



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 114929687 A

(43) 申请公布日 2022. 08. 19

(21) 申请号 202080092292.X

(22) 申请日 2020.12.09

(30) 优先权数据

19214827.8 2019.12.10 EP

(85) PCT国际申请进入国家阶段日

2022.07.08

(86) PCT国际申请的申请数据

PCT/EP2020/085369 2020.12.09

(87) PCT国际申请的公布数据

W02021/116225 EN 2021.06.17

(71) 申请人 诺瓦尔德股份有限公司

地址 德国德累斯顿

(72) 发明人 沃洛季米尔·森科维斯基

约翰内斯·斯科尔茨

(74) 专利代理机构 中原信达知识产权代理有限
责任公司 11219

专利代理师 王潜 郭国清

(51) Int.Cl.

G07D 401/14 (2006.01)

G07D 471/04 (2006.01)

H01L 51/52 (2006.01)

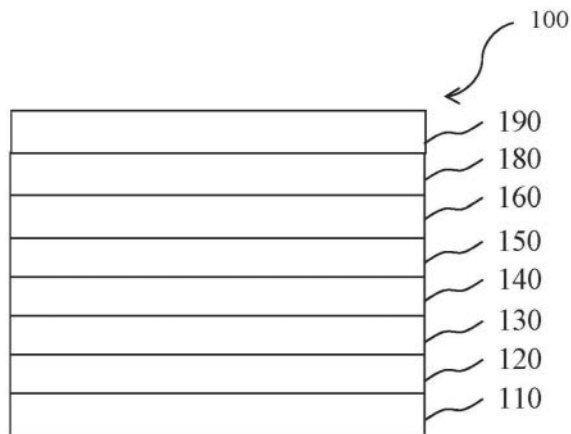
权利要求书9页 说明书59页 附图3页

(54) 发明名称

吡啶化合物以及包含它的有机半导体层、有机电子器件和显示装置

(57) 摘要

本发明涉及包含取代或未取代吡啶基团的化合物、包含至少一种具有取代或未取代吡啶基团的化合物的有机半导体层以及包含所述有机半导体层的有机电子器件。本发明还涉及包含所述有机电子器件的显示装置。



1. 一种由下式I表示的化合物:

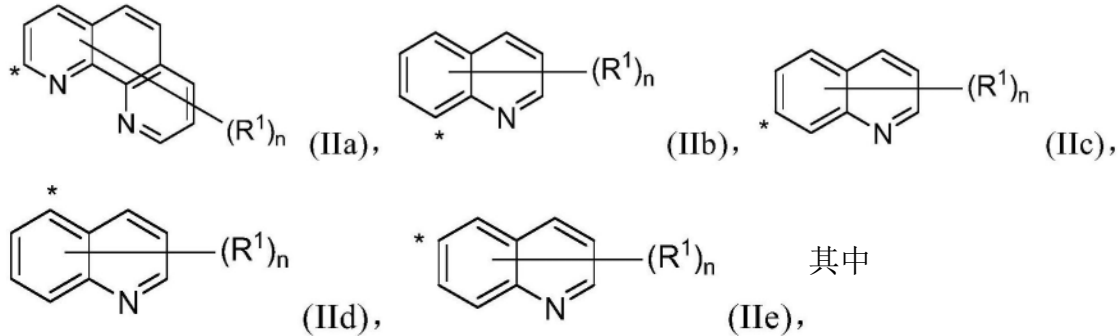


其中,

Ar^1 选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶;

L是单键、取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基;并且

Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-\text{PX}^1(\text{R}^2)_2$, D, F, 或CN; 其中

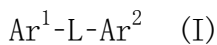
R^2 独立地选自 C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

X^1 选自S或O; 并且

n是0、1、2或3。

2. 根据权利要求1所述的式I的化合物, 其中 Ar^1 选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的二氢苯并[c]吡啶、取代或未取代的二氢苯并[a]吡啶、取代或未取代的二苯并[c, h]吡啶亚基、取代或未取代的二苯并[c]吡啶亚基、取代或未取代的二苯并[h]吡啶亚基或者取代或未取代的二苯并[a, j]吡啶。

3. 根据权利要求1或权利要求2所述的式I的化合物, 其中式I由下式表示:

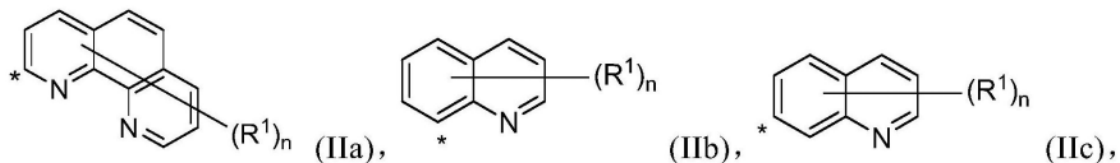


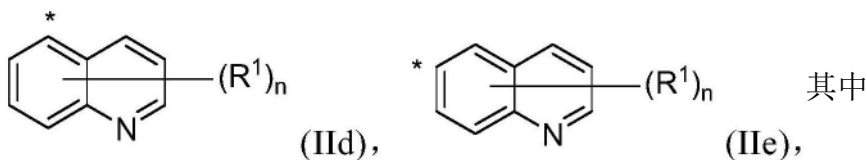
其中,

Ar^1 选自取代或未取代的二苯并吡啶;

L是单键、取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基; 并且

Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:





R^1 以及 Ar^1 和 L 的取代基独立地选自H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$, D, F, 或CN; 其中

R^2 独立地选自 C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

X^1 选自S或O; 并且

n 是0、1、2或3。

4. 根据权利要求1至3所述的式I的化合物, 其中式I由下式表示:

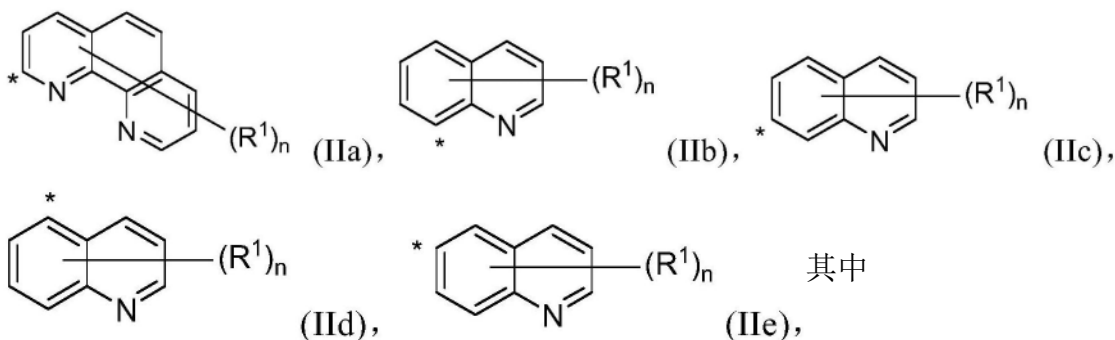


其中,

Ar^1 选自取代或未取代的二苯并吡啶;

L 是单键、取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基; 并优选取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基; 并且

Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



R^1 以及 Ar^1 和 L 的取代基独立地选自H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$, D, F, 或CN; 其中

R^2 独立地选自 C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

X^1 选自S或O; 并且

n 是0、1、2或3; 并且

其中所述式I的化合物包含至少9个至25个芳族环; 并且

任选地, 如果 L 选自苯亚基、萘亚基或蒽亚基, 优选苯亚基, 则 Ar^1 和 Ar^2 以间位与 L 键合。

5. 根据权利要求1至4所述的式I的化合物, 其中式I由下式表示:

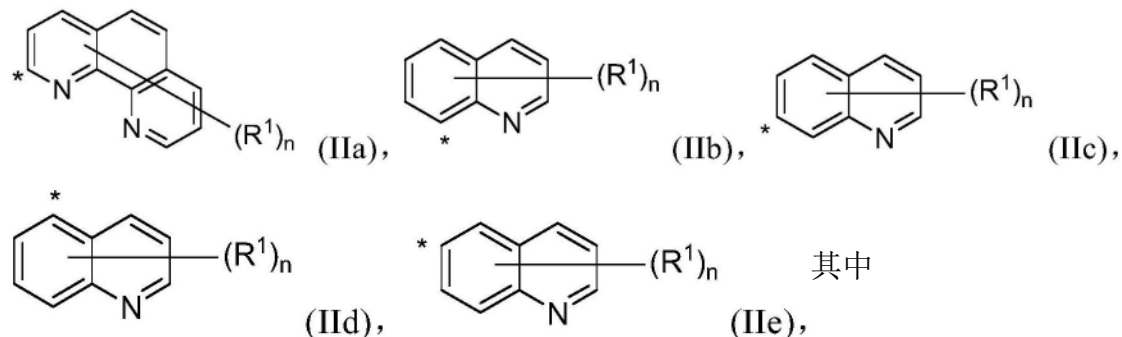


其中,

Ar^1 选自取代或未取代的二苯并吡啶;

L是取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基;并且

Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-\text{PX}^1(\text{R}^2)_2$, D, F, 或CN; 其中

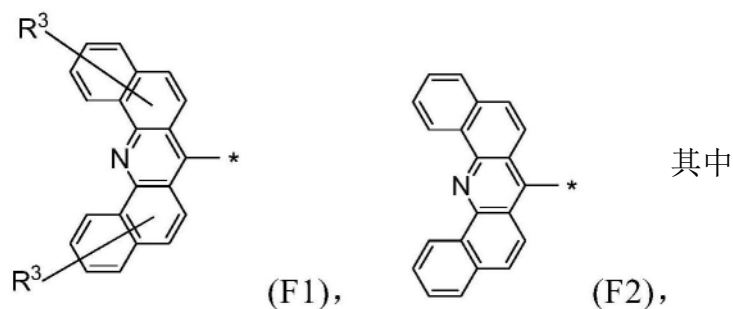
R^2 独立地选自 C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

X^1 选自S或O; 并且

n是0、1、2或3; 并且

其中所述式I的化合物包含至少9个至25个芳族环。

6. 根据权利要求1至5所述的式I的化合物, 其中 Ar^1 选自F1或F2:



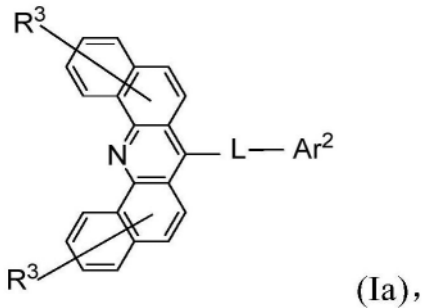
星号“*”表示结合位置;

R^3 可独立地选自H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-\text{PX}^1(\text{R}^2)_2$, D, F, 或CN;

其中 R^2 独立地选自 C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

X^1 选自S或O。

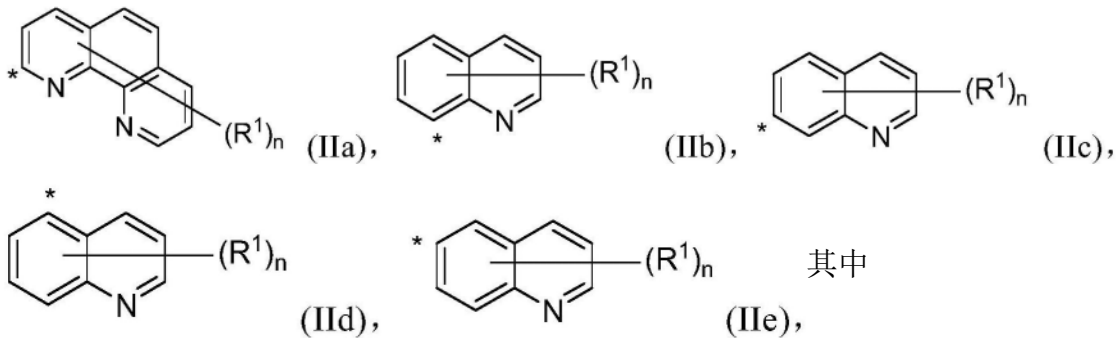
7. 根据前述权利要求1至6中的任一项所述的式I的化合物,其中所述式I由式Ia表示:



其中

L是单键、取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基、取代或未取代的苯亚基、取代或未取代的联苯亚基、取代或未取代的三联苯亚基、取代或未取代的蒽亚基、取代或未取代的二苯并呋喃亚基、取代或未取代的二苯并噻吩亚基、取代或未取代的咪唑亚基、取代或未取代的吡啶亚基、取代或未取代的苯基吡啶亚基、取代或未取代的喹啉亚基,

Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



星号“*”表示结合位置;

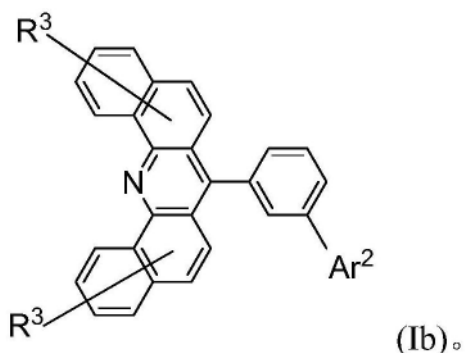
R^1 、 R^3 以及取代基L独立地选自H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$, D, F, 或CN;

其中 R^2 独立地选自 C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

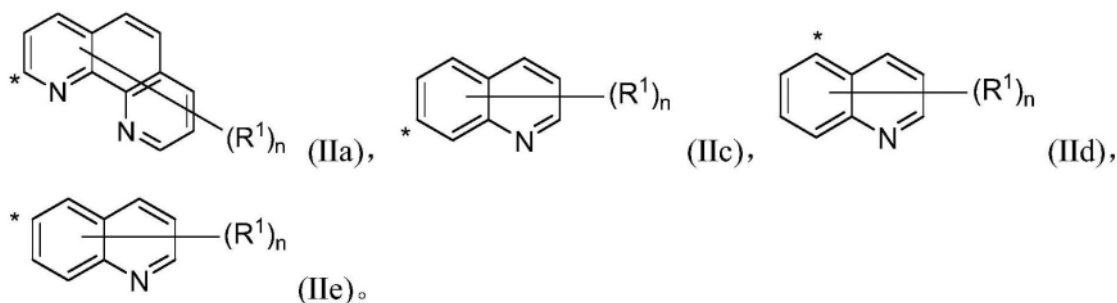
X^1 选自S或O; 并且

n是0、1、2或3。

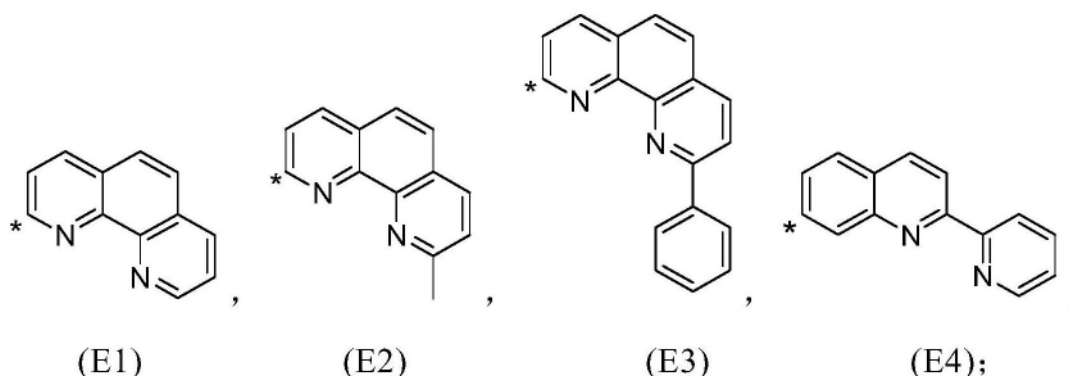
8. 根据前述权利要求1至7中的任一项所述的式I的化合物,其中所述式I的化合物由下式Ib表示:



9. 根据前述权利要求1至8中的任一项所述的式I的化合物,其中Ar²选自IIa、IIc、IIId或IIe:



10. 根据前述权利要求1至9中的任一项所述的式I的化合物,其中Ar²选自E1至E4:



其中,星号“*”表示结合位置。

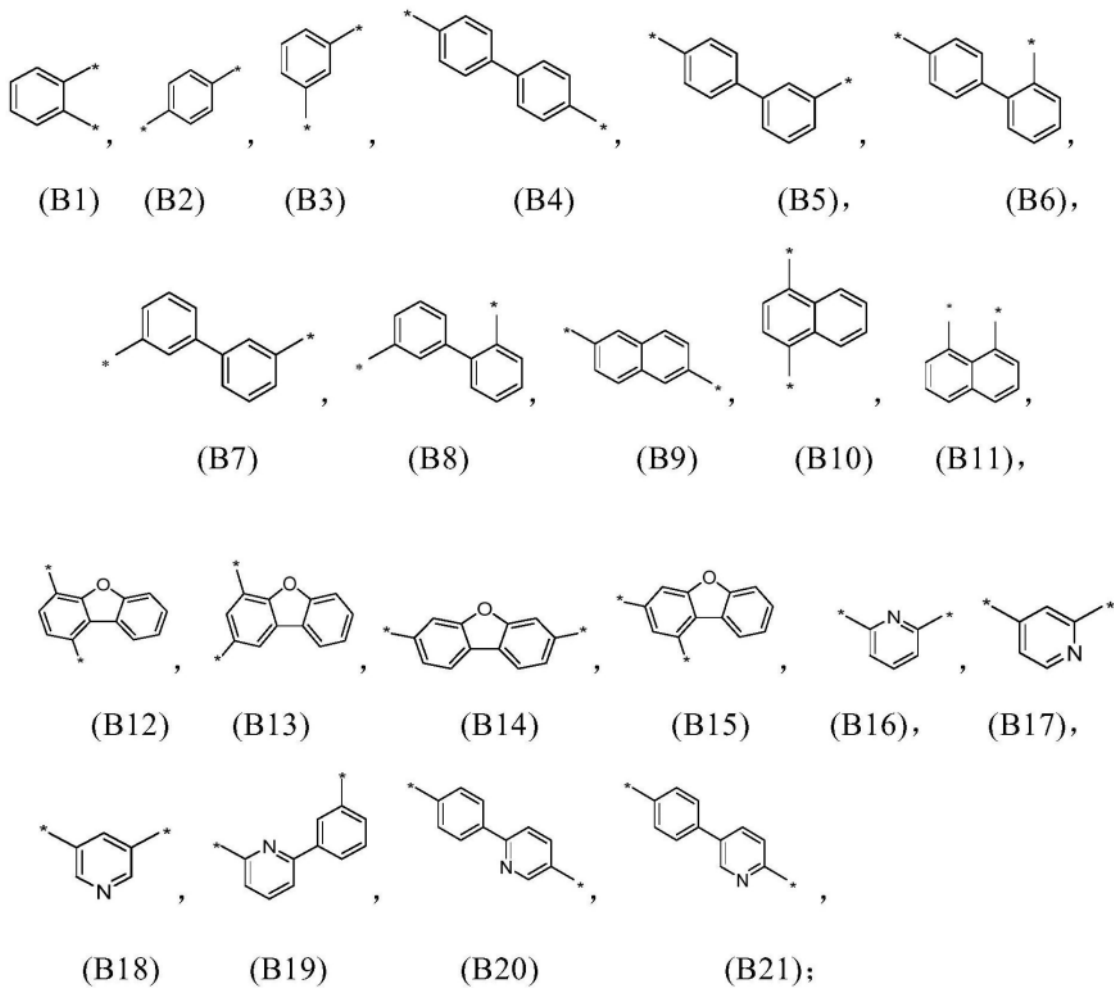
11. 根据前述权利要求1至10中的任一项所述的式I的化合物,其中L选自未取代的C₆至C₁₈芳亚基、未取代的C₃至C₁₈杂芳亚基、未取代的苯亚基、未取代的联苯亚基、未取代的三联苯亚基、未取代的蒽亚基、未取代的萘亚基、未取代的二苯并呋喃亚基、未取代的二苯并噻吩亚基、未取代的咪唑亚基、未取代的吡啶亚基、未取代的苯基吡啶亚基、未取代的喹啉亚基。

12. 根据前述权利要求1至11中的任一项所述的式I的化合物,其中L选自未取代的苯亚基、未取代的联苯亚基、未取代的三联苯亚基、未取代的蒽亚基、未取代的萘亚基、未取代的二苯并呋喃亚基、未取代的二苯并噻吩亚基、未取代的咪唑亚基、未取代的吡啶亚基、未取代的苯基吡啶亚基、未取代的喹啉亚基。

13. 根据前述权利要求1至12中的任一项所述的式I的化合物,其中L与Ar¹和Ar²间位连接或L与Ar¹和Ar²连接,并且L选自未取代的C₆至C₁₈芳亚基、未取代的C₃至C₁₈杂芳亚基、未取代的苯亚基、未取代的联苯亚基、未取代的三联苯亚基、未取代的蒽亚基、未取代的萘亚基、

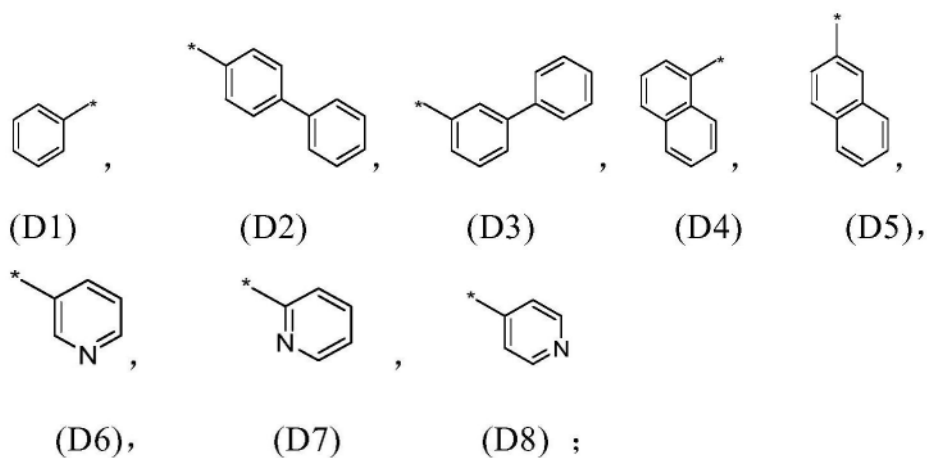
未取代的二苯并呋喃亚基、未取代的二苯并噻吩亚基、未取代的咪唑亚基、未取代的吡啶亚基、未取代的苯基吡啶亚基、未取代的喹啉亚基。

14. 根据前述权利要求1至13中的任一项所述的式I的化合物,其中L选自B1至B21,优选B1和B3至B21:



其中星号“*”表示结合位置。

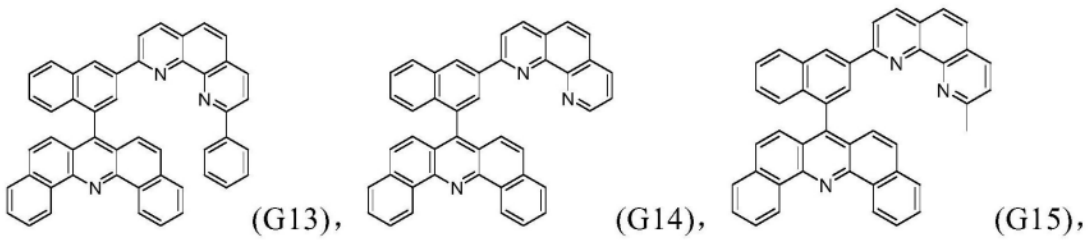
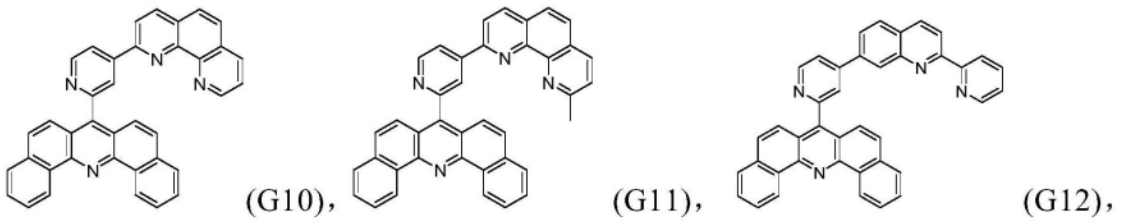
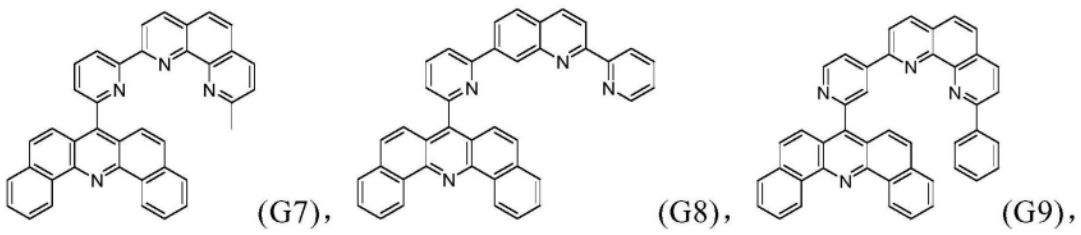
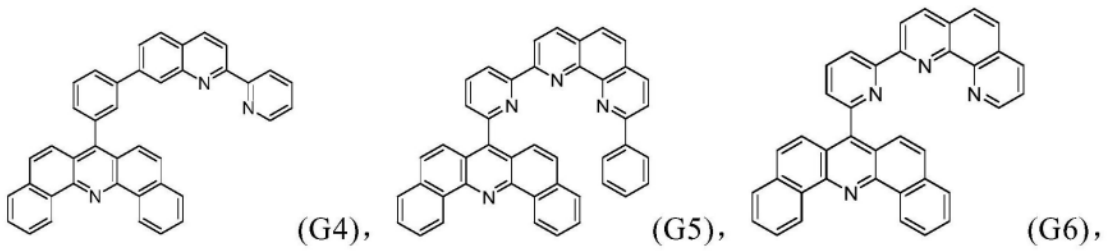
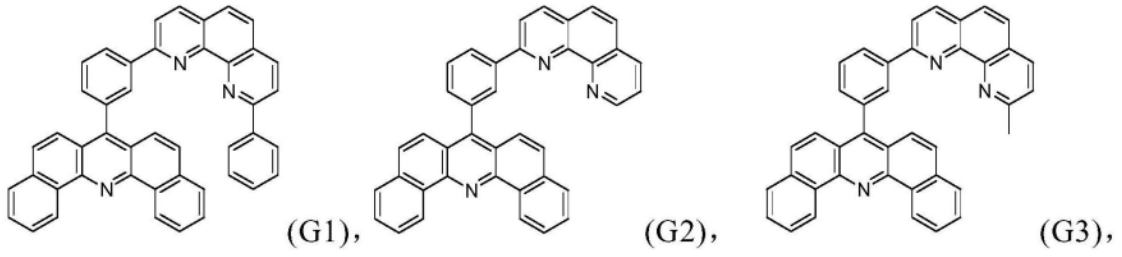
15. 根据前述权利要求1至14中的任一项所述的式I的化合物,其中R¹选自D1至D8:

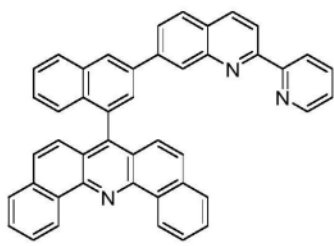


其中星号“*”表示结合位置。

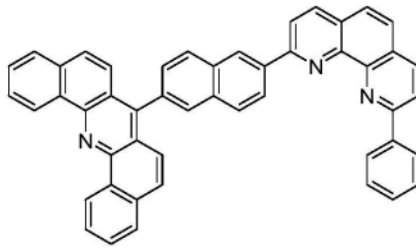
16. 根据前述权利要求1至15中的任一项所述的式I的化合物,其中所述式(I)的化合物

选自G1至G20:

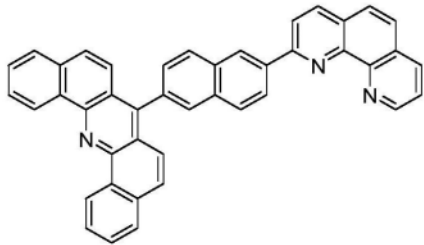




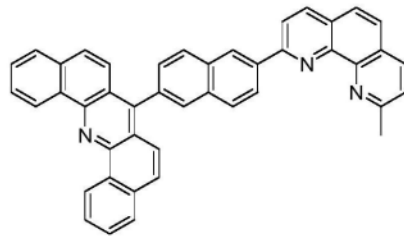
(G16),



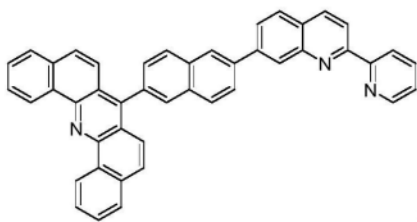
(G17),



(G18),

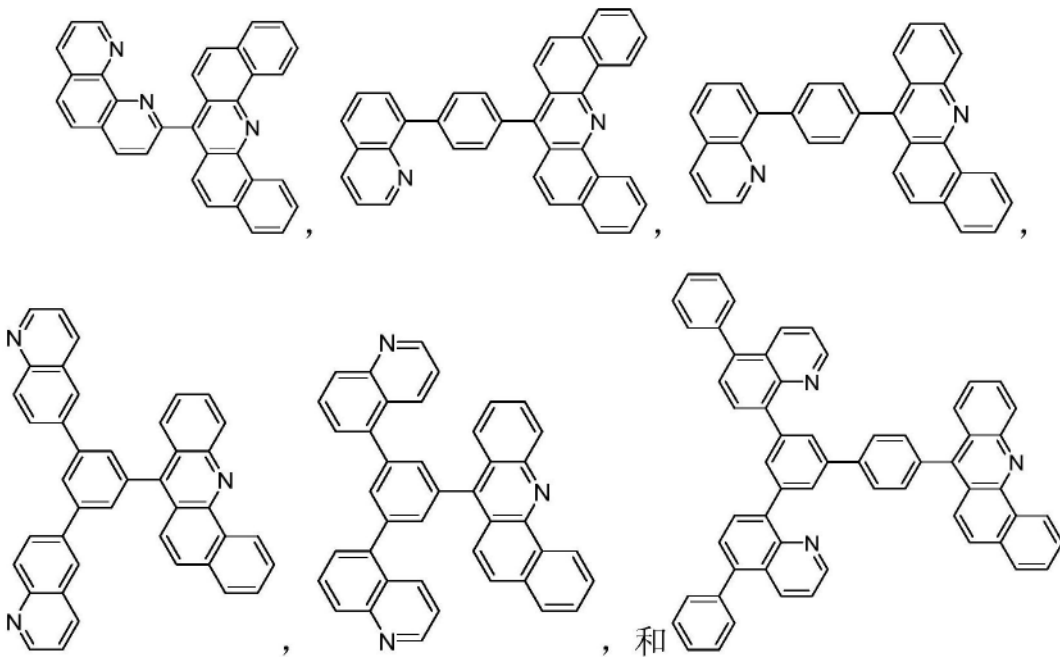


(G19),

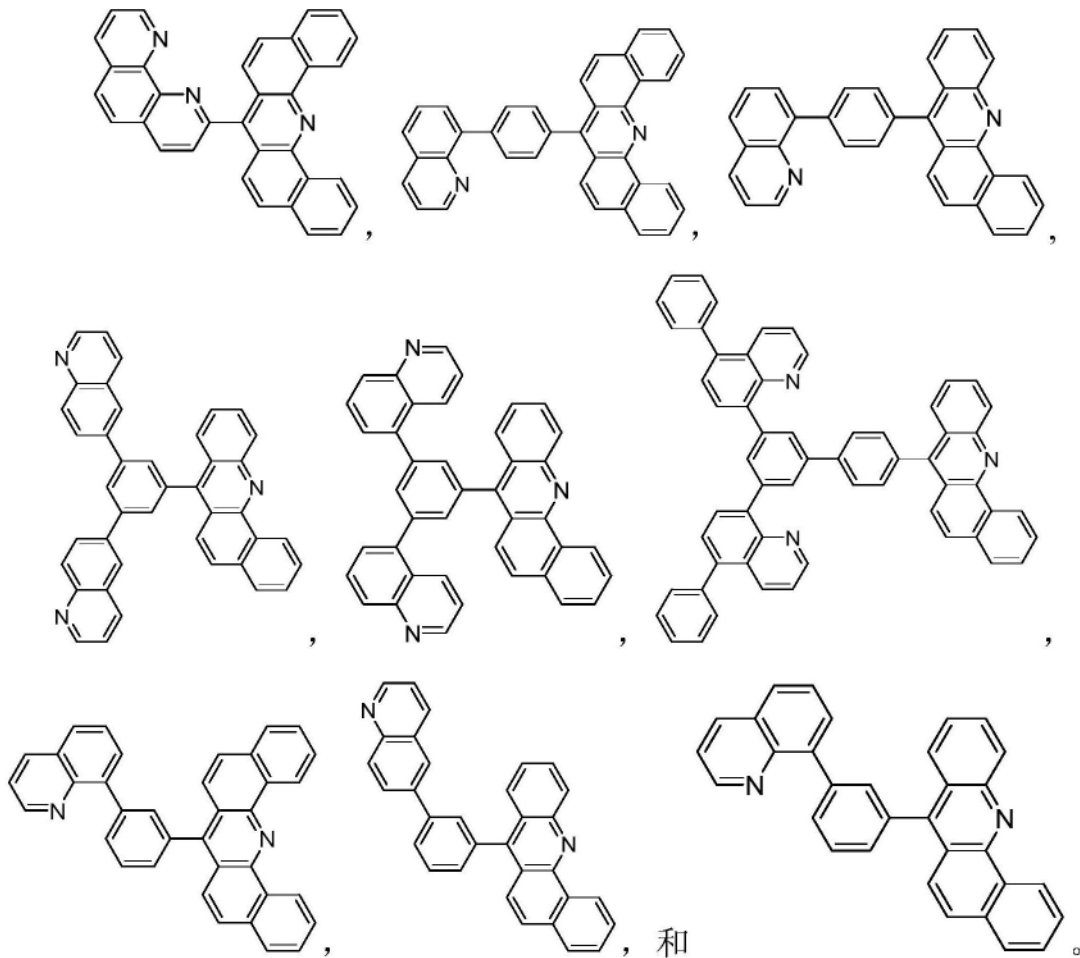


(G20)。

17. 根据前述权利要求1至16中的任一项所述的式I的化合物,其中排除以下化合物:



18. 根据前述权利要求1至17中的任一项所述的式I的化合物,其中排除以下化合物:



19. 一种有机半导体层,所述有机半导体层包含至少一种根据前述权利要求1至18中的任一项所述的由式I表示的化合物。

20. 根据权利要求19所述的有机半导体层,其中所述有机电子半导体层还包含掺杂剂,其中所述掺杂剂选自金属、金属盐或有机金属络合物。

21. 一种有机电子器件,所述有机电子器件包括阳极层、阴极层和至少一个根据权利要求19或20所述的有机半导体层,其中所述至少一个有机半导体层包含根据前述权利要求1至10中的任一项所述的式1的化合物。

22. 根据权利要求21所述的有机电子器件,所述有机电子器件还包括至少一个发光层,其中所述有机半导体层布置在所述至少一个发光层和所述阴极层之间。

23. 根据前述权利要求21至22中的任一项所述的有机电子器件,其中所述电子器件为发光器件、薄膜晶体管、电池、显示器件或光伏电池,优选发光器件。

吡啶化合物以及包含它的有机半导体层、有机电子器件和显示装置

技术领域

[0001] 本发明涉及包含取代或未取代吡啶基团的化合物、包含至少一种具有取代或未取代吡啶基团的化合物的有机半导体层以及包含前者的有机电子器件。本发明还涉及包含所述有机电子器件的显示装置。

背景技术

[0002] 寻找新的化合物,该化合物可适合用于包含它的有机半导体层或有机电子器件,始终是一个目标。作为自发光器件的有机电子器件,例如有机发光二极管OLED,具有宽视角、优异的对比度、迅速的响应、高亮度、优异的工作电压特性和色彩再现。典型的OLED包括阳极、空穴传输层HTL、发光层EML、电子传输层ETL和阴极,它们依次层叠在基底上。在这方面,HTL、EML和ETL是由有机化合物形成的薄膜。

[0003] 当向阳极和阴极施加电压时,从阳极电极注入的空穴经由HTL移动到EML,而从阴极电极注入的电子经由ETL移动到EML。空穴和电子在EML中重新组合而产生激子。当激子从激发态降至基态时,发出光。空穴和电子的注入和流动应该是平衡的,使得具有上述结构的OLED具有优异的效率 and/或长寿命。

[0004] 有机发光二极管的性能可受到半导体层的特性的影响,并且尤其可受到半导体层的有机材料的特性的影响。

[0005] 特别地,需要开发一种能够增加电子迁移率并同时增加电化学稳定性的半导体层,以使有机电子器件例如有机发光二极管可应用于大尺寸的平板显示器。

[0006] 此外,需要开发一种能够在更高的电流密度下并因此在较高的亮度下具有延长的寿命的有机半导体层。特别是需要开发有机半导体材料或半导体层以降低例如对移动显示装置的工作电压,这对于降低功耗和增加电池寿命很重要。

[0007] 始终需要寻找可改善有机半导体材料、半导体层及其有机电子器件的性能的新化合物,特别是为了在较低的工作电压下实现高效率 and 长寿命。从而可降低功耗并改善电池寿命,例如对于移动电子设备而言。

发明内容

[0008] 本发明的一个方面提供了一种由下式I表示的化合物:

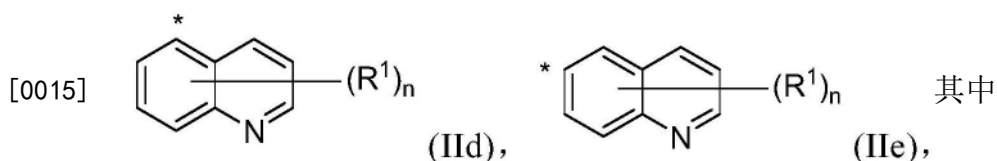
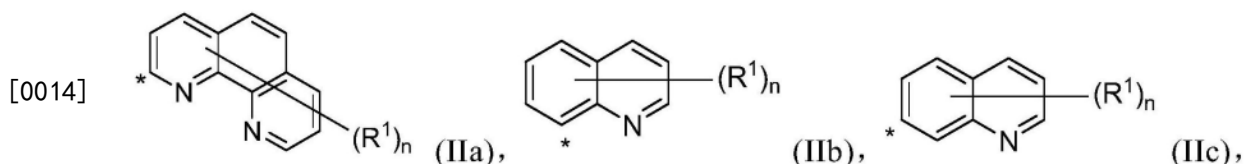
[0009] Ar^1-L-Ar^2 (I)

[0010] 其中,

[0011] Ar^1 选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶;

[0012] L是单键、取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基;并且

[0013] Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



[0016] R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$, D, F, 或CN; 其中

[0017] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

[0018] X^1 选自S或O; 并且

[0019] n是0、1、2或3。

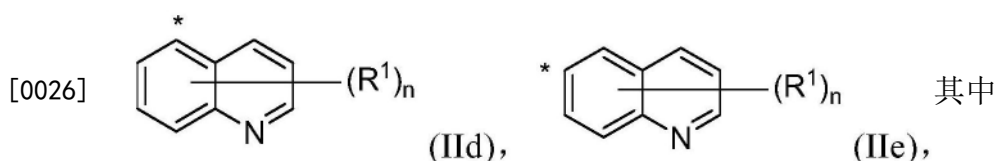
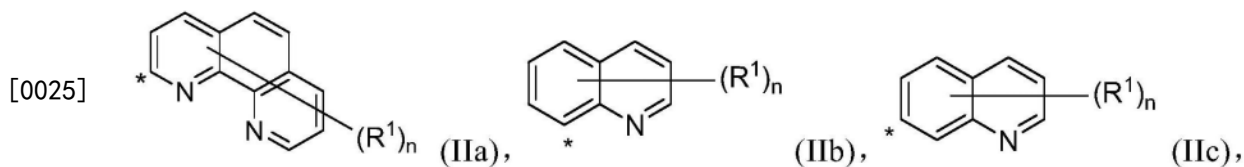
[0020] 根据一个实施方式, 所述化合物可由下式I表示:

[0021] Ar^1-L-Ar^2 (I), 其中,

[0022] Ar^1 选自取代或未取代的二苯并吡啶;

[0023] L是单键、取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基; 并且

[0024] Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



[0027] R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$, D, F, 或CN; 其中

[0028] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

[0029] X^1 选自S或O; 并且

[0030] n是0、1、2或3。

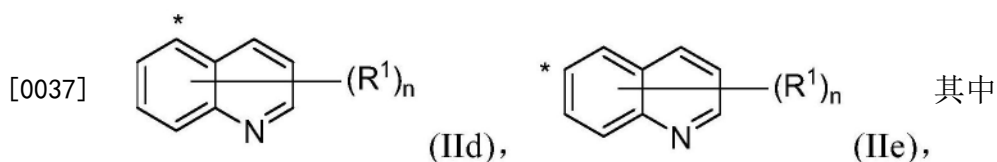
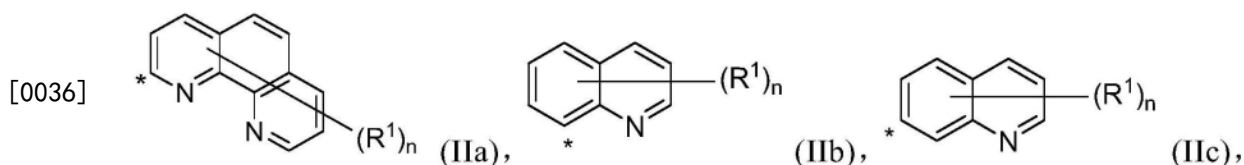
[0031] 根据一个实施方式, 所述化合物可由下式I表示:

[0032] Ar^1-L-Ar^2 (I), 其中,

[0033] Ar^1 选自取代或未取代的二苯并吡啶;

[0034] L是单键、取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基;并且

[0035] Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



[0038] R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$,D,F,或CN;其中

[0039] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

[0040] X^1 选自S或O;并且

[0041] n是0、1、2或3;并且

[0042] 其中所述式I的化合物包含至少9个至25个芳族环。

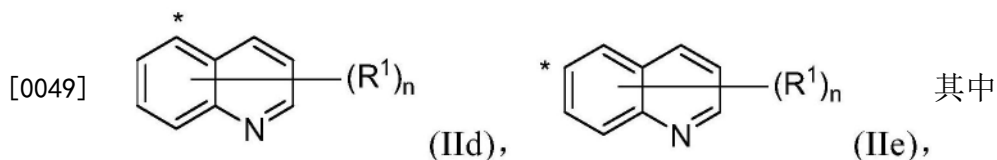
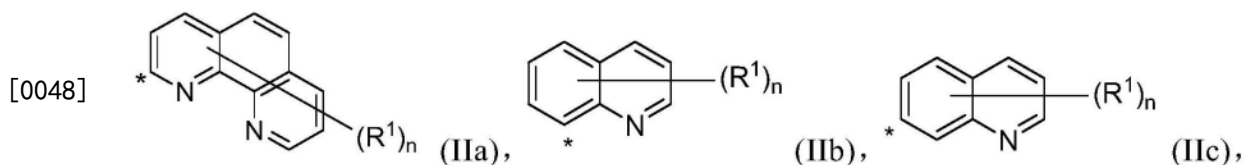
[0043] 根据一个实施方式,所述化合物可由下式I表示:

[0044] Ar^1-L-Ar^2 (I), 其中,

[0045] Ar^1 选自取代或未取代的二苯并吡啶;

[0046] L是取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基;并且

[0047] Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



[0050] R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$,D,F,或CN;其中

[0051] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全

氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基;

[0052] X¹选自S或O;并且

[0053] n是0、1、2或3。

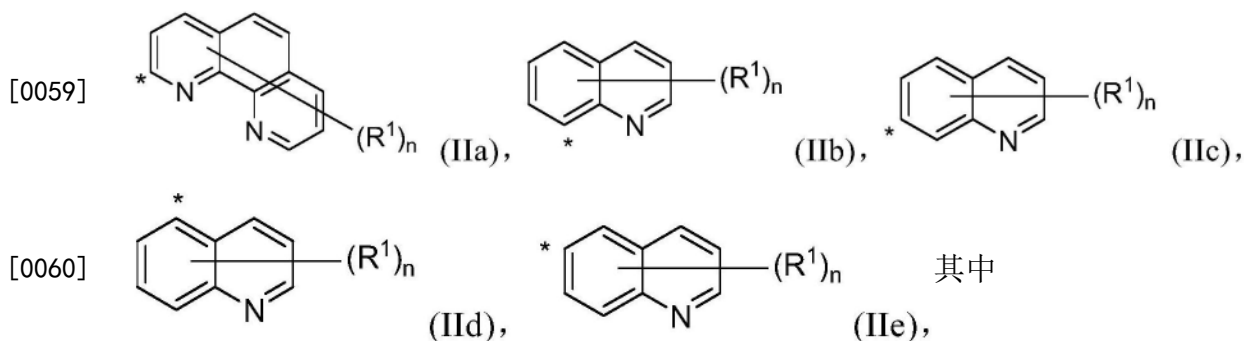
[0054] 根据一个实施方式,所述化合物可由下式I表示:

[0055] Ar¹-L-Ar² (I),其中,

[0056] Ar¹选自取代或未取代的二苯并吡啶;

[0057] L是取代或未取代的C₆至C₁₈芳亚基、取代或未取代的C₃至C₁₈杂芳亚基;并且

[0058] Ar²具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



[0061] R¹以及Ar¹和L的取代基独立地选自:H,C₆至C₁₈芳基,C₃至C₂₀杂芳基,C₁至C₁₆烷基,C₁至C₁₆烷氧基,C₃至C₁₆支链烷基,C₃至C₁₆环状烷基,C₃至C₁₆支链烷氧基,C₃至C₁₆环状烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基,-PX¹(R²)₂,D,F,或CN;其中

[0062] R²独立地选自:C₆至C₁₂芳基,C₃至C₁₂杂芳基,C₁至C₁₆烷基,C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基;

[0063] X¹选自S或O;并且

[0064] n是0、1、2或3;并且

[0065] 其中所述式I的化合物包含至少9个至25个芳族环。

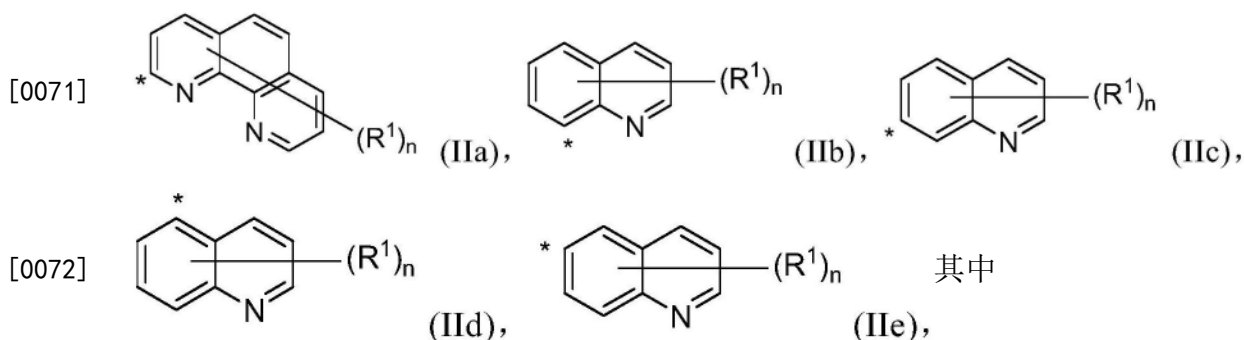
[0066] 根据一个实施方式,所述化合物可由下式I表示:

[0067] Ar¹-L-Ar² (I),其中,

[0068] Ar¹选自取代或未取代的二苯并吡啶;

[0069] L是取代或未取代的C₆至C₁₈芳亚基、取代或未取代的C₃至C₁₈杂芳亚基;并且

[0070] Ar²具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



[0073] R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$,D,F,或CN;其中

[0074] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

[0075] X^1 选自S或O;并且

[0076] n是0、1、2或3;并且

[0077] 其中所述式I的化合物包含至少9个至25个芳族环;并且任选地,其中如果L选自苯亚基、萘亚基或蒽亚基,优选苯亚基,则 Ar^1 和 Ar^2 以间位与L键合。

[0078] 所述式I的化合物提供较低的工作电压,这对于降低功耗和增加电池寿命是重要的。此外,所述式I的化合物具有高Tg,导致热稳定性改善。

[0079] 若非另有说明,杂原子可单独地选自N、O、S、B、Si、P、Se,优选选自N、O和S,另外优选选自S或O,更优选是N。

[0080] 若非另有说明,星号“*”表示结合位置。

[0081] 若非另有说明,H可以表示氢或氘。

[0082] 若非另有说明,L的基团成员的最后一个音节是“亚基(ene)”。

[0083] 根据另一个实施方式,其中n可选自0、1、2或3,或优选n可选自0、1或2,或还优选n可选自0或1,或另外优选n可选为1,也优选n可选为0。

[0084] 根据一个实施方式,L可选自取代或未取代的苯亚基、取代或未取代的联苯亚基、取代或未取代的三联苯亚基、取代或未取代的蒽亚基、取代或未取代的萘亚基、取代或未取代的二苯并呋喃亚基、取代或未取代的二苯并噻吩亚基、取代或未取代的咪唑亚基、取代或未取代的吡啶亚基、取代或未取代的苯基吡啶亚基、取代或未取代的喹啉亚基。

[0085] 根据一个实施方式,L可选自未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基。

[0086] 在本发明的一个实施方式中,L可选自未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基、未取代的苯亚基、未取代的联苯亚基、未取代的三联苯亚基、未取代的蒽亚基、未取代的萘亚基、未取代的二苯并呋喃亚基、未取代的二苯并噻吩亚基、未取代的咪唑亚基、未取代的吡啶亚基、未取代的苯基吡啶亚基、未取代的喹啉亚基。

[0087] 根据本发明的另一个实施方式,L可选自未取代的苯亚基、未取代的联苯亚基、未取代的三联苯亚基、未取代的蒽亚基、未取代的萘亚基、未取代的二苯并呋喃亚基、未取代的二苯并噻吩亚基、未取代的咪唑亚基、未取代的吡啶亚基、未取代的苯基吡啶亚基、未取代的喹啉亚基。

[0088] 根据一个实施方式,L可选自未取代的苯亚基或未取代的联苯亚基。

[0089] 根据一个实施方式,如果L选自苯亚基、萘亚基或蒽亚基,优选苯亚基,则 Ar^1 和 Ar^2 任选以间位与L键合。

[0090] 根据一个实施方式,其中所述化合物由下式I表示:

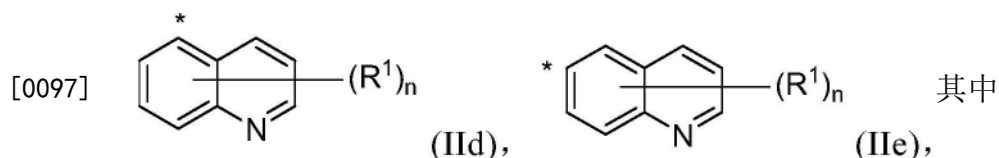
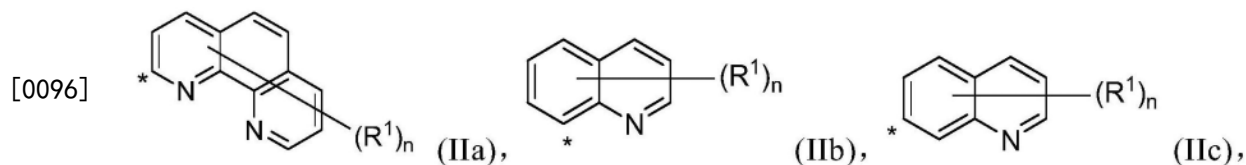
[0091] Ar^1-L-Ar^2 (I)

[0092] 其中,

[0093] Ar¹可选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶；

[0094] L可以是单键、取代或未取代的C₆至C₁₈芳亚基、取代或未取代的C₃至C₁₈杂芳亚基；并且

[0095] Ar²具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe：



[0098] R¹以及Ar¹和L的取代基独立地选自：H，C₆至C₁₈芳基，C₃至C₂₀杂芳基，C₁至C₁₆烷基，C₁至C₁₆烷氧基，C₃至C₁₆支链烷基，C₃至C₁₆环状烷基，C₃至C₁₆支链烷氧基，C₃至C₁₆环状烷氧基，部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基，部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基，部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基，部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基，-PX¹(R²)₂，D，F，或CN；其中

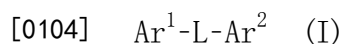
[0099] R²独立地选自：C₆至C₁₂芳基，C₃至C₁₂杂芳基，C₁至C₁₆烷基，C₁至C₁₆烷氧基，部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基，部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基，部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基，部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基；

[0100] X¹可选自S或O；并且

[0101] n是0、1、2或3；其中

[0102] 如果L选自苯亚基、萘亚基或蒽亚基，优选苯亚基，则Ar¹和Ar²任选以间位与L键合。

[0103] 本发明的一个实施方式涉及一种由下式I表示的化合物：

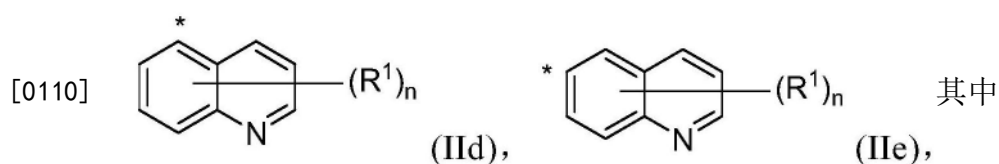
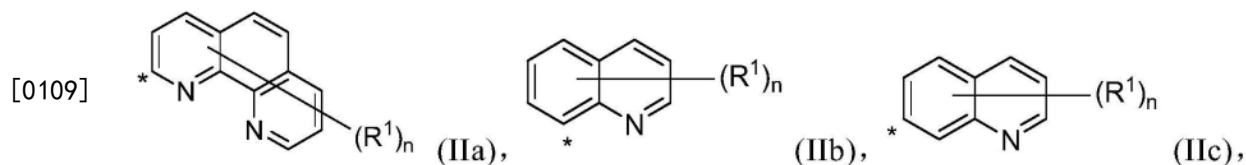


[0105] 其中，

[0106] Ar¹可选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶；

[0107] L可以是取代或未取代的C₆至C₁₈芳亚基、取代或未取代的C₃至C₁₈杂芳亚基；并且

[0108] Ar²具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe：



[0111] R¹以及Ar¹和L的取代基独立地选自：H，C₆至C₁₈芳基，C₃至C₂₀杂芳基，C₁至C₁₆烷基，C₁至C₁₆烷氧基，C₃至C₁₆支链烷基，C₃至C₁₆环状烷基，C₃至C₁₆支链烷氧基，C₃至C₁₆环状烷氧基，部

分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,-PX¹(R²)₂,D,F,或CN;其中

[0112] R²独立地选自:C₆至C₁₂芳基,C₃至C₁₂杂芳基,C₁至C₁₆烷基,C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基;

[0113] X¹可选自S或O;并且

[0114] n是0、1、2或3;其中,优选地,如果L是苯亚基,则Ar¹和Ar²以间位与L键合。

[0115] 根据一个实施方式,其中所述化合物由下式I表示:

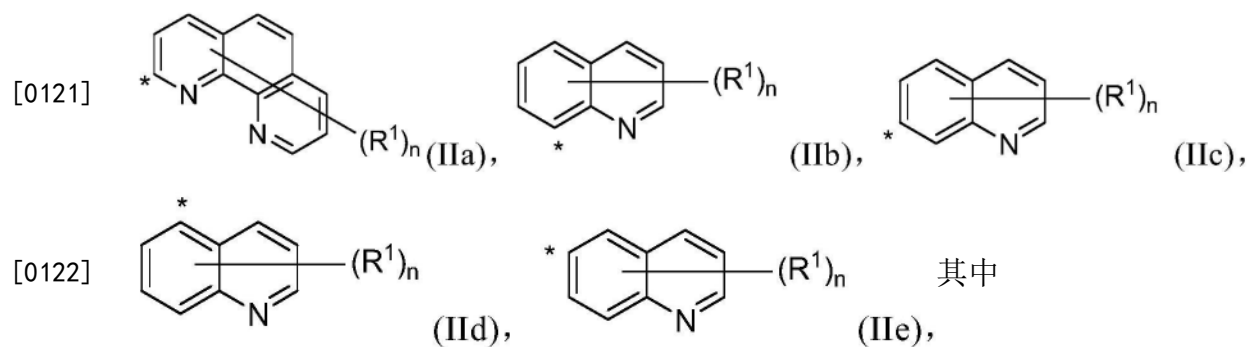
[0116] Ar¹-L-Ar² (I)

[0117] 其中,

[0118] Ar¹可选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶;

[0119] L可选自以下基团:取代或未取代的苯亚基,取代或未取代的联苯亚基,取代或未取代的三联苯亚基,取代或未取代的蒽亚基,取代或未取代的萘亚基,取代或未取代的二苯并咪唑亚基,取代或未取代的二苯并噻吩亚基,取代或未取代的咪唑亚基,取代或未取代的吡啶亚基,取代或未取代的苯基吡啶亚基,取代或未取代的喹啉亚基;并且

[0120] Ar²具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



[0123] R¹以及Ar¹和L的取代基独立地选自:H,C₆至C₁₈芳基,C₃至C₂₀杂芳基,C₁至C₁₆烷基,C₁至C₁₆烷氧基,C₃至C₁₆支链烷基,C₃至C₁₆环状烷基,C₃至C₁₆支链烷氧基,C₃至C₁₆环状烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,-PX¹(R²)₂,D,F,或CN;其中

[0124] R²独立地选自:C₆至C₁₂芳基,C₃至C₁₂杂芳基,C₁至C₁₆烷基,C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基;

[0125] X¹可选自S或O;并且

[0126] n是0、1、2或3;其中

[0127] 如果L选自苯亚基、萘亚基或蒽亚基,优选苯亚基,则Ar¹和Ar²任选地以间位与L键合。

[0128] 在本发明的一个实施方式中,所述化合物由下式I表示:

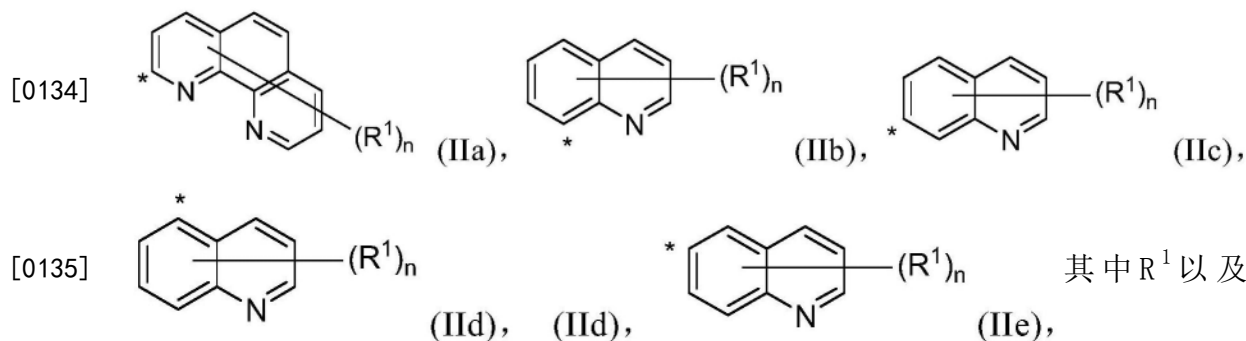
[0129] Ar¹-L-Ar² (I)

[0130] 其中,

[0131] Ar¹可选自取代或未取代的吡啶,取代或未取代的苯并吡啶,取代或未取代的二苯并吡啶;

[0132] L可选自以下基团:未取代的苯亚基,未取代的联苯亚基,未取代的三联苯亚基,未取代的蒽亚基,未取代的萘亚基,未取代的二苯并呋喃亚基,未取代的二苯并噻吩亚基,未取代的咪唑亚基,未取代的吡啶亚基,未取代的苯基吡啶亚基,未取代的喹啉亚基;并且

[0133] Ar²具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



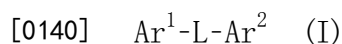
Ar¹和L的取代基独立地选自:H,C₆至C₁₈芳基,C₃至C₂₀杂芳基,C₁至C₁₆烷基,C₁至C₁₆烷氧基,C₃至C₁₆支链烷基,C₃至C₁₆环状烷基,C₃至C₁₆支链烷氧基,C₃至C₁₆环状烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基,-PX¹(R²)₂,D,F,或CN;其中

[0136] R²独立地选自:C₆至C₁₂芳基,C₃至C₁₂杂芳基,C₁至C₁₆烷基,C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基;

[0137] X¹可选自S或O;并且

[0138] n是0、1、2或3;其中,优选地,如果L是苯亚基,则Ar¹和Ar²以间位与L键合。

[0139] 根据一个实施方式,其中所述化合物由下式I表示:

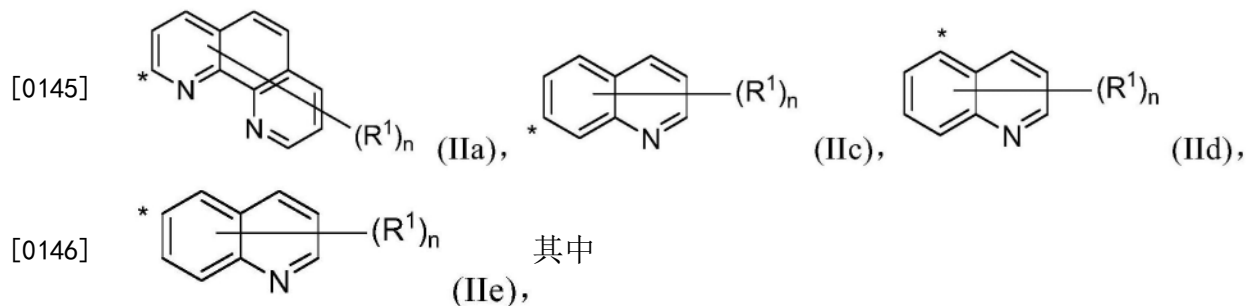


[0141] 其中,

[0142] Ar¹可选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶;

[0143] L可选自以下基团:取代或未取代的苯亚基,取代或未取代的联苯亚基,取代或未取代的三联苯亚基,取代或未取代的蒽亚基,取代或未取代的萘亚基,取代或未取代的二苯并呋喃亚基,取代或未取代的二苯并噻吩亚基,取代或未取代的咪唑亚基,取代或未取代的吡啶亚基,取代或未取代的苯基吡啶亚基,取代或未取代的喹啉亚基;并且

[0144] Ar²具有式IIa、IIc、IIId或IIe:



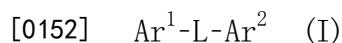
[0147] R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$,D,F,或CN;其中

[0148] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

[0149] X^1 可选自S或O;并且

[0150] n是0、1、2或3;其中,优选地,如果L是苯亚基,则 Ar^1 和 Ar^2 以间位与L键合。

[0151] 根据一个实施方式,其中所述化合物由下式I表示:

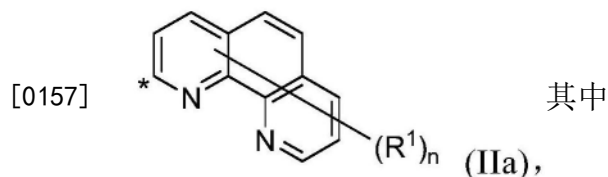


[0153] 其中,

[0154] Ar^1 可选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶;

[0155] L可选自以下基团:取代或未取代的苯亚基、取代或未取代的联苯亚基、取代或未取代的三联苯亚基、取代或未取代的蒽亚基、取代或未取代的萘亚基、取代或未取代的二苯并咪唑亚基、取代或未取代的二苯并噻吩亚基、取代或未取代的咪唑亚基、取代或未取代的吡啶亚基、取代或未取代的苯基吡啶亚基、取代或未取代的喹啉亚基;并且

[0156] Ar^2 具有式IIa:



[0158] R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$,D,F,或CN;其中

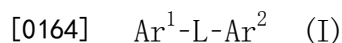
[0159] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

[0160] X^1 可选自S或O;并且

[0161] n是0、1、2或3;其中

[0162] 如果L选自苯亚基、萘亚基或蒽亚基,优选苯亚基,则 Ar^1 和 Ar^2 任选地以间位与L键合。

[0163] 根据一个实施方式,其中所述化合物由下式I表示:

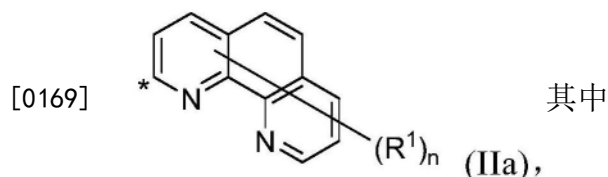


[0165] 其中,

[0166] Ar^1 可选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶;

[0167] L可选自未取代的苯亚基、未取代的联苯亚基、未取代的三联苯亚基、未取代的蒽亚基、未取代的萘亚基、未取代的二苯并呋喃亚基、未取代的二苯并噻吩亚基、未取代的咪唑亚基、未取代的吡啶亚基、未取代的苯基吡啶亚基、未取代的喹啉亚基；并且

[0168] Ar^2 具有式IIa:



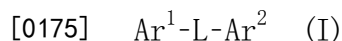
[0170] R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$, D, F, 或CN; 其中

[0171] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

[0172] X^1 可选自S或O; 并且

[0173] n是0、1、2或3。

[0174] 根据一个实施方式, 其中所述化合物由下式I表示:

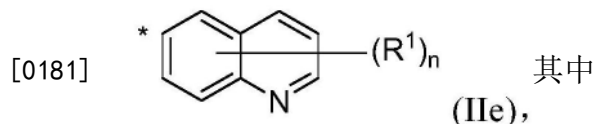
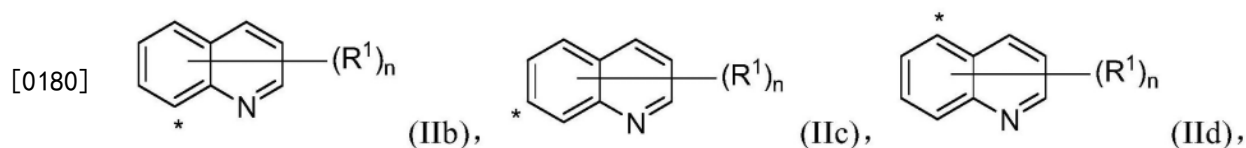


[0176] 其中,

[0177] Ar^1 可选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶;

[0178] L可选自以下基团: 取代或未取代的苯亚基、取代或未取代的联苯亚基、取代或未取代的三联苯亚基、取代或未取代的蒽亚基、取代或未取代的萘亚基、取代或未取代的二苯并呋喃亚基、取代或未取代的二苯并噻吩亚基、取代或未取代的咪唑亚基、取代或未取代的吡啶亚基、取代或未取代的苯基吡啶亚基、取代或未取代的喹啉亚基; 并且

[0179] Ar^2 具有式IIb、IIc、IId或IIe:



[0182] R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$, D, F, 或CN; 其中

[0183] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全

氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基;

[0184] X¹可选自S或O;并且

[0185] n是0、1、2或3;其中

[0186] 根据一个实施方式,其中所述化合物由下式I表示:

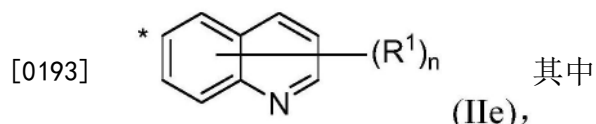
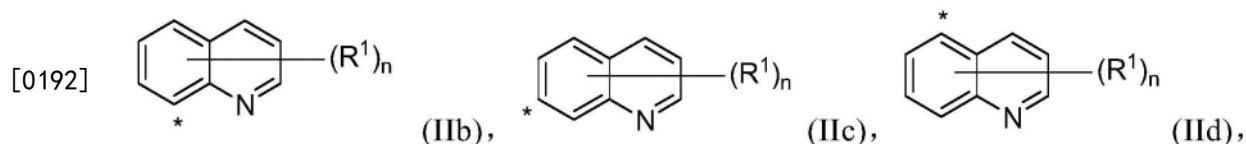
[0187] Ar¹-L-Ar² (I)

[0188] 其中,

[0189] Ar¹可选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶;

[0190] L可选自以下基团:取代或未取代的苯亚基、取代或未取代的联苯亚基、取代或未取代的三联苯亚基、取代或未取代的蒽亚基、取代或未取代的萘亚基、取代或未取代的二苯并呋喃亚基、取代或未取代的二苯并噻吩亚基、取代或未取代的咪唑亚基、取代或未取代的吡啶亚基、取代或未取代的苯基吡啶亚基、取代或未取代的喹啉亚基;并且

[0191] Ar²具有式IIb、IIc、IIId或IIe:



[0194] R¹独立地选自:C₆至C₁₈芳基,C₃至C₂₀杂芳基,C₁至C₁₆烷基,C₁至C₁₆烷氧基,C₃至C₁₆支链烷基,C₃至C₁₆环状烷基,C₃至C₁₆支链烷氧基,C₃至C₁₆环状烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基,-PX¹(R²)₂,D,F,或CN;其中

[0195] R²独立地选自C₆至C₁₂芳基,C₃至C₁₂杂芳基,C₁至C₁₆烷基,C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基;

[0196] X¹可选自S或O;并且

[0197] n是0、1、2或3;任选地,其中

[0198] 如果L选自苯亚基、萘亚基或蒽亚基,优选苯亚基,则Ar¹和Ar²以间位与L键合。

[0199] 在本发明的一个实施方式中,所述化合物由下式I表示:

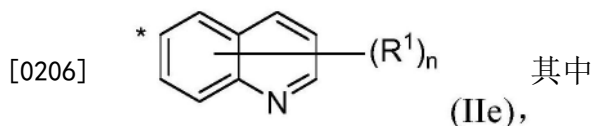
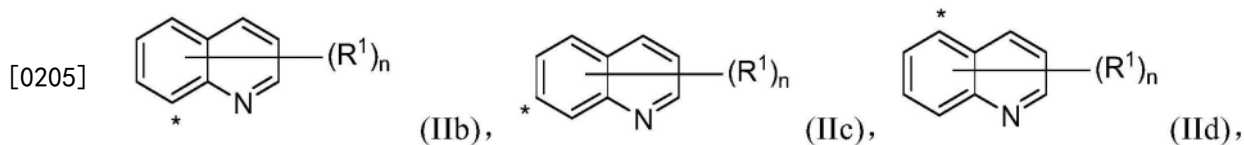
[0200] Ar¹-L-Ar² (I)

[0201] 其中,

[0202] Ar¹可选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶;

[0203] L可选自以下基团:未取代的苯亚基、未取代的联苯亚基、未取代的三联苯亚基、未取代的蒽亚基、未取代的萘亚基、未取代的二苯并呋喃亚基、未取代的二苯并噻吩亚基、未取代的咪唑亚基、未取代的吡啶亚基、未取代的苯基吡啶亚基、未取代的喹啉亚基;并且

[0204] Ar²具有式IIb、IIc、IIId或IIe:



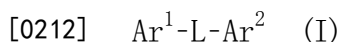
[0207] R^1 独立地选自： C_6 至 C_{18} 芳基， C_3 至 C_{20} 杂芳基， C_1 至 C_{16} 烷基， C_1 至 C_{16} 烷氧基， C_3 至 C_{16} 支链烷基， C_3 至 C_{16} 环状烷基， C_3 至 C_{16} 支链烷氧基， C_3 至 C_{16} 环状烷氧基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基， $-PX^1(R^2)_2$ ，D，F，或CN；其中

[0208] R^2 独立地选自： C_6 至 C_{12} 芳基， C_3 至 C_{12} 杂芳基， C_1 至 C_{16} 烷基， C_1 至 C_{16} 烷氧基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基；

[0209] X^1 可选自S或O；并且

[0210] n 是0、1、2或3；其中任选地，如果L选自苯亚基、萘亚基或蒽亚基，优选苯亚基，则 Ar^1 和 Ar^2 以间位与L键合。

[0211] 根据一个实施方式，其中所述化合物由下式I表示：

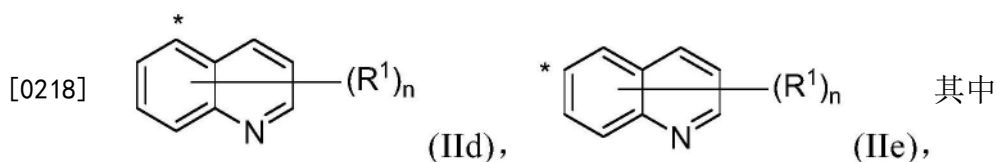
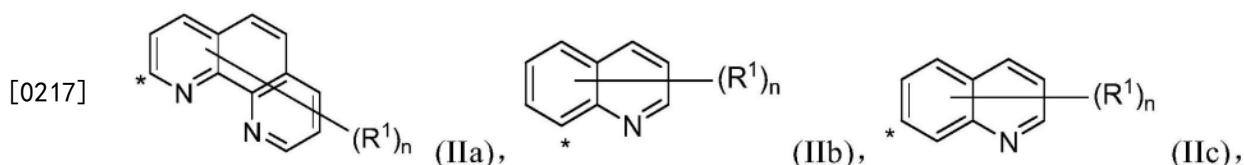


[0213] 其中，

[0214] Ar^1 可选自未取代的吡啶、未取代的苯并吡啶、未取代的二苯并吡啶；

[0215] L选自以下基团：取代或未取代的苯亚基、未取代的联苯亚基、未取代的三联苯亚基、未取代的蒽亚基、未取代的二苯并咪唑亚基、未取代的二苯并噻吩亚基、未取代的咪唑亚基、未取代的吡啶亚基、未取代的苯基吡啶亚基、未取代的喹啉亚基；并且

[0216] Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe：



[0219] R^1 独立地选自： H ， C_6 至 C_{18} 芳基， C_3 至 C_{20} 杂芳基， C_1 至 C_{16} 烷基， C_1 至 C_{16} 烷氧基， C_3 至 C_{16} 支链烷基， C_3 至 C_{16} 环状烷基， C_3 至 C_{16} 支链烷氧基， C_3 至 C_{16} 环状烷氧基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基， $-PX^1(R^2)_2$ ，D，F，或CN；其中

[0220] R^2 独立地选自： C_6 至 C_{12} 芳基， C_3 至 C_{12} 杂芳基， C_1 至 C_{16} 烷基， C_1 至 C_{16} 烷氧基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基；

[0221] X^1 可选自 S 或 O; 并且

[0222] n 是 0、1、2 或 3; 其中

[0223] 如果 L 选自苯亚基、萘亚基或蒽亚基, 优选苯亚基, 则任选地 Ar^1 和 Ar^2 以间位与 L 键合, 优选 Ar^1 和 Ar^2 以间位与 L 键合。

[0224] 本发明的一个实施方式涉及一种由下式 I 表示的化合物:

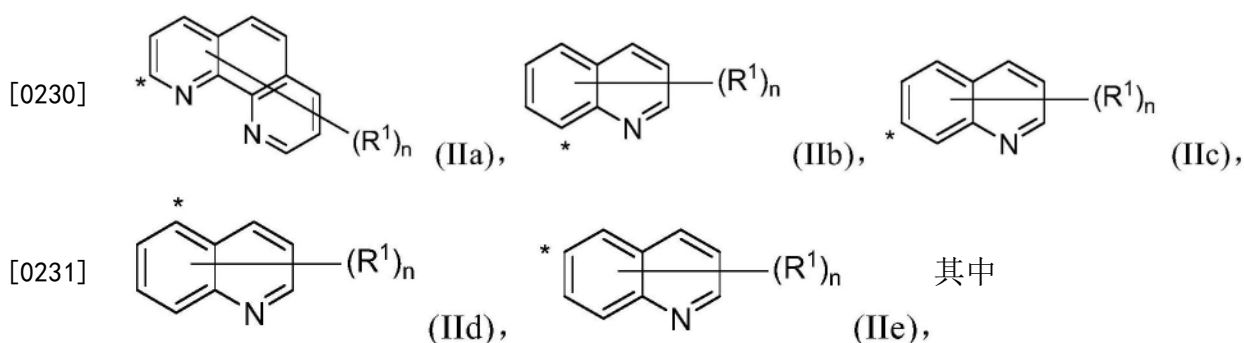
[0225] Ar^1-L-Ar^2 (I)

[0226] 其中,

[0227] Ar^1 可选自未取代的吡啶、未取代的苯并吡啶、未取代的二苯并吡啶;

[0228] L 可选自以下基团: 未取代的苯亚基, 未取代的联苯亚基, 未取代的三联苯亚基, 未取代的蒽亚基, 未取代的二苯并呋喃亚基, 未取代的二苯并噻吩亚基, 未取代的咪唑亚基, 未取代的吡啶亚基, 未取代的苯基吡啶亚基, 未取代的喹啉亚基; 并且

[0229] Ar^2 具有式 IIa、IIb、IIc、IIId 或 IIe:



[0232] R^1 独立地选自: H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$, D, F, 或 CN; 其中

[0233] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

[0234] X^1 可选自 S 或 O; 并且

[0235] n 是 0、1、2 或 3; 其中如果 L 选自苯亚基、萘亚基或蒽亚基, 优选苯亚基, 则任选地 Ar^1 和 Ar^2 以间位与 L 键合, 优选 Ar^1 和 Ar^2 以间位与 L 键合。

[0236] 根据一个实施方式, 其中所述化合物由下式 I 表示:

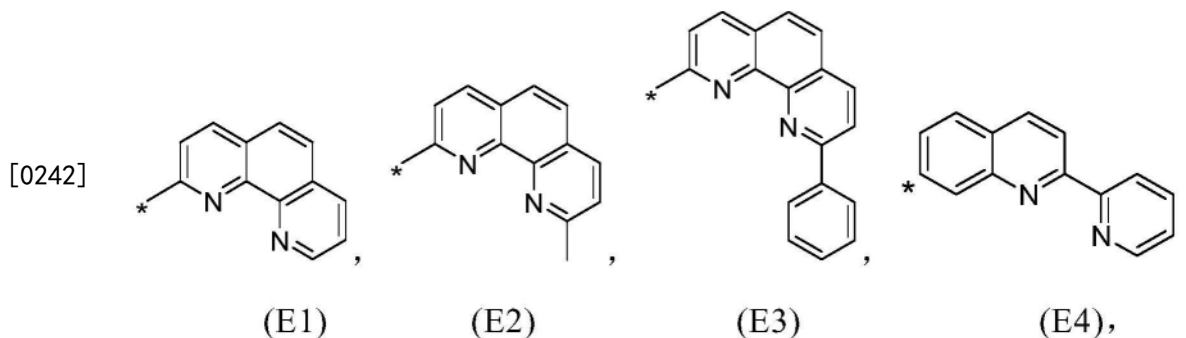
[0237] Ar^1-L-Ar^2 (I)

[0238] 其中,

[0239] Ar^1 可选自未取代的吡啶、未取代的苯并吡啶、未取代的二苯并吡啶;

[0240] L 可选自以下基团: 取代或未取代的苯亚基, 未取代的联苯亚基, 未取代的三联苯亚基, 未取代的蒽亚基, 未取代的二苯并呋喃亚基, 未取代的二苯并噻吩亚基, 未取代的咪唑亚基, 未取代的吡啶亚基, 未取代的苯基吡啶亚基, 未取代的喹啉亚基; 并且

[0241] Ar^2 可选自 E1 至 E4:



[0243] 其中,星号“*”表示结合位置;并且其中 Ar^1 和 Ar^2 以间位与L键合,并优选如果L选自苯亚基、萘亚基或蒽亚基,优选苯亚基,则 Ar^1 和 Ar^2 以间位与L键合。

[0244] 根据另一个实施方式, Ar^1 可选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的二氢苯并[c]吡啶、取代或未取代的二氢苯并[a]吡啶、取代或未取代的二苯并[c,h]吡啶亚基、取代或未取代的二苯并[c]吡啶亚基、取代或未取代的二苯并[h]吡啶亚基或者取代或未取代的二苯并[a,j]吡啶,其中

[0245] 所述取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$,D,F,或CN;其中

[0246] X^1 可选自S或O;并且

[0247] R^2 可独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基。

[0248] 根据另一个实施方式, Ar^1 可选自取代或未取代的二氢苯并[c]吡啶、取代或未取代的二氢苯并[a]吡啶、取代或未取代的二苯并[c,h]吡啶亚基、取代或未取代的二苯并[c]吡啶亚基、取代或未取代的二苯并[h]吡啶亚基或者取代或未取代的二苯并[a,j]吡啶,其中

[0249] 所述取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$,D,F,或CN;其中

[0250] X^1 可选自S或O;并且

[0251] R^2 可独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基。

[0252] 根据另一个实施方式, Ar^1 可选自取代或未取代的二苯并[c,h]吡啶亚基、取代或未取代的二苯并[c]吡啶亚基、取代或未取代的二苯并[h]吡啶亚基或者取代或未取代的二苯并[a,j]吡啶,其中

[0253] 所述取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基。

化的C₁至C₁₆烷氧基, -PX¹(R²)₂, D, F, 或CN; 其中

[0254] X¹可选自S或O; 并且

[0255] R²可独立地选自: C₆至C₁₂芳基, C₃至C₁₂杂芳基, C₁至C₁₆烷基, C₁至C₁₆烷氧基, 部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基, 部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基, 部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基, 部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基。

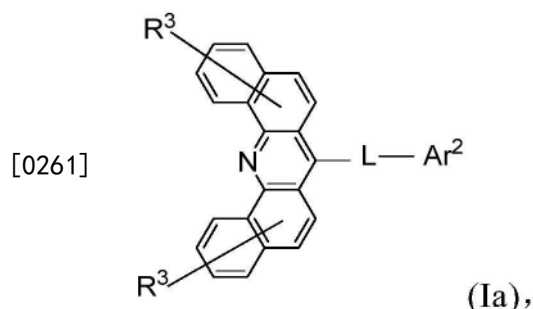
[0256] 根据另一个实施方式, Ar¹可选自未取代的吡啶、未取代的二氢苯并[c]吡啶、未取代的二氢苯并[a]吡啶、未取代的二苯并[c, h]吡啶亚基、未取代的二苯并[c]吡啶亚基、未取代的二苯并[h]吡啶亚基或未取代的二苯并[a, j]吡啶。

[0257] 根据另一个实施方式, Ar¹可选自未取代的二氢苯并[c]吡啶、未取代的二氢苯并[a]吡啶、未取代的二苯并[c, h]吡啶亚基、未取代的二苯并[c]吡啶亚基、未取代的二苯并[h]吡啶亚基、或未取代的二苯并[a, j]吡啶。

[0258] 根据另一个实施方式, Ar¹可选自取代或未取代的二苯并[c, h]吡啶亚基、取代或未取代的二苯并[c]吡啶亚基、取代或未取代的二苯并[h]吡啶亚基或者取代或未取代的二苯并[a, j]吡啶。

[0259] 根据另一个实施方式, Ar¹可选自未取代的二苯并[c, h]吡啶亚基、未取代的二苯并[c]吡啶亚基、未取代的二苯并[h]吡啶亚基或未取代的二苯并[a, j]吡啶。

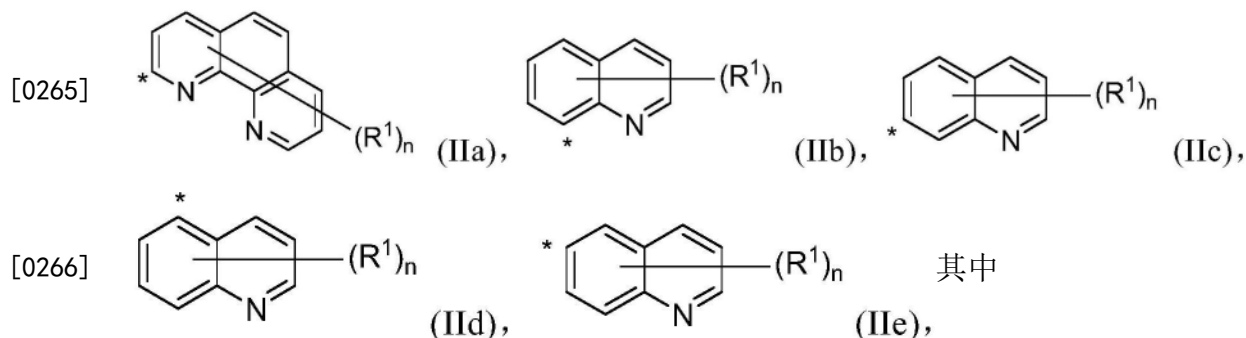
[0260] 根据另一个实施方式, 其中所述式I的化合物可由式Ia表示:



[0262] 其中

[0263] L可以是单键、取代或未取代的C₆至C₁₈芳亚基、取代或未取代的C₃至C₁₈杂芳亚基、取代或未取代的苯亚基、取代或未取代的联苯亚基、取代或未取代的三联苯亚基、取代或未取代的蒽亚基、取代或未取代的萘亚基、取代或未取代的二苯并呋喃亚基、取代或未取代的二苯并噻吩亚基、取代或未取代的咪唑亚基、取代或未取代的吡啶亚基、取代或未取代的苯基吡啶亚基、取代或未取代的喹啉亚基,

[0264] Ar²可具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



[0267] R¹, R³以及取代基L可独立地选自: H, C₆至C₁₈芳基, C₃至C₂₀杂芳基, C₁至C₁₆烷基, C₁至

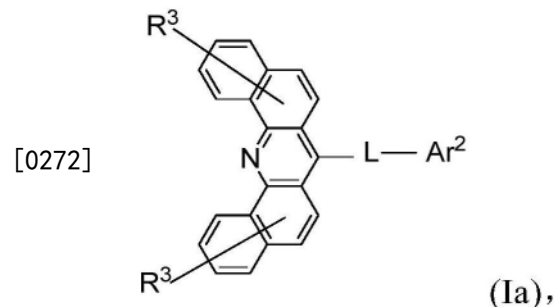
C₁₆烷氧基, C₃至C₁₆支链烷基, C₃至C₁₆环状烷基, C₃至C₁₆支链烷氧基, C₃至C₁₆环状烷氧基, 部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基, 部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基, 部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基, 部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基, -PX¹(R²)₂, D, F, 或CN; 其中

[0268] R²独立地选自: C₆至C₁₂芳基, C₃至C₁₂杂芳基, C₁至C₁₆烷基, C₁至C₁₆烷氧基, 部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基, 部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基, 部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基, 部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基;

[0269] X¹可选自S或O; 并且

[0270] n可以是0、1、2或3。

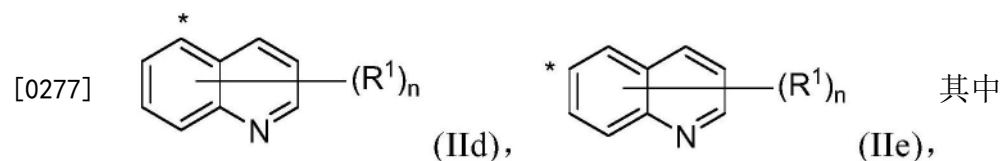
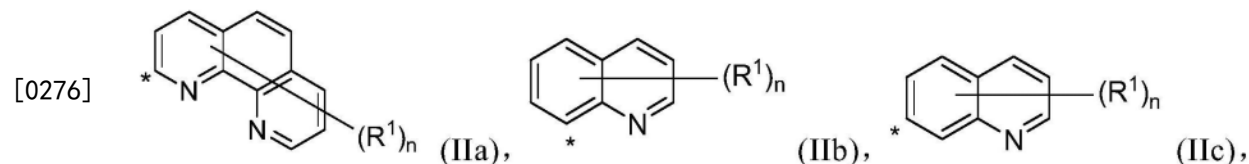
[0271] 根据另一个实施方式, 其中所述式I的化合物可由式Ia表示:



[0273] 其中

[0274] L是取代或未取代的C₆至C₁₈芳亚基、取代或未取代的C₃至C₁₈杂芳亚基、取代或未取代的苯亚基、取代或未取代的联苯亚基、取代或未取代的三联苯亚基、取代或未取代的蒽亚基、取代或未取代的萘亚基、取代或未取代的二苯并呋喃亚基、取代或未取代的二苯并噻吩亚基、取代或未取代的咪唑亚基、取代或未取代的吡啶亚基、取代或未取代的苯基吡啶亚基、取代或未取代的喹啉亚基,

[0275] Ar²可具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



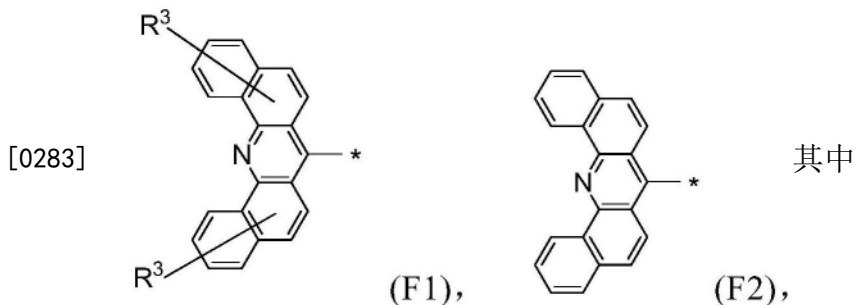
[0278] R¹, R³以及取代基L可独立地选自: H, C₆至C₁₈芳基, C₃至C₂₀杂芳基, C₁至C₁₆烷基, C₁至C₁₆烷氧基, C₃至C₁₆支链烷基, C₃至C₁₆环状烷基, C₃至C₁₆支链烷氧基, C₃至C₁₆环状烷氧基, 部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基, 部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基, 部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基, 部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基, -PX¹(R²)₂, D, F, 或CN; 其中

[0279] R²独立地选自: C₆至C₁₂芳基, C₃至C₁₂杂芳基, C₁至C₁₆烷基, C₁至C₁₆烷氧基, 部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基, 部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基, 部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基, 部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基;

[0280] X¹可选自S或O; 并且

[0281] n可以是0、1、2或3。

[0282] 根据另一个实施方式,其中Ar¹选自F1或F2:

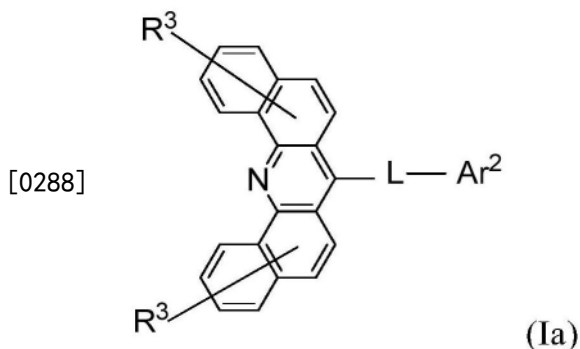


[0284] R³可独立地选自:H,C₆至C₁₈芳基,C₃至C₂₀杂芳基,C₁至C₁₆烷基,C₁至C₁₆烷氧基,C₃至C₁₆支链烷基,C₃至C₁₆环状烷基,C₃至C₁₆支链烷氧基,C₃至C₁₆环状烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基,-PX¹(R²)₂,D,F,或CN;

[0285] 其中R²独立地选自:C₆至C₁₂芳基,C₃至C₁₂杂芳基,C₁至C₁₆烷基,C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基;

[0286] X¹选自S或O。

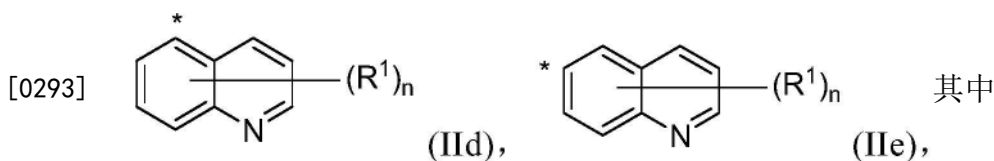
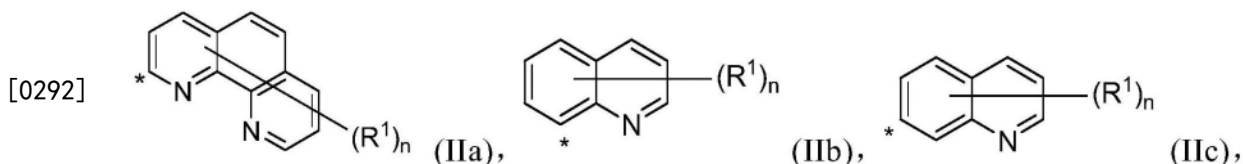
[0287] 根据另一个实施方式,其中所述式I的化合物可由式Ia表示:



[0289] 其中,

[0290] L可以是单键、取代或未取代的C₆至C₁₈芳亚基、取代或未取代的C₃至C₁₈杂芳亚基、取代或未取代的苯亚基、取代或未取代的联苯亚基、取代或未取代的三联苯亚基、取代或未取代的蒽亚基、取代或未取代的萘亚基、取代或未取代的二苯并呋喃亚基、取代或未取代的二苯并噻吩亚基、取代或未取代的咪唑亚基、取代或未取代的吡啶亚基、取代或未取代的苯基吡啶亚基、取代或未取代的喹啉亚基,

[0291] Ar²可具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



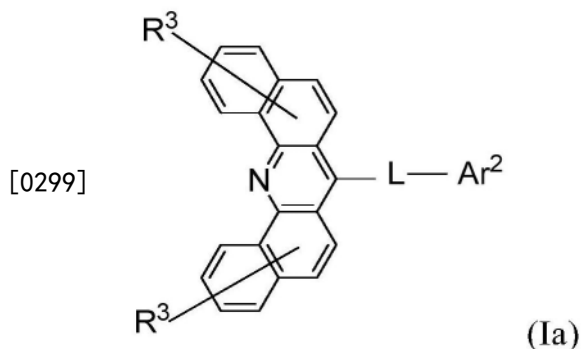
[0294] R^1 、 R^3 以及取代基L可独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$, D, F, 或CN; 其中

[0295] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

[0296] X^1 可选自S或O; 并且

[0297] n可以是0、1、2或3; 并且其中如果L选自苯亚基、萘亚基或蒽亚基, 优选苯亚基, 则任选地 Ar^1 和 Ar^2 以间位与L键合, 优选 Ar^1 和 Ar^2 以间位与L键合。

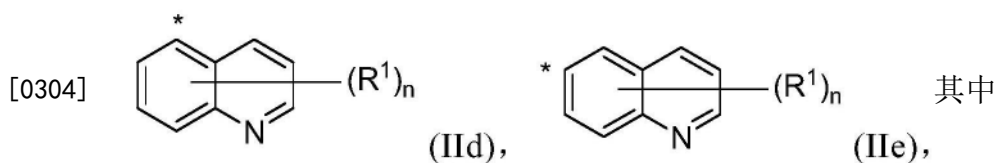
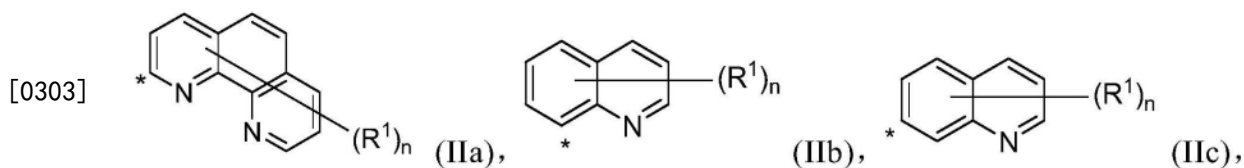
[0298] 根据另一个实施方式, 其中所述式I的化合物可由式Ia表示:



[0300] 其中,

[0301] L是取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基、取代或未取代的苯亚基、取代或未取代的联苯亚基、取代或未取代的三联苯亚基、取代或未取代的蒽亚基、取代或未取代的萘亚基、取代或未取代的二苯并呋喃亚基、取代或未取代的二苯并噻吩亚基、取代或未取代的喹啉亚基、取代或未取代的吡啶亚基、取代或未取代的苯基吡啶亚基、取代或未取代的喹啉亚基,

[0302] Ar^2 可具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



[0305] R^1 、 R^3 以及取代基L可独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$, D, F, 或CN; 其中

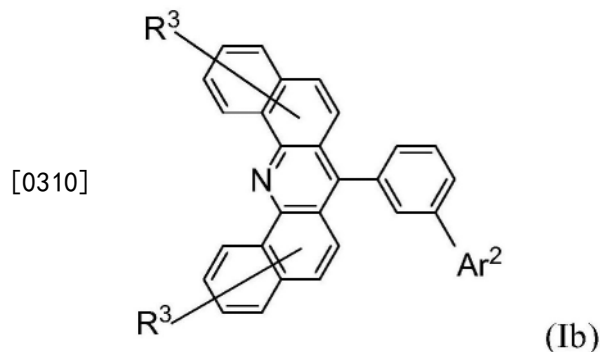
[0306] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

氧化的C₁至C₁₆烷氧基;

[0307] X¹可选自S或O;并且

[0308] n可以是0、1、2或3;并且其中如果L选自苯亚基、萘亚基或蒽亚基,优选苯亚基,则任选地Ar¹和Ar²以间位与L键合,优选Ar¹和Ar²以间位与L键合。

[0309] 根据另一个实施方式,其中所述式I的化合物可由式Ib表示:



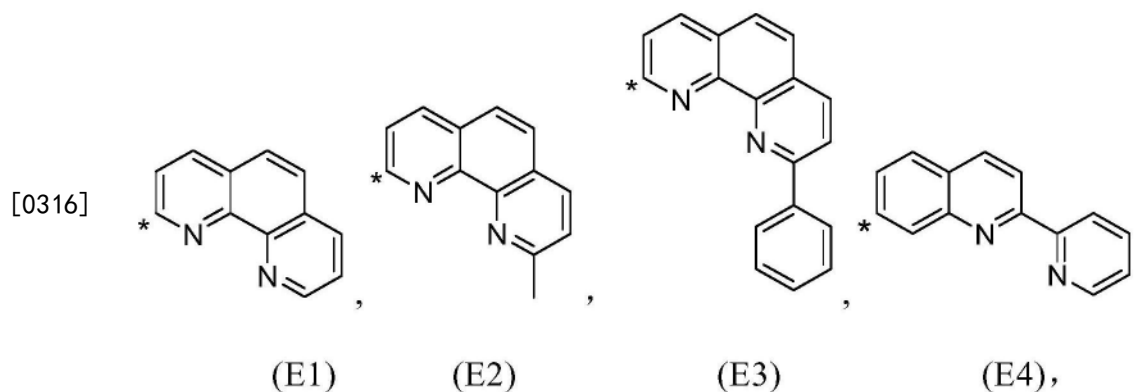
[0311] 其中

[0312] R³可独立地选自:H,C₆至C₁₈芳基,C₃至C₂₀杂芳基,C₁至C₁₆烷基,C₁至C₁₆烷氧基,C₃至C₁₆支链烷基,C₃至C₁₆环状烷基,C₃至C₁₆支链烷氧基,C₃至C₁₆环状烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氧化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氧化的C₁至C₁₆烷氧基,-PX¹(R²)₂,D,F,或CN;其中

[0313] R²独立地选自:C₆至C₁₂芳基,C₃至C₁₂杂芳基,C₁至C₁₆烷基,C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基,部分或全氧化的C₁至C₁₆烷基,部分或全氧化的C₁至C₁₆烷氧基;并且

[0314] X¹可选自S或O;并且n可以是0、1、2或3;并且其中

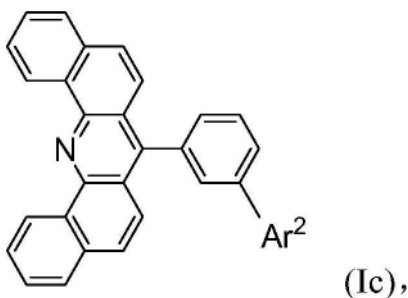
[0315] Ar²可选自E1至E4:



[0317] 其中星号“*”表示结合位置。

[0318] 根据另一个实施方式,其中所述式I的化合物可由式Ic表示:

[0319]



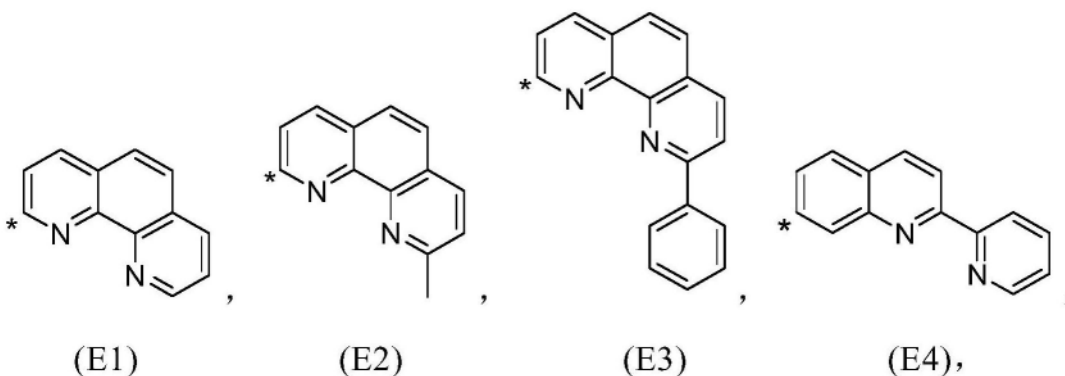
[0320] 其中 R^3 可独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$,D,F,或CN;其中

[0321] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;并且

[0322] X^1 可选自S或O;并且n可以是0、1、2或3;并且其中

[0323] 根据另一个实施方式,其中 Ar^2 选自E1至E4:

[0324]



[0325] 其中星号“*”表示 Ar^2 与L的结合位置。

[0326] 根据另一个实施方式,其中L与 Ar^1 和 Ar^2 间位连接或L与 Ar^1 和 Ar^2 连接,并且L可选自以下基团:未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基,未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基,未取代的苯亚基,未取代的联苯亚基,未取代的三联苯亚基,未取代的蒽亚基,未取代的萘亚基,未取代的二苯并咪唑亚基,未取代的二苯并噻吩亚基,未取代的咪唑亚基,未取代的吡啶亚基,未取代的苯基吡啶亚基,未取代的喹啉亚基。

[0327] 术语“L是间位连接的”是指 Ar^1 和 Ar^2 以间位与L键合,例如,如果L是苯亚基,或者如果 Ar^1 和 Ar^2 在两个不同的芳亚基环处键合,例如如果L是联苯亚基,所述芳亚基环中与 Ar^2 键合的位置也相对于 Ar^1 的键合位置移过两个碳原子。

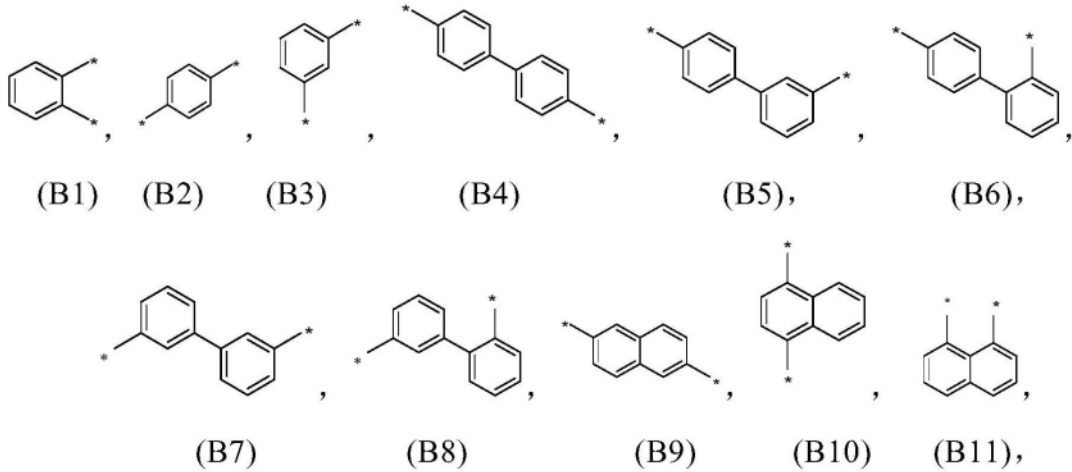
[0328] 根据另一个实施方式,其中L与 Ar^1 和 Ar^2 间位连接或L与 Ar^1 和 Ar^2 连接,并且L可选自以下基团:未取代的苯亚基,未取代的联苯亚基,未取代的三联苯亚基,未取代的蒽亚基,未取代的萘亚基,未取代的二苯并咪唑亚基,未取代的二苯并噻吩亚基,未取代的咪唑亚基,未取代的吡啶亚基,未取代的苯基吡啶亚基,或未取代的喹啉亚基。

[0329] 根据另一个实施方式,其中L与 Ar^1 和 Ar^2 间位连接或L与 Ar^1 和 Ar^2 连接,并且L可选自以下基团:未取代的苯亚基,未取代的联苯亚基,未取代的三联苯亚基,或未取代的蒽亚

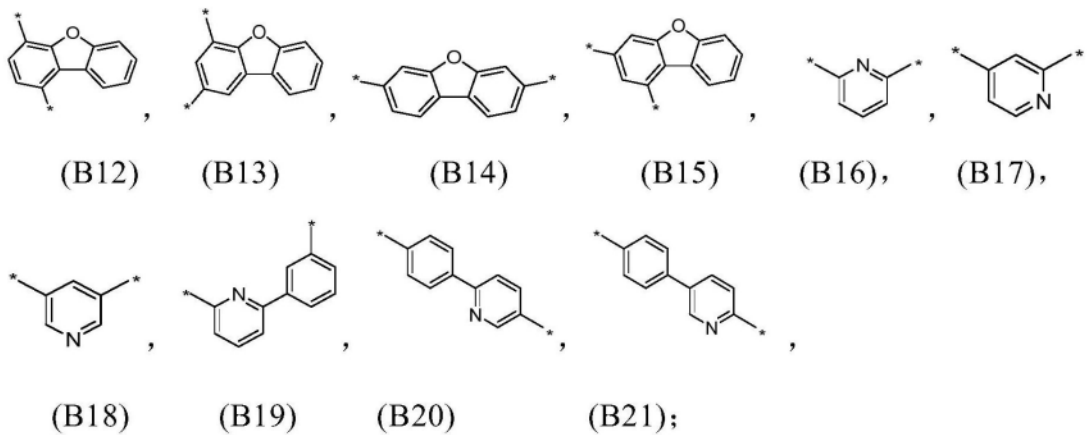
基,未取代的萘亚基。

[0330] 根据另一个实施方式,其中L与Ar¹和Ar²间位连接或L与Ar¹和Ar²连接,并且L可选自以下基团:未取代的二苯并呋喃亚基,未取代的二苯并噻吩亚基,未取代的咪唑亚基,未取代的吡啶亚基,未取代的苯基吡啶亚基,或未取代的喹啉亚基。

[0331] 根据另一个实施方式,其中L可选自B1至B21:

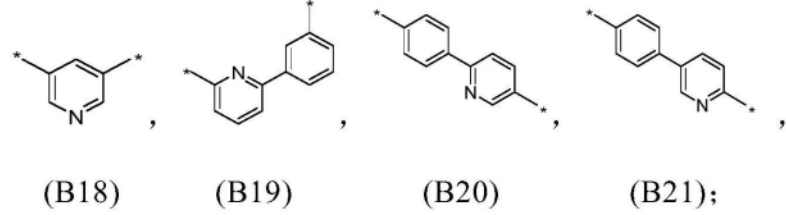
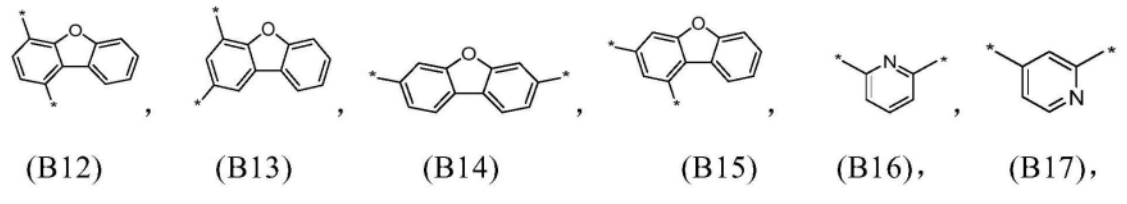
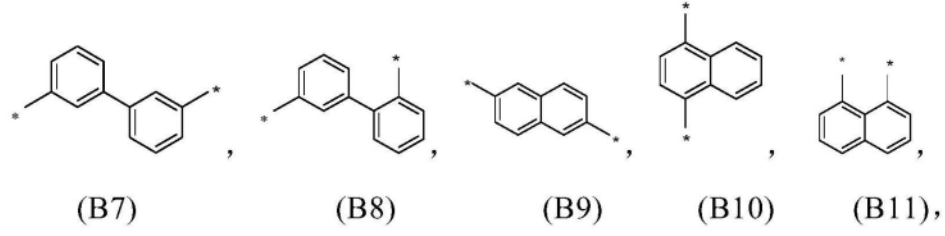
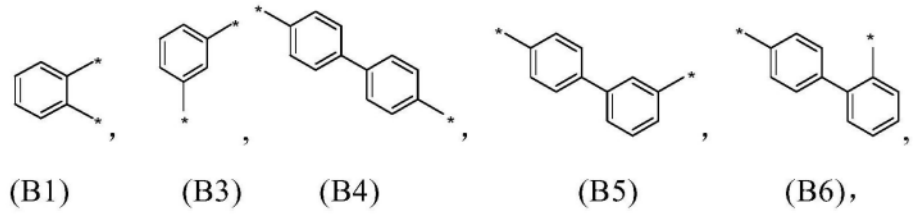


[0332]



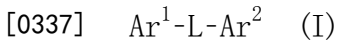
[0333] 其中星号“*”表示L的结合位置。

[0334] 根据另一个实施方式,其中L可选自B1以及B3至B21:



[0335] 其中星号“*”表示L的结合位置。

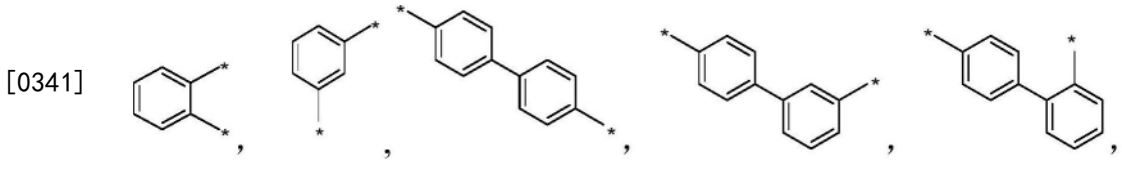
[0336] 因此,本发明的一个实施方式可涉及由下式I表示的化合物:

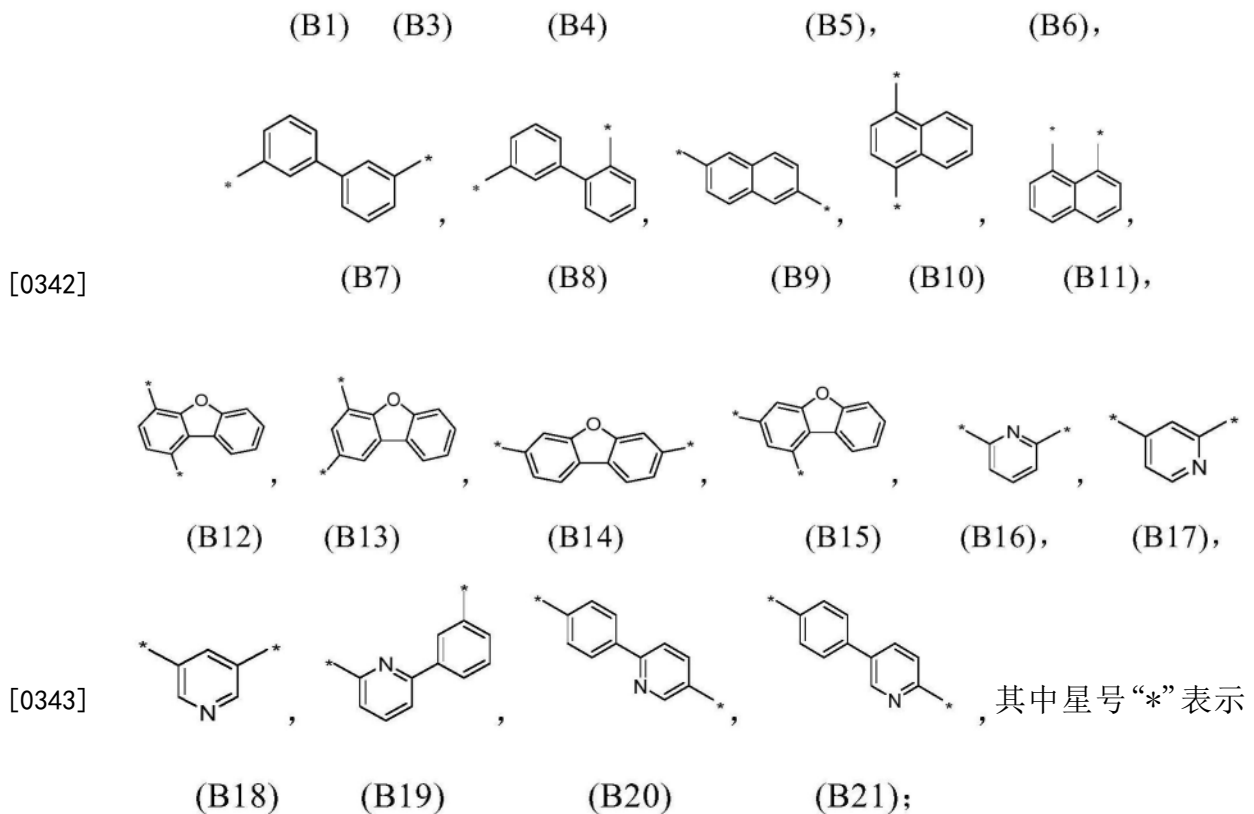


[0338] 其中,

[0339] Ar^1 选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶,优选代或未取代的二苯并吡啶;

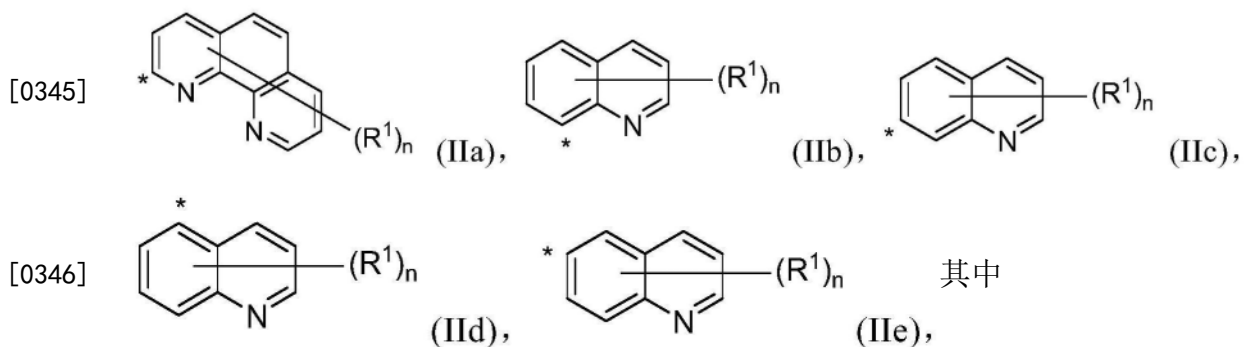
[0340] L选自B1以及B3至B21:





L的结合位置;并且

[0344] Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



[0347] R^1 以及 Ar^1 的取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$,D,F,或CN;其中

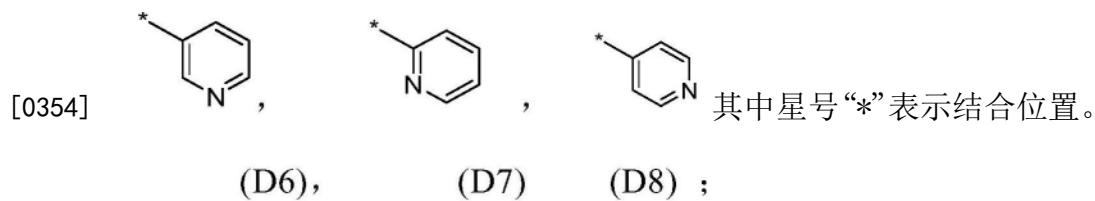
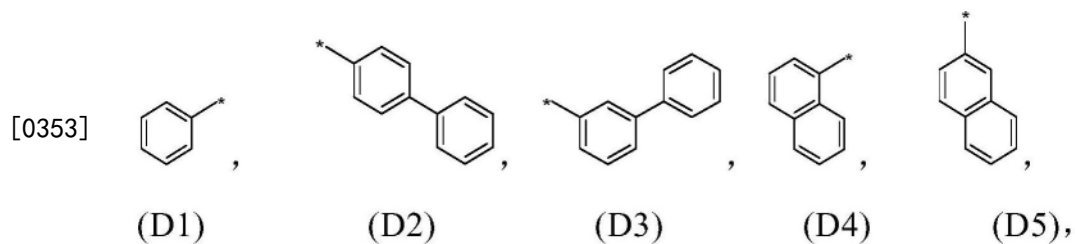
[0348] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

[0349] X^1 选自S或O;并且

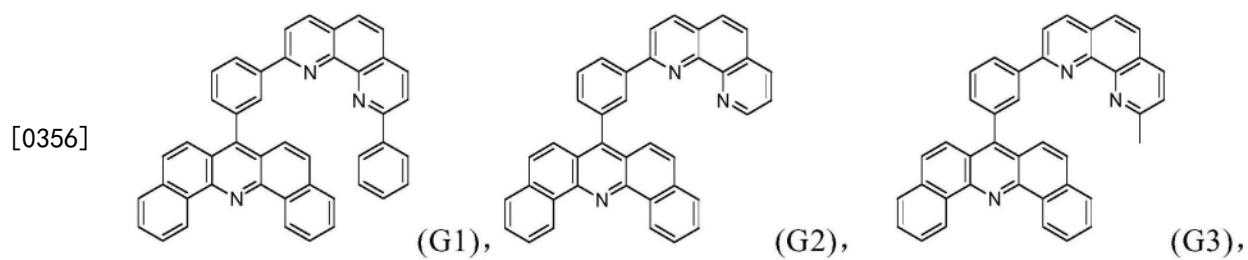
[0350] n是0、1、2或3。

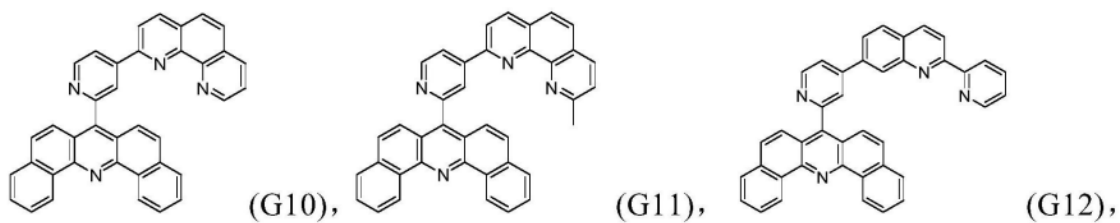
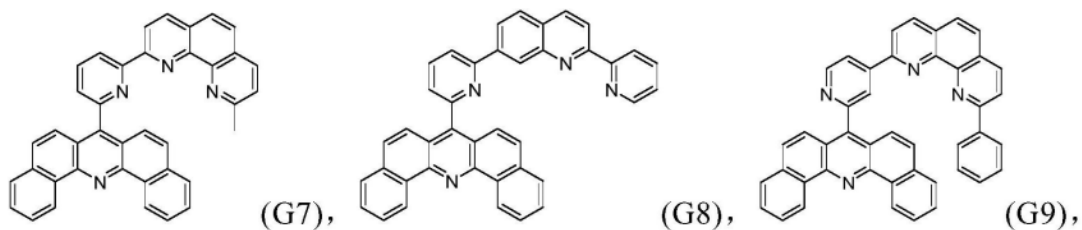
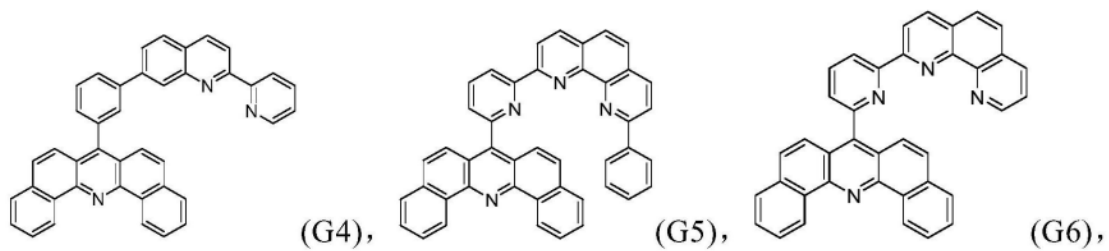
[0351] 根据另一个实施方式,其中L可选自B1至B11。根据另一个实施方式,其中L可选自B1至B8。根据另一个实施方式,其中L可选自B3、B5、B6、B7或B8。根据另一个实施方式,其中L可选自B1至B3,优选选自B3。

[0352] 根据另一个实施方式,其中R¹可选自D1至D8:

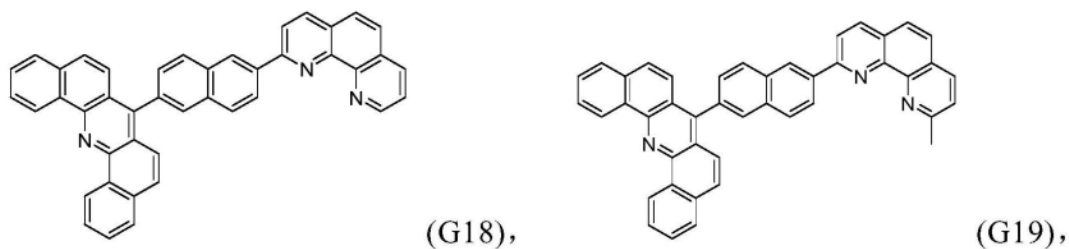
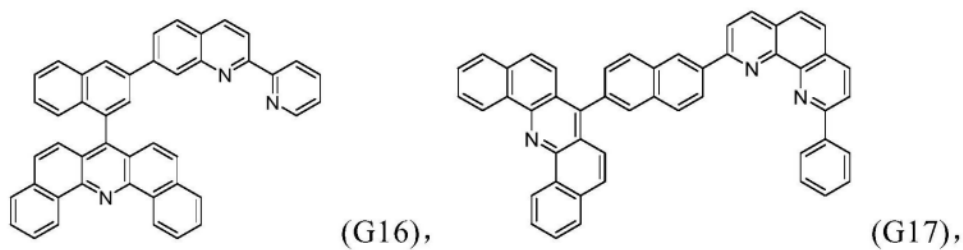
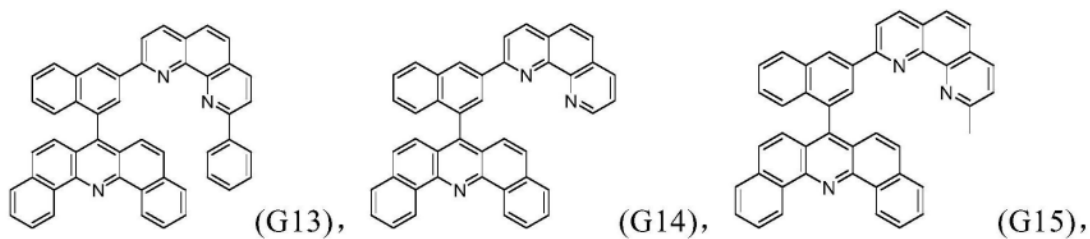


[0355] 根据另一个实施方式,其中所述式I的化合物可选自G1至G20的化合物:

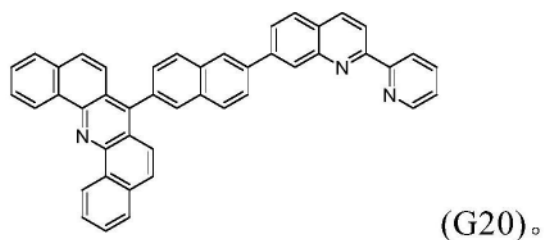




[0357]

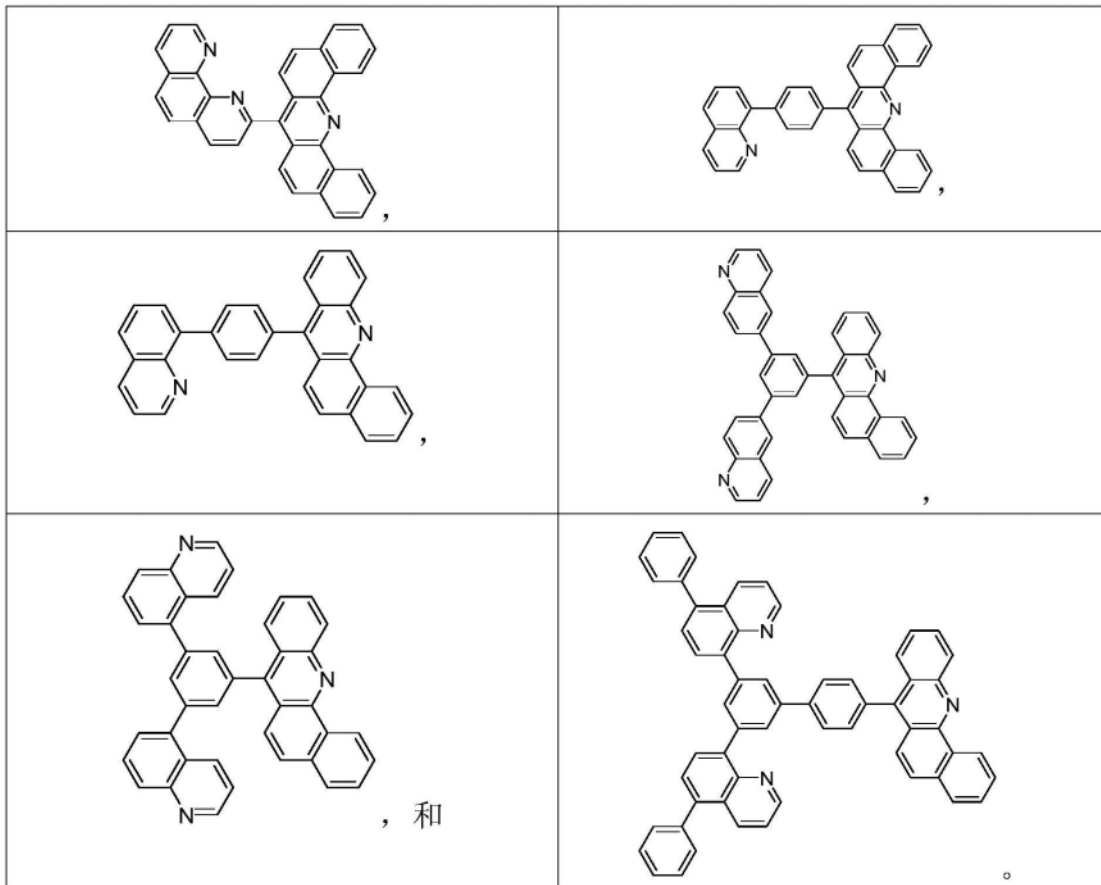


[0358]



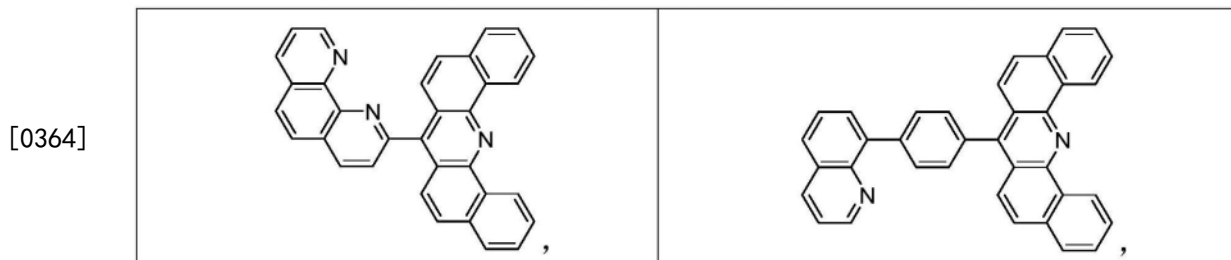
[0359] 可排除表3a中列出的以下来自式(I)的化合物:

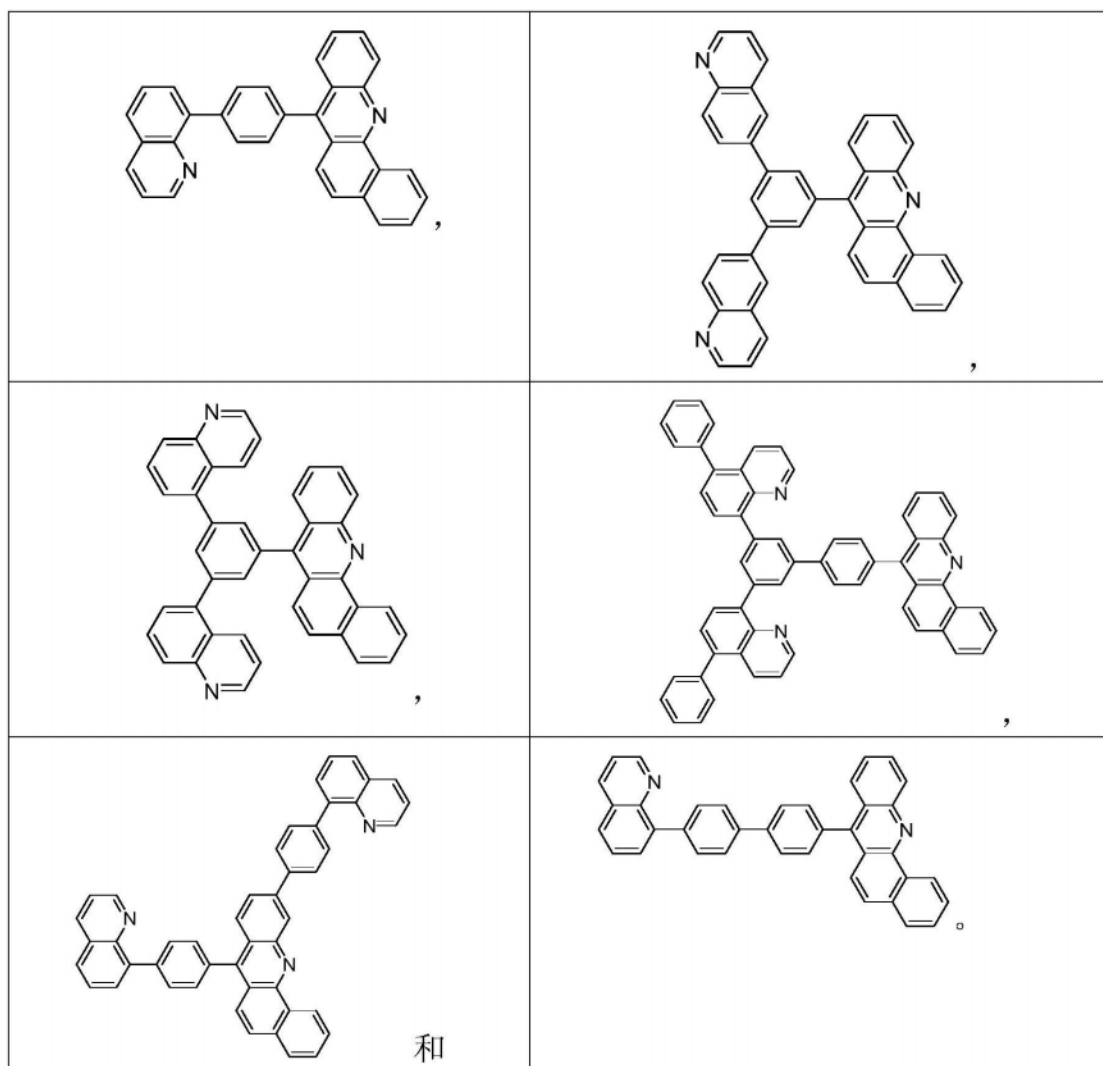
[0360] 表3a



[0362] 更优选地,可排除表3b中列出的以下来自式 (I) 的化合物:

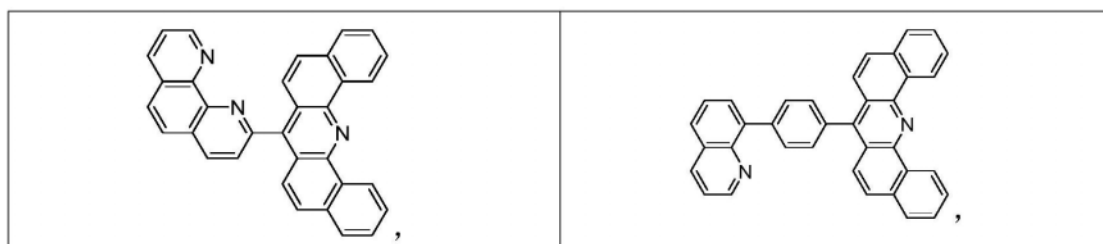
[0363] 表3b



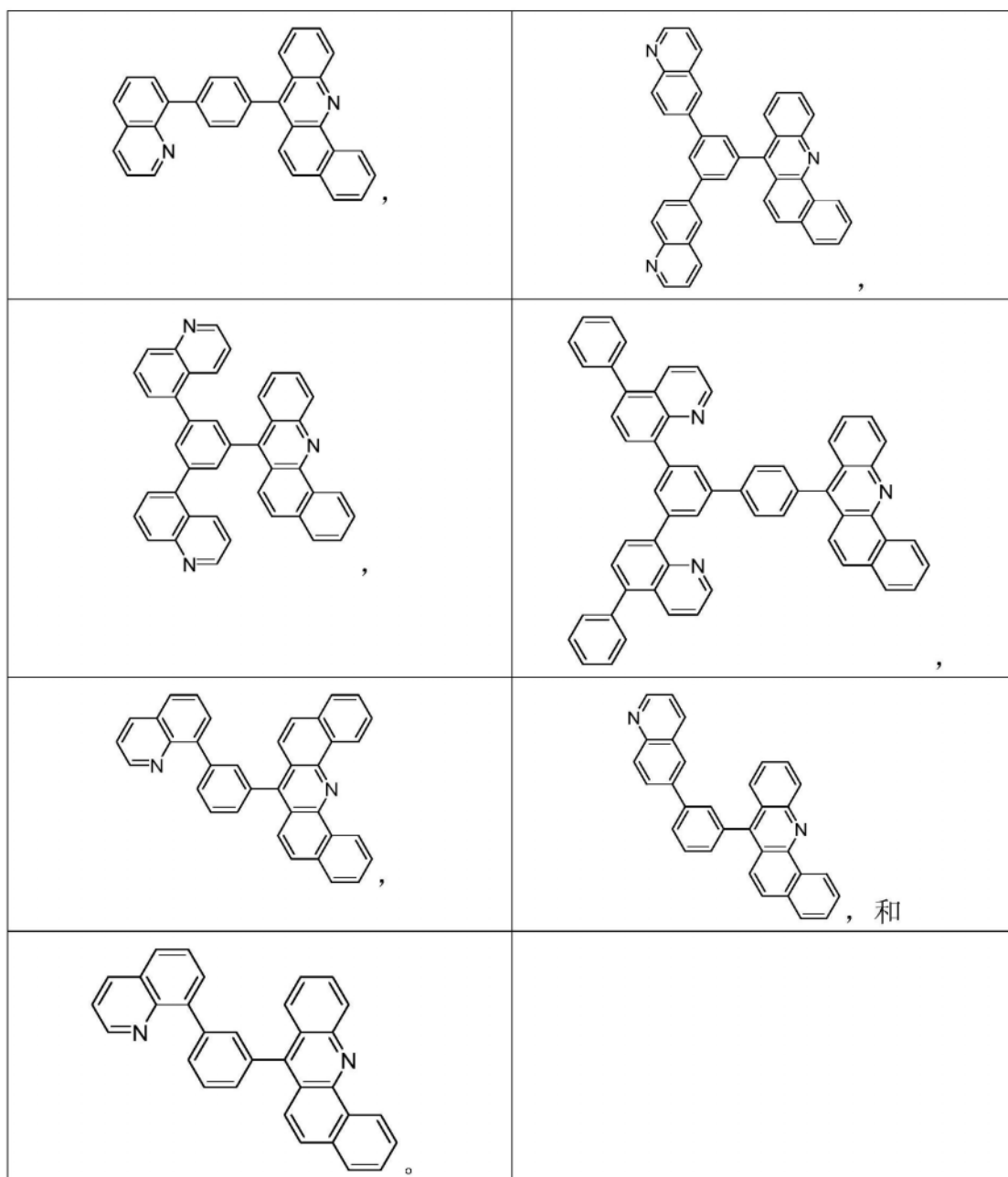


[0366] 此外,可排除表3c中列出的以下来自式(I)的化合物:

[0367] 表3c:



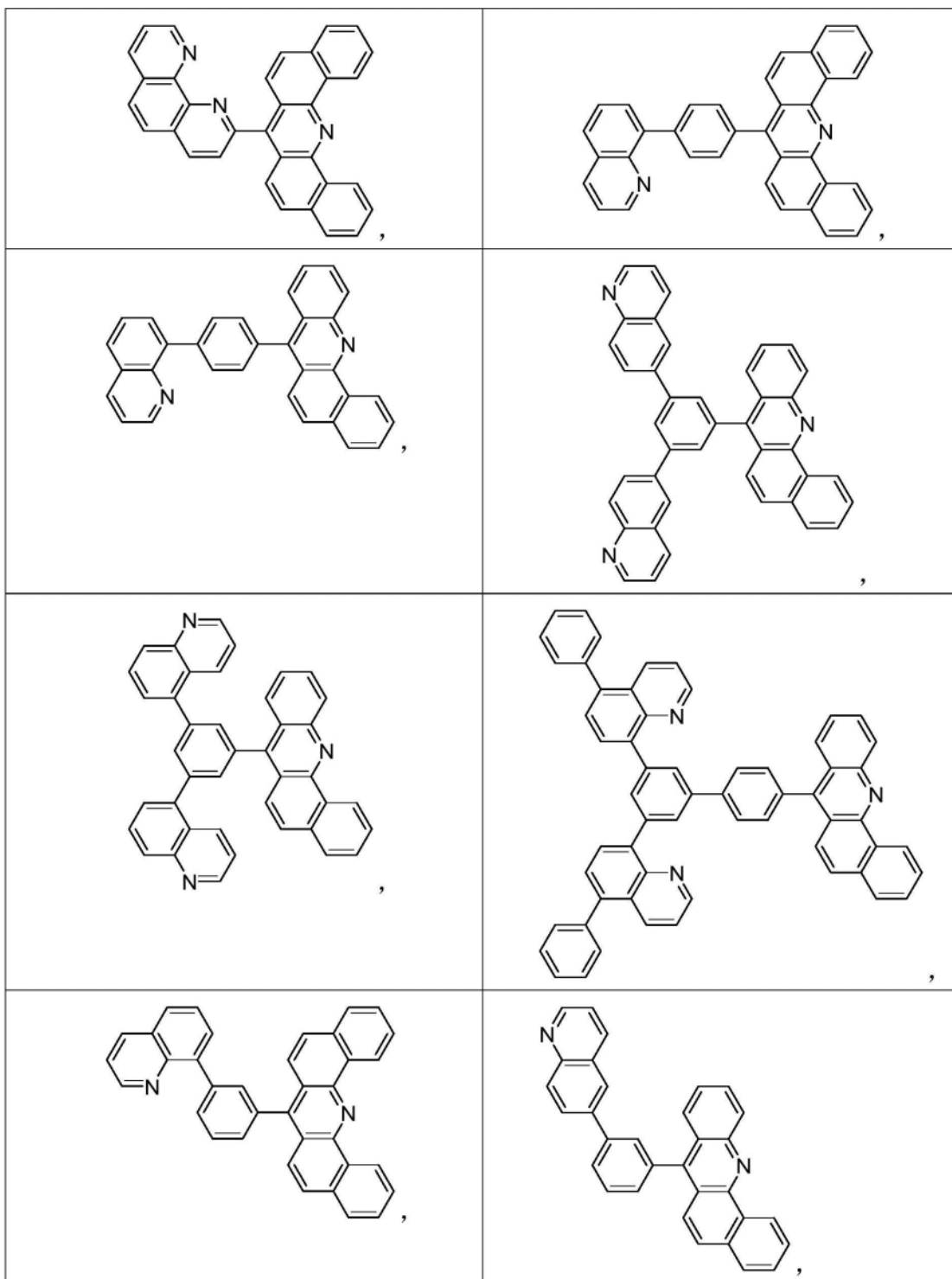
[0369]

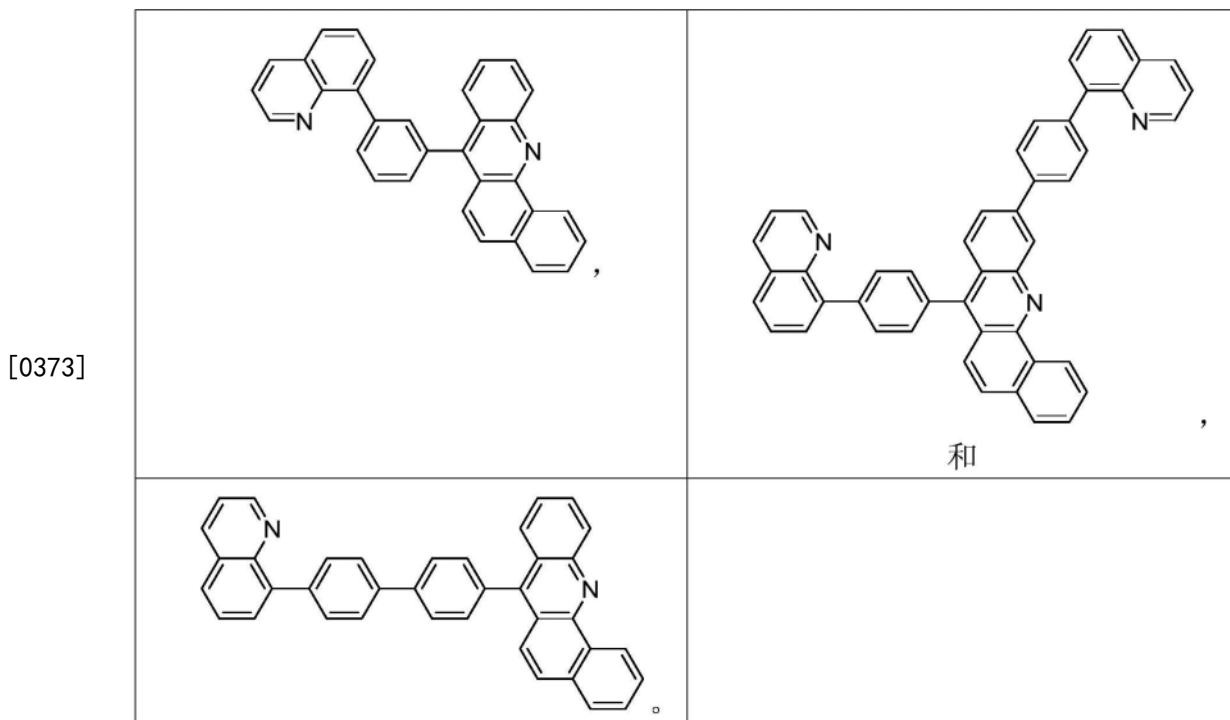


[0370] 更优选地,可排除表3d中列出的以下来自式(I)的化合物:

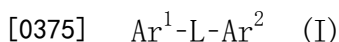
[0371] 表3d

[0372]





[0374] 根据一个实施方式,所述化合物由下式I表示:

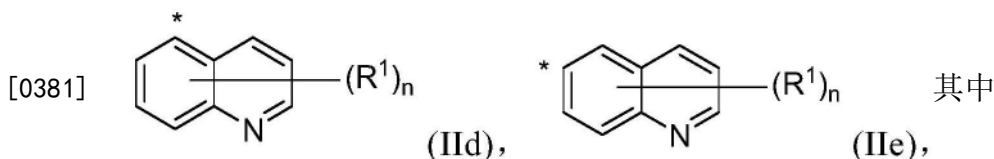
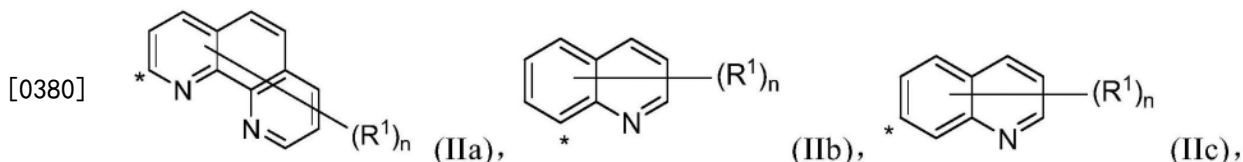


[0376] 其中,

[0377] Ar^1 选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶,优选取代或未取代的二苯并吡啶;

[0378] L是单键、取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基;并且

[0379] Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IId或IIe:



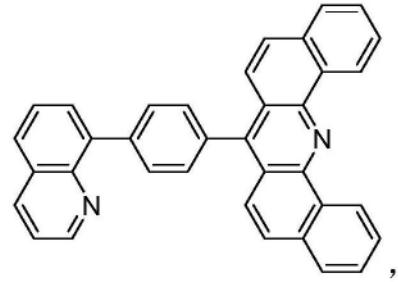
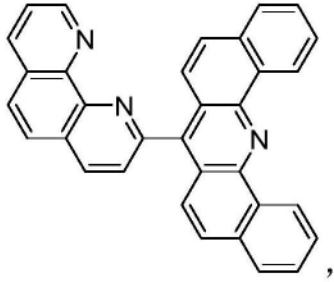
[0382] R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$,D,F,或CN;其中

[0383] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

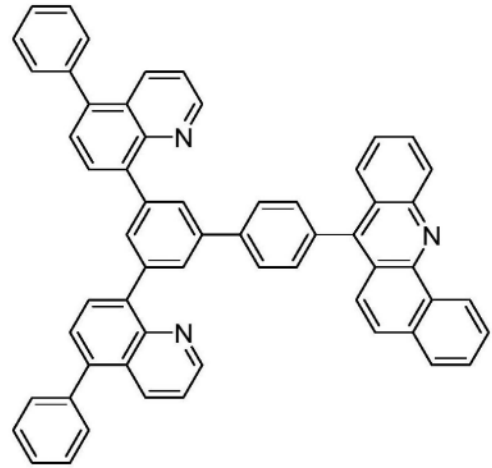
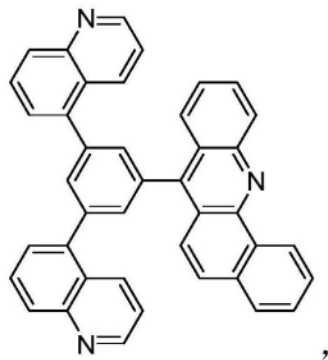
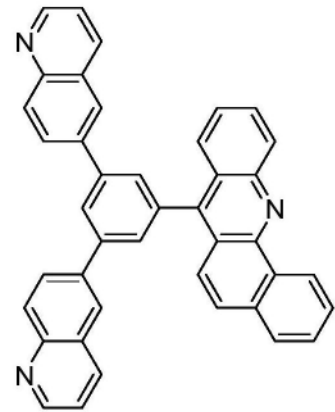
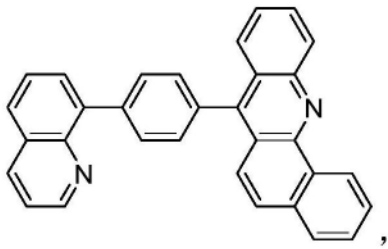
[0384] X^1 选自S或O;

[0385] n是0、1、2或3,并且

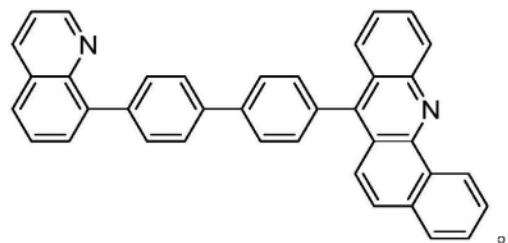
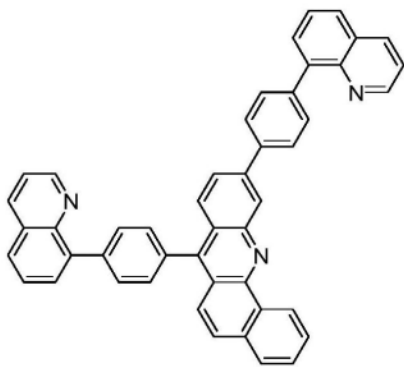
[0386] 其中排除以下化合物：



[0387]



[0388]



， 和

[0389] 根据另一个实施方式，所述化合物由下式I表示：

[0390] Ar^1-L-Ar^2 (I)

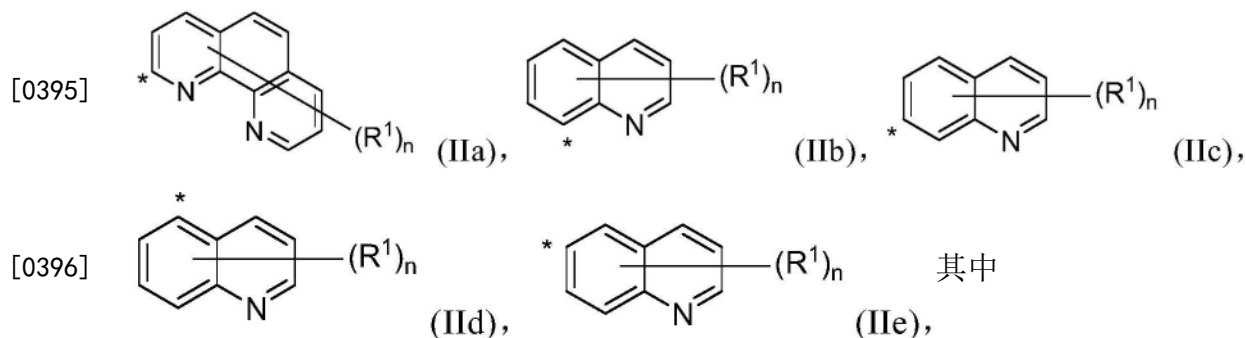
[0391] 其中，

[0392] Ar^1 选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并

吡啶, 优选取代或未取代的二苯并吡啶;

[0393] L是单键、取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基; 并且

[0394] Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



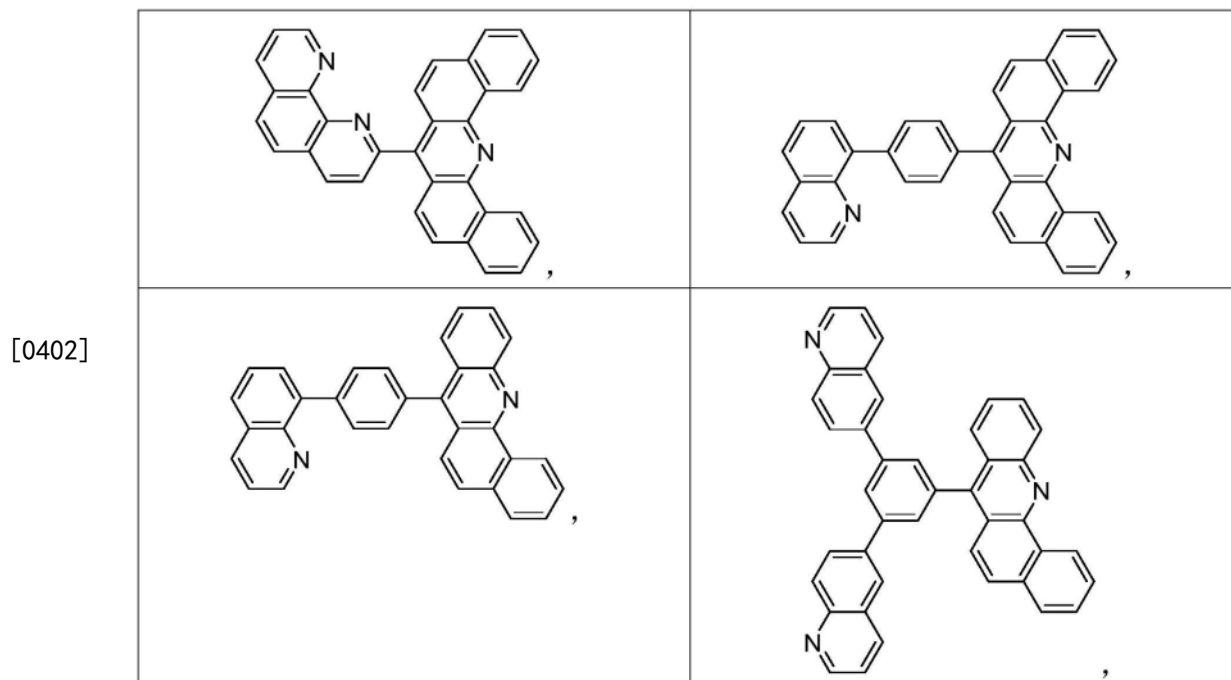
[0397] R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自: H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$, D, F, 或CN; 其中

[0398] R^2 独立地选自 C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基, 部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

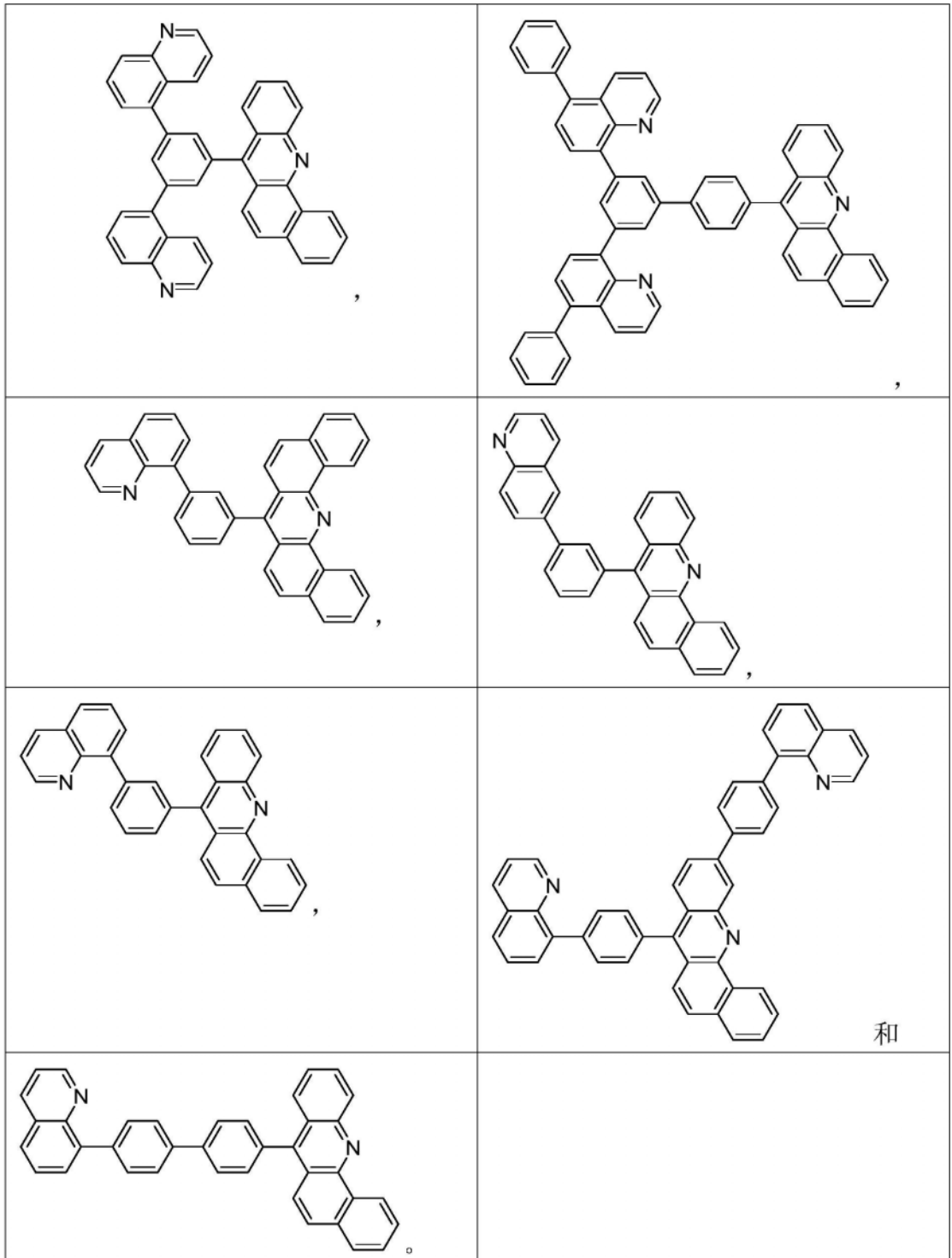
[0399] X^1 选自S或O;

[0400] n是0、1、2或3, 并且

[0401] 其中排除以下化合物:



[0403]



[0404] 有机半导体层

[0405] 根据另一个方面,本发明涉及一种有机电子半导体层,其包含至少一种由式I表示的化合物。

[0406] 根据另一个实施方式,所述有机电子半导体层包含至少一种由式I表示的化合物:

[0407] Ar^1-L-Ar^2 (I)

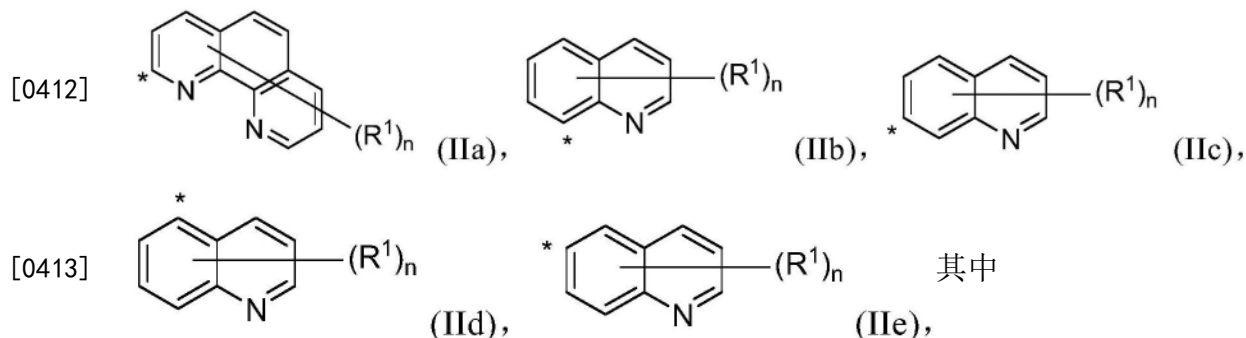
[0408] 其中,

[0409] Ar^1 选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并

吡啶；

[0410] L是单键、取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基；并且

[0411] Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe：



[0414] R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自：H， C_6 至 C_{18} 芳基， C_3 至 C_{20} 杂芳基， C_1 至 C_{16} 烷基， C_1 至 C_{16} 烷氧基， C_3 至 C_{16} 支链烷基， C_3 至 C_{16} 环状烷基， C_3 至 C_{16} 支链烷氧基， C_3 至 C_{16} 环状烷氧基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基， $-PX^1(R^2)_2$ ，D，F，或CN；其中

[0415] R^2 独立地选自 C_6 至 C_{12} 芳基， C_3 至 C_{12} 杂芳基， C_1 至 C_{16} 烷基， C_1 至 C_{16} 烷氧基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基；

[0416] X^1 选自S或O；并且

[0417] n是0、1、2或3。

[0418] 根据另一个方面，本发明涉及一种有机电子半导体层，其包含至少一种由式I表示的化合物。

[0419] 根据另一个实施方式，所述有机电子半导体层包含至少一种由式I表示的化合物：

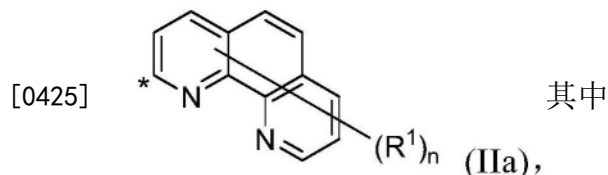
[0420] Ar^1-L-Ar^2 (I)

[0421] 其中，

[0422] Ar^1 选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶；

[0423] L是单键、取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基；并且

[0424] Ar^2 具有式IIa：



[0426] R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自：H， C_6 至 C_{18} 芳基， C_3 至 C_{20} 杂芳基， C_1 至 C_{16} 烷基， C_1 至 C_{16} 烷氧基， C_3 至 C_{16} 支链烷基， C_3 至 C_{16} 环状烷基， C_3 至 C_{16} 支链烷氧基， C_3 至 C_{16} 环状烷氧基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基， $-PX^1(R^2)_2$ ，D，F，或CN；其中

[0427] R^2 独立地选自： C_6 至 C_{12} 芳基， C_3 至 C_{12} 杂芳基， C_1 至 C_{16} 烷基， C_1 至 C_{16} 烷氧基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基；

氘化的C₁至C₁₆烷氧基；

[0428] X¹选自S或O；并且

[0429] n是0、1、2或3。

[0430] 根据另一个方面，本发明涉及一种有机电子半导体层，其包含至少一种由式I表示的化合物。

[0431] 根据另一个实施方式，所述有机电子半导体层包含至少一种由式I表示的化合物：

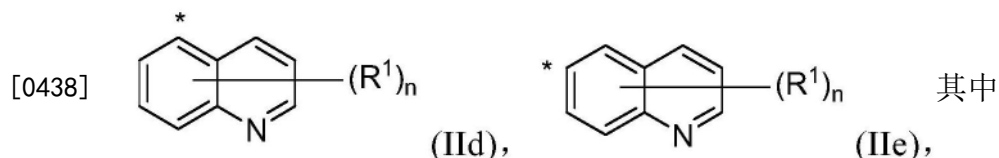
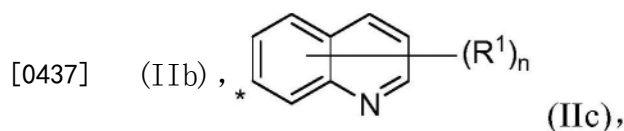
[0432] Ar¹-L-Ar² (I)

[0433] 其中，

[0434] Ar¹选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶；

[0435] L是单键、取代或未取代的C₆至C₁₈芳亚基、取代或未取代的C₃至C₁₈杂芳亚基；并且

[0436] Ar²具有式IIb、IIc、IIId或IIe：



[0439] R¹以及Ar¹和L的取代基独立地选自：H，C₆至C₁₈芳基，C₃至C₂₀杂芳基，C₁至C₁₆烷基，C₁至C₁₆烷氧基，C₃至C₁₆支链烷基，C₃至C₁₆环状烷基，C₃至C₁₆支链烷氧基，C₃至C₁₆环状烷氧基，部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基，部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基，部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基，部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基，-PX¹(R²)₂，D，F，或CN；其中

[0440] R²独立地选自C₆至C₁₂芳基，C₃至C₁₂杂芳基，C₁至C₁₆烷基，C₁至C₁₆烷氧基，部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基，部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基，部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基，部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基；

[0441] X¹选自S或O；并且

[0442] n是0、1、2或3。

[0443] 根据另一个实施方式，所述有机电子半导体层包含至少一种由式I表示的化合物：

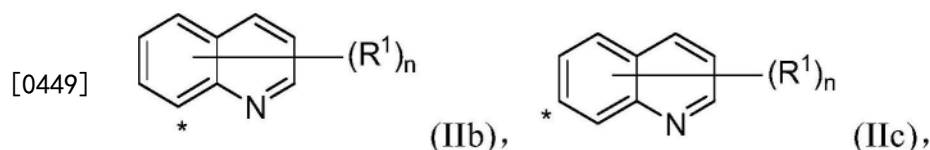
[0444] Ar¹-L-Ar² (I)

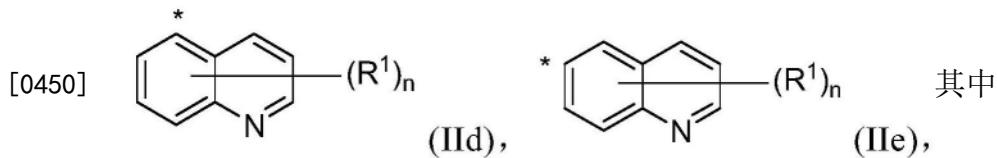
[0445] 其中，

[0446] Ar¹选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶；

[0447] L是单键、取代或未取代的C₆至C₁₈芳亚基、取代或未取代的C₃至C₁₈杂芳亚基；并且

[0448] Ar²具有式IIb、IIc、IIId或IIe：





[0451] R^1 以及 Ar^1 和 L 的取代基独立地选自： C_6 至 C_{18} 芳基， C_3 至 C_{20} 杂芳基， C_1 至 C_{16} 烷基， C_1 至 C_{16} 烷氧基， C_3 至 C_{16} 支链烷基， C_3 至 C_{16} 环状烷基， C_3 至 C_{16} 支链烷氧基， C_3 至 C_{16} 环状烷氧基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基， $-PX^1(R^2)_2$ ， D ， F ，或 CN ；其中

[0452] R^2 独立地选自： C_6 至 C_{12} 芳基， C_3 至 C_{12} 杂芳基， C_1 至 C_{16} 烷基， C_1 至 C_{16} 烷氧基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基，部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基；

[0453] X^1 选自 S 或 O ；并且

[0454] n 是 0 、 1 、 2 或 3 。

[0455] 根据另一个实施方式，所述有机电子半导体层包含至少一种由式I表示的化合物和掺杂剂，其中所述掺杂剂选自金属、金属盐或有机金属络合物。

[0456] 根据另一个实施方式，所述有机半导体层和/或所述有机电子器件的有机半导体层，其中所述金属掺杂剂可以是：

[0457] -金属，优选所述金属选自 Li 、 Na 、 Cs 、 Mg 、 Ca 、 Sr 、 Sm 、 Yb ，更优选所述金属选自 Li 、 Cs 、 Mg 、 Yb ；

[0458] -金属盐，优选所述金属盐选自碱金属盐、碱土金属盐、稀土金属盐及其混合物，

[0459] 其中所述碱金属盐优选选自 LiF 、 $LiCl$ 、 $LiBr$ 、 LiI 及其混合物，更优选是 LiF ；

[0460] -金属络合物，优选所述金属络合物是有机碱金属络合物，优选 LiQ 或碱金属硼酸盐。

[0461] 根据另一个实施方式，所述金属可具有根据鲍林标度(Pauling scale)为约 ≥ 0.7 至约 ≤ 1.3 的电负性，优选所述金属掺杂剂的电负性为约 ≥ 0.9 至约 ≤ 1.2 ，还优选约 ≥ 1 至约 ≤ 1.1 。

[0462] 根据另一个实施方式，所述金属可以选自以下：

[0463] -碱金属、碱土金属和稀土金属；

[0464] - Li 、 Na 、 Cs 、 Mg 、 Ca 、 Sr 、 Sm 或 Yb ；

[0465] - Li 、 Cs 、 Mg 或 Yb ；或

[0466] - Li 或 Yb 。

[0467] 根据另一个实施方式，所述金属可选自 Li 、 Na 、 Cs 、 Mg 、 Ca 、 Sr 、 Sm 或 Yb ，更优选所述金属可选自 Li 、 Cs 、 Mg 或 Yb 。

[0468] 根据另一个实施方式，所述第一有机半导体层和/或所述有机电子器件的第一有机半导体层可包含金属掺杂剂，其中所述金属掺杂剂是选自 Li 或 Yb 的金属。

[0469] 根据一个实施方式，其中所述有机电子半导体层可由式I的化合物和金属组成，其中在本文中也称为“金属掺杂剂”的所述金属选自碱金属、碱土金属和稀土金属，优选所述金属可选自 Li 、 Na 、 Cs 、 Mg 、 Ca 、 Sr 、 Sm 或 Yb 并更优选所述金属可选自 Li 、 Cs 、 Mg 或 Yb 。

[0470] 根据一个实施方式，其中所述有机电子半导体层可由式I的化合物和金属掺杂剂

组成,其中所述金属掺杂剂是选自Li或Yb的金属。

[0471] 根据另一个实施方式,所述掺杂剂可选自碱金属盐,也称为碱金属卤化物,是具有化学式MX的无机化合物家族,其中M是碱金属并且X是卤素。

[0472] M可以选自Li、Na、钾、铷和铯。

[0473] X可以选自F、Cl、Br和I。

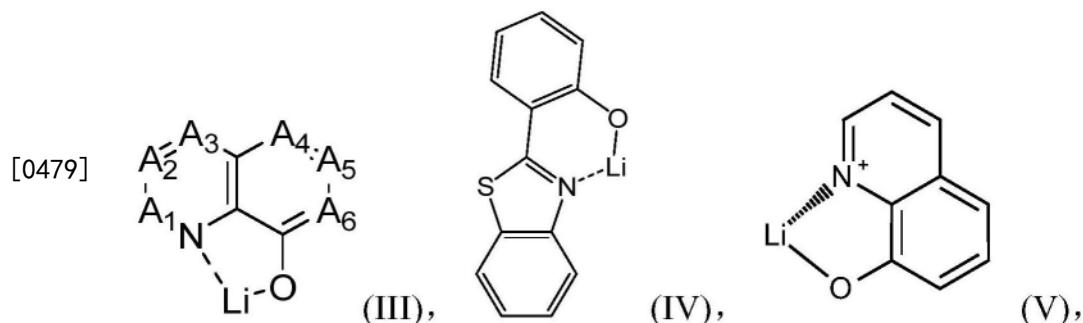
[0474] 根据本发明的各种实施方式,可优选卤化锂。所述卤化锂可以选自LiF、LiCl、LiBr和LiI。然而,最优选的是LiF。

[0475] 碱金属卤化物是基本上不发光或非发光的。

[0476] 根据另一个实施方式,所述掺杂剂可选自碱金属有机络合物,其中所述碱金属有机络合物包括碱金属和至少一种有机配体。所述碱金属优选选自锂。

[0477] 根据本发明的各种实施方式,所述锂有机络合物的有机配体为喹啉阴离子、硼酸阴离子、酚阴离子、吡啶醇阴离子或席夫碱(Schiff base)配体;

[0478] -优选所述喹啉锂络合物具有式III、IV或V:



[0480] 其中

[0481] A_1 至 A_6 相同或独立地选自CH、CR、N和O;

[0482] R相同或独立地选自氢、卤素、具有1至20个碳原子的烷基或芳亚基或杂芳亚基;更优选 A_1 至 A_6 是CH;

[0483] -优选所述硼酸阴离子类有机配体是四(1H-吡唑-1-基)硼酸阴离子;

[0484] -优选所述酚阴离子是2-(吡啶-2-基)酚阴离子、2-(二苯基磷酰基)酚阴离子、咪唑酚阴离子、或2-(吡啶-2-基)酚阴离子,更优选2-(1-苯基-1H-苯并[d]咪唑-2-基)酚阴离子;

[0485] -优选所述吡啶醇阴离子是2-(二苯基磷酰基)吡啶-3-醇阴离子。

[0486] 根据本发明的各种实施方式,所述碱金属有机络合物、优选锂有机络合物的有机配体可以是喹啉阴离子。可以适合使用的喹啉阴离子在WO 2013079217 A1中公开并通过引用并入。

[0487] 根据本发明的各种实施方式,所述锂有机络合物的有机配体可以是硼酸阴离子类有机配体,优选所述锂有机络合物是四(1H-吡唑-1-基)硼酸锂。可以适合使用的硼酸阴离子类有机配体在WO 2013079676 A1中公开并通过引用并入。

[0488] 根据本发明的各种实施方式,所述有机锂络合物的有机配体可以是酚阴离子配体,优选所述锂有机络合物是2-(二苯基磷酰基)酚锂。可以适合使用的酚阴离子在WO 2013079678 A1中公开并通过引用并入。

[0489] 另外,酚阴离子配体可以选自吡啶醇阴离子,优选2-(二苯基磷酰基)吡啶-3-醇阴

离子。可以适合使用的吡啶酚阴离子配体在JP 2008195623中公开并通过引用并入。

[0490] 此外,酚阴离子配体可以选自咪唑酚阴离子,优选2-(1-苯基-1H-苯并[d]咪唑-2-基)酚阴离子。可以适合使用的咪唑酚阴离子配体在JP 2001291593中公开并通过引用并入。

[0491] 还有,酚阴离子配体可以选自噁唑酚阴离子,优选2-(苯并[d]噁唑-2-基)酚阴离子。可以适合使用的噁唑酚阴离子配体在US 20030165711中公开并通过引用并入。

[0492] 所述碱金属有机络合物可以是基本上不发光的。

[0493] 所述式I的化合物和/或在本文中也称为“金属掺杂剂”的金属可以是基本上不发光的。

[0494] 所述包含本发明的组合物的有机半导体层可以是基本上不发光的。

[0495] 所述有机半导体层的厚度可以为约0.5nm至约100nm,例如约2nm至约40nm。当有机半导体层的厚度在这些范围内时,所述有机半导体层可具有改善的电荷传输能力且不会显著增加工作电压。

[0496] 所述包含本发明的组合物的有机半导体层可具有强电子传输特性以增加电荷迁移率和/或稳定性。

[0497] 根据本发明的一个实施方式,所述有机半导体层是电子传输层,其中电子传输层可由式I的化合物组成。

[0498] 根据本发明的一个实施方式,所述有机半导体层是电子传输层,其中电子传输层可由式I的化合物和掺杂剂组成。

[0499] 根据本发明的一个实施方式,所述有机半导体层是电子传输层并且任选的第二有机半导体层是空穴注入层。

[0500] 根据本发明的一个实施方式,所述有机半导体层是电子传输层并且任选的第二有机半导体层是n型电荷产生层。

[0501] 根据本发明的一个实施方式,所述有机半导体层是n型电荷产生层,其中n型电荷产生层可由式I的化合物组成。

[0502] 根据本发明的一个实施方式,所述有机半导体层是n型电荷产生层,其中n型电荷产生层可由式I的化合物和掺杂剂组成。

[0503] 根据本发明的一个实施方式,所述有机半导体层是n型电荷产生层,并且任选的第二有机半导体层是空穴注入层和/或p型电荷产生层。

[0504] 根据本发明的一个实施方式,所述有机半导体层是电子传输层和/或n型电荷产生层,并且任选的第二有机半导体层是空穴注入层和/或p型电荷产生层。

[0505] 电子器件

[0506] 本发明的另一方面涉及一种有机电子器件。

[0507] 根据一个实施方式,所述有机电子器件包括阳极层、阴极层和至少一个有机半导体层,其中所述至少一个有机半导体层包含本发明的式I的化合物。

[0508] 根据一个实施方式,所述有机电子器件包括阳极、至少一个有机半导体层和阴极;其中至少一个有机半导体层包含由下式I表示的化合物:

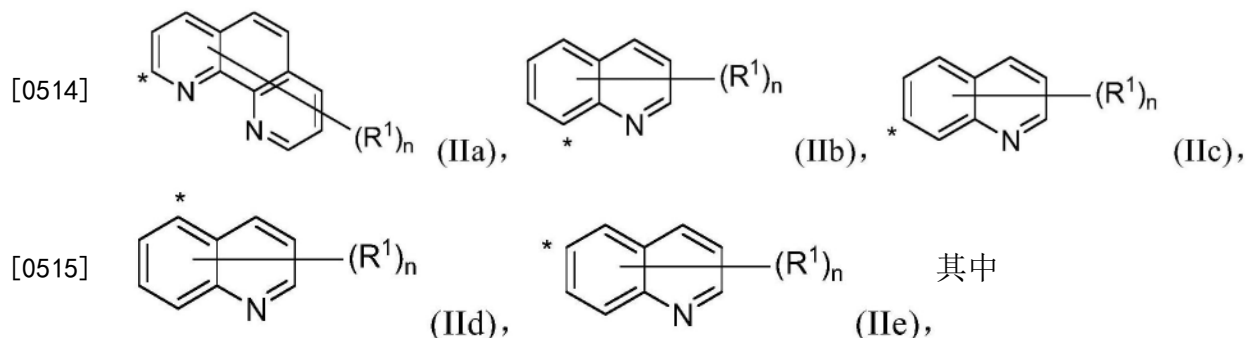
[0509] Ar^1-L-Ar^2 (I)

[0510] 其中,

[0511] Ar¹选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶；

[0512] L是单键、取代或未取代的C₆至C₁₈芳亚基、取代或未取代的C₃至C₁₈杂芳亚基；并且

[0513] Ar²具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe：



[0516] R¹以及Ar¹和L的取代基独立地选自：H，C₆至C₁₈芳基，C₃至C₂₀杂芳基，C₁至C₁₆烷基，C₁至C₁₆烷氧基，C₃至C₁₆支链烷基，C₃至C₁₆环状烷基，C₃至C₁₆支链烷氧基，C₃至C₁₆环状烷氧基，部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基，部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基，部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基，部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基，-PX¹(R²)₂，D，F，或CN；其中

[0517] R²独立地选自：C₆至C₁₂芳基，C₃至C₁₂杂芳基，C₁至C₁₆烷基，C₁至C₁₆烷氧基，部分或全氟化的C₁至C₁₆烷基，部分或全氟化的C₁至C₁₆烷氧基，部分或全氘化的C₁至C₁₆烷基，部分或全氘化的C₁至C₁₆烷氧基；

[0518] X¹选自S或O；并且

[0519] n是0、1、2或3；其中星号“*”表示结合位置。

[0520] 根据一个实施方式，所述有机电子器件包括阳极、有机半导体层、第二有机半导体层和阴极；其中所述有机半导体层可包含由式I表示的化合物；以及掺杂剂，其中所述掺杂剂选自金属、金属盐或有机金属络合物。

[0521] 制造有机电子器件的方法

[0522] 根据本发明的另一个方面，提供了一种制造有机电子器件的方法，所述方法使用：

[0523] -至少一个沉积源，优选两个沉积源，更优选至少三个沉积源。

[0524] 可合适的沉积方法包括：

[0525] -通过真空热蒸发进行沉积；

[0526] -通过溶液加工进行沉积，优选所述加工可选自旋涂、印刷、流延；和/或

[0527] -狭缝式模头涂布。

[0528] 根据本发明的各种实施方式，提供了一种方法，所述方法使用：

[0529] -释放根据本发明的式I的化合物的沉积源，和

[0530] -任选的释放所述至少一种金属掺杂剂的第二沉积源；

[0531] -任选的释放例如轴烯化合物的第三沉积源，

[0532] 所述方法包括形成有机半导体层的步骤；从而对于有机发光二极管(OLED)而言：

[0533] -所述有机半导体层是通过从所述沉积源释放所述式I的化合物和从所述第二沉积源释放所述任选的金属掺杂剂而形成的。

[0534] 根据本发明的各种实施方式，所述方法还可包括在阳极电极上形成发光层，以及至少一个以下的层：在阳极电极和有机半导体层之间形成空穴传输层或形成空穴阻挡层。

[0535] 根据本发明的各种实施方式,所述方法还可包括形成有机发光二极管(OLED)的步骤,其中

[0536] -在基底上形成阳极电极,

[0537] -在所述阳极电极上形成空穴注入层,其中空穴注入层可包含轴烯化合物,

[0538] -在空穴注入层上形成发光层,

[0539] -在所述发光层上形成电子传输层叠层,优选在所述发光层上形成电子传输层并在所述电子传输层上形成第二电子传输层,并且所述第二电子传输层可包含根据本发明的式(I)的化合物和金属掺杂剂,

[0540] -最后,形成阴极电极,

[0541] -任选在阳极和发光层之间依次形成空穴传输层、电子阻挡层,

[0542] -任选在电子传输层叠层和阴极电极之间形成电子注入层。

[0543] 根据本发明的各种实施方式,所述方法还可包括在电子传输层上形成电子注入层。然而,根据本发明的OLED的各种实施方式,所述OLED可不包含电子注入层。

[0544] 根据本发明的另一个方面,提供了一种电子装置,其包含至少一个根据整个本申请中所述的任何实施方式的有机发光器件,优选地,所述电子装置可包含整个本申请中所述的实施方式之一中的有机发光二极管。更优选地,所述电子装置是显示装置。

[0545] 定义

[0546] 术语“L是间位连接的”是指Ar¹和Ar²在苯环上间隔一个碳原子与L键合,或者如果Ar¹和Ar²在两个不同的芳亚基环处键合,例如如果L是联苯亚基,则所述芳亚基环中与Ar²键合的位置也相对于Ar¹的键合位置移过两个碳原子。

[0547] 术语“有机金属络合物”是指包含一种或多种金属和一个或多个有机基团的化合物。所述金属可通过共价键或离子键与所述有机基团结合。所述有机基团是指主要包含共价结合的碳和氢原子的基团。所述有机基团还可包含选自N、O、S、B、Si、P、Se、优选选自B、N、O和S的杂原子。

[0548] 在本说明书的上下文中,术语“基本上不发光的”或“不发光的”是指来自所述式I的化合物和至少一种金属掺杂剂的组合物或层的可见光发射光谱。可见光发光光谱是波长约 $\geq 380\text{nm}$ 至约 $\leq 780\text{nm}$ 的发光光谱。优选地,有机半导体层或包含层的器件包含所述式I的化合物和至少一种选自Li、Na、Cs、Mg、Ca、Sr、Sm或Yb、优选Li、Cs、Mg或Yb、更优选Li和Yb的金属。

[0549] 术语“没有”、“不含”、“不包含”不排除可能存在于沉积之前的化合物中杂质。杂质对于本发明要实现的目的没有技术效果。

[0550] 工作电压,也称为U,在10毫安/平方厘米(mA/cm²)下以伏特(V)计量。

[0551] 坎德拉/安培效率,也称为cd/A效率,在10毫安/平方厘米(mA/cm²)下以坎德拉/安培计量。

[0552] 外量子效率,也称为EQE,以百分比(%)为单位测量。

[0553] 颜色空间由坐标CIE-x和CIE-y(国际照明委员会1931)描述。对于蓝色发光,CIE-y特别重要。CIE-y越小表示蓝色越深。

[0554] 最高占据分子轨道,也称为HOMO,和最低未占分子轨道,也称为LUMO,以电子伏特(eV)为单位测量。

[0555] 标准起始温度以 $^{\circ}\text{C}$ 为单位测量,描述了在低于 10^{-5} 毫巴的压力下可测量的化合物蒸发开始时的VTE源温度。

[0556] 术语“OLED”、“有机发光二极管”、“有机发光器件”和“有机光电子器件”同时使用并具有相同的含义。

[0557] 术语“过渡金属”是指并且包括元素周期表d区中的任何元素,包括元素周期表上第3至12族元素。

[0558] 术语“第III至VI族金属”是指并且包括元素周期表第III至VI族的任何金属。

[0559] 如本文所用的“重量百分比”、“wt.-%”、“重量百分数”、“重量%”及其变体是指将组合物、组分、物质或试剂表示为相应电子传输层的该组分、物质或试剂的重量除以其组合物的总重量并乘以100。应理解,选择相应电子传输层的所有组分、物质和剂的总重量百分比的量,使其不超过100重量%。

[0560] 如本文所用的“体积百分比”、“vol.-%”、“体积百分数”、“体积%”及其变体是指将元素金属、组分、物质或试剂表示为相应的电子传输层的该组分、物质或试剂的体积除以其相应电子传输层的总体积并乘以100。应理解,阴极层的所有元素金属、组分、物质和试剂的总体积百分比的量被选择成使其不超过100体积%。

[0561] 不论是否明确指出,本文假设所有数值均由术语“约”修饰。如本文中所述的术语“约”是指可能发生的数值量的变化。

[0562] 不论是否被术语“约”修饰,权利要求均包括该量的等效值。

[0563] 应注意,如在本说明书和权利要求中使用的单数形式“一个”、“一种”和“所述”包括复数个指称物,除非内容另有明确说明。。

[0564] 应当注意,如本说明书和所附权利要求书中所用的“*”如果没有另外定义,则指示化学键合位置。

[0565] 阳极电极和阴极电极可被描述为阳极/阴极或阳极电极/阴极电极或阳极电极层/阴极电极层。

[0566] 在本说明书中,当没有另外提供定义时,“烷基基团”可以指脂族烃基。所述烷基基团可以指没有任何双键或三键的“饱和烷基基团”。所述烷基基团可以是直链、环状或支链的烷基基团。

[0567] 所述烷基基团可以是 C_1 至 C_{16} 烷基基团,或优选 C_1 至 C_{12} 烷基基团。更具体地,所述烷基基团可以是 C_1 至 C_{14} 烷基基团,或优选 C_1 至 C_{10} 烷基基团或 C_1 至 C_6 烷基基团。例如, C_1 至 C_4 烷基基团在烷基链中包含1至4个碳,并且可选自甲基、乙基、丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基和叔丁基。

[0568] 所述烷基基团的具体实例可以是甲基基团、乙基基团、丙基基团、异丙基基团、丁基基团、异丁基基团、叔丁基基团、戊基基团、己基基团、环丙基基团、环丁基基团、环戊基基团、环己基基团等。

[0569] 在本说明书中,“芳基”或“芳亚基基团”可以指包含至少一个烃芳族部分的基团,并且该烃芳族部分的所有元素可具有形成共轭的p轨道,例如苯基基团、萘基基团、蒽基基团、菲基基团、芘基基团、芴基基团等。

[0570] 术语“杂芳基”和“杂芳亚基”可以指具有至少一个杂原子的芳族杂环,并且该芳族杂环的所有元素可具有形成共轭的p轨道,例如吡啶基、嘧啶基、吡嗪基、三嗪基、吡咯基、呋

唑基、呋喃基、苯并呋喃基、二苯并呋喃基、噻吩基、苯并噻吩基、二苯并噻吩基基团等。优选地,所述芳族杂环不含 sp^3 -杂化碳原子。

[0571] 术语“取代或未取代的杂芳基”、“取代或未取代的 C_5 至 C_{24} 杂芳基”、“取代或未取代的 C_3 至 C_{24} 杂芳基”、“取代或未取代的 C_5 至 C_{18} 杂芳基”、“取代或未取代的 C_5 至 C_{17} 杂芳基”、“取代或未取代的 C_3 至 C_{17} 杂芳基”、“取代或未取代的 C_3 至 C_{12} 杂芳亚基”等是指所述取代或未取代的杂芳基包含至少一个杂芳基环;或至少一个杂芳基环和至少一个非杂芳基环;或至少两个杂芳基环和至少一个非杂芳基环;或至少三个杂芳基环和至少一个非杂芳基环;或至少一个杂芳基环和至少两个非杂芳基环。所述取代或未取代的杂芳基的环可以是稠合的。

[0572] 术语“杂芳环”是指二苯并[d,d]呋喃基、二苯并[b,d]噻吩基或二苯并[b,d]硒苯基基团。

[0573] 所述杂原子可选自N、O、S、B、Si、P、Se,优选选自N、O和S。

[0574] 杂芳亚基环可包含至少1个至3个杂原子。优选地,杂芳亚基环可包含至少1个至3个单独地选自N、S和/或O的杂原子。

[0575] 所述式I的化合物还进一步优选至少一个另外的杂芳基/杂芳亚基环可包含至少1个至3个N原子、或至少1个至2个N原子或至少一个N原子。

[0576] 所述式I的化合物还进一步优选至少一个另外的杂芳基/杂芳亚基环可包含至少1个至3个O原子、或至少1个至2个O原子或至少一个O原子。

[0577] 所述式I的化合物还进一步优选至少一个另外的杂芳基/杂芳亚基环可包含至少1个至3个S原子、或至少1个至2个S原子或至少一个S原子。

[0578] 根据另一个优选实施方式,其中所述式I的化合物可包含:

[0579] -至少6个至25个芳族环,优选至少7个至22个芳族环,还优选至少8个至20个芳族环,另外优选至少9个至15个芳族环,更优选至少10个至14个芳族环;其中

[0580] -至少2个至5个、优选3个至4个或2个至3个是杂芳族环。

[0581] 根据一个实施方式,其中所述式I的化合物:

[0582] -包含至少约6个至约20个芳族环,优选至少约7个至约18个芳族环,还优选至少约9个至约16个芳族环,另外优选至少约10个至约15个芳族环,更优选至少约11个至约14个芳族环;和/或

[0583] -所述式I的化合物包含至少约2个至约6个、优选约3个至约5个或约2个至约4个杂芳族环,其中所述杂原子可以选自N、O、S。

[0584] 根据一个实施方式,其中所述式I的化合物可以不含茛环并且不含杂茛环。

[0585] 根据一个实施方式,其中所述式I的化合物可以不含螺环基团。

[0586] 根据一个另外优选的实施方式,其中所述式I的化合物包含至少2个至7个、优选2个至5个、或2个至3个杂芳族环。

[0587] 根据一个另外优选的实施方式,其中所述式I的化合物包含至少2个至7个、优选2个至5个、或2个至3个杂芳族环,其中所述芳族环中的至少一个是五元杂芳族环。

[0588] 根据一个另外优选的实施方式,其中所述式I的化合物包含至少3个至7个、优选3个至6个、或3个至5个杂芳族环,其中所述杂芳族环中的至少两个是五元杂芳族环。

[0589] 根据一个实施方式,其中所述式I的化合物可包含至少6个至12个非杂芳族环和2个至3个杂芳族环。

[0590] 根据一个优选的实施方式,其中所述式I的化合物可包含至少7个至12个非杂芳族环和2个至5个杂芳族环。

[0591] 根据一个优选的实施方式,其中所述式I的化合物可包含至少7至11个非杂芳族环和2至3个杂芳族环。

[0592] 根据一个实施方式,所述式I的化合物可包含3个至6个N原子,优选4个至5个N原子。

[0593] 根据一个实施方式,所述式I的化合物可包含3个至6个N原子,优选4个至5个N原子,其中6元杂环包含不多于1个N原子。

[0594] 根据一个实施方式,所述式I的化合物可包含3个至6个N原子,优选4个至5个N原子,其中6元杂环包含一个杂原子,它是N原子。

[0595] 根据一个实施方式,所述式I的化合物可包含3个至6个N原子,优选4个至5个N原子,其中所述式I的化合物包含3个至6个6元杂环,优选4个至5个6元杂环,其中所述6元杂环包含一个杂原子,它是N原子。

[0596] 根据一个实施方式,所述化合物可由下式I表示:

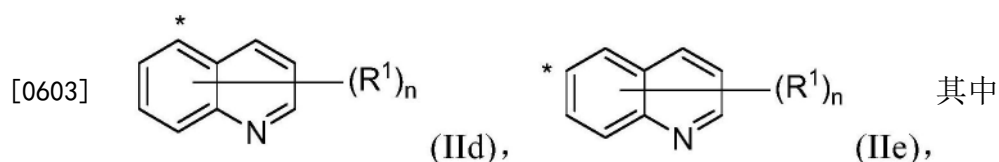
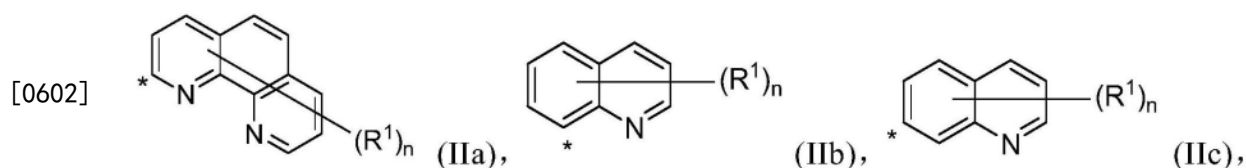
[0597] Ar^1-L-Ar^2 (I)

[0598] 其中,

[0599] Ar^1 选自取代或未取代的吡啶、取代或未取代的苯并吡啶、取代或未取代的二苯并吡啶;

[0600] L是取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基;并且

[0601] Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



[0604] R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$,D,F,或CN;其中

[0605] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

[0606] X^1 选自S或O;并且

[0607] n是0、1、2或3;并且

[0608] 其中所述式I的化合物包含3个至6个N原子。

[0609] 根据另一个实施方式,所述化合物可由下式I表示:

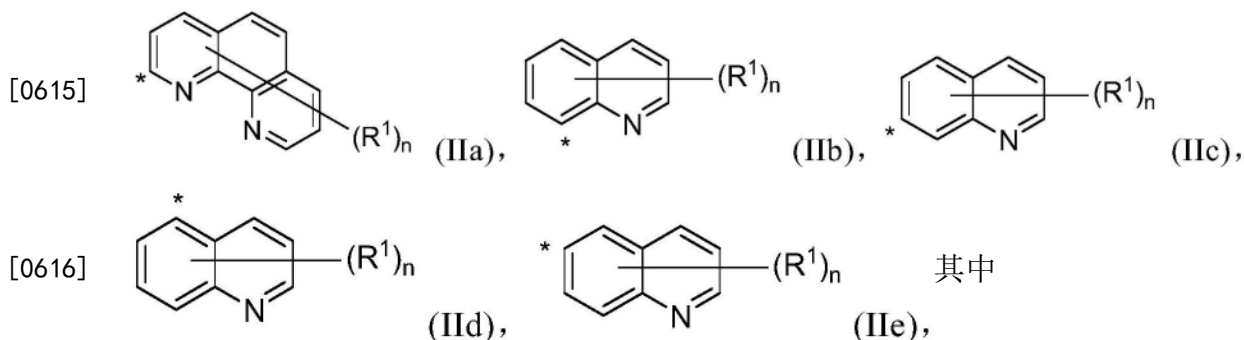
[0610] Ar^1-L-Ar^2 (I)

[0611] 其中,

[0612] Ar^1 选自取代或未取代的二苯并吡啶;

[0613] L是取代或未取代的 C_6 至 C_{18} 芳亚基、取代或未取代的 C_3 至 C_{18} 杂芳亚基;并且

[0614] Ar^2 具有式IIa、IIb、IIc、IIId或IIe:



[0617] R^1 以及 Ar^1 和L的取代基独立地选自:H, C_6 至 C_{18} 芳基, C_3 至 C_{20} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基, C_3 至 C_{16} 支链烷基, C_3 至 C_{16} 环状烷基, C_3 至 C_{16} 支链烷氧基, C_3 至 C_{16} 环状烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基, $-PX^1(R^2)_2$,D,F,或CN;其中

[0618] R^2 独立地选自: C_6 至 C_{12} 芳基, C_3 至 C_{12} 杂芳基, C_1 至 C_{16} 烷基, C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氟化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷基,部分或全氘化的 C_1 至 C_{16} 烷氧基;

[0619] X^1 选自S或O;并且

[0620] n是0、1、2或3;并且

[0621] 其中所述式I的化合物包含3个至6个N原子。

[0622] 熔点

[0623] 熔点(mp)确定为来自上述TGA-DSC测量的DSC曲线或来自单独的DSC测量(Mettler Toledo DSC822e,在纯氮气流下将样品以10K/min的加热速率从室温加热至完全熔化。将4至6mg的样品量放入40 μ L带盖的Mettler Toledo铝盘中,在盖中刺穿一个<1mm的孔)作为峰值温度。

[0624] 根据另一个实施方式,其中所述式I的化合物的熔点可以为约 $\geq 220^\circ\text{C}$ 且约 $\leq 380^\circ\text{C}$,优选约 $\geq 260^\circ\text{C}$ 且约 $\leq 370^\circ\text{C}$,还优选约 $\geq 265^\circ\text{C}$ 且约 $\leq 360^\circ\text{C}$ 。

[0625] 玻璃化转变温度

[0626] 玻璃化转变温度如2010年3月发表的DIN EN ISO 11357所述,在Mettler Toledo DSC 822e差示扫描量热计中在氮气下并使用10K/min的加热速率进行测量。

[0627] 根据另一个实施方式,其中所述式I的化合物的玻璃化转变温度 T_g 可以为约 $\geq 105^\circ\text{C}$ 且约 $\leq 380^\circ\text{C}$,优选约 $\geq 110^\circ\text{C}$ 且约 $\leq 350^\circ\text{C}$,并还优选约 $\geq 130^\circ\text{C}$ 且约 $\leq 180^\circ\text{C}$ 。

[0628] 标准起始温度

[0629] 标准起始温度通过将100mg化合物加载到VTE源中来确定。作为VTE源,使用如Kurt J.Lesker Company(www.lesker.com)或CreaPhys GmbH(<http://www.creaphys.com>)供应的有机材料的点源。在小于 10^{-5} mbar的压力下以15K/min的恒定速率加热VTE源,并用热电偶测量源内部的温度。用QCM检测器检测化合物的蒸发,该检测器检测化合物在检测器的石英

晶体上的沉积。在石英晶体上的沉积速率以 $\text{\AA}/\text{秒}$ 为单位来测量。为了确定标准起始温度，将沉积速率对VTE源温度作图。标准起始是在QCM检测器上出现明显沉积时的温度。为了结果精确，将VTE源加热并冷却三次，并且仅将第二次和第三次运行的结果用于确定标准起始温度。

[0630] 为了实现对有机化合物蒸发速率的良好控制，标准起始温度可在200°C至255°C范围内。如果标准起始温度低于200°C，蒸发可能太快，因此难以控制。如果标准起始温度高于255°C，则蒸发速率可能太低，其可导致节拍时间低下，并且由于长时接触高温，VTE源中有机化合物可能发生分解。

[0631] 标准起始温度是化合物挥发性的间接量度。标准起始温度越高，化合物的挥发性越低。

[0632] 根据另一个实施方式，其中所述式I的化合物的标准起始温度 T_{R0} 可以为约 $\geq 200^\circ\text{C}$ 且约 $\leq 260^\circ\text{C}$ ，优选约 $\geq 220^\circ\text{C}$ 且约 $\leq 260^\circ\text{C}$ ，还优选约 $\geq 220^\circ\text{C}$ 且约 $\leq 260^\circ\text{C}$ ，另外优选约 $\geq 230^\circ\text{C}$ 且约 $\leq 255^\circ\text{C}$ 。

[0633] 偶极矩

[0634] 含有N个原子的分子的偶极矩 $|\vec{\mu}|$ 由下式给出：

$$[0635] \quad \vec{\mu} = \sum_i^N q_i \vec{r}_i$$

$$[0636] \quad |\vec{\mu}| = \sqrt{\mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2}$$

[0637] 其中 q_i 和 \vec{r}_i 是原子i在分子中的部分电荷和位置。

[0638] 偶极矩通过半经验分子轨道法确定。如程序包TURBOMOLE V6.5 (TURBOMOLE GmbH, Litzenhardtstrasse 19, 76135Karlsruhe, 德国) 中实施的，在气相中使用杂化泛函B3LYP和6-31G*基组来优化分子结构的几何结构。如果多于一个构象是可行的，则选择具有最低总能量的构象来确定该分子的键长。

[0639] 根据一个实施方式，所述式I的化合物的偶极矩(德拜)可在约 ≥ 1 至约 ≤ 6 ，优选约 ≥ 2 至约 ≤ 5.5 ，还优选约 ≥ 3 至约 ≤ 5 ，另外优选约 ≥ 3.5 至约 ≤ 4.8 的范围内。

[0640] 计算的HOMO和LUMO

[0641] HOMO和LUMO用程序包TURBOMOLE V6.5计算。通过在气相中应用杂化泛函B3LYP与6-31G*基组，确定分子结构的优化的几何结构以及HOMO和LUMO能级。如果多于一个构象是可行的，则选择具有最低总能量的构象。

[0642] 根据一个实施方式，所述式I的化合物的LUMO能级(eV)可在约-2.20eV至约-1.50eV，优选约-2.0eV至约-1.55eV，还优选约-1.9eV至约-1.6eV，也优选约-1.8eV至约-1.7eV的范围内。

[0643] 技术效果

[0644] 惊异地发现，本发明的包含含有式I的化合物的有机半导体层的有机电子器件通过优于本领域已知的有机电子器件而解决了本发明针对的问题，特别是在工作电压方面更是情况如此，这对于降低功耗和增加电池寿命、例如对于移动显示装置的这两个方面而言很重要。同时，cd/A效率，也称为电流效率，保持在相似乃至更高的水平。在高电流密度下的

长寿命对于在高亮度下运行的装置的寿命是重要的。

[0645] 同样地,惊异地发现落入本发明最宽的定义范围内的一些由式1表示的化合物在有机电子器件中在所提及的玻璃化转变温度、标准起始温度和/或工作电压的性质方面表现特别好。这些化合物在本文中讨论为是特别优选的。

[0646] 本发明对有机电子器件性能的有益效果可以见于表1和表2。

[0647] 阳极

[0648] 阳极的材料可以是金属或金属氧化物、或有机材料,优选逸出功高于约4.8eV、更优选高于约5.1eV、最优选高于约5.3eV的材料。优选的金属是贵金属如Pt、Au或Ag,优选的金属氧化物是透明金属氧化物如ITO或IZO,所述透明金属氧化物可有利地用于具有反射阴极的底部发光型OLED中。

[0649] 在包括透明金属氧化物阳极或反射金属阳极的器件中,阳极的厚度可以为约50nm至约100nm,而半透明金属阳极可薄至约5nm至约15nm,并且不透明的金属阳极可具有约15nm至约150nm的厚度。

[0650] 空穴注入层(HIL)

[0651] 空穴注入层可改善阳极和用于空穴传输层的有机材料之间的界面性质,并且施加在非平坦化的阳极上,从而可平坦化阳极的表面。例如,空穴注入层可包含最高占有分子轨道的能级(HOMO)在阳极材料的逸出功和空穴传输层的HOMO能级之间的中值的材料,以调节阳极的逸出功和空穴传输层的HOMO能级之间的差异。

[0652] 当空穴传输区包括空穴注入层时,可通过多种方法例如真空沉积、旋涂、流延、Langmuir-Blodgett(LB)方法等中的任一种,在阳极上形成所述空穴注入层。

[0653] 当使用真空沉积来形成空穴注入层时,真空沉积条件可取决于用于形成空穴注入层的材料以及待形成的空穴注入层的期望的结构和热性质而变化,例如,真空沉积可在温度为约100°C至约500°C、压力为约 10^{-6} Pa至约 10^{-1} Pa以及沉积速率为约0.1至约10nm/sec下进行,但沉积条件不限于此。

[0654] 当使用旋涂来形成空穴注入层时,涂覆条件可取决于用于形成空穴注入层的材料以及待形成的空穴注入层的期望的结构和热性质而变化。例如,涂覆速率可在约2000rpm至约5000rpm的范围内,涂覆后进行热处理以除去溶剂的温度可在约80°C至约200°C的范围内,但涂覆条件不限于此。

[0655] 根据另一个实施方式,所述空穴注入层包含至少一种轴烯化合物,其中所述轴烯化合物是[3]-轴烯,优选所述轴烯化合物是[3]-轴烯并且选自基团A1至A21。

[0656] 所述空穴注入层可还包含p型掺杂剂以改善导电性和/或从阳极的空穴注入。

[0657] p型掺杂剂

[0658] 在另一个方面,p型掺杂剂可均匀地分散在空穴注入层中。

[0659] 在另一个方面,p型掺杂剂可在空穴注入层中靠近阳极处以较高的浓度存在而在靠近阴极处以较低的浓度存在。

[0660] p型掺杂剂可以是醌衍生物或轴烯化合物之一,但不限于此。p型掺杂剂的非限制性实例是醌衍生物,例如四氰基醌二甲烷(TCNQ)、2,3,5,6-四氟-四氰基-1,4-苯并醌二甲烷(F4-TCNQ)、4,4',4''-((1E,1'E,1''E)-环丙烷-1,2,3-三亚基三(氰甲基亚基))-三(2,3,5,6-四氟苯甲腈)。

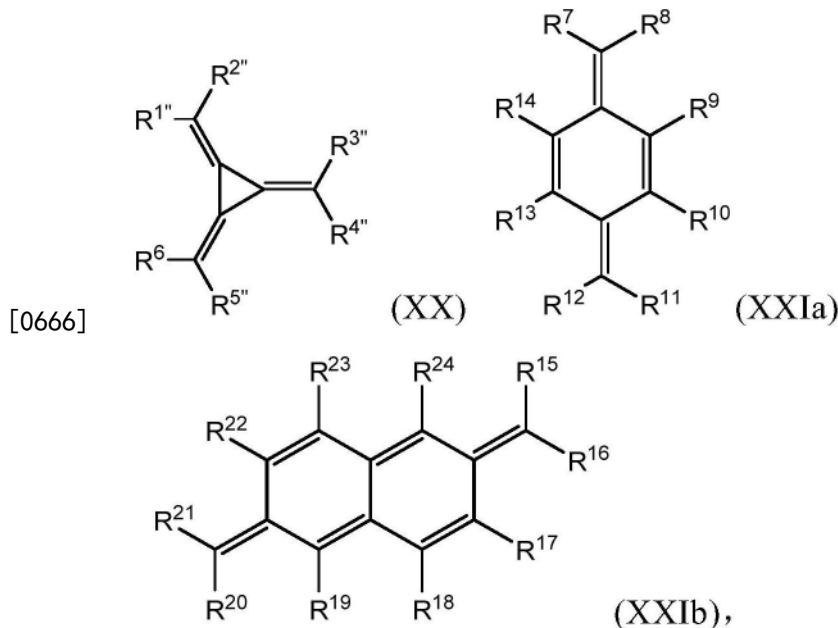
[0661] 根据另一个实施方式,包含含有本发明组合物的有机半导体层的有机电子器件可另外包含含有轴烯化合物和/或醌二甲烷化合物的层。

[0662] 在另一个实施方式中,所述轴烯化合物和/或所述醌二甲烷化合物可被一个或多个卤素原子和/或被一个或多个吸电子基团取代。吸电子基团可以选自腈基团、卤化烷基基团,或者选自全卤化烷基基团,或者选自全氟化烷基基团。吸电子基团的其它实例可以是酰基、磺酰基基团或磷酰基基团。

[0663] 或者,酰基基团、磺酰基基团和/或磷酰基基团可包含卤化和/或全卤化烷基。在一个实施方式中,全卤化烷基可以是全氟化烷基。全氟化烷基的实例可以是全氟甲基、全氟乙基、全氟丙基、全氟异丙基、全氟丁基、全氟苯基、全氟甲苯基;包含卤化烷基的磺酰基基团的实例可以是三氟甲基磺酰基、五氟乙基磺酰基、五氟苯基磺酰基、七氟丙基磺酰基、九氟丁基磺酰基等。

[0664] 在一个实施方式中,所述轴烯和/或所述醌二甲烷化合物可包含在空穴注入、空穴传输和/或空穴产生层中。

[0665] 在一个实施方式中,所述轴烯化合物可具有式 (XX) 和/或所述醌二甲烷化合物可具有式 (XXIa) 或 (XXIb) :



[0667] 其中 $R^{1''}$ 、 $R^{2''}$ 、 $R^{3''}$ 、 $R^{4''}$ 、 $R^{5''}$ 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{20} 、 R^{21} 可独立地选自吸电子基团并且 R^9 、 R^{10} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{17} 、 R^{18} 、 R^{19} 、 R^{22} 、 R^{23} 和 R^{24} 可独立地选自H、卤素和吸电子基团。可以适合使用的吸电子基团如上所述。

[0668] 空穴传输层 (HTL)

[0669] 形成空穴传输层和电子阻挡层的条件可基于上述形成空穴注入层的条件来限定。

[0670] 电荷传输区的空穴传输部分的厚度可以为约10nm至约1000nm,例如约10nm至约100nm。当所述电荷传输区的空穴传输部分包括空穴注入层和空穴传输层时,空穴注入层的厚度可以为约10nm至约1000nm,例如约10nm至约100nm,并且空穴传输层的厚度可以为约5nm至约200nm,例如约10nm至约150nm。当电荷传输区域、HIL和HTL的空穴传输部分的厚度在这些范围内时,可在不显著增加工作电压下获得令人满意的空穴传输特性。

[0671] 所述空穴传输区域中所用的空穴传输基质材料没有特别限制。优选的是包含至少6个离域电子的共轭体系的共价化合物,优选包含至少一个芳族环的有机化合物,更优选包含至少两个芳族环的有机化合物,还优选包含至少三个芳族环的有机化合物,最优选包含至少四个芳族环的有机化合物。广泛用于空穴传输层中的空穴传输基质材料的典型实例是多环芳族烃、三芳亚胺化合物和杂环芳族化合物。可用于所述空穴传输区的各个层中的空穴传输基质的前沿轨道能级的合适范围是公知的。就氧化还原电对HTL基质/HTL基质的阳离子基团的氧化还原电位而言,优选的值(如果通过循环伏安法相对于作为参考的二茂铁/二茂铁盐氧化还原电对进行测量)可在0.0至1.0V范围内,更优选在0.2至0.7V范围内,还更优选在0.3至0.5V范围内。

[0672] 缓冲层

[0673] 所述电荷传输区的空穴传输部分还可包括缓冲层。

[0674] 可以适合使用的缓冲层公开在US 6 140 763、US 6 614 176和US2016/248022中。

[0675] 所述缓冲层可根据从EML发光的波长来补偿光的光学共振距离,从而可提高效率。

[0676] 发光层(EML)

[0677] 发光层可通过使用真空沉积、旋涂、流延、LB法等空穴传输区上形成。当使用真空沉积或旋涂形成发光层时,尽管沉积和涂覆条件可与形成空穴注入层的条件相似,但沉积和涂覆条件可取决于用于形成所述发光层的材料而变化。所述发光层可包括发光体主体(EML主体)和发光体掺杂剂(仅另外的发光体)。

[0678] 所述发光层的厚度可以为约100Å至约1000Å,例如约200Å至约600Å。当发光层的厚度在这些范围内时,所述发光层可在不显著增加工作电压下具有改善的发光特性。

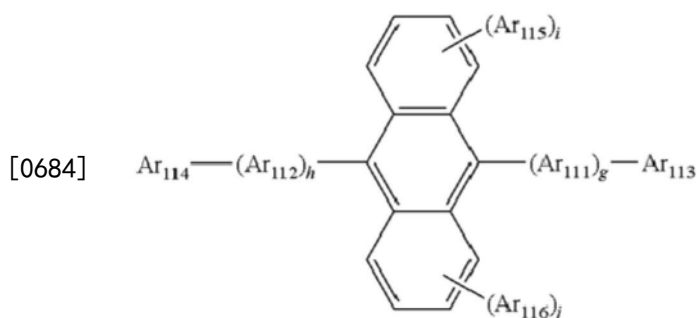
[0679] 发光体主体

[0680] 根据另一个实施方式,所述发光层可包含式I的化合物作为发光体主体。

[0681] 所述发光体主体化合物具有至少三个芳族环,所述芳族环可独立地选自碳环和杂环。

[0682] 其它可以用作发光体主体的化合物是由下式400表示的蒽基质化合物:

[0683] 式400



[0685] 在式400中,Ar₁₁₁和Ar₁₁₂可各自独立地是取代或未取代的C₆-C₆₀芳亚基基团;Ar₁₁₃至Ar₁₁₆可各自独立地是取代或未取代的C₁-C₁₀烷基基团、或取代或未取代的C₆-C₆₀芳亚基基团;并且g、h、i和j可各自独立地是0到4的整数。

[0686] 在一些实施方式中,式400中的Ar₁₁₁和Ar₁₁₂可各自独立地是苯亚基基团、萘基基团、菲亚基基团、或芘亚基基团之一;或

[0687] 苯亚基基团、萘基基团、菲亚基基团、芴基基团或芘亚基基团,各自被苯基基团、萘

基基团或蒽基基团中的至少一种取代。

[0688] 在式400中,g、h、i和j可各自独立地是0、1或2的整数。

[0689] 在式400中,Ar₁₁₃至Ar₁₁₆可各自独立地是下列之一

[0690] -被苯基基团、萘基基团或蒽基基团中的至少一种取代的C₁-C₁₀烷基基团;

[0691] -苯基基团、萘基基团、蒽基基团、苊基基团、菲基基团或芴基基团;

[0692] -苯基基团、萘基基团、蒽基基团、苊基基团、菲基基团或芴基基团,各自被氬原子、卤素原子、羟基基团、氰基基团、硝基基团、氨基基团、脒基基团、胼基基团、脞基基团、羧基基团或其盐中的至少一种取代

[0693] -磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐,

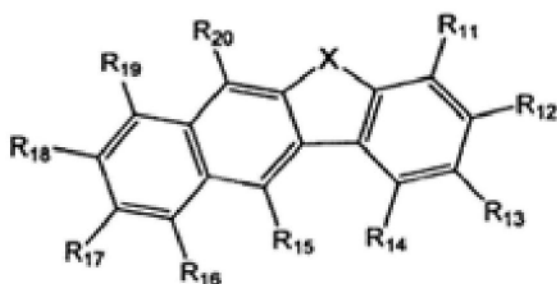
[0694] -C₁-C₆₀烷基基团、C₂-C₆₀烯基基团、C₂-C₆₀炔基基团、C₁-C₆₀烷氧基基团、苯基基团、萘基基团、蒽基基团、苊基基团、菲基基团,或

[0695] -芴基基团

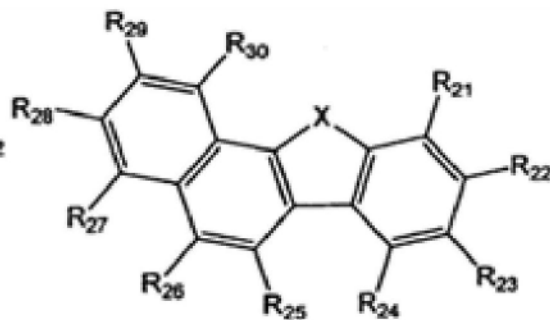
[0696]  或 ;

[0697] -式7或8

[0698]



(7),



(8)。

[0699] 其中在式7和8中,X可选自氧原子和硫原子,但本发明的实施方式不限于此。

[0700] 在式7中,R₁₁至R₁₄中的任何一个用于键合Ar₁₁₁。未用于键合Ar₁₁₁的R₁₁至R₁₄以及R₁₅至R₂₀与R₁至R₈相同。

[0701] 在式8中,R₂₁至R₂₄中的任何一个用于键合Ar₁₁₁。未用于键合Ar₁₁₁的R₂₁至R₂₄以及R₂₅至R₃₀与R₁至R₈相同。

[0702] 优选地,所述EML主体包含1和3个之间选自N、O或S中的杂原子。更优选地,所述EML主体包含一个选自S或O的杂原子。

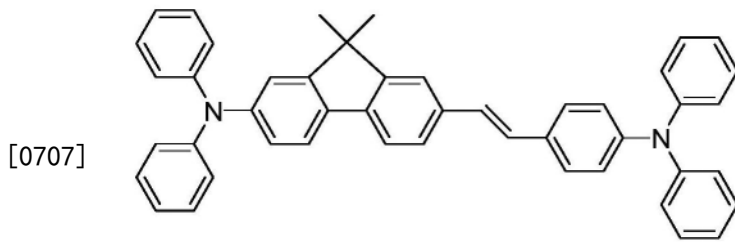
[0703] 发光体掺杂

[0704] 所述掺杂剂以少量混合来引起发光,并且通常可以通过多重激发成为三重态以上来发光的例如金属络合物的材料。所述掺杂剂可以是例如无机、有机、或有机/无机化合物,并且可以使用其中的一种或多种。

[0705] 所述发光体可以是红色、绿色或蓝色发光体。

[0706] 所述掺杂剂可以是荧光掺杂剂,例如三联芴,其结构如下所示。4,4'-双(4-二苯基

氨基苯乙烯基)联苯(DPAVBi)、2,5,8,11-四叔丁基茚(TBPe)和下面的化合物8是荧光蓝色掺杂剂的实例。



化合物 8

[0708] 所述掺杂剂可以是磷光掺杂剂,磷光掺杂剂的实例可以是包含Ir、Pt、Os、Ti、Zr、Hf、Eu、Tb、Tm、Fe、Co、Ni、Ru、Rh、Pd或其组合的有机金属化合物。所述磷光掺杂剂可以是例如由式Z表示的化合物,但不限于此:

[0709] J_2MX (Z)。

[0710] 在式Z中,M是金属,J和X相同或不同,并且是与M形成络合物的配体。

[0711] M可以是例如Ir、Pt、Os、Ti、Zr、Hf、Eu、Tb、Tm、Fe、Co、Ni、Ru、Rh、Pd或其组合,J和X可以是例如二齿配体。

[0712] 在阳极和阴极之间可布置一个或多个发光层。为了提高整体性能,可存在两个或更多个发光层。

[0713] 电荷产生层

[0714] 电荷产生层(也称为CGL)可布置在第一发光层和第二发光层之间、以及如果存在第三发光层,则第二和第三发光层之间。通常,CGL包括n型电荷产生层(也称为n-CGL或电子产生层)和p型电荷产生层(也称为p-CGL或空穴产生层)。在n型CGL和p型CGL之间可布置中间层。

[0715] 根据另一个实施方式,所述包含式I的化合物的有机半导体层是n型电荷产生层。在另一个实施方式中,所述n型电荷产生层可包含本发明的式I的化合物。

[0716] 在另一个方面,所述至少n型电荷产生层可包含式I的化合物和掺杂剂,其中所述掺杂剂选自金属、金属盐或有机金属络合物。

[0717] 在另一个方面,所述至少n型电荷产生层可包含式I的化合物和掺杂剂,其中所述掺杂剂是选自Li、Na、Cs、Mg、Ca、Sr、Sm或Yb、优选选自Li、Cs、Mg或Yb的金属。

[0718] 在另一个方面,所述至少n型电荷产生层可包含式I的化合物和掺杂剂,其中所述掺杂剂是选自Li或Yb的金属。

[0719] 电子传输层(ETL)

[0720] 根据另一个实施方式,所述包含式I的化合物的有机半导体层是电子传输层。在另一个实施方式中,电子传输层可包含所述式I的化合物。

[0721] 在另一个方面,所述至少一个电子传输层可包含式I的化合物和掺杂剂,其中所述掺杂剂选自金属、金属盐或有机金属络合物。

[0722] 在另一个方面,所述至少一个电子传输层可包含式I的化合物和掺杂剂,其中所述掺杂剂是选自Li、Na、Cs、Mg、Ca、Sr、Sm或Yb,优选选自Li、Cs、Mg或Yb的金属。

[0723] 在另一个方面,所述至少一个电子传输层可包含式I的化合物和掺杂剂,其中所述

掺杂剂是选自Li或Yb的金属。

[0724] 在另一个实施方式中,所述有机电子器件包含由两个或更多个电子传输层形成的有机层叠层的电子传输区,其中至少一个电子传输层包含所述式I的化合物。

[0725] 在另一个实施方式中,所述有机电子器件包含由两个或更多个电子传输层形成的有机层叠层的电子传输区,其中至少一个电子传输层可包含式I的化合物和掺杂剂,其中所述掺杂剂选自金属、金属盐或有机金属络合物。

[0726] 在另一个实施方式中,所述有机电子器件包含由两个或更多个电子传输层形成的有机层叠层的电子传输区,其中至少一个电子传输层可包含式I的化合物和掺杂剂,其中所述掺杂剂是选自Li、Na、Cs、Mg、Ca、Sr、Sm或Yb,优选选自Li、Cs、Mg或Yb的金属。

[0727] 所述电子传输层的厚度可以为约0.5nm至约100nm,例如约2nm至约40nm。当电子传输层的厚度在这些范围内时,所述电子传输层可在不显著增加工作电压下具有改善的电子传输能力。

[0728] 电子注入层 (EIL)

[0729] 根据本发明的另一个方面,所述有机电子器件还可在电子传输层 (ETL) 和阴极之间包括电子注入层。

[0730] 电子注入层 (EIL) 可促进从阴极注入电子。

[0731] 根据本发明的另一个方面,所述电子注入层可包含:

[0732] (i) 选自碱金属、碱土金属和稀土金属的基本元素形式的金属,优选选自Li、Na、K、Rb、Cs、Mg、Ca、Sr、Ba、Eu和Yb,更优选选自Li、Na、Mg、Ca、Sr和Yb,还更优选选自Li或Yb,最优选Yb;和/或

[0733] (ii) 碱金属络合物和/或碱金属盐,优选Li络合物和/或盐,更优选喹啉醇锂,甚至更优选8-羟基喹啉醇锂。

[0734] 所述电子注入层可包含选自LiF、NaCl、CsF、Li₂O和BaO中的至少一种。

[0735] EIL的厚度可以为约0.1nm至约10nm,或约0.3nm至约9nm。当电子注入层的厚度在这些范围内时,所述电子注入层可在不显著增加工作电压下具有令人满意的电子注入能力。

[0736] 所述电子注入层可包含所述式I的化合物和本发明的金属掺杂剂或由它们组成。

[0737] 阴极

[0738] 阴极的材料可以是:具有低逸出功的金属、合金或导电化合物,或其组合。阴极的材料的具体实例可以是锂(Li)、镁(Mg)、铝(Al)、铝-锂(Al-Li)、钙(Ca)、镁-铟(Mg-In)、镁-银(Mg-Ag)、银(Ag)等。为了制造具有沉积在基底上的反射阳极的顶部发光型发光器件,所述阴极可以由例如氧化锡铟(ITO)、氧化铟锌(IZO)或银(Ag)形成为透光电极。

[0739] 在包含透明金属氧化物阴极或反射金属阴极的器件中,所述阴极的厚度可以为约50nm至约100nm,而半透明金属阴极可薄至约5nm至约15nm。

[0740] 基底

[0741] 在阳极下方或阴极之上还可设置基底。所述基底可以是一般有机发光二极管中所用的基底,并且可以是机械强度、热稳定性、透明度、表面光滑度、易处理性和耐水性均强的玻璃基底或透明塑料基底。

[0742] 以下,将参考实施例更详细地说明所述实施方式。然而,本公开不限于以下实施

例。

附图说明

[0743] 通过以下结合附图对示例性实施方式的描述,本发明的这些和/或其它方面和优点将变得清楚并更容易领会,其中:

[0744] 图1是根据本发明示例性实施方式的有机发光二极管(OLED)的示意性截面图;

[0745] 图2是根据本发明示例性实施方式的OLED的示意性截面图。

[0746] 图3是根据本发明的示例性实施方式,包含电荷产生层的串联式OLED的示意性截面图。

[0747] 图4是根据本发明的示例性实施方式,包含电荷产生层的串联式OLED的示意性截面图。

具体实施方式

[0748] 现在将详细参考本发明的示例性实施方式,其示例在附图中示出,其中同样的附图标记始终表示同样的元件。下面通过参考附图描述示例性实施方式,以解释本发明的方面。

[0749] 本文中,当一个元件被称为形成或设置在第二元件“上”时,所述元件可以直接设置在第二元件上,或可在其间设置一个或多个其它元件。当一个元件是指“直接”形成或设置在第二元件上时,其间没有设置其它元件。

[0750] 图1是根据本发明示例性实施方式的有机发光二极管(OLED) 100的示意性截面图。OLED 100包括基底110、阳极120、空穴注入层(HIL) 130、空穴传输层(HTL) 140、发光层(EML) 150、电子传输层(ETL) 160、电子注入层(EIL) 180和阴极190。电子传输层(ETL) 160包含式I的化合物和任选的掺杂剂或由它们组成。

[0751] 任选可以使用电子传输层叠层(ETL)代替单个电子传输层160。所述电子传输层叠层(ETL)包括第一电子传输层和第二电子传输层,其中所述第一电子传输层布置在EML附近,所述第二电子传输层布置在阴极(190)附近。所述第一和/或第二电子传输层包含本发明的式I的化合物和任选的本发明的金属掺杂剂。

[0752] 图2是根据本发明另一个示例性实施方式的OLED 100的示意性截面图。图2与图1的不同之处在于,图2的OLED 100包含电子阻挡层(EBL) 145和空穴阻挡层(HBL) 155。参照图2,OLED 100包括基底110、阳极120、空穴注入层(HIL) 130、空穴传输层(HTL) 140、电子阻挡层(EBL) 145、发光层(EML) 150、空穴阻挡层(HBL) 155、电子传输层(ETL) 160和第二电子传输层(ETL) 161、电子注入层(EIL) 180和阴极电极190。电子传输层(ETL) 160和/或电子注入层(EIL) 180包含所述式I的化合物和任选的金属掺杂剂或由它们组成。

[0753] 在以上描述中,制造本发明的OLED 100的方法以在基底110上形成阳极120开始,在阳极120上依次形成空穴注入层130、空穴传输层140、任选的电子阻挡层145、发光层150、任选的空穴阻挡层155、至少一个第一电子传输层160和任选的至少一个第二电子传输层161、任选的至少一个电子注入层180、和阴极190,或以相反的次序实施。

[0754] 图3是根据本发明另一个示例性实施方式的串联式OLED 200的示意性截面图。图3与图2的不同之处在于,图3的OLED 100还包含电荷产生层和空穴传输层(HTL) 141。

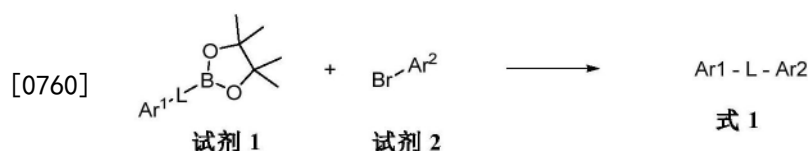
[0755] 参照图3,所述OLED 200包括基底110、阳极120、空穴注入层(HIL) 130、空穴传输层(HTL) 140、电子阻挡层(EBL) 145、发光层(EML) 150、空穴阻挡层(HBL) 155、第一电子传输层(ETL) 160、第二电子传输层(ETL) 161、n-型电荷产生层(n型CGL) 185、p型电荷产生层(p型GCL) 135、第二空穴传输层(HTL) 141和阴极190。第一电子传输层(ETL) 160或第二电子传输层(ETL) 161、以及电子注入层(EIL) 180和/或n-型电荷产生层(n型CGL) 185包含所述式I的化合物和任意的金属掺杂剂或由它们组成。

[0756] 图4是根据本发明另一个示例性实施方式的串联式OLED 200的示意性截面图。图4与图2的不同之处在于,图3的OLED 100还包含电荷产生层和第二发光层。参照图4,OLED 200包括基底110、阳极120、空穴注入层(HIL) 130、空穴传输层(HTL) 140、第一电子阻挡层(EBL) 145、发光层(EML) 150、空穴阻挡层(HBL) 155、电子传输层(ETL) 160、可包含式I的化合物和任意的金属掺杂剂的n-型电荷产生层(n型CGL) 185、p型电荷产生层(p型GCL) 135、第二空穴传输层(HTL) 141、第二电子阻挡层(EBL) 146、第二发光层(EML) 151、第二空穴阻挡层(EBL) 156、第二电子传输层(ETL) 161、第二电子注入层(EIL) 181和阴极190。电子传输层(ETL) 160和任意的电子注入层(EIL) 180和/或n-型电荷产生层(n型CGL) 185包含所述式I的化合物和任意的掺杂剂或由它们组成。在以上描述中,制造本发明的OLED 200的方法以在基底110上形成阳极120开始,在阳极120上依次形成空穴注入层130、空穴传输层140、任意的电子阻挡层145、发光层150、任意的空穴阻挡层155、任意的至少一个第一电子传输层160、n型CGL 185、p型GCL 135、第二空穴传输层141、任意的第二电子阻挡层146、第二发光层151、任意的第二空穴阻挡层156、至少一个第二电子传输层161、任意的第二电子注入层181和阴极190,或以相反的次序实施。

[0757] 以下,参考实施例更详细地说明所述实施方式。然而,本公开不限于以下实施例。现在将详细参考示例性的方面。

[0758] 式I的化合物的制备

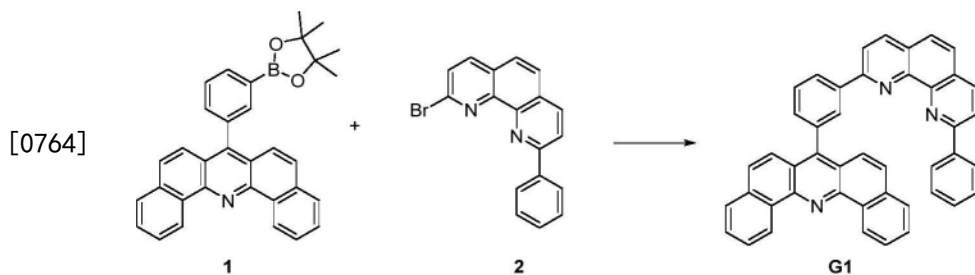
[0759] 合成式I的化合物的一般程序1



[0761] 将反应器用氮气冲洗并装入试剂1 (1eq)、试剂2和碳酸钾 (3eq)。添加1,4-二噁烷 (1500mL) 和水 (250mL) 并将该反应混合物用N₂脱气20分钟。添加第一份催化剂[1,1'-双(二苯基膦基)二茂铁]二氯化钨(II) (0.01eq)。将反应混合物加热至100℃并搅拌72小时。然后添加第二份催化剂(0.01eq)并在100℃继续搅拌100小时。

[0762] 使反应混合物冷却至室温。使产物沉淀并通过过滤收集。将固体材料用水(2×500mL)洗涤并在60℃下真空干燥过夜。粗产物经2cm硅胶热过滤进行纯化。用8L氯苯溶解产物,再用6L富甲醇(60mL)的氯苯洗脱。将溶液浓缩至5L,搅拌过夜,通过过滤收集沉淀物。用氯苯(2×300mL)洗涤该固体材料并在60℃下真空干燥过夜。将产物从DMF中重结晶。

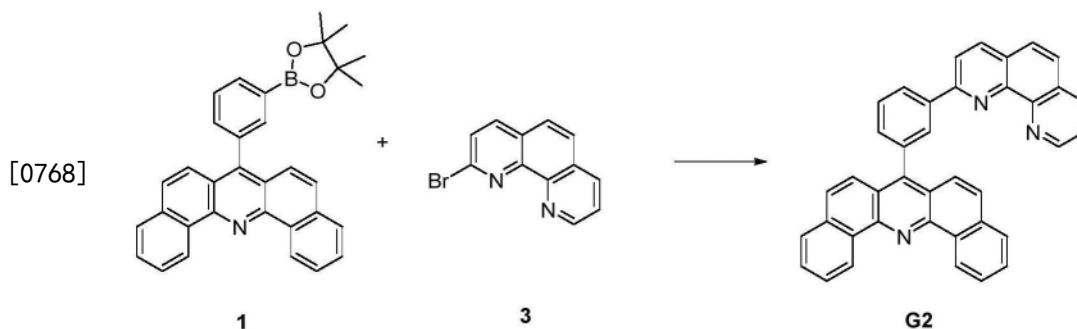
[0763] 7-(3-(9-苯基-1,10-菲咯啉-2-基)苯基)二苯并[c,h]吡啶(G1)的合成:



[0765] 用氮气冲洗3颈圆底烧瓶并装入7-(3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)苯基)二苯并[c,h]吡啶(1) (8.28g,17.2mmol,1eq)、2-氯-9-苯基-1,10-菲咯啉(2) (5.00g,17.2mmol,1eq)、碳酸钾(7.13g,51.6mmol,3eq)、1,4-二噁烷(156mL)和水(26mL)。将反应混合物用N₂脱气30分钟,并添加催化剂[1,1'-双(二苯基膦基)二茂铁]二氯化钯(II) (0.38g,0.52mmol,0.03eq)。将该混合物在95℃搅拌24小时。

[0766] 使该反应混合物冷却至室温并通过过滤收集产物。将固体材料用水洗涤至其为中性,并在70℃下真空干燥过夜。将粗产物溶解在DCM中,经Al₂O₃过滤并除去溶剂。将产物从氯苯中重结晶。产率为40%,292nm处HPLC纯度为99.85%。通过高真空升华实现进一步纯化,产率为89%。ESI-MS 610 (M+H)。

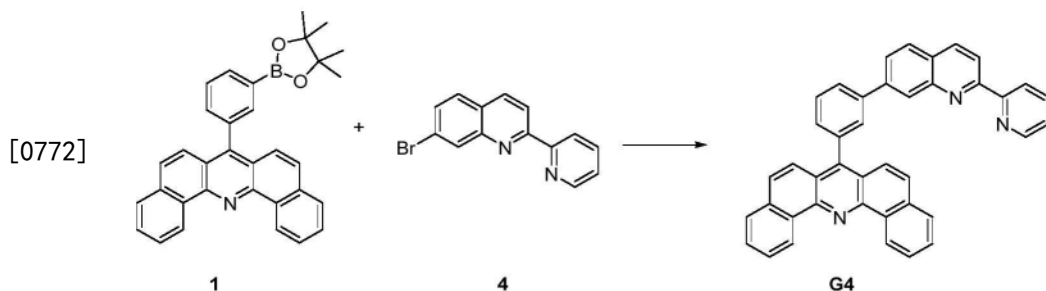
[0767] 7-(3-(1,10-菲咯啉-2-基)苯基)二苯并[c,h]吡啶(G2)的合成:



[0769] 用氮气冲洗反应器并装入7-(3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)苯基)二苯并[c,h]吡啶(1)、2-溴-1,10-菲咯啉(3) (100.0g,0.386mol,1eq)和碳酸钾(160g,1.16mol,3eq)。添加1,4-二噁烷(1500mL)和水(250mL)并将反应混合物用N₂脱气20分钟。添加第一份催化剂[1,1'-双(二苯基膦基)二茂铁]二氯化钯(II) (2.8g,3.86mmol,0.01eq)。将反应混合物加热至100℃并搅拌72小时。然后添加第二份催化剂(2.8g,3.86mmol,0.01eq)并在100℃继续搅拌100小时。

[0770] 使反应混合物冷却至室温。使产物沉淀并通过过滤收集。将固体材料用水(2×500mL)洗涤并在60℃下真空干燥过夜。粗产物经2cm硅胶热过滤进行纯化。用8L氯苯溶解产物,再用6L的富甲醇(60mL)的氯苯洗脱。将溶液浓缩至5L,搅拌过夜,通过过滤收集沉淀物。用氯苯(2×300mL)洗涤该固体材料并在60℃下真空干燥过夜。将产物从DMF中重结晶。产率为68%,292nm处HPLC纯度为99.93%。通过高真空升华实现进一步纯化,产率为85%。ESI-MS 534 (M+H)。

[0771] 7-(3-(2-(吡啶-2-基)喹啉-7-基)苯基)二苯并[c,h]吡啶(G4)的合成:



[0773] 用氮气冲洗3颈圆底烧瓶并装入7-(3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)苯基)二苯并[a,h]吡啶(22.21g,46.15mmol,1eq)、7-溴-2-(吡啶-2-基)喹啉(13.16g,46.15mmol,1eq)、碳酸钾(15.93g,115.34mmol,2.5eq)、THF(58mL)、甲苯(230mL)和水(58mL)。将反应混合物用N₂脱气30分钟,并添加催化剂[1,1'-双(二苯基膦基)二茂铁]二氯化钯(II)(1.01g,1.38mmol,0.03eq)。将该混合物在80℃搅拌过夜。

[0774] 使该反应混合物冷却至室温并真空去除溶剂。将粗产物溶解于DCM中,用水(300mL)洗涤。有机层经MgSO₄干燥并通过二氧化硅过滤。除去溶剂并将产物悬浮在正己烷中。将其通过过滤洗涤并再次干燥。然后,将产物从甲苯中重结晶两次,用正己烷和甲醇洗涤并再次干燥。产率为50%,在292nm处HPLC纯度为98.89%。通过高真空升华实现进一步纯化,产率为64%。ESI-MS 560 (M+H)。

[0775] 底部发光型器件

[0776] 对于底部发光型器件,实施例1和2以及比较例1,将具有90nm ITO的15Ω/cm²玻璃基底(可得自Corning Co.)切割成150mm×150mm×0.7mm的尺寸,用异丙醇超声洗涤5分钟,然后用纯水超声洗涤5分钟,再用UV臭氧洗涤30分钟,以制备第一电极。然后,将97体积%联苯-4-基(9,9-二苯基-9H-芴-2-基)-[4-(9-苯基-9H-吡啶-3-基)苯基]-胺(CAS 1242056-42-3)与3体积%2,2',2''-(环丙烷-1,2,3-三亚基)三(2-(对氰基四氟苯基)乙腈)(A2)真空沉积在所述阳极上,根据本发明的实施例1和2以及比较例1,形成厚度为10nm的HIL(表2)。

[0777] 然后,将联苯-4-基(9,9-二苯基-9H-芴-2-基)-[4-(9-苯基-9H-吡啶-3-基)苯基]-胺真空沉积在所述HIL上,形成厚度为128nm的HTL。

[0778] 然后,将N,N-双(4-(二苯并[b,d]呋喃-4-基)苯基)-[1,1':4',1''-三联苯]-4-胺(CAS 1198399-61-9)真空沉积在所述HTL上,形成厚度为5nm的电子阻挡层(EBL)。

[0779] 然后,将97体积%H09(Sun Fine Chemicals,韩国)作为EML主体和3体积%BD200(Sun Fine Chemicals,韩国)作为荧光蓝色掺杂剂沉积在所述EBL上,形成厚度为20nm的蓝色发光EML。

[0780] 然后通过所述发光层上沉积2-(3'-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-[1,1'-联苯]-3-基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪,形成厚度为5nm的空穴阻挡层。

[0781] 然后,在所述空穴阻挡层上通过沉积2-([1,1'-联苯]-4-基)-4-(9,9-二苯基-9H-芴-4-基)-6-苯基-1,3,5-三嗪,形成厚度为25nm的电子传输层。所述电子传输层(ETL)包含50重量%的基质化合物和50重量%的LiQ。

[0782] 然后在所述ETL上形成厚度为15nm的n-CGL。所述n-CGL包含99重量%式1的基质化合物和1重量%的Li作为金属掺杂剂,或电子传输层可包含97重量%的式1的基质化合物和3重量%的Yb,见表2。然后,根据发明例5-10(表4),通过在n-CGL上沉积联苯-4-基(9,9-二苯基-9H-芴-2-基)-[4-(9-苯基-9H-吡啶-3-基)苯基]-胺(CAS1242056-42-3)与2,2',2''-

(环丙烷-1,2,3-三亚基)三(2-(对氰基四氟苯基)乙腈)(A2),在n-CGL上形成厚度为10nm的p-CGL。在比较例中,除使用HAT-CN代替A2外,以与发明例中相同的方式在n-CGL上形成p-CGL。

[0783] 然后,在所述p-CGL上真空沉积联苯-4-基(9,9-二苯基-9H-芴-2-基)-[4-(9-苯基-9H-咪唑-3-基)苯基]-胺,形成厚度为10nm的第二HTL。

[0784] 在 10^{-7} 毫巴下以0.01至1 Å/s的速率蒸发A1,形成厚度为100nm的阴极。

[0785] 通过用玻璃载片封装所述器件,保护所述OLED叠层不受环境条件影响。从而形成空腔,该空腔包含吸气材料用于进一步保护。

[0786] 为了评估本发明的实施例与现有技术相比的性能,在20°C下测量电流效率。使用Keithley 2635源测量单元,通过提供以V计的电压并测量流过被测器件的以mA计的电流来确定电流-电压特性。施加于器件的电压在0V至10V之间的范围内以0.1V的步长变化。同样,通过使用Instrument Systems CAS-140CT阵列光谱仪(由Deutsche Akkreditierungsstelle(DAKK S)校准)测量各电压值下以 cd/m^2 为单位的亮度,来确定亮度-电压特性和CIE坐标。 $10\text{mA}/\text{cm}^2$ 下的 cd/A 效率分别通过内插亮度-电压和电流-电压特性来确定。

[0787] 器件的寿命LT在环境条件(20°C)和 $30\text{mA}/\text{cm}^2$ 下使用Keithley 2400源表测量,并以小时记录。

[0788] 器件的辉度用已校准的光电二极管测量。寿命LT被定义为直到器件的辉度降至其初始值的97%为止的时间。

[0789] 因此,可以看出用于ETL(实施例1-4)和n-CGL(实施例5-8)的材料在用于有机电子器件中时可以确保有机电子器件的低驱动电压和高效率。

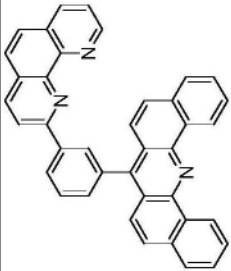
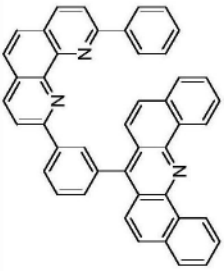
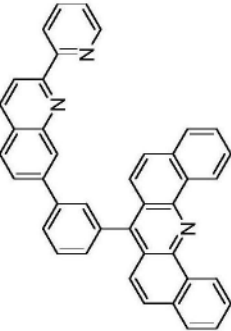
[0790] 综上所述,实现了工作电压的改善,这对于降低功耗和延长电池寿命是重要的,例如对于移动显示装置的这两方面而言更是情况如此。同时, cd/A 效率,也称为电流效率,保持在相似或甚至改善的水平。高电流密度下的长寿命对于在高辉度下运行的装置的寿命是重要的。

[0791] 虽然本发明已经结合目前被认为是实用的示例性实施方式进行了描述,但应理解本发明不限于所公开的实施方式,而是相反,旨在涵盖包括在所附权利要求的主旨和范围内各种修改和等效布置。因此,上述实施方式应被理解为示例性的,而不是以任何方式限制本发明。

[0792] 在表1和表2中,列出了本发明的式I化合物的性质。

[0793]

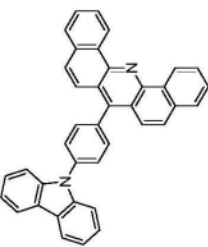
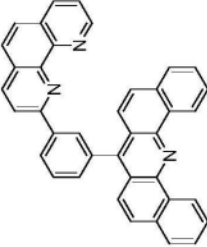
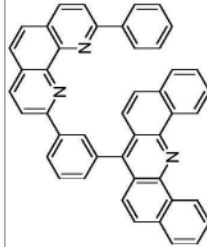
表 1
本发明的式 I 化合物的性质

称为:	结构	mp (°C)	T _g (°C)	T _{RO} (°C)	HOMO (eV)	LUMO (eV)	偶极矩 (德拜)
G2		319	161	263	-5.49	-1.72	4.75
G1		303	158	269	-5.57	-1.75	3.82
G4		247	132	246	-5.57	-1.75	4.29

[0794]

表 2

包含含有式(I)化合物的 n-CGL 的有机电子器件的性能

示例	基质化合物	金属掺杂剂	n-CGL		厚度 n-CGL(nm)	15 mA/cm ² 下 的工作电压 (V)
			基质化合物 (vol.-%)	金属掺杂剂 (vol.-%)		
比较例 1		Li	99	1	15	11.9
实施例 1 G2		Li	99	1	15	4.8
实施例 2 G1		Li	99	1	15	4.8

[0795] 综上所述,当有机半导体层包含式(I)的化合物时,可实现低工作电压和改善的寿命。

[0796] 虽然本发明已经结合目前被认为是实用的示例性实施方式进行了描述,但应理解本发明不限于所公开的实施方式,而是相反,旨在涵盖包括在所附权利要求的主旨和范围内各种修改和等效布置。因此,上述实施方式应被理解为示例性的,而不是以任何方式限制本发明。

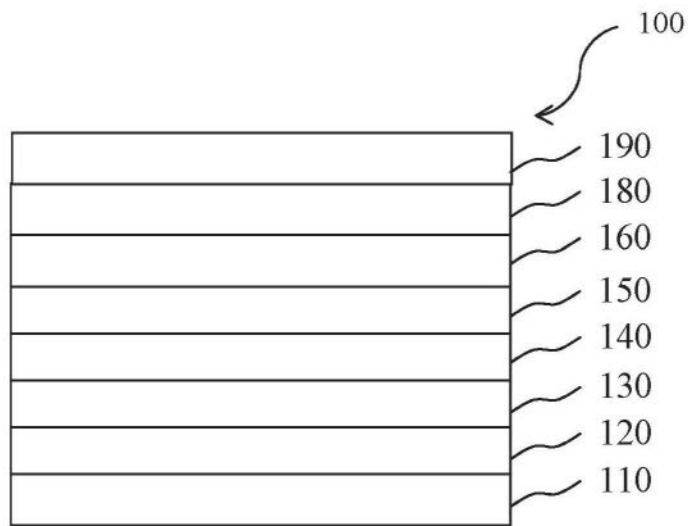


图1

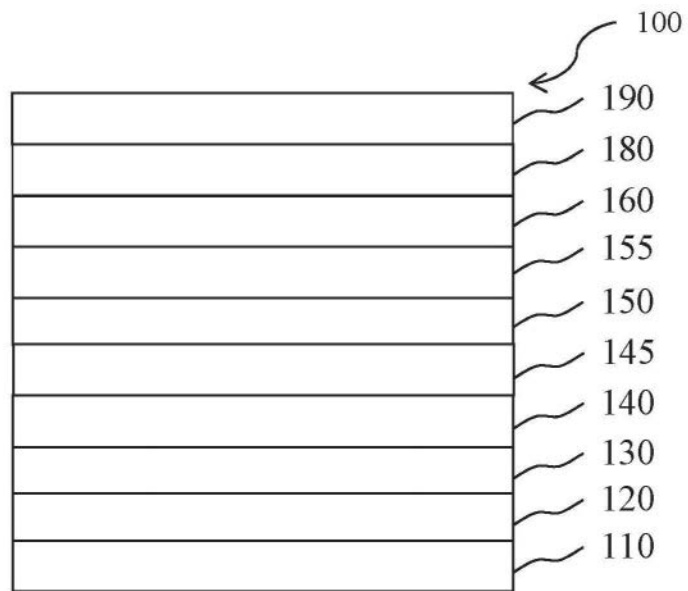


图2

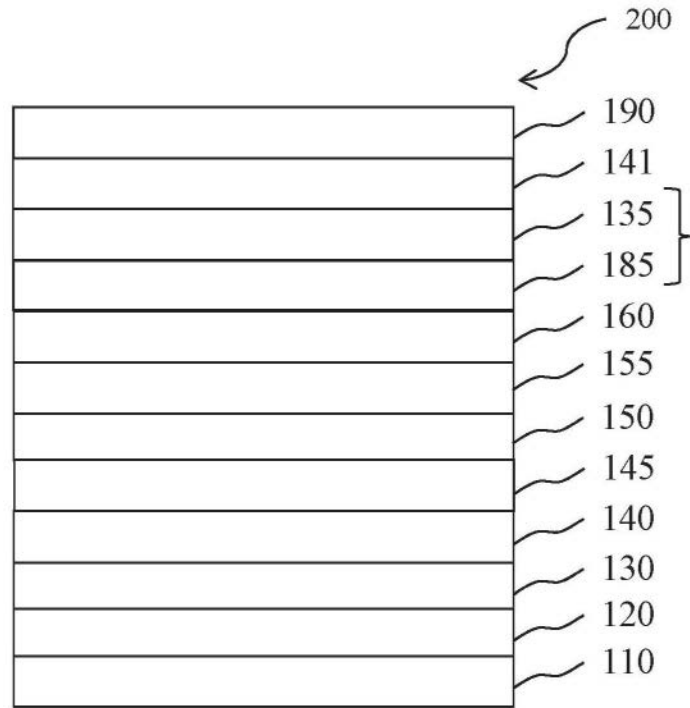


图3

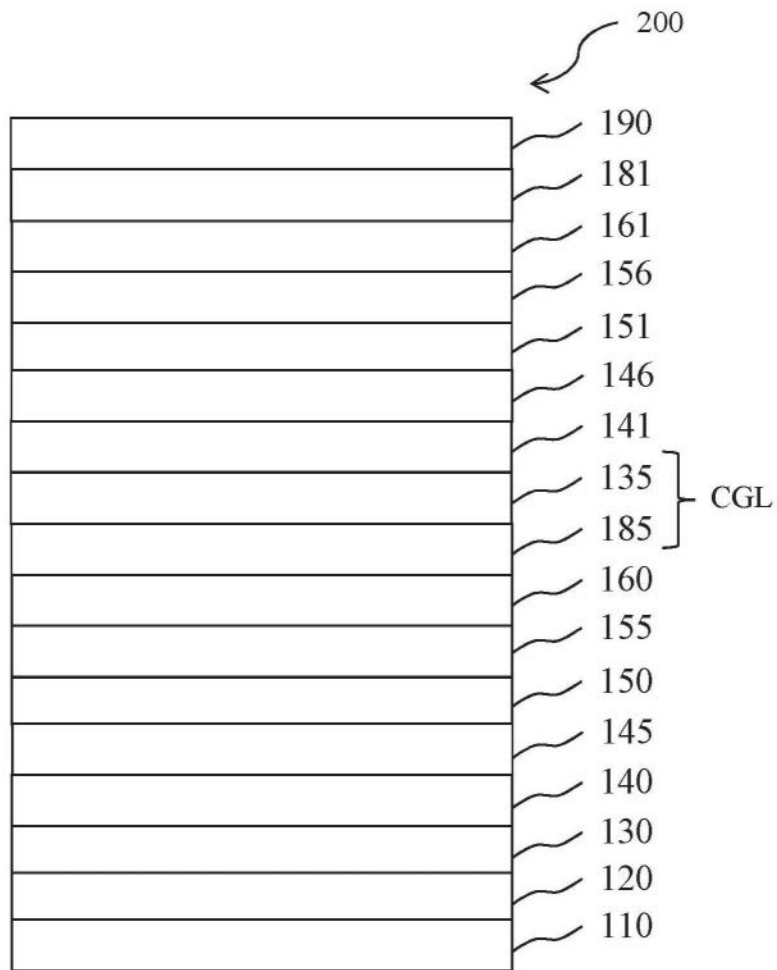


图4