter vermindertem Druck entfernt und das Produkt wurde mit Pentan (300 mL) und Diethylether (200 mL) gewaschen und am Vakuum getrocknet. Das Produkt wurde als beigefarbener Feststoff isoliert und in der Regel ohne weitere Aufreinigung weiter umgesetzt. Analysenreines Produkt konnte durch Vakuumsublimation bei 250 °C, 0.002 mbar beziehungsweise durch MPLC-Aufreinigung (Laufmittelgradient Cyclohexan - Dichlormethan) erhalten werden.

Stufenweise Substitution: zweiter Substitutionsschritt:

[0049] Die Synthese, die Substitution mit 1H-Phenothiazin erfolgte analog zum ersten Schritt. Die Aufreinigung erfolgte mittels MPLC (Laufmittelgradient Cyclohexan - Dichlormethan).

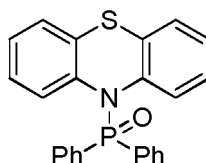
Eintopf-Synthese:

[0050] Eine 1:1 Mischung der beiden Verbindungen NHR_2 und NHR'_2 (20 mmol, 2.00 Äquiv.) wird mit Natriumhydrid (60% mit Paraffin, 1.00g, 26 mmol, 2.6 Äquiv.) versetzt und unter Stickstoff portionsweise mit insgesamt 250 mL Dioxan gelöst. Die Zugabegeschwindigkeit wird dabei an die Wasserstoffbildung angepasst um ein Übersäumen zu vermeiden. Nach vollständiger Zugabe wurde die Reaktion für 15 min bei r. t. gerührt und anschließend für 15 min unter Rückfluss erhitzt. 2,6-Difluorpyrazin (1.15 g, 10 mmol, 1.00 Äquiv.) wird tropfenweise zur Reaktionsmischung zugegeben. Dabei schwächt sich die Fluoreszenz unter UV-Licht merklich ab. Die Reaktionsmischung wird bis zu vollständigem Umsatz der Edukte (Reaktionskontrolle per HPLC, GC-MS oder DC; typischerweise 6 h) am Rückfluss erhitzt. Nach Abkühlen auf Raumtemperatur wird überschüssige Base durch tropfenweise Zugabe von 10 mL Wasser unter Stickstoff gequencht. Die Reaktionsmischung wurde in 200 mL gesättigte Natriumchloridlösung gegeben und das Rohprodukt durch Absaugen abgetrennt und mit Wasser (300 mL) sowie Methanol (60 mL) gewaschen. Der so erhaltene Feststoff wurde mit 200 mL heißem Toluol digeriert und der unlösliche Rückstand verworfen. Das Lösungsmittel wurde unter vermindertem Druck

entfernt und das Produkt wurde mit Pentan (300 mL) und Diethylether (200 mL) gewaschen und am Vakuum getrocknet. Zur Aufreinigung wurde das Produkt durch mehrfache Umkristallisation bzw. in Einzelfällen durch Vakuumsublimation aufgereinigt.

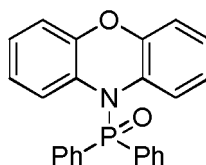
Beispiel 6: N-Phenothiazinenyl-diphenyl-phosphinoxid (nicht erfindungsgemäß)

[0051]



Beispiel 7: N-Phenoxazinenyl-diphenyl-phosphinoxid (nicht erfindungsgemäß)

[0052]



Beispiel 8: Quantenmechanische Berechnungen

[0053] Zur Bestimmung der HOMO-/LUMO-Lagen wurden Dichtefunktionaltheorie-Rechnungen (DFT) unter Einsatz des BP86-Funktional und der "resolution-of-identity"-Näherung sowie des def2-SV(P)-Basissatzes durchgeführt. Für die numerische Integration wurde das m4 grid verwendet.

Beispiel 9: Cyclovoltammetrie

[0054] Cyclovoltammogramme von 10^{-3} molaren Lösungen der organischen Moleküle in Dichlormethan und Tetrabutylammoniumhexafluorophosphat (0.1 mol/l) als Leitelektrolyt wurden aufgenommen mit Hilfe eines Model 600D Series Electrochemical Analyzer mit Workstation (CH Instruments) bei einer Scanrate von 100 mV s^{-1} . Die Messungen wurden durchgeführt bei Raumtemperatur, unter Argon-Atmosphäre mit einer Dreielektroden-Anordnung (Arbeits- und Gegenelektrode: Pt-Wire. Referenzelektrode: Ag/AgCl) und kalibriert gegen $\text{FeCp}_2/\text{FeCp}_2^+$ als internem Standard. HOMO- und LUMO-Daten wurden korrigiert mittels Ferrocen als internem Standard gegen SCE und nach folgenden Formeln berechnet (B. D'Andrade et al., Organic Electronics 2005, 6, 11.):

$$E_{\text{CV-HOMO}} = -(1.4 * 0.978 * (\text{Ox/V} - \text{Ferrocen/V}) + 4.6) \text{ eV}$$

$$E_{\text{CV-LUMO}} = -(1.19 * (\text{Red/V} - \text{Ferrocen/V}) + 4.78) \text{ eV}$$

Beispiel 10: Kristallstruktur von 2,6-Bis-N-phenothiazinyl-pyridin

[0055] Wie aus der in Figur 6 dargestellten Kristallstruktur hervorgeht, sind durch die direkte Anknüpfung die Donoreinheit Phenothiazin und der Pyridinrest gegeneinander verdreht. Diese Verdrehung mündet in eine hohe Triplett-Energie, insbesondere im Vergleich mit Molekülen, bei denen die Verdrehung schwächer ausgeprägt ist bzw. Spacer zwischen Donor und Pyridin (oder einem anderen, geeigneten Akzeptor wie Pyrimidin oder Triazin oder anderen) verwendet werden.

Beispiel 11: Bestimmung der Triplett-Energie einiger erfindungsgemäßer Moleküle sowie Vergleich mit der Triplett-Energie von Molekülen des Stands der Technik

[0056] Für die Berechnung der Host-Moleküle wurde Dichtefunktionaltheorie (DFT) unter Verwendung des BP86-Funktionals (Becke, A. D. Phys. Rev. A1988, 38, 3098-3100; Perdew, J. P. Phys. Rev. B1986, 33, 8822-8827) und des def2-SV(P)-Basissatzes (Weigend, F.; Ahlrichs, R. Phys. Chem. Chem. Phys. 2005, 7, 3297-3305; Rappoport, D.; Furche, F. J. Chem. Phys. 2010, 133, 134105/1-134105/11) verwendet. Zur numerischen Integration kam das m4-Grid zum Einsatz und die resolution-of-identity-Näherung (RI) wurde in allen Rechnungen verwendet. (Häser, M.; Ahlrichs, R. J. Comput. Chem. 1989, 10, 104-111; Weigend, F.; Häser, M. Theor. Chem. Acc. 1997, 97, 331-340; Sierka, M.; Hoge Kamp, A.; Ahlrichs, R. J. Chem. Phys. 2003, 118, 9136-9148) Die Grenzorbitale in diesem Beispiel wurden für die optimierten Grundzustandsgeometrien berechnet. Alle DFT-Rechnungen wurden mit dem Turbomole-Programmpaket (Version 6.5) durchgeführt. (TURBOMOLE V6.5 2013, a development of University of Karlsruhe and Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 1989-2007, TURBOMOLE GmbH, since 2007; available from <http://www.turbomole.com>)

[0057] Die DFT-Ergebnisse sind in Figur 7 zusammengefasst.

[0058] Wie im vorangehenden Beispiel anhand von Röntgenkristallografieergebnissen gezeigt wurde, ergibt sich durch das erfindungsgemäße direkte Verknüpfen der Erfindungsgemäßen sechsgliedrigen Donoreinheiten mit Akzeptoren wie Pyrimidin und Triazin aufgrund von sterischer Abstoßung eine relative Verdrillung dieser Einheiten. Dies verringert den Überlapp der Grenzorbitale HOMO und LUMO und sorgt für die gegenüber dem Stand der Technik vorteilhafte Erhöhung der Triplett-Energie.

Der Vergleich der Moleküle Molekül-DFT-1 und -2 aus diesem Beispiel zeigt den Vorteil der erfindungsgemäßen Verknüpfung auf: 2 unterscheidet sich von 1 durch kurzkettige, gespannte Alkylketten, mit denen Donor und Akzeptor verknüpft sind und teilweise in Konjugation gezwungen werden. Dies äußert sich in einer unvorteilhaften Delokalisierung der Grenzorbitale über Donor und Pyridinrest und mündet in einer Erniedrigung der relevanten adiabatischen Triplett-Energie.

[0059] Die Moleküle Molekül-DFT-3 und -4 sind nicht erfindungsgemäß, sondern entsprechen dem Stand der Technik. Der Unterschied zu den erfindungsgemäßen Molekülen Molekül-DFT-5 und -6 besteht in einer zusätzlichen Spacereinheit. Dadurch sind für -3 und -4 jeweils auch Anteile des HOMOs auf dem Spacer, hier einer Phenyl-Gruppe, lokalisiert. In der Folge ergeben sich relativ niedrige adiabatische Triplett-Energien von 2.00 und 2.07 eV. Wird statt dessen wie durch diese Erfindung gelehrt ein erfindungsgemäßer Donor direkt an einen erfindungsgemäßen Akzeptor wie Triazin angeknüpft, so steigt im Vergleich dazu die adiabatische Triplett-Energie signifikant auf Werte von 2.64 bzw. 2.58 eV an. Damit ergibt sich für diesen Fall durch die Verwendung der erfindungsgemäßen Verknüpfung eine wünschenswerte Erhöhung der Triplett-Energie um 24 % gegenüber dem Stand der Technik.

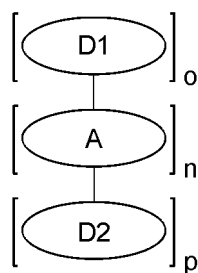
Figuren

[0060]

- Figur 1 Schematischer Aufbau einer OLED (Die Vorrichtung umfasst mindestens eine Anode, eine Kathode und eine Emitterschicht.).
- Figur 2 Berechnete Grenzorbitale des Grundzustands von Beispiel 2.
- Figur 3 Cyclovoltammogramm von Beispiel 1.
- Figur 4 Cyclovoltammogramm von Beispiel 2.
- Figur 5 Anregungs- und Emissionsspektrum eines Filmes von Beispiel 3 (pur gelöst in Toluol) (Anregung bei 320 nm).
- Figur 6 Kristallstruktur von 2,6-Bis-N-phenothiazinyl-pyridin.
- Figur 7 DFT Ergebnisse für die Moleküle DFT-1 bis DFT-6.

Patentansprüche

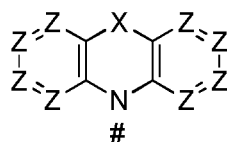
1. Organisches Molekül, aufweisend eine Struktur der Formel 1:



Formel 1

mit

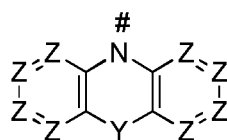
A = eine Akzeptorgruppe mit elektronenziehenden Eigenschaften, unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe aus Pyridazin, Pyrimidin, Pyrazin, Triazin, Oxazol, Thiazol, Imidazol, Pyrazol, Isoxazol, Isothiazol, 1,2,3-Triazol, 1,2,4-Triazol, 1,2,4-Oxadiazol, 1,2,4-Thiadiazol, Tetrazol, 1,2,3,4-Oxatriazol, 1,2,3,4-Thiatriazol, P(=O)R¹, P(=S)R¹₂, P(=S)R¹, P(=Se)R¹₂, P(=Se)R¹, SO₂, Benzimidazol, Benzoxazol, Benzothiazol; D1 = eine Gruppe aufweisend eine Struktur der Formel 1a;



Formel 1a

und

D2 = eine Gruppe aufweisend eine Struktur der Formel 1b;



Formel 1b

wobei für die verwendeten Symbole und Indizes gilt:

n ist gleich 1;

o ist eine ganze Zahl zwischen 1 und 5;

p eine ganze Zahl zwischen 0 und 4;

wobei o + p ≤ 5;

X ist gleich oder verschieden eine bivalente Brücke ausgewählt aus O, S, S=O, SO₂, Se, Se=O, SeO₂, C(R³)₂, C=NR³, C=C(R³)₂, Si(R³)₂, N(R³), P(R³), P(=O)R³ oder B(R³);

Y ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden eine kovalente Einfachbindung oder eine bivalente Brücke ausgewählt aus O, S, S=O, SO₂, Se, Se=O, SeO₂, C(R³)₂, C=NR³, C=C(R³)₂, Si(R³)₂, N(R³), P(R³), P(=O)R³ oder B(R³);

Z ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden CR² oder N;

R¹ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden Wasserstoff, Halogen, Deuterium, Gruppen, die über Stickstoff (-NR₂²) oder Sauerstoff (-OR₂²) gebunden sind, Alkyl-(linear, verzweigt oder zyklisch), Heteroalkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkenyl-, Alkynyl-Gruppen oder substituierte Alkyl- (linear, verzweigt oder zyklisch), Heteroalkyl-, Aryl-, Heteroaryl- und Alkenyl-Gruppen mit Substituenten wie Halogene oder Deuterium, Alkylgruppen (linear, verzweigt oder zyklisch);

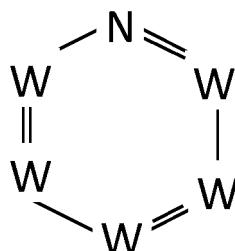
R^2 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden Wasserstoff, Deuterium, Alkyl- (linear, verzweigt oder zyklisch), Heteroalkyl-, Aryl-, Alkenyl-, Alkynyl-Gruppen oder substituierte Alkyl- (linear, verzweigt oder zyklisch), Heteroalkyl-, Aryl- und Alkenyl-Gruppen mit Substituenten wie Halogene oder Deuterium, Alkylgruppen (linear, verzweigt oder zyklisch);

R^3 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H, D, OR^5 , SR^5 oder $C(R^5)_3$;

R^5 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden Wasserstoff, eine Alkylgruppe oder eine Arylgruppe;

und wobei die Verknüpfung mit A jeweils an der mit # gekennzeichneten Stelle in Form einer Einfachbindung stattfindet.

2. Organisches Molekül nach Anspruch 1, wobei A eine Struktur der Formel 2a aufweist und n gleich 1 ist:



Formel 2a

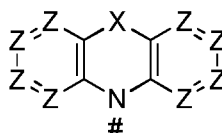
wobei W bei jedem Auftreten gleich oder verschieden CR^1 oder N ist und mindestens eine Gruppe W gleich N ist.

3. Verfahren zur Herstellung eines organischen Moleküls nach Anspruch 1 oder 2, aufweisend den folgenden Schritt:

Durchführen einer Reaktion von einem Difluor-substituierten Derivat von A mit D1 oder von A mit D1 und D2, wobei

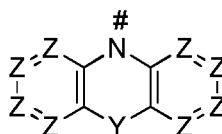
A = unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe aus Pyridazin, Pyrimidin, Pyrazin, Triazin, Oxazol, Thiazol, Imidazol, Pyrazol, Isoxazol, Isothiazol, 1,2,3-Triazol, 1,2,4-Triazol, 1,2,4-Oxadiazol, 1,2,4-Thiadiazol, Tetrazol, 1,2,3,4-Oxatriazol, 1,2,3,4-Thiatrizol, $P(=O)R^1$, $P(=S)R^1_2$, $P(=S)R^1$, $P(=Se)R^1_2$, $P(=Se)R^1$, SO_2 , Benzimidazol, Benzoxazol, Benzothiazol;

D1 = eine Donorgruppe mit elektronenschiebenden Eigenschaften, aufweisend eine Struktur der Formel 1a;



Formel 1a

D2 = eine Donorgruppe mit elektronenschiebenden Eigenschaften, aufweisend eine Struktur der Formel 1b;



Formel 1b

wobei die Verknüpfung mit A jeweils an der mit # gekennzeichneten Stelle in Form einer Einfachbindung stattfindet;

und wobei die weiteren Symbole die in Anspruch 1 bis 2 angegebenen Bedeutungen haben.

4. Verfahren nach Anspruch 3, wobei die Reaktion unter Zugabe einer Base durchgeführt wird.

5. Verfahren nach Anspruch 3 oder 4, weiterhin aufweisend den Schritt der Zugabe eines Oxidationsmittels unabhängig voneinander ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Wasserstoffperoxid, Wasserstoffperoxid-Harnstoff-Addukt, Sauerstoff oder Ozon und optional weiterhin aufweisend den weiteren Schritt der Zugabe von Selen oder Schwefel oder Lawessons Reagenz.

6. Mischung, enthaltend mindestens ein organisches Molekül nach Anspruch 1 oder 2 und mindestens einen lumineszierenden Emitter.

7. Formulierung, enthaltend mindestens ein organisches Molekül nach Anspruch 1 oder 2 oder eine Mischung nach Anspruch 6 und mindestens ein Lösemittel.

8. Verwendung eines organischen Moleküls nach Anspruch 1 oder 2 als Hostmaterial insbesondere für lumineszierende Emitter und/oder als Elektronentransportmaterial und/oder als Lochinjektionsmaterial und/oder als Lochblockiermaterial in einem optoelektronischen Bauelement, das durch ein Vakuumverdampfungsverfahren oder aus Lösung hergestellt wird.

9. Verwendung nach Anspruch 8, wobei das optoelektronische Bauelement ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus:

- Organischen lichtemittierenden Bauteilen (OLEDs),
- Licht-emittierenden elektrochemischen Zellen,
- OLED-Sensoren, insbesondere in nicht hermetisch nach außen abgeschirmten Gas- und Dampf-Sensoren,
- organischen Solarzellen,
- Organischen Feldeffekttransistoren,
- Organischen Lasern und
- Down-Konversions-Elementen.

10. Verwendung nach Anspruch 8 oder 9, wobei es sich bei dem optoelektronischen Bauelement um ein organisches lichtemittierendes Bauelement handelt und das organische Molekül in einer emittierenden Schicht, insbesondere als Matrixmaterial, insbesondere für lumineszierende Emitter und/oder als Elektronentransportmaterial und/oder als Lochinjektionsmaterial und/oder als Lochblockiermaterial eingesetzt wird.

11. Optoelektronisches Bauelement, aufweisend ein organisches Molekül nach Anspruch 1 oder 2.

12. Optoelektronisches Bauelement nach Anspruch 11, ausgeformt als ein Bauelement ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus organischem lichtemittierendem Bauelement, organischer Diode, organischer Solarzelle, organischem Transistor, organischer lichtemittierender Diode, Licht-emittierender elektrochemischer Zelle, organischem Feldeffekttransistor und organischem Laser.

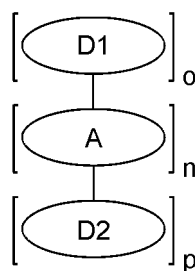
13. Verfahren zur Herstellung eines optoelektronischen Bauelements, wobei ein organisches Molekül nach Anspruch 1 oder 2 verwendet wird.

14. Verfahren nach Anspruch 13, **dadurch gekennzeichnet, dass** mindestens eine Schicht beschichtet wird

- mit einem Sublimationsverfahren,
- mit einem OVPD (Organic Vapour Phase Deposition) Verfahren,
- mit Hilfe einer Trägergassublimation,
- aus einer Lösung oder
- mit einem Druckverfahren.

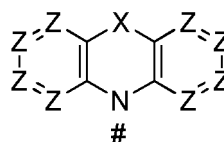
Claims

1. Organic molecule comprising a structure of formula 1:

**Formula 1**

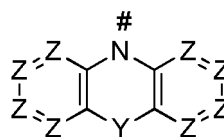
where

A = an acceptor group having electron-withdrawing properties, selected independently from the group of pyridazine, pyrimidine, pyrazine, triazine, oxazole, thiazole, imidazole, pyrazole, isoxazole, isothiazole, 1,2,3-triazole, 1,2,4-triazole, 1,2,4-oxadiazole, 1,2,4-thiadiazole, tetrazole, 1,2,3,4-oxatriazole, 1,2,3,4-thiatriazole, P(=O)R¹, P(=S)R¹, P(=S)R¹, P(=Se)R¹, P(=Se)R¹, SO₂, benzimidazole, benzoxazole, benzothiazole;
D1 = a group comprising a structure of the formula 1a;

**Formula 1a**

and

D2 = a group comprising a structure of the formula 1b;

**Formula 1b**

where the symbols and indices used are as follows:

n is 1

o is an integer from 1 to 5;

p is an integer from 0 to 4;

where $o + p \leq 5$;

X is the same or different a bivalent bridge selected from O, S, S=O, SO₂, Se, Se=O, SeO₂, C(R³)₂, C=NR³, C=C(R³)₂, Si(R³)₂, N(R³), P(R³), P(=O)R³ and B(R³);

Y is the same or different at each instance and is a covalent single bond or a bivalent bridge selected from O, S, S=O, SO₂, Se, Se=O, SeO₂, C(R³)₂, C=NR³, C=C(R³)₂, Si(R³)₂, N(R³), P(R³), P(=O)R³ and B(R³);
Z is the same or different at each instance and is CR² or N;

R¹ is the same or different at each instance and is hydrogen, halogen, deuterium, groups bonded via nitrogen (-NR₂²) or oxygen (-OR²), alkyl groups (linear, branched or cyclic), heteroalkyl groups, aryl groups, heteroaryl groups, alkenyl groups, alkynyl groups or substituted alkyl groups (linear, branched or cyclic), heteroalkyl groups, aryl groups, heteroaryl groups and alkenyl groups having substituents such as halogens or deuterium, alkyl groups (linear, branched or cyclic);

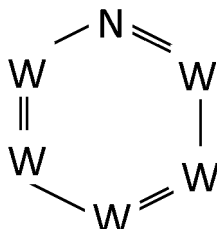
R² is the same or different at each instance and is hydrogen, deuterium, alkyl groups (linear, branched or

cyclic), heteroalkyl groups, aryl groups, heteroaryl groups, alkenyl groups, alkynyl groups or substituted alkyl groups (linear, branched or cyclic), heteroalkyl groups, aryl groups, heteroaryl groups and alkenyl groups having substituents such as halogens or deuterium, alkyl groups (linear, branched or cyclic);
 R^3 is the same or different at each instance and is H, D, OR^5 , SR^5 or $C(R^5)_3$;

R^5 is the same or different at each instance and is hydrogen, an alkyl group or an aryl group;

and where the bond to A in each case takes the form of a single bond at the point indicated by #.

2. Organic molecule according to claim 1, where A comprises a structure of the formula 2a and n is 1:



Formula 2a

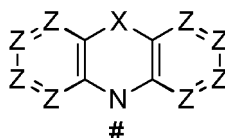
where W is the same or different at each instance and is CR^1 or N and at least one group W is N.

3. Method for preparing an organic molecule according to claim 1 or 2, comprising the following step:

conducting a reaction of a difluoro-substituted derivative of A with D1 or of A with D1 and D2, where

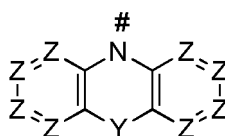
A = independently selected from the group of pyridazine, pyrimidine, pyrazine, triazine, oxazole, thiazole, imidazole, pyrazole, isoxazole, isothiazole, 1,2,3-triazole, 1,2,4-triazole, 1,2,4-oxadiazole, 1,2,4-thiadiazole, tetrazole, 1,2,3,4-oxatriazole, 1,2,3,4-thiatriazole, $P(=O)R^1$, $P(=S)R^1_2$, $P(=S)R^1$, $P(=Se)R^1_2$, $P(=Se)R^1$, SO_2 , benzimidazole, benzoxazole, benzothiazole;

D1 = a donor group having electron-donating properties, having a structure of the formula 1a;



Formula 1a

D2 = a donor group having electron-donating properties, comprising a structure of the formula 1b;



Formula 1b

where the bond to A in each case takes place at the point identified by # in the form of a single bond; and where the further symbols are each as defined in claims 1 and 2.

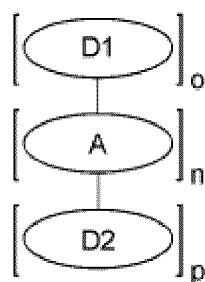
4. Method according to claim 3, wherein the reaction is conducted with addition of a base.
5. Method according to claim 3 or 4, additionally comprising the step of adding an oxidizing agent selected independently from the group consisting of hydrogen peroxide, hydrogen peroxide-urea adduct, oxygen and ozone, and optionally

additionally comprising the further step of adding selenium or sulphur or Lawesson's reagent.

6. Mixture comprising at least an organic molecule according to claims 1 to 2 and at least a luminescent emitter.
7. Formulation comprising at least an organic molecule according to claims 1 to 2 or a mixture according to claim 6 and at least a solvent.
8. Use of an organic molecule according to claim 1 or 2 as a host material, in particular for luminescent emitters, and/or as electron transport material and/or as hole injection material and/or as hole blocker material in an optoelectronic device which is produced by a vacuum evaporation method or from a solution.
9. Use according to claim 8, wherein the optoelectronic device is selected from the group consisting of:
 - organic light-emitting devices (OLEDs),
 - light-emitting electrochemical cells,
 - OLED sensors, in particular in gas and vapor sensors not hermetically shielded from the outside,
 - organic solar cells,
 - organic field-effect transistors,
 - organic lasers and
 - down-conversion elements.
10. Use according to claim 8 or 9, wherein the optoelectronic device is an organic light-emitting device, and the organic molecule is used in an emitting layer, in particular as matrix material, in particular for luminescent emitters, and/or as electron transport material and/or as hole injection material and/or as hole blocker material.
11. Optoelectronic device comprising an organic molecule according to claim 1 or 2.
12. Optoelectronic device according to claim 11, in the form of a device selected from the group consisting of organic light-emitting device, organic diode, organic solar cell, organic transistor, organic light-emitting diode, light-emitting electrochemical cell, organic field-effect transistor and organic laser.
13. Method for producing an optoelectronic device, wherein an organic molecule according to claims 1 to 2 is used.
14. Method according to claim 13, **characterized in that** at least one layer is coated
 - by a sublimation process,
 - by an OVPD (organic vapor phase deposition) process,
 - via a carrier gas sublimation,
 - from a solution, or
 - by a printing process.

Revendications

1. Molécule organique, présentant une structure de formule 1 :

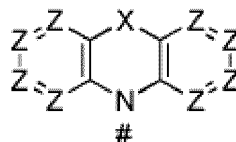


formule 1

avec

A = un groupe accepteur présentant des propriétés d'attracteur d'électrons, indépendamment choisi dans le groupe composé de pyridazine, pyrimidine, pyrazine, triazine, oxazole, thiazole, imidazole, pyrazole, isoxazole, isothiazole, 1,2,3-triazole, 1,2,4-triazole, 1,2,4-oxadiazole, 1,2,4-thiadiazole, tétrazole, 1,2,3,4-oxatriazole, 1,2,3,4-thiatriazole, P(=O)R¹, P(=S)R¹₂, P(=S)R¹, P(=Se)R¹₂, P(=Se)R¹, SO₂, benzimidazole, benzoxazole, benzothiazole ;

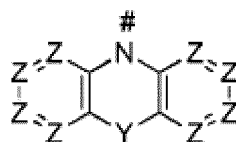
D1 = un groupe présentant une structure de formule 1a ;



formule 1a

et

D2 = un groupe présentant une structure de formule 1b ;



formule 1b

dans lesquelles, pour les symboles et indices utilisés, s'applique :

n est égal à 1 ;

o est un nombre entier entre 1 et 5 ;

p est un nombre entier entre 0 et 4 ;

avec o + p ≤ 5 ;

X est, identique ou différent, un pont divalent choisi parmi O, S, S=O, SO₂, Se, Se=O, SeO₂, C(R³)₂, C=NR³, C=C(R³)₂, Si(R³)₂, N(R³), P(R³), P(=O)R³ ou B(R³) ;

Y, identique ou différent en chaque occurrence, est une simple liaison covalente ou un pont divalent choisi parmi O, S, S=O, SO₂, Se, Se=O, SeO₂, C(R³)₂, C=NR³, C=C(R³)₂, Si(R³)₂, N(R³), P(R³), P(=O)R³ ou B(R³) ;

Z, identique ou différent en chaque occurrence, est CR² ou N ;

R¹, identique ou différent en chaque occurrence, est hydrogène, halogène, deutérium, des groupes, qui sont liés par un azote (-NR₂²) ou par un oxygène (-OR₂²), des groupes alkyle (linéaire, ramifié ou cyclique), hétéroalkyle, aryle, hétéroaryle, alcényle, alcynyle ou des groupes alkyle (linéaire, ramifié ou cyclique), hétéroalkyle, aryle et alcényle substitués comportant des substituants tels que des halogènes ou deutérium, des groupes alkyle (linéaire, ramifié ou cyclique) ;

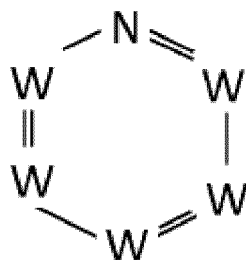
R², identique ou différent en chaque occurrence, est hydrogène, deutérium, des groupes alkyle (linéaire, ramifié ou cyclique), hétéroalkyle, aryle, alcényle, alcynyle ou des groupes alkyle (linéaire, ramifié ou cyclique), hétéroalkyle, aryle et alcényle substitués comportant des substituants tels que des halogènes ou deutérium, des groupes alkyle (linéaire, ramifié ou cyclique) ;

R³, identique ou différent en chaque occurrence, est H, D, OR⁵, SR⁵ ou C(R⁵)₃ ;

R⁵, identique ou différent en chaque occurrence, est hydrogène, un groupe alkyle ou un groupe aryle ;

et le lien avec A ayant lieu à chaque fois sous forme d'une simple liaison à la position indiquée par #.

2. Molécule organique selon la revendication 1, A présentant une structure de formule 2a et n étant égal à 1 :



formule 2a

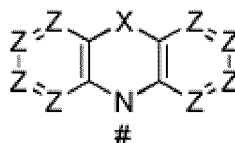
W, identique ou différent en chaque occurrence, étant CR¹ ou N et au moins un groupe W étant égal à N.

3. Procédé pour la préparation d'une molécule organique selon la revendication 1 ou 2, présentant l'étape suivante :

réalisation d'une réaction d'un dérivé de A substitué deux fois par fluor avec D1 ou de A avec D1 et D2,

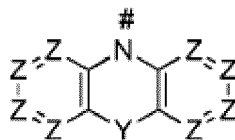
A = choisi indépendamment l'un de l'autre dans le groupe composé de pyridazine, pyrimidine, pyrazine, triazine, oxazole, thiazole, imidazole, pyrazole, isoxazole, isothiazole, 1,2,3-triazole, 1,2,4-triazole, 1,2,4-oxadiazole, 1,2,4-thiadiazole, tétrazole, 1,2,3,4-oxatriazole, 1,2,3,4-thiatriazole, P(=O)R¹, P(=S)R¹, P(=S)R¹, P(=Se)R¹, SO₂, benzimidazole, benzoxazole, benzothiazole ;

D1 = un groupe donneur comportant des propriétés de répulsion d'électrons présentant une structure de formule 1a ;



formule 1a

D2 = un groupe donneur comportant des propriétés de répulsion d'électrons présentant une structure de formule 1b ;



formule 1b

le lien avec A ayant lieu à chaque fois sous forme d'une simple liaison à la position indiquée par # ;
et les autres symboles possédant les significations indiquées dans les revendications 1 et 2.

4. Procédé selon la revendication 3, la réaction étant réalisée avec ajout d'une base.

5. Procédé selon la revendication 3 ou 4, présentant en outre l'étape d'ajout d'un oxydant choisi indépendamment l'un de l'autre dans le groupe constitué par le peroxyde d'hydrogène, l'adduit peroxyde d'hydrogène-urée, l'oxygène ou l'ozone et éventuellement en outre présentant l'étape supplémentaire d'ajout de sélénium ou de soufre ou du réactif de Lawesson.

6. Mélange, contenant au moins une molécule organique selon la revendication 1 ou 2 et au moins un émetteur électroluminescent.

7. Formulation, contenant au moins une molécule organique selon la revendication 1 ou 2 ou un mélange selon la revendication 6 et au moins un solvant.

8. Utilisation d'une molécule organique selon la revendication 1 ou 2 en tant que matériau hôte en particulier pour des émetteurs électroluminescents et/ou en tant que matériau de transport d'électrons et/ou en tant que matériau d'injection de trou et/ou en tant que matériau de blocage de trou dans un composant optoélectronique, qui est préparé par un procédé d'évaporation sous vide ou à partir d'une solution.

9. Utilisation selon la revendication 8, le composant optoélectronique étant choisi dans le groupe constitué par :

- des composants électroluminescents organiques (OLED),
- des cellules électrochimiques électroluminescentes,
- des capteurs OLED, en particulier des capteurs de gaz et de vapeur non hermétiquement protégés vers l'extérieur,
- des cellules solaires organiques,
- des transistors organiques à effet de champ,
- des lasers organiques et
- des éléments de conversion descendante.

10. Utilisation selon la revendication 8 ou 9, le composant optoélectronique étant un composant électroluminescent organique et la molécule organique étant utilisée dans une couche émettrice, en particulier en tant que matériau de matrice, en particulier pour des émetteurs électroluminescents et/ou en tant que matériau de transport d'électrons et/ou en tant que matériau d'injection de trou et/ou en tant que matériau de blocage de trou.

11. Composant optoélectronique, présentant une molécule organique selon la revendication 1 ou 2.

12. Composant optoélectronique selon la revendication 11, formé en tant que composant choisi dans le groupe constitué par un composant électroluminescent organique, une diode organique, une cellule solaire organique, un transistor organique, une diode électroluminescente organique, une cellule électrochimique électroluminescente, un transistor organique à effet de champ et un laser organique.

13. Procédé pour la préparation d'un composant optoélectronique, une molécule organique selon la revendication 1 ou 2 étant utilisée.

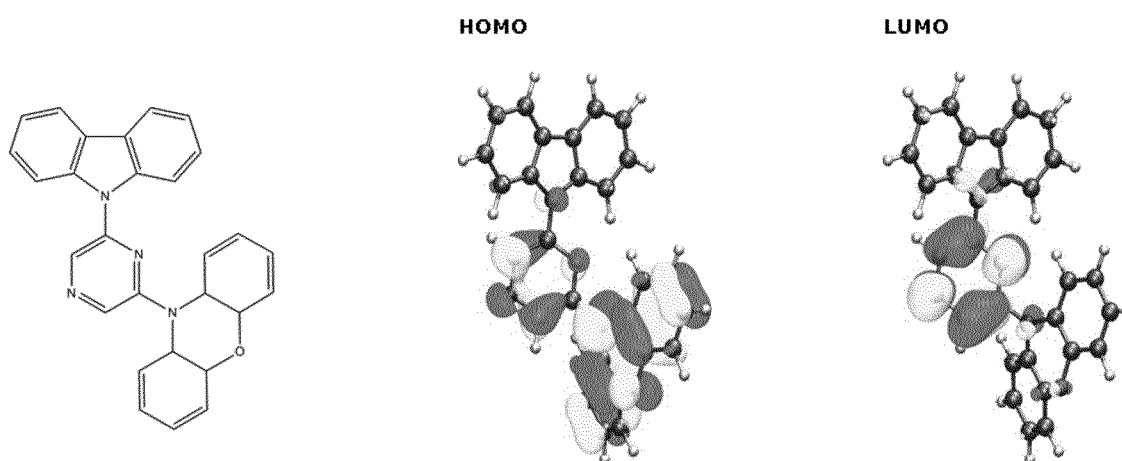
14. Procédé selon la revendication 13, **caractérisé en ce qu'**au moins une couche est revêtue

- par un procédé de sublimation,
- par un procédé OVPD (dépôt organique en phase vapeur),
- à l'aide d'une sublimation de gaz vecteur,
- à partir d'une solution ou
- par un procédé d'impression.

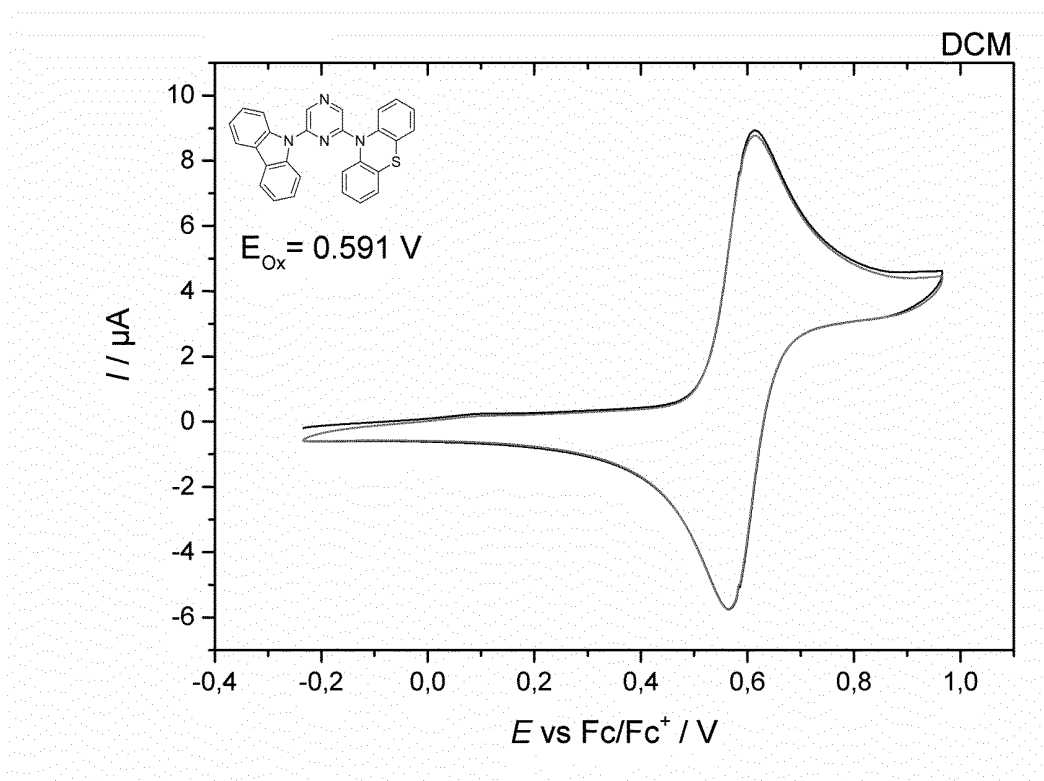
Figur 1

Kathode
Elektroneninjectionsschicht EIL
Lochblockierschicht HBL / Elektronenleitschicht ETL
Dotierte Emitterschicht EML
Lochtransportschicht HTL / Elektronenblockierschicht EBL
Lochinjektionsschicht HIL
Anode
Trägermaterial Glas

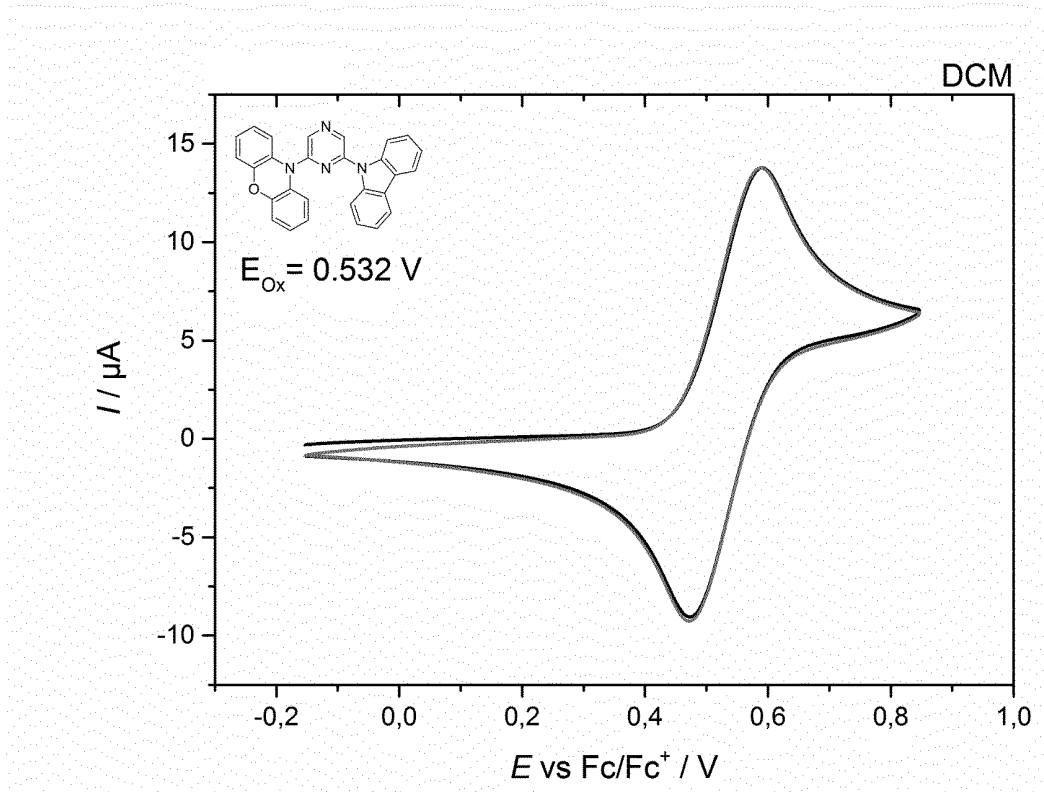
Figur 2



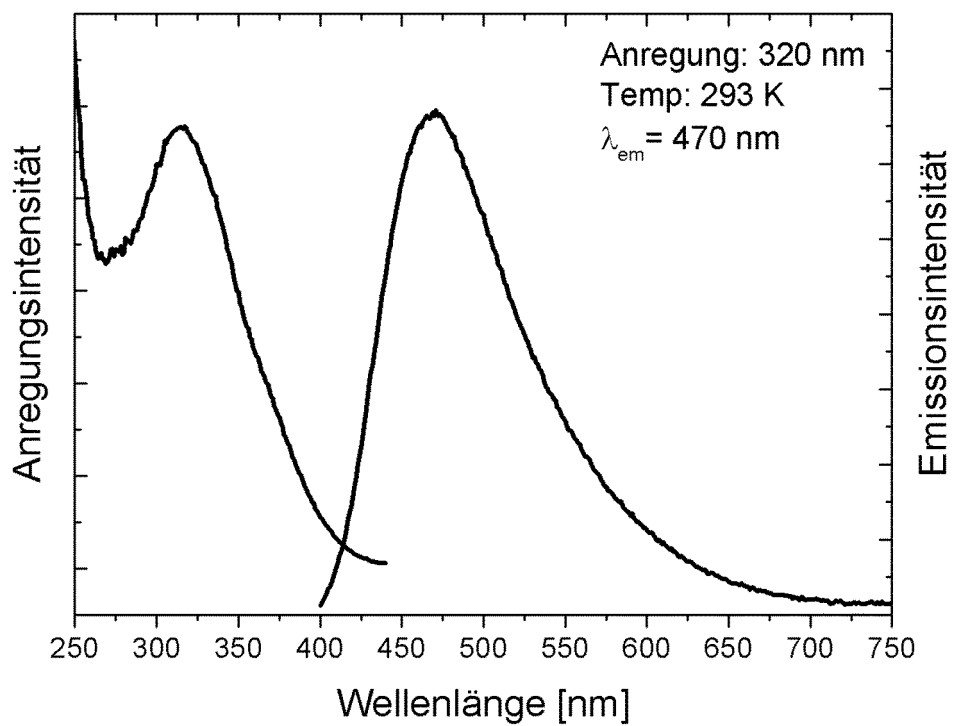
Figur 3



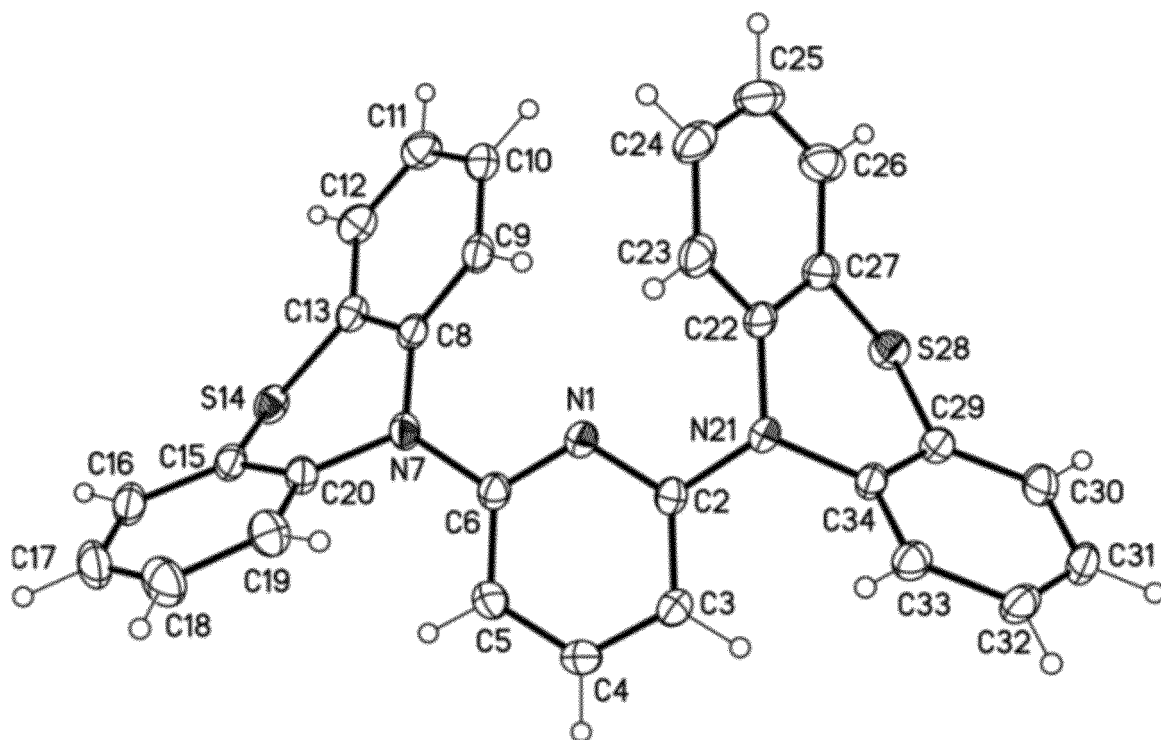
Figur 4



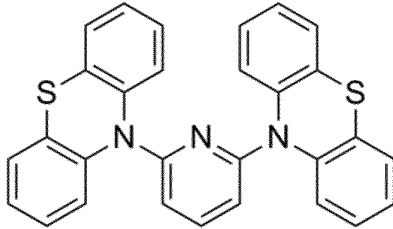
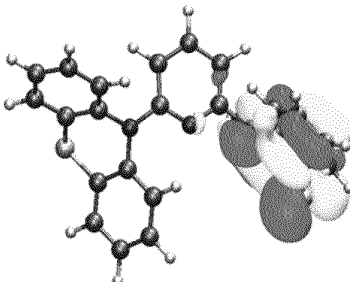
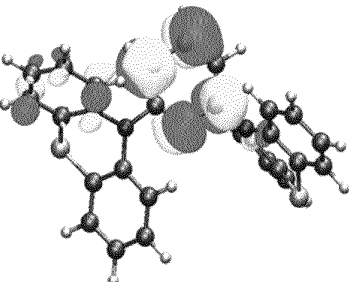
Figur 5

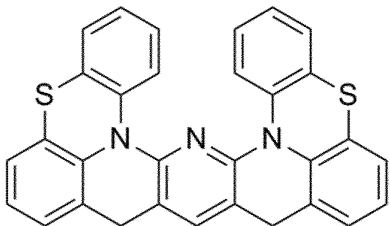
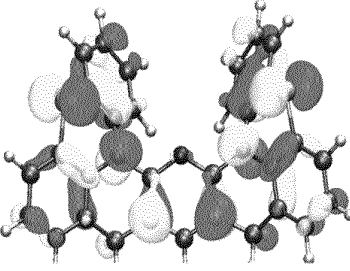
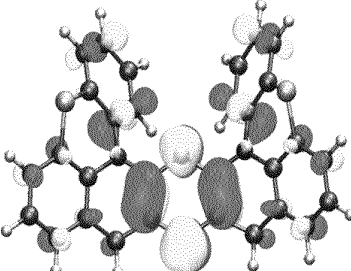


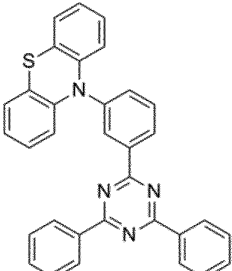
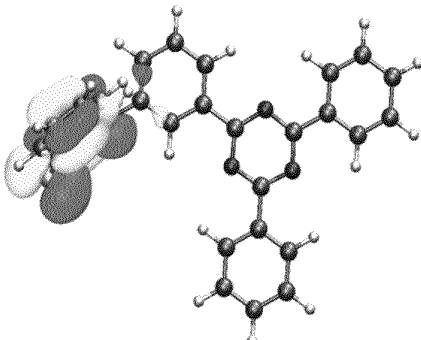
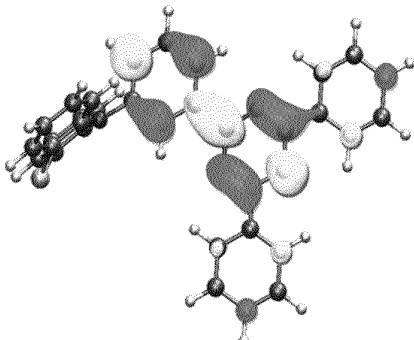
Figur 6



Figur 7

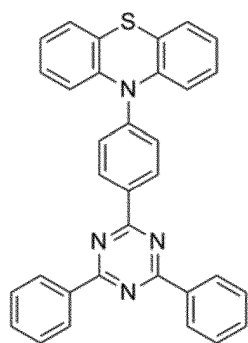
Molekül DFT-1		
structure of omID:154	HOMO	LUMO
		
E_{vert}^T	2.643	
E_{adi}^T	2.226	

Molekül DFT-2		
structure of omID:329	HOMO	LUMO
		
E_{vert}^T	2.582	
E_{adi}^T	2.445	

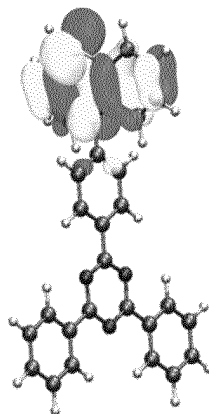
Molekül DFT-3		
structure of omID:330	HOMO	LUMO
		
E_{vert}^T	2.364	
E_{adi}^T	2.009	

Molekül DFT-4

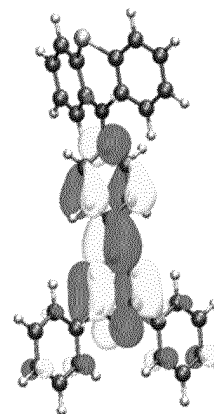
structure of omID:331



HOMO



LUMO

 $E_{\text{vert}}^{\text{T}}$

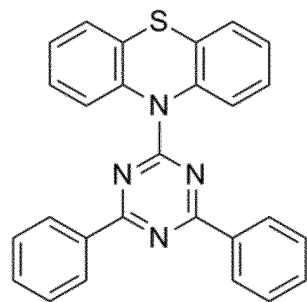
2.403

 $E_{\text{adi}}^{\text{T}}$

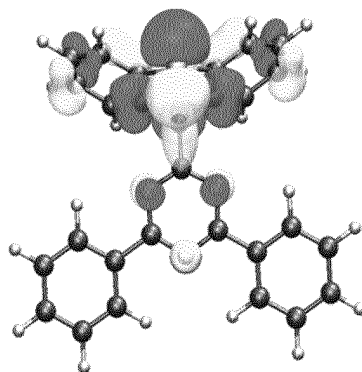
2.072

Molekül DFT-5

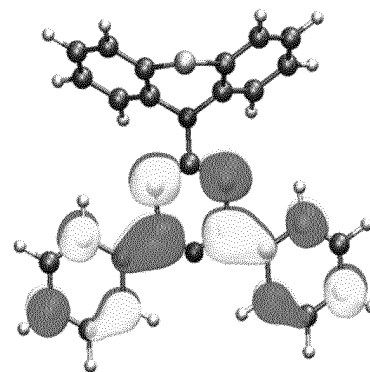
structure of omID:332



HOMO



LUMO

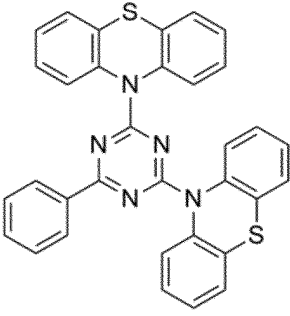
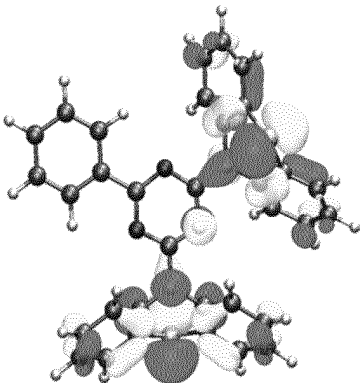
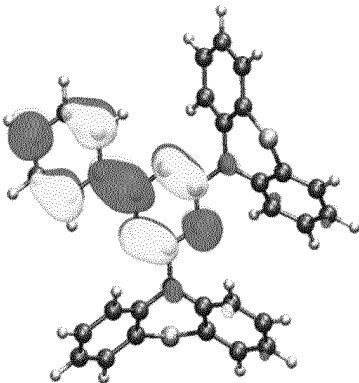
 $E_{\text{vert}}^{\text{T}}$

3.009

 $E_{\text{adi}}^{\text{T}}$

2.638

Moleküle DFT-6

structure of omID:333		HOMO	LUMO
			
$E_{\text{vert}}^{\text{T}}$	3.093		
$E_{\text{adi}}^{\text{T}}$	2.577		

IN DER BESCHREIBUNG AUFGEFÜHRTE DOKUMENTE

Diese Liste der vom Anmelder aufgeführten Dokumente wurde ausschließlich zur Information des Lesers aufgenommen und ist nicht Bestandteil des europäischen Patentdokumentes. Sie wurde mit größter Sorgfalt zusammengestellt; das EPA übernimmt jedoch keinerlei Haftung für etwaige Fehler oder Auslassungen.

In der Beschreibung aufgeführte Patentdokumente

- US 20120068170 A1 [0008]
- WO 2012149999 A1 [0008]
- US 20140001443 A1 [0008]
- KR 20140020208 [0008]
- KR 20130142967 [0008]
- US 20100171417 A1 [0008]
- KR 20130075949 A [0008]

In der Beschreibung aufgeführte Nicht-Patentliteratur

- **H. YERSIN.** *Top. Curr. Chem.*, 2004, vol. 241, 1 [0003]
- **H. YERSIN.** *Highly Efficient OLEDs with Phosphorescent Materials.* Wiley-VCH, 2008 [0003]
- **K. GOUSHI ; K. YOSHIDA ; K. SATO ; C. ADACHI.** *Nat. Photonics*, 2012, vol. 6, 253-258 [0005]
- **F. SO ; D. KONDAKOV.** *Ad. Mater.*, 2010, vol. 22, 3762-3777 [0006]
- **DONGWOOK KIM et al.** *JACS*, vol. 133 (44), 17895-17900 [0008]
- **B. D'ANDRADE et al.** *Organic Electronics*, 2005, vol. 6, 11 [0054]
- **BECKE, A. D.** *Phys. Rev.*, vol. A1988 (38), 3098-3100 [0056]
- **PERDEW, J. P.** *Phys. Rev. B*, 1986, vol. 33, 8822-8827 [0056]
- **WEIGEND, F. ; AHLRICHS, R.** *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2005, vol. 7, 3297-3305 [0056]
- **RAPPOPORT, D. ; FURCHE, F. J.** *Chem. Phys.*, 2010, vol. 133, 134105, , 1-134105, 11 [0056]
- **HÄSER, M. ; AHLRICHS, R. J.** *Comput. Chem.*, 1989, vol. 10, 104-111 [0056]
- **WEIGEND, F. ; HÄSER, M.** *Theor. Chem. Acc.*, 1997, vol. 97, 331-340 [0056]
- **SIERKA, M. ; HOGKAMP, A. ; AHLRICHS, R. J.** *Chem. Phys.*, 2003, vol. 118, 9136-9148 [0056]
- **TURBOMOLE V6.5** 2013. Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 1989 [0056]

专利名称(译)	oelds的主机材料		
公开(公告)号	EP3132478A1	公开(公告)日	2017-02-22
申请号	EP2015718823	申请日	2015-04-14
[标]申请(专利权)人(译)	辛诺拉有限公司		
申请(专利权)人(译)	CYNORA GMBH		
当前申请(专利权)人(译)	CYNORA GMBH		
[标]发明人	VOLZ DANIEL ABMROSEK DAVID		
发明人	VOLZ, DANIEL ABMROSEK, DAVID		
IPC分类号	H01L51/54		
CPC分类号	H01L51/0067 H01L51/0071 H01L51/5012 Y02E10/549 Y02P70/521		
优先权	2014164796 2014-04-15 EP 2014197513 2014-12-11 EP		
其他公开文献	EP3132478B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及具有式 (I) 结构的分子在电子器件中的用途，其中A代表受体基团，D1和D2代表具有结构式1a和1b的供体基团。