



(12)

## Patentschrift

(21) Aktenzeichen: **10 2018 107 166.3**  
(22) Anmeldetag: **26.03.2018**  
(43) Offenlegungstag: **26.09.2019**  
(45) Veröffentlichungstag  
der Patenterteilung: **25.06.2020**

(51) Int Cl.: **C07D 209/82** (2006.01)  
**C07D 209/86** (2006.01)  
**C09K 11/06** (2006.01)  
**H01L 51/54** (2006.01)  
**H01L 51/46** (2006.01)  
**H01L 51/30** (2006.01)

Innerhalb von neun Monaten nach Veröffentlichung der Patenterteilung kann nach § 59 Patentgesetz gegen das Patent Einspruch erhoben werden. Der Einspruch ist schriftlich zu erklären und zu begründen. Innerhalb der Einspruchsfrist ist eine Einspruchsgebühr in Höhe von 200 Euro zu entrichten (§ 6 Patentkostengesetz in Verbindung mit der Anlage zu § 2 Abs. 1 Patentkostengesetz).

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

(74) Vertreter:  
**Hoppe, Georg Johannes, Dipl.-Biochem. Dr. rer.  
nat., 14163 Berlin, DE**

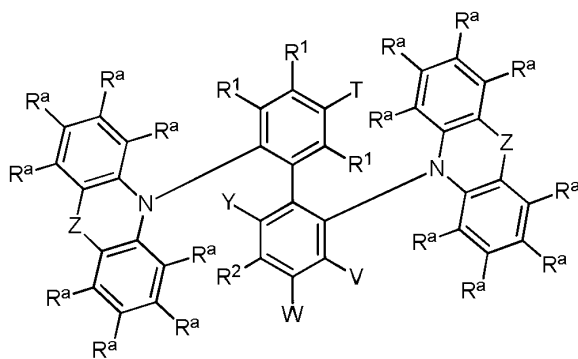
(72) Erfinder:  
**Esteban, Alhama Arjona, Dr., 70372 Stuttgart, DE**

(56) Ermittelte Stand der Technik:

<b>DE</b>	<b>10 2016 113 784</b>	<b>A1</b>
<b>US</b>	<b>2017 / 0 369 439</b>	<b>A1</b>
<b>WO</b>	<b>2015/ 199 303</b>	<b>A1</b>
<b>CN</b>	<b>106 966 955</b>	<b>A</b>

(54) Bezeichnung: **Organische Moleküle, insbesondere für die Verwendung in optoelektronischen Vorrichtungen**

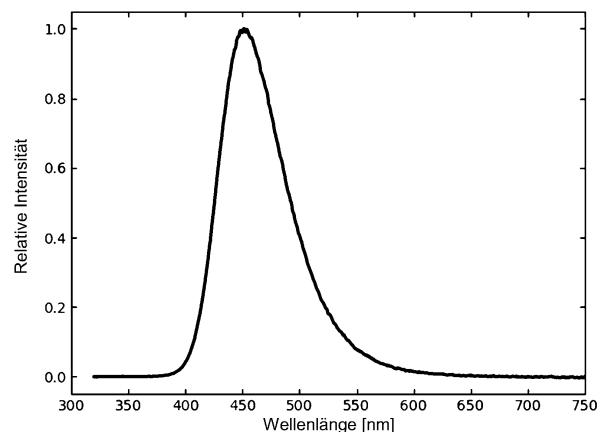
(57) Hauptanspruch: Organisches Molekül, das eine Struktur der Formel I umfasst oder daraus besteht,



Formel I

wobei  
T aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus CN und CF<sub>3</sub> besteht;  
V, W und Y unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt sind, die aus Folgendem besteht: CN, CF<sub>3</sub> und R<sup>2</sup>;  
Z bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus einer direkten Bindung, CR<sup>3</sup>R<sup>4</sup>, C=CR<sup>3</sup>R<sup>4</sup>, C=O, C=NR<sup>3</sup>, NR<sup>3</sup>, O, SiR<sup>3</sup>R<sup>4</sup>, S, S(O) und S(O)<sub>2</sub> besteht;  
R<sup>1</sup> bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus Folgendem besteht:  
Wasserstoff,

Deuterium,  
C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-alkyl,  
wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional durch Deuterium substituiert sind;  
C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>-alkenyl,  
wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional durch Deuterium substituiert sind;  
C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>-alkynyl,  
wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional durch Deuterium substituiert sind; und C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-aryl,  
das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert ist, die unabhängig voneinander aus der ...



## Beschreibung

**[0001]** Die Erfindung betrifft organische Moleküle und deren Verwendung in organischen Leuchtdioden (Organic Light-Emitting Diodes, OLEDs) und in anderen optoelektronischen Vorrichtungen.

**[0002]** Die WO 2015/199303 A1 betrifft chemische Verbindungen und deren Verwendung in organischen photoelektronischen Vorrichtungen. Aus der US 2017/0369439 A1 sind cyclische Verbindungen bekannt und lichtemittierende Vorrichtungen aufweisend diese cyclischen Verbindungen. Biphenyl-Verbindungen und lichtemittierende Vorrichtungen sind aus der CN 106966955 A bekannt. Die DE 10 2016 113784 A1 offenbart organische elektrolumineszierende Verbindung und deren Verwendung in organischen photoelektrischen Einrichtungen.

## Beschreibung

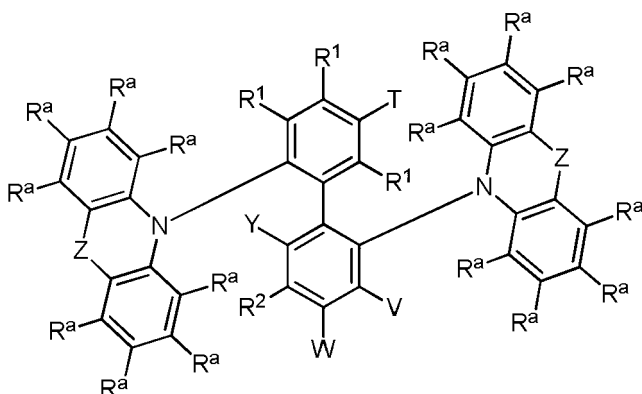
**[0003]** Die Aufgabe der vorliegenden Erfindung ist die Bereitstellung von Molekülen, die für die Verwendung in organischen optoelektronischen Vorrichtungen geeignet sind.

**[0004]** Diese Aufgabe wird durch die Erfindung gelöst, die eine neue Klasse organischer Moleküle bereitstellt.

**[0005]** Gemäß der Erfindung sind die organischen Moleküle rein organische Moleküle, d. h., im Gegensatz zu Metallkomplexen, die für die Verwendung in optoelektronischen Vorrichtungen bekannt sind, enthalten diese keine Metallionen.

**[0006]** Gemäß der vorliegenden Erfindung zeigen die organischen Moleküle Emissionsmaxima im blauen, himmelblauen oder grünen Spektralbereich. Die organischen Moleküle zeigen insbesondere Emissionsmaxima zwischen 420 nm und 520 nm, bevorzugt zwischen 440 nm und 495 nm oder mehr bevorzugt zwischen 450 nm und 470 nm. Die Photolumineszenz-Quantenausbeuten der organischen Moleküle gemäß der Erfindung sind insbesondere 20 % oder mehr. Die Moleküle gemäß der Erfindung zeigen insbesondere eine thermisch aktivierte verzögerte Fluoreszenz (Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF). Die Verwendung der Moleküle gemäß der Erfindung in einer optoelektronischen Vorrichtung, wie zum Beispiel in einer organischen Leuchtdiode (Organic Light-Emitting Diode, OLED), führt zu einer höheren Effizienz der Vorrichtung. Entsprechende OLEDs haben eine höhere Stabilität als OLEDs mit bekannten Emittiermaterialien und vergleichbarer Farbe.

**[0007]** Die organischen, lichtemittierenden Moleküle der Erfindung umfassen oder bestehen aus einer Struktur der Formel I,



Formel I

**[0008]** T wird aus der Gruppe ausgewählt, die aus CN und CF<sub>3</sub> besteht.

V, W und Y werden unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus Folgendem besteht: CN, CF<sub>3</sub> und R<sup>2</sup>.

**[0009]** Z wird bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus einer direkten Bindung, CR<sup>3</sup>R<sup>4</sup>, C=CR<sup>3</sup>R<sup>4</sup>, C=O, C=NR<sup>3</sup>, NR<sup>3</sup>, O, SiR<sup>3</sup>R<sup>4</sup>, S, S(O) and S(O)<sub>2</sub> besteht.

**[0010]** R<sup>1</sup> wird bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus Folgendem besteht:

Wasserstoff,

Deuterium,

C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-alkyl,

wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional durch Deuterium substituiert werden;

C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>-alkenyl,

wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional durch Deuterium substituiert werden;

C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>-alkynyl,

wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional durch Deuterium substituiert werden; und

C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-aryl,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu und Ph;

**[0011]** R<sup>2</sup> wird bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus Folgendem besteht:

Wasserstoff,

Deuterium,

C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-alkyl,

wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional durch Deuterium substituiert werden; C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>-alkenyl, wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional durch Deuterium substituiert werden; C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>-alkynyl, wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional durch Deuterium substituiert werden; und C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-aryl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu und Ph;

**[0012]** R<sup>a</sup>, R<sup>3</sup> und R<sup>4</sup> werden bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus Folgendem besteht: Wasserstoff, Deuterium, N(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, OR<sup>5</sup>, Si(R<sup>5</sup>)<sub>3</sub>, B(OR<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R<sup>5</sup>, CF<sub>3</sub>, CN, F, Br, I, C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-alkyl,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>5</sup> substituiert wird, und wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-alkoxy,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>5</sup> substituiert wird, und wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-thioalkoxy,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>5</sup> substituiert wird, und wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-alkenyl,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>5</sup> substituiert wird, und wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-alkynyl,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>5</sup> substituiert wird, und wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-aryl,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>5</sup> substituiert wird; und

C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-heteroaryl,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>5</sup> substituiert wird.

**[0013]** R<sup>5</sup> bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus Folgendem besteht: Wasserstoff, Deuterium, N(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, OR<sup>6</sup>, Si(R<sup>6</sup>)<sub>3</sub>, B(OR<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R<sup>6</sup>, CF<sub>3</sub>, CN, F, Br, I,

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-alkyl,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>6</sup> substituiert wird, und wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>, C≡C, Si(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>6</sup>, P(=O)(R<sup>6</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>6</sup>, O, S oder CONR<sup>6</sup>;

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-alkoxy,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>6</sup> substituiert wird, und wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>, C≡C, Si(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>6</sup>, P(=O)(R<sup>6</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>6</sup>, O, S oder CONR<sup>6</sup>;

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-thioalkoxy,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>6</sup> substituiert wird, und wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>, C≡C, Si(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>6</sup>, P(=O)(R<sup>6</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>6</sup>, O, S oder CONR<sup>6</sup>;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-alkenyl,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>6</sup> substituiert wird, und wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>, C≡C, Si(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>6</sup>, P(=O)(R<sup>6</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>6</sup>, O, S oder CONR<sup>6</sup>;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-alkynyl,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>6</sup> substituiert wird, und wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>, C≡C, Si(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>6</sup>, P(=O)(R<sup>6</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>6</sup>, O, S oder CONR<sup>6</sup>;

C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-aryl,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>6</sup> substituiert wird; und

C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-heteroaryl,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>6</sup> substituiert wird.

**[0014]** R<sup>6</sup> bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus Folgendem besteht: Wasserstoff; Deuterium, OPh, CF<sub>3</sub>, CN, F,

C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-alkyl,

wobei optional ein oder mehrere Wasserstoffatome unabhängig voneinander substituiert werden durch Deuterium, CN, CF<sub>3</sub> oder F;

C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-alkoxy,

wobei optional ein oder mehrere Wasserstoffatome unabhängig voneinander substituiert werden durch Deuterium, CN, CF<sub>3</sub> oder F;

C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-thioalkoxy,

wobei optional ein oder mehrere Wasserstoffatome unabhängig voneinander substituiert werden durch Deuterium, CN, CF<sub>3</sub> oder F;

C<sub>2</sub>-C<sub>5</sub>-alkenyl,

wobei optional ein oder mehrere Wasserstoffatome unabhängig voneinander substituiert werden durch Deuterium, CN, CF<sub>3</sub> oder F;

C<sub>2</sub>-C<sub>5</sub>-alkynyl,

wobei optional ein oder mehrere Wasserstoffatome unabhängig voneinander substituiert werden durch Deuterium, CN, CF<sub>3</sub> oder F;

C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-aryl,

das optional durch einen oder mehrere C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-alkyl-Substituenten substituiert wird; C<sub>3</sub>-C<sub>17</sub>-heteroaryl,

das optional durch einen oder mehrere C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-alkyl-Substituenten substituiert wird;

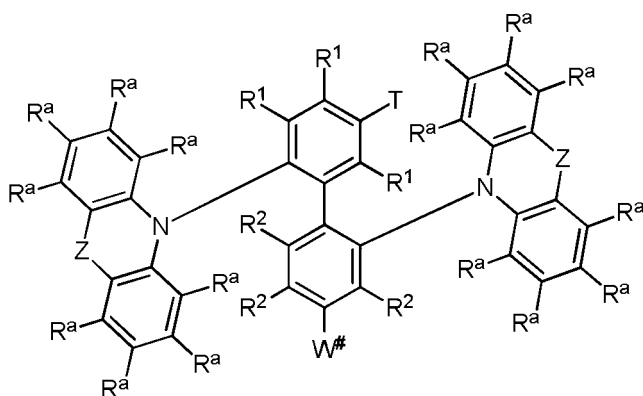
N(C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-aryl)<sub>2</sub>,

N(C<sub>3</sub>-C<sub>17</sub>-heteroaryl)<sub>2</sub>; und

N(C<sub>3</sub>-C<sub>17</sub>-heteroaryl)(C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-aryl).

**[0015]** Gemäß der Erfindung ist genau ein (ein und nur ein) Substituent, der aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus T, V, W und Y besteht, CN; und genau ein Substituent, der aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus T, V, W und Y besteht, ist CF<sub>3</sub>.

**[0016]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfasst oder besteht das organische Molekül aus einer Struktur der Formel Ia:



Formel Ia

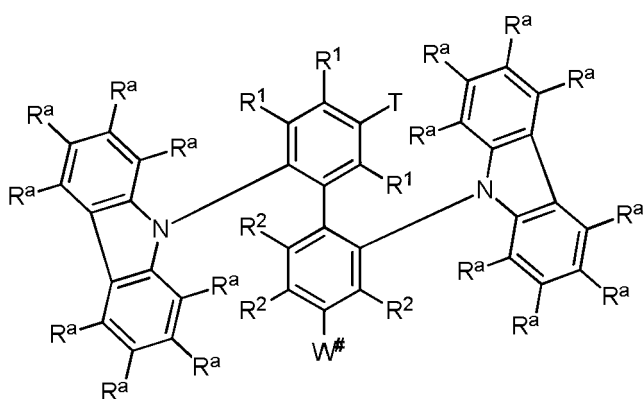
wobei

W<sup>#</sup> aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus CN und CF<sub>3</sub> besteht,

wobei genau ein Substituent, der aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus T und W<sup>#</sup> besteht, CN ist; und genau ein (d. h., der andere) Substituent, der aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus T und W<sup>#</sup> besteht, CF<sub>3</sub> ist;

und wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

**[0017]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfasst oder besteht das organische Molekül aus einer Struktur der Formel IIa:



Formel IIa

wobei

$W^{\#}$  aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus CN und  $CF_3$  besteht,

wobei genau ein Substituent, der aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus T und  $W^{\#}$  besteht, CN ist; und genau ein (d. h., der andere) Substituent, der aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus T und  $W^{\#}$  besteht,  $CF_3$  ist;

und wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

**[0018]** In einer Ausführungsform werden  $R^1$  und  $R^2$  unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus Wasserstoff (H), Methyl, Mesityl, Toly und Phenyl besteht. Der Begriff Toly umfasst 2-Toly, 3-Toly und 4-Toly.

**[0019]** In einer Ausführungsform werden  $R^1$  und  $R^2$  bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus Wasserstoff (H), Methyl und Phenyl besteht.

**[0020]** In einer Ausführungsform sind  $R^1$  und  $R^2$  Wasserstoff (H).

**[0021]** In einer Ausführungsform ist T CN und V ist  $CF_3$ .

In einer Ausführungsform ist T CN und W ist  $CF_3$

In einer Ausführungsform ist T CN und Y ist  $CF_3$

**[0022]** In einer Ausführungsform ist T  $CF_3$  und V ist CN.

In einer Ausführungsform ist T  $CF_3$  und W ist CN.

In einer Ausführungsform ist T  $CF_3$  und Y ist CN.

**[0023]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung wird  $R^a$  bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus Folgendem besteht: H,

Me,

$i$ Pr,

$t$ Bu,

CN,

$CF_3$ ,

Ph, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph,

Pyridinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph,

Pyrimidinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph,

Carbazolyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph,

Triazinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph,

und  $N(Ph)_2$ .

**[0024]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung wird  $R^a$  bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus Folgendem besteht: H,

Me,

$i$ Pr,

$t$ Bu,

CN,

$CF_3$ ,

Ph, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph,

Pyridinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph,

Pyrimidinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph, und

Triazinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph.

**[0025]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung wird  $R^a$  bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus Folgendem besteht: H,

Me,

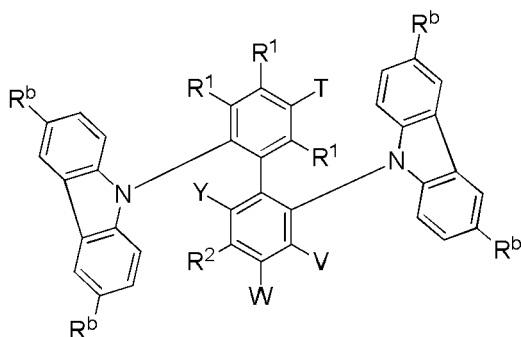
$t$ Bu,

Ph, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph,

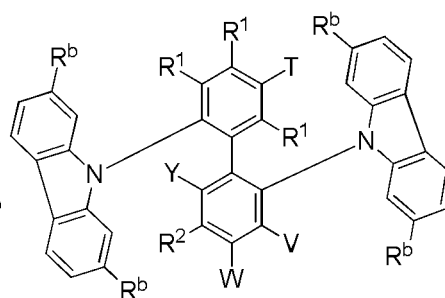
Triazinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph.

**[0026]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung ist  $R^a$  bei jedem Vorkommen H.

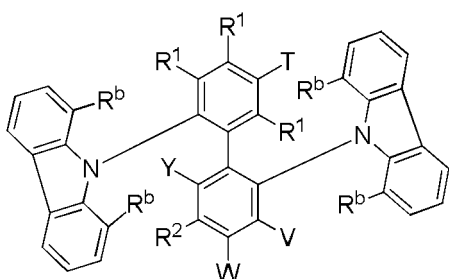
**[0027]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die aus der Gruppe von Formel IIb, Formel IIb-2, Formel IIb-3 oder Formel IIb-4 ausgewählt wird:



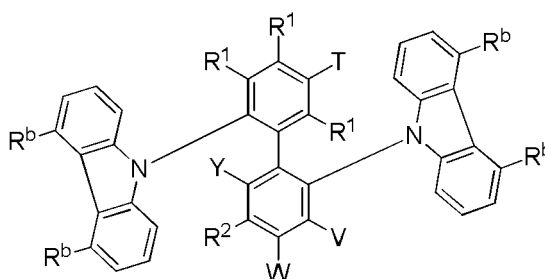
Formel IIb



Formel IIb-2



Formel IIb-3



Formel IIb-4

wobei

R<sup>b</sup> bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus Folgendem besteht:

Deuterium,

N(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>,

OR<sup>5</sup>,

Si(R<sup>5</sup>)<sub>3</sub>,

B(OR<sup>5</sup>)<sub>2</sub>,

OSO<sub>2</sub>R<sup>5</sup>,

CF<sub>3</sub>,

CN,

F,

Br,

I,

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-alkyl,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>5</sup> substituiert wird, und wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-alkoxy,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>5</sup> substituiert wird, und wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-thioalkoxy,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>5</sup> substituiert wird, und wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-alkenyl,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>5</sup> substituiert wird, und wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-alkynyl,

das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>5</sup> substituiert wird, und wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-aryl,

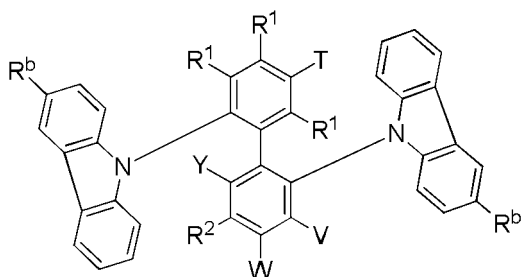
das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>5</sup> substituiert wird; und

C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-heteroaryl,

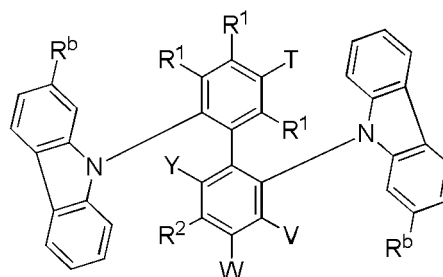
das optional durch einen oder mehrere Substituenten R<sup>5</sup> substituiert wird. Davon abgesehen gelten die vorher erwähnten Definitionen.

**[0028]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die aus der Gruppe von Formel IIc, Formel IIc-2, Formel IIc-3 oder Formel IIc-4 ausgewählt wird:

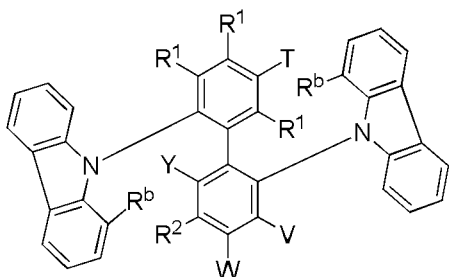




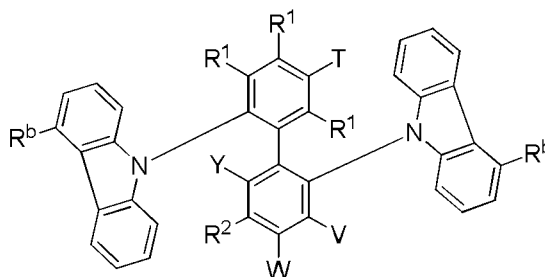
Formel IIc



Formel Ic-2



Formel IIc-3



Formel IIc-4

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

**[0029]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung wird  $R^b$  bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus Folgendem besteht:

Me,

$i$ Pr,

$t$ Bu,

CN,

$CF_3$ ,

Ph, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph,

Pyridinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph,

Carbazolyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph,

Triazinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph,

und  $N(Ph)_2$ .

**[0030]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung wird  $R^b$  bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus Folgendem besteht:

Me,

$i$ Pr,

$t$ Bu,

CN,

$CF_3$ ,

Ph, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN,  $CF_3$  und Ph,

Pyridinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph,

Pyrimidinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph, und

Triazinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph.

**[0031]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung wird R<sup>b</sup> bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus Folgendem besteht:

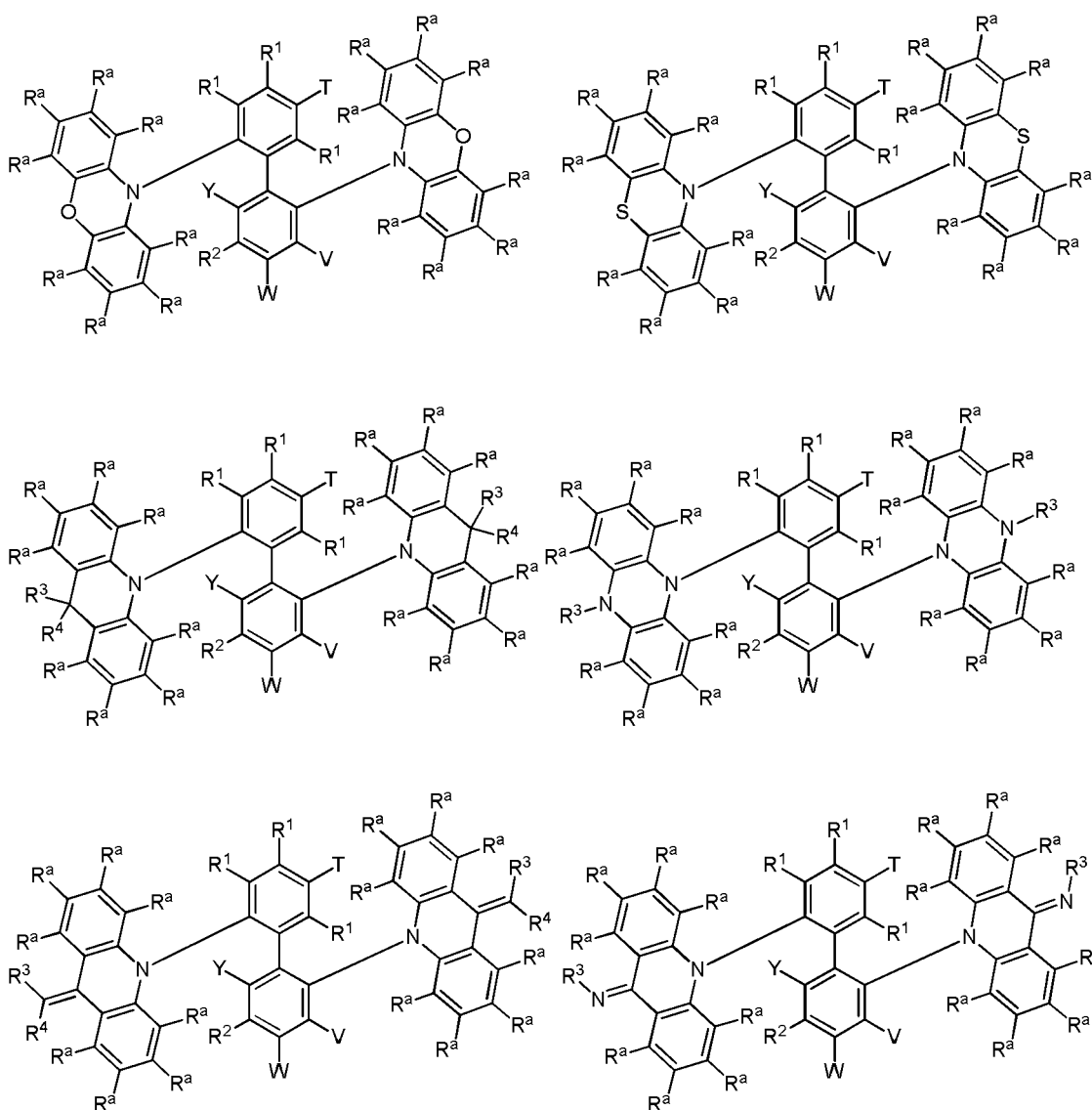
Me,

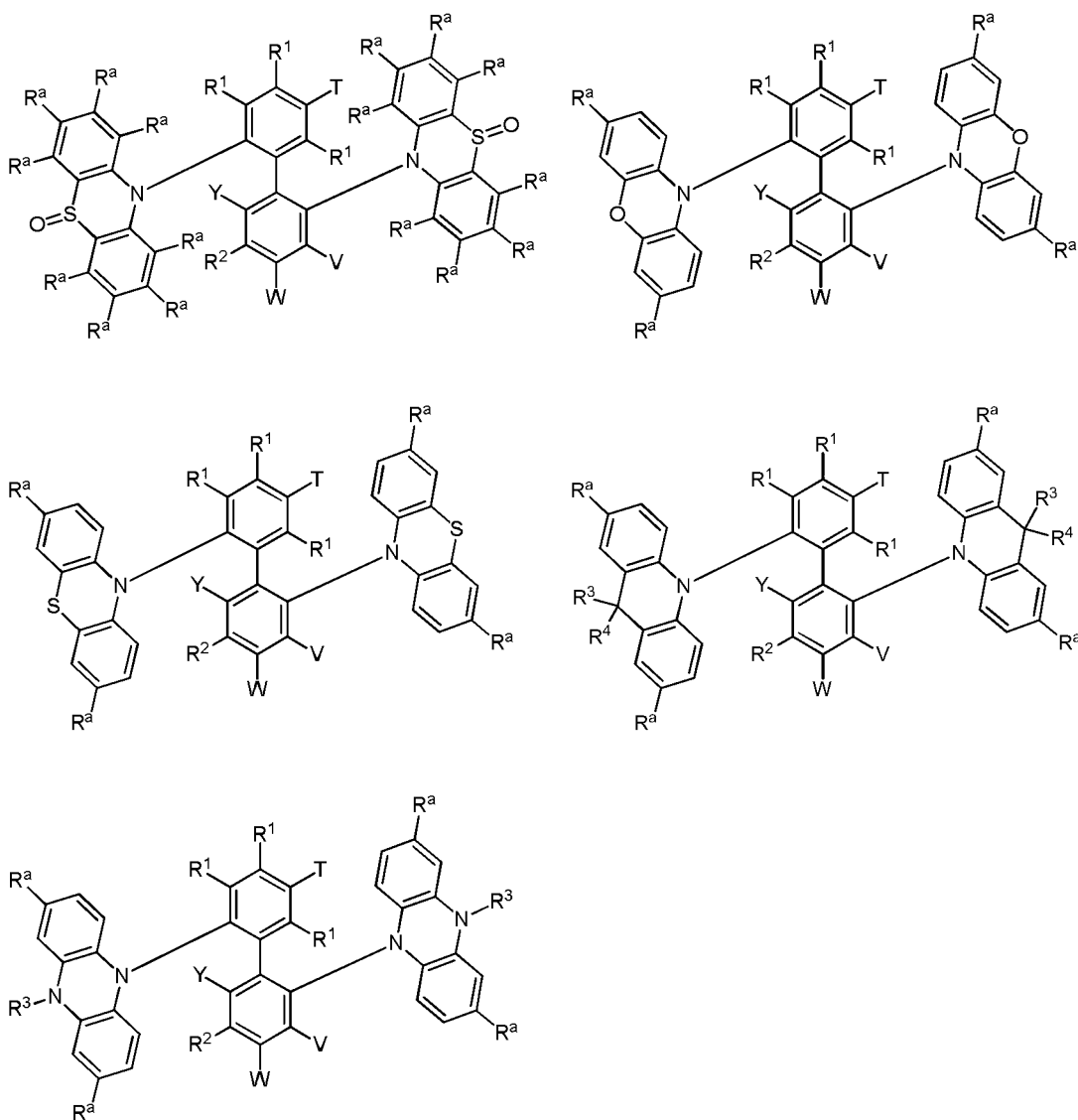
<sup>i</sup>Bu,

Ph, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph,

Triazinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph.

**[0032]** Nachfolgend werden Ausführungsbeispiele des organischen Moleküls der Erfindung gezeigt:

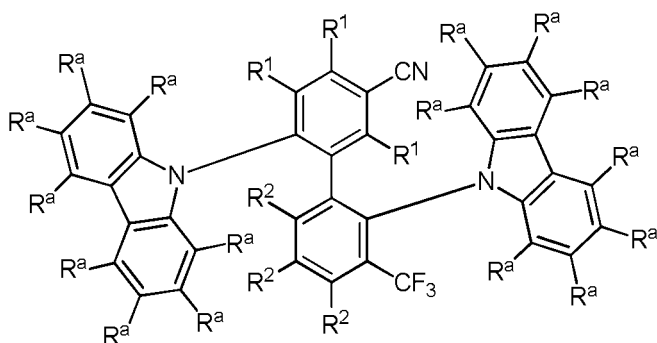




wobei für W, V, Y, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>a</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup> und R<sup>5</sup> die vorher erwähnten Definitionen gelten.

**[0033]** In einer Ausführungsform werden R<sup>a</sup> und R<sup>5</sup> bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus Folgendem besteht: Wasserstoff (H), Methyl (Me), i-Propyl (CH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>) (iPr), t-Butyl (tBu), Phenyl (Ph), CN, CF<sub>3</sub> und Diphenylamin (NPh<sub>2</sub>).

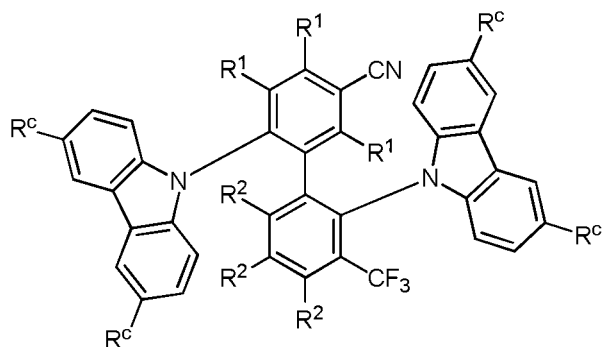
**[0034]** In einer Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur der Formel III:



Formel III

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

**[0035]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel IIIa:



Formel IIIa

wobei

$R^c$  bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus Folgendem besteht:

Me,

<sup>i</sup>Pr,

<sup>t</sup>Bu,

Ph, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph,

Pyridinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph,

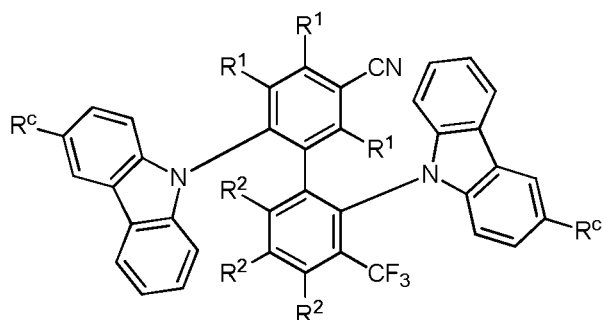
Pyrimidinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph,

Carbazolyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph,

Triazinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph,

und N(Ph)<sub>2</sub>.

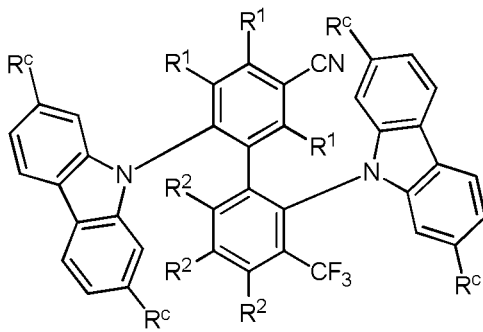
**[0036]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel IIIb:



Formel IIIb

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

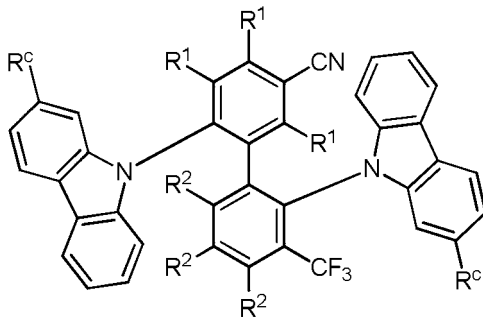
**[0037]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel IIIc:



Formel IIIc

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

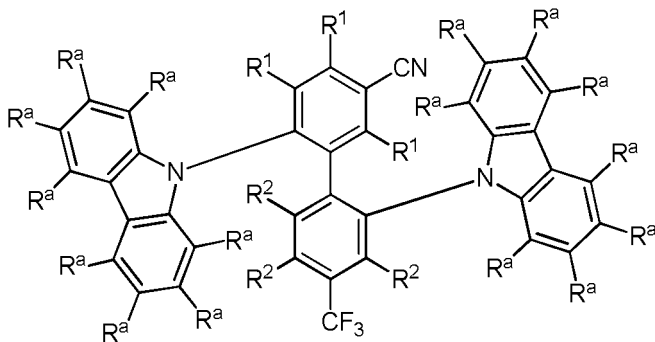
**[0038]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel IIIId:



Formel IIIId

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

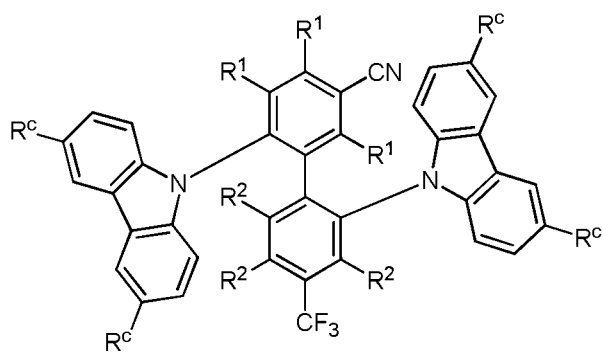
**[0039]** In einer Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur der Formel VI:



Formel IV

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

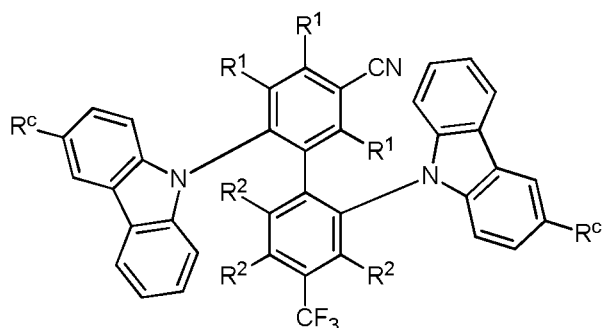
**[0040]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel IVa:



Formel IVa

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

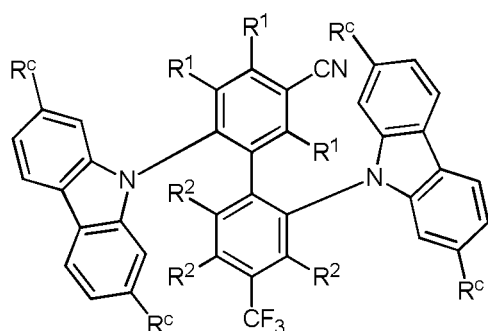
**[0041]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel IVb:



Formel IVb

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

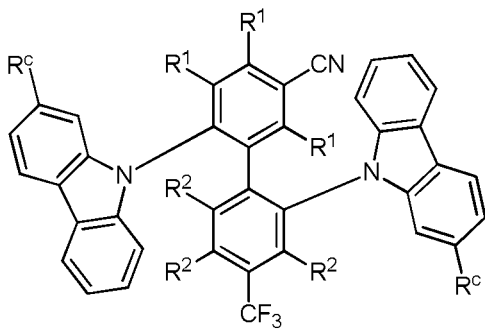
**[0042]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel IVc:



Formel IVc

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

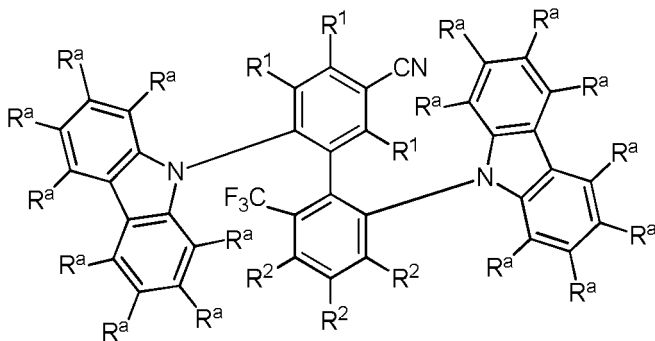
**[0043]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel IVd:



Formel IVd

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

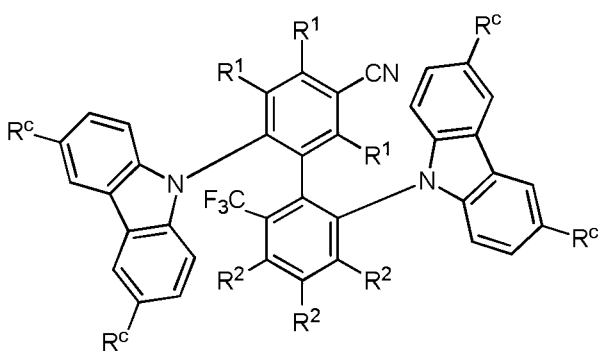
**[0044]** In einer Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur der Formel V:



Formel V

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

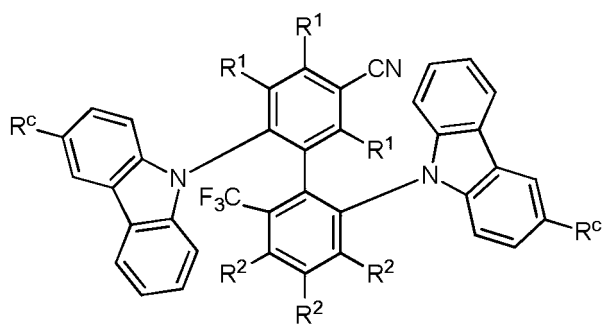
**[0045]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel Va:



Formel Va

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

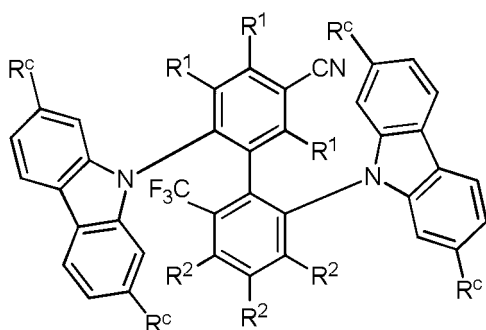
**[0046]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel Vb:



Formel Vb

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

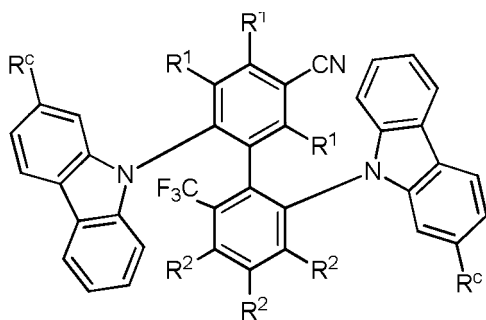
**[0047]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel Vc:



Formel Vc

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

**[0048]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel Vd:

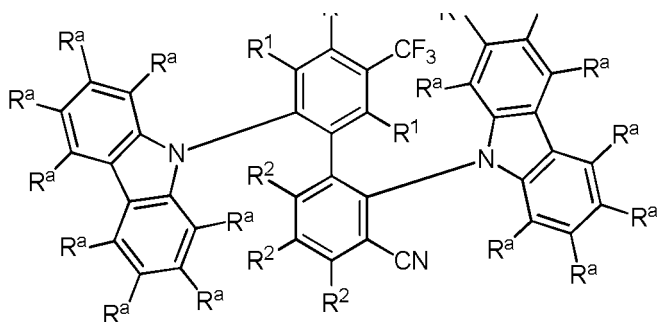


Formel Vd

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

**[0049]** In einer Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur der Formel VI:

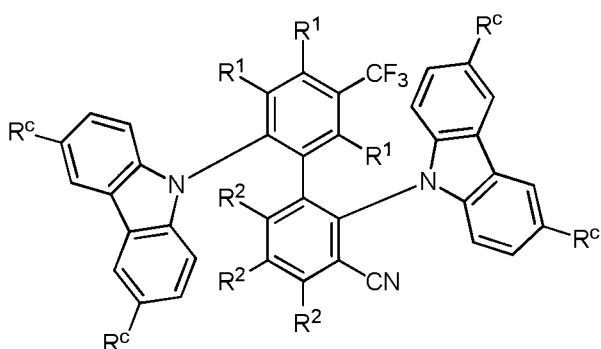




Formel VI

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

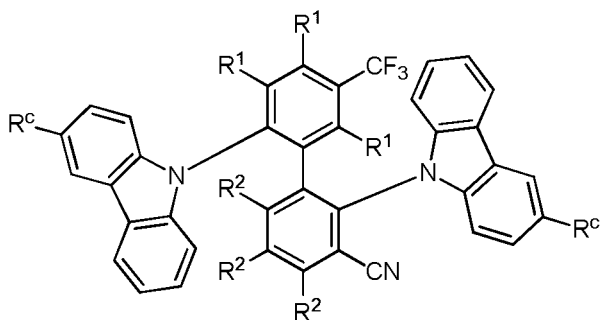
**[0050]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel VIa:



Formel VIa

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

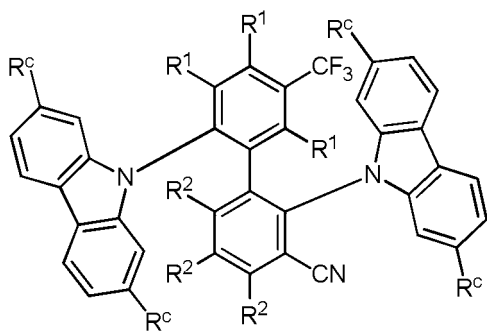
**[0051]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel VIb:



Formel VIb

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

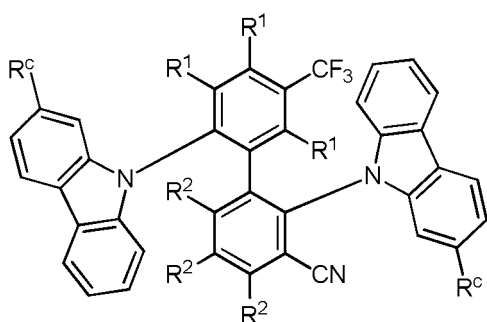
**[0052]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel VIc:



Formel VIc

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

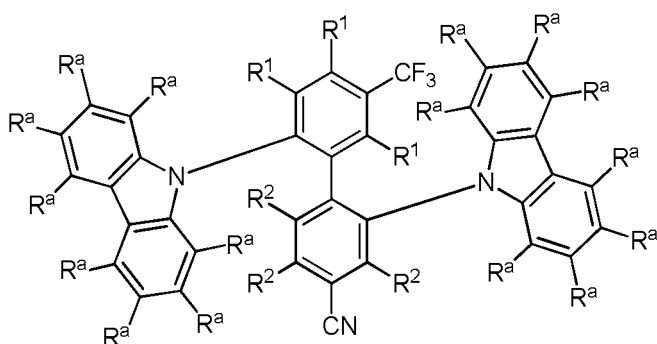
**[0053]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel VIId:



Formel VIId

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

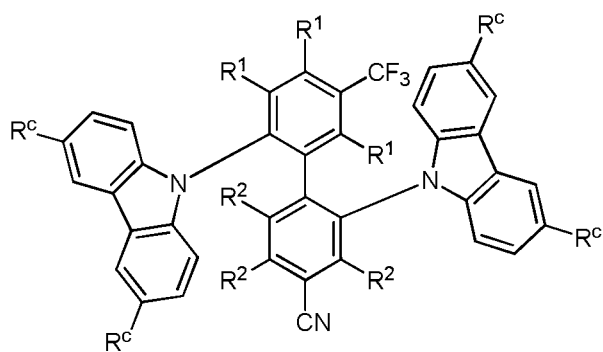
**[0054]** In einer Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur der Formel VII:



Formel VII

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

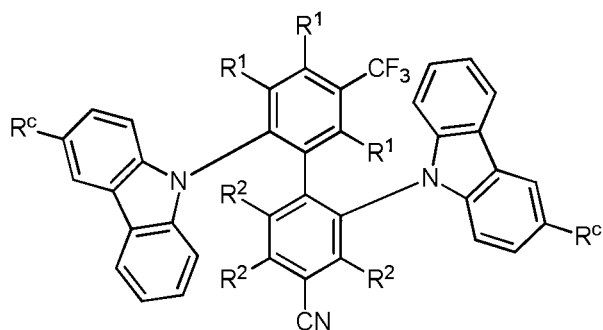
**[0055]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel VIIa:



Formel VIIa

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

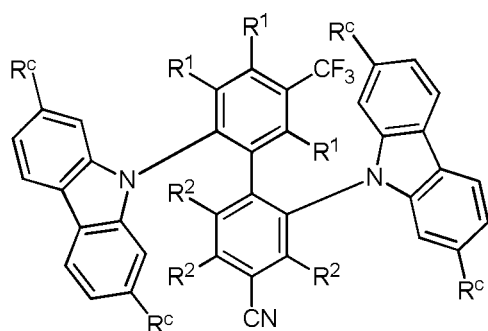
**[0056]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel VIIb:



Formel VIIb

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

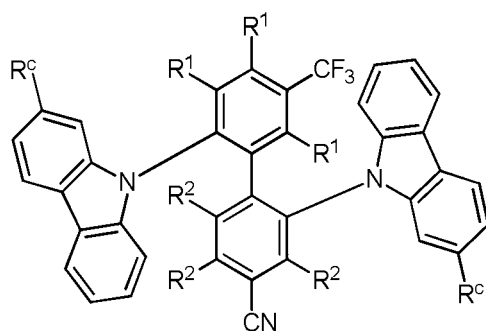
**[0057]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel VIIc:



Formel VIIc

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

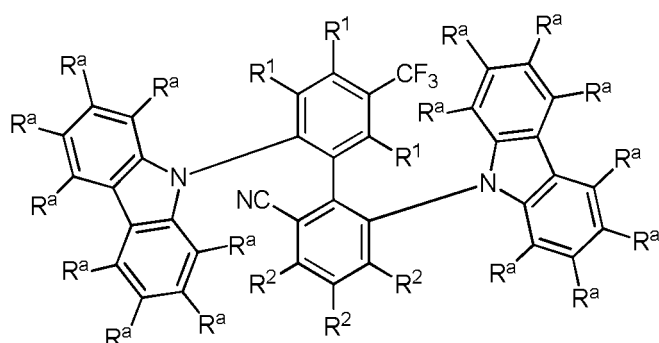
**[0058]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel VIId:



Formel VIId

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

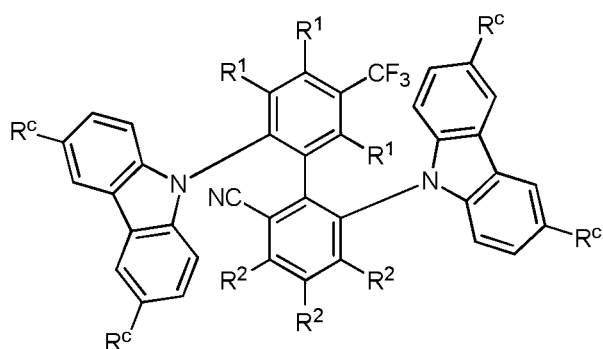
**[0059]** In einer Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur der Formel VIII:



Formel VIII

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

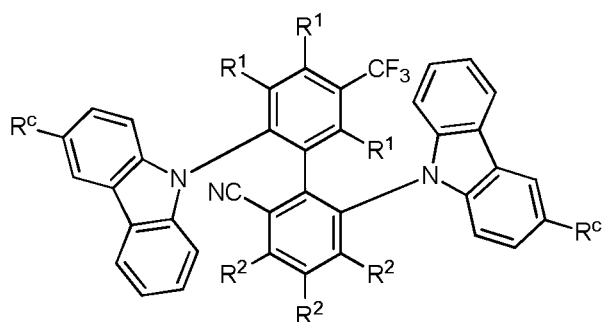
**[0060]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel VIIIa:



Formel VIIIa

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

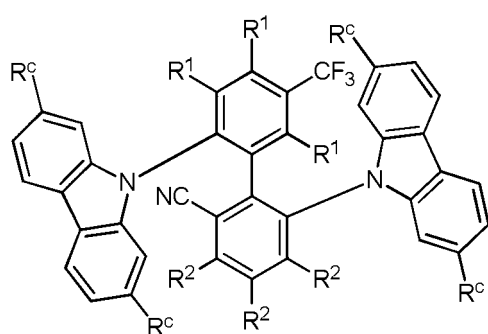
**[0061]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel VIIIb:



Formel VIIIb

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

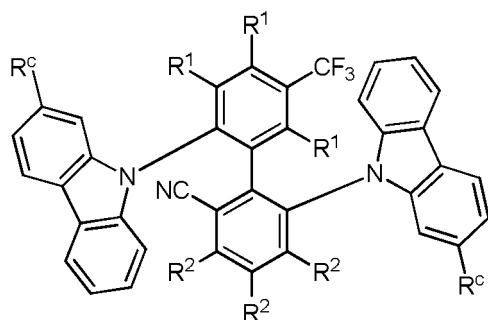
**[0062]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel VIIIc:



Formel VIIIc

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

**[0063]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung umfassen oder bestehen die organischen Moleküle aus einer Struktur, die ausgewählt wird aus der Formel VIIIId:



Formel VIIIId

wobei die vorher erwähnten Definitionen gelten.

**[0064]** In eine Ausführungsform der Erfindung wird R<sup>c</sup> bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus Folgendem besteht

Me,

<sup>i</sup>Pr,

<sup>t</sup>Bu,

Ph, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph; und

Triazinyl, das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert wird, die unabhängig voneinander ausgewählt werden aus der Gruppe, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph.

**[0065]** Wie in der vorliegenden Anmeldung verwendet, können die Begriffe „aryl“ und „aromatisch“ im weitesten Sinne als jegliche mono-, bi- oder polyzyklischen aromatischen Einheiten verstanden werden. Demgemäß enthält eine Arylgruppe **6 bis 60** aromatische Ringatome und eine heteroaryle Gruppe enthält **5 bis 60** aromatische Ringatome, von denen mindestens eines ein Heteroatom ist. Ungeachtet dessen kann in der gesamten Anmeldung die Anzahl der aromatischen Ringatome als tiefgestellte Zahl in der Definition bestimmter Substituenten angegeben sein. Insbesondere beinhaltet der heteroaromatische Ring ein bis drei Heteroatome. Die Begriffe „heteroaryl“ und „heteroaromatisch“ können ebenfalls im weitesten Sinne als jegliche mono-, bi- oder polyzyklischen heteroaromatischen Einheiten verstanden werden, die mindestens ein Heteroatom beinhalten. Die Heteroatome können bei jedem Vorkommen gleich oder unterschiedlich sein und individuell aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus N, O und S besteht. Demgemäß bezieht sich der Begriff „Arylen“ auf einen zweiwertigen Substituenten, der zwei Bindestellen zu anderen Molekülstrukturen aufweist und dadurch als Linkerstruktur dient. Falls eine Gruppe in den Ausführungsbeispielen anders als in den hier angegebenen Definitionen definiert wird, zum Beispiel die Anzahl der aromatischen Ringatome oder die Anzahl der Heteroatome sich von der angegebenen Definition unterscheidet, ist die Definition in den Ausführungsbeispielen anzuwenden. Gemäß der Erfindung ist ein kondensierter (ringförmiger) aromatischer oder heteroaromatischer Polyzyklus aus zwei oder mehr einzelnen aromatischen oder heteroaromatischen Zyklen gebildet, die den Polyzyklus über eine Kondensationsreaktion ausbildeten.

**[0066]** Insbesondere umfasst der Begriff „Arylgruppe“ oder „Heteroarylgruppe“ wie in der vorliegenden Anmeldung durchgehend verwendet Gruppen, die über jede Position der aromatischen oder heteroaromatischen Gruppe gebunden werden können, die abgeleitet ist von Benzen, Naphthalin, Anthracen, Phenanthren, Pyren, Dihydropyren, Chrysen, Perylen, Fluoranthren, Benzanthracen, Benzphenanthren, Tetracen, Pentacen, Benzopyren, Furan, Benzofuran, Isobenzofuran, Dibenzofuran, Thiophen, Benzothiophen, Isobenzothiophen, Dibenzothiophen; Pyrrol, Indol, Isoindol, Carbazol, Pyridin, Quinolin, Isoquinolin, Acridin, Phenanthridin, Benzo-5,6-quinolin, Benzo-6,7-quinolin, Benzo-7,8-quinolin, Phenothiazin, Phenoxazin, Pyrazol, Indazol, Imidazol, Benzimidazol, Naphthoimidazol, Phenanthroimidazol, Pyridoimidazol, Pyrazinoimidazol, Quinoxalinoimidazol, Oxazol, Benzoxazol, Naphthooxazol, Anthroxazol, Phenanthroxazol, Isoxazol, 1,2-Thiazol, 1,3-Thiazol, Benzothiazol, Pyridazin, Benzopyridazin, Pyrimidin, Benzopyrimidin, 1,3,5-Triazin, Quinoxalin, Pyrazin, Phenazin, Naphthyridin, Carbolin, Benzocarbolin, Phenanthrolin, 1,2,3-Triazol, 1,2,4-Triazol, Benzotriazol, 1,2,3-Oxadiazol, 1,2,4-Oxadiazol, 1,2,5-Oxadiazol, 1,2,3,4-Tetrazin, Purin, Pteridin, Indolizin und Benzothiadiazol oder Kombinationen der vorstehend erwähnten Gruppen.

**[0067]** Wie in der vorliegenden Anmeldung verwendet, kann der Begriff „zyklische Gruppe“ im weitesten Sinne als jegliche mono-, bi- oder polyzyklischen Einheiten verstanden werden.

**[0068]** Wie in der vorliegenden Anmeldung verwendet, kann der Begriff „Biphenyl“ als Substituent im weitesten Sinne als Ortho-Biphenyl, Meta-Biphenyl oder Para-Biphenyl verstanden werden, wobei Ortho, Meta und Para in Bezug auf die Bindestelle mit einer anderen chemischen Einheit definiert sind.

**[0069]** Wie in der vorliegenden Anmeldung verwendet, kann der Begriff „Alkylgruppe“ im weitesten Sinne als jeglicher linearer, verzweigter oder zyklischer Alkylsubstituent verstanden werden. Insbesondere umfasst der Begriff Alkyl die Substituenten Methyl (Me), Ethyl (Et), n-Propyl (<sup>n</sup>Pr), i-Propyl (<sup>i</sup>Pr), Cyclopropyl, n-Butyl (<sup>n</sup>Bu), i-Butyl (<sup>i</sup>Bu), s-Butyl (<sup>s</sup>Bu), t-Butyl (<sup>t</sup>Bu), Cyclobutyl, 2-Methylbutyl, n-Pentyl, s-Pentyl, t-Pentyl, 2-Pentyl, Neo-pentyl, Cyclopentyl, n-Hexyl, s-Hexyl, t-Hexyl, 2-Hexyl, 3-Hexyl, Neo-hexyl, Cyclohexyl, 1-Methylcyclopentyl, 2-Methylpentyl, n-Heptyl, 2-Heptyl, 3-Heptyl, 4-Heptyl, Cycloheptyl, 1-Methylcyclohexyl, n-Octyl, 2-Ethylhexyl, Cyclooctyl, 1-Bicyclo[2,2,2]octyl, 2-Bicyclo[2,2,2]-octyl, 2-(2,6-Dimethyl)octyl, 3-(3,7-Dimethyl)octyl, Adamantyl, 2,2,2-Trifluorethyl, 1,1-Dimethyl-n-hex-1-yl, 1,1-Dimethyl-n-hept-1-yl, 1,1-Dimethyl-n-oct-1-yl, 1,1-Dimethyl-n-dec-1-yl, 1,1-Dimethyl-n-dodec-1-yl, 1,1-Dimethyl-n-tetradec-1-yl, 1,1-Dimethyl-n-hexadec-1-yl, 1,1-Dimethyl-n-Octadec-1-yl, 1,1-Diethyl-n-hex-1-yl, 1,1-Diethyl-n-hept-1-yl, 1,1-Diethyl-n-oct-1-yl, 1,1-Diethyl-n-dec-1-yl, 1,1-Diethyl-n-dodec-1-yl, 1,1-Diethyl-n-tetradec-1-yl, 1,1-Diethyl-n-hexadec-1-yl, 1,1-Diethyl-n-octadec-1-yl, 1-(n-Propyl)-cyclohex-1-yl, 1-(n-Butyl)-cyclohex-1-yl, 1-(n-Hexyl)-cyclohex-1-yl, 1-(n-Octyl)-cyclohex-1-yl und 1-(n-Decyl)-cyclohex-1-yl.

**[0070]** Wie in der vorliegenden Anmeldung verwendet, umfasst der Begriff „Alkenyl“ lineare, verzweigte und zyklische Alkenylsubstituenten. Der Begriff Alkenylgruppe umfasst exemplarisch die Substituenten Ethenyl, Propenyl, Butenyl, Pentenyl, Cyclopentenyl, Hexenyl, Cyclohexenyl, Heptenyl, Cycloheptenyl, Octenyl, Cyclooctenyl oder Cyclooctadienyl.

**[0071]** Wie in der vorliegenden Anmeldung verwendet, umfasst der Begriff „Alkynyl“ lineare, verzweigte und zyklische Alkynylsubstituenten. Der Begriff „Alkynylgruppe“ umfasst exemplarisch Ethynyl, Propynyl, Butynyl, Pentynyl, Hexynyl, Heptynyl oder Octynyl.

**[0072]** Wie in der vorliegenden Anmeldung verwendet, umfasst der Begriff Alkoxy lineare, verzweigte und zyklische Alkoxysubstituenten. Der Begriff Alkoxygruppe umfasst exemplarisch Methoxy, Ethoxy, n-Propoxy, i-Propoxy, n-Butoxy, i-Butoxy, s-Butoxy, t-Butoxy und 2-Methylbutoxy.

**[0073]** Wie in der vorliegenden Anmeldung verwendet, umfasst der Begriff Thioalkoxy lineare, verzweigte und zyklische Thioalkoxysubstituenten, in denen das O der exemplarischen Alkoxygruppen durch S substituiert wird.

**[0074]** Wie in der vorliegenden Anmeldung verwendet, können die Begriffe „Halogen“ und „Halo“ im weitesten Sinne bevorzugt als Fluorin, Chlorin, Bromin oder Iodin verstanden werden.

**[0075]** Wenn Wasserstoff (H) hierin erwähnt wird, könnte es bei jedem Vorkommen auch durch Deuterium substituiert werden.

**[0076]** Es ist selbstverständlich, dass, wenn ein Molekularfragment als ein Substituent oder sonst mit einer anderen Einheit verbunden beschrieben wird, sein Name so geschrieben wird, als wäre es ein Fragment (z. B. Naphtyl, Dibenzofuryl) oder als wäre es das ganze Molekül (z. B. Naphthalen, Dibenzofuran). Wie hierin beschrieben, werden die verschiedenen Arten, einen Substituenten oder ein verbundenes Fragment zu bezeichnen, als gleichwertig betrachtet.

**[0077]** In einer Ausführungsform haben die organischen Moleküle gemäß der Erfindung eine Lebensdauer im angeregten Zustand von nicht mehr als 150  $\mu\text{s}$ , von nicht mehr als 100  $\mu\text{s}$ , insbesondere von nicht mehr als 50  $\mu\text{s}$ , bevorzugter von nicht mehr als 10  $\mu\text{s}$  oder nicht mehr als 7  $\mu\text{s}$  Polymethylmethacrylat (PMMA) mit 10 % Gew.-% organischer Moleküle bei Raumtemperatur.

**[0078]** In einer Ausführungsform der Erfindung stellen die organischen Moleküle gemäß der Erfindung thermisch aktivierte verzögerte Fluoreszenz (TADF)-Emmitter dar, die einen  $\Delta E_{\text{ST}}$ -Wert aufweisen, der dem Energieunterschied zwischen dem ersten angeregten Singulettzustand (S1) und dem ersten angeregten Triplettzustand (T1) von weniger als 5000  $\text{cm}^{-1}$ , bevorzugt weniger als 3000  $\text{cm}^{-1}$ , bevorzugter weniger als 1500  $\text{cm}^{-1}$ , noch bevorzugter weniger als 1000  $\text{cm}^{-1}$  oder sogar weniger als 500  $\text{cm}^{-1}$  entspricht.

**[0079]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung haben die organischen Moleküle gemäß der Erfindung einen Emissionspeak im sichtbaren oder nächsten Ultraviolettbereich, d. h. im Bereich einer Wellenlänge von 380 bis 800 nm, mit einer vollen Breite beim halben Maximum von weniger als 0,50 eV, bevorzugt weniger als 0,48 eV, bevorzugter weniger als 0,45 eV, noch bevorzugter weniger als 0,43 eV oder sogar weniger als 0,40 eV in einer Folie aus Polymethylmethacrylat (PMMA) mit 10 Gew.-% organischem Molekül bei Raumtemperatur.

**[0080]** In einer weiteren Ausführungsform der Erfindung haben die organischen Moleküle gemäß der Erfindung einen „blauen Materialindex“ (BMI), der durch Teilen der Photolumineszenz-Quantenausbeute (Photoluminescence Quantum Yield, PLQY) in Prozent durch die CIEy-Farbkoordinate des emittierten Lichts berechnet wird, von mehr als 150, insbesondere mehr als 200, bevorzugt mehr als 250, bevorzugter von mehr als 300 oder sogar mehr als 500.

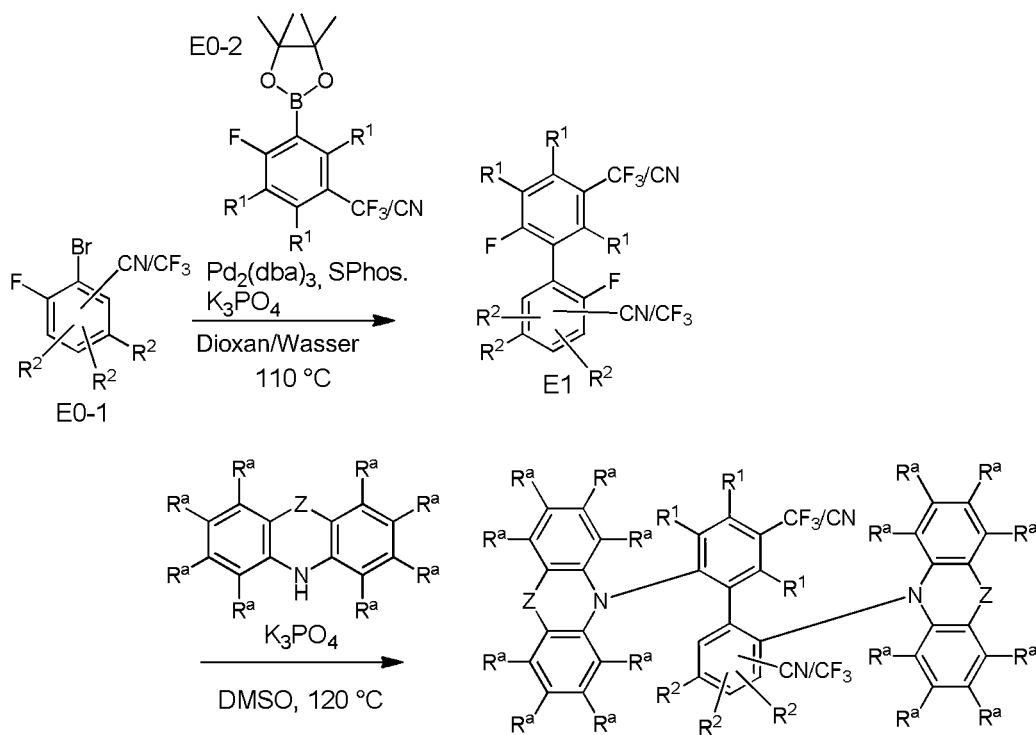
**[0081]** Orbital- und Anregungszustandsenergien können entweder mittels Experimentalverfahren oder durch Berechnungen ermittelt werden, die quantenchemische Verfahren anwenden, insbesondere Dichtfunktionaltheorieberechnungen. Die Energie des höchsten besetzten Molekülorbitals  $E^{\text{HOMO}}$  wird durch Verfahren ermittelt, die einem Fachmann aus zyklischen Voltammetriemessungen mit einer Genauigkeit von 0,1 eV bekannt sind. Die Energie des niedrigsten unbesetzten Molekülorbitals  $E^{\text{LUMO}}$  wird als der Beginn des Absorptionsspektrums bestimmt.

**[0082]** Der Beginn des Emissionsspektrums wird durch Berechnen des Schnittpunkts der Tangente des Emissionsspektrums mit der x-Achse bestimmt. Die Tangente des Emissionsspektrums wird auf der Niedrigenergieseite des Absorptionsbands und am Punkt des halben Maximums der maximalen Intensität des Absorptionsspektrums eingestellt.

**[0083]** Die Energie des ersten angeregten Triplettzustands T1 wird vom Beginn des Emissionsspektrums bei niedriger Temperatur, normalerweise 77 K, ermittelt. Für Wirtsverbindungen, bei denen der erste angeregte Singlettzustand und der niedrigste Triplettzustand energetisch durch mehr als 0,4 eV getrennt sind, ist die Phosphoreszenz normalerweise in einem Steady-State-Spektrum in 2-Me-THF sichtbar. Die Triplettenergie kann somit als Beginn des Phosphoreszenzspektrums ermittelt werden. Für TADF-Emittermoleküle wird die Energie des ersten angeregten Triplettzustands T1 vom Beginn des verzögerten Emissionsspektrums bei 77 K ermittelt, sofern nicht anders angegeben, gemessen in einer Folie aus PMMA mit 10 Gew.-% des Emitters. Sowohl für Wirts- als auch Emittterverbindungen wird die Energie des ersten angeregten Singlettzustands S1 vom Beginn des Emissionsspektrums ermittelt, sofern nicht anders angegeben, gemessen in einer Folie aus PMMA mit 10 Gew.-% der Wirts- oder Emittterverbindung.

**[0084]** Der Beginn des Emissionsspektrums wird durch Berechnen des Schnittpunkts der Tangente des Emissionsspektrums mit der X-Achse berechnet. Die Tangente des Emissionsspektrums wird auf der Hochenergieseite des Emissionsbands und am Punkt beim halben Maximum der maximalen Intensität des Emissionsspektrums eingestellt.

**[0085]** Ein weiterer Aspekt der Erfindung betrifft einen Prozess zum Herstellen organischer Moleküle (mit einer optionalen nachfolgenden Reaktion) gemäß der Erfindung, wobei ein R<sup>2</sup>-substituiertes cyano/trifluormethyl-substituiertes 1-Brom-2-fluorphenyl als Reaktionsmittel verwendet wird:



**[0086]** Gemäß der Erfindung kann bei der Reaktion für die Synthese von E1 eine Boronsäure oder ein entsprechender Boronsäureester anstatt eines Boronsäurepinakolesters verwendet werden.

**[0087]** Normalerweise wird Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (tris (dibenzylideneacetone)dipalladium (0)) als ein Pd-Katalysator verwendet, es sind aber Alternativen auf dem Fachgebiet bekannt. Beispielsweise kann der Ligand aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus S-Phos ([2-dicyclohexylphosphino-2',6'-dimethoxy-1,1'-biphenyl]); oder SPhos), X-Phos (2-(Dicyclohexylphosphino)-2'',4'',6''-triisopropylbiphenyl; oder XPhos) und P(Cy)<sub>3</sub> (Tricyclohexylphosphin) besteht. Das Salz wird beispielsweise aus Trikaliumphosphat und Kaliumacetat ausgewählt und das Lösungsmittel kann ein reines Lösungsmittel, wie beispielsweise Toluol oder Dioxan, oder ein Gemisch, wie beispielsweise Toluol/Dioxan/Wasser oder Dioxan/Toluol, sein. Ein Fachmann kann bestimmen, welcher Pd-Katalysator, Ligand, welches Salz und welche Lösungsmittelkombination hohe Reaktionsausbeuten ergibt.

**[0088]** Für die Reaktion eines Stickstoff-Heterozyklus in einer nukleophilen aromatischen Substitution mit einem Arylhalid, bevorzugt einem Arylfluorid, beinhalten typische Bedingungen die Verwendung einer Basis, wie z. B. dreibasischem Kaliumphosphat oder Natriumhydrid, in einem aprotischen polaren Lösungsmittel, wie z. B. Dimethylsulfoxid (DMSO) oder N,N-Dimethylformamid (DMF).



**[0089]** Ein alternativer Syntheseweg umfasst die Einführung eines Stickstoff-Heterozyklus über kupfer- oder palladium-katalysierte Kopplung mit einem Arylhalid oder Arylpseudohalid, bevorzugt einem Arylbromid, einem Aryliodid, einem Aryltriflat oder einem Aryltosylat.

**[0090]** Ein weiterer Aspekt der Erfindung betrifft die Verwendung eines organischen Moleküls gemäß der Erfindung als Lumineszenzemitter oder Absorber und/oder als Wirtsmaterial und/oder als Elektronentransportmaterial und/oder als Lochinjektionsmaterial und/oder als Lochblockierungsmaterial in einer organischen optoelektronischen Vorrichtung.

**[0091]** Die organische elektrolumineszierende Vorrichtung kann im weitesten Sinne als jede Vorrichtung verstanden werden, die auf organischen Materialien basiert, die für das Emittieren von Licht im sichtbaren oder nächsten Ultraviolett (UV)-Bereich geeignet ist, d. h., im Bereich einer Wellenlänge von 380 nm bis 800 nm. Bevorzugter kann die organische elektrolumineszierende Vorrichtung in der Lage sein, Licht im sichtbaren Bereich zu emittieren, d. h., von 400 nm bis 800 nm.

**[0092]** Im Zusammenhang mit einer solchen Verwendung wird die optoelektronische Vorrichtung insbesondere aus der Gruppe ausgewählt, die aus Folgendem besteht:

- organischen Leuchtdioden (OLEDs),
- lichtemittierende elektrochemische Zellen,
- OLED-Sensoren, insbesondere Gas- und Dampfsensoren, die nicht hermetisch außen abgeschirmt sind,
- organische Dioden,
- organischen Solarzellen,
- organischen Transistoren,
- organischen Feldeffekttransistoren,
- organischen Laser und
- Abwärtskonversionselementen.

**[0093]** In einer bevorzugten Ausführungsform im Zusammenhang mit einer solchen Verwendung ist die organische elektrolumineszierende Vorrichtung eine Vorrichtung, die aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus einer organischen Leuchtdiode (Organic Light Emitting Diode, OLED), einer lichtemittierenden elektrochemischen Zelle (Light Emitting Electrochemical Cell, LEC) und einem lichtemittierenden Transistor besteht.

**[0094]** Im Fall der Verwendung ist die Fraktion des organischen Moleküls gemäß der Erfindung in der Emissionsschicht in einer organischen optoelektronischen Vorrichtung und insbesondere in OLEDs 1 bis 99 Gew.-%, insbesondere 5 bis 80 Gew.-%. In einer alternativen Ausführungsform ist der Anteil des organischen Moleküls in der Emissionsschicht 100 Gew.-%.

**[0095]** In einer Ausführungsform umfasst die lichtemittierende Schicht nicht nur die organischen Moleküle gemäß der Erfindung, sondern auch ein Wirtsmaterial, dessen Triplett- (T1) und Singlett- (S1) -Energieniveaus energetisch höher sind als die Triplett- (T1) und Singlett- (S1) -Energieniveaus des organischen Moleküls.

**[0096]** Ein weiterer Aspekt der Erfindung betrifft eine Zusammensetzung, die Folgendes umfasst oder aus Folgendem besteht:

- (a) mindestens ein organisches Molekül gemäß der Erfindung, insbesondere in Form eines Emitters und/oder eines Wirts, und
- (b) ein oder mehrere Emitter- und/oder Wirtsmaterialien, die sich vom organischen Molekül gemäß der Erfindung unterscheiden, und
- (c) optional einen oder mehrere Farbstoffe und/oder ein oder mehrere Lösungsmittel.

**[0097]** In einer Ausführungsform umfasst die lichtemittierende Schicht (oder besteht (im Wesentlichen) daraus) eine Zusammensetzung, die Folgendes umfasst oder aus Folgendem besteht:

- (a) mindestens ein organisches Molekül gemäß der Erfindung, insbesondere in Form eines Emitters und/oder eines Wirts, und
- (b) ein oder mehrere Emitter- und/oder Wirtsmaterialien, die sich vom organischen Molekül gemäß der Erfindung unterscheiden, und
- (c) optional einen oder mehrere Farbstoffe und/oder ein oder mehrere Lösungsmittel.

**[0098]** Insbesondere bevorzugt umfasst die lichtemittierende Schicht EML (oder besteht (im Wesentlichen) daraus) eine Zusammensetzung, die Folgendes umfasst oder aus Folgendem besteht:

- (i) 1 bis 50 Gew.-%, bevorzugt 5 bis 40 Gew.-%, insbesondere 10 bis 30 Gew.-% von einem oder mehreren organischen Molekülen gemäß der Erfindung E;
- (ii) 5 bis 99 Gew.-%, bevorzugt 30 bis 94,9 Gew.-%, insbesondere 40 bis 89 Gew.-% von mindestens einer Wirtsverbindung H; und
- (iii) optional 0 bis 94 Gew.-%, bevorzugt 0,1 bis 65 Gew.-%, insbesondere 1 bis 50 Gew.-% von mindestens einer weiteren Wirtsverbindung D mit einer Struktur, die sich von der Struktur der Moleküle gemäß der Erfindung unterscheidet; und
- (iv) optional 0 bis 94 Gew.-%, bevorzugt 0 bis 65 Gew.-%, insbesondere 0 bis 50 Gew.-% eines Lösungsmittels; und
- (v) optional 0 bis 30 Gew.-%, insbesondere 0 bis 20 Gew.-%, bevorzugt 0 bis 5 Gew.-% von mindestens einem weiteren Emittermolekül F mit einer Struktur, die sich von der Struktur der Moleküle gemäß der Erfindung unterscheidet.

**[0099]** Energie von der Wirtsverbindung H kann bevorzugt auf das eine oder die mehreren organischen Molekülen gemäß der Erfindung E übertragen werden, insbesondere von dem ersten angeregten Triplettzustand T1(H) der Wirtsverbindung H zu dem ersten angeregten Triplettzustand T1(E) des einen oder der mehreren organischen Moleküle gemäß der Erfindung E und/oder von dem ersten angeregten Singlettzustand S1(H) der Wirtsverbindung H zu dem ersten angeregten Singlettzustand S1(E) des einen oder der mehreren organischen Moleküle gemäß der Erfindung E.

**[0100]** In einer weiteren Ausführungsform umfasst die lichtemittierende Schicht EML eine (oder besteht im Wesentlichen aus einer) Zusammensetzung, die Folgendes umfasst oder aus Folgendem besteht:

- (i) 1 bis 50 Gew.-%, bevorzugt 5 bis 40 Gew.-%, insbesondere 10 bis 30 Gew.-% von einem organischen Molekül gemäß der Erfindung E;
- (ii) 5 bis 99 Gew.-%, bevorzugt 30 bis 94,9 Gew.-%, insbesondere 40 bis 89 Gew.-% von einer Wirtsverbindung H; und
- (iii) optional 0 bis 94 Gew.-%, bevorzugt 0,1 bis 65 Gew.-%, insbesondere 1 bis 50 Gew.-% von mindestens einer weiteren Wirtsverbindung D mit einer Struktur, die sich von der Struktur der Moleküle gemäß der Erfindung unterscheidet; und
- (iv) optional 0 bis 94 Gew.-%, bevorzugt 0 bis 65 Gew.-%, insbesondere 0 bis 50 Gew.-% eines Lösungsmittels; und
- (v) optional 0 bis 30 Gew.-%, insbesondere 0 bis 20 Gew.-%, bevorzugt 0 bis 5 Gew.-% von mindestens einem weiteren Emittermolekül F mit einer Struktur, die sich von der Struktur der Moleküle gemäß der Erfindung unterscheidet.

**[0101]** In einer Ausführungsform hat die Wirtsverbindung H das höchste besetzte Molekülorbital HOMO(H), das eine Energie  $E^{\text{HOMO}}(\text{H})$  im Bereich von -5 bis -6,5 eV aufweist, und die mindestens eine weitere Wirtsverbindung D hat ein höchstes besetztes Molekülorbital HOMO(D), das eine Energie  $E^{\text{HOMO}}(\text{D})$  aufweist, wobei  $E^{\text{HOMO}}(\text{H}) > E^{\text{HOMO}}(\text{D})$ .

**[0102]** In einer weiteren Ausführungsform hat die Wirtsverbindung H ein niedrigstes nicht besetztes Molekülorbital LOMO(H), das eine Energie  $E^{\text{LOMO}}(\text{H})$  aufweist, und die mindestens eine weitere Wirtsverbindung D hat ein niedrigstes nicht besetztes Molekülorbital LOMO(D), das eine Energie  $E^{\text{LOMO}}(\text{D})$  aufweist, wobei  $E^{\text{LOMO}}(\text{H}) > E^{\text{LOMO}}(\text{D})$ .

**[0103]** In einer Ausführungsform hat die Wirtsverbindung H ein höchstes besetztes Molekülorbital HOMO(H), das eine Energie  $E^{\text{HOMO}}(\text{H})$  aufweist, und ein niedrigstes nicht besetztes Molekülorbital LUMO(H), das eine Energie  $E^{\text{LUMO}}(\text{H})$  aufweist, und

die mindestens eine weitere Wirtsverbindung H hat ein höchstes besetztes Molekülorbital HOMO(D), das eine Energie  $E^{\text{HOMO}}(\text{D})$  aufweist, und ein niedrigstes nicht besetztes Molekülorbital LUMO(D), das eine Energie  $E^{\text{LUMO}}(\text{D})$  aufweist,

das organische Molekül gemäß der Erfindung E hat ein höchstes besetztes Molekülorbital HOMO(E), das eine Energie  $E^{\text{HOMO}}(\text{E})$  aufweist, und ein niedrigstes nicht besetztes Molekülorbital LUMO(E), das eine Energie  $E^{\text{LUMO}}(\text{E})$  aufweist,

wobei

$E^{\text{HOMO}}(\text{H}) > E^{\text{HOMO}}(\text{D})$  und der Unterschied zwischen dem Energieniveau des höchsten besetzten Molekülorbitals HOMO(E) des organischen Moleküls gemäß der Erfindung E ( $E^{\text{HOMO}}(\text{E})$ ) und dem Energieniveau des höchsten besetzten Molekülorbitals HOMO(H) der Wirtsverbindung H ( $E^{\text{HOMO}}(\text{H})$ ) ist zwischen -0,5 eV und 0,5 eV, bevorzugter zwischen -0,3 eV und 0,3 eV, noch bevorzugter zwischen -0,2 eV und 0,2 eV oder sogar zwischen -0,1 eV und 0,1 eV; und

$E^{\text{LUMO}}(\text{H}) > E^{\text{LUMO}}(\text{D})$  und der Unterschied zwischen dem Energieniveau des niedrigsten nicht besetzten Molekülorbitals LUMO(E) des organischen Moleküls gemäß der Erfindung E ( $E^{\text{LUMO}}(\text{E})$ ) und dem niedrigsten nicht besetzten Molekülorbital LUMO(D) der mindestens einen weiteren Wirtsverbindung D ( $E^{\text{LUMO}}(\text{D})$ ) ist zwischen -0,5 eV und 0,5 eV, bevorzugter zwischen -0,3 eV und 0,3 eV, noch bevorzugter zwischen -0,2 eV und 0,2 eV oder sogar zwischen -0,1 eV und 0,1 eV.

**[0104]** In einem weiteren Aspekt betrifft die Erfindung eine optoelektronische Vorrichtung, die ein organisches Molekül oder eine Zusammensetzung des hier beschriebenen Typs umfasst, insbesondere in Form einer Vorrichtung, die aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus organischer Leuchtdiode (Organic Light-Emitting Diode, OLED), lichtemittierender elektrochemischer Zelle, OLED-Sensor, insbesondere Gas- und Dampfsensoren, die nicht hermetisch außen abgeschirmt sind, organischer Diode, organischer Solarzelle, organischem Transistor, organischem Feldeffekttransistor, organischem Laser und Abwärtskonversionselement ausgewählt wird.

**[0105]** In einer bevorzugten Ausführungsform ist die organische elektrolumineszierende Vorrichtung eine Vorrichtung, die aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus einer organischen Leuchtdiode (Organic Light Emitting Diode, OLED), einer lichtemittierenden elektrochemischen Zelle (Light Emitting Electrochemical Cell, LEC) und einem lichtemittierenden Transistor ausgewählt wird.

**[0106]** In einer Ausführungsform der optoelektronischen Vorrichtung der Erfindung wird das organische Molekül der Erfindung E als Emissionsmaterial in einer lichtemittierenden Schicht EML verwendet.

**[0107]** In einer Ausführungsform der optoelektronischen Vorrichtung der Erfindung besteht die lichtemittierende Schicht EML aus der hier beschriebenen Zusammensetzung der Erfindung.

**[0108]** Exemplarisch kann, wenn die organische elektrolumineszierende Vorrichtung eine OLED ist, diese die folgende Schichtstruktur aufweisen:

1. Substrat
2. Anodenschicht A
3. Lochinjektionsschicht, HIL
4. Lochtransportschicht, HTL
5. Elektronenblockierschicht, EBL
6. emittierende Schicht, EML
7. Lochblockierschicht, HBL
8. Elektronentransportschicht, ETL
9. Elektroneninjectionsschicht, EIL
10. Kathodenschicht,

wobei die OLED jede Schicht nur optional umfasst, verschiedene Schichten zusammengeführt werden können und die OLED mehr als eine Schicht jedes der oben definierten Schichttypen umfassen kann.

**[0109]** Außerdem kann die organische elektrolumineszierende Vorrichtung optional eine oder mehrere Schutzschichten umfassen, die die Vorrichtung vor schädigender Exposition schädlicher Arten in der Umgebung schützen können, einschließlich z. B. Feuchtigkeit, Dampf und/oder Gase.

**[0110]** In einer Ausführungsform der Erfindung ist die organische elektrolumineszierende Vorrichtung eine OLED, die die folgende invertierte Schichtstruktur aufweist:

1. Substrat
2. Kathodenschicht
3. Elektroneninjectionsschicht, EIL
4. Elektronentransportschicht, ETL
5. Lochblockierschicht, HBL
6. emittierende Schicht, B
7. Elektronenblockierschicht, EBL
8. Lochtransportschicht, HTL
9. Lochinjectionsschicht, HIL
10. Anodenschicht A

wobei die OLED mit einer invertierten Schichtstruktur jede Schicht nur optional umfasst, verschiedene Schichten zusammengeführt werden können und die OLED mehr als eine Schicht jedes der oben definierten Schichttypen umfassen kann.

**[0111]** In einer Ausführungsform der Erfindung ist die organische elektrolumineszierende Vorrichtung eine OLED, die eine gestapelte Architektur aufweisen kann. In dieser Architektur sind, im Gegensatz zur typischen Anordnung, in der die OLEDs nebeneinander platziert sind, die einzelnen Einheiten aufeinander gestapelt. Mischlicht kann mit OLEDs erzeugt werden, die eine gestapelte Architektur aufweisen, insbesondere weißes Licht kann durch Stapeln blauer, grüner und roter OLEDs erzeugt werden. Außerdem kann die OLED, die eine gestapelte Architektur aufweist, optional eine Ladungserzeugungsschicht (Charge Generation Layer, CGL) umfassen, die sich normalerweise zwischen zwei OLED-Untereinheiten befindet und aus einer n-dotierten und p-dotierten Schicht besteht, wobei die n-dotierte Schicht einer CGL sich normalerweise näher bei der Anodenschicht befindet.

**[0112]** In einer Ausführungsform der Erfindung ist die organische elektrolumineszierende Vorrichtung eine OLED, die zwei oder mehr Emissionsschichten zwischen Anode und Kathode umfasst. Insbesondere umfasst diese so genannte Tandem-OLED drei Emissionsschichten, wobei eine Emissionsschicht rotes Licht emittiert, eine Emissionsschicht grünes Licht emittiert und eine Emissionsschicht blaues Licht emittiert, und sie kann optional weitere Schichten umfassen, wie z. B. Ladungserzeugungsschichten, Blockier- oder Transportschichten zwischen den einzelnen Emissionsschichten. In einer weiteren Ausführungsform sind die Emissionsschichten angrenzend gestapelt. In einer weiteren Ausführungsform umfasst die Tandem-OLED eine Ladungserzeugungsschicht zwischen den zwei jeweiligen Emissionsschichten. Außerdem können angrenzende Emissionsschichten oder Emissionsschichten, die durch eine Ladungserzeugungsschicht getrennt sind, zusammengeführt werden.

**[0113]** Das Substrat kann durch jedes Material oder jede Zusammensetzung von Materialien gebildet sein. Am häufigsten werden Glasplättchen als Substrate verwendet. Alternativ können dünne Metallschichten (z. B. Kupfer-, Gold-, Silber- oder Aluminiumfolien) oder Kunststofffolien oder -plättchen verwendet werden. Dies kann einen höheren Grad an Flexibilität erlauben. Die Anodenschicht A besteht meistens aus Materialien, die den Erhalt einer (im Wesentlichen) transparenten Folie erlauben. Da mindestens eine der beiden Elektroden (im Wesentlichen) transparent sein sollte, um Lichtemission von der OLED zu erlauben, ist entweder die Anodenschicht A oder die Kathodenschicht C transparent. Bevorzugt umfasst die Anodenschicht A einen großen Gehalt von oder besteht sogar aus transparenten leitfähigen Oxiden (Transparent Conductive Oxides, TCOs). Eine solche Anodenschicht A kann exemplarisch Indiumzinnoxid, Aluminiumzinkoxid, fluordotiertes Zinnoxid, Indiumzinkoxid, PbO, SnO, Zirkoniumoxid, Molybdänoxid, Vanadiumoxid, Wolframoxid, Graphit, dotiertes Si, dotiertes Ge, dotiertes GaAs, dotiertes Polyanilin, dotiertes Polypyrrol und/oder dotiertes Polythiopen umfassen.

**[0114]** Die Anodenschicht A besteht besonders bevorzugt (im Wesentlichen) aus Indiumzinnoxid (ITO) (z. B.  $(\text{InO}_3)_{0.9}(\text{SnO}_2)_{0.1}$ ). Die Rauheit der Anodenschicht A, die durch die transparenten leitfähigen Oxide (Transparent Conductive Oxides, TCOs) verursacht wird, kann durch Verwendung einer Lochinjektionsschicht (Hole Injection Layer, HIL) kompensiert werden. Ferner kann die HIL die Injektion von Quasi-Ladungsträgern (d. h. Löchern) ermöglichen, indem der Transport der Quasi-Ladungsträger vom TCO zur Lochtransportsschicht (Hole Transport Layer, HTL) ermöglicht wird. Die Lochinjektionsschicht (Hole Injection Layer, HIL) kann Poly-3,4-ethylendioxythiophen (PEDOT), Polystyrolsulfonat (PSS),  $\text{MoO}_2$ ,  $\text{V}_2\text{O}_5$ , CuPC oder CuI, insbesondere ein Gemisch aus PEDOT und PSS umfassen. Die Lochinjektionsschicht (Hole Injection Layer, HIL) kann außerdem die Diffusion der Metalle von der Anodenschicht A in die Lochtransportsschicht (Hole Transport Layer, HTL) verhindern. Die HIL kann exemplarisch PEDOT:PSS (Poly-3,4-ethylendioxythiophen: Polystyrolsulfonat), PEDOT (Poly-3,4-ethylendioxythiophen), mMTDATA (4,4',4''-Tris[phenyl(m-tolyl)amino]triphenylamin), Spiro-TAD (2,2',7,7'-Tetrakis(n,n-diphenylamino)-9,9'-spirobifluoren), DNTPD (N1,N1'-(Biphenyl-4,4'-diyl)bis(N1-phenyl-N4,N4-di-m-tolylbenzen-1,4-diamin), NPB (N,N'-Nis-(1-naphthalenyl)-N,N'-bis-phenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamin), NPNPB (N,N'-Diphenyl-N,N'-di-[4-(N,N-diphenyl-amino)phenyl]benzidin), MeO-TPD (N,N,N',N'-Tetrakis(4-methoxyphenyl)benzidin), HAT-CN (1,4,5,8,9,11-Hexaazatriphenylen-hexacarbonitril) und/oder Spiro-NPD (N,N'-Diphenyl-N,N'-bis-(1-naphthyl)-9,9'-spirobifluoren-2,7-diamin) umfassen.

**[0115]** Neben der Anodenschicht A oder der Lochinjektionsschicht (Hole Injection Layer, HIL) befindet sich normalerweise eine Lochtransportsschicht (Hole Transport Layer, HTL). Hierin kann jede Lochtransportverbindung verwendet werden. Es können exemplarisch elektronenreiche heteroaromatische Verbindungen wie Triarylamine und/oder Carbazole als Lochtransportverbindung verwendet werden. Die HTL kann die Energiebarriere zwischen der Anodenschicht A und der lichtemittierenden Schicht EML verringern. Die Lochtransportsschicht (Hole Transport Layer, HTL) kann auch eine Elektronenblockierungsschicht (Electron Blocking Layer, EBL) sein. Bevorzugt weisen Lochtransportverbindungen ein vergleichbar hohes Energieniveau wie ihre Triplettzustände T1 auf. Die Lochtransportsschicht (Hole Transport Layer, HTL) kann exemplarisch einen sternförmigen Heterozyklus wie Tris(4-carbazoyl-9-ylphenyl)amin (TCTA), Poly-TPD (Poly(4-butylphenyl-diphenyl-amin)), [alpha]-NPD (Poly(4-butylphenyl-diphenyl-amin)), TAPC (4,4'-Cyclohexyliden-bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamin]), 2-TNATA (4,4',4''-tris[2-naphthyl(phenyl)amino]triphenylamin), Spiro-TAD, DNTPD, NPB, NPNPB, MeO-TPD, HAT-CN und/oder TrisPcz (9,9'-Diphenyl-6-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)-9H,9'H-3,3'-bicarbazol) umfassen. Außerdem kann die HTL eine p-dotierte Schicht umfassen, die aus einem anorganischen oder organischen Dotierungsmittel in einer organischen lochtransportierenden Matrix besteht. Übergangsmetalloxide wie Vanadiumoxid, Molybdenoxid oder Wolframoxid können exemplarisch als anorganisches Dotierungsmittel verwendet werden. Tetrafluortetracyanoquinodimethan ( $\text{F}_4\text{-TCNQ}$ ), Kupfer-Pentafluorbenzoat ( $\text{Cu(I)pFBz}$ ) oder Übergangsmetallkomplexe können exemplarisch als organisches Dotierungsmittel verwendet werden.

**[0116]** Die EBL kann exemplarisch mCP (1,3-Bis(carbazol-9-yl)benzen), TCTA, 2-TNATA, mCBP (3,3-Di(9H-carbazol-9-yl)biphenyl), Tris-Pcz, CzSi (9-(4-Tert-Butylphenyl)-3,6-bis(triphenylsilyl)-9H-carbazol), und/oder DCB (N,N'-Dicarbazolyl-1,4-dimethylbenzen) umfassen.

**[0117]** Neben der Lochtransportsschicht (Hole Transport Layer, HTL) befindet sich normalerweise die lichtemittierende Schicht EML. Die lichtemittierende Schicht EML umfasst mindestens ein lichtemittierendes Molekül. Insbesondere umfasst die EML mindestens ein lichtemittierendes Molekül gemäß der Erfindung E. In einer Ausführungsform umfasst die lichtemittierende Schicht nur die organischen Moleküle gemäß der Erfindung E. Normalerweise umfasst die EML ein oder mehrere Wirtsmaterialien H. Exemplarisch wird das Wirtsmaterial ausgewählt aus CBP (4,4'-Bis-(N-carbazolyl)-biphenyl), mCP, mCBP Sif87 (Dibenzo[b,d]thiophen-2-yltriphenylsilan), CzSi, SimCP ([3,5-Di(9H-carbazol-9-yl)phenyl]triphenylsilan), Sif88 (Dibenzo[b,d]thiophen-2-yl)diphenylsilan), DPEPO (Bis[2-(diphenylphosphino)phenyl] etheroxid), 9-[3-(Dibenzofuran-2-yl)phenyl]-9H-carbazol, 9-[3-(Dibenzofuran-2-yl)phenyl]-9H-carbazol, 9-[3-(Dibenzothiophen-2-yl)phenyl]-9H-carbazol, 9-[3,5-Bis(2-dibenzofuranyl)phenyl]-9H-carbazol, 9-[3,5-Bis(2-dibenzothiophenyl)phenyl]-9H-carbazol, T2T (2,4,6-Tris(biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazin), T3T (2,4,6-Tris(triphenyl-3-yl)-1,3,5-triazin) und/oder TST (2,4,6-Tris(9,9'-spirobifluoren-2-yl)-1,3,5-triazin). Das Wirtsmaterial H sollte normalerweise so ausgewählt werden, dass es erste Triplett- (T1) und erste Singlett- (S1) -Energieniveaus aufweist, die energetisch höher sind als die ersten Triplett- (T1) und ersten Singlett- (S1) -Energieniveaus des organischen Moleküls.

**[0118]** In einer Ausführungsform der Erfindung umfasst die EML ein so genanntes gemischtes Wirtssystem mit mindestens einem lochdominanten Wirt und einem elektronendominanten Wirt. In einer besonderen Ausführungsform umfasst die EML genau ein lichtemittierendes Molekül gemäß der Erfindung E und ein gemischtes Wirtssystem, das T2T als elektronendominanten Wirt und einen Wirt, der aus CBP, mCP, mCBP, 9-[3-(Dibenzofuran-2-yl)phenyl]-9H-carbazol, 9-[3-(Dibenzofuran-2-yl)phenyl]-9H-carbazol, 9-[3-(Dibenzothiophen-2-

yl)phenyl]-9H-carbazol, 9-[3,5-Bis(2-dibenzofuranyl)phenyl]-9H-carbazol und 9-[3,5-Bis(2-dibenzothiophenyl)phenyl]-9H-carbazol ausgewählt wird, als lochdominanten Wirt umfasst. In einer weiteren Ausführungsform umfasst die EML 50 bis 80 Gew.-%, bevorzugt 60 bis 75 Gew.-% eines Wirts, der aus CBP, mCP, mCBP, 9-[3-(Dibenzofuran-2-yl)phenyl]-9H-carbazol, 9-[3-(Dibenzofuran-2-yl)phenyl]-9H-carbazol, 9-[3-(Dibenzothiophen-2-yl)phenyl]-9H-carbazol, 9-[3,5-Bis(2-dibenzofuranyl)phenyl]-9H-carbazol und 9-[3,5-Bis(2-dibenzothiophenyl)phenyl]-9H-carbazol, ausgewählt wird; 10 bis 45 Gew.-%, bevorzugt 15 bis 30 Gew.-% T2T und 5 bis 40 % Gew.-%, bevorzugt 10 bis 30 Gew.-% lichtemittierendes Molekül gemäß der Erfindung.

**[0119]** Neben der lichtemittierenden Schicht EML kann sich eine Elektronentransportschicht (Electron Transport Layer, ETL) befinden. Hierin kann jeder Elektronentransporter verwendet werden. Exemplarisch können elektronenarme Verbindungen, wie z. B. Benzimidazole, Pyridine, Triazole, Oxadiazole (z. B. 1,3,4-Oxadiazol), Phosphinoxide und Sulfon, verwendet werden. Ein Elektronentransporter kann auch ein sternförmiger Heterozyklus, wie z. B. 1,3,5-Tri(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl (TPBi), sein. Die ETL kann NBphen (2,9-Bis(naphthalen-2-yl)-4,7-diphenyl-1,10-phenanthrolin), Alq<sub>3</sub> (Aluminium-tris(8-hydroxyquinolin)), TSPO1 (Diphenyl-4-triphenylsilylphenyl-phosphinoxid), BPyTP2 (2,7-Di(2,2'-bipyridin-5-yl)triphenyl), Sif87 (Dibenzo[b,d]thiophen-2-yltriphenylsilan), Sif88 (Dibenzo[b,d]thiophen-2-yl)diphenylsilan), BmPyPhB (1,3-Bis[3,5-di(pyridin-3-yl)phenyl]benzen) und/oder BTB (4,4'-Bis-[2-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazinyl)]-1,1'-biphenyl) umfassen. Optional kann die ETL mit Materialien wie Liq dotiert sein. Die Elektronentransportschicht (Electron Transport Layer, ETL) kann außerdem Löcher blockieren oder es wird eine lochblockierende Schicht (Hole Blocking Layer, HBL) eingeführt.

Die HBL kann exemplarisch BCP (2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthrolin = Bathocuproin), BAq (Bis(8-hydroxy-2-methylquinolin)-(4-phenylphenoxy)aluminium), NBphen (2,9-Bis(naphthalen-2-yl)-4,7-diphenyl-1,10-phenanthrolin), Alq<sub>3</sub> (Aluminium-tris(8-hydroxyquinolin)), TSPO1 (Diphenyl-4-triphenylsilylphenyl-phosphinoxid), T2T (2,4,6-Tris(biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazin), T3T (2,4,6-Tris(triphenyl-3-yl)-1,3,5-triazin), TST (2,4,6-Tris(9,9'-spirobifluoren-2-yl)-1,3,5-triazin) und/oder TCB/TCP (1,3,5-Tris(N-carbazolyl)benzol/ 1,3,5-tris(carbazol-9-yl)-benzen) umfassen.

**[0120]** Neben der Elektronentransportschicht (Electron Transport Layer, ETL) kann sich eine Kathodenschicht C befinden. Die Kathodenschicht C kann exemplarisch ein Metall (z.B. Al, Au, Ag, Pt, Cu, Zn, Ni, Fe, Pb, LiF, Ca, Ba, Mg, In, W oder Pd) oder eine Metalllegierung umfassen oder daraus bestehen. Aus praktischen Gründen kann die Kathodenschicht auch aus (im Wesentlichen) intransparenten Metallen wie Mg, Ca oder Al bestehen. Alternativ oder zusätzlich kann die Kathodenschicht C auch Graphit oder Kohlenstoffnanoröhren (Carbon Nanotubes, CNTs) umfassen. Alternativ kann die Kathodenschicht C auch aus nanoskaligen Silberdrähten bestehen.

**[0121]** Eine OLED kann ferner optional eine Schutzschicht zwischen der Elektronentransportschicht (Electron Transport Layer, ETL) und der Kathodenschicht C (die als Elektroneninjektionsschicht (Electron Injection Layer, EIL) bezeichnet werden kann) umfassen. Diese Schicht kann Lithiumfluorid, Cäsiumfluorid, Silber, Liq (8-Hydroxyquinolinolatolithium), Li<sub>2</sub>O, BaF<sub>2</sub>, MgO und/oder NaF umfassen.

**[0122]** Optional können die Elektronentransportschicht (Electron Transport Layer, ETL) und/oder eine Lochblockierungsschicht (Hole Blocking Layer, HBL) eine oder mehrere Wirtsverbindungen H umfassen.

**[0123]** Um das Emissionsspektrum und/oder das Absorptionsspektrum der lichtemittierenden Schicht EML weiter zu modifizieren, kann die lichtemittierende Schicht EML ferner ein oder mehrere Emittiermoleküle F umfassen. Solche Emittiermoleküle F können jedes Emittiermolekül sein, das im Stand der Technik bekannt ist. Bevorzugt ist ein solches Emittiermolekül F ein Molekül mit einer Struktur, die sich von der Struktur der Moleküle gemäß der Erfindung E unterscheidet. Das Emittiermolekül F kann optional ein TADF-Emitter sein. Alternativ kann das Emittiermolekül F optional ein fluoreszierendes und/oder phosphoreszierendes Emittiermolekül sein, das in der Lage ist, das Emissionsspektrum und/oder das Absorptionsspektrum der lichtemittierenden Schicht EML zu verschieben. Exemplarisch können die Triplett- und/oder Singlett-Exzitonen vom Emittiermolekül gemäß der Erfindung E zum Emittiermolekül F übertragen werden, bevor sie durch Emittieren von Licht, das normalerweise rotverschoben ist im Vergleich zum Licht, das vom Emittiermolekül E emittiert wird, zum Grundzustand S<sub>0</sub> relaxieren. Optional kann das Emittiermolekül F auch zwei Photoneneffekte hervorrufen (d. h. die Absorption von zwei Photonen mit der Hälfte der Energie des Absorptionsmaximums).

**[0124]** Optional kann eine organische elektrolumineszierende Vorrichtung (z. B. eine OLED) exemplarisch eine im Wesentlichen weiße organische elektrolumineszierende Vorrichtung sein. Exemplarisch kann eine solche organische elektrolumineszierende Vorrichtung mindestens ein (tief-)blaues Emittiermolekül und ein

oder mehrere Emittiermoleküle sein, die grünes und/oder rotes Licht emittieren. Dann kann außerdem optional, wie oben beschrieben, Energiedurchlässigkeit zwischen zwei oder mehr Molekülen vorhanden sein.

**[0125]** Wie hierin verwendet, sofern im bestimmten Zusammenhang nicht genauer definiert, ist die Bezeichnung der Farben des emittierten und/oder absorbierten Lichts wie folgt:

Violett:	Wellenlängenbereich von >380 bis 420 nm;
Dunkelblau:	Wellenlängenbereich von >420 bis 480 nm;
Himmelblau:	Wellenlängenbereich von >480 bis 500 nm;
Grün:	Wellenlängenbereich von >500 bis 560 nm;
Gelb:	Wellenlängenbereich von >560 bis 580 nm;
Orange:	Wellenlängenbereich von >580 bis 620 nm;
Rot:	Wellenlängenbereich von >620 bis 800 nm.

**[0126]** In Bezug auf Emittiermoleküle beziehen sich solche Farben auf Emissionsmaxima. Daher weist ein dunkelblauer Emittier exemplarisch ein Emissionsmaximum im Bereich von >420 bis 480 nm, ein himmelblauer Emittier ein Emissionsmaximum im Bereich von >480 bis 500 nm, ein grüner Emittier ein Emissionsmaximum in einem Bereich von >500 bis 560 nm, ein roter Emittier ein Emissionsmaximum in einem Bereich von >620 bis 800 nm auf.

**[0127]** Ein dunkelblauer Emittier kann bevorzugt ein Emissionsmaximum von unter 480 nm, bevorzugter unter 470 nm, noch bevorzugter unter 465 nm oder sogar unter 460 nm haben. Es beträgt normalerweise über 420 nm, bevorzugt über 430 nm, bevorzugter über 440 nm oder sogar über 450 nm.

**[0128]** Demgemäß betrifft ein weiterer Aspekt der vorliegenden Erfindung eine OLED, die eine äußere Quantenausbeute bei 1000 cd/m<sup>2</sup> von mehr als 8 % aufweist, bevorzugter mehr als 10 %, bevorzugter von mehr als 13 %, noch bevorzugter von mehr als 15 % oder sogar mehr als 20 % und/oder ein Emissionsmaximum zwischen 420 nm und 500 nm, bevorzugt zwischen 430 nm und 490 nm, bevorzugter zwischen 440 nm und 480 nm und noch bevorzugter zwischen 450 nm und 470 nm aufweist und/oder einen LT80-Wert bei 500 cd/m<sup>2</sup> von mehr als 100 h, bevorzugt mehr als 200 h, bevorzugter mehr als 400 h, noch bevorzugter mehr als 750 h oder sogar mehr als 1000 h aufweist. Demgemäß betrifft ein weiterer Aspekt der vorliegenden Erfindung eine OLED, deren Emission eine CIEy-Farbkoordinate von weniger als 0,45, bevorzugt weniger als 0,30, bevorzugter weniger als 0,20 oder noch bevorzugter weniger als 0,15 oder sogar weniger als 0,10 aufweist.

**[0129]** Ein weiterer Aspekt der vorliegenden Erfindung betrifft eine OLED, die Licht bei einem bestimmten Farbpunkt emittiert. Gemäß der vorliegenden Erfindung emittiert die OLED Licht in einem schmalen Emissionsband (geringe Halbwertsbreite (Full Width At Half Maximum, FWHM)). In einem Aspekt emittiert die OLED gemäß der Erfindung Licht mit einer FWHM des Hauptemissionspeaks von weniger als 0,50 eV, bevorzugt weniger als 0,48 eV, bevorzugter weniger als 0,45 eV, noch bevorzugter weniger als 0,43 eV oder sogar weniger als 0,40 eV.

**[0130]** Ein weiterer Aspekt der vorliegenden Erfindung betrifft eine OLED, die Licht mit CIE<sub>x</sub>- und CIE<sub>y</sub>-Farbkoordinaten in der Nähe der CIE<sub>x</sub>- (= 0,131) und CIE<sub>y</sub>+ (= 0,046)-Farbkoordinaten der Primärfarbe blau (CIE<sub>x</sub> = 0,131 und CIE<sub>y</sub> = 0,046) emittiert, wie durch ITU-R-Empfehlung BT.2020 (Rec. 2020) empfohlen, und damit für die Verwendung in Ultra High Definition (UHD)-Displays, z. B. UHD-TVs geeignet ist. Demgemäß betrifft ein weiterer Aspekt der Erfindung eine OLED, deren Emission eine CIE<sub>x</sub>-Farbkoordinate zwischen 0,02 und 0,30 aufweist, bevorzugt zwischen 0,03 und 0,25, bevorzugter zwischen 0,05 und 0,20 oder noch bevorzugter zwischen 0,08 und 0,18 oder sogar zwischen 0,10 und 0,15 und/oder eine CIE<sub>y</sub>-Farbkoordinate zwischen 0,00 und 0,45, bevorzugt zwischen 0,01 und 0,30, bevorzugter zwischen 0,02 und 0,20 oder noch bevorzugter zwischen 0,03 und 0,15 oder sogar zwischen 0,04 und 0,10.

**[0131]** In einem weiteren Aspekt betrifft die Erfindung ein Verfahren zum Herstellen einer optoelektronischen Komponente. In diesem Fall wird ein organisches Molekül der Erfindung verwendet.

**[0132]** Die organische elektrolumineszierende Vorrichtung, insbesondere die OLED gemäß der vorliegenden Erfindung, kann durch jegliche Mittel der Dampfabscheidung und/oder Flüssigverarbeitung hergestellt werden. Demgemäß wird mindestens eine Schicht

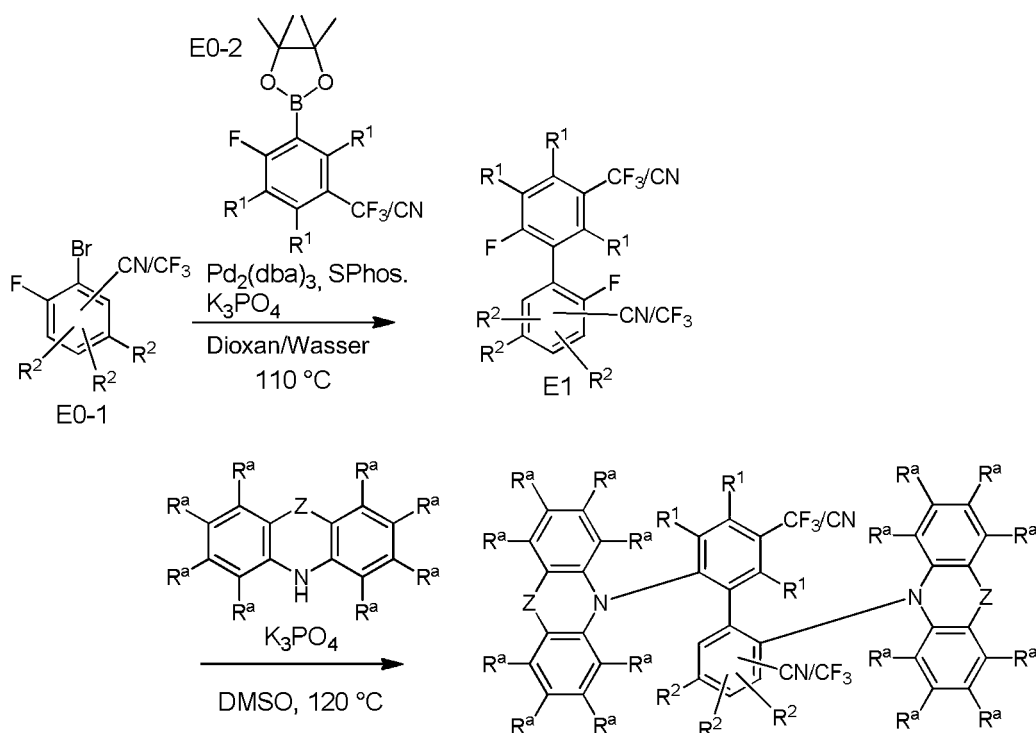
- mittels eines Sublimationsprozesses hergestellt,
- mittels eines organischen Dampfphasenabscheidungsprozesses hergestellt,
- mittels eines Trägergassublimationsprozesses hergestellt,
- lösungsverarbeitet oder gedruckt.

**[0133]** Die zum Herstellen der organischen elektrolumineszierenden Vorrichtung und insbesondere der OLED gemäß der vorliegenden Erfindung verwendeten Verfahren sind im Stand der Technik bekannt. Die verschiedenen Schichten werden einzeln und nacheinander mittels aufeinanderfolgender Abscheidungsprozesse auf ein geeignetes Substrat abgeschieden. Die einzelnen Schichten können mithilfe derselben oder unterschiedlicher Abscheidungsverfahren abgeschieden werden.

**[0134]** Dampfabscheidungsprozesse umfassen beispielsweise thermische (Ko-)Verdampfung, chemische Dampfabscheidung und physikalische Dampfabscheidung. Für aktive Matrix-OLED-Displays wird eine AMOLED-Rückwandplatine als Substrat verwendet. Die einzelne Schicht kann aus Lösungen oder Dispersionen verarbeitet werden, die geeignete Lösungsmittel nutzen. Der Lösungsabscheidungsprozess umfasst exemplarisch Rotationsbeschichtung, Tauchbeschichtung und Tintenstrahldruck. Flüssigverarbeitung kann optional in einer inerten Atmosphäre (z. B. einer Stickstoffatmosphäre) durchgeführt werden und das Lösungsmittel kann optional vollständig oder teilweise durch Mittel entfernt werden, die im Stand der Technik bekannt sind.

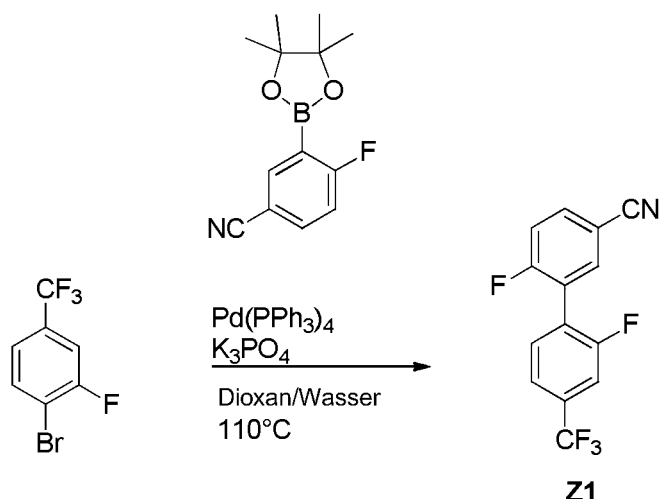
### Beispiele

#### Allgemeines Syntheschema I



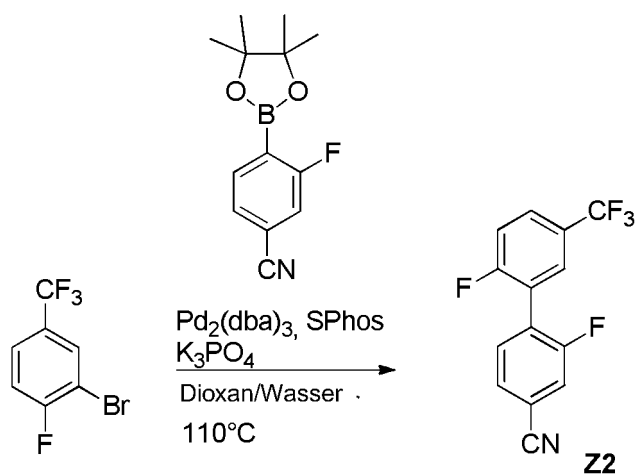


## Allgemeine Vorgehensweise für die Synthese AAV1:



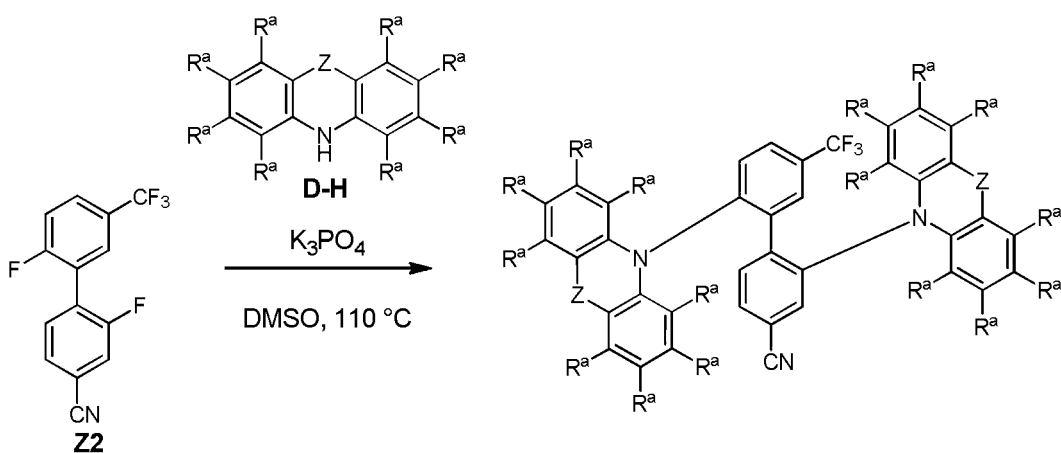
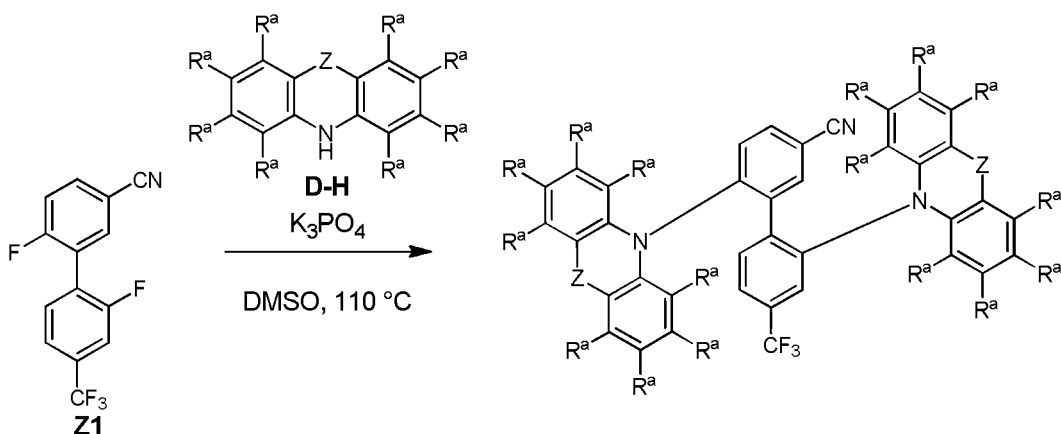
**[0135]** 4-Brom-3-fluorbenzotrifluorid (1,0 Entsprechung), 2-Fluor-5-cyanophenylborester (1,2 Äquivalente),  $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$  (0,02 Äquivalente) und Kaliumphosphat (2,50 Äquivalente) werden unter Stickstoffatmosphäre in einem Dioxan/Wasser-Gemisch (Verhältnis 10:1) bei  $100^\circ\text{C}$  für 22 h gerührt. Aktivkohle und Celite® werden zu dem Reaktionsgemisch hinzugefügt und bei  $90^\circ\text{C}$  für 10 min gerührt und dann wird das Gemisch heiß gefiltert und die organische Phase unter reduziertem Druck konzentriert. Der Rest wird durch Chromatografie gereinigt und das Produkt Z1 als ein Festkörper erhalten.

## Allgemeine Vorgehensweise für die Synthese AAV2:



**[0136]** 3-Brom-4-fluorbenzotrifluorid (1,0 Entsprechung), 2-Fluor-4-cyanophenylborester (1,1 Äquivalente),  $\text{Pd}(\text{dba})_3\text{Cl}_2$  (0,04 Äquivalente), SPhos (0,16 Äquivalente) und Kaliumphosphat (2,50 Äquivalente) werden unter Stickstoffatmosphäre in einem Dioxan/Wasser-Gemisch (Verhältnis 10:1) bei  $100^\circ\text{C}$  für 22 h gerührt. Aktivkohle und Celite® werden zu dem Reaktionsgemisch hinzugefügt und bei  $90^\circ\text{C}$  für 10 min gerührt und dann wird das Gemisch heiß gefiltert und die organische Phase unter reduziertem Druck konzentriert. Der Rest wird durch Chromatografie gereinigt und das Produkt Z2 als ein Festkörper erhalten.

Allgemeine Vorgehensweise für die Synthese AAV3:



**[0137]** Z1 oder Z2 (1 Äquivalent jeweils), das entsprechende Donormolekül D-H (2,0 Äquivalente) und tribasisches Kaliumphosphat (5,0 Äquivalente) werden unter Stickstoffatmosphäre in DMSO suspendiert und bei  $110\text{ °C}$  für 23 h gerührt. Das Reaktionsgemisch wird in eine gesättigte Natriumchloridlösung gegossen und das resultierende Präzipitat gefiltert. Anschließend wird der Rest in Dichlormethan gelöst und mit der gesättigten Natriumchloridlösung gewaschen, über  $MgSO_4$  getrocknet und das Lösungsmittel unter reduziertem Druck verdampft. Das Rohprodukt wird mittels Chromatographie gereinigt.

**[0138]** Insbesondere ist das Donormolekül D-H ein 3,6-substituiertes Carbazol (z. B. 3,6-Dimethylcarbazol, 3,6-Diphenylcarbazol, 3,6-Di-tert-butylcarbazol), ein 2,7-substituiertes Carbazol (z. B. 2,7-Dimethylcarbazol, 2,7-Diphenylcarbazol, 2,7-Di-tert-butylcarbazol), ein 1,8-substituiertes Carbazol (z. B. 1,8-Dimethylcarbazol, 1,8-Diphenylcarbazol, 1,8-Di-tert-butylcarbazol), ein 1-substituiertes Carbazol (z. B. 1-Methylcarbazol, 1-Phenylcarbazol, 1-Tert-butylcarbazol), ein 2-substituiertes Carbazol (z. B. 2-Methylcarbazol, 2-Phenylcarbazol, 2-Tert-butylcarbazol) oder ein 3-substituiertes Carbazol (z. B. 3-Methylcarbazol, 3-Phenylcarbazol, 3-Tert-butylcarbazol).

**[0139]** Exemplarisch kann ein halogensubstituiertes Carbazol und insbesondere 3-Bromcarbazol als D-H verwendet werden.

In einer nachfolgenden Reaktion kann eine Borsäureesterfunktionsgruppe oder eine Borsäurefunktionsgruppe exemplarisch an der Position des einen oder der mehreren Halogensubstituenten eingeführt werden, der bzw. die über D-H eingeführt wurden, um das entsprechende Carbazol-3-ylboronsäureester oder die entsprechende Carbazol-3-ylboronsäure z. B. über die Reaktion mit Bis(pinacolato)diboron (CAS-Nr. 73183-34-3) zu erhalten. Nachfolgend können ein oder mehrere Substituenten  $R^a$  anstatt der Borsäureestergruppe oder der Borsäuregruppe über eine Kupplungsreaktion mit dem entsprechenden halogenierten Reaktionsmittel  $R^a\text{-Hal}$ , bevorzugt  $R^a\text{-Cl}$  und  $R^a\text{-Br}$  eingeführt werden.

**[0140]** Alternativ können ein oder mehrere Substituenten R<sup>a</sup> an der Position des einen oder der mehreren Halogensubstituenten, die über D-H eingeführt wurden, über die Reaktion mit einer Borsäure des Substituenten R<sup>a</sup> [R<sup>a</sup>-B(OH)<sub>2</sub>] oder einem entsprechenden Borsäureester eingeführt werden.

**[0141]** Insbesondere kann die Synthese eines organischen Moleküls gemäß der Erfindung gemäß dem allgemeinen Syntheschema I mit den Synthesebedingungen ausgeführt werden, die durch die Allgemeine Vorgehensweise für die Synthese AAV1, AAV2 und AAV3 bereitgestellt werden, wobei E0-1 ein Brom-fluor-substituiertes Trifluorbenzotrifluorid ist, das aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus Folgendem besteht: 4-Brom-3-fluorbenzotrifluorid, 3-Brom-4-fluorbenzotrifluorid, 3-Brom-2-fluorbenzotrifluorid, 2-Brom-3-fluorbenzotrifluorid; und E0-2 ein Fluor-cynaophenylborester ist, der aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus Folgendem besteht: 2-Fluor-5-cyanophenylborester, 2-Fluor-4-cyanophenylborester, 2-Fluor-3-cyanophenylborester, 2-Fluor-6-cyanophenylborester.

#### Zyklische Voltammetrie

**[0142]** Zyklische Voltammogramme werden aus Lösungen gemessen, die eine Konzentration von 10<sup>-3</sup> mol/L der organischen Moleküle in Dichlormethan oder einem geeigneten Lösungsmittel und ein geeignetes Träger-elektrolyt (z. B. 0,1 mol/L Tetrabutylammonium-Hexafluorphosphat) haben. Die Messungen werden bei Raumtemperatur unter Stickstoffatmosphäre mit einer Drei-Elektrodenanordnung (Arbeits- und Gegenelektroden: Pt-Draht, Referenzelektrode: Pt-Draht) durchgeführt und mithilfe von FeCp<sub>2</sub>/FeCp<sub>2</sub><sup>+</sup> als internem Standard kalibriert. Die HOMO-Daten wurden mithilfe von Ferrocen als internem Standard gegenüber SCE (Saturated Calomel Electrode) korrigiert.

#### Dichtefunktionaltheorieberechnung

**[0143]** Molekülstrukturen werden unter Einsatz des BP86-Funktional und des Ansatzes der Zerlegung der Einheit (Resolution of Identity, RI) optimiert. Anregungsenergien werden mithilfe der optimierten (BP86) Strukturen unter Einsatz von zeitabhängigen DFT (TD-DFT) Verfahren berechnet. Orbital- und Anregungszustandsenergien werden mit dem B3LYP-Funktional berechnet. Def2-SVP-Basissätze und ein m4-Raster für die numerische Integration werden verwendet. Das Turbomole-Programmpaket wird für alle Berechnungen verwendet.

#### Photophysikalische Messungen

Probenvorbehandlung: Rotationsbeschichtung

Vorrichtung: Spin150, SPS euro.

Die Probenkonzentration ist 10 mg/ml, gelöst in einem geeigneten Lösungsmittel.

Programm: 1) 3 s bei 400 U/min; 20 s bei 1000 U/min bei 1000 Upm/s. 3) 10 s bei 4000 U/min bei 1000 Upm/s. Nach Beschichtung werden die Folien bei 70 °C 1 Minute lang getrocknet.

#### Photolumineszenz-Spektroskopie und TCSPC (Time-Correlated Single-Photon Counting/Zeitkorrelierte Einzelphotonenzählung)

**[0144]** Steady-State-Emissions-Spektroskopie wird mit einem Horiba Scientific, Modell FluoroMax-4 ausgestattet mit einer 150 W Xenon-Bogenlampe, Anregungs- und Emissionsmonochromatoren und einem Hamamatsu-R928-Photovervielfacher sowie einer zeitkorrelierten Einzelphotonenzählung gemessen. Emissions- und Anregungsspektren werden mithilfe von Standardkorrekturanpassungen korrigiert.

**[0145]** Die Lebensdauer im angeregten Zustand wird unter Einsatz desselben Systems mithilfe des TCSPC-Verfahrens mit FM-2013-Ausrüstung und einem Horiba Yvon TCSPC-Hub ermittelt. Anregungsquellen:

NanoLED 370 (Wellenlänge: 371 nm, Impulsdauer: 1,1 ns)

NanoLED 290 (Wellenlänge: 294 nm, Impulsdauer: < 1 ns)

SpectraLED 310 (Wellenlänge: 314 nm)

SpectraLED 355 (Wellenlänge: 355 nm).

**[0146]** Datenanalyse (exponentielle Anpassung) erfolgt mithilfe des Softwarepakets DataStation und DAS6-Analysesoftware. Die Anpassung wird mithilfe des Chi-Quadrat-Tests spezifiziert.

#### Photolumineszenz-Quantenausbeutemessungen

**[0147]** Für Photolumineszenz-Quantenausbeute (PLQY)-Messungen wird ein Absolute PL Quantum Yield Measurement C9920-03G-System (Hamamatsu Photonics) verwendet. Quantenausbeute und CIE-Koordinaten werden mithilfe der Software U6039-05 Version 3.6.0 ermittelt. Emissionsmaxima werden in nm angegeben, Quantenausbeuten  $\Phi$  in % und CIE-Koordinaten als X-, Y-Werte. PLQY wird mithilfe des folgenden Protokolls ermittelt:

- 1) Qualitätssicherung: Anthracen in Ethanol (bekannte Konzentration) wird als Referenz verwendet
- 2) Anregungswellenlänge: Das Absorptionsmaximum des organischen Moleküls wird ermittelt und das Molekül wird mithilfe seiner Wellenlänge angeregt
- 3) Messung  
Quantenausbeuten werden für Proben von Lösungen oder Folien unter Stickstoffatmosphäre gemessen. Die Ausbeute wird mithilfe der folgenden Gleichung berechnet:

$$\Phi_{PL} = \frac{n_{\text{photon,emittiert}}}{n_{\text{photon,absorbiert}}} = \frac{\int \frac{\lambda}{hc} [Int_{\text{emittiert}}^{\text{Probe}}(\lambda) - Int_{\text{absorbiert}}^{\text{Probe}}(\lambda)] d\lambda}{\int \frac{\lambda}{hc} [Int_{\text{emittiert}}^{\text{Referenz}}(\lambda) - Int_{\text{absorbiert}}^{\text{Referenz}}(\lambda)] d\lambda}$$

wobei  $n_{\text{photon}}$  die Photonenzahl und Int. die Intensität angibt.

#### Herstellung und Charakterisierung organischer Elektrolumineszenz-Vorrichtungen

**[0148]** OLED-Vorrichtungen, die organische Moleküle gemäß der Erfindung umfassen, können über Vakuumabscheidungsverfahren hergestellt werden. Wenn eine Schicht mehr als eine Verbindung enthält, wird der Gewichtsprozentsatz von einer oder mehreren Verbindungen in % angegeben. Die gesamten Gewichtsprozentwerte ergeben 100 %, wenn also ein Wert nicht angegeben ist, ist die Fraktion dieser Verbindung gleich der Differenz zwischen den angegebenen Werten und 100 %.

Die (nicht vollständig optimierten) OLEDs werden mithilfe von Standardverfahren und Messung der Elektrolumineszenzspektren, der äußeren Quantenausbeute (in %) in Abhängigkeit von der Intensität, die mithilfe des von der Photodiode erkannten Lichts berechnet wird, sowie des Stroms charakterisiert. Die Lebensdauer der OLED-Vorrichtung wird aus der Änderung der Luminanz während des Betriebs bei konstanter Stromdichte extrahiert. Der LT50-Wert entspricht der Zeit, in der sich die gemessene Luminanz auf 50 % der Anfangsluminanz verringerte, analog entspricht LT80 dem Zeitpunkt, an dem die gemessene Luminanz sich auf 80 % der Anfangsluminanz verringerte, LT95 ist der Zeitpunkt, an dem sich die gemessene Luminanz auf 95 % der Anfangsluminanz verringerte, usw.

Beschleunigte Lebensdauerermessungen werden durchgeführt (z. B. durch Anwendung erhöhter Stromdichten). Exemplarische LT80-Werte bei  $500 \text{ cd/m}^2$  werden mithilfe der folgenden Gleichung ermittelt:

$$LT80\left(500 \frac{\text{cd}^2}{\text{m}^2}\right) = LT80(L_0) \left(\frac{L_0}{500 \frac{\text{cd}^2}{\text{m}^2}}\right)^{1.6}$$

wobei  $L_0$  die Anfangsluminanz bei der angewandten Stromdichte angibt.

Die Werte entsprechen dem Durchschnitt mehrerer Pixel (normalerweise zwei bis acht), die Standardabweichung zwischen diesen Pixeln ist angegeben.

#### HPLC-MS:

**[0149]** HPLC-MS-Spektroskopie wird auf einem HPLC von Agilent (1100-Serie) mit MS-Detektor (Thermo LTQ XL) durchgeführt. Eine Umkehrphasensäule  $4,6 \text{ mm} \times 150 \text{ mm}$ , Partikelgröße  $5,0 \mu\text{m}$  von Waters (ohne

Vorsäule) wird in der HPLC verwendet. Die HPLC-MS-Messungen werden bei Raumtemperatur (RT) mit den Lösungsmitteln Acetonitril, Wasser und THF in den folgenden Konzentrationen durchgeführt:

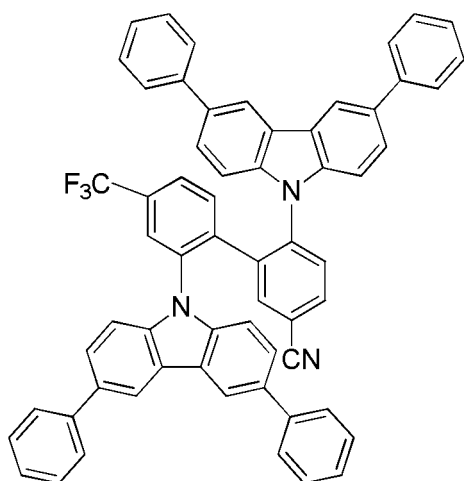
Lösungsmittel A:	H <sub>2</sub> O (90 %)	MeCN (10 %)
Lösungsmittel B:	H <sub>2</sub> O (10 %)	MeCN (90 %)
Lösungsmittel C:	THF (100 %)	

**[0150]** Aus einer Lösung mit einer Konzentration von 0,5mg/ml wird ein Injektionsvolumen 15 µL für die Messungen genommen. Der folgende Gradient wird verwendet:

Durchflussmenge				
[ml/min]	Zeit [min]	A [%]	B [%]	D [%]
3	0	40	50	10
3	10	10	15	75
3	16	10	15	75
3	16,01	40	50	10
3	20	40	50	10

**[0151]** Ionisation der Sonde wird durch APCI (Atmospheric Pressure Chemical Ionization/Chemische Ionisation bei Atmosphärendruck) durchgeführt.

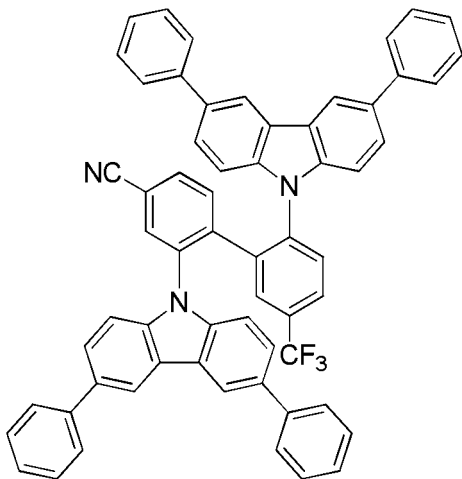
Beispiel 1



**[0152]** Beispiel 1 wurde gemäß AAV1 (Ausbeute = 16 %) und AAV3 (Ausbeute = 71 %) synthetisiert.

**[0153]** Fig. 1 stellt das Emissionsspektrum von Beispiel 1 (10 Gew.-% in PMMA) dar. Das Emissionsmaximum ( $\lambda_{\max}$ ) beträgt 451 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 54 %, die Halbwertsbreite (FWHM) beträgt 0,40 eV und die Emissionslebensdauer beträgt 76 µs. Die resultierende CIE<sub>x</sub>-Koordinate wird bei 0,15 und die CIE<sub>y</sub>-Koordinate bei 0,12 bestimmt.

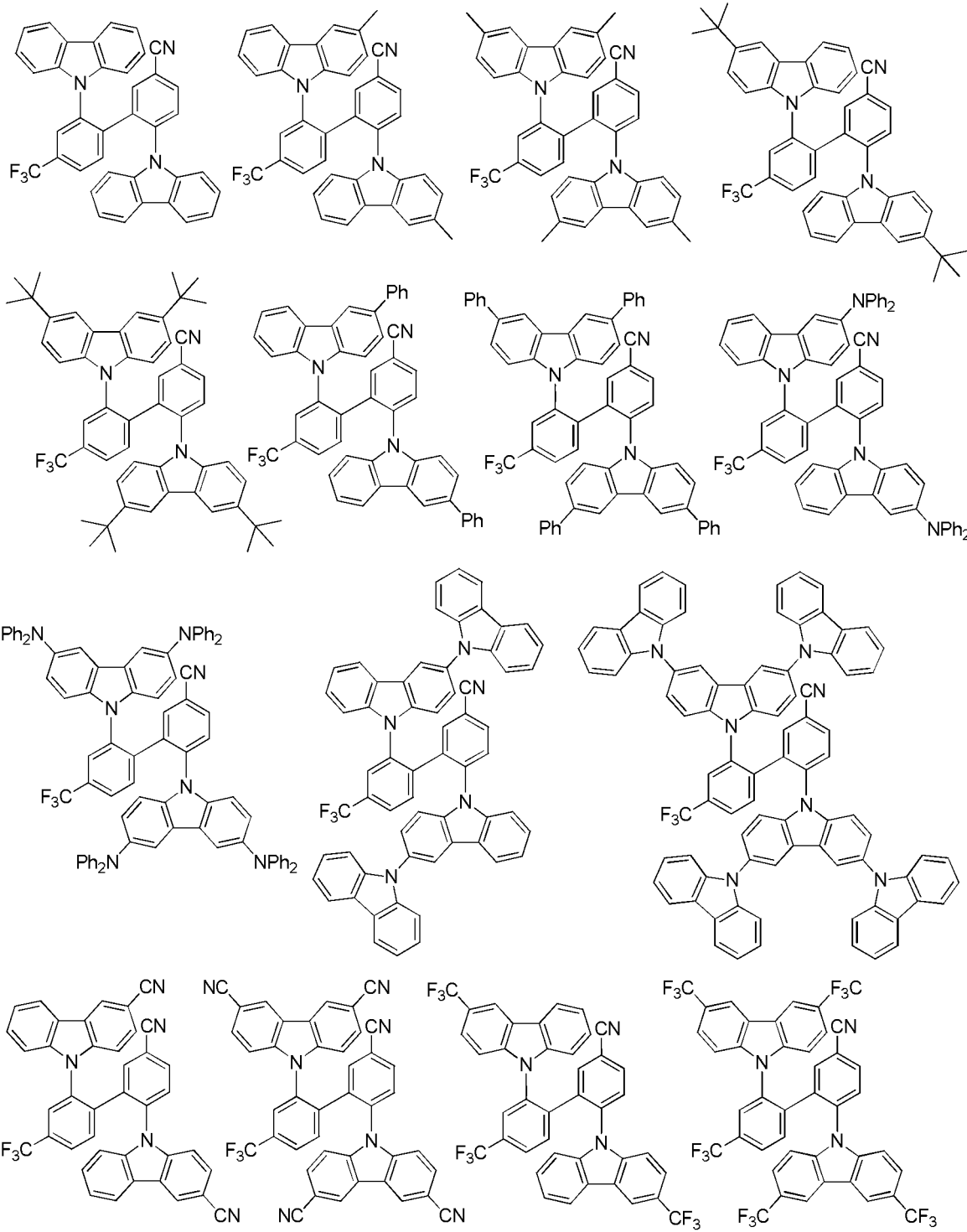
## Beispiel 2

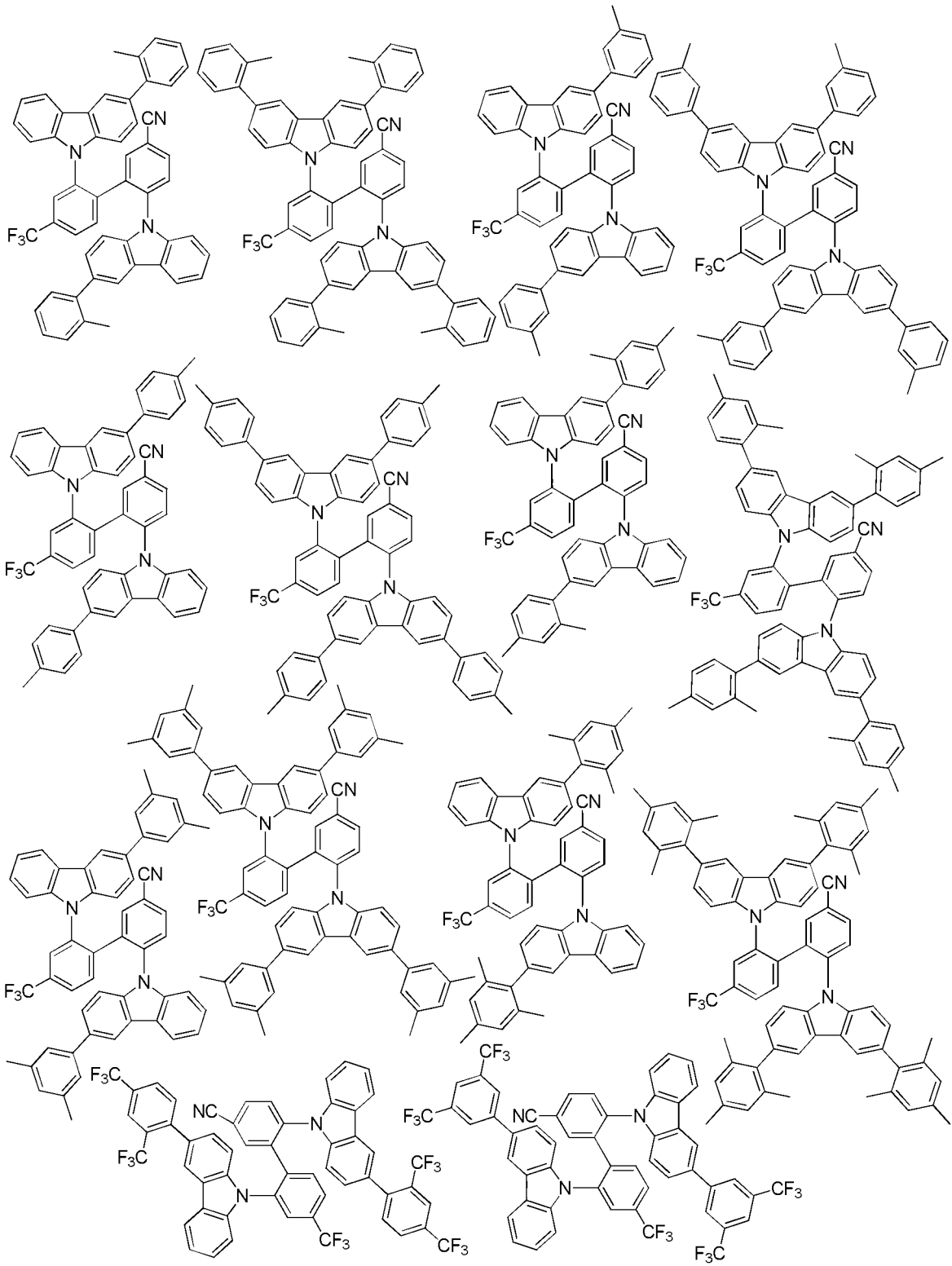


**[0154]** Beispiel 2 wurde gemäß AAV2 (Ausbeute = 62 %) und AAV3 (Ausbeute = 37 %) synthetisiert.

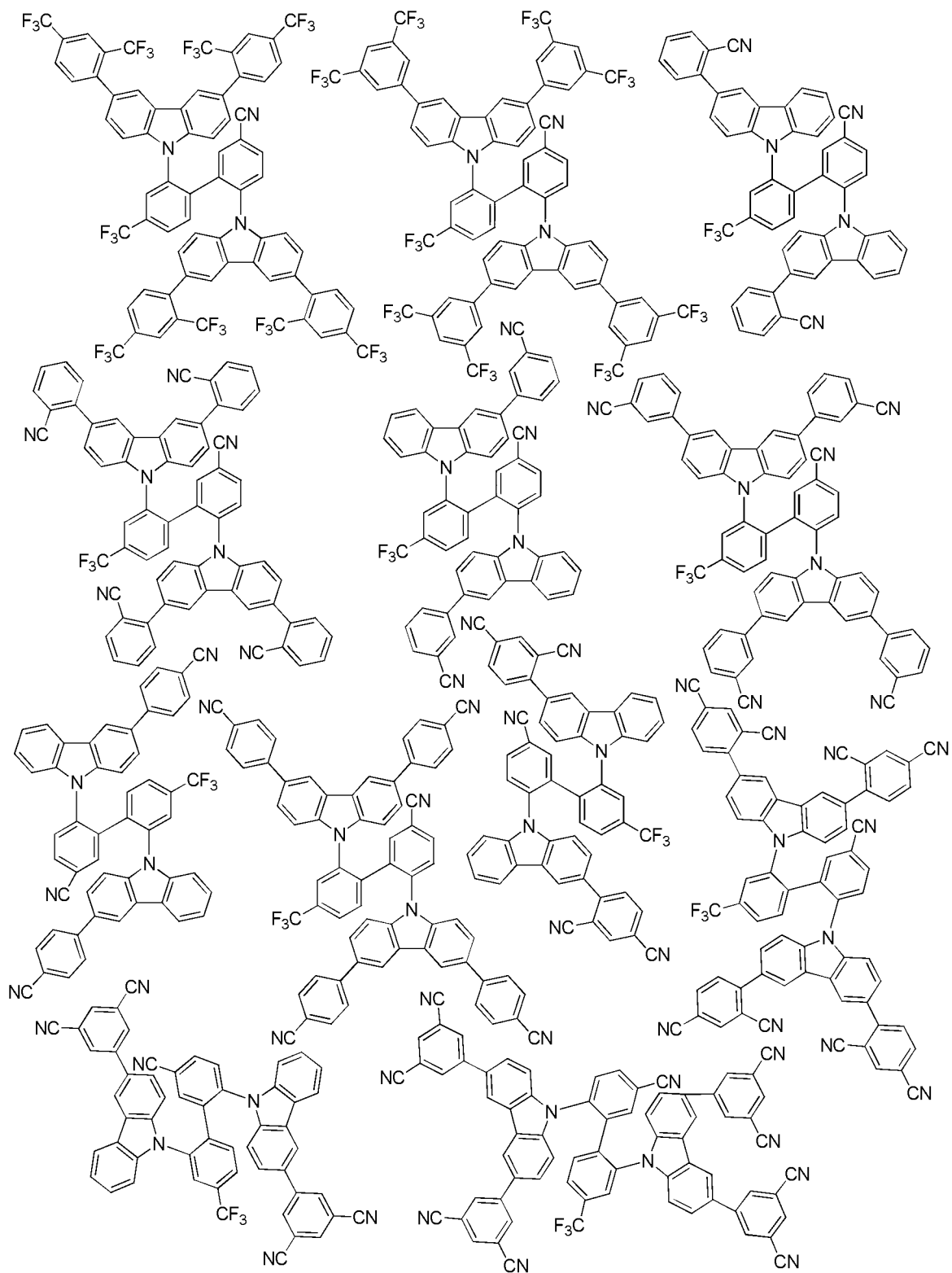
**[0155]** Fig. 2 stellt das Emissionsspektrum von Beispiel 2 (10 Gew.-% in PMMA) dar. Das Emissionsmaximum ( $\lambda_{\text{max}}$ ) beträgt 467 nm. Die Photolumineszenzquantenausbeute (PLQY) beträgt 67 %, die Halbwertsbreite (FWHM) beträgt 0,40 eV und die Emissionslebensdauer beträgt 37  $\mu\text{s}$ . Die resultierende CIE<sub>x</sub>-Koordinate wird bei 0,16 und die CIE<sub>y</sub>-Koordinate bei 0,20 bestimmt.

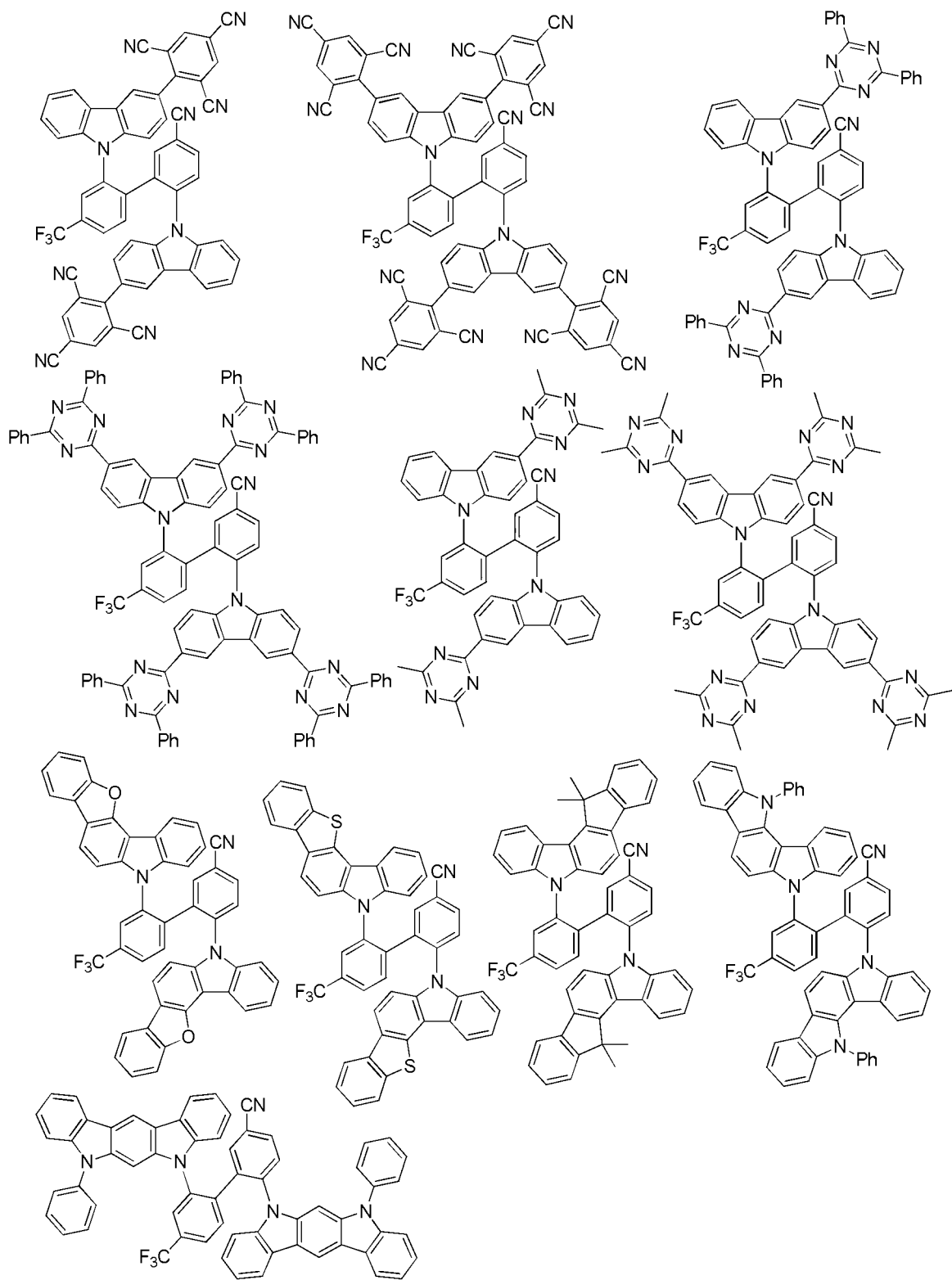
Weitere Beispiele erfindungsgemäßer organischer Moleküle

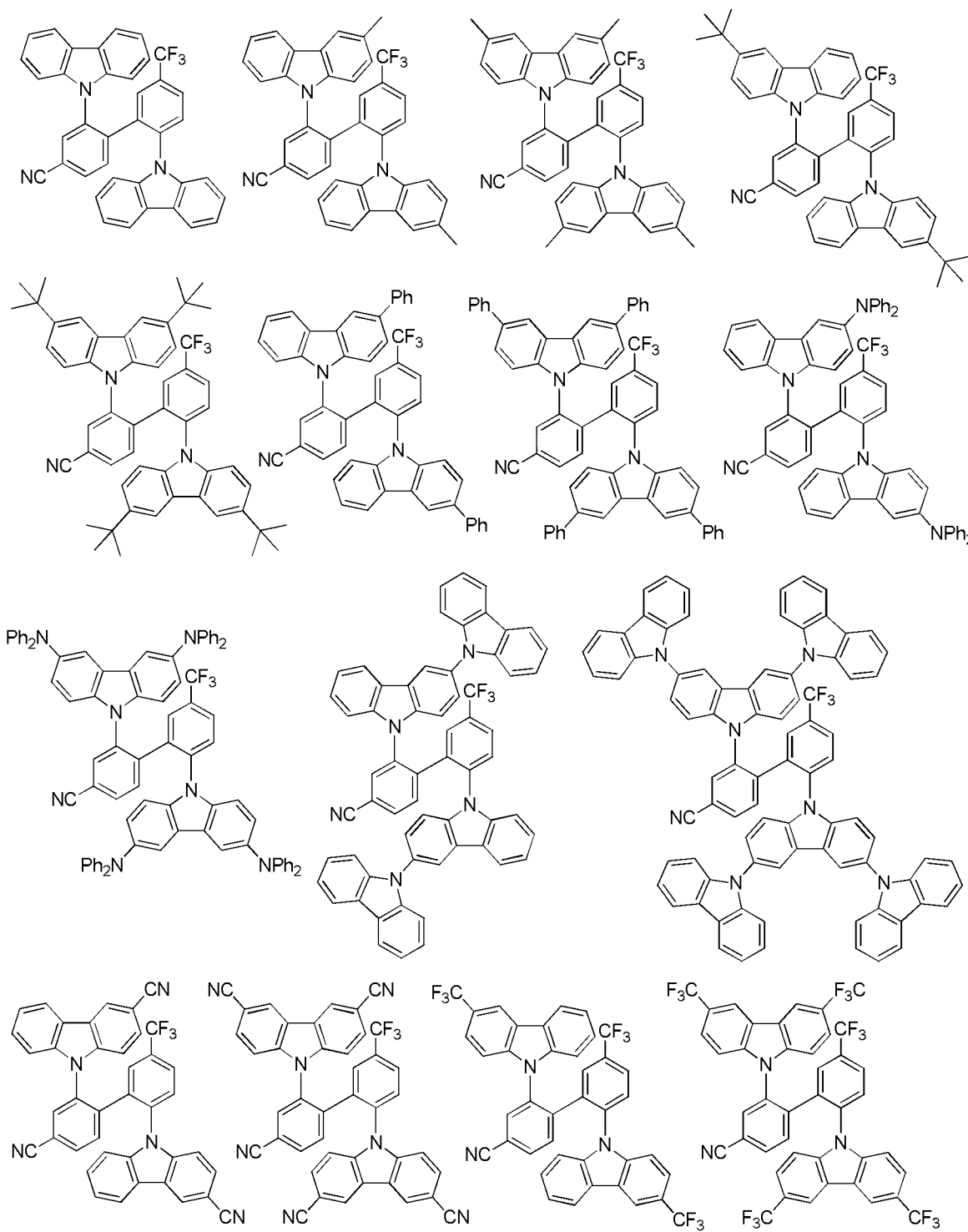


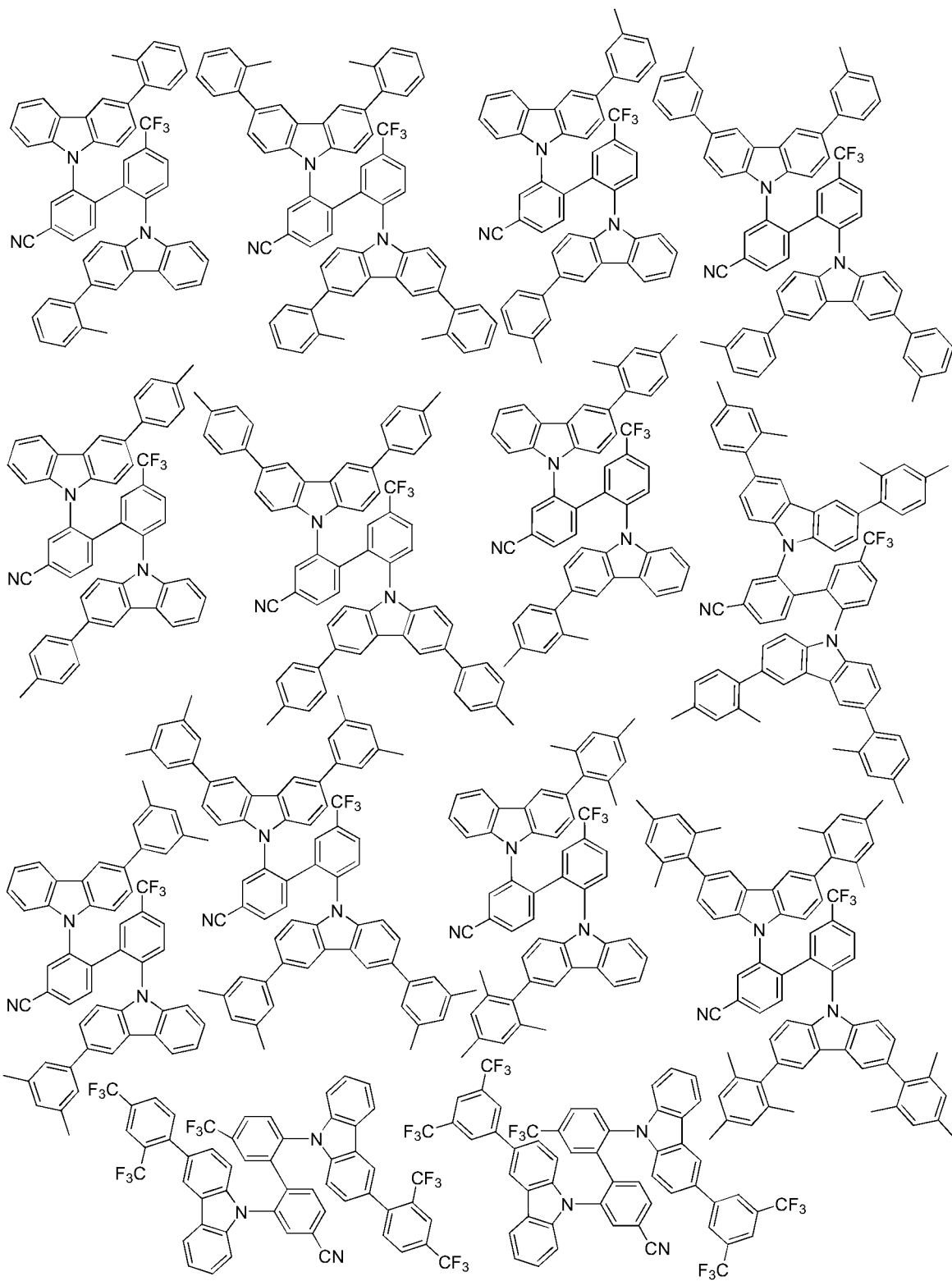


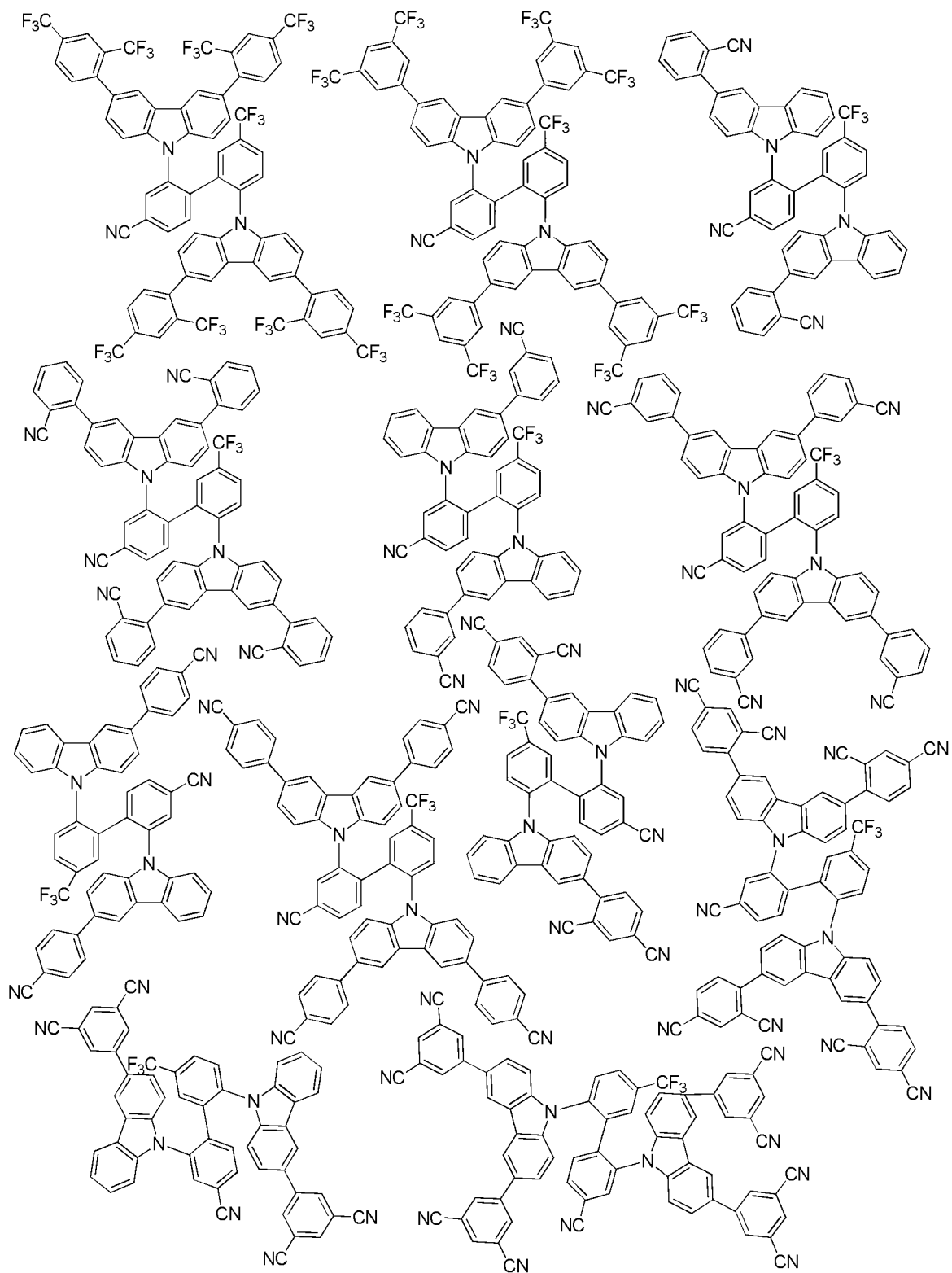


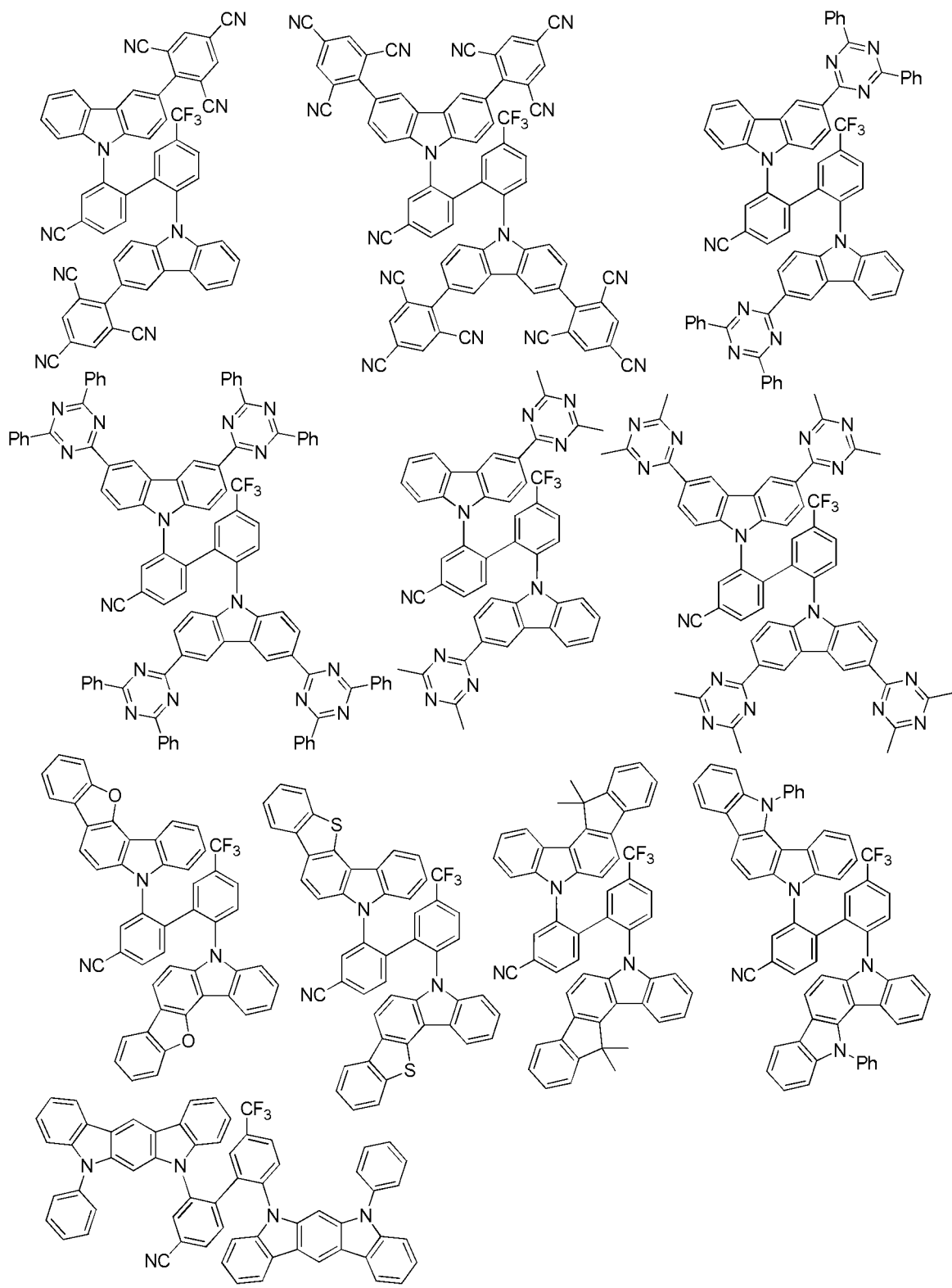


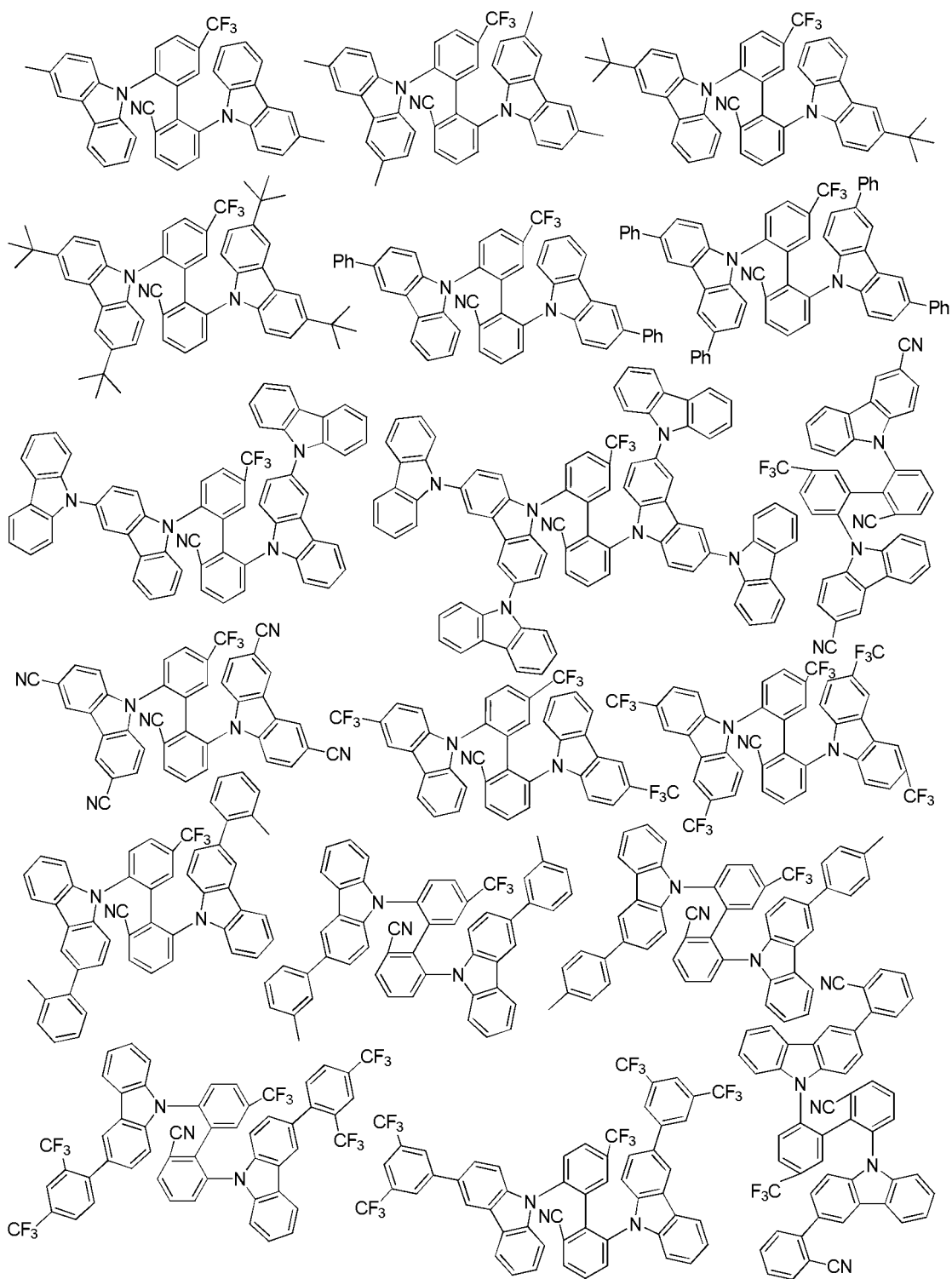


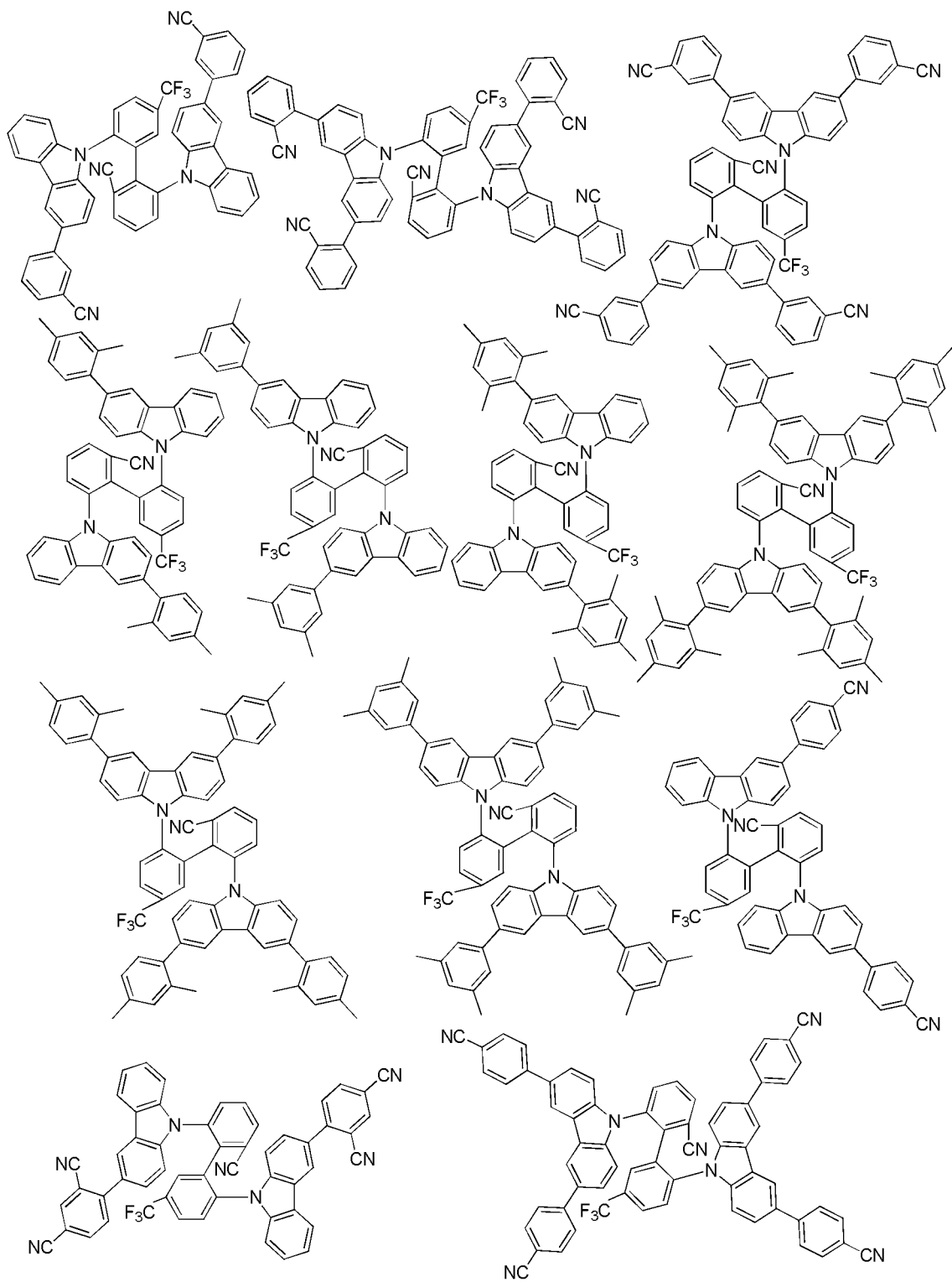




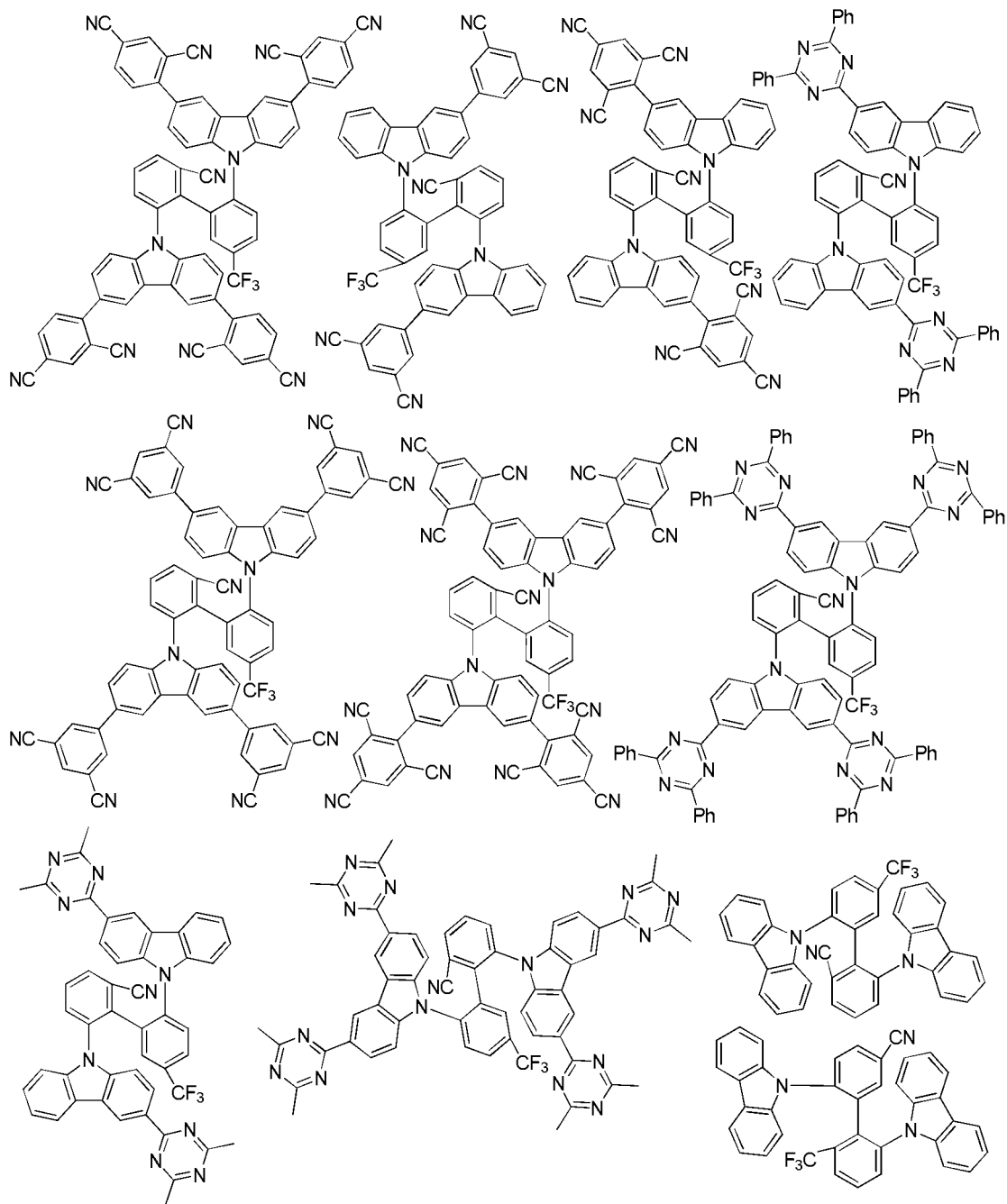


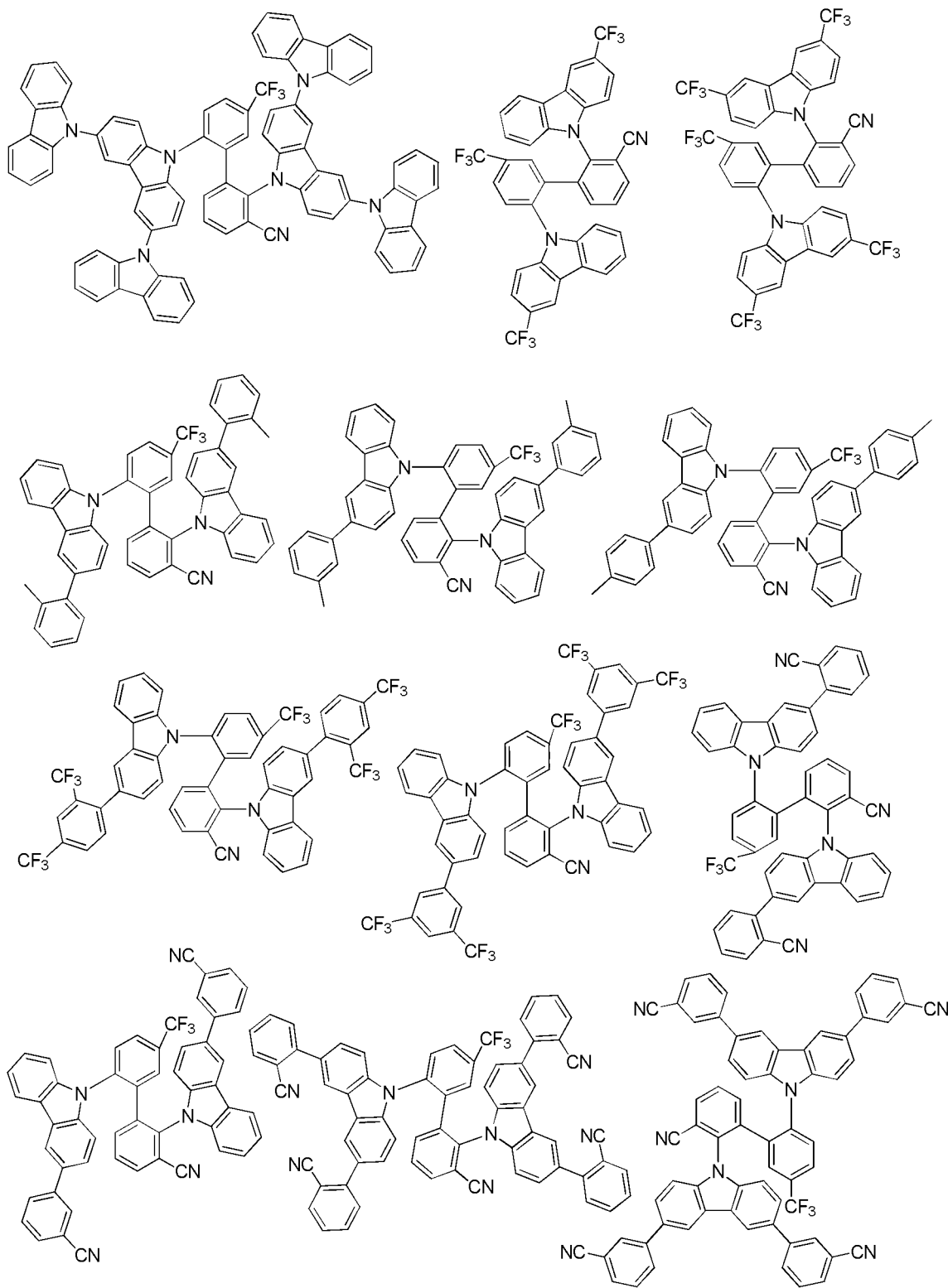


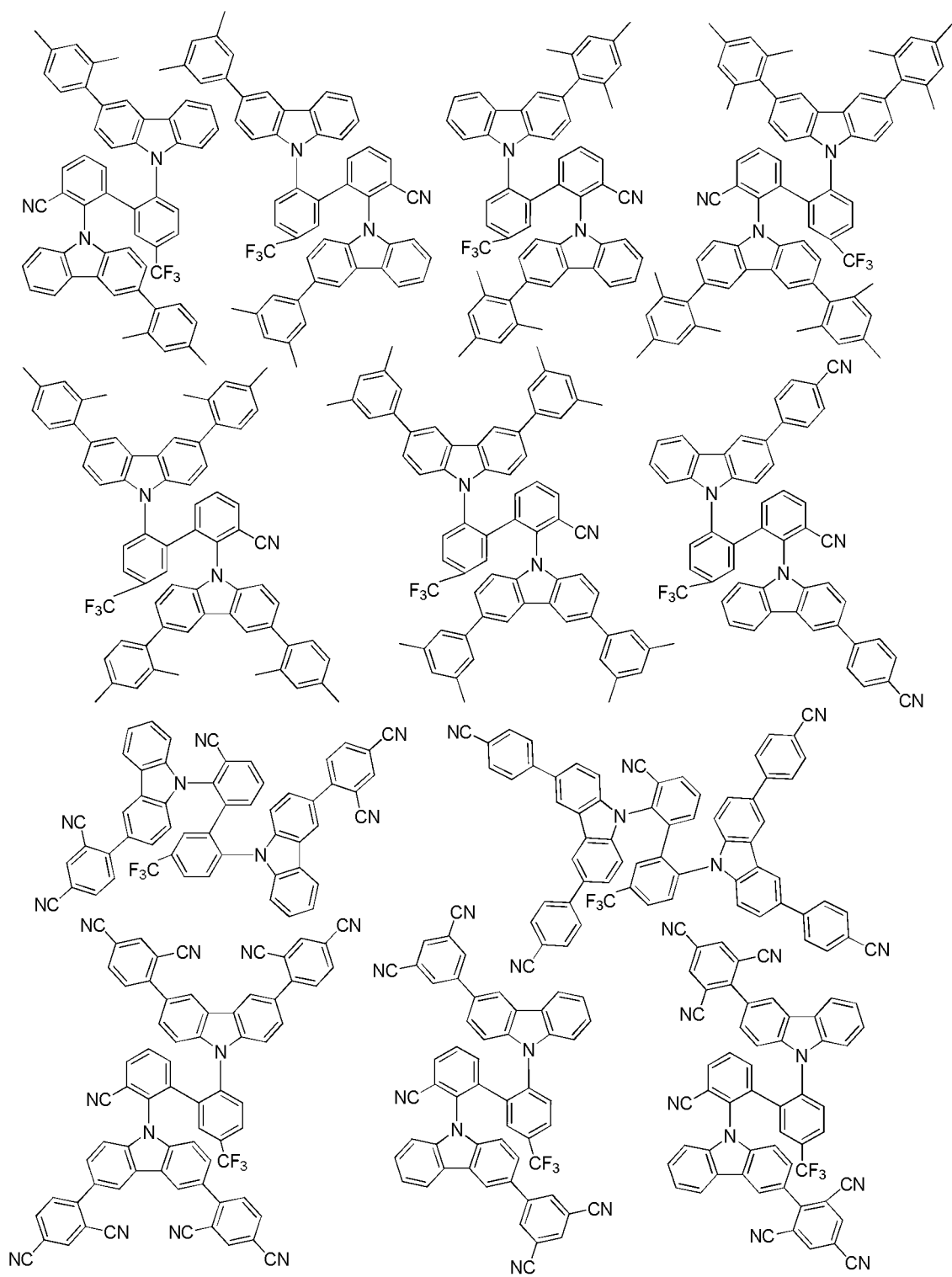


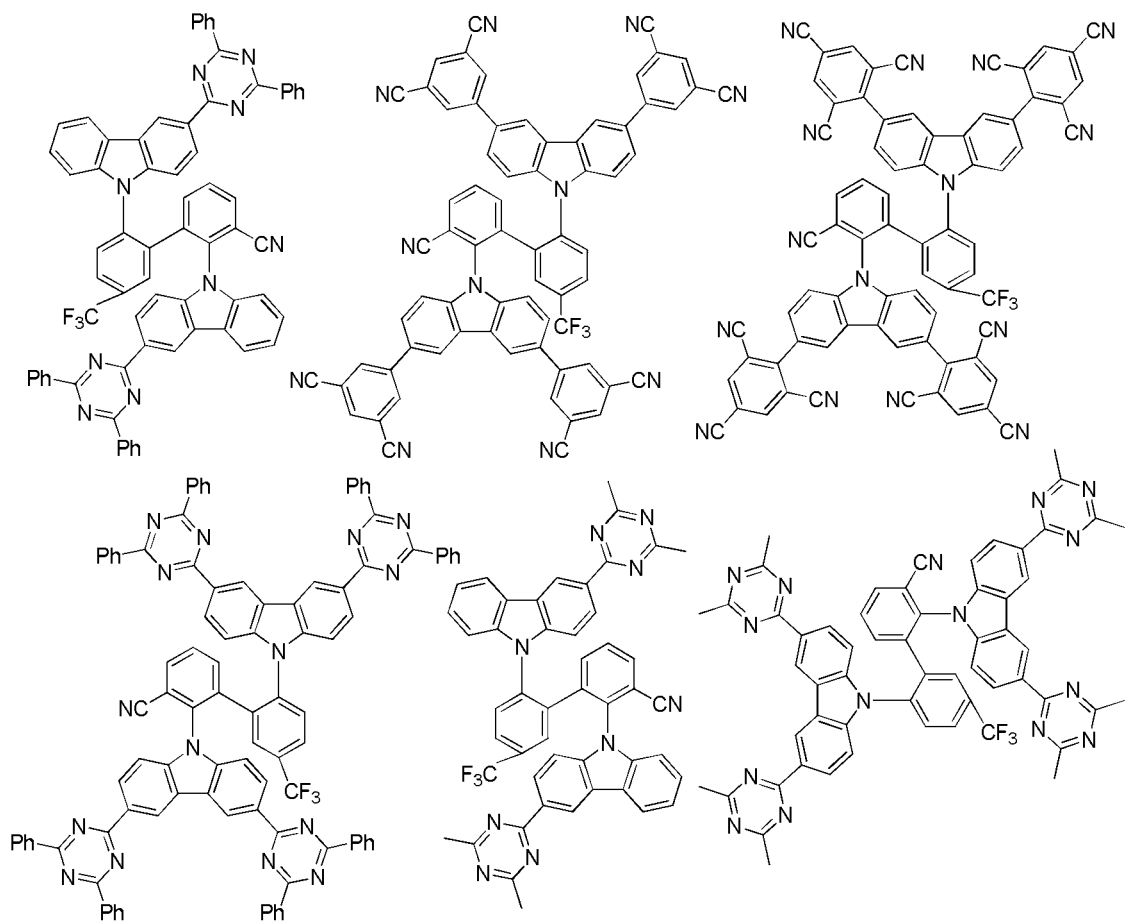


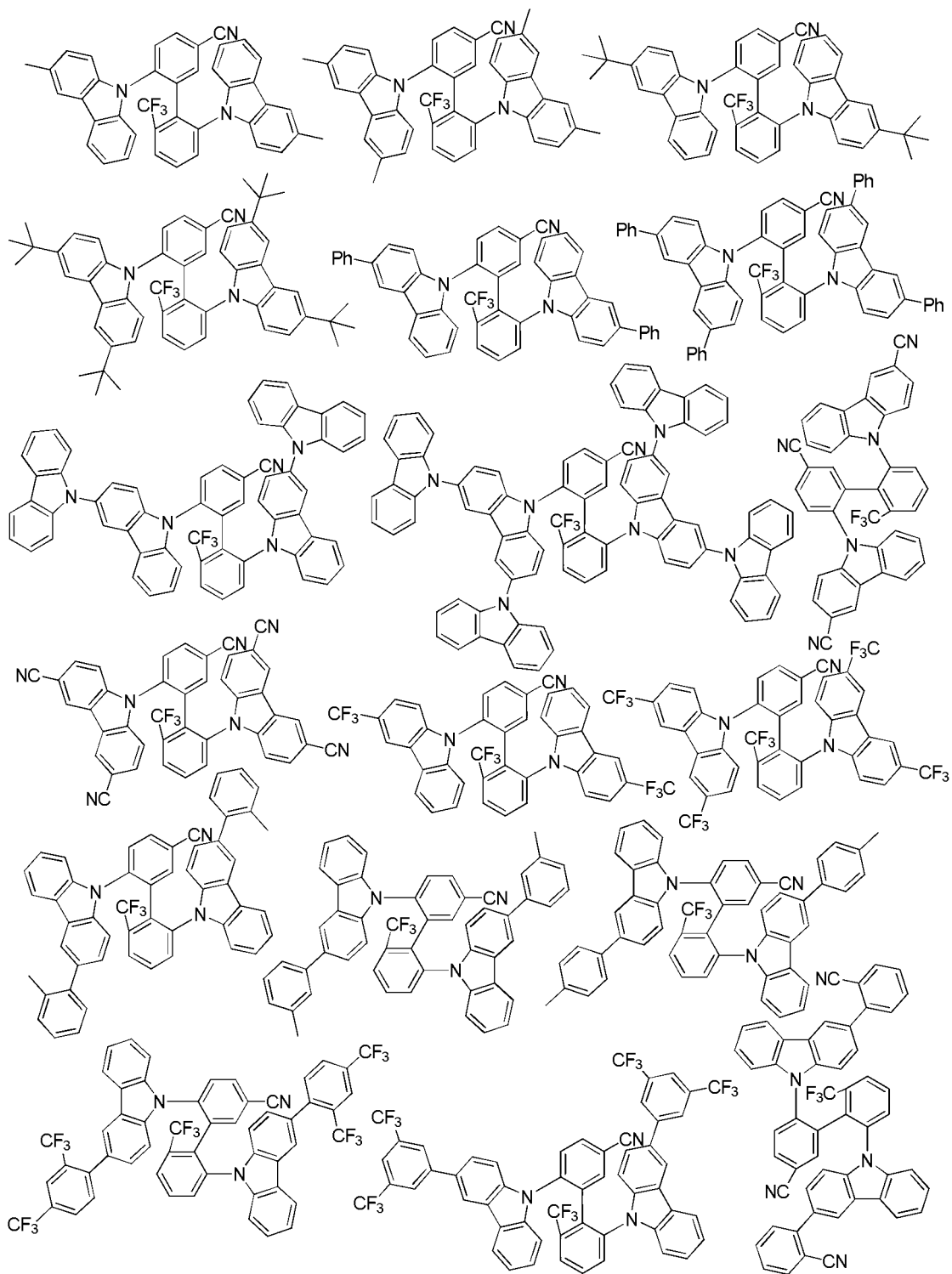


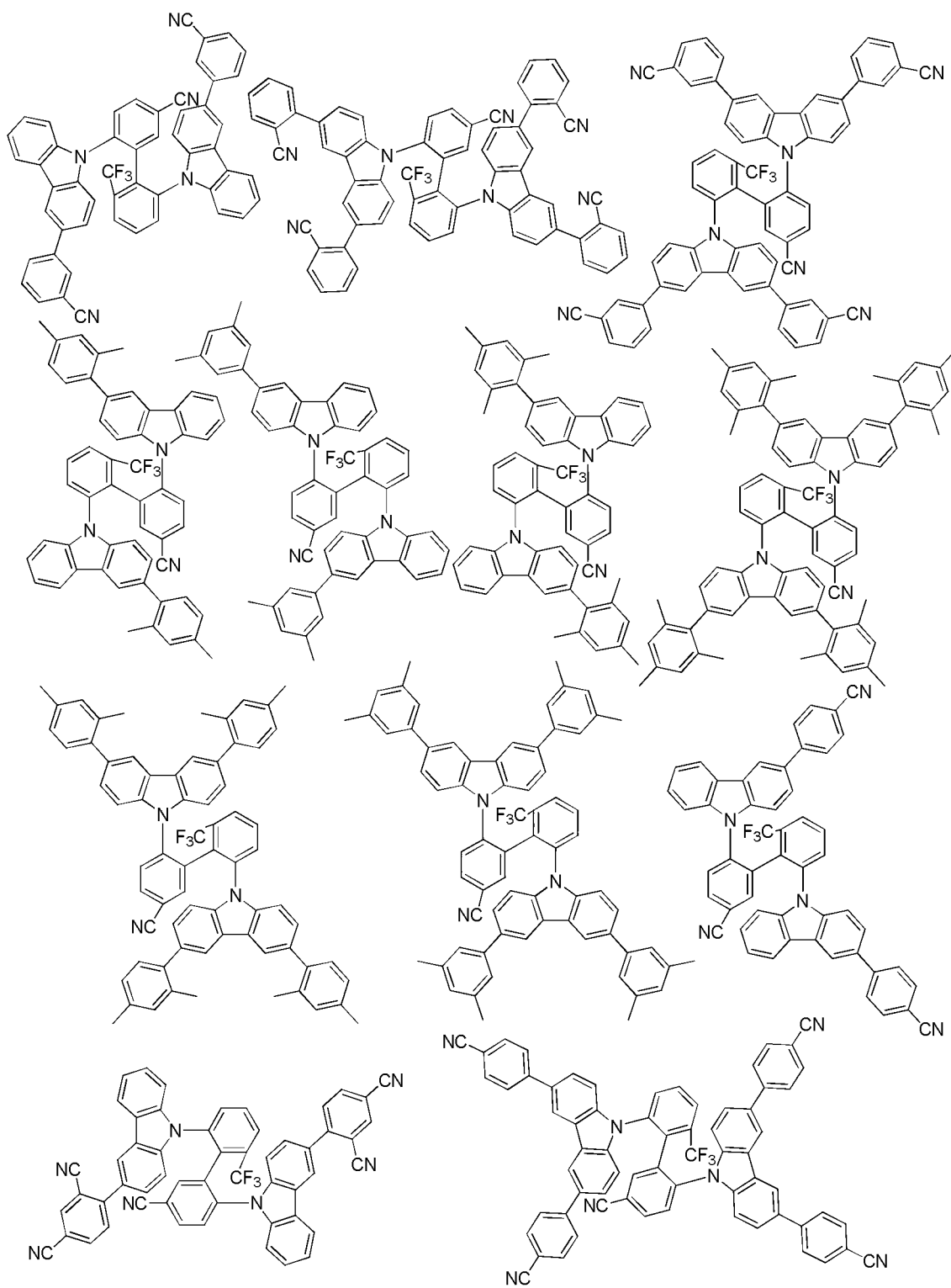


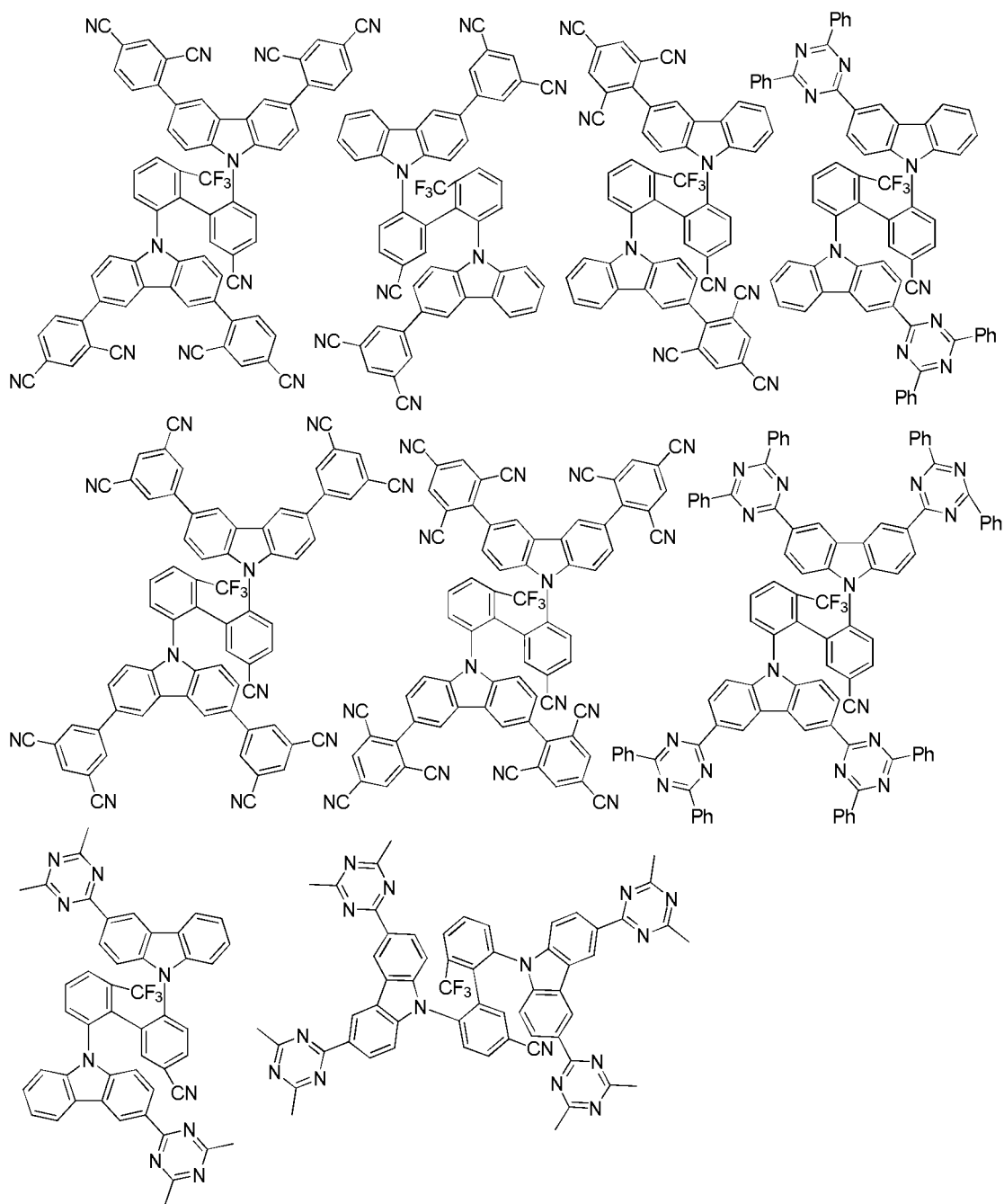


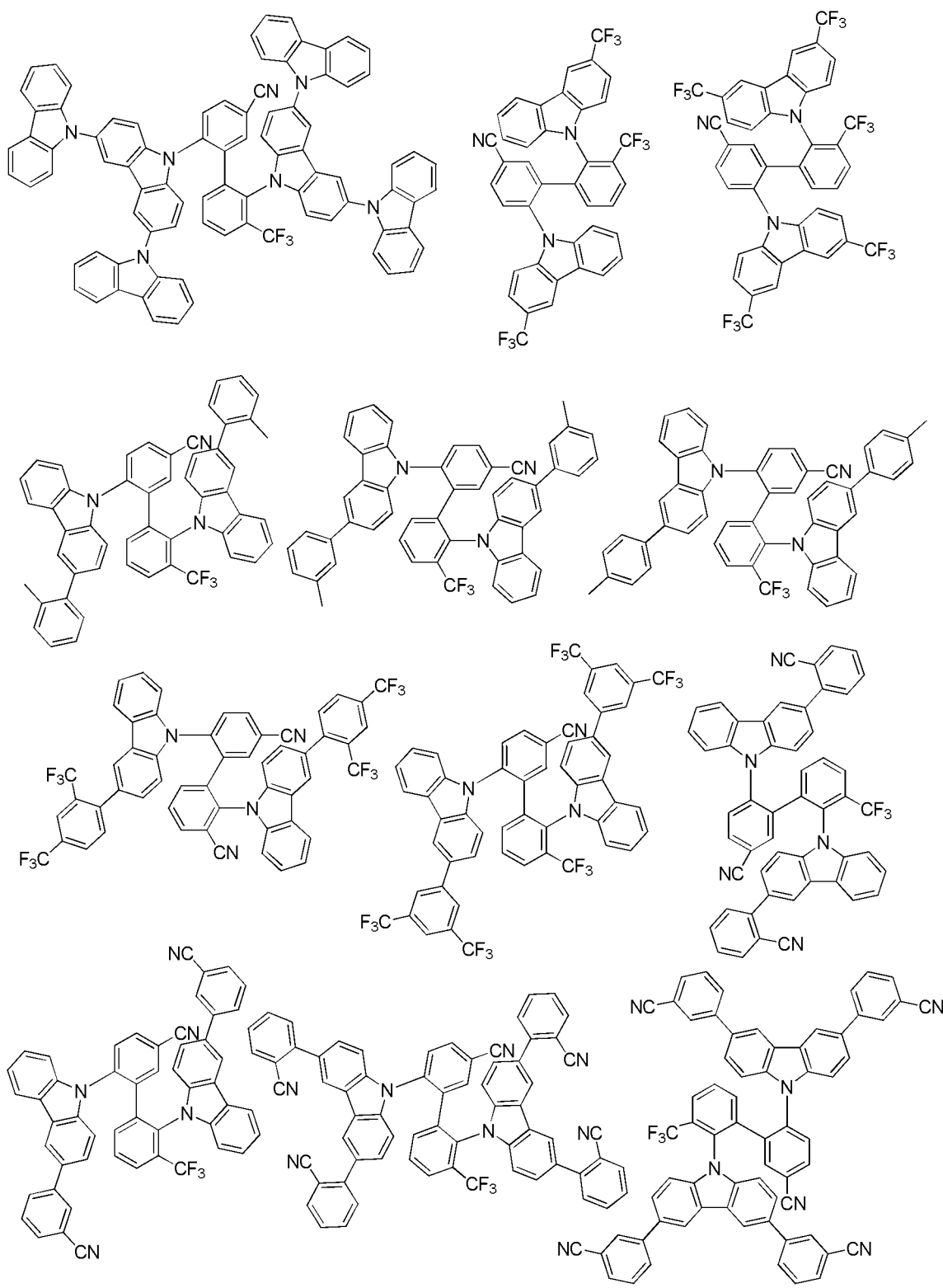




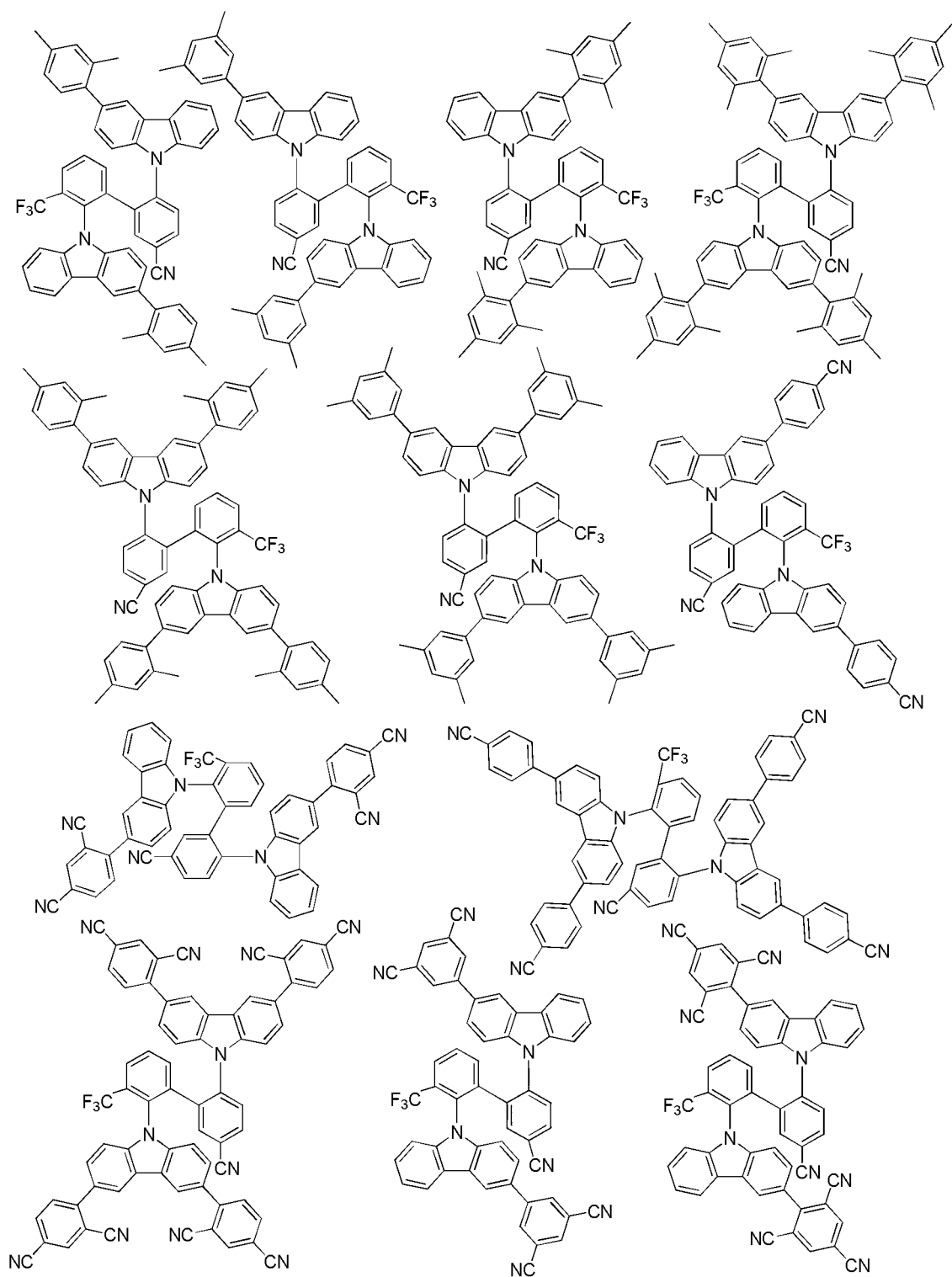


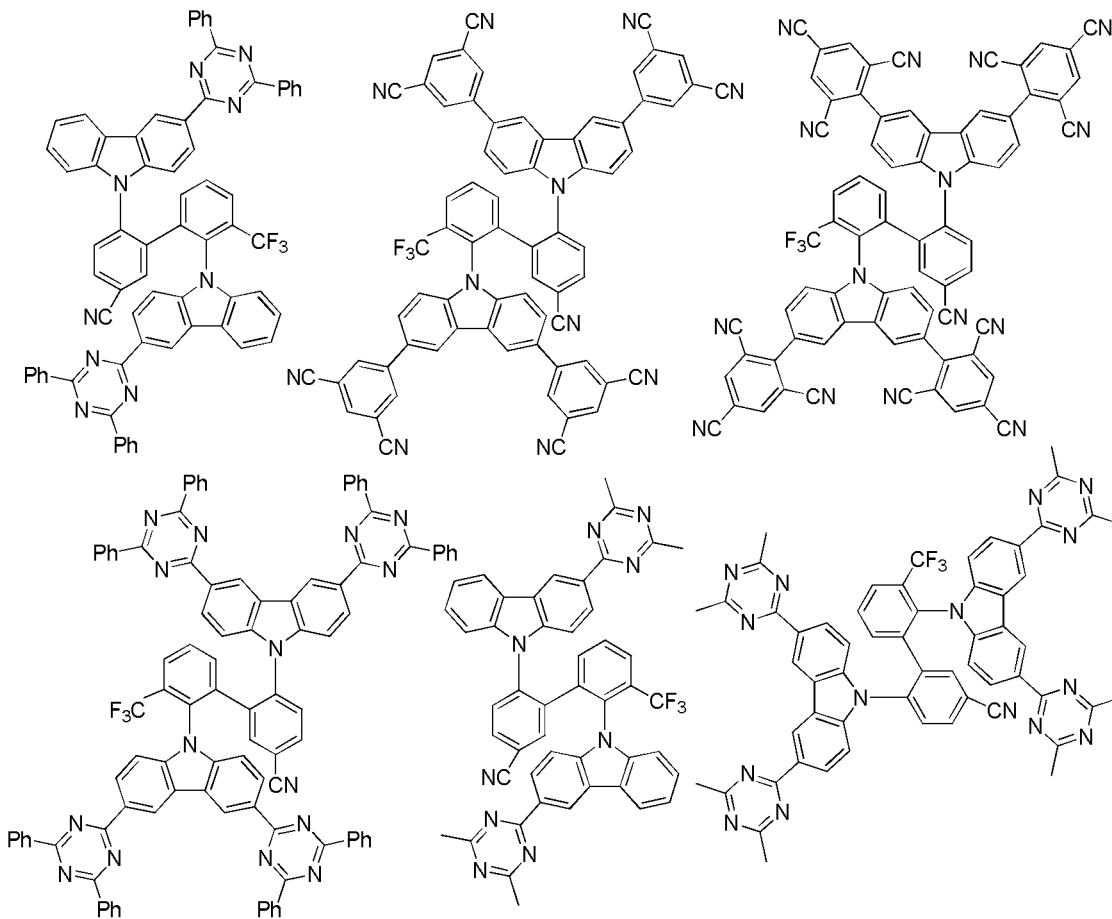












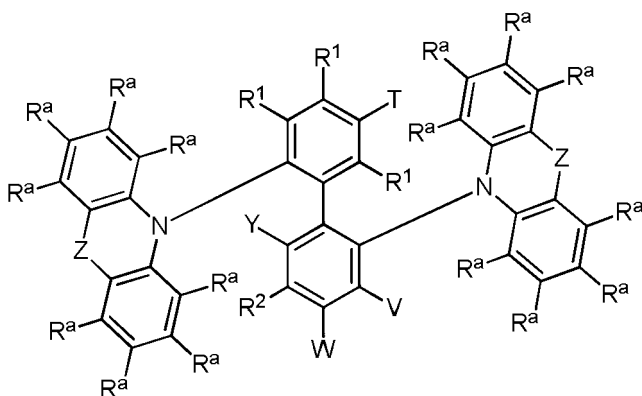
Figurenliste

**Fig. 1** Emissionsspektrum von Beispiel 1 (10 Gew.-%) in PMMA.

**Fig. 2** Emissionsspektrum von Beispiel 2 (10 Gew.-%) in PMMA.

**Patentansprüche**

1. Organisches Molekül, das eine Struktur der Formel I umfasst oder daraus besteht,



Formel I

wobei

T aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus CN und CF<sub>3</sub> besteht;

V, W und Y unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt sind, die aus Folgendem besteht: CN, CF<sub>3</sub> und R<sup>2</sup>;

Z bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus einer direkten Bindung,  $\text{CR}^3\text{R}^4$ ,  $\text{C}=\text{CR}^3\text{R}^4$ ,  $\text{C}=\text{O}$ ,  $\text{C}=\text{NR}^3$ ,  $\text{NR}^3$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{SiR}^3\text{R}^4$ ,  $\text{S}$ ,  $\text{S}(\text{O})$  und  $\text{S}(\text{O})_2$  besteht;

$\text{R}^1$  bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus Folgendem besteht:  
Wasserstoff,  
Deuterium,  
 $\text{C}_1\text{-C}_5$ -alkyl,  
wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional durch Deuterium substituiert sind;  
 $\text{C}_2\text{-C}_8$ -alkenyl,  
wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional durch Deuterium substituiert sind;  
 $\text{C}_2\text{-C}_8$ -alkynyl,  
wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional durch Deuterium substituiert sind; und  $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ -aryl,  
das optional durch einen oder mehrere Substituenten substituiert ist, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt sind, die aus Folgendem besteht: Me,  $^i\text{Pr}$ ,  $^t\text{Bu}$  und Ph;

$\text{R}^2$  bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus Folgendem besteht:  
Wasserstoff,  
Deuterium,  
 $\text{C}_1\text{-C}_5$ -alkyl,  
wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional durch Deuterium substituiert sind;  
 $\text{C}_2\text{-C}_8$ -alkenyl,  
wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional durch Deuterium substituiert sind;  
 $\text{C}_2\text{-C}_8$ -alkynyl,  
wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional durch Deuterium substituiert sind; und  $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ -aryl,  
das optional mit einem oder mehreren Substituenten substituiert ist, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt sind, die aus Folgendem besteht: Me,  $^i\text{Pr}$ ,  $^t\text{Bu}$  und Ph;

$\text{R}^a$ ,  $\text{R}^3$  und  $\text{R}^4$  bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt sind, die aus Folgendem besteht: Wasserstoff, Deuterium,  $\text{N}(\text{R}^5)_2$ ,  $\text{OR}^5$ ,  $\text{Si}(\text{R}^5)_3$ ,  $\text{B}(\text{OR}^5)_2$ ,  $\text{OSO}_2\text{R}^5$ ,  $\text{CF}_3$ , CN, F, Br, I,  
 $\text{C}_1\text{-C}_{40}$ -alkyl,  
das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $\text{R}^5$  substituiert ist, und  
wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $\text{CH}_2$ -Gruppen optional substituiert sind durch  $\text{R}^5\text{C}=\text{CR}^5$ ,  $\text{C}\equiv\text{C}$ , Si  $(\text{R}^5)_2$ , Ge  $(\text{R}^5)_2$ , Sn  $(\text{R}^5)_2$ ,  $\text{C}=\text{O}$ ,  $\text{C}=\text{S}$ ,  $\text{C}=\text{Se}$ ,  $\text{C}=\text{NR}^5$ ,  $\text{P}(\text{O})(\text{R}^5)$ , SO,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NR}^5$ , O, S oder  $\text{CONR}^5$ ;

$\text{C}_1\text{-C}_{40}$ -alkoxy,  
das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $\text{R}^5$  substituiert ist, und  
wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $\text{CH}_2$ -Gruppen optional substituiert sind durch  $\text{R}^5\text{C}=\text{CR}^5$ ,  $\text{C}\equiv\text{C}$ , Si  $(\text{R}^5)_2$ , Ge  $(\text{R}^5)_2$ , Sn  $(\text{R}^5)_2$ ,  $\text{C}=\text{O}$ ,  $\text{C}=\text{S}$ ,  $\text{C}=\text{Se}$ ,  $\text{C}=\text{NR}^5$ ,  $\text{P}(\text{O})(\text{R}^5)$ , SO,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NR}^5$ , O, S oder  $\text{CONR}^5$ ;

$\text{C}_1\text{-C}_{40}$ -thioalkoxy,  
das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $\text{R}^5$  substituiert ist, und  
wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $\text{CH}_2$ -Gruppen optional substituiert sind durch  $\text{R}^5\text{C}=\text{CR}^5$ ,  $\text{C}\equiv\text{C}$ , Si  $(\text{R}^5)_2$ , Ge  $(\text{R}^5)_2$ , Sn  $(\text{R}^5)_2$ ,  $\text{C}=\text{O}$ ,  $\text{C}=\text{S}$ ,  $\text{C}=\text{Se}$ ,  $\text{C}=\text{NR}^5$ ,  $\text{P}(\text{O})(\text{R}^5)$ , SO,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NR}^5$ , O, S oder  $\text{CONR}^5$ ;

$\text{C}_2\text{-C}_{40}$ -alkenyl,  
das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $\text{R}^5$  substituiert ist, und  
wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $\text{CH}_2$ -Gruppen optional substituiert sind durch  $\text{R}^5\text{C}=\text{CR}^5$ ,  $\text{C}\equiv\text{C}$ , Si  $(\text{R}^5)_2$ , Ge  $(\text{R}^5)_2$ , Sn  $(\text{R}^5)_2$ ,  $\text{C}=\text{O}$ ,  $\text{C}=\text{S}$ ,  $\text{C}=\text{Se}$ ,  $\text{C}=\text{NR}^5$ ,  $\text{P}(\text{O})(\text{R}^5)$ , SO,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NR}^5$ , O, S oder  $\text{CONR}^5$ ;

$\text{C}_2\text{-C}_{40}$ -alkynyl,  
das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $\text{R}^5$  substituiert ist, und  
wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $\text{CH}_2$ -Gruppen optional substituiert sind durch  $\text{R}^5\text{C}=\text{CR}^5$ ,  $\text{C}\equiv\text{C}$ , Si  $(\text{R}^5)_2$ , Ge  $(\text{R}^5)_2$ , Sn  $(\text{R}^5)_2$ ,  $\text{C}=\text{O}$ ,  $\text{C}=\text{S}$ ,  $\text{C}=\text{Se}$ ,  $\text{C}=\text{NR}^5$ ,  $\text{P}(\text{O})(\text{R}^5)$ , SO,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NR}^5$ , O, S oder  $\text{CONR}^5$ ;

$\text{C}_6\text{-C}_{60}$ -aryl,  
das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $\text{R}^5$  substituiert ist; und  
 $\text{C}_3\text{-C}_{57}$ -heteroaryl,  
das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $\text{R}^5$  substituiert ist;

$\text{R}^5$  bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus Folgendem besteht:  
Wasserstoff, Deuterium,  $\text{N}(\text{R}^6)_2$ ,  $\text{OR}^6$ ,  $\text{Si}(\text{R}^6)_3$ ,  $\text{B}(\text{OR}^6)_2$ ,  $\text{OSO}_2\text{R}^6$ ,  $\text{CF}_3$ , CN, F, Br, I,  
 $\text{C}_1\text{-C}_{40}$ -alkyl,  
das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $\text{R}^6$  substituiert ist, und  
wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $\text{CH}_2$ -Gruppen optional substituiert sind durch  $\text{R}^6\text{C}=\text{CR}^6$ ,  $\text{C}\equiv\text{C}$ , Si  $(\text{R}^6)_2$ , Ge  $(\text{R}^6)_2$ , Sn  $(\text{R}^6)_2$ ,  $\text{C}=\text{O}$ ,  $\text{C}=\text{S}$ ,  $\text{C}=\text{Se}$ ,  $\text{C}=\text{NR}^6$ ,  $\text{P}(\text{O})(\text{R}^6)$ , SO,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NR}^6$ , O, S oder  $\text{CONR}^6$ ;

$\text{C}_1\text{-C}_{40}$ -alkoxy,  
das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $\text{R}^6$  substituiert ist, und  
wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $\text{CH}_2$ -Gruppen optional substituiert sind durch  $\text{R}^6\text{C}=\text{CR}^6$ ,  $\text{C}\equiv\text{C}$ , Si  $(\text{R}^6)_2$ , Ge  $(\text{R}^6)_2$ , Sn  $(\text{R}^6)_2$ ,  $\text{C}=\text{O}$ ,  $\text{C}=\text{S}$ ,  $\text{C}=\text{Se}$ ,  $\text{C}=\text{NR}^6$ ,  $\text{P}(\text{O})(\text{R}^6)$ , SO,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NR}^6$ , O, S oder  $\text{CONR}^6$ ;

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-thioalkoxy,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten R<sup>6</sup> substituiert ist, und

wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert sind durch R<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>, C≡C, Si (R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>6</sup>, P(=O)(R<sup>6</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>6</sup>, O, S oder CONR<sup>6</sup>;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-alkenyl,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten R<sup>6</sup> substituiert ist, und

wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert sind durch R<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>, C≡C, Si (R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>6</sup>, P(=O)(R<sup>6</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>6</sup>, O, S oder CONR<sup>6</sup>;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-alkynyl,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten R<sup>6</sup> substituiert ist, und

wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert sind durch R<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>, C≡C, Si (R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>6</sup>, P(=O)(R<sup>6</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>6</sup>, O, S oder CONR<sup>6</sup>;

C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-aryl,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten R<sup>6</sup> substituiert ist; und

C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-heteroaryl,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten R<sup>6</sup> substituiert ist;

R<sup>6</sup> bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus Folgendem besteht:

Wasserstoff; Deuterium, OPh, CF<sub>3</sub>, CN, F,

C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-alkyl,

wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional unabhängig voneinander substituiert sind durch Deuterium, CN, CF<sub>3</sub> oder F;

C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-alkoxy,

wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional unabhängig voneinander substituiert sind durch Deuterium, CN, CF<sub>3</sub> oder F;

C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-thioalkoxy,

wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional unabhängig voneinander substituiert sind durch Deuterium, CN, CF<sub>3</sub> oder F;

C<sub>2</sub>-C<sub>5</sub>-alkenyl,

wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional unabhängig voneinander substituiert sind durch Deuterium, CN, CF<sub>3</sub> oder F;

C<sub>2</sub>-C<sub>5</sub>-alkynyl,

wobei ein oder mehrere Wasserstoffatome optional unabhängig voneinander substituiert sind durch Deuterium, CN, CF<sub>3</sub> oder F;

C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-aryl,

das optional mit einem oder mehreren C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-alkyl-Substituenten substituiert ist;

C<sub>3</sub>-C<sub>17</sub>-heteroaryl,

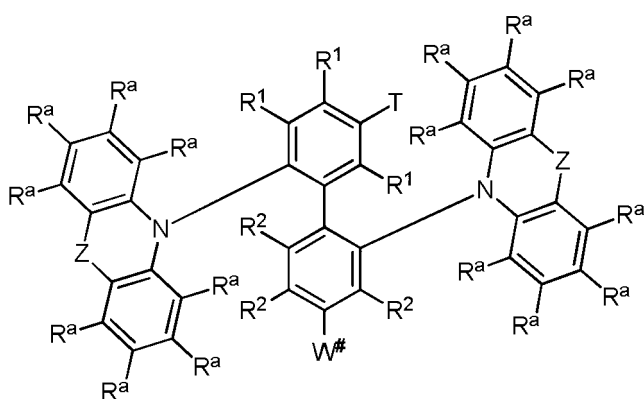
das optional mit einem oder mehreren C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-alkyl-Substituenten substituiert ist;

N(C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-aryl)<sub>2</sub>;

N(C<sub>3</sub>-C<sub>17</sub>-heteroaryl)<sub>2</sub>,

und N(C<sub>3</sub>-C<sub>17</sub>-heteroaryl)(C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-aryl); wobei genau ein Substituent, der aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus T, V, W und Y besteht, CN ist; und genau ein Substituent, der aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus T, V, W und Y besteht, CF<sub>3</sub> ist.

2. Organisches Molekül nach Anspruch 1, wobei das Molekül eine Struktur der Formel Ia umfasst oder daraus besteht:



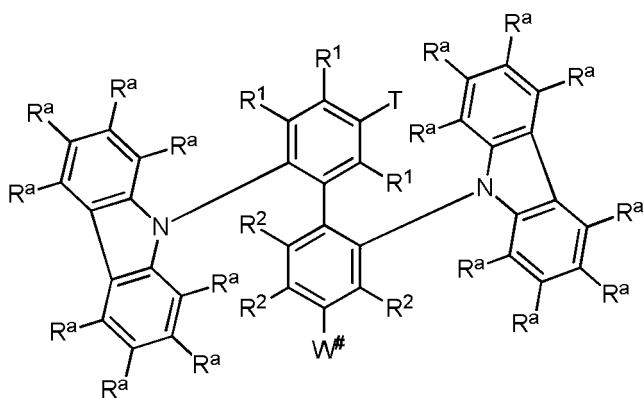
Formel Ia

wobei

$W^\#$  aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus CN und  $CF_3$  besteht,

Z, T,  $R^1$ ,  $R^2$  und  $R^a$  nach Anspruch 1 definiert sind, wobei genau ein Substituent, der aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus T und  $W^\#$  besteht, CN ist; und genau ein Substituent, der aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus T und  $W^\#$  besteht,  $CF_3$  ist.

3. Organisches Molekül nach einem oder mehreren von den Ansprüchen 1 bis 2, wobei das Molekül eine Struktur der Formel IIa umfasst oder daraus besteht:



Formel IIa

wobei

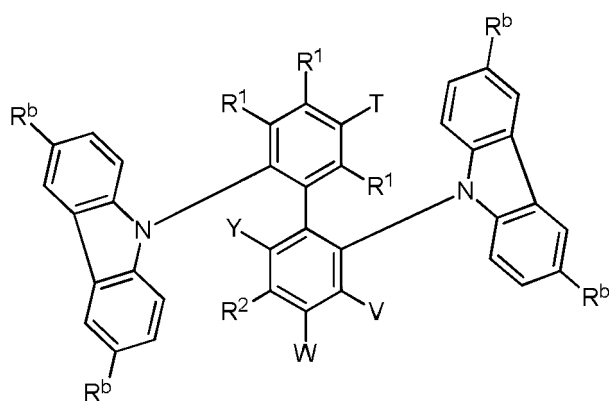
$W^\#$  aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus CN und  $CF_3$  besteht,

Z, T,  $R^1$ ,  $R^2$  und  $R^a$  wie in Anspruch 1 definiert sind, wobei genau ein Substituent, der aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus T und  $W^\#$  besteht, CN ist; und genau ein Substituent, der aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus T,  $W^\#$  besteht,  $CF_3$  ist.

4. Organisches Molekül nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 3, wobei  $R^1$  und  $R^2$  bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt sind, die aus H, Methyl, Mesityl, Toly und Phenyl besteht.

5. Organisches Molekül nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 4, wobei  $R^1$  und  $R^2$  beide H sind.

6. Organisches Molekül nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 4, wobei das Molekül eine Struktur der Formel IIb umfasst oder daraus besteht:



Formel IIb

wobei

$R^b$  bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus Folgendem besteht: Wasserstoff, Deuterium,  $N(R^5)_2$ ,  $OR^5$ ,  $Si(R^5)_3$ ,  $B(OR^5)_2$ ,  $OSO_2R^5$ ,  $CF_3$ , CN, F, Br, I,

$C_1$ - $C_{40}$ -alkyl,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $R^5$  substituiert ist, und

wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $CH_2$ -Gruppen optional substituiert sind durch  $R^5C=CR^5$ ,  $C\equiv C$ , Si( $R^5$ )<sub>2</sub>, Ge( $R^5$ )<sub>2</sub>, Sn( $R^5$ )<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)( $R^5$ ), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

$C_1$ - $C_{40}$ -alkoxy,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $R^5$  substituiert ist, und

wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $CH_2$ -Gruppen optional substituiert sind durch  $R^5C=CR^5$ ,  $C\equiv C$ , Si( $R^5$ )<sub>2</sub>, Ge( $R^5$ )<sub>2</sub>, Sn( $R^5$ )<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)( $R^5$ ), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

$C_1$ - $C_{40}$ -thioalkoxy,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $R^5$  substituiert ist, und

wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $CH_2$ -Gruppen optional substituiert sind durch  $R^5C=CR^5$ ,  $C\equiv C$ , Si( $R^5$ )<sub>2</sub>, Ge( $R^5$ )<sub>2</sub>, Sn( $R^5$ )<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)( $R^5$ ), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

$C_2$ - $C_{40}$ -alkenyl,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $R^5$  substituiert ist, und

wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $CH_2$ -Gruppen optional substituiert sind durch  $R^5C=CR^5$ ,  $C\equiv C$ , Si( $R^5$ )<sub>2</sub>, Ge( $R^5$ )<sub>2</sub>, Sn( $R^5$ )<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)( $R^5$ ), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

$C_2$ - $C_{40}$ -alkynyl,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $R^5$  substituiert ist, und

wobei eine oder mehrere nicht benachbarte  $CH_2$ -Gruppen optional substituiert sind durch  $R^5C=CR^5$ ,  $C\equiv C$ , Si( $R^5$ )<sub>2</sub>, Ge( $R^5$ )<sub>2</sub>, Sn( $R^5$ )<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)( $R^5$ ), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

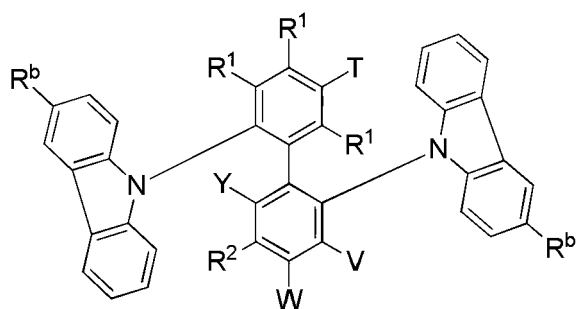
$C_6$ - $C_{60}$ -aryl,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $R^5$  substituiert ist; und

$C_3$ - $C_{57}$ -heteroaryl,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten  $R^5$  substituiert ist; und wobei davon abgesehen die Definitionen des Anspruchs 1 gelten.

7. Organisches Molekül nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 4, wobei das Molekül eine Struktur der Formel IIc umfasst oder daraus besteht:



Formel IIc

wobei

R<sup>b</sup> bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus Folgendem besteht: Wasserstoff, Deuterium, N(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, OR<sup>5</sup>, Si(R<sup>5</sup>)<sub>3</sub>, B(OR<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R<sup>5</sup>, CF<sub>3</sub>, CN, F, Br, I,

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-alkyl,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten R<sup>5</sup> substituiert ist, und

wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-alkoxy,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten R<sup>5</sup> substituiert ist, und

wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-thioalkoxy,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten R<sup>5</sup> substituiert ist, und

wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert sind durch R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-alkenyl,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten R<sup>5</sup> substituiert ist, und

wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-alkynyl,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten R<sup>5</sup> substituiert ist, und

wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH<sub>2</sub>-Gruppen optional substituiert werden durch R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S oder CONR<sup>5</sup>;

C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-aryl,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten R<sup>5</sup> substituiert ist; und

C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-heteroaryl,

das optional mit einem oder mehreren Substituenten R<sup>5</sup> substituiert ist; und wobei davon abgesehen die Definitionen des Anspruchs 1 gelten.

8. Organisches Molekül nach Anspruch 6 oder 7, wobei R<sup>b</sup> bei jedem Vorkommen unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus Folgendem besteht:

- Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub>,

- Ph, das optional mit einem oder mehreren Substituenten substituiert ist, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph;

- Pyridinyl, das optional mit einem oder mehreren Substituenten substituiert ist, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph;

- Pyrimidinyl, das optional mit einem oder mehreren Substituenten substituiert ist, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph;

- Carbazolyl, das optional mit einem oder mehreren Substituenten substituiert ist, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph;

- Triazinyl, das optional mit einem oder mehreren Substituenten substituiert ist, die unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt werden, die aus Folgendem besteht: Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> und Ph; und

- N(Ph)<sub>2</sub>.

9. Verfahren zur Herstellung eines organischen Moleküls nach den Ansprüchen 1 bis 8, umfassend ein R<sup>2</sup>-substituiertes cyano/trifluormethyl-substituiertes 1-Brom-2-fluorphenyl als ein Reaktionsmittel.

10. Verwendung eines organischen Moleküls nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 8 als Lumineszenzmitter und/oder als Wirtsmaterial und/oder als Elektronentransportmaterial und/oder als Lochinjektionsmaterial und/oder als Lochblockierungsmaterial in einer optoelektronischen Vorrichtung.

11. Verwendung nach Anspruch 10, wobei die optoelektronische Vorrichtung aus der Gruppe ausgewählt wird, die aus Folgendem besteht:

- organischen Leuchtdioden (OLEDs),
- lichtemittierenden elektrochemischen Zellen,
- OLED-Sensoren, insbesondere in nicht hermetisch abgeschirmten Gas- und Dampfsensoren,
- organischen Dioden,
- organischen Solarzellen,
- organischen Transistoren,
- organischen Feldeffekttransistoren,

- organischen Lasern und
- Abwärtskonversionselementen.

12. Zusammensetzung, die umfasst oder besteht aus:

- (a) mindestens einem organischen Molekül nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 8, insbesondere in Form eines Emitters und/oder eines Wirts, und
- (b) einem oder mehreren Emitter- und/oder Wirtsmaterialien, die sich von dem organischen Molekül nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 8 unterscheiden, und
- (c) optional einen oder mehrere Farbstoffe und/oder ein oder mehrere Lösungsmittel.

13. Optoelektronische Vorrichtung, umfassend ein organisches Molekül nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 8 oder eine Zusammensetzung nach Anspruch 12, insbesondere in Form einer Vorrichtung, die aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus Folgendem besteht: organische Leuchtdiode (OLED), lichtemittierende elektrochemische Zelle, OLED-Sensor, insbesondere in nicht hermetisch abgeschirmten Gas- und Dampfsensoren, organische Diode, organische Solarzelle, organischer Transistor, organischer Feldeffekttransistor, organischer Laser und Abwärtskonversionselement.

14. Optoelektronische Vorrichtung nach Anspruch 13, die umfasst oder besteht aus:

- einem Substrat,
- einer Anode, und
- einer Kathode, wobei die Anode oder die Kathode auf dem Substrat angeordnet ist, und
- mindestens einer lichtemittierenden Schicht, die zwischen der Anode und der Kathode angeordnet ist und die das organische Molekül nach den Ansprüchen 1 bis 8 oder eine Zusammensetzung nach Anspruch 12 umfasst.

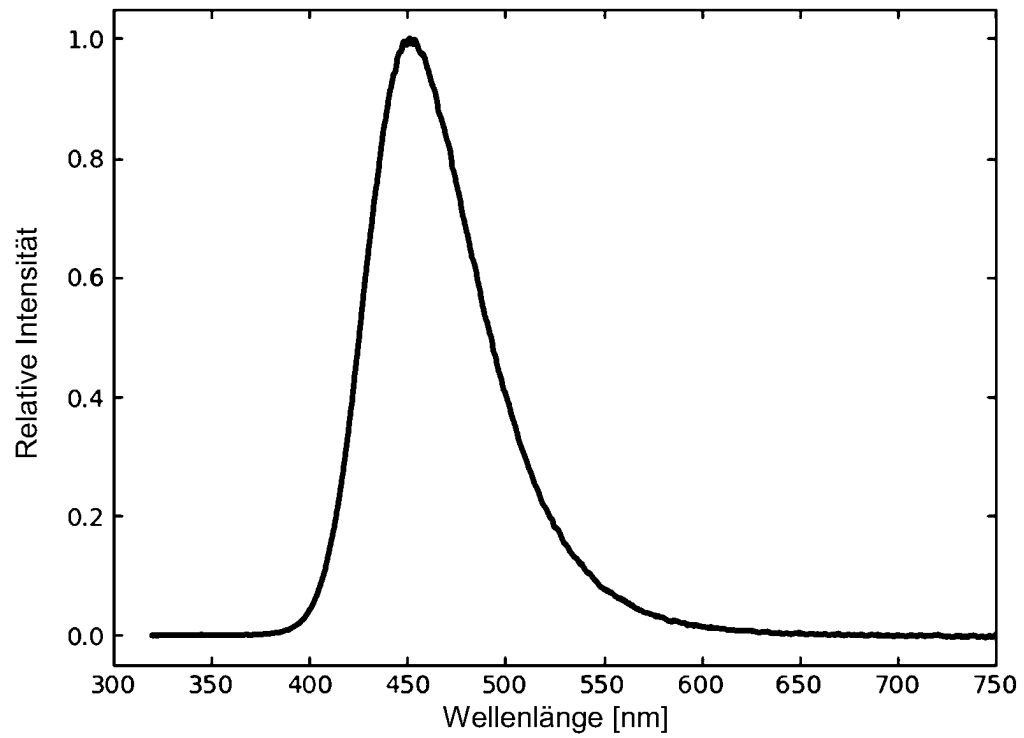
15. Verfahren zur Herstellung einer optoelektronischen Vorrichtung, wobei ein organisches Molekül nach einem der Ansprüche 1 bis 8 oder eine Zusammensetzung nach Anspruch 12 verwendet wird, insbesondere umfassend das Verarbeiten der organischen Verbindung durch ein Vakuumaufdampfungsverfahren oder aus einer Lösung.

Es folgt eine Seite Zeichnungen



Anhängende Zeichnungen

Figur 1



Figur 2

