

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

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum
Internationales Büro



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

PCT

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer
WO 2007/065550 A1

(51) Internationale Patentklassifikation:

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

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

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2006/011029

(22) Internationales Anmeldedatum:
17. November 2006 (17.11.2006)

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:

10 2005 058 557.4
8. Dezember 2005 (08.12.2005) DE
10 2006 009 630.4 2. März 2006 (02.03.2006) DE

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

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

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

(72) Erfinder; und

(75) Erfinder/Anmelder (nur für US): **HEIL, Holger**
[DE/DE]; Weinbergstrasse 49, 64285 Darmstadt (DE).
STOESSEL, Philipp [DE/DE]; Sophienstrasse 30,
60487 Frankfurt/Main (DE). **PARHAM, Amir** [DE/DE];
Franz-Henle-Strasse 4, 65929 Frankfurt (DE). **VEST-
WEBER, Horst** [DE/DE]; Denkmalstrasse 6, 34630
Gilbersberg-Winterscheid (DE).

Veröffentlicht:

— mit internationalem Recherchenbericht

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

(54) Title: NOVEL MATERIALS FOR ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DEVICES

(54) Bezeichnung: NEUE MATERIALIEN FÜR ORGANISCHE ELEKTROLUMINESZENZVORRICHTUNGEN

(57) Abstract: The invention relates to anthracene derivatives, to the use thereof in organic electroluminescent devices and organic electroluminescent devices containing said compounds.

(57) Zusammenfassung: Die vorliegende Erfindung betrifft Anthracenderivate, deren Verwendung in organischen Elektrolumi-
neszenzvorrichtungen und organische Elektrolumineszenzvorrichtungen enthaltend diese Verbindungen.



WO 2007/065550 A1

Neue Materialien für organische Elektrolumineszenzvorrichtungen

Die vorliegende Erfindung beschreibt neue Anthracenderivate, die Verwendung dieser Verbindungen in organischen Elektrolumineszenz-
5 vorrichtungen und organische Elektrolumineszenzvorrichtungen enthaltend diese Verbindungen.

Organische Halbleiter werden als funktionelle Materialien in einer Reihe verschiedenartiger Anwendungen, die im weitesten Sinn der Elektronik-
10 industrie zugerechnet werden können, verwendet. Der allgemeine Aufbau organischer Elektrolumineszenzvorrichtungen, die zur Emission von Licht im sichtbaren Spektralbereich befähigt sind, ist beispielsweise in US 4539507, US 5151629, EP 0676461 und WO 98/27136 beschrieben.

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

- 20 1. Die verwendeten Verbindungen sind nicht ausreichend thermisch stabil und weisen keine ausreichend hohe Glasübergangstemperatur auf.
- 25 2. Die verwendeten Verbindungen sind nicht ausreichend gut löslich in organischen Lösemitteln, was ihre Reinigung bei der Herstellung sowie die Reinigung der Aufdampfanlagen (beispielsweise der Schattenmasken) erschwert.
- 30 3. Die Loch- und Elektronenstabilität (Redoxstabilität) der bislang verwendeten Verbindungen ist noch nicht ausreichend.

Als nächstliegender Stand der Technik kann die Verwendung verschiedener kondensierter Aromaten, insbesondere Anthracen- oder Pyrenderivate, als Host-Materialien vor allem für blau emittierende Elektrolumineszenzvorrichtungen genannt werden. Als Host-Material
35 gemäß dem Stand der Technik ist 9,10-Bis(2-naphthyl)anthracen (US 5935721) bekannt. Weitere Anthracenderivate, die sich als Host-

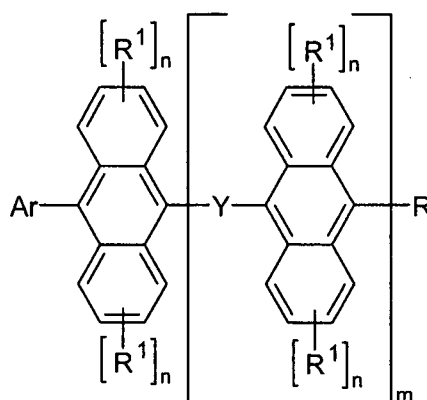
- 2 -

Materialien eignen, sind beispielsweise in WO 01/076323, in
 WO 01/021729, in WO 04/013073, in WO 04/018588, in WO 03/087023
 oder in WO 04/018587 beschrieben. Host-Materialien, basierend auf aryl-
 substituierten Pyrenen und Chrysenen, werden in WO 04/016575
 beschrieben, wobei hier prinzipiell auch entsprechende Anthracen- und
 Phenanthrenderivate mit umfasst sind. In WO 03/095445 und in
 CN 1362464 werden 9,10-Bis(1-naphthyl)anthracen-Derivate für die
 Verwendung in OLEDs beschrieben.

Es war die Aufgabe der vorliegenden Erfindung, Verbindungen mit
 verbesserten Eigenschaften, insbesondere verbesserte Hostmaterialien
 und verbesserte blaue und grüne Emmitter, bereitzustellen.

Überraschend wurde gefunden, dass organische Elektrolumineszenz-
 vorrichtungen, welche bestimmte Anthracenderivate enthalten, die mit
 Trialkylsilylgruppen substituiert sind, deutliche Verbesserungen gegenüber
 dem Stand der Technik aufweisen. Diese Verbindungen weisen eine hohe
 thermische Stabilität, eine hohe Glasübergangstemperatur, eine hohe
 Redoxstabilität und eine gute Löslichkeit in organischen Lösemitteln auf.
 Diese Verbindungen und deren Verwendung in OLEDs sind daher der
 Gegenstand der vorliegenden Erfindung.

Gegenstand der Erfindung sind silyl-substituierte Verbindungen der Formel
 (1),



Formel (1)

- 3 -

wobei für die verwendeten Symbole und Indizes gilt:

- 5 **Ar** ist eine 1-Naphthylgruppe oder eine 9-Anthrylgruppe, in welcher ein oder zwei Kohlenstoffatome durch N ersetzt sein können und welche mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann und/oder welche mit einem oder mehreren Resten $N(Ar^1)_2$ substituiert sein kann, wobei die beiden Reste Ar^1 auch durch eine Einfachbindung oder eine Gruppe O, S, $N(R^1)$ oder $C(R^1)_2$ miteinander verbunden sein können;
- 10 **R** ist ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen, welches mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann, oder eine Gruppe $N(Ar^1)_2$, wobei die beiden Reste Ar^1 auch durch eine Einfachbindung oder eine Gruppe O, S, $N(R^1)$ oder $C(R^1)_2$ miteinander verbunden sein können;
- 15 **Ar^1** ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen, welches durch einen oder mehrere Reste R^1 substituiert sein kann;
- 20 **Y** ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden eine bivalente Gruppe enthaltend 1 bis 40 C-Atome oder -O-, -S-, $-NR^1$ -, $-P(=O)R^1$ - oder eine Einfachbindung;
- 25 **R^1** ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten $Si(R^2)_3$, F, Cl, Br, I, CN, $N(R^3)_2$, NO_2 , eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^3 substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen durch $-R^3C=CR^3$ -, $-C\equiv C$ -, $Si(R^3)_2$, $Ge(R^3)_2$, $Sn(R^3)_2$, C=O, C=S, C=Se, C=NR³, -O-, -S-, $-N(R^3)$ - oder $-CONR^3$ - ersetzt sein können und
- 30 wobei ein oder mehrere H-Atome durch F, Cl, Br, I, CN oder NO_2 ersetzt sein können, oder eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 5
- 35

- 4 -

- 5 bis 24 aromatischen Ringatomen, die mit einem oder mehreren Resten R^3 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 24 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^3 substituiert sein kann, oder eine Kombination aus zwei, drei, vier oder fünf dieser Systeme; dabei können auch zwei oder mehrere benachbarte Substituenten R^1 miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden;
- 10 R^2 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden eine geradkettige Alkylgruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkylgruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, wobei jeweils eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen, die nicht direkt an das Silicium binden, durch $-R^3C=CR^3-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^3)_2$, $Ge(R^3)_2$,
 15 $Sn(R^3)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^3$, $-O-$, $-S-$, $-N(R^3)-$ oder $-CONR^3-$ ersetzt sein können und wobei jeweils ein oder mehrere H-Atome durch F, Cl, Br, I, CN oder NO_2 ersetzt sein können, welche auch durch eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 5 bis 24 aromatischen Ringatomen, die mit einem oder mehreren Resten R^3 substituiert sein kann, oder durch eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 24 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^3 substituiert sein kann, substituiert sein kann; dabei können auch zwei oder mehrere Substituenten R^2 miteinander ein mono- oder polycyclisches Ringsystem bilden;
- 20 R^3 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H oder ein Kohlenwasserstoffrest mit 1 bis 20 C-Atomen, welcher aliphatisch oder aromatisch oder eine Kombination aus aliphatisch und aromatisch sein kann und welcher auch durch F substituiert sein kann; dabei können auch zwei oder mehrere Reste R^3 miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden;
- 30 n ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten 0, 1, 2, 3 oder 4;
- 35 m ist 0, 1, 2, 3, 4 oder 5;

- 5 -

dadurch gekennzeichnet, dass mindestens ein Rest R^1 im Molekül anwesend ist, welcher eine Gruppe $Si(R^2)_3$ darstellt.

- 5 Unter einer Arylgruppe bzw. einer Heteroarylgruppe im Sinne dieser Erfindung wird eine aromatische Gruppe bzw. heteroaromatische Gruppe mit einem gemeinsamen aromatischen π -Elektronensystem verstanden. Dies kann im Sinne dieser Erfindung ein einfacher Homo- oder Hetero-
- 10 cyclus sein, beispielsweise Benzol, Pyridin, Thiophen, etc., oder es kann eine kondensierte Aryl- oder Heteroarylgruppe sein, in der mindestens zwei aromatische oder heteroaromatische Ringe, beispielsweise Benzol-
- 15 ringe, miteinander „verschmolzen“, d. h. durch Anellierung einander ankondensiert sind, also mindestens eine gemeinsame Kante und dadurch auch ein gemeinsames aromatisches π -Elektronensystem aufweisen. Diese Aryl- oder Heteroarylgruppen können substituiert oder unsubstituiert
- 20 sein; ebenso können gegebenenfalls vorhandene Substituenten weitere Ringsysteme bilden. So sind beispielsweise Systeme wie Naphthalin, Anthracen, Phenanthren, Pyren, etc. als Arylgruppen und Chinolin, Acridin, Benzothiophen, Carbazol, etc. als Heteroarylgruppen im Sinne dieser Erfindung zu sehen, während beispielsweise Biphenyl, Fluoren, Spirobi-
- fluoren, etc. keine Arylgruppen darstellen, da es sich hierbei um separate aromatische Elektronensysteme handelt.

- 25 Ein aromatisches Ringsystem im Sinne dieser Erfindung enthält 6 bis 40 C-Atome im Ringsystem. Ein heteroaromatisches Ringsystem im Sinne dieser Erfindung enthält 2 bis 40 C-Atome und mindestens ein Heteroatom im Ringsystem, mit der Maßgabe, dass die Summe aus C-Atomen und Heteroatomen mindestens 5 ergibt. Die Heteroatome sind bevorzugt ausgewählt aus N, O und/oder S. Unter einem aromatischen oder hetero-
- 30 aromatischen Ringsystem im Sinne dieser Erfindung soll ein System verstanden werden, das nicht notwendigerweise nur Aryl- oder Heteroarylgruppen enthält, sondern in dem auch mehrere Aryl- oder Heteroarylgruppen durch eine kurze, nicht-aromatische Einheit (weniger als 10 % der von H verschiedenen Atome, bevorzugt weniger als 5 % der von H
- 35 verschiedenen Atome), wie z. B. ein sp^3 -hybridisiertes C-, N- oder O-Atom, unterbrochen sein können. So sollen beispielsweise auch Systeme wie

9,9'-Spirobifluoren, Fluoren, 9,9-Diarylfluoren, Triarylamin, Diarylether, etc. als aromatische Ringsysteme im Sinne dieser Erfindung verstanden werden. Dabei kann ein Teil des aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystems auch eine kondensierte Gruppe sein.

5

Im Rahmen der vorliegenden Erfindung werden unter einer C₁- bis C₄₀-Alkylgruppe, in der auch einzelne H-Atome oder CH₂-Gruppen durch die oben genannten Gruppen substituiert sein können, besonders bevorzugt die Reste Methyl, Ethyl, n-Propyl, i-Propyl, n-Butyl, i-Butyl, s-Butyl, t-Butyl, 2-Methylbutyl, n-Pentyl, s-Pentyl, Cyclopentyl, n-Hexyl, Cyclohexyl, n-Heptyl, Cycloheptyl, n-Octyl, Cyclooctyl, 2-Ethylhexyl, Trifluormethyl, Pentafluorethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, Ethenyl, Propenyl, Butenyl, Pentenyl, Cyclopentenyl, Hexenyl, Cyclohexenyl, Heptenyl, Cycloheptenyl, Octenyl, Cyclooctenyl, Ethinyl, Propinyl, Butinyl, Pentinyl, Hexinyl oder Octinyl verstanden. Unter einer C₁- bis C₄₀-Alkoxygruppe werden besonders bevorzugt Methoxy, Ethoxy, n-Propoxy, i-Propoxy, n-Butoxy, i-Butoxy, s-Butoxy, t-Butoxy oder 2-Methylbutoxy verstanden. Unter einem aromatischen oder heteroaromatischen Ringsystem mit 1 bis 30 aromatischen Ringatomen, welches noch jeweils mit den oben genannten Resten R¹ bzw. R² substituiert sein kann und welches über beliebige Positionen am Aromaten bzw. Heteroaromaten verknüpft sein kann, werden insbesondere Gruppen verstanden, die abgeleitet sind von Benzol, Naphthalin, Anthracen, Phenanthren, Pyren, Chrysen, Perylen, Fluoranthren, Tetracen, Pentacen, Benzpyren, Biphenyl, Biphenylen, Terphenyl, Terphenylen, Fluoren, Spirobifluoren, Truxen, Isotruxen, Dihydrophenanthren, Dihdropyren, Tetrahydropyren, cis- oder trans-Indenofluoren, Furan, Benzofuran, Isobenzofuran, Dibenzofuran, Thiophen, Benzothiophen, Isobenzothiophen, Dibenzothiophen, Pyrrol, Indol, Isoindol, Carbazol, Pyridin, Chinolin, Isochinolin, Acridin, Phenanthridin, Benzo-5,6-chinolin, Benzo-6,7-chinolin, Benzo-7,8-chinolin, Phenothiazin, Phenoxazin, Pyrazol, Indazol, Imidazol, Benzimidazol, Naphthimidazol, Phenanthrimidazol, Pyridimidazol, Pyrazinimidazol, Chinoxalinimidazol, Oxazol, Benzoxazol, Naphthoxazol, Anthroxazol, Phenanthroxazol, Isoxazol, 1,2-Thiazol, 1,3-Thiazol, Benzothiazol, Pyridazin, Benzopyridazin, Pyrimidin, Benzpyrimidin, Chinoxalin, Pyrazin, Phenazin, Naphthyridin, Azacarbazol, Benzocarbolin, Phenanthrolin,

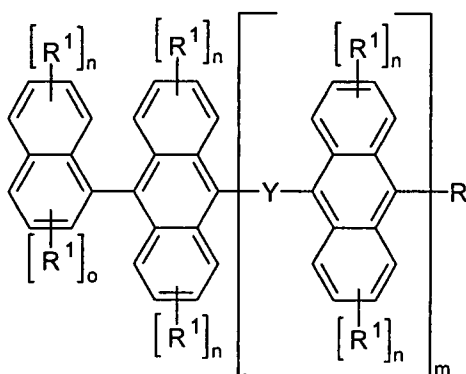
35

- 7 -

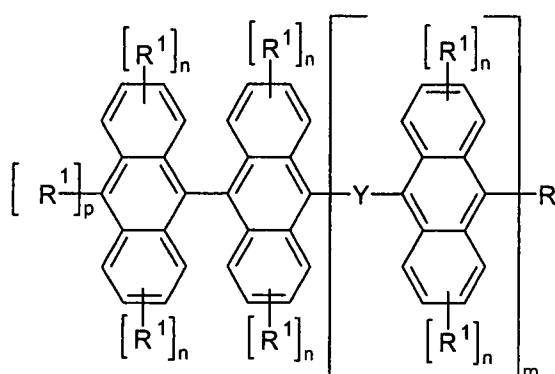
1,2,3-Triazol, 1,2,4-Triazol, Benzotriazol, 1,2,3-Oxadiazol, 1,2,4-Oxadiazol,
 1,2,5-Oxadiazol, 1,3,4-Oxadiazol, 1,2,3-Thiadiazol, 1,2,4-Thiadiazol,
 1,2,5-Thiadiazol, 1,3,4-Thiadiazol, 1,3,5-Triazin, 1,2,4-Triazin,
 1,2,3-Triazin, Tetrazol, 1,2,4,5-Tetrazin, 1,2,3,4-Tetrazin, 1,2,3,5-Tetrazin,
 Purin, Pteridin, Indolizin und Benzothiadiazol.

Bevorzugt sind Verbindungen der Formel (1), in denen das Symbol Ar für
 eine 1-Naphthylgruppe, eine 9-Anthrylgruppe, eine 1-, 4-, 5- oder
 8-Isochinolinylnylgruppe oder eine 4- oder 5-Chinolinylnylgruppe steht.

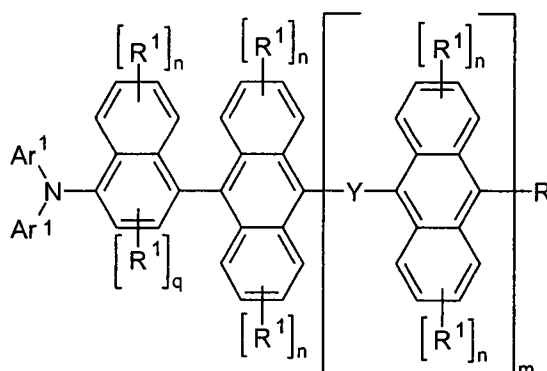
Besonders bevorzugt sind Verbindungen der Formel (1), in denen das
 Symbol Ar für eine 1-Naphthylgruppe oder eine 9-Anthrylgruppe steht.
 Ganz besonders bevorzugt sind die Verbindungen der Formel (1a) bis
 (1d),



Formel (1a)

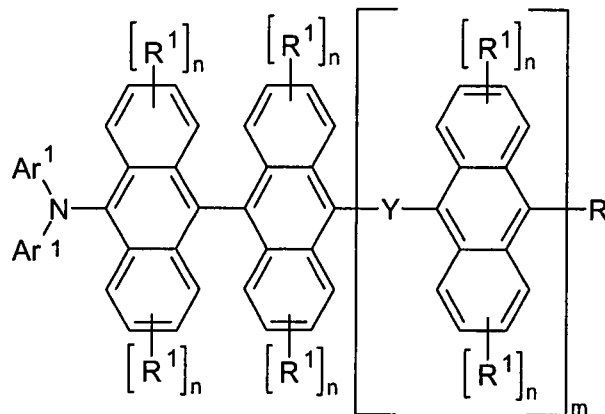


Formel (1b)



Formel (1c)

- 8 -



Formel (1d)

wobei R, Ar¹, R¹, Y, m und n die oben definierte Bedeutung haben, wobei die beiden Reste Ar¹ auch durch eine Einfachbindung oder eine Gruppe O, S, N(R¹) oder C(R¹)₂ miteinander verbunden sein können, und weiterhin gilt:

o ist 0, 1, 2 oder 3;

p ist 0 oder 1;

q ist 0, 1 oder 2;

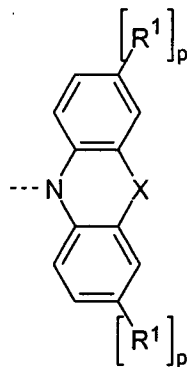
dadurch gekennzeichnet, dass mindestens ein Rest R¹ anwesend ist, der für eine Gruppe Si(R²)₃ steht.

In Verbindungen gemäß Formel (1b) ist der Index p bevorzugt 1, d. h. an die Anthrylgruppe ist bevorzugt in 10-Position ein weiterer Substituent ungleich Wasserstoff gebunden.

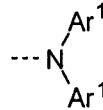
Bevorzugt sind weiterhin Verbindungen der Formel (1) bzw. (1a) bis (1d), in denen das Symbol R für ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 6 bis 24 aromatischen Ringatomen steht, welches mit einem oder mehreren Resten R¹ substituiert sein kann, oder in denen das Symbol R für eine Gruppe der Formel (2a) oder (2b) steht,

- 9 -

5



Formel (2a)



Formel (2b)

10

wobei R^1 und p die oben aufgeführte Bedeutung haben und weiterhin gilt:

X steht für eine Einfachbindung, O, S, $N(R^1)$ oder $C(R^1)_2$;

15

Ar^1 ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 5 bis 20 aromatischen Ringatomen, welche mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann, bevorzugt eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 6 bis 14 aromatischen Ringatomen, welche mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann, besonders bevorzugt Phenyl, 1-Naphthyl oder 2-Naphthyl, welches jeweils mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann.

20

25

Wenn ein Substituent an der Gruppe Ar für eine Gruppe $N(Ar^1)_2$ steht, so ist auch dieser Substituent bevorzugt aus den oben aufgeführten Formeln (2a) und (2b) gewählt.

30

Wenn das Symbol R für ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem steht, so steht es bevorzugt für ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 9 bis 24 aromatischen Ringatomen, welches durch einen oder mehrere Reste R^1 substituiert sein kann. Besonders bevorzugt sind Verbindungen der Formel (1), in denen das Symbol R für eine kondensierte Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 10 bis 16 aromatischen Ringatomen oder für eine aromatische, gegebenenfalls überbrückte, Biarylgruppe steht, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein können. Ganz besonders bevorzugt sind Verbindungen

35

der Formel (1), in denen das Symbol R, wenn er für ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem steht, gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für eine 1-Naphthyl-, 2-Naphthyl-, 9-Anthryl-, 2-Phenanthrenyl-, 9-Phenanthrenyl-, Chinolinyl-, Isochinolinyl-, ortho-, meta- oder para-Biphenyl-, 2-Fluorenyl- oder 2-Spirofluorenylgruppe steht, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann, insbesondere für 1-Naphthyl, welches mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann.

Bevorzugt sind weiterhin Verbindungen gemäß Formel (1) bzw. (1a) bis (1d), die, wenn die Gruppe R für ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem steht, gehinderte Rotation um die Anthracen-R-Bindung aufweisen. Unter gehinderter Rotation im Sinne dieser Erfindung wird eine Rotationsbarriere von mindestens 80 kJ/mol, bevorzugt mindestens 100 kJ/mol, besonders bevorzugt mindestens 120 kJ/mol bei Raumtemperatur verstanden. Diese Rotationsbarriere lässt sich experimentell durch temperaturabhängige NMR-Messungen bestimmen. Wenn die Verbindung der Formel (1) bzw. (1a) bzw. (1b) Atropisomerie um eine oder um mehrere Bindungen zeigt, so sind jeweils auch OLEDs enthaltend die entsprechenden isolierten oder angereicherten Atropisomere Gegenstand der Erfindung. Dies bezieht sich sowohl auf Enantiomere wie auch auf Diastereomere. Gehinderte Rotation um die Anthracen-R-Bindung wird erreicht, wenn die Gruppe R mindestens einen organischen Substituenten in ortho-Position aufweist und/oder wenn es sich bei der Gruppe R beispielsweise um eine 1-Naphthylgruppe handelt, die peri-Wasserstoffatome aufweist.

Es sind sowohl Verbindungen gemäß Formel (1) erfindungsgemäß, in denen die beiden Gruppen Ar und R gleich gewählt sind, wie auch Verbindungen gemäß Formel (1), in denen die Gruppen Ar und R unterschiedlich sind.

Bevorzugt sind weiterhin Verbindungen gemäß Formel (1) bzw. (1a) bis (1d), in denen das Symbol R^1 , gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für $\text{Si}(\text{R}^2)_3$, F, eine geradkettige Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 1 bis 6 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl- oder Alkoxy-

gruppe mit 3 bis 10 C-Atomen, wobei jeweils ein oder mehrere CH₂-Gruppen durch -R³C=CR³-, Si(R³)₂-, -O-, -S- oder -N(R³)- ersetzt sein können und wobei jeweils ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können, oder eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 5 bis 14 aromatischen Ringatomen, die mit einem oder mehreren Resten R³ substituiert sein kann, oder eine Kombination aus zwei oder drei dieser Systeme steht; dabei können auch zwei oder mehrere Reste R¹ miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden. Besonders bevorzugte Reste R¹ sind ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Si(R²)₃, F, geradkettigen Alkylgruppen mit 1 bis 4 C-Atomen oder verzweigten Alkylgruppen mit 3 bis 5 C-Atomen, wobei jeweils ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können, oder Aryl- oder Heteroarylgruppen mit 6 bis 10 aromatischen Ringatomen oder eine Kombination aus zwei dieser Systeme; dabei können auch zwei oder mehrere benachbarte Reste R¹ miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden.

Bevorzugt sind weiterhin Verbindungen gemäß Formel (1) bzw. (1a) bis (1d), in denen das Symbol Y, gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, eine lineare Alkylengruppe mit 1 bis 10 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl- oder Alkylidengruppe mit 3 bis 10 C-Atomen, eine bivalente aromatische Gruppe mit 6 bis 25 C-Atomen, C=O, -O-, -S- oder eine Gruppe der Formel -N(R¹)- oder -P(=O)R¹- oder eine Einfachbindung darstellt. Besonders bevorzugt sind Verbindungen, in denen das Symbol Y, gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für eine lineare Alkylengruppe mit 1 bis 4 C-Atomen, für eine verzweigte Alkyl- oder Alkylidengruppe mit 3 bis 5 C-Atomen, für eine cyclische Alkylengruppe mit 3 bis 10 C-Atomen, für eine bivalente aromatische Gruppe, ausgewählt aus Gruppen, die sich ableiten von Benzol, Naphthalin, Biphenyl oder Terphenyl, oder C=O, -N(R³)- oder -P(=O)R³- oder eine Einfachbindung darstellt.

Bevorzugt sind weiterhin Verbindungen gemäß Formel (1) bzw. (1a) bis (1d), in denen der Index m für 0, 1 oder 2 steht, besonders bevorzugt für 0 oder 1.

Bevorzugt sind weiterhin Verbindungen gemäß Formel (1) bzw. (1a) bis (1d), in denen der Index n für 0, 1 oder 2 steht, besonders bevorzugt für 0 oder 1, wobei mindestens ein Rest R^1 im Molekül anwesend ist, der für $Si(R^2)_3$ steht. Bevorzugt enthält die Verbindung gemäß Formel (1) bzw. (1a) bis (1d) eine, zwei, drei oder vier Gruppen der Formel $Si(R^2)_3$, besonders bevorzugt eine oder zwei Gruppen der Formel $Si(R^2)_3$.

Die Gruppen der Formel $Si(R^2)_3$ können in verschiedenen Positionen des Moleküls gebunden sein. In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung ist mindestens eine Gruppe der Formel $Si(R^2)_3$ an die zentrale Anthraceneinheit gebunden, bevorzugt in 2-Position und/oder in 6-Position des Anthracens. In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform der Erfindung ist mindestens eine Gruppe der Formel $Si(R^2)_3$ an die Gruppe Ar gebunden. Wenn die Gruppe Ar eine 1-Naphthylgruppe darstellt, ist die Gruppe der Formel $Si(R^2)_3$ bevorzugt in der 4-Position der Naphthylgruppe gebunden. Wenn die Gruppe Ar eine 9-Anthrylgruppe darstellt, ist die Gruppe der Formel $Si(R^2)_3$ bevorzugt in der 10-Position der Anthracengruppe gebunden oder in der 2-Position bzw. in der 2,6-Position, falls in der 10-Position ein anderer Rest R^1 gebunden ist. In nochmals einer weiteren bevorzugten Ausführungsform der Erfindung ist mindestens eine Gruppe der Formel $Si(R^2)_3$ an die Gruppe R gebunden. Wenn die Gruppe R eine Arylgruppe oder eine Heteroarylgruppe darstellt, ist die Gruppe der Formel $Si(R^2)_3$ bevorzugt in der para-Position an der Arylgruppe gebunden. Wenn die Gruppe R eine Gruppe der Formel $N(Ar^1)_2$ darstellt, ist die Gruppe der Formel $Si(R^2)_3$ bevorzugt an einer oder beiden Gruppen Ar^1 in der Position para zum Stickstoff gebunden.

Bevorzugte Reste R^2 an der Silylgruppe sind gewählt aus geradkettigen Alkylgruppen mit 1 bis 10 C-Atomen oder verzweigten oder cyclischen Alkylgruppen mit 3 bis 10 C-Atomen, wobei jeweils eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen, die nicht direkt an das Silicium binden, durch O ersetzt sein können und wobei jeweils ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können; dabei können auch zwei oder mehrere Substituenten R^2 miteinander ein mono- oder polycyclisches Ringsystem bilden. Besonders bevorzugte Reste R^2 an der Silylgruppe sind gewählt aus geradkettigen Alkylgruppen mit 1 bis 4 C-Atomen oder verzweigten

Alkylgruppen mit 3 oder 4 C-Atomen, wobei jeweils ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können. Ganz besonders bevorzugte Gruppen R^2 sind Methyl, CF_3 , Ethyl, iso-Propyl und tert-Butyl. Ganz besonders bevorzugte Gruppen $Si(R^2)_3$ sind $Si(Me)_3$, $Si(Me)_2(t-Bu)$,
5 $SiMe(t-Bu)_2$ und $Si(i-Pr)_3$.

Bevorzugt sind weiterhin Verbindungen gemäß Formel (1), deren Molekulargewicht zwischen 400 und 1500 g/mol liegt, besonders bevorzugt zwischen 400 und 900 g/mol.

10 Es stehen verschiedene Verfahren zur Herstellung der erfindungsgemäßen Verbindungen zur Verfügung. Soll die Silylgruppe am Anthracen eingeführt werden, so eignet sich als Ausgangsverbindung 2-Brom-anthrachinon oder 2,6-Dibromanthrachinon bzw. das entsprechende Chlor-anthrachinonderivat. Dieses kann jeweils mit einem reaktiven Organo-
15 metallreagenz, beispielsweise einem Arylgrignardreagenz oder Aryllithiumreagenz umgesetzt und in einem Folgeschritt, beispielsweise mit Zinn(II)-chlorid reduziert werden. Dadurch erhält man 9,10-Diarylanthracenderivate, welche noch in 2- bzw. 2,6-Position Brom oder Chlor tragen. Die
20 Metallierung, beispielsweise Lithiierung, und Umsetzung mit einem Silylhalogenid, beispielsweise Trialkylsilylchlorid, führt zur entsprechenden silylierten Zielverbindung.

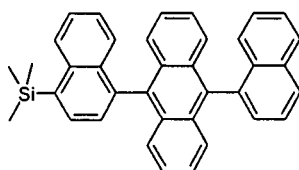
25 Soll die Silylgruppe nicht am zentralen Anthracen, sondern an den aromatischen Gruppen Ar bzw. R eingeführt werden, so bietet es sich auch an, diese in einem ersten Schritt einzuführen und dann erst in einem weiteren Schritt die aromatische Gruppe mit dem Anthracen zu kuppeln. So kann ein Dibromaromat selektiv monolithiiert und mit einem Silylhalogenid zu einem Brom-silylaromaten umgesetzt werden. Dieser kann
30 wiederum durch Lithiierung zur entsprechenden Boronsäure bzw. einem Boronsäurederivat umgesetzt werden, welche dann mit Dibromanthracen oder einem anderen Anthracenderivat in einer Suzuki-Kupplung unter Palladiumkatalyse gekuppelt werden kann. Analog dazu kommen weitere
35 Kupplungsreaktionen zwischen dem Aromaten und dem Anthracen in Frage, beispielsweise die Kupplung nach Stille. Wenn die Gruppe R eine

- 14 -

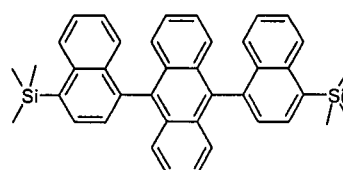
Diarylaminogruppe darstellt, eignet sich eine Kupplung nach Hartwig-Buchwald.

Ein weiterer Gegenstand dieser Erfindung ist ein Verfahren zur Herstellung der erfindungsgemäßen Verbindungen nach Formel (1), welche eine oder mehrere Gruppen $\text{Si}(\text{R}^2)_3$ an der Gruppe Ar bzw. R tragen, durch Kupplung einer funktionalisierten Gruppe Ar bzw. R, welche durch eine oder mehrere Gruppen $\text{Si}(\text{R}^2)_3$ substituiert ist, mit einem entsprechenden Anthracen-derivat. Die Kupplung ist bevorzugt eine Übergangsmetallkatalysierte Kupplungsreaktion, insbesondere eine Suzuki-Kupplung, eine Stille-Kupplung oder eine Hartwig-Buchwald-Kupplung. Dabei kann die Funktionalisierung der Gruppe Ar bzw. R ein Boronsäurederivat für den Einsatz in einer Suzuki-Kupplung sein. Die Gruppe kann ein Trialkylzinn-derivat für den Einsatz in einer Stille-Kupplung sein. Sie kann eine N-H-Funktionalität für den Einsatz in einer Hartwig-Buchwald-Kupplung sein. Weiterhin kann sie eine bromierte Verbindung sein, wenn das Anthracen entsprechend durch ein Boronsäurederivat oder durch ein Trialkylzinn-derivat substituiert ist. Dabei ist überraschend, dass die Silylgruppe an der Gruppe Ar bzw. R unbeschadet in der metallkatalysierten Kupplungsreaktion eingesetzt werden kann und dass diese nicht zu Nebenreaktionen führt.

Beispiele für bevorzugte Verbindungen gemäß Formel (1) sind die im Folgenden abgebildeten Verbindungen (A1) bis (A68).



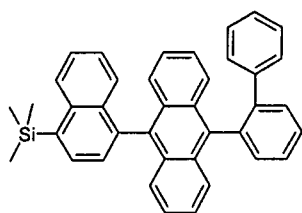
(A1)



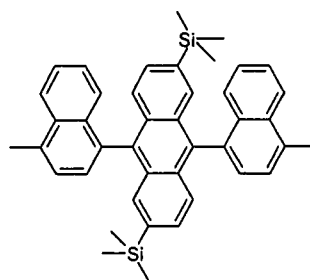
(A2)

- 15 -

5

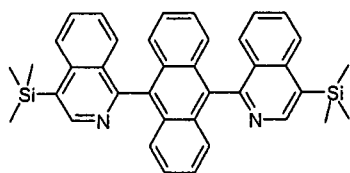


(A3)

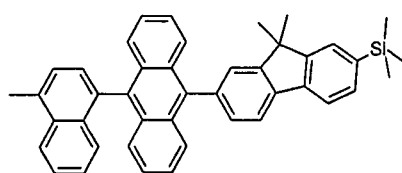


(A4)

10

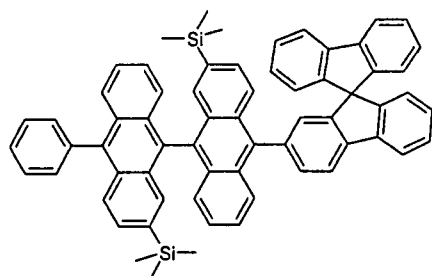


(A5)

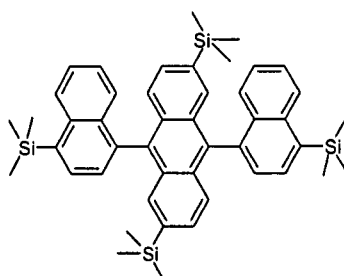


(A6)

15

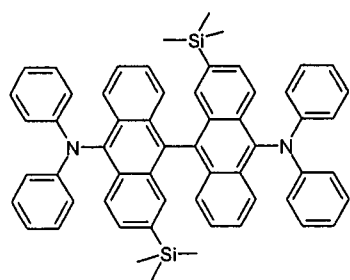


(A7)

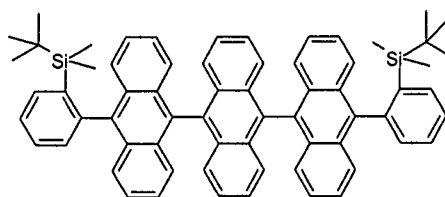


(A8)

20

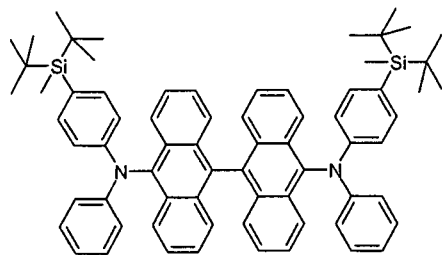


(A9)

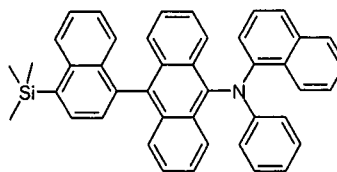


(A10)

25



(A11)

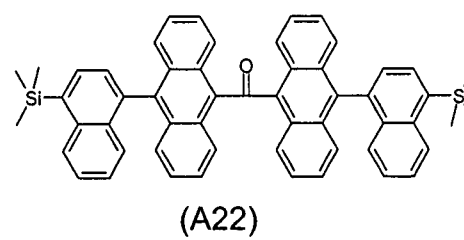
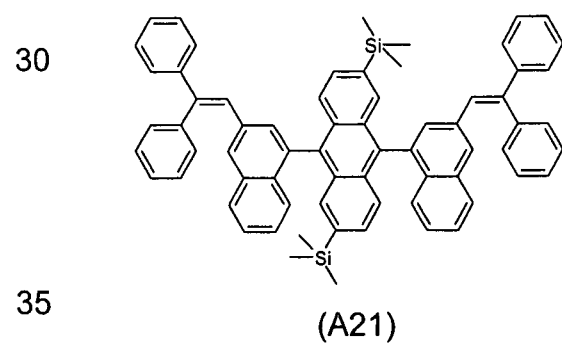
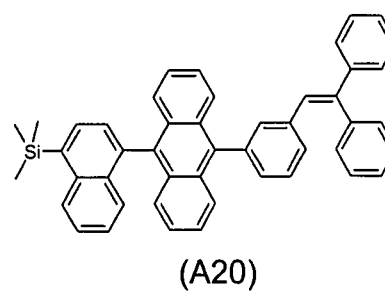
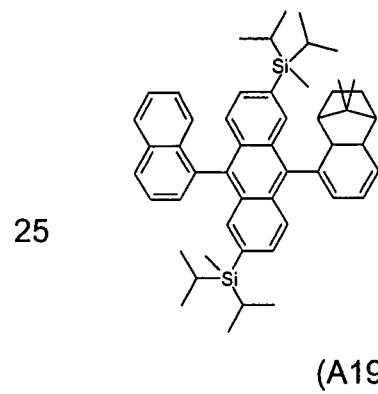
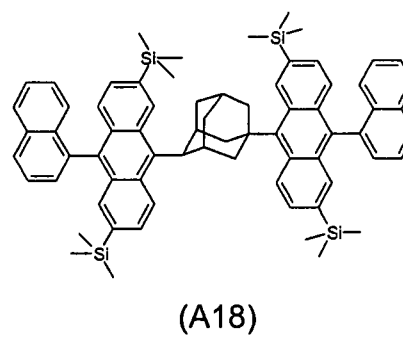
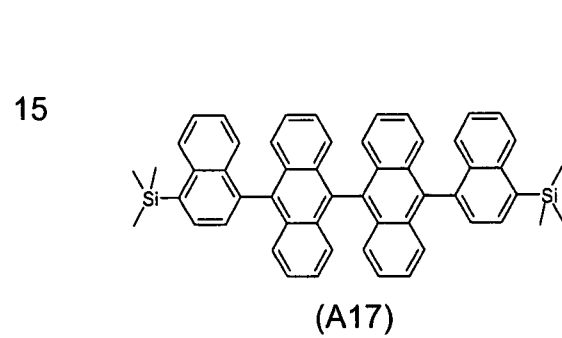
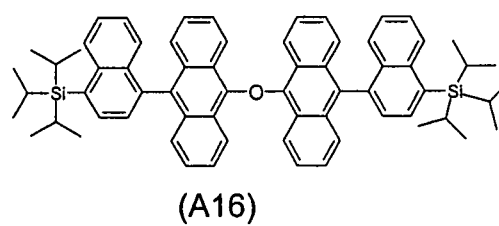
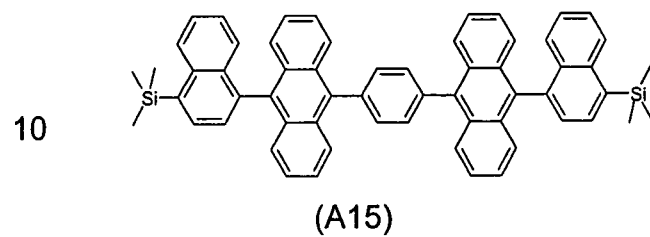
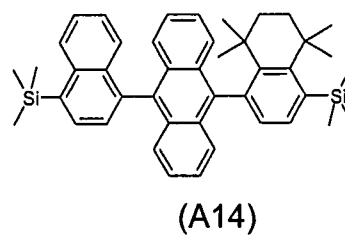
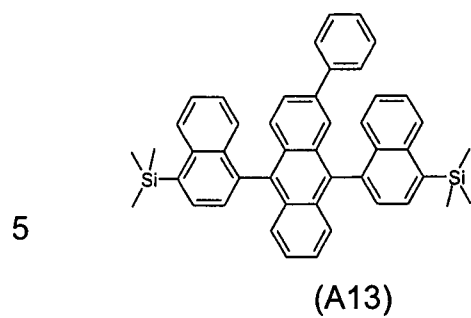


(A12)

30

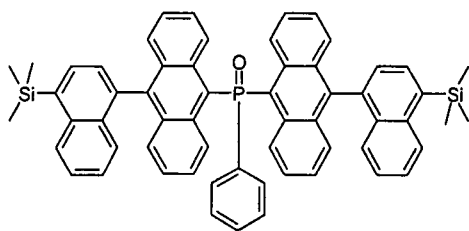
35

- 16 -

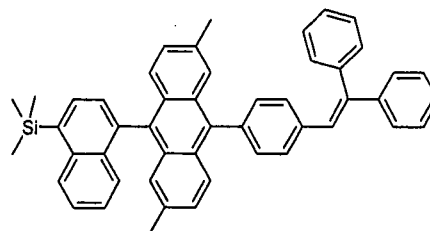


35

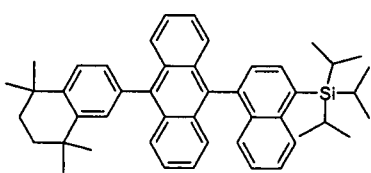
- 17 -



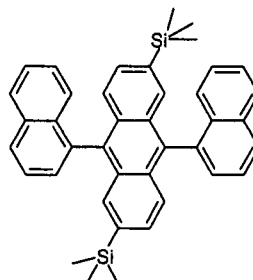
(A23)



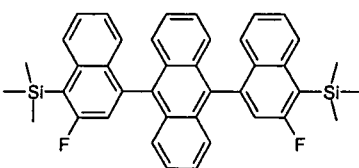
(A24)



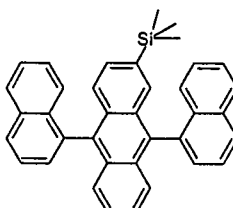
(A25)



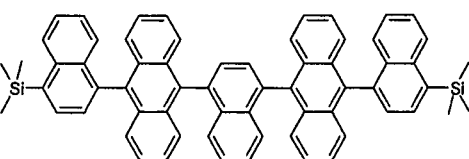
(A26)



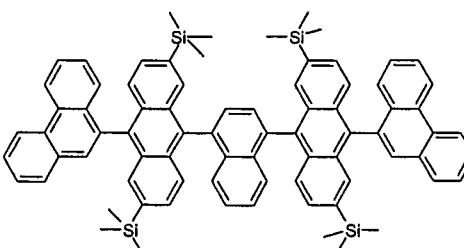
(A27)



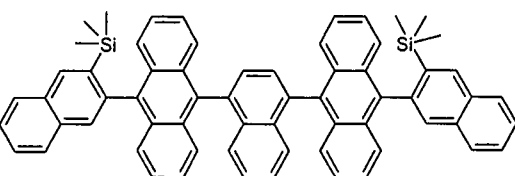
(A28)



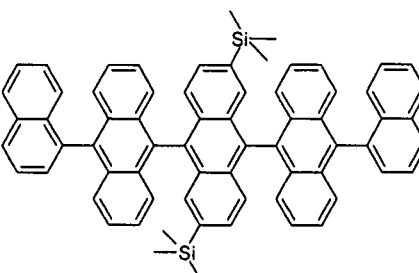
(A29)



(A30)

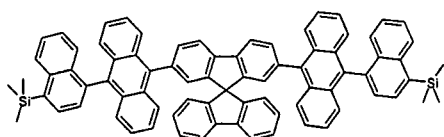


(A31)

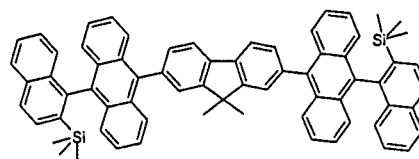


(A32)

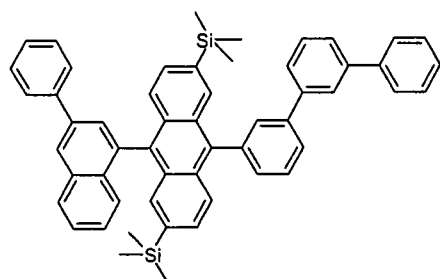
- 18 -



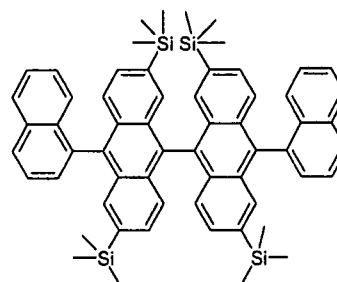
(A33)



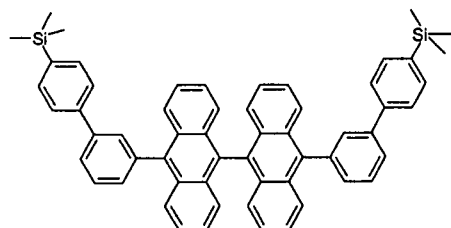
(A34)



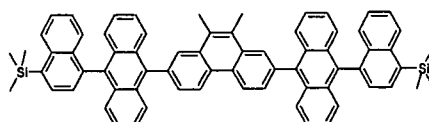
(A35)



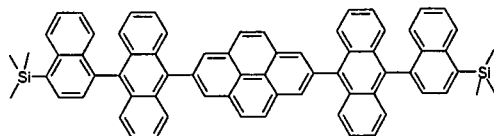
(A36)



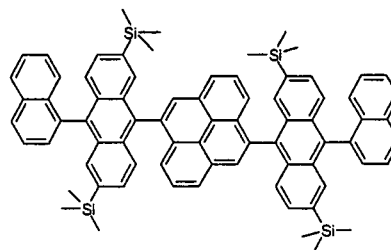
(A37)



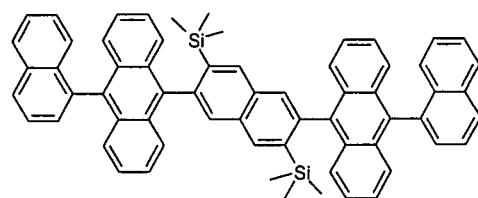
(A38)



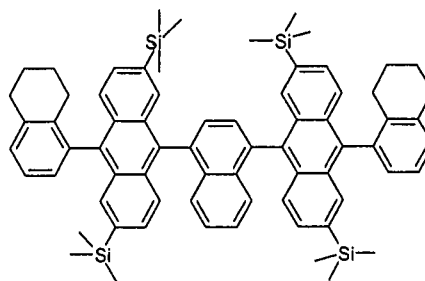
(A39)



(A40)



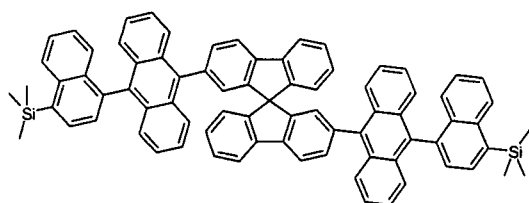
(A41)



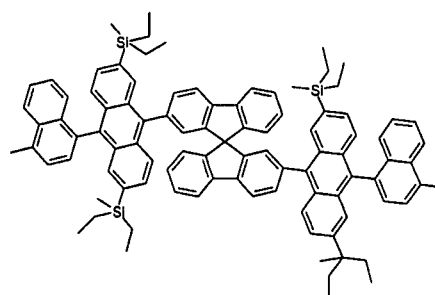
(A42)

- 19 -

5

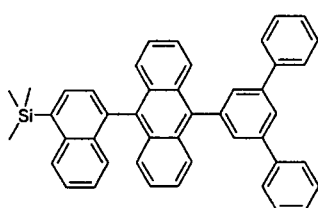


(A43)

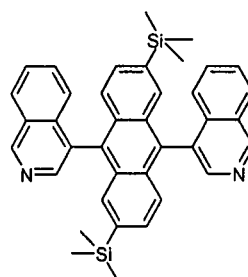


(A44)

10

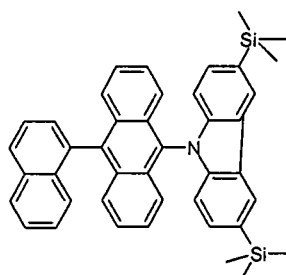


(A45)

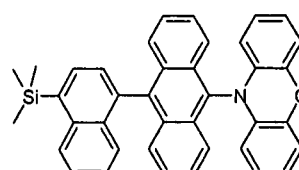


(A46)

15

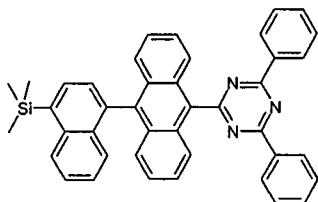


(A47)

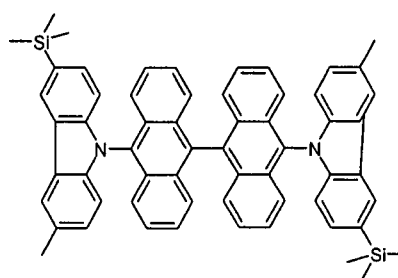


(A48)

20



(A49)



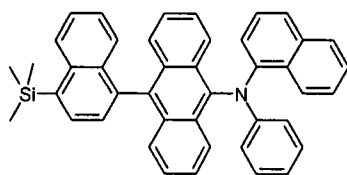
(A50)

30

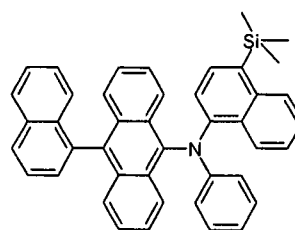
35

- 20 -

5

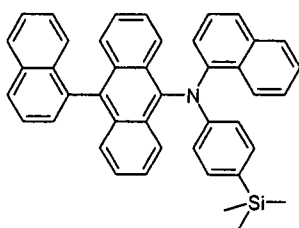


(A51)

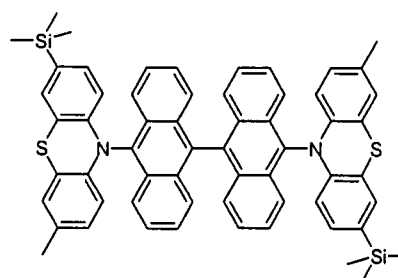


(A52)

10



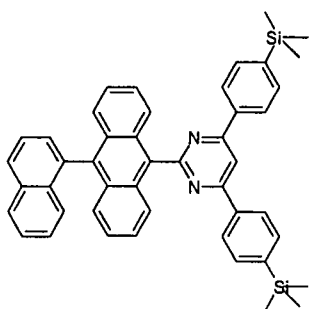
(A53)



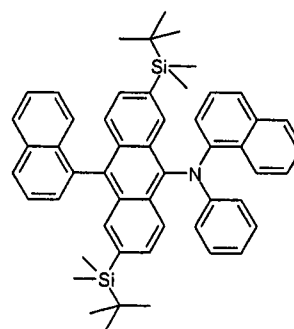
(A54)

15

20



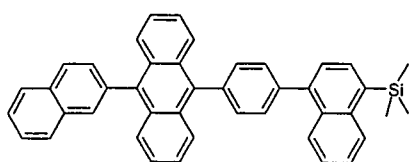
(A55)



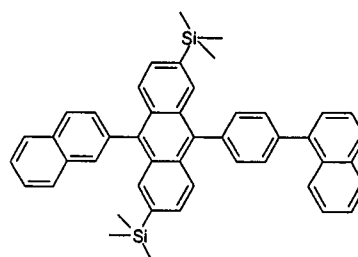
(A56)

25

30



(A57)

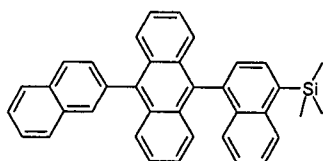


(A58)

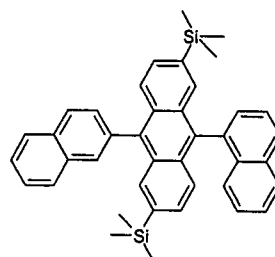
35

- 21 -

5

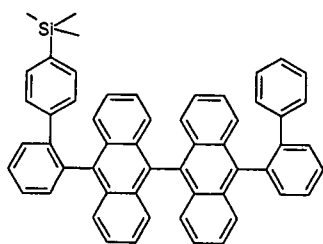


(A59)

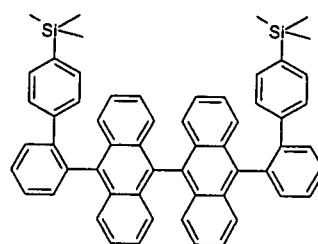


(A60)

10

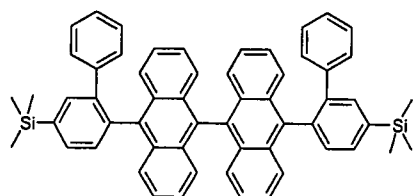


(A61)

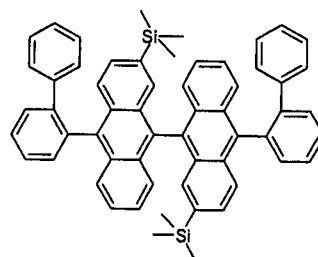


(A62)

15

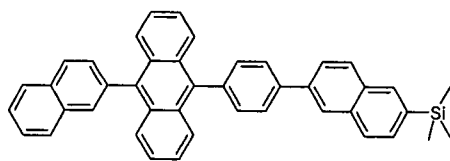


(A63)

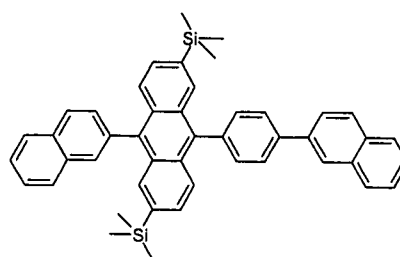


(A64)

25



(A65)



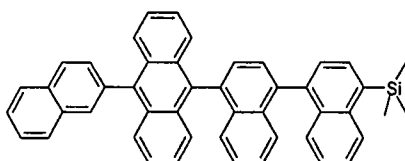
(A66)

30

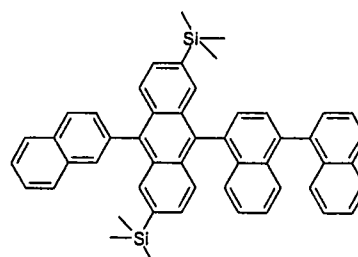
35

- 22 -

5



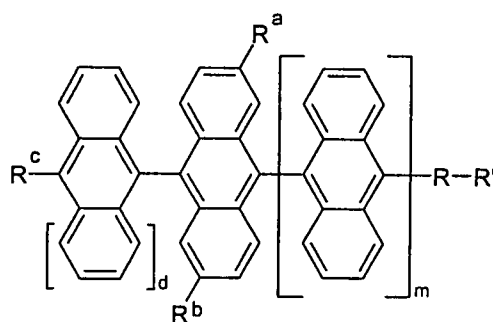
(A67)



(A68)

- 10 Die folgende Tabelle 1 gibt weitere bevorzugte Strukturen gemäß Formel (1) an. Dabei sind ebenso die Strukturen bevorzugt, die statt Gruppen der Formel $\text{Si}(\text{Me})_3$ Gruppen der Formel $\text{SiMe}_2(\text{t-Bu})$, $\text{SiMe}(\text{t-Bu})_2$ oder $\text{Si}(\text{i-Pr})_3$ enthalten. Die in der Tabelle verwendeten Symbole und Indizes beziehen sich auf die im Folgenden abgebildete Formel (3):

15



20

Formel (3)

- 25 Dabei bedeutet $d = 0$, dass es sich bei der entsprechenden Gruppe um eine 1-Naphthylgruppe handelt. Weiterhin steht in Tabelle 1 die Abkürzung $\text{N}(\text{Ph})_2$ für eine Diphenylaminogruppe, $\text{N}(\text{p-Tol})_2$ für eine Bis(para-tolyl)-aminogruppe und $\text{N}(\text{Ph})(1\text{-Naph})$ für eine N-Phenyl-N-(1-naphthyl)amino-

30

Tabelle 1: Bevorzugte Strukturen der Formel (3)

Nr.	R	Ra	Rb	Rc	d	m	R'
1	Phenyl	H	H	$\text{Si}(\text{Me})_3$	0	0	H
2	Phenyl	H	H	$\text{Si}(\text{Me})_3$	0	1	H
3	Phenyl	H	H	$\text{Si}(\text{Me})_3$	1	0	H
4	Phenyl	H	H	$\text{Si}(\text{Me})_3$	1	1	H

35

- 23 -

5	5	Phenyl	H	Si(Me)3	H	0	0	H
	6	Phenyl	H	Si(Me)3	H	0	1	H
	7	Phenyl	H	Si(Me)3	H	1	0	H
	8	Phenyl	H	Si(Me)3	H	1	1	H
	9	Phenyl	H	Si(Me)3	Si(Me)3	0	0	H
10	10	Phenyl	H	Si(Me)3	Si(Me)3	0	1	H
	11	Phenyl	H	Si(Me)3	Si(Me)3	1	0	H
	12	Phenyl	H	Si(Me)3	Si(Me)3	1	1	H
	13	Phenyl	H	Si(Me)3	Methyl	0	0	H
	14	Phenyl	H	Si(Me)3	Methyl	0	1	H
15	15	Phenyl	H	Si(Me)3	Methyl	1	0	H
	16	Phenyl	H	Si(Me)3	Methyl	1	1	H
	17	Phenyl	H	Si(Me)3	F	0	0	H
	18	Phenyl	H	Si(Me)3	F	0	1	H
	19	Phenyl	H	Si(Me)3	F	1	0	H
20	20	Phenyl	H	Si(Me)3	F	1	1	H
	21	Phenyl	H	Si(Me)3	Phenyl	0	0	H
	22	Phenyl	H	Si(Me)3	Phenyl	0	1	H
	23	Phenyl	H	Si(Me)3	Phenyl	1	0	H
	24	Phenyl	H	Si(Me)3	Phenyl	1	1	H
25	25	Phenyl	Si(Me)3	H	H	0	0	H
	26	Phenyl	Si(Me)3	H	H	0	1	H
	27	Phenyl	Si(Me)3	H	H	1	0	H
	28	Phenyl	Si(Me)3	H	H	1	1	H
	29	Phenyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	0	0	H
30	30	Phenyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	0	1	H
	31	Phenyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	1	0	H
	32	Phenyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	1	1	H
	33	Phenyl	Si(Me)3	H	Methyl	0	0	H
	34	Phenyl	Si(Me)3	H	Methyl	0	1	H
35	35	Phenyl	Si(Me)3	H	Methyl	1	0	H
	36	Phenyl	Si(Me)3	H	Methyl	1	1	H
	37	Phenyl	Si(Me)3	H	F	0	0	H
	38	Phenyl	Si(Me)3	H	F	0	1	H
	39	Phenyl	Si(Me)3	H	F	1	0	H
40	40	Phenyl	Si(Me)3	H	F	1	1	H
	41	Phenyl	Si(Me)3	H	Phenyl	0	0	H
	42	Phenyl	Si(Me)3	H	Phenyl	0	1	H
	43	Phenyl	Si(Me)3	H	Phenyl	1	0	H
	44	Phenyl	Si(Me)3	H	Phenyl	1	1	H
45	45	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	0	0	H
	46	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	0	1	H
	47	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	1	0	H
	48	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	1	1	H
	49	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	0	0	H
50	50	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	0	1	H
	51	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	1	0	H
	52	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	1	1	H
	53	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	0	0	H

- 24 -

5	54	Phenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	0	1	H
	55	Phenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	1	0	H
	56	Phenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	1	1	H
	57	Phenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	0	0	H
	58	Phenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	0	1	H
10	59	Phenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	1	0	H
	60	Phenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	1	1	H
	61	Phenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	0	0	H
	62	Phenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	0	1	H
	63	Phenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	1	0	H
15	64	Phenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	1	1	H
	65	Phenyl	H	H	H	0	0	Si(Me) ₃
	66	Phenyl	H	H	H	0	1	Si(Me) ₃
	67	Phenyl	H	H	H	1	0	Si(Me) ₃
	68	Phenyl	H	H	H	1	1	Si(Me) ₃
20	69	Phenyl	H	H	Si(Me) ₃	0	0	Si(Me) ₃
	70	Phenyl	H	H	Si(Me) ₃	0	1	Si(Me) ₃
	71	Phenyl	H	H	Si(Me) ₃	1	0	Si(Me) ₃
	72	Phenyl	H	H	Si(Me) ₃	1	1	Si(Me) ₃
	73	Phenyl	H	H	Methyl	0	0	Si(Me) ₃
25	74	Phenyl	H	H	Methyl	0	1	Si(Me) ₃
	75	Phenyl	H	H	Methyl	1	0	Si(Me) ₃
	76	Phenyl	H	H	Methyl	1	1	Si(Me) ₃
	77	Phenyl	H	H	F	0	0	Si(Me) ₃
	78	Phenyl	H	H	F	0	1	Si(Me) ₃
30	79	Phenyl	H	H	F	1	0	Si(Me) ₃
	80	Phenyl	H	H	F	1	1	Si(Me) ₃
	81	Phenyl	H	H	Phenyl	0	0	Si(Me) ₃
	82	Phenyl	H	H	Phenyl	0	1	Si(Me) ₃
	83	Phenyl	H	H	Phenyl	1	0	Si(Me) ₃
35	84	Phenyl	H	H	Phenyl	1	1	Si(Me) ₃
	85	Phenyl	H	Si(Me) ₃	H	0	0	Si(Me) ₃
	86	Phenyl	H	Si(Me) ₃	H	0	1	Si(Me) ₃
	87	Phenyl	H	Si(Me) ₃	H	1	0	Si(Me) ₃
	88	Phenyl	H	Si(Me) ₃	H	1	1	Si(Me) ₃
	89	Phenyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	0	Si(Me) ₃
	90	Phenyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	1	Si(Me) ₃
	91	Phenyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	0	Si(Me) ₃
	92	Phenyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	1	Si(Me) ₃
	93	Phenyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	0	0	Si(Me) ₃
	94	Phenyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	0	1	Si(Me) ₃
	95	Phenyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	1	0	Si(Me) ₃
	96	Phenyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	1	1	Si(Me) ₃
	97	Phenyl	H	Si(Me) ₃	F	0	0	Si(Me) ₃
	98	Phenyl	H	Si(Me) ₃	F	0	1	Si(Me) ₃
	99	Phenyl	H	Si(Me) ₃	F	1	0	Si(Me) ₃
	100	Phenyl	H	Si(Me) ₃	F	1	1	Si(Me) ₃
	101	Phenyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	0	0	Si(Me) ₃
	102	Phenyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	0	1	Si(Me) ₃

- 25 -

5

10

15

20

25

30

35

103	Phenyl	H	Si(Me)3	Phenyl	1	0	Si(Me)3
104	Phenyl	H	Si(Me)3	Phenyl	1	1	Si(Me)3
105	Phenyl	Si(Me)3	H	H	0	0	Si(Me)3
106	Phenyl	Si(Me)3	H	H	0	1	Si(Me)3
107	Phenyl	Si(Me)3	H	H	1	0	Si(Me)3
108	Phenyl	Si(Me)3	H	H	1	1	Si(Me)3
109	Phenyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	0	0	Si(Me)3
110	Phenyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	0	1	Si(Me)3
111	Phenyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	1	0	Si(Me)3
112	Phenyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	1	1	Si(Me)3
113	Phenyl	Si(Me)3	H	Methyl	0	0	Si(Me)3
114	Phenyl	Si(Me)3	H	Methyl	0	1	Si(Me)3
115	Phenyl	Si(Me)3	H	Methyl	1	0	Si(Me)3
116	Phenyl	Si(Me)3	H	Methyl	1	1	Si(Me)3
117	Phenyl	Si(Me)3	H	F	0	0	Si(Me)3
118	Phenyl	Si(Me)3	H	F	0	1	Si(Me)3
119	Phenyl	Si(Me)3	H	F	1	0	Si(Me)3
120	Phenyl	Si(Me)3	H	F	1	1	Si(Me)3
121	Phenyl	Si(Me)3	H	Phenyl	0	0	Si(Me)3
122	Phenyl	Si(Me)3	H	Phenyl	0	1	Si(Me)3
123	Phenyl	Si(Me)3	H	Phenyl	1	0	Si(Me)3
124	Phenyl	Si(Me)3	H	Phenyl	1	1	Si(Me)3
125	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	0	0	Si(Me)3
126	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	0	1	Si(Me)3
127	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	1	0	Si(Me)3
128	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	1	1	Si(Me)3
129	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	0	0	Si(Me)3
130	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	0	1	Si(Me)3
131	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	1	0	Si(Me)3
132	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	1	1	Si(Me)3
133	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	0	0	Si(Me)3
134	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	0	1	Si(Me)3
135	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	1	0	Si(Me)3
136	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	1	1	Si(Me)3
137	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	F	0	0	Si(Me)3
138	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	F	0	1	Si(Me)3
139	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	F	1	0	Si(Me)3
140	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	F	1	1	Si(Me)3
141	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	0	0	Si(Me)3
142	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	0	1	Si(Me)3
143	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	1	0	Si(Me)3
144	Phenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	1	1	Si(Me)3
145	1-Naphthyl	H	H	Si(Me)3	0	0	H
146	1-Naphthyl	H	H	Si(Me)3	0	1	H
147	1-Naphthyl	H	H	Si(Me)3	1	0	H
148	1-Naphthyl	H	H	Si(Me)3	1	1	H
149	1-Naphthyl	H	Si(Me)3	H	0	0	H
150	1-Naphthyl	H	Si(Me)3	H	0	1	H
151	1-Naphthyl	H	Si(Me)3	H	1	0	H

- 26 -

5	152	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	H	1	1	H
	153	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	0	H
	154	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	1	H
	155	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	0	H
	156	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	1	H
10	157	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	0	0	H
	158	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	0	1	H
	159	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	1	0	H
	160	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	1	1	H
	161	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	0	0	H
15	162	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	0	1	H
	163	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	1	0	H
	164	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	1	1	H
	165	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	0	0	H
	166	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	0	1	H
20	167	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	1	0	H
	168	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	1	1	H
	169	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	0	0	H
	170	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	0	1	H
	171	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	1	0	H
25	172	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	1	1	H
	173	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	0	0	H
	174	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	0	1	H
	175	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	1	0	H
	176	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	1	1	H
30	177	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Methyl	0	0	H
	178	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Methyl	0	1	H
	179	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Methyl	1	0	H
	180	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Methyl	1	1	H
	181	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	F	0	0	H
35	182	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	F	0	1	H
	183	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	F	1	0	H
	184	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	F	1	1	H
	185	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Phenyl	0	0	H
	186	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Phenyl	0	1	H
	187	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Phenyl	1	0	H
	188	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Phenyl	1	1	H
	189	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	0	0	H
	190	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	0	1	H
	191	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	1	0	H
	192	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	1	1	H
	193	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	0	H
	194	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	1	H
	195	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	0	H
	196	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	1	H
	197	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	0	0	H
	198	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	0	1	H
	199	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	1	0	H
	200	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	1	1	H

- 27 -

5	201	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	0	0	H
	202	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	0	1	H
	203	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	1	0	H
	204	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	1	1	H
	205	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	0	0	H
10	206	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	0	1	H
	207	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	1	0	H
	208	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	1	1	H
	209	1-Naphthyl	H	H	H	0	0	Si(Me) ₃
	210	1-Naphthyl	H	H	H	0	1	Si(Me) ₃
15	211	1-Naphthyl	H	H	H	1	0	Si(Me) ₃
	212	1-Naphthyl	H	H	H	1	1	Si(Me) ₃
	213	1-Naphthyl	H	H	Si(Me) ₃	0	0	Si(Me) ₃
	214	1-Naphthyl	H	H	Si(Me) ₃	0	1	Si(Me) ₃
	215	1-Naphthyl	H	H	Si(Me) ₃	1	0	Si(Me) ₃
20	216	1-Naphthyl	H	H	Si(Me) ₃	1	1	Si(Me) ₃
	217	1-Naphthyl	H	H	Methyl	0	0	Si(Me) ₃
	218	1-Naphthyl	H	H	Methyl	0	1	Si(Me) ₃
	219	1-Naphthyl	H	H	Methyl	1	0	Si(Me) ₃
	220	1-Naphthyl	H	H	Methyl	1	1	Si(Me) ₃
25	221	1-Naphthyl	H	H	F	0	0	Si(Me) ₃
	222	1-Naphthyl	H	H	F	0	1	Si(Me) ₃
	223	1-Naphthyl	H	H	F	1	0	Si(Me) ₃
	224	1-Naphthyl	H	H	F	1	1	Si(Me) ₃
	225	1-Naphthyl	H	H	Phenyl	0	0	Si(Me) ₃
30	226	1-Naphthyl	H	H	Phenyl	0	1	Si(Me) ₃
	227	1-Naphthyl	H	H	Phenyl	1	0	Si(Me) ₃
	228	1-Naphthyl	H	H	Phenyl	1	1	Si(Me) ₃
	229	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	H	0	0	Si(Me) ₃
	230	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	H	0	1	Si(Me) ₃
35	231	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	H	1	0	Si(Me) ₃
	232	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	H	1	1	Si(Me) ₃
	233	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	0	Si(Me) ₃
	234	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	1	Si(Me) ₃
	235	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	0	Si(Me) ₃
	236	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	1	Si(Me) ₃
	237	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	0	0	Si(Me) ₃
	238	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	0	1	Si(Me) ₃
	239	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	1	0	Si(Me) ₃
	240	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	1	1	Si(Me) ₃
	241	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	0	0	Si(Me) ₃
	242	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	0	1	Si(Me) ₃
	243	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	1	0	Si(Me) ₃
	244	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	1	1	Si(Me) ₃
	245	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	0	0	Si(Me) ₃
	246	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	0	1	Si(Me) ₃
	247	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	1	0	Si(Me) ₃
	248	1-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	1	1	Si(Me) ₃
	249	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	0	0	Si(Me) ₃

- 28 -

5	250	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	0	1	Si(Me) ₃
	251	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	1	0	Si(Me) ₃
	252	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	1	1	Si(Me) ₃
	253	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	0	0	Si(Me) ₃
	254	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	0	1	Si(Me) ₃
10	255	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	1	0	Si(Me) ₃
	256	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	1	1	Si(Me) ₃
	257	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Methyl	0	0	Si(Me) ₃
	258	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Methyl	0	1	Si(Me) ₃
	259	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Methyl	1	0	Si(Me) ₃
15	260	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Methyl	1	1	Si(Me) ₃
	261	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	F	0	0	Si(Me) ₃
	262	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	F	0	1	Si(Me) ₃
	263	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	F	1	0	Si(Me) ₃
	264	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	F	1	1	Si(Me) ₃
20	265	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Phenyl	0	0	Si(Me) ₃
	266	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Phenyl	0	1	Si(Me) ₃
	267	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Phenyl	1	0	Si(Me) ₃
	268	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Phenyl	1	1	Si(Me) ₃
	269	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	0	0	Si(Me) ₃
25	270	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	0	1	Si(Me) ₃
	271	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	1	0	Si(Me) ₃
	272	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	1	1	Si(Me) ₃
	273	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	0	Si(Me) ₃
	274	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	1	Si(Me) ₃
30	275	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	0	Si(Me) ₃
	276	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	1	Si(Me) ₃
	277	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	0	0	Si(Me) ₃
	278	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	0	1	Si(Me) ₃
	279	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	1	0	Si(Me) ₃
35	280	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	1	1	Si(Me) ₃
	281	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	0	0	Si(Me) ₃
	282	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	0	1	Si(Me) ₃
	283	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	1	0	Si(Me) ₃
	284	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	1	1	Si(Me) ₃
	285	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	0	0	Si(Me) ₃
	286	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	0	1	Si(Me) ₃
	287	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	1	0	Si(Me) ₃
	288	1-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	1	1	Si(Me) ₃
	289	2-Naphthyl	H	H	Si(Me) ₃	0	0	H
	290	2-Naphthyl	H	H	Si(Me) ₃	0	1	H
	291	2-Naphthyl	H	H	Si(Me) ₃	1	0	H
	292	2-Naphthyl	H	H	Si(Me) ₃	1	1	H
	293	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	H	0	0	H
	294	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	H	0	1	H
	295	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	H	1	0	H
	296	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	H	1	1	H
	297	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	0	H
	298	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	1	H

- 29 -

5	299	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	0	H
	300	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	1	H
	301	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	0	0	H
	302	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	0	1	H
	303	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	1	0	H
10	304	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	1	1	H
	305	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	0	0	H
	306	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	0	1	H
	307	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	1	0	H
	308	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	1	1	H
15	309	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	0	0	H
	310	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	0	1	H
	311	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	1	0	H
	312	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	1	1	H
	313	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	0	0	H
20	314	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	0	1	H
	315	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	1	0	H
	316	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	1	1	H
	317	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	0	0	H
	318	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	0	1	H
25	319	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	1	0	H
	320	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	1	1	H
	321	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Methyl	0	0	H
	322	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Methyl	0	1	H
	323	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Methyl	1	0	H
30	324	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Methyl	1	1	H
	325	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	F	0	0	H
	326	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	F	0	1	H
	327	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	F	1	0	H
	328	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	F	1	1	H
35	329	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Phenyl	0	0	H
	330	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Phenyl	0	1	H
	331	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Phenyl	1	0	H
	332	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	Phenyl	1	1	H
	333	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	0	0	H
	334	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	0	1	H
	335	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	1	0	H
	336	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	1	1	H
	337	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	0	H
	338	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	1	H
	339	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	0	H
	340	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	1	H
	341	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	0	0	H
	342	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	0	1	H
	343	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	1	0	H
	344	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	1	1	H
	345	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	0	0	H
	346	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	0	1	H
	347	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	1	0	H

- 30 -

	348	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	1	1	H
	349	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	0	0	H
	350	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	0	1	H
	351	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	1	0	H
	352	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	1	1	H
5	353	2-Naphthyl	H	H	H	0	0	Si(Me) ₃
	354	2-Naphthyl	H	H	H	0	1	Si(Me) ₃
	355	2-Naphthyl	H	H	H	1	0	Si(Me) ₃
	356	2-Naphthyl	H	H	H	1	1	Si(Me) ₃
	357	2-Naphthyl	H	H	Si(Me) ₃	0	0	Si(Me) ₃
	358	2-Naphthyl	H	H	Si(Me) ₃	0	1	Si(Me) ₃
	359	2-Naphthyl	H	H	Si(Me) ₃	1	0	Si(Me) ₃
10	360	2-Naphthyl	H	H	Si(Me) ₃	1	1	Si(Me) ₃
	361	2-Naphthyl	H	H	Methyl	0	0	Si(Me) ₃
	362	2-Naphthyl	H	H	Methyl	0	1	Si(Me) ₃
	363	2-Naphthyl	H	H	Methyl	1	0	Si(Me) ₃
	364	2-Naphthyl	H	H	Methyl	1	1	Si(Me) ₃
	365	2-Naphthyl	H	H	F	0	0	Si(Me) ₃
15	366	2-Naphthyl	H	H	F	0	1	Si(Me) ₃
	367	2-Naphthyl	H	H	F	1	0	Si(Me) ₃
	368	2-Naphthyl	H	H	F	1	1	Si(Me) ₃
	369	2-Naphthyl	H	H	Phenyl	0	0	Si(Me) ₃
	370	2-Naphthyl	H	H	Phenyl	0	1	Si(Me) ₃
	371	2-Naphthyl	H	H	Phenyl	1	0	Si(Me) ₃
	372	2-Naphthyl	H	H	Phenyl	1	1	Si(Me) ₃
20	373	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	H	0	0	Si(Me) ₃
	374	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	H	0	1	Si(Me) ₃
	375	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	H	1	0	Si(Me) ₃
	376	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	H	1	1	Si(Me) ₃
	377	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	0	Si(Me) ₃
	378	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	1	Si(Me) ₃
	379	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	0	Si(Me) ₃
25	380	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	1	Si(Me) ₃
	381	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	0	0	Si(Me) ₃
	382	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	0	1	Si(Me) ₃
	383	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	1	0	Si(Me) ₃
	384	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Methyl	1	1	Si(Me) ₃
	385	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	0	0	Si(Me) ₃
	386	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	0	1	Si(Me) ₃
30	387	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	1	0	Si(Me) ₃
	388	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	F	1	1	Si(Me) ₃
	389	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	0	0	Si(Me) ₃
	390	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	0	1	Si(Me) ₃
	391	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	1	0	Si(Me) ₃
	392	2-Naphthyl	H	Si(Me) ₃	Phenyl	1	1	Si(Me) ₃
	393	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	0	0	Si(Me) ₃
35	394	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	0	1	Si(Me) ₃
	395	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	1	0	Si(Me) ₃
	396	2-Naphthyl	Si(Me) ₃	H	H	1	1	Si(Me) ₃

- 31 -

	397	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	0	0	Si(Me)3
	398	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	0	1	Si(Me)3
	399	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	1	0	Si(Me)3
	400	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	1	1	Si(Me)3
5	401	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	Methyl	0	0	Si(Me)3
	402	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	Methyl	0	1	Si(Me)3
	403	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	Methyl	1	0	Si(Me)3
	404	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	Methyl	1	1	Si(Me)3
	405	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	F	0	0	Si(Me)3
	406	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	F	0	1	Si(Me)3
	407	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	F	1	0	Si(Me)3
10	408	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	F	1	1	Si(Me)3
	409	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	Phenyl	0	0	Si(Me)3
	410	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	Phenyl	0	1	Si(Me)3
	411	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	Phenyl	1	0	Si(Me)3
	412	2-Naphthyl	Si(Me)3	H	Phenyl	1	1	Si(Me)3
	413	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	0	0	Si(Me)3
	414	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	0	1	Si(Me)3
15	415	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	1	0	Si(Me)3
	416	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	1	1	Si(Me)3
	417	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	0	0	Si(Me)3
	418	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	0	1	Si(Me)3
	419	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	1	0	Si(Me)3
	420	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	1	1	Si(Me)3
	421	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	0	0	Si(Me)3
20	422	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	0	1	Si(Me)3
	423	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	1	0	Si(Me)3
	424	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	1	1	Si(Me)3
	425	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	F	0	0	Si(Me)3
	426	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	F	0	1	Si(Me)3
	427	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	F	1	0	Si(Me)3
	428	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	F	1	1	Si(Me)3
25	429	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	0	0	Si(Me)3
	430	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	0	1	Si(Me)3
	431	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	1	0	Si(Me)3
	432	2-Naphthyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	1	1	Si(Me)3
	433	para-Tolyl	H	H	Si(Me)3	0	0	-
	434	para-Tolyl	H	H	Si(Me)3	0	1	-
30	435	para-Tolyl	H	H	Si(Me)3	1	0	-
	436	para-Tolyl	H	H	Si(Me)3	1	1	-
	437	para-Tolyl	H	Si(Me)3	H	0	0	-
	438	para-Tolyl	H	Si(Me)3	H	0	1	-
	439	para-Tolyl	H	Si(Me)3	H	1	0	-
	440	para-Tolyl	H	Si(Me)3	H	1	1	-
	441	para-Tolyl	H	Si(Me)3	Si(Me)3	0	0	-
	442	para-Tolyl	H	Si(Me)3	Si(Me)3	0	1	-
35	443	para-Tolyl	H	Si(Me)3	Si(Me)3	1	0	-
	444	para-Tolyl	H	Si(Me)3	Si(Me)3	1	1	-
	445	para-Tolyl	H	Si(Me)3	Methyl	0	0	-

- 32 -

5	446	para-Tolyl	H	Si(Me)3	Methyl	0	1	-
	447	para-Tolyl	H	Si(Me)3	Methyl	1	0	-
	448	para-Tolyl	H	Si(Me)3	Methyl	1	1	-
	449	para-Tolyl	H	Si(Me)3	F	0	0	-
	450	para-Tolyl	H	Si(Me)3	F	0	1	-
	451	para-Tolyl	H	Si(Me)3	F	1	0	-
	452	para-Tolyl	H	Si(Me)3	F	1	1	-
	453	para-Tolyl	H	Si(Me)3	Phenyl	0	0	-
	454	para-Tolyl	H	Si(Me)3	Phenyl	0	1	-
	455	para-Tolyl	H	Si(Me)3	Phenyl	1	0	-
10	456	para-Tolyl	H	Si(Me)3	Phenyl	1	1	-
	457	para-Tolyl	Si(Me)3	H	H	0	0	-
	458	para-Tolyl	Si(Me)3	H	H	0	1	-
	459	para-Tolyl	Si(Me)3	H	H	1	0	-
	460	para-Tolyl	Si(Me)3	H	H	1	1	-
15	461	para-Tolyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	0	0	-
	462	para-Tolyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	0	1	-
	463	para-Tolyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	1	0	-
	464	para-Tolyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	1	1	-
	465	para-Tolyl	Si(Me)3	H	Methyl	0	0	-
	466	para-Tolyl	Si(Me)3	H	Methyl	0	1	-
	467	para-Tolyl	Si(Me)3	H	Methyl	1	0	-
	468	para-Tolyl	Si(Me)3	H	Methyl	1	1	-
	469	para-Tolyl	Si(Me)3	H	F	0	0	-
	470	para-Tolyl	Si(Me)3	H	F	0	1	-
20	471	para-Tolyl	Si(Me)3	H	F	1	0	-
	472	para-Tolyl	Si(Me)3	H	F	1	1	-
	473	para-Tolyl	Si(Me)3	H	Phenyl	0	0	-
	474	para-Tolyl	Si(Me)3	H	Phenyl	0	1	-
	475	para-Tolyl	Si(Me)3	H	Phenyl	1	0	-
25	476	para-Tolyl	Si(Me)3	H	Phenyl	1	1	-
	477	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	0	0	-
	478	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	0	1	-
	479	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	1	0	-
	480	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	1	1	-
	481	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	0	0	-
	482	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	0	1	-
	483	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	1	0	-
	484	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	1	1	-
	485	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	0	0	-
30	486	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	0	1	-
	487	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	1	0	-
	488	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	1	1	-
	489	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	F	0	0	-
	490	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	F	0	1	-
35	491	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	F	1	0	-
	492	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	F	1	1	-
	493	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	0	0	-
	494	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	0	1	-

- 33 -

5

10

15

20

25

30

35

495	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	1	0	-
496	para-Tolyl	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	1	1	-
497	2-Biphenyl	H	H	Si(Me)3	0	0	-
498	2-Biphenyl	H	H	Si(Me)3	0	1	-
499	2-Biphenyl	H	H	Si(Me)3	1	0	-
500	2-Biphenyl	H	H	Si(Me)3	1	1	-
501	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	H	0	0	-
502	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	H	0	1	-
503	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	H	1	0	-
504	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	H	1	1	-
505	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	Si(Me)3	0	0	-
506	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	Si(Me)3	0	1	-
507	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	Si(Me)3	1	0	-
508	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	Si(Me)3	1	1	-
509	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	Methyl	0	0	-
510	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	Methyl	0	1	-
511	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	Methyl	1	0	-
512	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	Methyl	1	1	-
513	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	F	0	0	-
514	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	F	0	1	-
515	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	F	1	0	-
516	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	F	1	1	-
517	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	Phenyl	0	0	-
518	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	Phenyl	0	1	-
519	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	Phenyl	1	0	-
520	2-Biphenyl	H	Si(Me)3	Phenyl	1	1	-
521	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	H	0	0	-
522	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	H	0	1	-
523	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	H	1	0	-
524	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	H	1	1	-
525	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	0	0	-
526	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	0	1	-
527	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	1	0	-
528	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	Si(Me)3	1	1	-
529	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	Methyl	0	0	-
530	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	Methyl	0	1	-
531	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	Methyl	1	0	-
532	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	Methyl	1	1	-
533	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	F	0	0	-
534	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	F	0	1	-
535	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	F	1	0	-
536	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	F	1	1	-
537	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	Phenyl	0	0	-
538	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	Phenyl	0	1	-
539	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	Phenyl	1	0	-
540	2-Biphenyl	Si(Me)3	H	Phenyl	1	1	-
541	2-Biphenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	0	0	-
542	2-Biphenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	0	1	-
543	2-Biphenyl	Si(Me)3	Si(Me)3	H	1	0	-

- 34 -

5	544	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	1	1	-
	545	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	0	-
	546	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	1	-
	547	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	0	-
	548	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	1	-
	549	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	0	0	-
	550	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	0	1	-
	551	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	1	0	-
	552	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	1	1	-
	553	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	0	0	-
10	554	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	0	1	-
	555	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	1	0	-
	556	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	1	1	-
	557	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	0	0	-
	558	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	0	1	-
	559	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	1	0	-
	560	2-Biphenyl	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	1	1	-
15	561	N(Ph) ₂	H	H	Si(Me) ₃	0	0	-
	562	N(Ph) ₂	H	H	Si(Me) ₃	0	1	-
	563	N(Ph) ₂	H	H	Si(Me) ₃	1	0	-
	564	N(Ph) ₂	H	H	Si(Me) ₃	1	1	-
	565	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	H	0	0	-
	566	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	H	0	1	-
	567	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	H	1	0	-
	568	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	H	1	1	-
20	569	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	0	-
	570	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	1	-
	571	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	0	-
	572	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	1	-
	573	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	Methyl	0	0	-
	574	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	Methyl	0	1	-
25	575	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	Methyl	1	0	-
	576	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	Methyl	1	1	-
	577	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	F	0	0	-
	578	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	F	0	1	-
	579	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	F	1	0	-
	580	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	F	1	1	-
30	581	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	Phenyl	0	0	-
	582	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	Phenyl	0	1	-
	583	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	Phenyl	1	0	-
	584	N(Ph) ₂	H	Si(Me) ₃	Phenyl	1	1	-
	585	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	H	0	0	-
	586	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	H	0	1	-
35	587	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	H	1	0	-
	588	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	H	1	1	-
	589	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	0	0	-
	590	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	0	1	-
	591	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	1	0	-
	592	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	Si(Me) ₃	1	1	-

- 35 -

5

10

15

20

25

30

35

593	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	Methyl	0	0	-
594	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	Methyl	0	1	-
595	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	Methyl	1	0	-
596	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	Methyl	1	1	-
597	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	F	0	0	-
598	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	F	0	1	-
599	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	F	1	0	-
600	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	F	1	1	-
601	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	Phenyl	0	0	-
602	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	Phenyl	0	1	-
603	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	Phenyl	1	0	-
604	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	H	Phenyl	1	1	-
605	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	0	0	-
606	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	0	1	-
607	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	1	0	-
608	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	H	1	1	-
609	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	0	-
610	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	1	-
611	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	0	-
612	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	1	-
613	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	0	0	-
614	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	0	1	-
615	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	1	0	-
616	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	1	1	-
617	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	0	0	-
618	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	0	1	-
619	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	1	0	-
620	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	1	1	-
621	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	0	0	-
622	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	0	1	-
623	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	1	0	-
624	N(Ph) ₂	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	1	1	-
625	N(p-Tol) ₂	H	H	Si(Me) ₃	0	0	-
626	N(p-Tol) ₂	H	H	Si(Me) ₃	0	1	-
627	N(p-Tol) ₂	H	H	Si(Me) ₃	1	0	-
628	N(p-Tol) ₂	H	H	Si(Me) ₃	1	1	-
629	N(p-Tol) ₂	H	Si(Me) ₃	H	0	0	-
630	N(p-Tol) ₂	H	Si(Me) ₃	H	0	1	-
631	N(p-Tol) ₂	H	Si(Me) ₃	H	1	0	-
632	N(p-Tol) ₂	H	Si(Me) ₃	H	1	1	-
633	N(p-Tol) ₂	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	0	-
634	N(p-Tol) ₂	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	0	1	-
635	N(p-Tol) ₂	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	0	-
636	N(p-Tol) ₂	H	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	1	-
637	N(p-Tol) ₂	H	Si(Me) ₃	Methyl	0	0	-
638	N(p-Tol) ₂	H	Si(Me) ₃	Methyl	0	1	-
639	N(p-Tol) ₂	H	Si(Me) ₃	Methyl	1	0	-
640	N(p-Tol) ₂	H	Si(Me) ₃	Methyl	1	1	-
641	N(p-Tol) ₂	H	Si(Me) ₃	F	0	0	-

- 36 -

5	642	N(p-Tol)2	H	Si(Me)3	F	0	1	-
	643	N(p-Tol)2	H	Si(Me)3	F	1	0	-
	644	N(p-Tol)2	H	Si(Me)3	F	1	1	-
	645	N(p-Tol)2	H	Si(Me)3	Phenyl	0	0	-
	646	N(p-Tol)2	H	Si(Me)3	Phenyl	0	1	-
10	647	N(p-Tol)2	H	Si(Me)3	Phenyl	1	0	-
	648	N(p-Tol)2	H	Si(Me)3	Phenyl	1	1	-
	649	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	H	0	0	-
	650	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	H	0	1	-
	651	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	H	1	0	-
15	652	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	H	1	1	-
	653	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	Si(Me)3	0	0	-
	654	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	Si(Me)3	0	1	-
	655	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	Si(Me)3	1	0	-
	656	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	Si(Me)3	1	1	-
20	657	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	Methyl	0	0	-
	658	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	Methyl	0	1	-
	659	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	Methyl	1	0	-
	660	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	Methyl	1	1	-
	661	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	F	0	0	-
25	662	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	F	0	1	-
	663	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	F	1	0	-
	664	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	F	1	1	-
	665	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	Phenyl	0	0	-
	666	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	Phenyl	0	1	-
30	667	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	Phenyl	1	0	-
	668	N(p-Tol)2	Si(Me)3	H	Phenyl	1	1	-
	669	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	H	0	0	-
	670	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	H	0	1	-
	671	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	H	1	0	-
35	672	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	H	1	1	-
	673	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	0	0	-
	674	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	0	1	-
	675	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	1	0	-
	676	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	1	1	-
	677	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	0	0	-
	678	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	0	1	-
	679	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	1	0	-
	680	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	Methyl	1	1	-
	681	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	F	0	0	-
	682	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	F	0	1	-
	683	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	F	1	0	-
	684	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	F	1	1	-
	685	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	0	0	-
	686	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	0	1	-
	687	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	1	0	-
	688	N(p-Tol)2	Si(Me)3	Si(Me)3	Phenyl	1	1	-
	689	N(Ph)(1-Naph)	H	H	Si(Me)3	0	0	-
	690	N(Ph)(1-Naph)	H	H	Si(Me)3	0	1	-

- 37 -

5	691	N(Ph)(1-Naph)	H	H	Si(Me)3	1	0	-
	692	N(Ph)(1-Naph)	H	H	Si(Me)3	1	1	-
	693	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	H	0	0	-
	694	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	H	0	1	-
	695	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	H	1	0	-
	696	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	H	1	1	-
	697	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	Si(Me)3	0	0	-
	698	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	Si(Me)3	0	1	-
	699	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	Si(Me)3	1	0	-
	700	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	Si(Me)3	1	1	-
10	701	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	Methyl	0	0	-
	702	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	Methyl	0	1	-
	703	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	Methyl	1	0	-
	704	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	Methyl	1	1	-
	705	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	F	0	0	-
15	706	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	F	0	1	-
	707	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	F	1	0	-
	708	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	F	1	1	-
	709	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	Phenyl	0	0	-
	710	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	Phenyl	0	1	-
20	711	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	Phenyl	1	0	-
	712	N(Ph)(1-Naph)	H	Si(Me)3	Phenyl	1	1	-
	713	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	H	0	0	-
	714	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	H	0	1	-
	715	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	H	1	0	-
	716	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	H	1	1	-
	717	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	Si(Me)3	0	0	-
	718	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	Si(Me)3	0	1	-
	719	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	Si(Me)3	1	0	-
	720	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	Si(Me)3	1	1	-
25	721	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	Methyl	0	0	-
	722	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	Methyl	0	1	-
	723	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	Methyl	1	0	-
	724	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	Methyl	1	1	-
	725	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	F	0	0	-
30	726	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	F	0	1	-
	727	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	F	1	0	-
	728	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	F	1	1	-
	729	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	Phenyl	0	0	-
	730	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	Phenyl	0	1	-
35	731	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	Phenyl	1	0	-
	732	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	H	Phenyl	1	1	-
	733	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	Si(Me)3	H	0	0	-
	734	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	Si(Me)3	H	0	1	-
	735	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	Si(Me)3	H	1	0	-
	736	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	Si(Me)3	H	1	1	-
	737	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	0	0	-
	738	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	0	1	-
	739	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me)3	Si(Me)3	Si(Me)3	1	0	-

5	740	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	1	1	-
	741	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	0	0	-
	742	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	0	1	-
	743	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	1	0	-
	744	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Methyl	1	1	-
	745	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	0	0	-
	746	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	0	1	-
	747	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	1	0	-
	748	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	F	1	1	-
	749	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	0	0	-
	750	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	0	1	-
	751	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	1	0	-
10	752	N(Ph)(1-Naph)	Si(Me) ₃	Si(Me) ₃	Phenyl	1	1	-

Die Verbindungen gemäß Formel (1) können in organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen eingesetzt werden. Je nach Substitutionsmuster eignen sie sich für den Einsatz als Hostmaterial, insbesondere für fluoreszierende Emitter, als Emitter, als Lochtransportmaterial, als Lochblockiermaterial und/oder als Elektronentransportmaterial.

Weiterer Gegenstand der Erfindung ist daher die Verwendung von Verbindungen gemäß Formel (1) in organischen elektronischen Vorrichtungen, insbesondere in organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen, insbesondere als Hostmaterial, als Emitter, als Lochtransportmaterial, als Lochblockiermaterial und/oder als Elektronentransportmaterial.

Weiterer Gegenstand der Erfindung sind organische elektronische Vorrichtungen, insbesondere organische Elektrolumineszenzvorrichtungen, enthaltend Anode, Kathode und mindestens eine emittierende Schicht, wobei mindestens eine Schicht mindestens eine Verbindung gemäß Formel (1) enthält. Bevorzugt ist die Schicht, die die Verbindung gemäß Formel (1) enthält, eine emittierende Schicht, eine Lochtransportschicht, eine Lochinjektionsschicht, eine Lochblockierschicht oder eine Elektronentransportschicht.

Außer Kathode, Anode und der emittierenden Schicht (bzw. den emittierenden Schichten) kann die organische Elektrolumineszenzvorrichtung noch weitere Schichten enthalten. Diese können beispielsweise sein: Lochinjektionsschicht, Lochtransportschicht, Lochblockier-

schicht, Elektronentransportschicht, Elektroneninjectionsschicht und/oder eine Charge-Generation Layer (T. Matsumoto *et al.*, *Multiphoton Organic EL Device Having Charge Generation Layer*, IDMC 2003, Taiwan; Session 21 OLED (5)). Die Materialien in diesen Schichten können auch dotiert
5 sein. Es muss nicht notwendigerweise jede dieser Schichten vorhanden sein. Als Lochtransportmaterialien eignen sich beispielsweise aromatische Amine, wie sie üblicherweise gemäß dem Stand der Technik verwendet werden, welche auch p-dotiert sein können. Als Elektronentransportmaterialien eignen sich beispielsweise Metallchelatkomplexe, z. B. AlQ₃,
10 Verbindungen auf Basis elektronenarmer Heterocyclen, z. B. Triazin-derivate, oder Verbindungen enthaltend aromatische Carbonyle oder Phosphinoxide, wie z. B. beschrieben in WO 05/084081 und WO 05/084082, welche jeweils auch n-dotiert sein können. Als Elektroneninjektionsmaterialien eignen sich insbesondere Fluoride und Oxide der
15 Alkali- und Erdalkalimetalle, beispielsweise NaF, BaF₂, CaF₂, LiF oder Li₂O.

Wenn das Symbol R für ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem steht, insbesondere für eine kondensierte Aryl- oder Heteroarylgruppe, eignet sich die Verbindung gemäß Formel (1) besonders gut als
20 Hostmaterial, insbesondere für fluoreszierende Emitter, und/oder als Elektronentransportmaterial und/oder als Lochblockiermaterial.

Unter einem Hostmaterial wird in einem System aus Host und Dotand diejenige Komponente verstanden, die in dem System im höheren Anteil vorliegt. Bei einem System aus einem Host und mehreren Dotanden wird
25 als Host diejenige Komponente verstanden, deren Anteil der höchste in der Mischung ist.

Der Anteil des Hostmaterials gemäß der Formel (1) in der emittierenden Schicht beträgt zwischen 50.0 und 99.9 Gew.-%, bevorzugt zwischen 80.0 und 99.5 Gew.-%, besonders bevorzugt zwischen 90.0 und 99.0 Gew.-%. Entsprechend beträgt der Anteil des Dotanden in der emittierenden
30 Schicht zwischen 0.1 und 50.0 Gew.-%, bevorzugt zwischen 0.5 und 20.0 Gew.-%, besonders bevorzugt zwischen 1.0 und 10.0 Gew.-%.

- Bevorzugte Dotanden sind ausgewählt aus der Klasse der aromatischen Anthracenamine, der aromatischen Anthracendiamine, der aromatischen Pyrenamine, der aromatischen Pyrendiamine, der aromatischen Chrysenamine, der aromatischen Chrysendiamine, der Monostyrylamine, der Distyrylamine, der Tristyrylamine, der Tetrastyrylamine, der Styrylphosphine, der Styrylether und der Arylamine. Unter einem aromatischen Anthracenamin wird eine Verbindung verstanden, in der eine Diarylamino-
gruppe direkt an eine Anthracengruppe gebunden ist, vorzugsweise in 9-Position. Unter einem aromatischen Anthracendiamin wird eine
Verbindung verstanden, in der zwei Diarylaminogruppen direkt an eine Anthracengruppe gebunden sind, vorzugsweise in 9,10-Position. Aromatische Pyrenamine und Pyrendiamine bzw. aromatische Chrysenamine und Chrysendiamine sind analog dazu definiert. Unter einem Monostyrylamin wird eine Verbindung verstanden, die eine Styrylgruppe und
mindestens ein, bevorzugt aromatisches, Amin enthält. Unter einem Distyrylamin wird eine Verbindung verstanden, die zwei Styrylgruppen und
mindestens ein, bevorzugt aromatisches, Amin enthält. Unter einem Tristyrylamin wird eine Verbindung verstanden, die drei Styrylgruppen und
mindestens ein, bevorzugt aromatisches, Amin enthält. Unter einem Tetrastyrylamin wird eine Verbindung verstanden, die vier Styrylgruppen und
mindestens ein, bevorzugt aromatisches, Amin enthält. Entsprechende Phosphine und Ether sind in Analogie zu den Aminen definiert. Unter
einem Arylamin bzw. einem aromatischen Amin im Sinne dieser Erfindung wird eine Verbindung verstanden, die drei aromatische oder hetero-
aromatische Ringsysteme direkt an den Stickstoff gebunden enthält. Die Styrylgruppen sind besonders bevorzugt Stilbene, die auch noch weiter
substituiert sein können. Besonders bevorzugte Dotanden sind gewählt aus den Klassen der Tristilbenamine, der aromatischen Stilbendiamine,
der Anthracendiamine und der Pyrendiamine. Ganz besonders bevorzugte Dotanden sind ausgewählt aus der Klasse der Tristyrylamine. Beispiele für
derartige Dotanden sind substituierte oder unsubstituierte Tristilbenamine oder die Dotanden, die in WO 06/000388, WO 06/058737 und
WO 06/000389 beschrieben sind.
- Weiterhin bevorzugt sind organische Elektrolumineszenzvorrichtungen, dadurch gekennzeichnet, dass mehrere emittierende Schichten verwendet

werden, wobei mindestens eine dieser Schichten mindestens eine Verbindung gemäß Formel (1) enthält. Besonders bevorzugt weisen diese Emissionsschichten insgesamt mehrere Emissionsmaxima zwischen 380 nm und 750 nm auf, so dass insgesamt weiße Emission resultiert, d. h. in der bzw. den weiteren emittierenden Schichten wird noch mindestens eine weitere emittierende Verbindung verwendet, die fluoreszieren oder phosphoreszieren kann und die gelbes, orange oder rotes Licht emittiert. Insbesondere bevorzugt sind Dreischichtsysteme, wobei mindestens eine dieser Schichten mindestens eine Verbindung gemäß Formel (1) enthält und wobei die drei Schichten blaue, grüne und orange oder rote Emission zeigen (für den prinzipiellen Aufbau siehe z. B. WO 05/011013). Ebenso eignen sich für weiße Emission Emittier, welche breitbandige Emissionsbanden aufweisen und dadurch weiße Emission zeigen.

Außer den Verbindungen gemäß Formel (1) können in der emittierenden Schicht auch weitere Substanzen vorhanden sein, beispielsweise Loch- oder Elektronentransportmaterialien.

Wenn das Symbol R für eine Gruppe $N(Ar^1)_2$ steht und/oder ein Substituent an der Gruppe Ar für eine Gruppe $N(Ar^1)_2$ steht, eignet sich die Verbindung gemäß Formel (1) besonders gut als emittierende Verbindung und/oder als Lochtransportmaterial, wie im Folgenden genauer ausgeführt.

Wenn die Verbindung der Formel (1) als Lochtransportmaterial eingesetzt wird, wird sie bevorzugt in einer Lochtransportschicht und/oder in einer Lochinjektionsschicht eingesetzt. Eine Lochinjektionsschicht im Sinne dieser Erfindung ist eine Schicht, die direkt an die Anode angrenzt. Eine Lochtransportschicht im Sinne dieser Erfindung ist eine Schicht, die zwischen einer Lochinjektionsschicht und einer Emissionsschicht liegt. Wenn die Verbindungen gemäß Formel (1) als Lochtransport- bzw. als Lochinjektionsmaterial verwendet werden, kann es bevorzugt sein, wenn sie mit Elektronenakzeptor-Verbindungen dotiert ist, beispielsweise mit F_4 -TCNQ oder mit Verbindungen, wie sie in EP 1476881 oder EP 1596445 beschrieben werden.

Wenn die Verbindung der Formel (1) als emittierende Verbindung eingesetzt wird, wird sie bevorzugt in Kombination mit einem Hostmaterial eingesetzt.

- 5 Der Anteil der emittierenden Verbindung gemäß Formel (1) in der Mischung der emittierenden Schicht beträgt zwischen 0.1 und 50.0 Gew.-%, bevorzugt zwischen 0.5 und 20.0 Gew. %, besonders bevorzugt zwischen 1.0 und 10.0 Gew.-%. Entsprechend beträgt der Anteil des
10 Hostmaterials in der Schicht zwischen 50.0 und 99.9 Gew.-%, bevorzugt zwischen 80.0 und 99.5 Gew.-%, besonders bevorzugt zwischen 90.0 und 99.0 Gew.-%.

- Als Hostmaterialien kommen verschiedene Stoffklassen in Frage. Bevorzugte Hostmaterialien sind ausgewählt aus den Klassen der Oligo-
15 arylene (z. B. 2,2',7,7'-tetraphenyl-spirobifluoren gemäß EP 676461 oder Dinaphthylanthracen), insbesondere der Oligo-arylene enthaltend kondensierte aromatische Gruppen, der Oligo-arylenvinylene (z. B. DPVBi oder Spiro-DPVBi gemäß EP 676461), der polypodalen Metallkomplexe (z. B. gemäß WO 04/081017), der lochleitenden Verbindungen (z. B.
20 gemäß WO 04/058911), der elektronenleitenden Verbindungen, insbesondere Ketone, Phosphinoxide, Sulfoxide, etc. (z. B. gemäß WO 05/084081 oder WO 05/084082), der Atropisomere (z. B. gemäß WO 06/048268) oder der Boronsäurederivate (z. B. gemäß der nicht offen gelegten Anmeldung EP 05009643.7). Besonders bevorzugte Host-
25 materialien sind ausgewählt aus den Klassen der Oligoarylene, enthaltend Naphthalin, Anthracen und/oder Pyren oder Atropisomeren dieser Verbindungen, der Oligo-arylenvinylene, der Ketone, der Phosphinoxide und der Sulfoxide. Ganz besonders bevorzugte Hostmaterialien sind ausgewählt aus den Klassen der Oligoarylene, enthaltend Anthracen
30 und/oder Pyren oder Atropisomeren dieser Verbindungen, der Phosphinoxide und der Sulfoxide.

- Weiterhin bevorzugt ist eine organische Elektrolumineszenzvorrichtung, dadurch gekennzeichnet, dass eine oder mehrere Schichten mit einem
35 Sublimationsverfahren beschichtet werden. Dabei werden die Materialien in Vakuum-Sublimationsanlagen bei einem Druck kleiner 10^{-5} mbar,

- 43 -

bevorzugt kleiner 10^{-6} mbar, besonders bevorzugt kleiner 10^{-7} mbar aufgedampft.

- 5 Bevorzugt ist ebenfalls eine organische Elektrolumineszenzvorrichtung, dadurch gekennzeichnet, dass eine oder mehrere Schichten mit dem OVPD (Organic Vapour Phase Deposition) Verfahren oder mit Hilfe einer Tränergassublimation beschichtet werden. Dabei werden die Materialien bei einem Druck zwischen 10^{-5} mbar und 1 bar aufgebracht.
- 10 Weiterhin bevorzugt ist eine organische Elektrolumineszenzvorrichtung, dadurch gekennzeichnet, dass eine oder mehrere Schichten aus Lösung, wie z. B. durch Spincoating, oder mit einem beliebigen Druckverfahren, wie z. B. Siebdruck, Flexodruck oder Offsetdruck, besonders bevorzugt aber LITI (Light Induced Thermal Imaging, Thermotransferdruck) oder Ink-
- 15 Jet Druck (Tintenstrahldruck), hergestellt werden. Hierfür sind lösliche Verbindungen gemäß Formel (1) nötig. Daher eignen sich die erfindungsgemäßen Verbindungen sehr gut für die Verarbeitung aus Lösung, da sie durch die Substitution hohe Löslichkeit in organischen Lösemitteln aufweisen.
- 20 Die erfindungsgemäßen organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen weisen folgende überraschende Vorteile gegenüber dem Stand der Technik auf:
- 25 1. Die thermische Stabilität und insbesondere die Glasübergangstemperatur der Verbindungen wird höher im Vergleich zu Verbindungen gemäß dem Stand der Technik, welche bei ansonsten gleichem Aufbau keine Trialkylsilylgruppe enthalten.
- 30 2. Die erfindungsgemäßen Verbindungen weisen eine sehr gute Löslichkeit in gängigen organischen Lösemitteln auf, was die Reinigung der Verbindungen bei der Herstellung sowie die Reinigung der Aufdampfanlagen (beispielsweise der Schattenmasken) vereinfacht und ein Aufbringen der Verbindungen durch Lösungsprozesse
- 35 ermöglicht.

3. Die erfindungsgemäßen Verbindungen weisen eine höhere Loch- und Elektronenstabilität (Redoxstabilität) auf gegenüber vergleichbaren Materialien gemäß dem Stand der Technik, die keine $\text{Si}(\text{R}^2)_3$ -Gruppen enthalten.

5

Im vorliegenden Anmeldetext wird auf die Verwendung erfindungsgemäßer Verbindungen in Bezug auf OLEDs und die entsprechenden Displays abgezielt.

10

Trotz dieser Beschränkung der Beschreibung ist es für den Fachmann ohne weiteres erfinderisches Zutun möglich, die erfindungsgemäßen Verbindungen auch für weitere Verwendungen in anderen elektronischen Vorrichtungen zu benutzen, z. B. für organische Feld-Effekt-Transistoren (O-FETs), organische Dünnschichttransistoren (O-TFTs), organische licht-

15

emittierende Transistoren (O-LETs), organische integrierte Schaltungen (O-ICs), organische Solarzellen (O-SCs), organische Feld-Quench-Devices (O-FQDs), organische Photorezeptoren, lichtemittierende elektrochemische Zellen (LECs) oder organische Laserdioden (O-Laser).

20

Die Verwendung der erfindungsgemäßen Verbindungen in den entsprechenden Vorrichtungen ebenso wie diese Vorrichtungen selbst sind ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung.

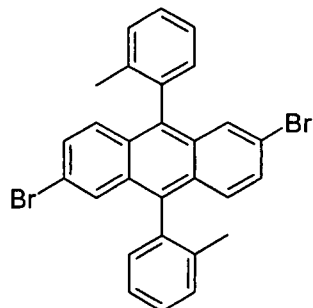
25

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

Beispiele:

Die nachfolgenden Synthesen werden, sofern nicht anders angegeben, unter einer Schutzgasatmosphäre durchgeführt. Die Edukte können von den Firmen ALDRICH bzw. ABCR (n-Butyllithium, 2.5 M in Hexan, Silane, Bromide, Anorganika, Lösemittel) bezogen werden. 2,6-Dibrom-anthrachinon wird nach Lee *et al.*, *Org. Lett.* **2005**, 7(2), 323 dargestellt.

35

Beispiel 1: 2,6-Bis(trimethylsilyl)-9,10-bis(o-tolyl)anthracen**a) 2,6-Dibrom-9,10-bis(o-tolyl)anthracen**

5

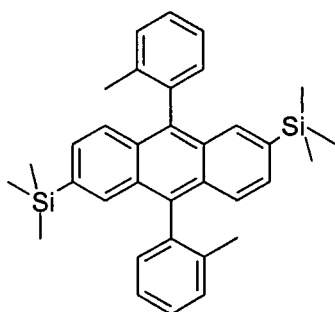
10

15

20

25

Aus 18.0 ml (150 mmol) 2-Bromtoluol in 500 ml THF wird durch Zugabe von 60 ml n-Butyllithium (2.5 M in Hexan) bei -78°C und 1 h Nachrühren das entsprechende Organolithiumreagenz dargestellt. Dieses wird mit 27.5 g (75 mmol) 2,6-Dibromanthrachinon versetzt. Anschließend wird die Reaktionsmischung 1 h bei -78°C gerührt, während 5 h auf Raumtemperatur erwärmt und dann mit einem Gemisch aus 100 ml Essigsäure und 200 ml Wasser versetzt. Der Feststoff wird abgesaugt, mit 200 ml Wasser, 100 ml Ethanol und zweimal mit je 200 ml Heptan gewaschen und getrocknet. Der Feststoff wird mit 15.2 g (80 mmol) Zinn(II)chlorid (wasserfrei) in 300 ml DMF 3 h unter Rückfluss erhitzt. Nach Erkalten wird mit 500 ml 2.5 N Salzsäure versetzt und vom Feststoff abgesaugt. Der Feststoff wird dreimal mit je 100 ml 2.5 N Salzsäure, dreimal mit je 100 ml Wasser und dreimal mit je 100 ml Ethanol gewaschen, im Vakuum getrocknet und zweimal aus DMF umkristallisiert. Ausbeute: 33.0 g (64 mmol), 85.2 % d. Th.; Reinheit: 99 % nach HPLC.

b) 2,6-Bis(trimethylsilyl)-9,10-bis(o-tolyl)anthracen

30

35

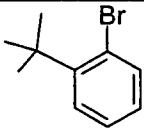
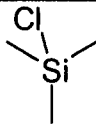
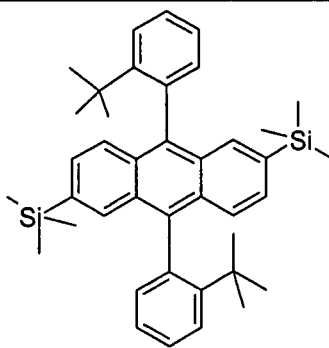
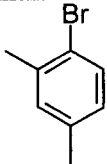
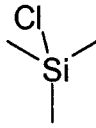
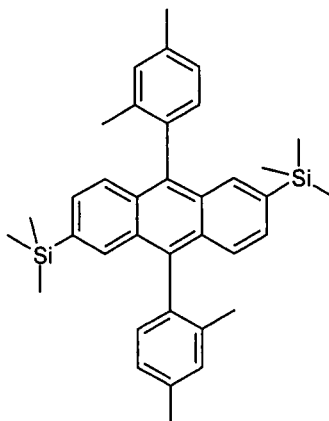
- 46 -

Aus 33.0 g (64 mmol) 2,6-Dibrom-9,10-di-o-tolyl-anthracen in 500 ml THF wird durch Zugabe von 77 ml n-Butyllithium (2.5 M in Hexan) bei -78°C und 3 h Nachrühren das entsprechende Organolithiumreagenz dargestellt und anschließend mit 26.8 ml (210 mmol) Chlortrimethylsilan versetzt.

5 Nach 1 h Nachrühren und Erwärmen auf Raumtemperatur wird das THF im Vakuum entfernt, der Rückstand wird in 500 ml Dichlormethan aufgenommen, die organische Phase wird dreimal mit je 500 ml Wasser gewaschen, getrocknet, über Celite filtriert und im Vakuum vom Lösemittel befreit. Der Rückstand wird fünfmal aus Toluol / Acetonitril umkristallisiert
 10 und dann im Hochvakuum sublimiert, $p = 1 \times 10^{-5}$ mbar, $T = 310^{\circ}\text{C}$.
 Ausbeute: 23.6 g (47 mmol), 73.4 % d. Th.; Reinheit: 99.8 % nach HPLC.
 Mischung aus zwei Atropisomeren nach ^1H -NMR-Spektroskopie.

Beispiel 2: Synthese weiterer erfindungsgemäßer Verbindungen

15 Analog zu Beispiel 1 werden folgende Verbindungen dargestellt:

Bsp.	Bromid / Schritt a)	Silan / Schritt b)	Produkt
3			
4			

- 47 -

5

10

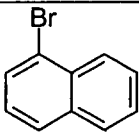
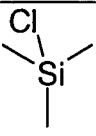
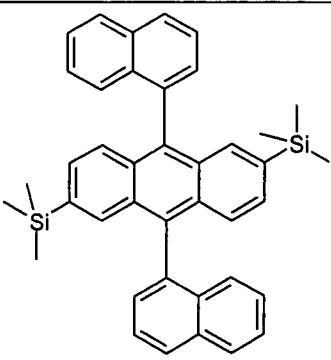
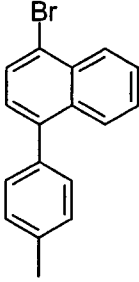
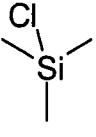
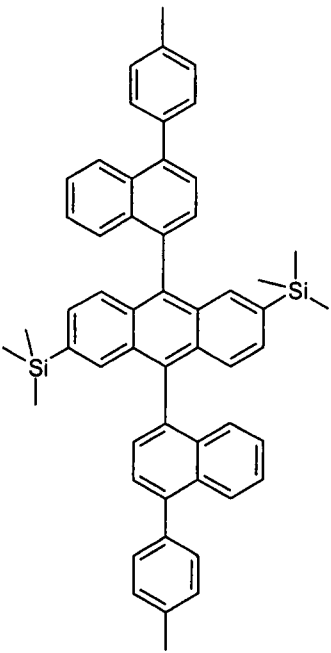
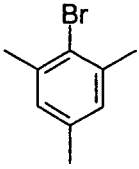
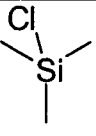
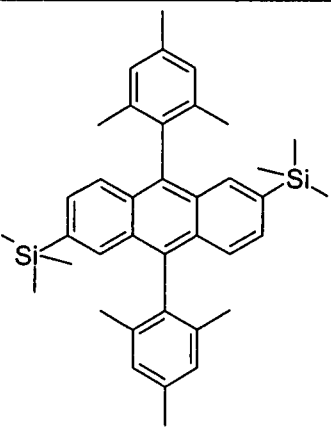
15

20

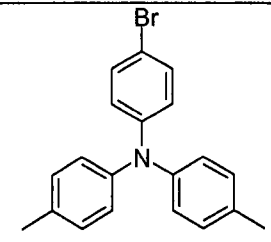
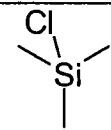
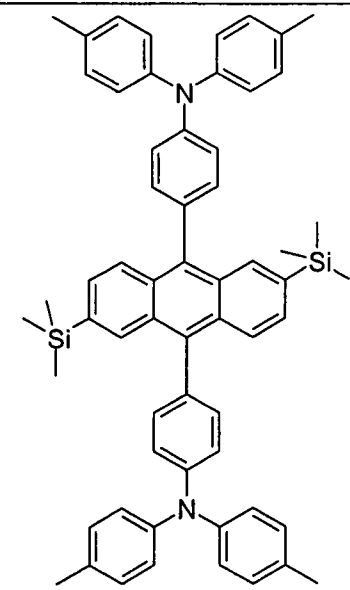
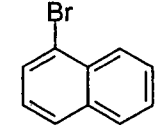
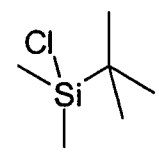
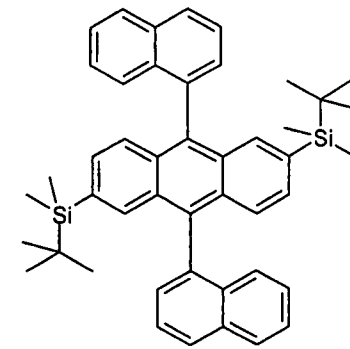
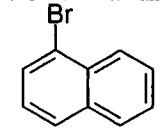
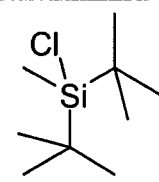
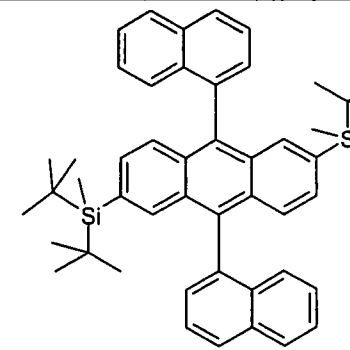
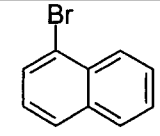
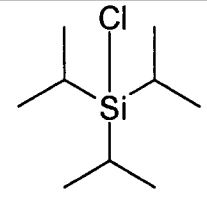
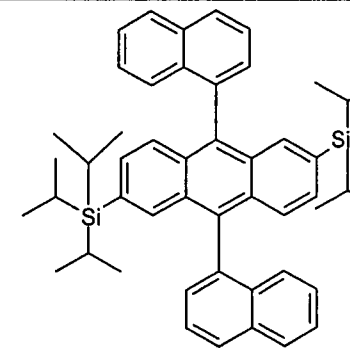
25

30

35

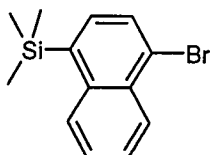
5			
6			
7			

- 48 -

8			
9			
10			
11			

Beispiel 12: 9-(4-Methylnaphth-1-yl)- 10-(4-trimethylsilylnaphthyl)-anthracen**a) Synthese von (4-Bromnaphth-1-yl)-trimethylsilan**

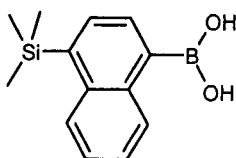
5



- 10 Ein Lösung aus 114.38 g (400 mmol) 1,4-Dibromnaphthalin und 1 l THF (absolut) wird unter Schutzgas auf -78 °C gekühlt, anschließend bei dieser Temperatur langsam mit 160 ml (400 mmol) n-Butyllithium (2.5 M in n-Hexan) versetzt und 30 h bei -78 °C nachgerührt. Die so erhaltene
- 15 Lösung wird mit einem Gemisch aus 52.3 ml (400 mmol) Chlortrimethylsilan in 200 ml THF (absolut) versetzt und langsam auf Raumtemperatur erwärmt. Nach Zugabe von 150 ml EtOH und anschließend 300 ml Wasser wird die organische Phase abgetrennt, über Magnesiumsulfat
- 20 getrocknet und eingeeengt. Das so erhaltene Öl wird bei 115-135 °C und 1.7 mbar destilliert. Es werden 80 g (286 mmol) (entsprechend 88 % d. Th.) des Produkts mit einer Reinheit größer 99.0 % nach HPLC erhalten.

b) Synthese von 4-(Trimethylsilyl)naphth-1-ylboronsäure

25

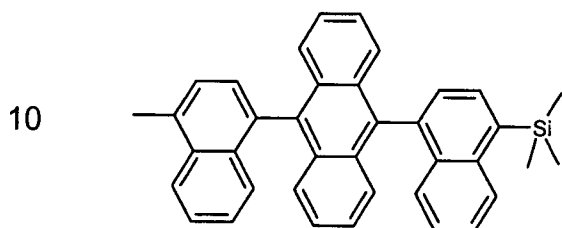


- 30 Eine auf -78 °C gekühlte Lösung von 46.8 g (167.6 mmol) (4-Bromnaphth-1-yl)-trimethylsilan in 950 ml Diethylether wird tropfenweise mit 73.7 ml (184 mmol) n-Butyllithium (2.5 M in Hexan) versetzt. Die Reaktionsmischung wird 30 min. bei -78 °C gerührt, auf Raumtemperatur erwärmt, dann erneut auf -78 °C gekühlt und schnell mit einer Mischung von 26.4 ml (234 mmol) Trimethylborat in 50 ml Diethylether versetzt. Nach Erwärmen
- 35 auf -10 °C wird mit 90 ml 2 N Salzsäure hydrolysiert. Die organische Phase wird abgetrennt, mit Wasser gewaschen, über Natriumsulfat getrocknet und zur Trockene eingeeengt. Der Rückstand wird in 200 ml

- 50 -

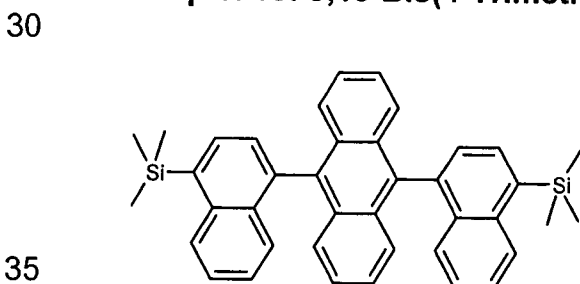
n-Heptan aufgenommen, der farblose Feststoff wird abgesaugt, mit n-Heptan gewaschen und im Vakuum getrocknet. Ausbeute: 26 g (106 mmol), 45 % d. Th.; Reinheit: 98 % nach ^1H -NMR.

5 **c) Synthese von 9-(4-Methylnaphth-1-yl)- 10-(4-trimethylsilylnaphthyl)-anthracen**



15 Eine gut gerührte, entgaste Suspension aus 22.8 g (93.3 mmol) 4-Trimethylsilylnaphth-1-ylboronsäure, 37.4 g (93.3 mmol) 9-(4-Methylnaphth-1-yl)anthracen und 90 g (230 mmol) Triskaliumphosphat in einem Gemisch aus 575 ml Wasser, 100 ml Dioxan und 860 ml Toluol wird mit 1.78 g (5,6 mmol) Tri-o-tolylphosphin und 0.2 g (0.9 mmol) Palladiumacetat versetzt und 60 h unter Rückfluss erhitzt. Nach Erkalten wird die organische Phase abgetrennt, dreimal mit 200 ml Wasser und einmal mit 200 ml gesättigter, wässriger Kochsalzlösung gewaschen und anschließend über Magnesiumsulfat getrocknet. Nach Abfiltrieren des Trockenmittels wird die organische Phase im Vakuum zur Trockene einrotiert. Der so erhaltene graue Rückstand wird aus Dioxan umkristallisiert. Die ausgefallenen Kristalle werden abgesaugt, mit 50 ml Ethanol gewaschen und anschließend im Vakuum getrocknet; Ausbeute: 38 g, 79 % d. Th.; Reinheit: 99.9 % nach HPLC.

30 **Beispiel 13: 9,10-Bis(4-Trimethylsilylnaphthyl) anthracen**



- 51 -

Eine gut gerührte, entgaste Suspension aus 29.7 g (122 mmol)
 4-Trimethylsilylnaphth-1-ylboronsäure (aus Beispiel 12 b), 13.6 g
 (40.6 mmol) 9,10-Dibromanthracen und 41 g (178 mmol) Triskalium-
 5 phosphat in einem Gemisch aus 163 ml Wasser, 200 ml Dioxan und
 200 ml Toluol wird mit 2.6 g (9.7 mmol) Tri-*o*-tolylphosphin und 0.365 g
 (1.63 mmol) Palladiumacetat versetzt und 60 h unter Rückfluss erhitzt.
 Nach Erkalten wird die organische Phase abgetrennt, dreimal mit 200 ml
 Wasser und einmal mit 200 ml gesättigter, wässriger Kochsalzlösung
 10 gewaschen und anschließend über Magnesiumsulfat getrocknet. Nach
 Abfiltrieren des Trockenmittels wird die organische Phase im Vakuum zur
 Trockene einrotiert. Der so erhaltene graue Rückstand wird aus Dioxan
 umkristallisiert. Die ausgefallenen Kristalle werden abgesaugt, mit 50 ml
 Ethanol gewaschen und anschließend im Vakuum getrocknet; Ausbeute:
 23 g, 78 % d. Th.; Reinheit: 99.9 % n. HPLC.

15

Beispiel 14: Herstellung der OLEDs

Die Herstellung von OLEDs erfolgt nach einem allgemeinen Verfahren
 gemäß WO 04/058911, das im Einzelfall auf die jeweiligen Gegebenheiten
 (z. B. Schichtdickenvariation, um optimale Effizienz bzw. Farbe zu
 20 erreichen) angepasst wird. Der grundlegende Aufbau und die verwendeten
 Materialien (außer der emittierenden Schicht) sind in den Beispielen zur
 besseren Vergleichbarkeit identisch. Analog dem o. g. allgemeinen
 Verfahren werden OLEDs mit folgendem Aufbau erzeugt:

25	Lochtransportschicht (HTM)	20 nm 2,2',7,7'-Tetrakis(di- <i>para</i> -tolyl- amino)spiro-9,9'-bifluoren (abgekürzt als HTM-1)
	Lochtransportschicht (HTM)	20 nm NPB (N-Naphthyl-N-phenyl-4,4'- diaminobiphenyl)
30	Emissionschicht (EML)	siehe Tabelle 1 für Materialien, Konzentration und Schichtdicke
	Elektronenleiter (ETL)	20 nm AlQ ₃ (bezogen von SynTec, Tris(chinolinato)aluminium(III))
	Kathode	1 nm LiF, darauf 150 nm Al.

35 Diese OLEDs werden standardmäßig charakterisiert; hierfür werden die
 Elektrolumineszenzspektren, die Effizienz (gemessen in cd/A), die

- 52 -

Leistungseffizienz (gemessen in lm/W) in Abhängigkeit der Helligkeit, berechnet aus Strom-Spannungs-Helligkeit-Kennlinien (IUL-Kennlinien), und die Lebensdauer bestimmt. Als Lebensdauer wird die Zeit definiert, nach der die Anfangshelligkeit von 1000 cd/m² auf die Hälfte gesunken ist.

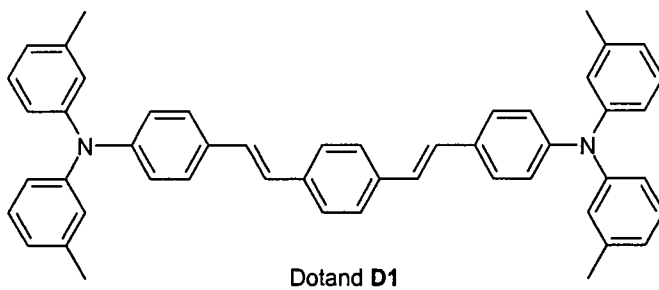
5

In Tabelle 2 sind die Ergebnisse einiger OLEDs (Beispiele 2 bis 9) zusammengefasst, die die Dotanden **D1**, **D2** sowie die Verbindung aus Beispiel 8 enthalten, wobei jeweils die Zusammensetzung der EML inklusive der Schichtdicken mit aufgeführt ist.

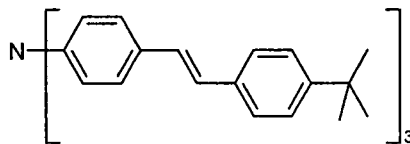
10

Die Struktur der Dotanden ist im Folgenden abgebildet:

15

Dotand **D1**

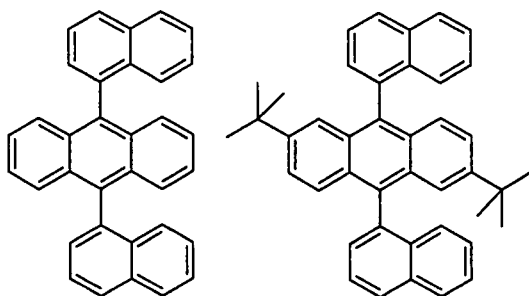
20

Dotand **D2**

25

Als erfindungsgemäßes Hostmaterial werden die Verbindungen aus Beispiel 5, 10, 12 und 13 eingesetzt. Als Hostmaterial gemäß dem Stand der Technik werden zum Vergleich die Hostmaterialien **H1** und **H2** eingesetzt. Die Hostmaterialien sind im Folgenden abgebildet:

30



35

Host **H1**Host **H2**

Wie man den Beispielen in der Tabelle 2 entnehmen kann, zeigen die
erfindungsgemäßen Elektrolumineszenzvorrichtungen höhere Effizienz
und längere Lebensdauer bei vergleichbaren Farbkoordinaten im Vergleich
5 zu Elektrolumineszenzvorrichtungen gemäß dem Stand der Technik.

10

15

20

25

30

35

Tabelle 2

Beispiel	EML	Max Effizienz (cd/A)	Spannung (V) bei 100cd/m ²	CIE	Lebensdauer (h)
Beispiel 15 (Vergleich)	H1 : D1 (3%) (30 nm)	11.8	5.5	x=0.17; y=0.32	6700
Beispiel 16 (Vergleich)	H1 : D1 (5%) (30 nm)	12.2	5.3	x=0.17; y=0.33	7000
Beispiel 17 (Vergleich)	H1 : D1 (7%) (30 nm)	11.5	5.2	x=0.18; y=0.36	5300
Beispiel 18 (Vergleich)	H2 : D1 (5%) (30 nm)	11.8	5.0	x=0.17; y=0.35	7800
Beispiel 19	Beispiel 13 : D1 (3%) (30 nm)	11.0	5.4	x=0.17; y=0.33	7200
Beispiel 20	Beispiel 13 : D1 (5%) (30 nm)	12.4	5.2	x=0.17; y=0.35	7900
Beispiel 21	Beispiel 12 : D1 (3%) (30 nm)	11.8	5.3	x=0.17; y=0.32	8000
Beispiel 22	Beispiel 12 : D1 (5%) (30 nm)	12.8	5.1	X=0.17; y=0.32	8500
Beispiel 23	Beispiel 10 : D1 (5%) (30 nm)	13	4.8	X=0.18; y=0.37	8800

5

10

15

20

Beispiel 24	Beispiel 5 : D1 (5%) (30 nm)	12.8	5.0	X=0.17; y=0.35	8400
Beispiel 25 (Vergleich)	H1 : D2 (5%) (30 nm)	4.2	5.1	x=0.15; y=0.11	1600
Beispiel 26	Beispiel 10 : D2 (5%) (30 nm)	5.1	5.1	x=0.15; y=0.14	2200
Beispiel 27	Beispiel 12 : D2 (5%) (30 nm)	4.5	5.0	x=0.15; y=0.12	3000
Beispiel 25	H1 : Beispiel 8 (5%) (30 nm)	6.1	5.1	x=0.15; y=0.17	4000
Beispiel 25	Beispiel 12 : Beispiel 8 (5%) (30 nm)	6.2	4.8	x=0.15; y=0.16	4500

5

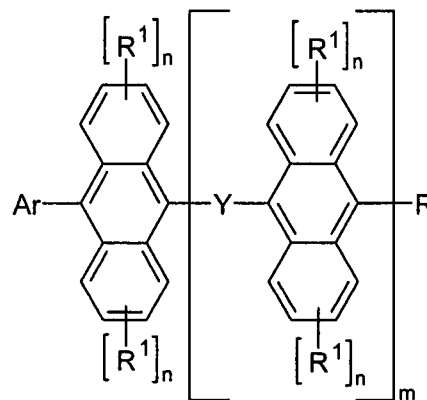
10

15

20

Patentansprüche

1. Silyl-substituierte Verbindungen der Formel (1),



Formel (1)

wobei für die verwendeten Symbole und Indizes gilt:

Ar ist eine 1-Naphthylgruppe oder eine 9-Anthrylgruppe, in welcher ein oder zwei Kohlenstoffatome durch N ersetzt sein können und welche mit einem oder mehreren Resten R¹ substituiert sein kann und/oder welche mit einem oder mehreren Resten N(Ar¹)₂ substituiert sein kann, wobei die beiden Reste Ar¹ auch durch eine Einfachbindung oder eine Gruppe O, S, N(R¹), C(R¹)₂ miteinander verbunden sein können;

R ist ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 40 aromatischen Ringatomen, welches mit einem oder mehreren Resten R¹ substituiert sein kann, oder eine Gruppe N(Ar¹)₂, wobei die beiden Reste Ar¹ auch durch eine Einfachbindung oder eine Gruppe O, S, N(R¹) oder C(R¹)₂ miteinander verbunden sein können;

Ar¹ ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem mit 5 bis 40

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

- 5 Y ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden eine bivalente Gruppe enthaltend 1 bis 40 C-Atome oder -O-, -S-, -NR¹-, -P(=O)R¹- oder eine Einfachbindung;
- 10 R^1 ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten Si(R²)₃, F, Cl, Br, I, CN, N(R³)₂, NO₂, eine geradkettige Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkoxy- oder Thioalkoxygruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R³ substituiert sein kann, wobei eine oder mehrere nicht benach-
- 15 barte CH₂-Gruppen durch -R³C=CR³-, -C≡C-, Si(R³)₂, Ge(R³)₂, Sn(R³)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR³, -O-, -S-, -N(R³)- oder -CONR³- ersetzt sein können und wobei ein oder mehrere H-Atome durch F, Cl, Br, I, CN oder NO₂ ersetzt sein können, oder eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 5 bis 24 aromatischen Ringatomen, die mit einem oder mehreren Resten R³
- 20 substituiert sein kann, oder eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 24 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R³ substituiert sein kann, oder eine Kombination aus zwei, drei, vier oder fünf dieser Systeme; dabei können auch zwei oder mehrere benachbarte Substituenten R¹ miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden;
- R^2 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden eine geradkettige Alkylgruppe mit 1 bis 40 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkylgruppe mit 3 bis 40 C-Atomen, wobei jeweils eine oder mehrere nicht benachbarte CH₂-Gruppen, die nicht direkt an das Silicium binden, durch -R³C=CR³-, -C≡C-, Si(R³)₂, Ge(R³)₂, Sn(R³)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR³, -O-, -S-, -N(R³)- oder -CONR³- ersetzt sein können und wobei jeweils ein oder mehrere H-Atome durch F, Cl, Br, I, CN oder NO₂ ersetzt sein können, welche auch durch eine Aryl- oder Heteroarylgruppe

5 mit 5 bis 24 aromatischen Ringatomen, die mit einem oder mehreren Resten R^3 substituiert sein kann, oder durch eine Aryloxy- oder Heteroaryloxygruppe mit 5 bis 24 aromatischen Ringatomen, die durch einen oder mehrere Reste R^3 substituiert sein kann, substituiert sein kann; dabei können auch zwei oder mehrere Substituenten R^2 miteinander ein mono- oder polycyclisches Ringsystem bilden;

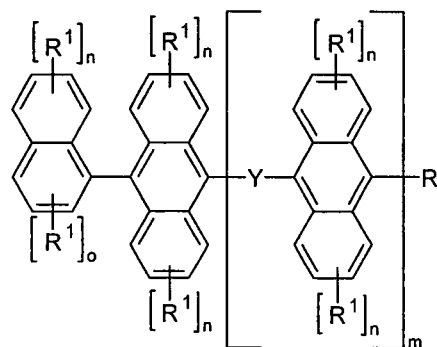
10 R^3 ist bei jedem Auftreten gleich oder verschieden H oder ein Kohlenwasserstoffrest mit 1 bis 20 C-Atomen, welcher aliphatisch oder aromatisch oder eine Kombination aus aliphatisch und aromatisch sein kann und welcher auch durch F substituiert sein kann; dabei können auch zwei oder mehrere Reste R^3 miteinander ein mono- oder polycyclisches, 15 aliphatisches oder aromatisches Ringsystem bilden;

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

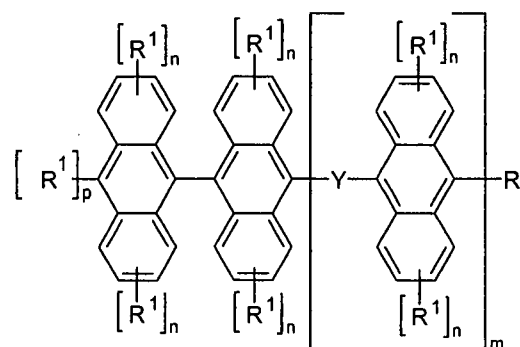
20 m ist 0, 1, 2, 3, 4 oder 5;

dadurch gekennzeichnet, dass mindestens ein Rest R^1 im Molekül anwesend ist, welcher eine Gruppe $Si(R^2)_3$ darstellt.

2. Verbindung der Formel (1a) bis (1d) nach Anspruch 1,



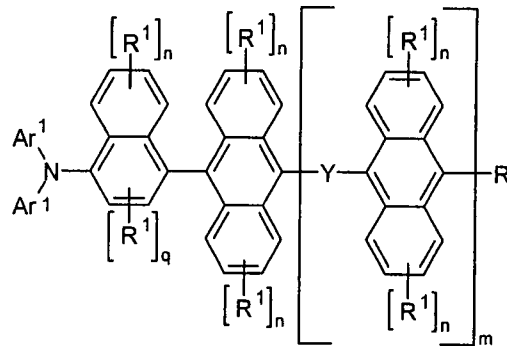
Formel (1a)



Formel (1b)

- 59 -

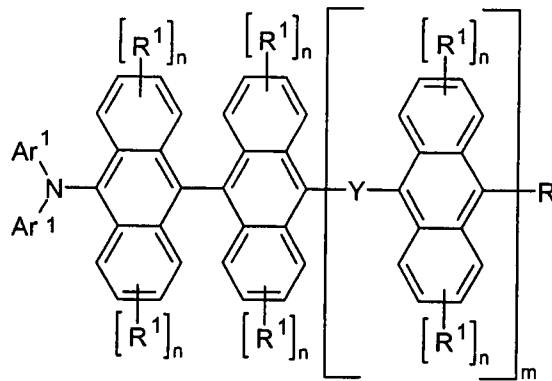
5



Formel (1c)

10

15



Formel (1d)

20

wobei R, Ar¹, R¹, Y, m und n die in Anspruch 1 definierte Bedeutung haben, wobei die beiden Reste Ar¹ auch durch eine Einfachbindung oder eine Gruppe O, S, N(R¹) oder C(R¹)₂ miteinander verbunden sein können, und weiterhin gilt:

o ist 0, 1, 2 oder 3;

p ist 0 oder 1, bevorzugt 1;

q ist 0, 1 oder 2;

dadurch gekennzeichnet, dass mindestens ein Rest R¹ anwesend ist, der für eine Gruppe Si(R²)₃ steht.

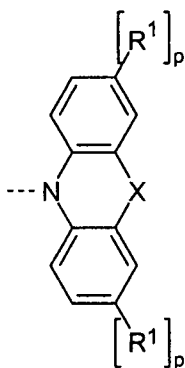
3. Verbindung nach Anspruch 1 oder 2, dadurch gekennzeichnet, dass das Symbol R für ein aromatisches oder heteroaromatisches

- 60 -

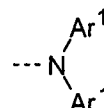
Ringsystem mit 6 bis 24 aromatischen Ringatomen steht, welches mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann, oder dass das Symbol R für eine Gruppe der Formel (2a) oder (2b) steht,

5

10



Formel (2a)



Formel (2b)

15

wobei R^1 und p die in Anspruch 1 und 2 aufgeführte Bedeutung haben und weiterhin gilt:

X steht für eine Einfachbindung, O, S, $N(R^1)$ oder $C(R^1)_2$;

20

Ar^1 ist gleich oder verschieden bei jedem Auftreten eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 5 bis 20 aromatischen Ringatomen, welche mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann, bevorzugt eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 6 bis 14 aromatischen Ringatomen, welche mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann, besonders bevorzugt Phenyl, 1-Naphthyl oder 2-Naphthyl, welches jeweils mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann.

4. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, dass das Symbol R, wenn es für ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem steht, für eine kondensierte Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 10 bis 16 aromatischen Ringatomen oder für eine aromatische, gegebenenfalls überbrückte, Biarylgruppe steht, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein können, insbesondere für eine 1-Naphthyl-, 2-Naphthyl-, 9-Anthryl-, 2-Phenanthrenyl-, 9-Phenanthrenyl-,

Chinoliny-, Isochinoliny-, ortho-, meta- oder para-Biphenyl-, 2-Fluorenyl- oder 2-Spirobifluorenylgruppe, die jeweils mit einem oder mehreren Resten R^1 substituiert sein kann.

- 5 5. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 4, dadurch gekennzeichnet, dass das Symbol R^1 , gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, für $Si(R^2)_3$, F, eine geradkettige Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 1 bis 6 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl- oder Alkoxygruppe mit 3 bis 10 C-Atomen, wobei jeweils ein oder mehrere CH_2 -Gruppen durch $-R^3C=CR^3-$, $Si(R^3)_2$, -O-, -S- oder $-N(R^3)-$ ersetzt sein können und wobei jeweils ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können, oder eine Aryl- oder Heteroarylgruppe mit 5 bis 14 aromatischen Ringatomen, die mit einem oder mehreren Resten R^3 substituiert sein kann, oder
10 eine Kombination aus zwei oder drei dieser Systeme steht; dabei können auch zwei oder mehrere Reste R^1 miteinander ein mono- oder polycyclisches, aliphatisches Ringsystem bilden.
- 15 6. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 5, dadurch gekennzeichnet, dass das Symbol Y, gleich oder verschieden bei jedem Auftreten, eine lineare Alkylengruppe mit 1 bis 10 C-Atomen oder eine verzweigte oder cyclische Alkyl- oder Alkylidengruppe mit 3 bis 10 C-Atomen, eine bivalente aromatische Gruppe mit 6 bis 25 C-Atomen, $C=O$, -O-, -S- oder eine Gruppe der Formel $-N(R^1)-$ oder $-P(=O)R^1-$ oder eine Einfachbindung darstellt.
- 20 7. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 6, dadurch gekennzeichnet, dass diese eine, zwei, drei oder vier Gruppen der Formel $Si(R^2)_3$ enthält.
8. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 7, dadurch gekennzeichnet, dass mindestens eine Gruppe $Si(R^2)_3$ an die zentrale Anthraceneinheit, bevorzugt in 2-Position und/oder in 6-Position, gebunden ist und/oder dass mindestens eine Gruppe der Formel $Si(R^2)_3$ an die Gruppe Ar gebunden ist, insbesondere in der 4-Position, wenn die Gruppe Ar eine Naphthylgruppe darstellt, oder in

- 62 -

der 10-Position, wenn die Gruppe Ar eine Anthrylgruppe darstellt, und/oder dass mindestens eine Gruppe der Formel $\text{Si}(\text{R}^2)_3$ an die Gruppe R gebunden ist.

- 5 9. Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 8,
dadurch gekennzeichnet, dass die Reste R^2 an der Silylgruppe aus
geradkettigen Alkylgruppen mit 1 bis 10 C-Atomen oder verzweigten
oder cyclischen Alkylgruppen mit 3 bis 10 C-Atomen, wobei jeweils
eine oder mehrere nicht benachbarte CH_2 -Gruppen, die nicht direkt
10 an das Silicium binden, durch O ersetzt sein können und wobei
jeweils ein oder mehrere H-Atome durch F ersetzt sein können,
gewählt sind; dabei können auch zwei oder mehrere Substituenten
 R^2 miteinander ein mono- oder polycyclisches Ringsystem bilden.
- 15 10. Verfahren zur Herstellung von Verbindungen nach einem oder
mehreren der Ansprüche 1 bis 9, welche eine oder mehrere Gruppen
 $\text{Si}(\text{R}^2)_3$ an der Gruppe Ar bzw. R tragen, durch Kupplung einer
funktionalisierten Gruppe Ar bzw. R, welche durch eine oder mehrere
Gruppen $\text{Si}(\text{R}^2)_3$ substituiert ist, mit einem entsprechenden
20 Anthracenderivat.
11. Verwendung von Verbindungen nach einem oder mehreren der
Ansprüche 1 bis 9 in organischen elektronischen Vorrichtungen,
insbesondere in organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen.
12. Organische elektronische Vorrichtung, enthaltend mindestens eine
Verbindung nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 9.
13. Organische elektronische Vorrichtung gemäß Anspruch 12, gewählt
aus organischen Elektrolumineszenzvorrichtungen (OLEDs, PLEDs),
organischen Feld-Effekt-Transistoren (O-FETs), organischen Dünn-
filmtransistoren (O-TFTs), organischen lichtemittierenden
Transistoren (O-LETs), organischen integrierten Schaltungen
(O-ICs), organischen Solarzellen (O-SCs), organischen Feld-Quench-
Devices (O-FQDs), organischen Photorezeptoren, lichtemittierende

- 63 -

elektrochemische Zellen (LECs) oder organische Laserdioden (O-Laser).

- 5 14. Organische Elektrolumineszenzvorrichtung nach Anspruch 12 oder 13, dadurch gekennzeichnet, dass mindestens eine emittierende Schicht, eine Lochtransportschicht, eine Lochinjektionsschicht, eine Lochblockierschicht und/oder eine Elektronentransportschicht mindestens eine Verbindung gemäß mindestens einem der Ansprüche 1 bis 9 enthält.
- 10 15. Organische Elektrolumineszenzvorrichtung nach Anspruch 14, dadurch gekennzeichnet, dass die Verbindung gemäß mindestens einem der Ansprüche 1 bis 9, wenn das Symbol R für ein aromatisches oder heteroaromatisches Ringsystem steht, als Hostmaterial für fluoreszierende Emitter und/oder als Elektronentransportmaterial und/oder als Lochblockiermaterial eingesetzt wird.
- 15 16. Organische Elektrolumineszenzvorrichtung nach Anspruch 14, dadurch gekennzeichnet, dass die Verbindung gemäß mindestens einem der Ansprüche 1 bis 9, wenn das Symbol R für eine Gruppe $N(Ar^1)_2$ steht, als emittierende Verbindung und/oder als Lochtransportmaterial eingesetzt wird.
- 20

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2006/011029

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER INV. C09K11/06 H05B33/14 C07C211/54 C07C15/28 H01L51/00		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C09K H05B H01L C07C		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used) EPO-Internal; CHEM ABS Data, WPI Data		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
P,X	US 2006/226768 A1 (YU CHEN-PING [TW] ET AL) 12 October 2006 (2006-10-12) the whole document	1-16
X	EP 1 533 289 A (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 25 May 2005 (2005-05-25) cited in the application paragraph [0036] page 16, line 25 - line 35	1-16
X	JP 2004 103463 A (KONICA MINOLTA HOLDINGS INC) 2 April 2004 (2004-04-02) abstract	1-16
X	US 6 506 504 B1 (KWON SOON-KI [KR] ET AL) 14 January 2003 (2003-01-14) claim 1	1-16
-/--		
<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> <input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex. </div>		
* Special categories of cited documents :		
<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> <div style="width: 45%;"> <p>*A* document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance</p> <p>*E* earlier document but published on or after the international filing date</p> <p>*L* document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)</p> <p>*O* document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means</p> <p>*P* document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed</p> </div> <div style="width: 45%;"> <p>*T* later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention</p> <p>*X* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone</p> <p>*Y* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art.</p> <p>*Z* document member of the same patent family</p> </div> </div>		
Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report	
22 January 2007	30/01/2007	
Name and mailing address of the ISA/ European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl, Fax: (+31-70) 340-3016	Authorized officer Lehnert, Andreas	

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2006/011029

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	EP 0 681 019 A2 (TDK CORP [JP] TDK CORP) 8 November 1995 (1995-11-08). the whole document -----	1-16
A	EP 1 167 488 A1 (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 2 January 2002 (2002-01-02) cited in the application paragraph [0027] -----	1-16
A	EP 1 533 290 A (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 25 May 2005 (2005-05-25) cited in the application claims 1-14 -----	1-16
A	EP 1 553 154 A (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 13 July 2005 (2005-07-13) cited in the application claims 1-12 -----	1-16

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No

PCT/EP2006/011029

Patent document cited in search report		Publication date	Patent family member(s)	Publication date
US 2006226768	A1	12-10-2006	NONE	
EP 1533289	A	25-05-2005	CN 1675148 A WO 2004013073 A1 JP 2004067528 A KR 20050025195 A US 2005233165 A1	28-09-2005 12-02-2004 04-03-2004 11-03-2005 20-10-2005
JP 2004103463	A	02-04-2004	NONE	
US 6506504	B1	14-01-2003	JP 2000150162 A KR 20000032063 A	30-05-2000 05-06-2000
EP 0681019	A2	08-11-1995	DE 69511755 D1 DE 69511755 T2 US 5635308 A	07-10-1999 13-01-2000 03-06-1997
EP 1167488	A1	02-01-2002	CN 1322232 A WO 0121729 A1 KR 20050100708 A TW 474113 B US 6534199 B1	14-11-2001 29-03-2001 19-10-2005 21-01-2002 18-03-2003
EP 1533290	A	25-05-2005	CN 1675149 A WO 2004016575 A1 JP 2004075567 A KR 20050038617 A US 2006134456 A1	28-09-2005 26-02-2004 11-03-2004 27-04-2005 22-06-2006
EP 1553154	A	13-07-2005	CN 1678711 A WO 2004018587 A1 KR 20050058465 A US 2006043858 A1	05-10-2005 04-03-2004 16-06-2005 02-03-2006

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2006/011029

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES

INV. C09K11/06 H05B33/14 C07C211/54 C07C15/28 H01L51/00

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

B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)

C09K H05B H01L C07C

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

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

EPO-Internal, CHEM ABS Data, WPI Data

C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
P, X	US 2006/226768 A1 (YU CHEN-PING [TW] ET AL) 12. Oktober 2006 (2006-10-12) das ganze Dokument	1-16
X	EP 1 533 289 A (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 25. Mai 2005 (2005-05-25) in der Anmeldung erwähnt Absatz [0036] Seite 16, Zeile 25 - Zeile 35	1-16
X	JP 2004 103463 A (KONICA MINOLTA HOLDINGS INC) 2. April 2004 (2004-04-02) Zusammenfassung	1-16
X	US 6 506 504 B1 (KWON SOON-KI [KR] ET AL) 14. Januar 2003 (2003-01-14) Anspruch 1	1-16

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

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

Datum des Abschlusses der internationalen Recherche	Absendedatum des internationalen Recherchenberichts
22. Januar 2007	30/01/2007
Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl, Fax: (+31-70) 340-3016	Bevollmächtigter Bediensteter Lehnert, Andreas

C. (Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
A	EP 0 681 019 A2 (TDK CORP [JP] TDK CORP) 8. November 1995 (1995-11-08) das ganze Dokument	1-16
A	EP 1 167 488 A1 (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 2. Januar 2002 (2002-01-02) in der Anmeldung erwähnt Absatz [0027]	1-16
A	EP 1 533 290 A (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 25. Mai 2005 (2005-05-25) in der Anmeldung erwähnt Ansprüche 1-14	1-16
A	EP 1 553 154 A (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 13. Juli 2005 (2005-07-13) in der Anmeldung erwähnt Ansprüche 1-12	1-16

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2006/011029

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument		Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie		Datum der Veröffentlichung
US 2006226768	A1	12-10-2006	KEINE		
EP 1533289	A	25-05-2005	CN	1675148 A	28-09-2005
			WO	2004013073 A1	12-02-2004
			JP	2004067528 A	04-03-2004
			KR	20050025195 A	11-03-2005
			US	2005233165 A1	20-10-2005
JP 2004103463	A	02-04-2004	KEINE		
US 6506504	B1	14-01-2003	JP	2000150162 A	30-05-2000
			KR	20000032063 A	05-06-2000
EP 0681019	A2	08-11-1995	DE	69511755 D1	07-10-1999
			DE	69511755 T2	13-01-2000
			US	5635308 A	03-06-1997
EP 1167488	A1	02-01-2002	CN	1322232 A	14-11-2001
			WO	0121729 A1	29-03-2001
			KR	20050100708 A	19-10-2005
			TW	474113 B	21-01-2002
			US	6534199 B1	18-03-2003
EP 1533290	A	25-05-2005	CN	1675149 A	28-09-2005
			WO	2004016575 A1	26-02-2004
			JP	2004075567 A	11-03-2004
			KR	20050038617 A	27-04-2005
			US	2006134456 A1	22-06-2006
EP 1553154	A	13-07-2005	CN	1678711 A	05-10-2005
			WO	2004018587 A1	04-03-2004
			KR	20050058465 A	16-06-2005
			US	2006043858 A1	02-03-2006

专利名称(译)	用于有机电致发光器件的新型材料		
公开(公告)号	EP1957604A1	公开(公告)日	2008-08-20
申请号	EP2006818610	申请日	2006-11-17
申请(专利权)人(译)	MERCK PATENT GMBH		
当前申请(专利权)人(译)	MERCK PATENT GMBH		
[标]发明人	HEIL HOLGER STOESSEL PHILIPP PARHAM AMIR VESTWEBER HORST		
发明人	HEIL, HOLGER STOESSEL, PHILIPP PARHAM, AMIR VESTWEBER, HORST		
IPC分类号	C09K11/06 H05B33/14 C07C211/54 C07C15/28 H01L51/00		
CPC分类号	H01L51/0058 C07F7/0805 C07F7/081 C07F7/0812 C07F7/0814 C09K11/06 C09K2211/1011 C09K2211/1014 H01L51/0094 H01L51/5012 H05B33/14 Y02E10/549		
优先权	102005058557 2005-12-08 DE 102006009630 2006-03-02 DE		
其他公开文献	EP1957604B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及蒽衍生物，其在有机电致发光器件中的用途和含有所述化合物的有机电致发光器件。