(19)国家知识产权局

(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 115461350 A
(43)申请公布日 2022.12.09

(21)申请号 202180032001.2

(22)申请日 2021.04.23

(30)优先权数据
20171128.0 2020.04.23 EP
20217125.2 2020.12.23 EP

(85)PCT国际申请进入国家阶段日
2022.10.24

(86)PCT国际申请的申请数据
PCT/EP2021/060706 2021.04.23

(87)PCT国际申请的公布数据
WO2021/214309 EN 2021.10.28

(71)申请人 三星显示有限公司
地址 韩国京畿道龙仁市

(72)发明人 S·塞弗曼 S·杜克

(74)专利代理机构 北京铭硕知识产权代理有限公司 11286
专利代理师 闵月 程月

(51)Int.Cl.
C07F 5/02(2006.01)
H01L 51/00(2006.01)
H01L 51/50(2006.01)
C09K 11/00(2006.01)

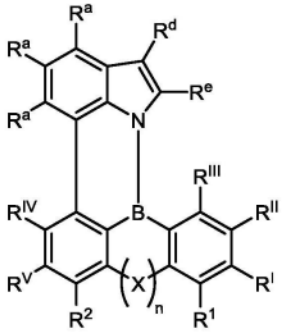
权利要求书6页 说明书162页

(54)发明名称

用于光电器件的有机分子

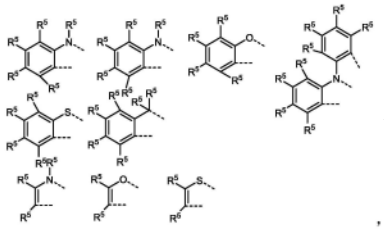
(57)摘要

发明涉及(具体地,应用于光电器件中的)有机分子。根据发明,有机分子由下式(I)表示:



式(I),

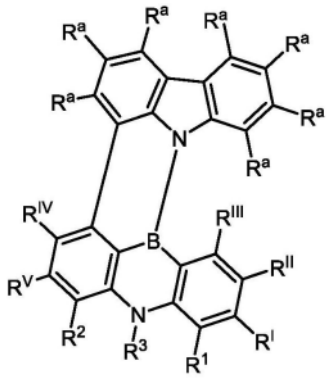
其中,n=0或1;并且X在选自于由直连键、CR^3R^4、$C=CR^3R^4$、C=O、$C=NR^3$、NR^3、O、SiR^3R^4、S、S(O)和$S(O)_2$组成的组;其中,至少一个取代基R^V与一个或更多个取代基R^2和/或R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系,其中,环体系选自于以下组:



其中,每条虚线表示连接点。

CN 115461350 A

1.一种有机分子，所述有机分子包括由式III-2a表示的结构：



式 III-2a，

其中，

R^1、R^2、R^3、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V均独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；$Si(R^5)_3$；$B(OR^5)_2$；$B(R^5)_2$；OSO_2R^5；CF_3；CN；F；Br；I；C_1-C_{40}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{40}烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{40}硫代烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{40}烯基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{40}炔基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{60}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{57}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；

R^a独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；$Si(R^5)_3$；$B(OR^5)_2$；$B(R^5)_2$；OSO_2R^5；CF_3；CN；F；Br；I；C_1-C_{40}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{40}烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{40}硫代烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{40}烯基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{40}炔基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或

$CONR^5$取代;C_6-C_{60}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_2-C_{57}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;

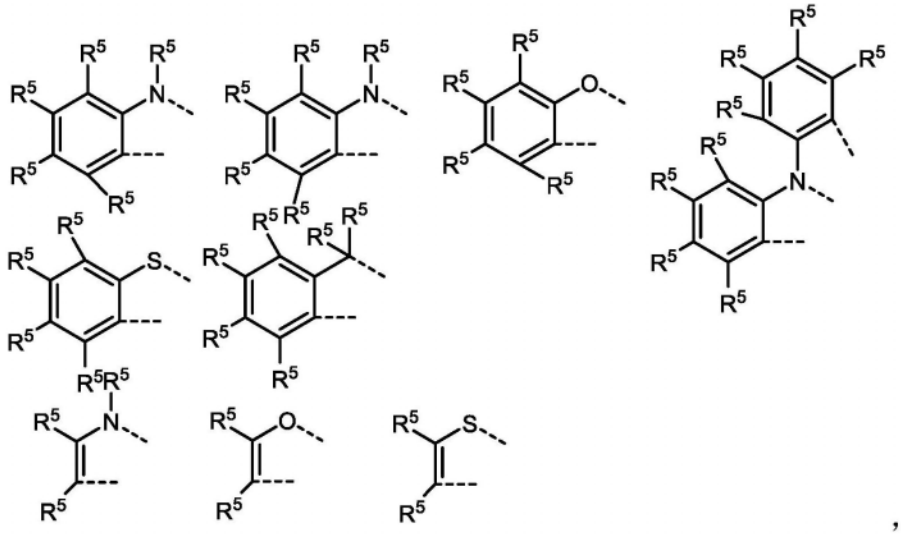
R^5独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;$N(R^6)_2$;OR^6;$Si(R^6)_3$;$B(OR^6)_2$;$B(R^6)_2$;OSO_2R^6;CF_3;CN;F;Br;I;C_1-C_{40}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_1-C_{40}烷氧基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_1-C_{40}硫代烷氧基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_2-C_{40}烯基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_2-C_{40}炔基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_6-C_{60}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6;以及C_2-C_{57}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6;

R^6独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;OPh;CF_3;CN;F;C_1-C_5烷基,其中,一个或更多个氢原子可选地独立地被氘、CN、CF_3或F取代;C_1-C_5烷氧基,其中,一个或更多个氢原子可选地独立地被氘、CN、CF_3或F取代;C_1-C_5硫代烷氧基,其中,一个或更多个氢原子可选地独立地被氘、CN、CF_3或F取代;C_2-C_5烯基,其中,一个或更多个氢原子可选地独立地被氘、CN、CF_3或F取代;C_2-C_5炔基,其中,一个或更多个氢原子可选地独立地被氘、CN、CF_3或F取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基;C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基;$N(C_6$-C_{18}芳基$)_2$;$N(C_2$-C_{17}杂芳基$)_2$;以及$N(C_2$-C_{17}杂芳基$)(C_6$-C_{18}芳基);

其中,取代基R^a和R^5能够独立地与一个或更多个取代基R^a和/或R^5形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系;

其中,取代基R^1、R^2、R^3、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地可选地与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^3、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和/或R^V形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系;并且

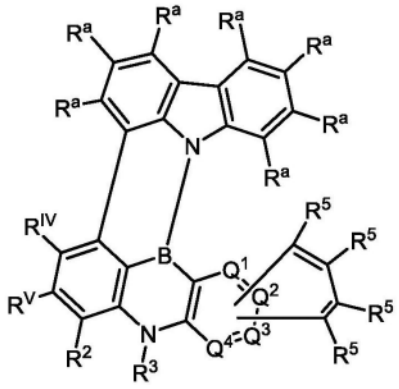
其中,至少一个取代基R^V与一个或更多个取代基R^2和/或R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系,其中,所述环体系选自于以下组:



其中，每条虚线表示连接点。

2.根据权利要求1所述的有机分子，其中，R^1、R^2、R^3、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；SR^5；$Si(R^5)_3$；$B(OR^5)_2$；$B(R^5)_2$；OSO_2R^5；CF_3；CN；卤素；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{18}烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{18}硫代烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{18}烯基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{18}炔基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

3.根据权利要求1或2所述的有机分子，所述有机分子包括式III-2b的结构：



式 III-2b，

其中，

R^3是可选地取代有一个或更多个取代基R^5的C_6-C_{18}芳基；

Q^1选自于由C和CR^{III}组成的组；

Q^2选自于由C和CR^{II}组成的组；

Q^3选自于由C和CR^{I}组成的组；

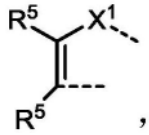
Q^4选自于由C和CR^{1}组成的组；

其中，

选自于由Q^2和Q^3组成的组中的至少一个取代基是C；并且

如果选自于由Q^2和Q^3组成的组中的仅一个取代基是C，则选自于由Q^1和Q^4组成的组中的恰好一个取代基是C。

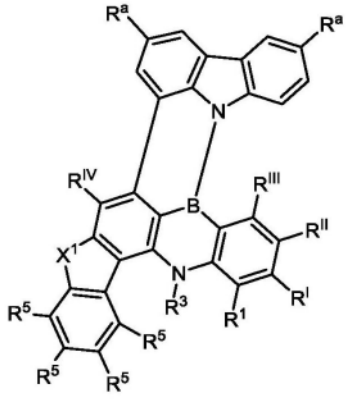
4.根据权利要求1至3中任一项所述的有机分子，其中，选自于由R^1、R^2、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和/或R^V形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，所述环体系选自于以下组：



，

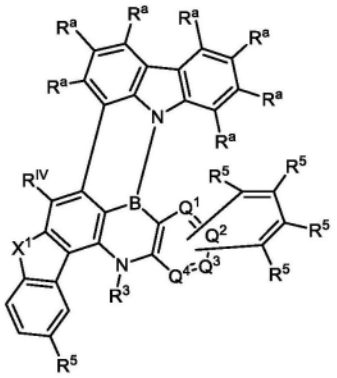
其中，X^1是S、O或NR^5。

5.根据权利要求1至4中任一项所述的有机分子，所述有机分子包括式III-2d-IIIa的结构：



式 III-2d-IIIa

6.根据权利要求1至5中任一项所述的有机分子，所述有机分子包括式III-2d-IIIc的结构：



式 III-2d-IIIc

7.根据权利要求1至6中任一项所述的有机分子，其中，R^3选自于由以下组成的组：C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

8.根据权利要求1至7中任一项所述的有机分子，其中，R^a独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；SR^5；$Si(R^5)_3$；$B(OR^5)_2$；$B(R^5)_2$；OSO_2R^5；CF_3；CN；卤素；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{18}烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{18}硫代烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{18}烯基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{18}炔基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

9.根据权利要求4至8中任一项所述的有机分子，其中，X^1是O。

10.一种光电器件，所述光电器件至少包括根据权利要求1至9中任一项所述的有机分子作为发光发射体。

11.根据权利要求10所述的光电器件，所述光电器件选自于由以下组成的组：

有机发光二极管(OLED)；

发光电化学电池；

OLED传感器；

有机二极管；

有机太阳能电池；

有机晶体管；

有机场效应晶体管；

有机激光器；以及

下变频元件。

12.一种组合物,所述组合物包括:

(a)根据权利要求1至9中任一项所述的有机分子,具体地,呈发射体和/或主体的形式;和

(b)与所述有机分子不同的发射体和/或主体材料;以及

(c)可选地,染料和/或溶剂。

13.一种光电器件,所述光电器件包括根据权利要求1至9中任一项所述的有机分子或根据权利要求12所述的组合物,具体地,所述光电器件呈选自于由有机发光二极管(OLED)、发光电化学电池、OLED传感器、有机二极管、有机太阳能电池、有机晶体管、有机场效应晶体管、有机激光器和下变频元件组成的组中的器件的形式。

14.根据权利要求13所述的光电器件,所述光电器件包括:

基底;

阳极;和阴极,其中,所述阳极或所述阴极设置在所述基底上;以及

发光层,布置在所述阳极与所述阴极之间且包括所述有机分子或所述组合物。

15.一种用于制造光电器件的方法,其中,使用根据权利要求1至9中任一项所述的有机分子或者根据权利要求12所述的组合物,具体地,所述方法包括通过真空蒸发法或从溶液中处理所述有机分子的步骤。

用于光电器件的有机分子

技术领域

[0001] 发明涉及有机分子以及有机分子在有机发光二极管(OLED)中和在其它光电器件中的应用。

背景技术

发明内容

[0002] 本发明的目的在于提供适用于在光电器件中使用的有机分子。

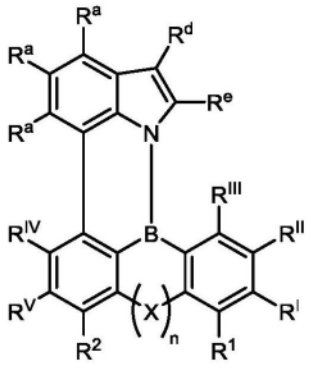
[0003] 该目的通过提供了一种新型的有机分子的发明来实现。

[0004] 根据发明,有机分子是纯有机分子,即,与已知用于光电器件中的金属配合物相比,有机分子不包含任何金属离子。

[0005] 根据本发明,有机分子在蓝色光谱范围、天蓝色光谱范围或绿色光谱范围内表现出发射最大值。具体地,有机分子在420nm与520nm之间(优选地在440nm与495nm之间,更优选地在450nm与470nm之间)表现出发射最大值,或者具体地,有机分子表现出低于560nm(更优选地低于550nm,甚至更优选地低于545nm,或者甚至低于540nm)的发射最大值。所述发射最大值通常将高于500nm(更优选地高于510nm,甚至更优选地高于515nm,或者甚至高于520nm)。具体地,根据发明的有机分子的光致发光量子产率是50%或更大。在光电器件(例如,有机发光二极管(OLED))中使用根据发明的有机分子导致光电器件的较高的效率或较高的色纯度(其由发射的半峰全宽(FWHM)表达)。对应的OLED具有比具有已知的发射体材料和可比颜色的OLED高的稳定性。

[0006] 发明的有机分子(或称为“有机发光分子”)包括式I的结构或由式I的结构组成:

[0007]



式 I,

[0008] 其中,

[0009] n=0或1;

[0010] X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、CR^3R^4、$C=CR^3R^4$、C=O、C=NR^3、NR^3、O、SiR^3R^4、S、S(O)和$S(O)_2$组成的组;

[0011] R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V选自于由以下组成的组:氢;氘;$N(R^5)_2$;OR^5;$Si(R^5)_3$;$B(OR^5)_2$;$B(R^5)_2$;OSO_2R^5;CF_3;CN;F;Br;I;C_1-C_{40}烷基,可选地取代有一个或更多个取代

基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{40}烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{40}硫代烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{40}烯基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{40}炔基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{60}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{57}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；

[0012] R^d和R^e彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；CF_3；CN；F；Br；I；C_1-C_{40}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^a，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{60}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^a；以及C_2-C_{57}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^a；

[0013] R^a在每次出现时独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；$Si(R^5)_3$；$B(OR^5)_2$；$B(R^5)_2$；OSO_2R^5；CF_3；CN；F；Br；I；C_1-C_{40}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{40}烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{40}硫代烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{40}烯基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{40}炔基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{60}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{57}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；

[0014] R^5在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^6)_2$；OR^6；$Si(R^6)_3$；$B(OR^6)_2$；$B(R^6)_2$；OSO_2R^6；CF_3；CN；F；Br；I；C_1-C_{40}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代；C_1-C_{40}烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S

或CONR^{6}取代;C_1-C_{40}硫代烷氧基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被R^{6}C=CR^6、C≡C、Si(R^6)$_2$、Ge(R^6)$_2$、Sn(R^6)$_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^6、P(=O)(R^6)、SO、SO_2、NR^6、O、S或CONR^{6}取代;C_2-C_{40}烯基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被R^{6}C=CR^6、C≡C、Si(R^6)$_2$、Ge(R^6)$_2$、Sn(R^6)$_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^6、P(=O)(R^6)、SO、SO_2、NR^6、O、S或CONR^{6}取代;C_2-C_{40}炔基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被R^{6}C=CR^6、C≡C、Si(R^6)$_2$、Ge(R^6)$_2$、Sn(R^6)$_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^6、P(=O)(R^6)、SO、SO_2、NR^6、O、S或CONR^{6}取代;C_6-C_{60}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6;以及C_2-C_{57}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6;

[0015] R^{6}在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;OPh;CF_3;CN;F;C_1-C_5烷基,其中,一个或更多个氢原子可选地彼此独立地被氘、CN、CF_3或F取代;C_1-C_5烷氧基,其中,一个或更多个氢原子可选地彼此独立地被氘、CN、CF_3或F取代;C_1-C_5硫代烷氧基,其中,一个或更多个氢原子可选地彼此独立地被氘、CN、CF_3或F取代;C_2-C_5烯基,其中,一个或更多个氢原子可选地彼此独立地被氘、CN、CF_3或F取代;C_2-C_5炔基,其中,一个或更多个氢原子可选地彼此独立地被氘、CN、CF_3或F取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基;C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基;N(C_6-C_{18}芳基)$_2$;N(C_2-C_{17}杂芳基)$_2$;以及N(C_2-C_{17}杂芳基)(C_6-C_{18}芳基);

[0016] 其中,取代基R^a、R^d、R^{e}和R^{5}彼此独立地可选地与一个或更多个取代基R^a、R^d、R^{e}和R^{5}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系;

[0017] 其中,取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^{V}彼此独立地可选地与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^{V}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0018] 针对取代基R^a、R^d、R^e、R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^{V}的示例包括C_6-C_{60}芳基(优选地C_6-C_{30}芳基,更优选地C_6-C_{18}芳基,甚至优选地C_6-C_{10}芳基)。

[0019] 具体的芳基取代基包括单环苯、双环联苯、缩合双环萘、三环三联苯(间三联苯、邻三联苯、对三联苯)、缩合三环体系(诸如苊、芴、非那烯、菲)、缩合四环体系(诸如三亚苯(苯并[9,10]菲)、芘、并四苯)、缩合五环体系(诸如苉和并五苯)。

[0020] 针对取代基R^a、R^d、R^e、R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^{V}的示例包括C_2-C_{57}杂芳基(优选地C_2-C_{30}杂芳基,更优选地C_2-C_{17}杂芳基,甚至优选地C_2-C_{10}杂芳基)。

[0021] 具体的杂芳基取代基包括吡咯、噁唑、异噁唑、噻唑、异噻唑、咪唑、噁二唑、噻二唑、三唑、四唑、吡唑、吡啶、嘧啶、哒嗪、吡嗪、三嗪、吲哚、异吲哚、1H-吲唑、苯并咪唑、苯并噁唑、苯并噻唑、1H-苯并三唑、喹啉、异喹啉、噌啉、喹唑啉、喹喔啉、酞嗪、萘啶、嘌呤、蝶啶、咔唑、吖啶、酚噻吩(phenoxathiin)、吩噁嗪环、吩噻嗪、吩嗪、呋喃、苯并呋喃、异苯并呋喃、二苯并呋喃、噻吩、苯并噻吩、二苯并噻吩、呋呫、噁二唑和噻蒽。

[0022] 针对取代基R^a、R^d、R^e、R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^{V}的示例包括C_1-C_{40}烷基(优选地C_1-C_{24}烷基或者支链或环状的C_3-C_{40}烷基,更优选地C_1-C_{18}烷基或者支链或环状的C_3-C_{18}烷基,甚至优选地C_1-C_{12}烷基或者支链或环状的C_3-C_{12}烷基,甚至更优选地C_1-C_6烷基或者支链或环状的C_3-C_6烷基,特别优选地C_1-C_4烷基或支链C_3-C_4烷基)。

[0023] 具体的烷基取代基包括甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁

基、正戊基、异戊基、新戊基、叔戊基、正己基、1-甲基、戊基、4-甲基-2-戊基、3,3-二甲基丁基、2-乙基丁基、正庚基、1-甲基己基、正辛基、叔辛基、1-甲基庚基、2-乙基己基、2-丙基戊基、正壬基、环己基、2,2-二甲基庚基、2,6-二甲基-4-庚基、3,5,5-三甲基己基、正癸基、正十一烷基、1-甲基癸基、正十二烷基、正十三烷基、1-己基庚基、正十四烷基、正十五烷基、正十六烷基、正十七烷基、正十八烷基、正十二烷基等。

[0024] 针对取代基R^a、R^d、R^e、R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V的示例包括C_1-C_{40}烷氧基(优选地C_1-C_{24}烷氧基或者支链或环状的C_3-C_{40}烷氧基,更优选地C_1-C_{18}烷氧基或者支链或环状的C_3-C_{18}烷氧基,甚至优选地C_1-C_{12}烷氧基或者支链或环状的C_3-C_{12}烷氧基,甚至更优选地C_1-C_6烷氧基或者支链或环状的C_3-C_6烷氧基,特别优选地C_1-C_4烷氧基或支链C_3-C_4烷氧基)。

[0025] 具体的烷氧基取代基包括甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、丁氧基、异丁氧基、仲丁氧基、叔丁氧基、戊氧基、己氧基、庚氧基、辛氧基等。

[0026] 针对取代基R^a、R^d、R^e、R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V的示例包括C_1-C_{40}硫代烷氧基(优选地C_1-C_{24}硫代烷氧基或者支链或环状的C_3-C_{40}硫代烷氧基,更优选地C_1-C_{18}硫代烷氧基或者支链或环状的C_3-C_{18}硫代烷氧基,甚至优选地C_1-C_{12}硫代烷氧基或者支链或环状的C_3-C_{12}硫代烷氧基,甚至更优选地C_1-C_6硫代烷氧基或者支链或环状的C_3-C_6硫代烷氧基,特别优选地C_1-C_4硫代烷氧基或支链C_3-C_4硫代烷氧基)。

[0027] 针对取代基R^a、R^d、R^e、R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V的示例包括C_2-C_{40}烯基(优选地C_2-C_{24}烯基或者支链或环状的C_3-C_{40}烯基,更优选地C_2-C_{18}烯基或者支链或环状的C_3-C_{18}烯基,甚至优选地C_2-C_{12}烯基或者支链或环状的C_3-C_{12}烯基,甚至更优选地C_2-C_6烯基或者支链或环状的C_3-C_6烯基,特别优选地C_2-C_4烯基或支链C_3-C_4烯基)。

[0028] 针对取代基R^a、R^d、R^e、R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V的示例包括C_2-C_{40}炔基(优选地C_2-C_{24}炔基或者支链或环状的C_3-C_{40}炔基,更优选地C_2-C_{18}炔基或者支链或环状的C_3-C_{18}炔基,甚至优选地C_2-C_{12}炔基或者支链或环状的C_3-C_{12}炔基,甚至更优选地C_2-C_6炔基或者支链或环状的C_3-C_6炔基,特别优选地C_2-C_4炔基或支链C_3-C_4炔基)。

[0029] 在优选的实施例中,R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;$N(R^5)_2$;OR^5;SR^5;$Si(R^5)_3$;$B(OR^5)_2$;$B(R^5)_2$;OSO_2R^5;CF_3;CN;卤素;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_1-C_{18}烷氧基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_1-C_{18}硫代烷氧基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_2-C_{18}烯基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_2-C_{18}炔基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0030] R^5在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;$N(R^6)_2$;OR^6;$Si(R^6)_3$;$B(OR^6)_2$;$B(R^6)_2$;OSO_2R^6;CF_3;CN;F;Br;I;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^6、P(=O)(R^6)、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_1-C_{18}烷氧基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^6、P(=O)(R^6)、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_1-C_{18}硫代烷氧基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^6、P(=O)(R^6)、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_2-C_{18}烯基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^6、P(=O)(R^6)、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_2-C_{18}炔基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^6、P(=O)(R^6)、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6。

[0031] 在优选的实施例中,n=1。

[0032] 在另一实施例中,n=0。

[0033] 在优选的实施例中,R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;$N(R^5)_2$;OR^5;$Si(R^5)_3$;$B(R^5)_2$;CF_3;CN;卤素;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^5、P(=O)(R^5)、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;并且

[0034] R^5在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;$N(R^6)_2$;OR^6;$Si(R^6)_3$;$B(R^6)_2$;CF_3;CN;F;Br;I;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^6、P(=O)(R^6)、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6。

[0035] 在优选的实施例中,R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;$N(R^5)_2$;OR^5;$Si(R^5)_3$;$B(R^5)_2$;CF_3;CN;卤素;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^5、P(=O)(R^5)、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;并且

[0036] R^5在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;$N(R^6)_2$;OR^6;$Si(R^6)_3$;$B(R^6)_2$;CF_3;CN;F;Br;I;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^6、P(=O)(R^6)、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,

[0037] 其中，基团R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}、R^5和R^V可选地彼此结合而形成可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基、氘、卤素、CN或CF_3的芳环或杂芳环。

[0038] 在优选的实施例中，R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；$Si(R^5)_3$；$B(R^5)_2$；CF_3；CN；卤素；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；并且

[0039] R^5在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^6)_2$；OR^6；$Si(R^6)_3$；$B(R^6)_2$；CF_3；CN；F；Br；I；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，

[0040] 其中，彼此相邻定位的基团R^1、R^2、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}、R^5和R^V可选地彼此结合而形成可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基、氘、卤素、CN或CF_3的芳环或杂芳环。

[0041] 在优选的实施例中，R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；$Si(R^5)_3$；$B(R^5)_2$；CF_3；CN；卤素；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；并且

[0042] R^5在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^6)_2$；OR^6；$Si(R^6)_3$；$B(R^6)_2$；CF_3；CN；F；Br；I；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6。

[0043] 在一个实施例中，R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0044] 在一个实施例中，R^1、R^2、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；

[0045] 其中，彼此相邻定位的基团R^1、R^2、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V可选地彼此结合而形成可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基、氘、卤素、CN或CF_3的芳环或杂芳环。

[0046] 在一个实施例中，R^3和R^4彼此独立地选自于由以下组成的组：C_1-C_{18}烷基，可选地取

代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0047] 在一个实施例中，R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组：C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0048] 在另一实施例中，R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组：C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0049] 在另一实施例中，R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组：C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0050] 在优选的实施例中，R^3彼此独立地选自于由以下组成的组：C_1-C_{40}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0051] 在优选的实施例中，R^3彼此独立地选自于由以下组成的组：C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0052] 在更优选的实施例中，R^3彼此独立地选自于由以下组成的组：C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0053] 在更优选的实施例中，R^3是可选地取代有一个或更多个取代基R^6的C_6-C_{18}芳基。

[0054] 在更优选的实施例中，R^3是可选地取代有一个或更多个取代基R^5的苯基(Ph)。

[0055] 在特定实施例中，R^3是可选地取代有一个或更多个取代基R^6的苯基(Ph)。

[0056] 在特定实施例中，R^3是可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基的苯基(Ph)。

[0057] 在特定实施例中，R^3是彼此独立地可选地取代有一个或更多个以下取代基的苯基(Ph)：C_1-C_5烷基，其中，一个或更多个氢原子可选地彼此独立地被氘、CN、CF_3或F取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基。

[0058] 在特定实施例中，R^3是Ph。

[0059] 在一个实施例中，R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组：C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代。

[0060] 在一个实施例中，选自于由R^1、R^2、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}、R^V和R^a组成的组中的至少一个取代基是：C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代。

[0061] 在一个实施例中，选自于由R^1、R^2、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}、R^V和R^a组成的组中的至少一个取

代基是:Me;^{i}Pr;以及^{t}Bu。

[0062] 在一个实施例中,R^{a}在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0063] 在一个实施例中,R^{a}在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0064] 在一个实施例中,R^{a}在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;以及C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0065] 在一个实施例中,至少一个R^{a}是Me;^{i}Pr;或者^{t}Bu。

[0066] 在优选的实施例中,选自于由R^1、R^2、R^{I}、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^{V}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^{I}、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^{V}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0067] 在更优选的实施例中,选自于由R^1、R^2、R^{I}、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^{V}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^{I}、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^{V}形成芳香族和/或杂芳香族的苯并稠合环体系。

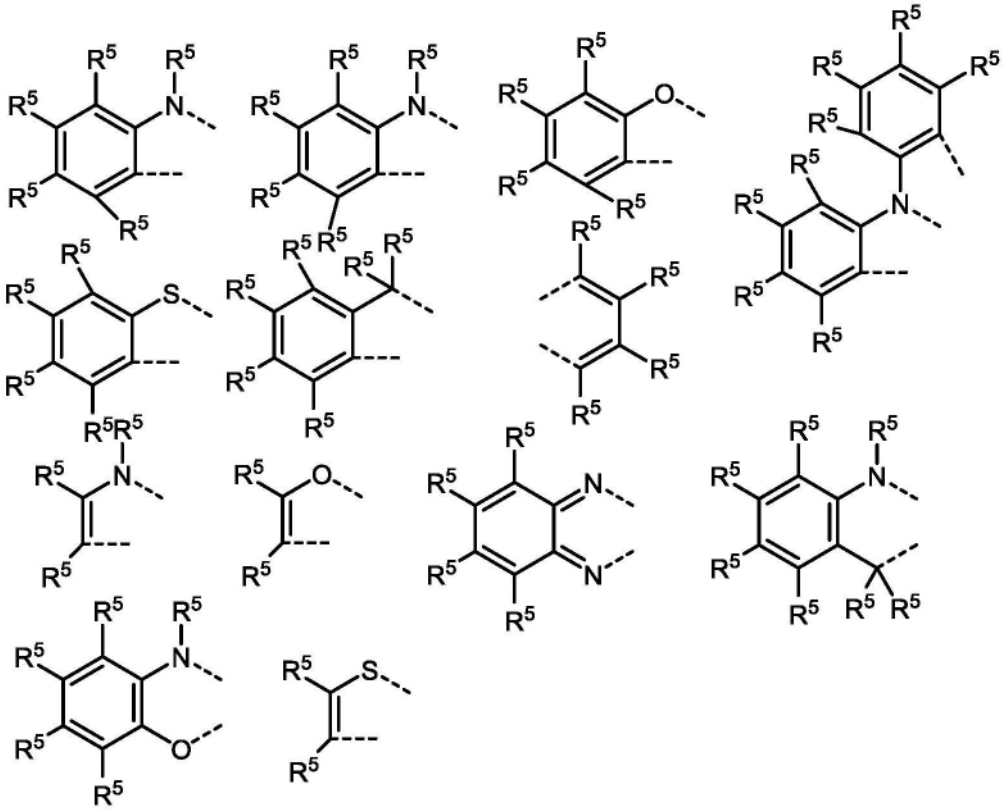
[0068] 在更优选的实施例中,选自于由R^1、R^2、R^{I}、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^{V}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个相邻的取代基R^1、R^2、R^{I}、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和/或R^{V}形成芳香族和/或杂芳香族的苯并稠合环体系。

[0069] R^1定位为与R^{I}相邻;R^{I}定位为与R^{II}和R^1相邻,R^{II}定位为与R^{III}和R^{I}相邻;R^{III}定位为与R^{II}相邻,R^2定位为与R^{V}相邻,R^{V}定位为与R^2和R^{IV}相邻,并且R^{IV}定位为与R^{V}相邻。

[0070] 在更优选的实施例中,选自于由R^1、R^2、R^{I}、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^{V}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个相邻的取代基R^1、R^2、R^{I}、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^{V}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

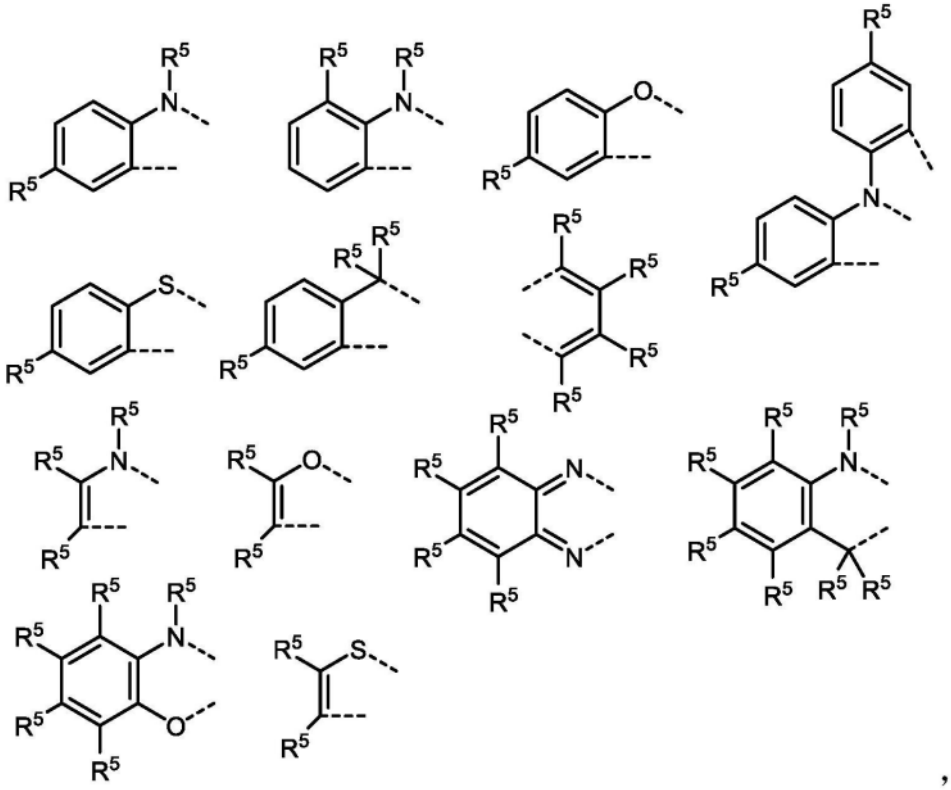
[0071] R^1定位为与R^{I}相邻;R^{I}定位为与R^{II}和R^1相邻,R^{II}定位为与R^{III}和R^{I}相邻;R^{III}定位为与R^{II}相邻,R^2定位为与R^{V}相邻,R^{V}定位为与R^2和R^{IV}相邻,并且R^{IV}定位为与R^{V}相邻。

[0072] 在优选的实施例中,选自于由R^1、R^2、R^{I}、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^{V}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^{I}、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^{V}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系,其中,环体系选自于以下组:

[0073] 

[0074] 其中,每条虚线是与如式I中所示的有机分子的其余部分的连接点。

[0075] 在优选的实施例中,选自于由R^1、R^2、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系,其中,环体系选自于以下组:

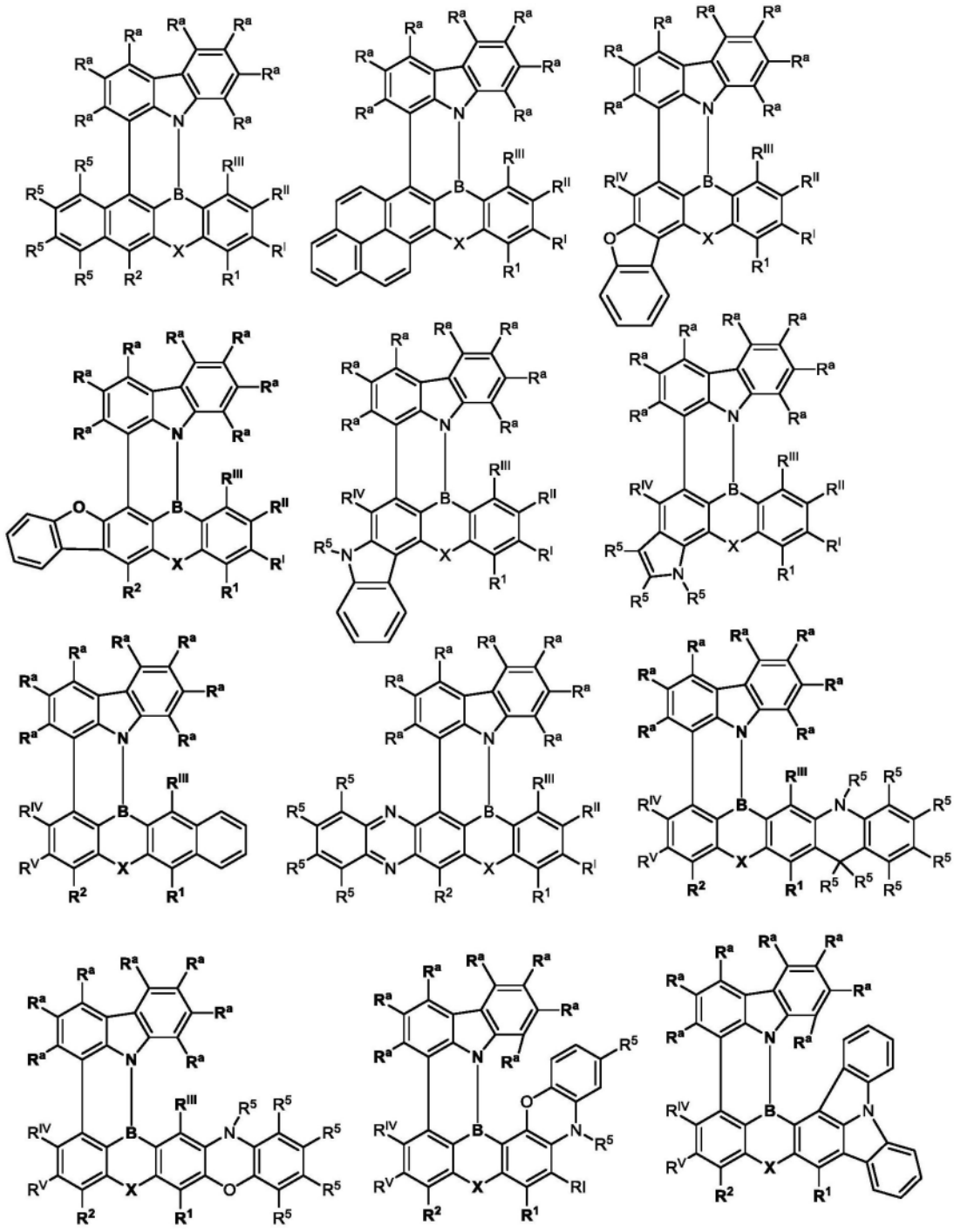
[0076] 

[0077] 其中,每条虚线是连接点。

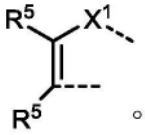
[0078] 在优选的实施例中,连接点定位为彼此相邻。这意味着R^1优选地与R^I形成环体系;R^I优选地与R^{II}和/或R^1形成环体系,R^{II}优选地与R^{III}和/或R^I形成环体系;R^{III}优选地与R^{II}形成环体系,R^2优选地与R^V形成环体系,R^V优选地与R^2和/或R^{IV}形成环体系,R^{IV}优选地与R^V形成环体系。

[0079] 在下面列出具体示例:

[0080]



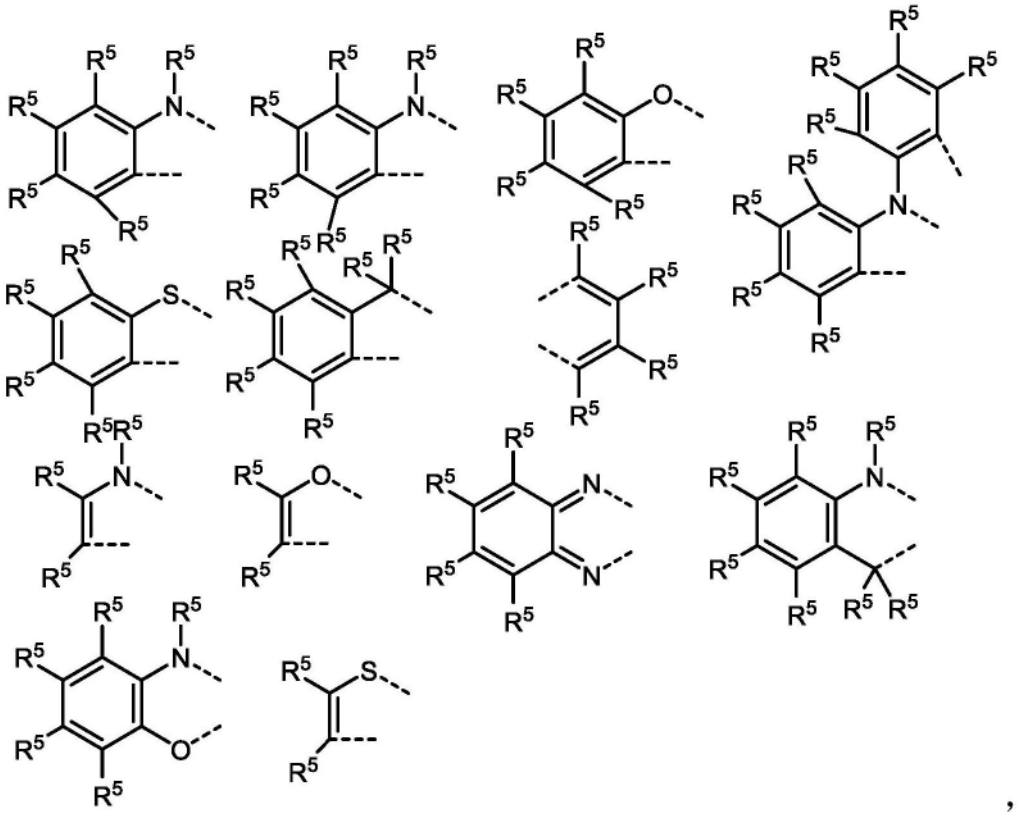
[0081] 在一个实施例中,选自于由R^1、R^2、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系,其中,环体系选自于以下组:

[0082] 。

[0083] 其中，X^1是S、O或NR^5。

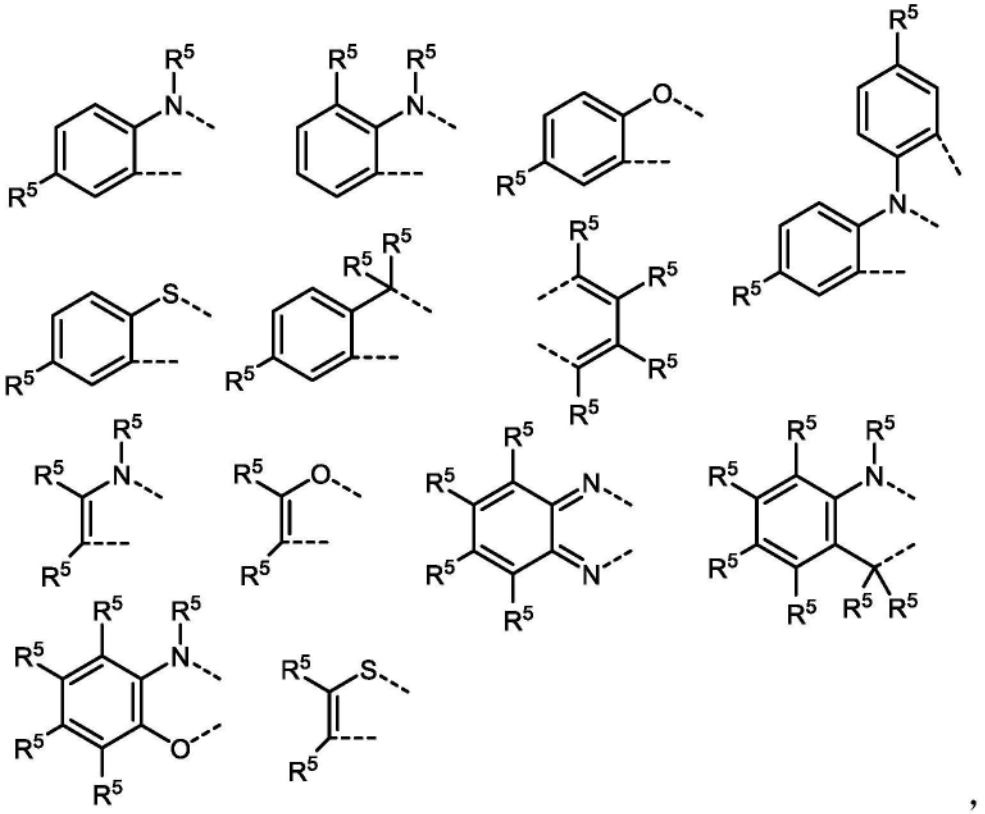
[0084] 在优选的实施例中，连接点定位为彼此相邻。

[0085] 在另一实施例中，选自于由R^1、R^I、R^{II}和R^{III}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^1、R^I、R^{II}和R^{III}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，环体系选自于以下组：

[0086] ，

[0087] 其中，每条虚线是连接点。

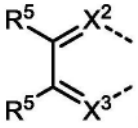
[0088] 在另一实施例中，选自于由R^1、R^I、R^{II}和R^{III}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^1、R^I、R^{II}和R^{III}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，环体系选自于以下组：

[0089] 

[0090] 其中，每条虚线是连接点。

[0091] 在优选的实施例中，连接点定位为彼此相邻。这意味着R^1优选地与R^I形成环体系；R^I优选地与R^{II}和/或R^1形成环体系；R^{II}优选地与R^{III}和/或R^I形成环体系；并且R^{III}优选地与R^{II}形成环体系。

[0092] 在一个实施例中，选自于由R^1、R^2、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，环体系选自于以下组：

[0093]  。

[0094] 其中，X^2是N或CR^5；

[0095] 其中，X^3是N或CR^5。

[0096] 在优选的实施例中，连接点定位为彼此相邻。

[0097] 在优选的实施例中，R^d和R^e在每次出现时独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；CF_3；CN；F；Br；I；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^a，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^5、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^a；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^a。

[0098] 在优选的实施例中，R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；SR^5；$Si(R^5)_3$；$B(OR^5)_2$；$B(R^5)_2$；OSO_2R^5；CF_3；CN；卤素；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、

$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{18}烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{18}硫代烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{18}烯基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{18}炔基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0099] 在一个实施例中，至少一个R^a与氢不同。

[0100] 在一个实施例中，R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，或者R^a与一个或更多个取代基R^a和R^5形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0101] 在一个实施例中，R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，或者R^a与一个或更多个取代基R^a和R^5形成芳香族或杂芳香族的环体系。

[0102] 在发明的一个实施例中，R^a在每次出现时独立地选自于由以下组成的组：氢；Me；^{i}Pr；^{t}Bu；CN；CF_3；F；芳基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3、F和Ph组成的组；吡啶基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3、F和Ph组成的组；咔唑基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3、F和Ph组成的组；三嗪基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3、F和Ph组成的组；以及$N(Ph)_2$，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、F和Ph组成的组，

[0103] 其中，彼此相邻定位的基团R^a可选地彼此结合而形成可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基、C_6-C_{18}芳基取代基、氘、卤素、CN或CF_3的芳环或杂芳环。

[0104] 在发明的一个实施例中，R^a在每次出现时独立地选自于由以下组成的组：氢；Me；^{i}Pr；^{t}Bu；CN；CF_3；F；芳基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3、F和Ph组成的组；吡啶基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3、F和Ph组成的组；咔唑基，可选地取代有一

个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3、F和Ph组成的组；三嗪基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3、F和Ph组成的组；以及$N(Ph)_2$，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、F和Ph组成的组。

[0105] 在发明的又一实施例中，R^a在每次出现时独立地选自于由以下组成的组：氢；Me；^{i}Pr；^{t}Bu；F；Ph，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3、F和Ph组成的组；咔唑基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3、F和Ph组成的组；以及$N(Ph)_2$，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、F和Ph组成的组。

[0106] 在发明的一个实施例中，R^a在每次出现时独立地选自于由以下组成的组：氢；Me；^{i}Pr；^{t}Bu；F；Ph，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3、F和Ph组成的组；咔唑基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3、F和Ph组成的组；以及$N(Ph)_2$，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、F和Ph组成的组，

[0107] 其中，彼此相邻定位的基团R^a可选地彼此结合而形成可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基、C_6-C_{18}芳基取代基、氘、卤素、CN或CF_3的芳环或杂芳环。

[0108] 在发明的又一实施例中，R^a在每次出现时独立地选自于由以下组成的组：氢；Me；^{i}Pr；^{t}Bu；F；Ph，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、F和Ph组成的组；咔唑基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、F和Ph组成的组；以及$N(Ph)_2$，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、F和Ph组成的组。

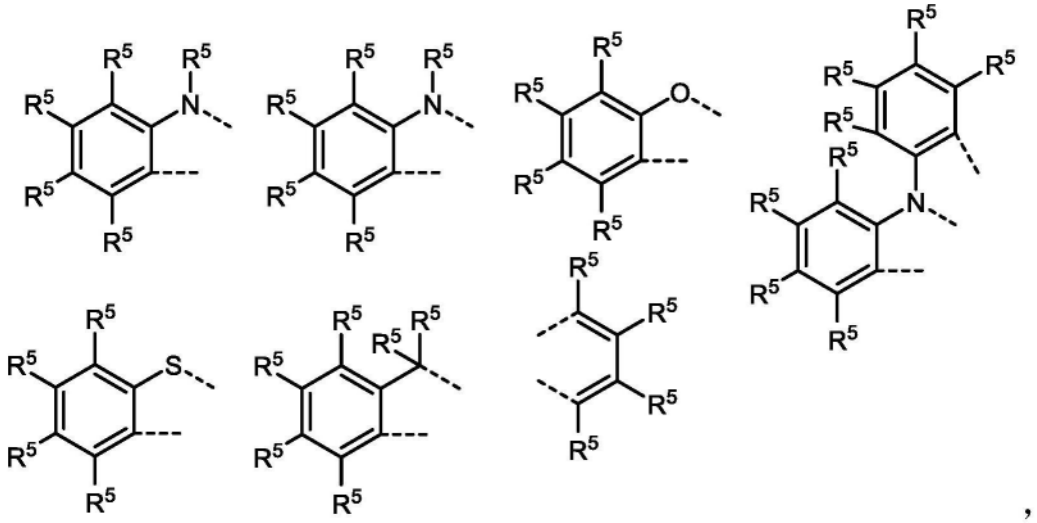
[0109] 在发明的又一实施例中，R^a在每次出现时独立地选自于由以下组成的组：氢；Me；^{i}Pr；^{t}Bu；Ph，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu和Ph组成的组；咔唑基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu和Ph组成的组；以及$N(Ph)_2$，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu和Ph组成的组。

[0110] 在发明的又一实施例中，R^a在每次出现时独立地选自于由以下组成的组：氢；Me；^{i}Pr；^{t}Bu；Ph，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu和Ph组成的组；以及$N(Ph)_2$，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu和Ph组成的组。

[0111] 在发明的又一实施例中，R^a在每次出现时独立地选自于由以下组成的组：氢；Me；^{i}Pr；^{t}Bu；以及Ph，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu和Ph组成的组。

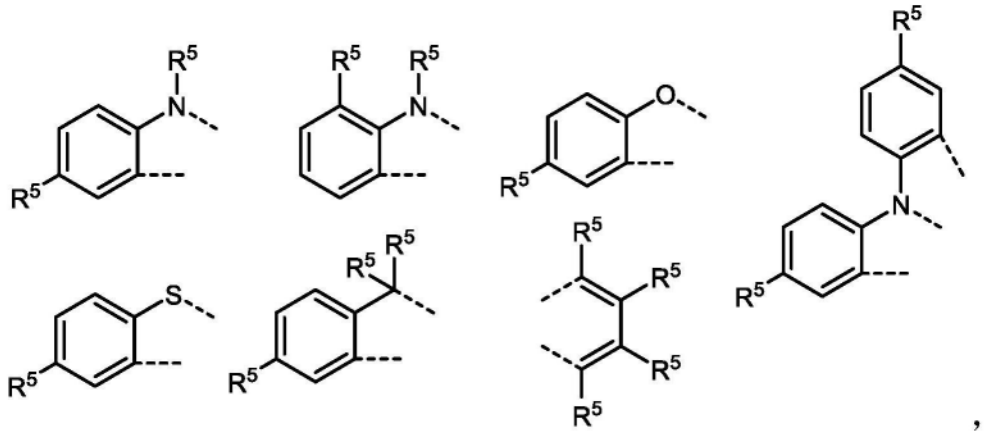
[0112] 在一个实施例中，R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C{=}CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C{=}NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，或者R^a与一个或更多个取代基R^a和R^5形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，环体系选自

于以下组：

[0113] 

[0114] 其中，每条虚线是连接点。

[0115] 在一个实施例中，R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，或者R^a与一个或更多个取代基R^a和R^5形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，环体系选自于以下组：

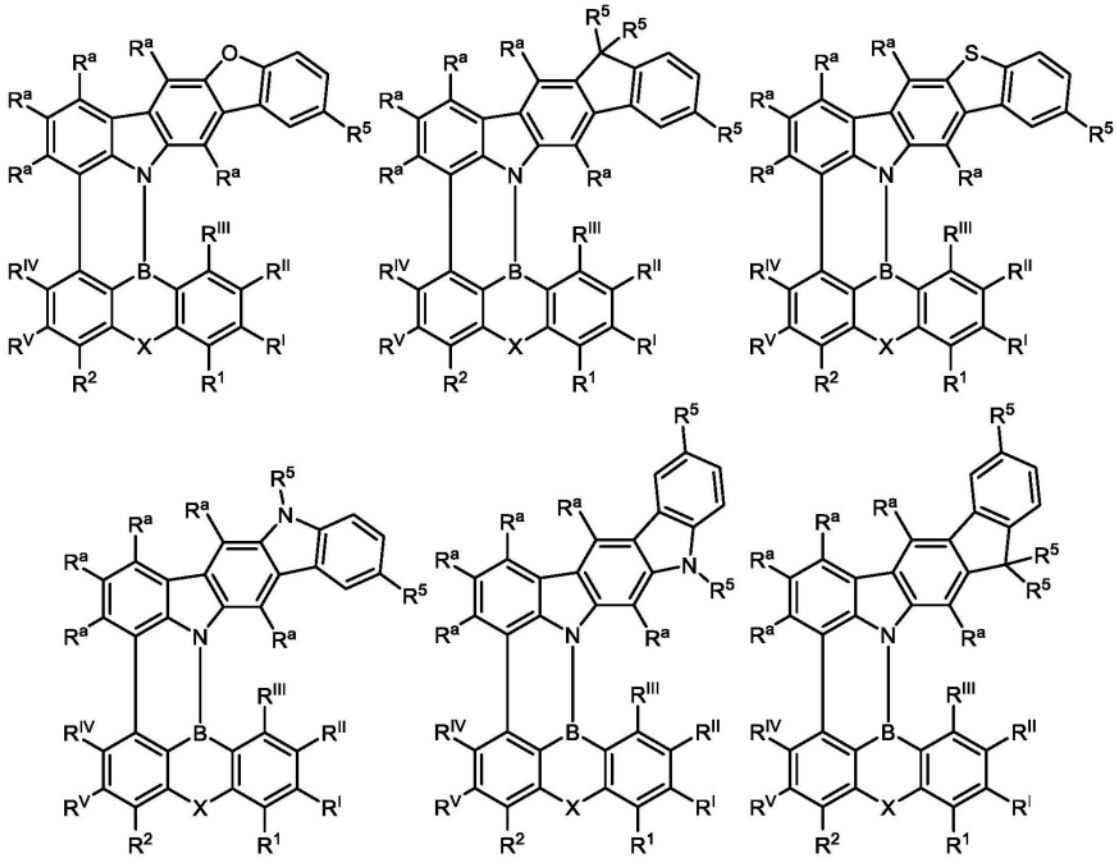
[0116] 

[0117] 其中，每条虚线是连接点。

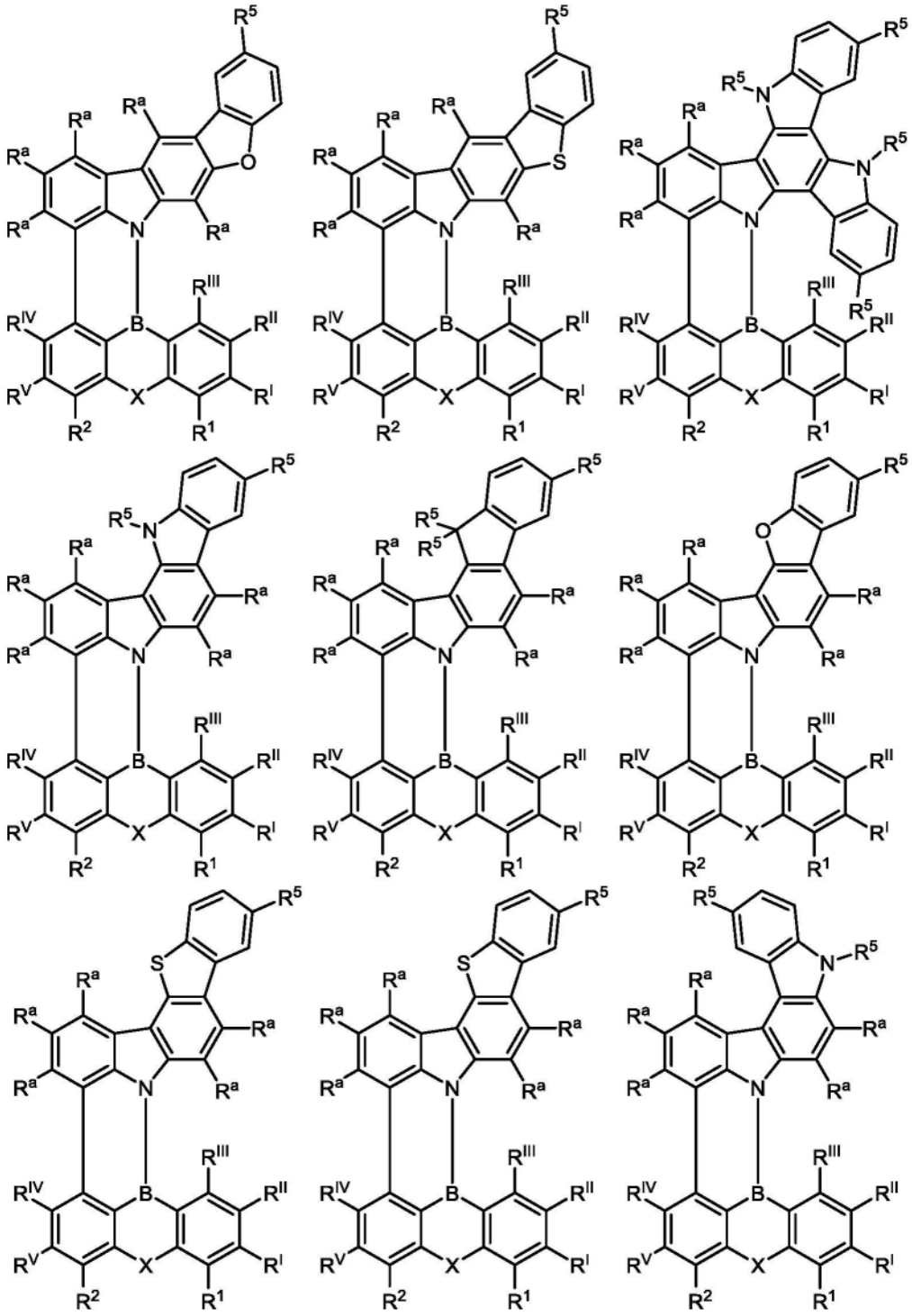
[0118] 在优选的实施例中，连接点定位为彼此相邻。这意味着R^a优选地与彼此相邻定位的R^a形成环体系。

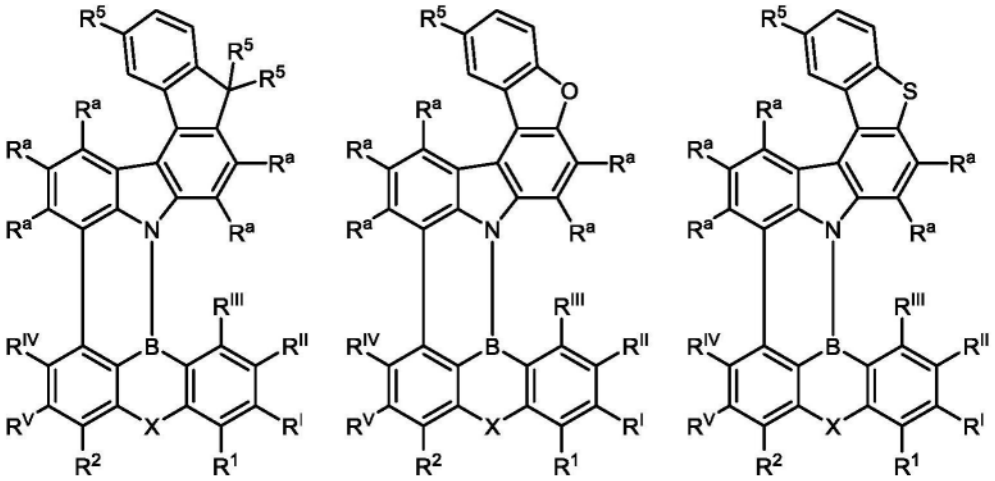
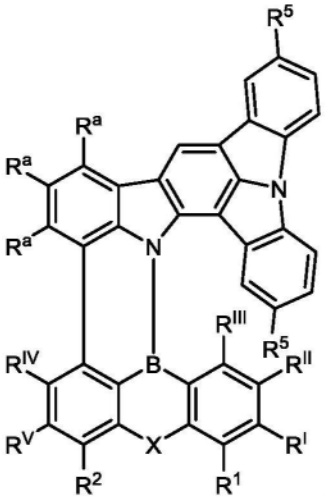
[0119] 在下面列出具体示例：

[0120]

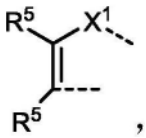


[0121]



[0122] 

。

[0123] 在一个实施例中，至少一个R^a与一个或更多个取代基R^a和R^5形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，环体系选自于以下组：

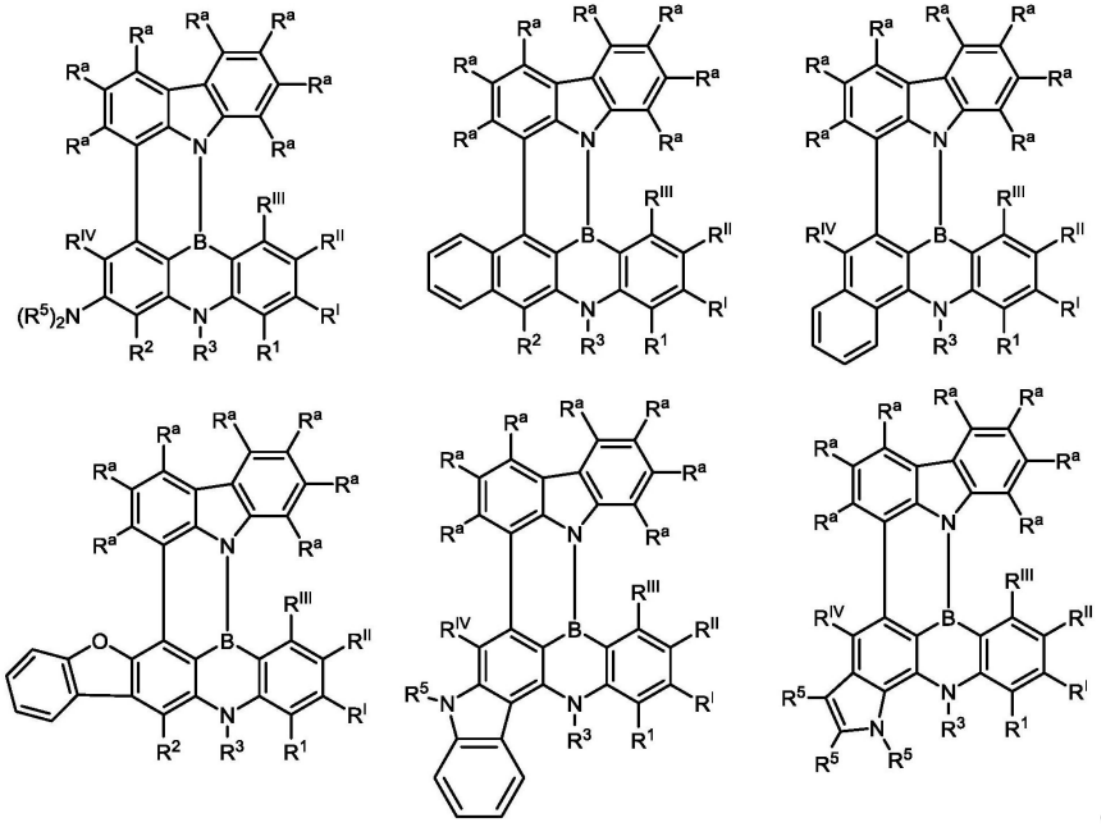
[0124] 
，

[0125] 其中，X^1是S、O或NR^5。

[0126] 在优选的实施例中，连接点定位为彼此相邻。

[0127] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式I的结构或由式I的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3并且R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系，则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0128] 在下面列出具体示例：

[0129] 

[0130] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式I的结构或由式I的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3并且R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系，则R^V是$N(R^6)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0131] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式I的结构或由式I的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3并且R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系，则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个相邻的取代基R^2和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0132] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式I的结构或由式I的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3并且R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系，则R^V是$N(R^6)_2$或者与一个或更多个相邻的取代基R^2和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0133] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式I的结构或由式I的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3并且R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系，则R^V是$N(R^5)_2$。

[0134] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式I的结构或由式I的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3并且R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系，则R^V是$N(R^6)_2$。

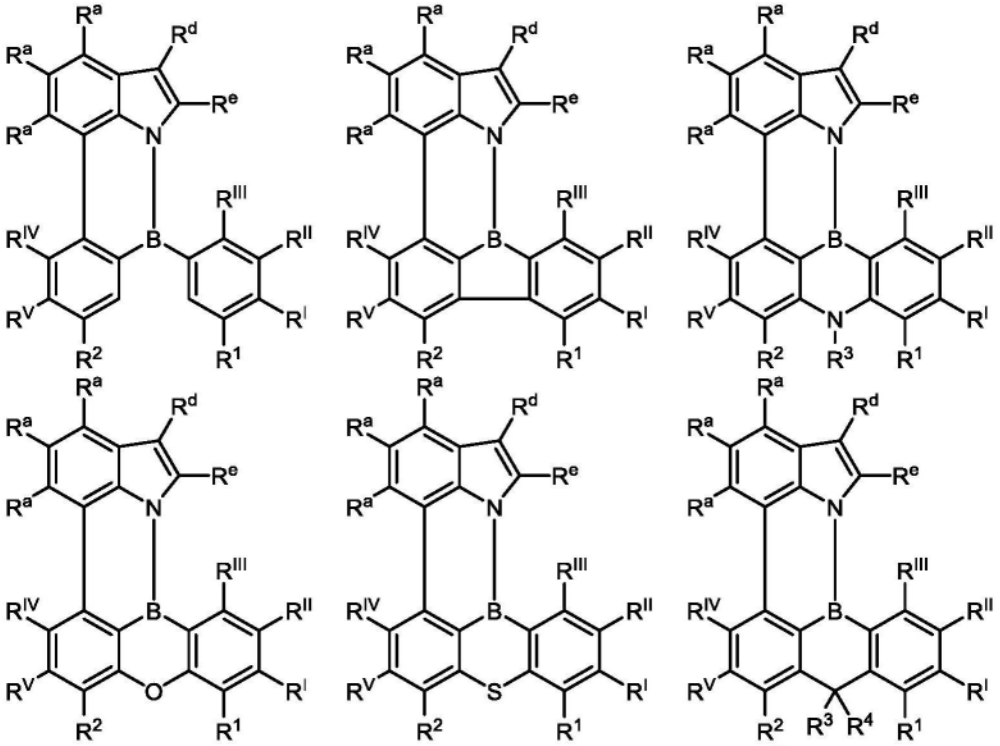
[0135] 在另一优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式I的结构或由式I的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3并且R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系，则R^V与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0136] 在更优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式I的结构或由式I的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3并且R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系，则R^V与一个或更多个

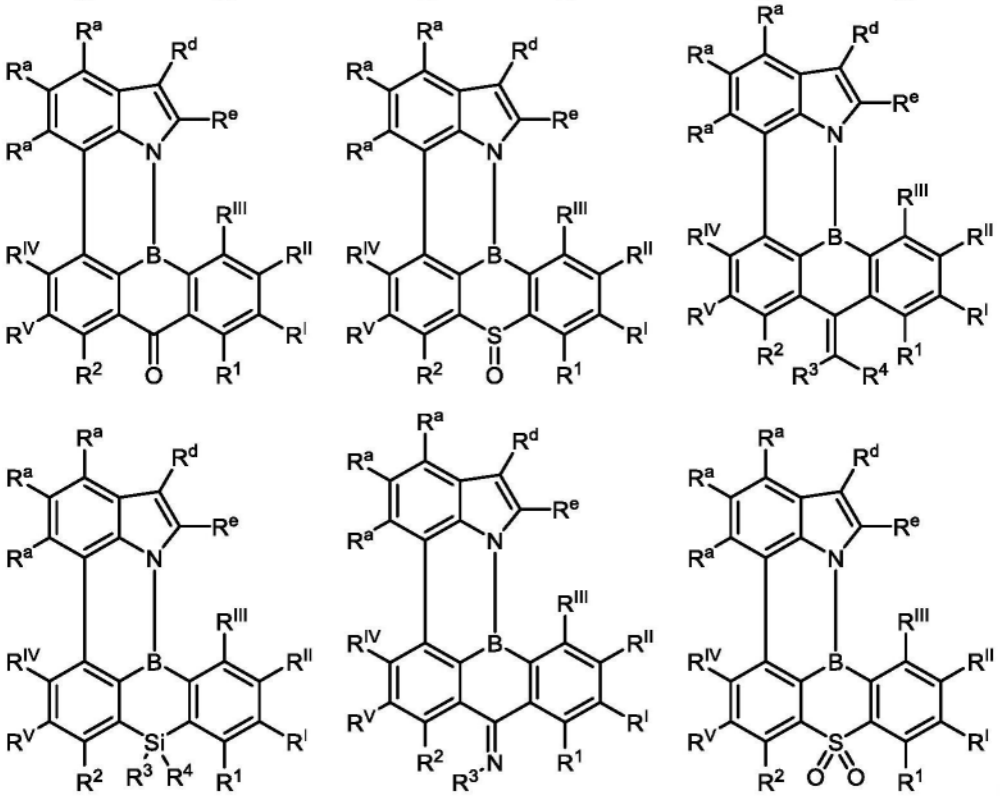
相邻的取代基R^2和/或R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0137] 在下面示出了针对具有不同的取代基X的n＝0和n＝1的示例：

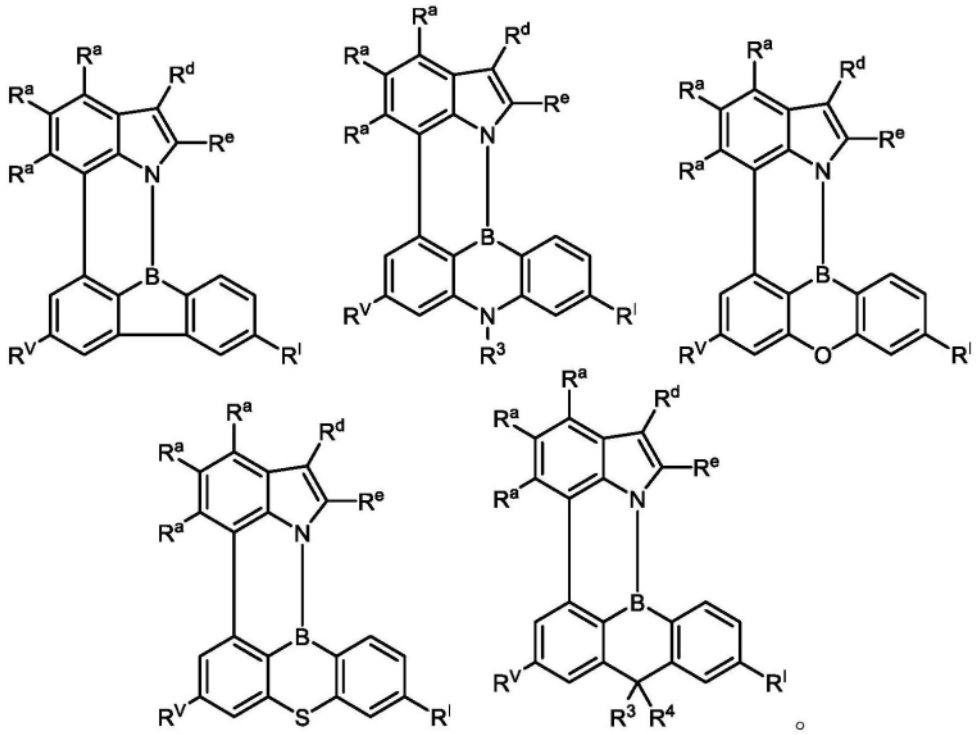
[0138]



[0139]



[0140] 根据发明的有机分子的附加的示例包括：

[0141] 

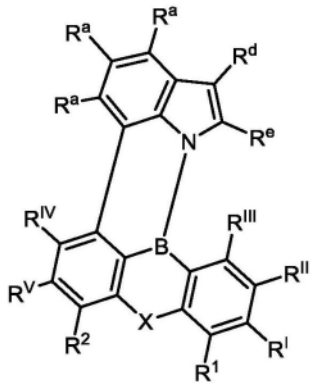
[0142] 在优选的实施例中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、NR^3、CR^3R^4、S和O组成的组。

[0143] 在更优选的实施例中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、NR^3、S和O组成的组。

[0144] 在特定实施例中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键和NR^3组成的组。

[0145] 在发明的一个实施例中，R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；Me；^{i}Pr；^{t}Bu；CN；CF_3；Ph，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组；吡啶基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组；嘧啶基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组；咔唑基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组；三嗪基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组；以及$N(Ph)_2$。

[0146] 在发明的一个实施例中，有机分子包括式II的结构或由式II的结构组成：

[0147] 

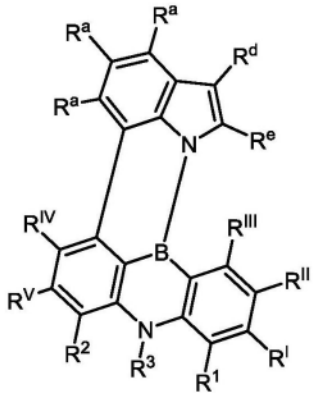
式 II。

[0148] 在发明的优选的实施例中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、NR^3和O组成的组。

[0149] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式II的结构或由式II的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3并且R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系，则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0150] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式II的结构或由式II的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3并且R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系，则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个相邻的取代基R^2和/或R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0151] 在发明的一个实施例中，有机分子包括式II-1的结构或由式II-1的结构组成：

[0152] 

式 II-1，

[0153] 其中，R^3选自于由以下组成的组：C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{57}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0154] 在发明的一个实施例中，有机分子包括式II-1的结构或由式II-1的结构组成，其中，R^3选自于由以下组成的组：C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{57}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0155] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括式II-1的结构或由式II-1的结构组成，其中，R^3是可选地取代有一个或更多个取代基R^5的C_6-C_{18}芳基。

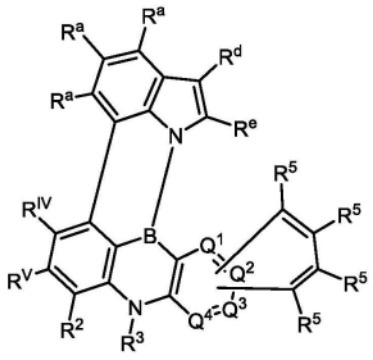
[0156] 在发明的另一实施例中，有机分子包括式II-1的结构或由式II-1的结构组成，其中，R^3是可选地取代有一个或更多个取代基R^6的C_6-C_{18}芳基。

[0157] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式II-1的结构或由式II-1的结构组成，且前提条件是如果R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系，则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0158] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式II-1的结构或由式II-1的结构组成，且前提条件是如果R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系，则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个相邻的取代基R^2和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0159] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括式II-1a的结构或由式II-1a的结构组

成：

[0160] 

式 II-1a，

[0161] 其中，R^3是可选地取代有一个或更多个取代基R^5的C_6-C_{18}芳基；

[0162] Q^1选自于由C和CR^{III}组成的组；

[0163] Q^2选自于由C和CR^{II}组成的组；

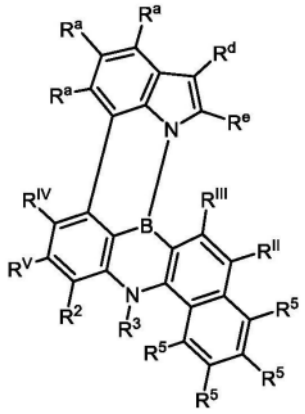
[0164] Q^3选自于由C和CR^{I}组成的组；

[0165] Q^4选自于由C和CR^{1}组成的组；

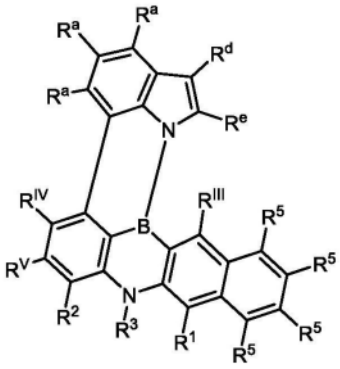
[0166] 其中，选自于由Q^2和Q^3组成的组中的至少一个取代基是C；

[0167] 如果选自于由Q^2和Q^3组成的组中的恰好一个(即，一个且仅一个)取代基是C，则选自于由Q^1和Q^4组成的组中的恰好一个取代基是C(并且另一个对应地是CR^{III}和CR^{1})。

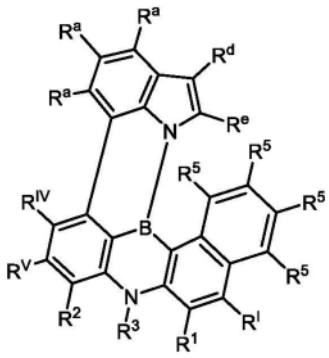
[0168] 这意味着式II-1a的结构由以下三种结构式II-1aa、式II-1ab和式II-1ac构成：

[0169] 

式 II-1aa



式 II-1ab

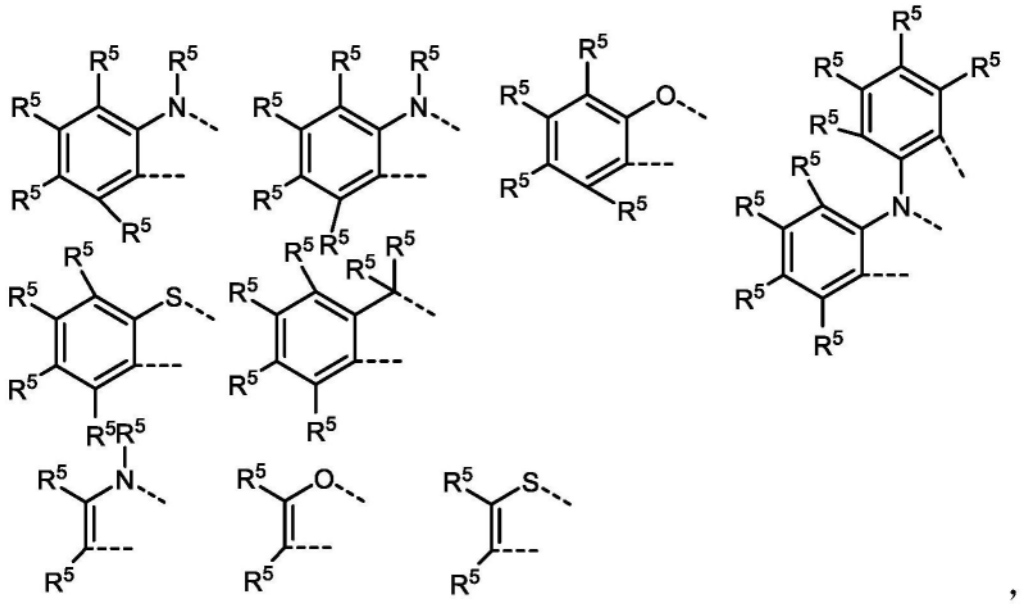


式 II-1ac。

[0170] 在发明的更优选的实施例中，有机分子包括式II-1a的结构或由式II-1a的结构组成，其中，选自于由R^2、R^V和R^{IV}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^2、R^V和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0171] 在发明的更优选的实施例中，有机分子包括式II-1a的结构或由式II-1a的结构组成，其中，至少一个取代基R^V与一个或更多个相邻的取代基R^2和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

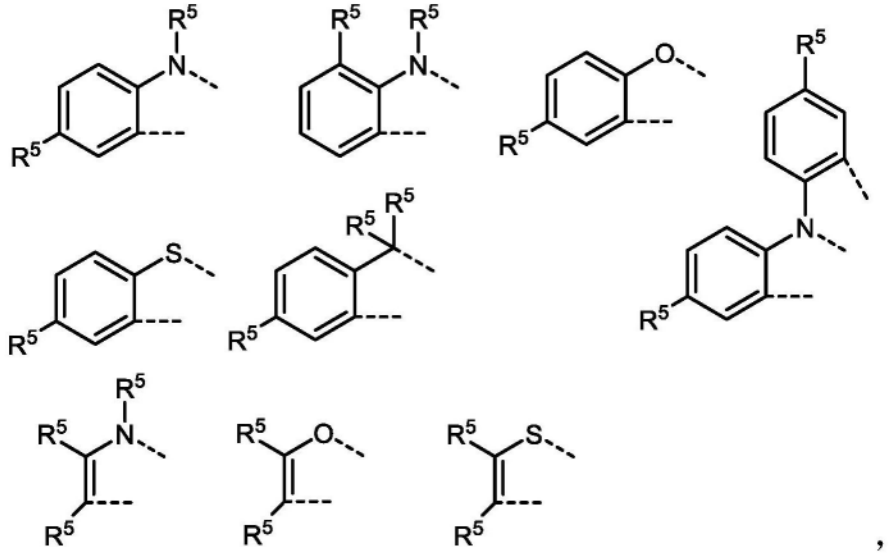
[0172] 在发明的更优选的实施例中，有机分子包括式II-1a的结构或由式II-1a的结构组成，其中，选自于由R^2、R^V和R^{IV}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^2、R^V和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，环体系选自于以下组：

[0173] 

[0174] 其中，每条虚线是连接点。

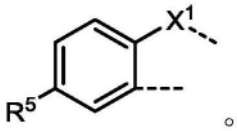
[0175] 在优选的实施例中，连接点定位为彼此相邻。这意味着R^2优选地与R^V形成环体系；R^V优选地与R^2和/或R^{IV}形成环体系，并且R^{IV}优选地与R^V形成环体系。

[0176] 在发明的更优选的实施例中，有机分子包括式II-1a的结构或由式II-1a的结构组成，其中，选自于由R^2、R^V和R^{IV}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^2、R^V和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，环体系选自于以下组：

[0177] 

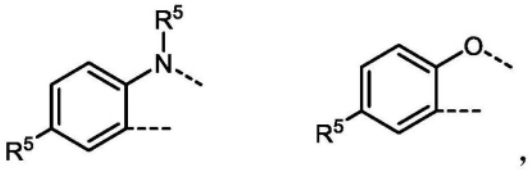
[0178] 其中，每条虚线是连接点。

[0179] 在发明的甚至更优选的实施例中，有机分子包括式II-1a的结构或由式II-1a的结构组成，其中，选自于由R^2、R^V和R^{IV}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^2、R^V和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，环体系选自于以下组：

[0180] 

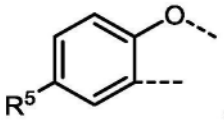
[0181] 其中，X^1是S、O或NR^5。

[0182] 在发明的甚至更优选的实施例中，有机分子包括式II-1a的结构或由式II-1a的结构组成，其中，选自于由R^2、R^V和R^{IV}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^2、R^V和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系，其中，环体系选自于以下组：

[0183] 

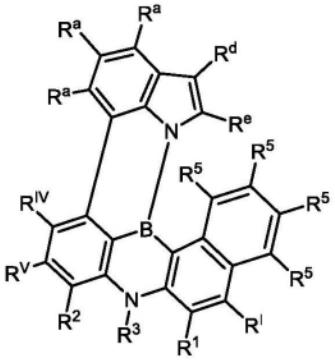
[0184] 其中，每条虚线是连接点。

[0185] 在发明的特定实施例中，有机分子包括式II-1a的结构或由式II-1a的结构组成，其中，选自于由R^2、R^V和R^{IV}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^2、R^V和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，环体系选自于以下组：

[0186] 

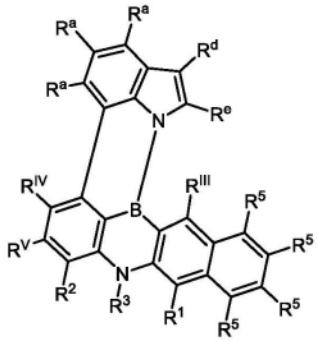
[0187] 其中，每条虚线是连接点。

[0188] 在优选的实施例中，有机分子包括式II-1ac的结构或由式II-1ac的结构组成：

[0189] 

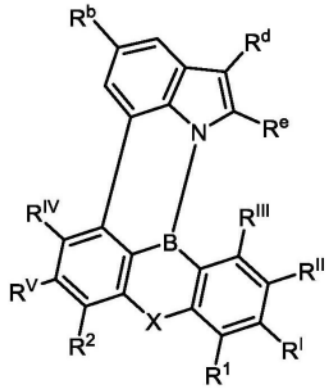
式 II-1ac。

[0190] 在另一实施例中，有机分子包括式II-1ab的结构或由式II-1ab的结构组成：

[0191] 

式 II-1ab。

[0192] 在发明的一个实施例中，有机分子包括式IIa的结构或由式IIa的结构组成：

[0193] 

式 IIa，

[0194] 其中，

[0195] R^b在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；$Si(R^5)_3$；$B(OR^5)_2$；OSO_2R^5；CF_3；CN；F；Br；I；C_1-C_{40}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{40}烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{40}硫代烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{40}烯基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{40}炔基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{60}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{57}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；

[0196] 除此之外，适用上述定义。

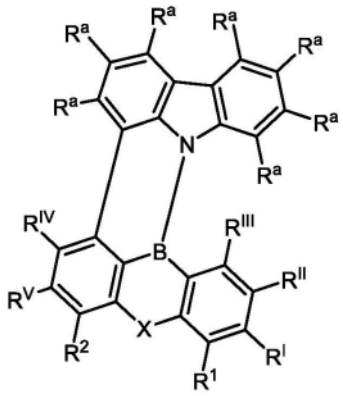
[0197] 在发明的又一实施例中，R^b在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；Me；^{i}Pr；^{t}Bu；CN；CF_3；Ph，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组；吡啶基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述

取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组;咔唑基,可选地取代有一个或更多个取代基,所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组;三嗪基,可选地取代有一个或更多个取代基,所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组;以及$N(Ph)_2$。

[0198] 在发明的又一实施例中,R^b在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:Me;^{i}Pr;^{t}Bu;CN;CF_3;Ph,可选地取代有一个或更多个取代基,所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组;吡啶基,可选地取代有一个或更多个取代基,所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组;咔唑基,可选地取代有一个或更多个取代基,所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组;三嗪基,可选地取代有一个或更多个取代基,所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组;以及$N(Ph)_2$。

[0199] 在优选的实施例中,发明的有机发光分子包括式IIa的结构或由式IIa的结构组成,且前提条件是如果X是NR^3并且R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系,则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0200] 在发明的优选的实施例中,有机分子包括式III的结构或由式III的结构组成:

[0201] 

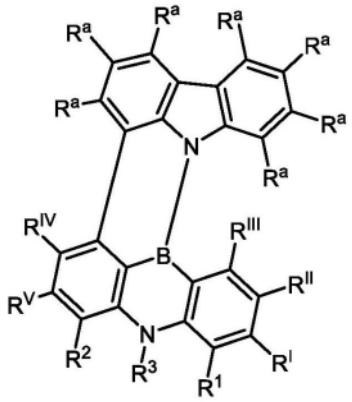
式 III,

[0202] 其中,取代基R^a和R^5彼此独立地可选地与一个或更多个取代基R^a和R^5形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系;并且

[0203] 其中,取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地可选地与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0204] 在优选的实施例中,发明的有机发光分子包括式III的结构或由式III的结构组成,且前提条件是如果X是NR^3,则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0205] 在发明的优选的实施例中,有机分子包括式III-1的结构或由式III-1的结构组成:

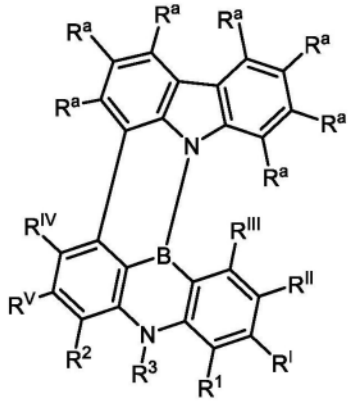
[0206] 

式 III-1，

[0207] 其中，R^3是可选地取代有一个或更多个取代基R^6的C_6-C_{60}芳基。

[0208] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式III-1的结构或由式III-1的结构组成，其中，R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0209] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括式III-2的结构或由式III-2的结构组成：

[0210] 

[0211] 式 III-2，

[0212] 其中，R^3是可选地取代有一个或更多个取代基R^5的C_6-C_{18}芳基。

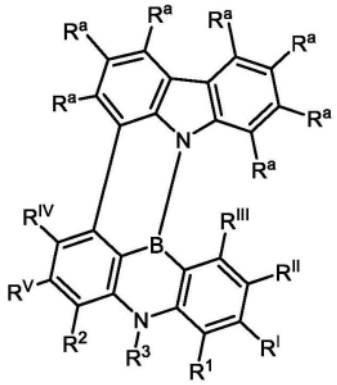
[0213] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括式III-2的结构或由式III-2的结构组成，其中，R^3是可选地取代有一个或更多个取代基R^6的C_6-C_{18}芳基，

[0214] 并且R^V选自于由以下组成的组：C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及$N(R^5)_2$。

[0215] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式III-2的结构或由式III-2的结构组成，其中，R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0216] 在优选的实施例中，有机分子包括式III-2的结构或由式III-2的结构组成，其中，R^V是$N(C_6$-C_{18}芳基$)_2$。

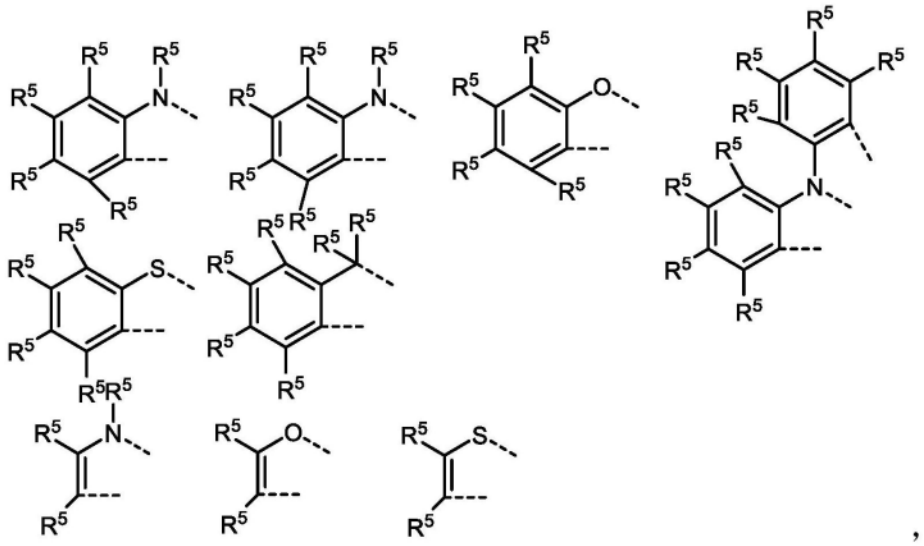
[0217] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括式III-2a的结构或由式III-2a的结构组成：

[0218] 

式 III-2a，

[0219] 其中，

[0220] 选自于由R^1、R^2、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，环体系选自于以下组：

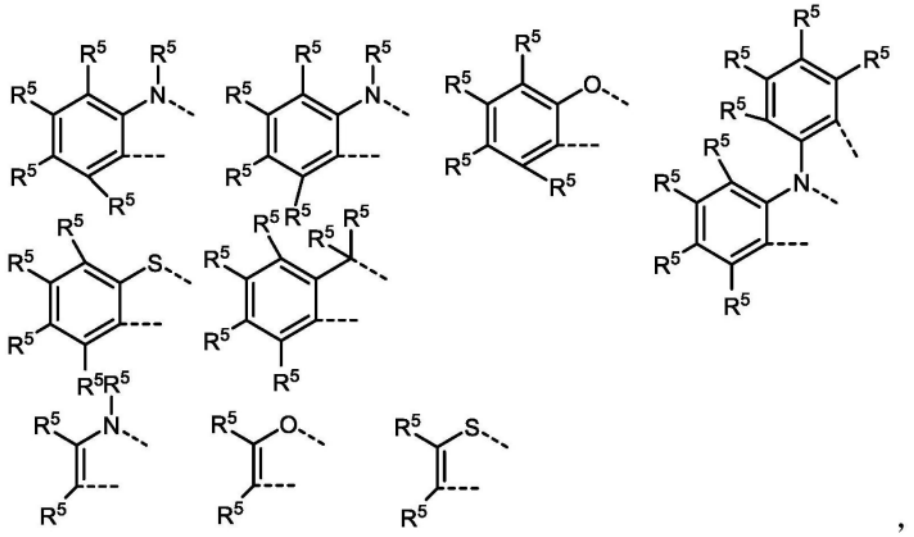
[0221] 

，

[0222] 其中，每条虚线是连接点。

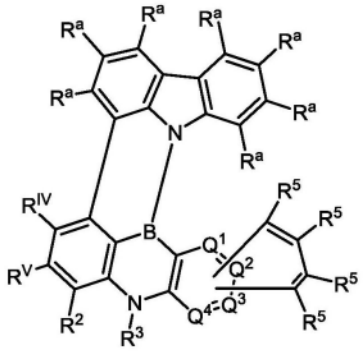
[0223] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括式III-2a的结构或由式III-2a的结构组成，其中，R^3是可选地取代有一个或更多个取代基R^5的C_6-C_{18}芳基，并且

[0224] 其中，选自于由R^1、R^2、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，环体系选自于以下组：

[0225] 

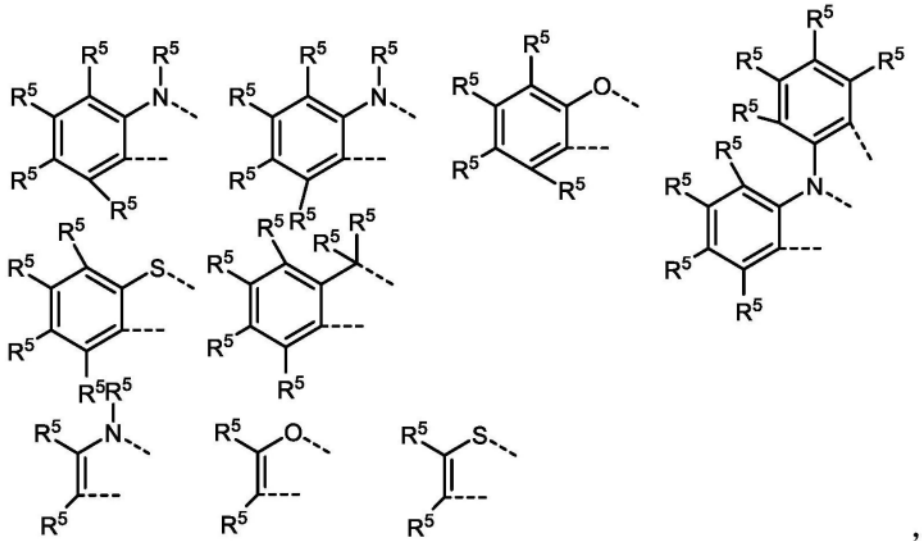
[0226] 其中，每条虚线是连接点。

[0227] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括式III-2b的结构或由式III-2b的结构组成：

[0228] 

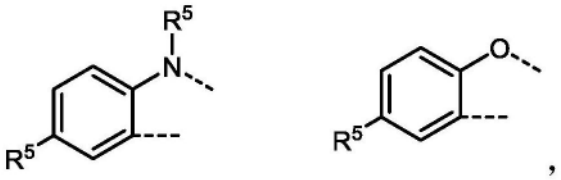
式 III-2b。

[0229] 在发明的更优选的实施例中，有机分子包括式III-2b的结构或由式III-2b的结构组成，其中，选自于由R^2、R^V和R^{IV}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^2、R^V和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系，其中，环体系选自于以下组：

[0230] 

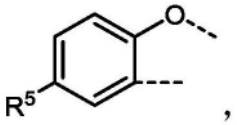
[0231] 其中,每条虚线是连接点。

[0232] 在发明的甚至更优选的实施例中,有机分子包括式III-2b的结构或由式III-2b的结构组成,其中,选自于由R^2、R^V和R^{IV}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^2、R^V和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系,其中,环体系选自于以下组:

[0233] 

[0234] 其中,每条虚线是连接点。

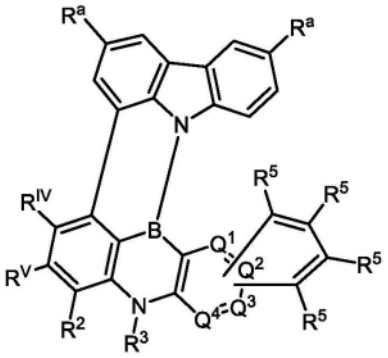
[0235] 在发明的特定实施例中,有机分子包括式III-2b的结构或由式III-2b的结构组成,其中,选自于由R^2、R^V和R^{IV}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^2、R^V和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系,其中,环体系选自于以下组:

[0236] 

[0237] 其中,每条虚线是连接点。

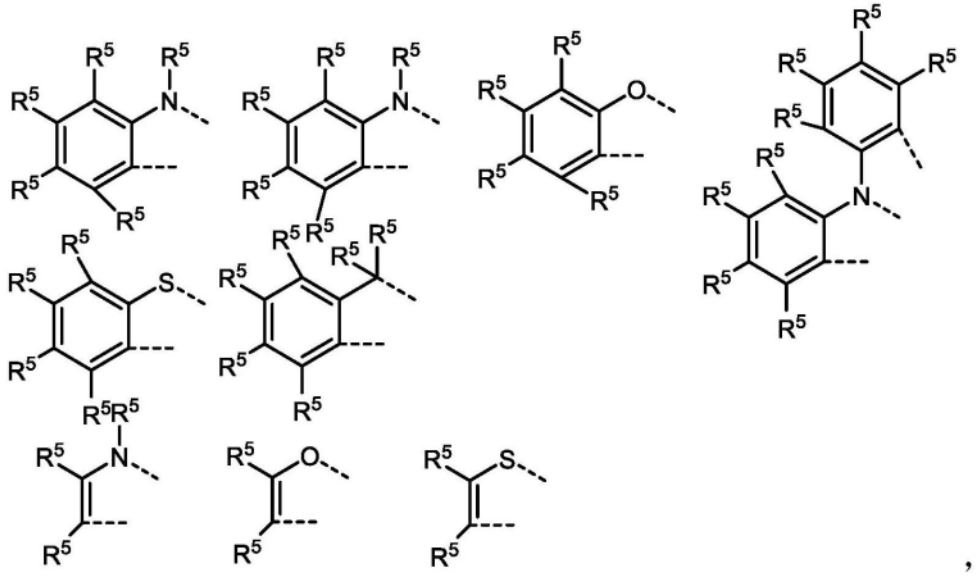
[0238] 在发明的一个实施例中,有机分子/低聚物包括式III-2b的结构或由式III-2b的结构组成,其中,至少一个R^a与氢不同。

[0239] 在发明的优选的实施例中,有机分子包括式III-2c的结构或由式III-2c的结构组成:

[0240] 

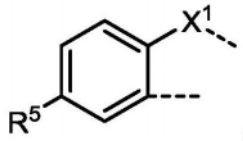
式 III-2c。

[0241] 在发明的更优选的实施例中,有机分子包括式III-2c的结构或由式III-2c的结构组成,其中,选自于由R^2、R^V和R^{IV}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^2、R^V和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系,其中,环体系选自于以下组:

[0242] 

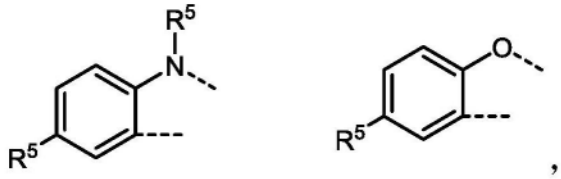
[0243] 其中，每条虚线是连接点。

[0244] 在发明的甚至更优选的实施例中，有机分子包括式III-2c的结构或由式III-2c的结构组成，其中，选自于由R^2、R^V和R^{IV}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^2、R^V和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，环体系选自于以下组：

[0245] 

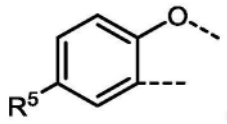
[0246] 其中，每条虚线是连接点。

[0247] 在发明的甚至更优选的实施例中，有机分子包括式III-2c的结构或由式III-2c的结构组成，其中，选自于由R^2、R^V和R^{IV}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^2、R^V和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，环体系选自于以下组：

[0248] 

[0249] 其中，每条虚线是连接点。

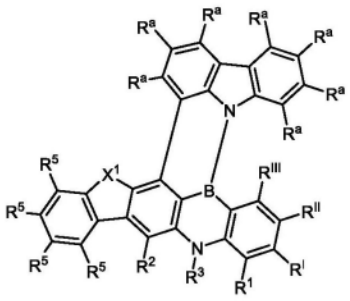
[0250] 在发明的特定实施例中，有机分子包括式III-2c的结构或由式III-2c的结构组成，其中，选自于由R^2、R^V和R^{IV}组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^2、R^V和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合的环体系，其中，环体系选自于以下组：

[0251] 

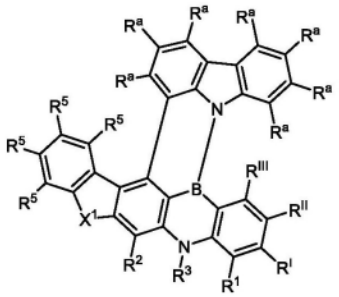
[0252] 其中，每条虚线是连接点。

[0253] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式III-2c的结构或由式III-2c的结构组成，其中，至少一个R^a与氢不同。

[0254] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括式III-2d-I、式III-2d-II、式III-2d-III和式III-2d-IV的结构，或者由式III-2d-I、式III-2d-II、式III-2d-III和式III-2d-IV的结构组成：

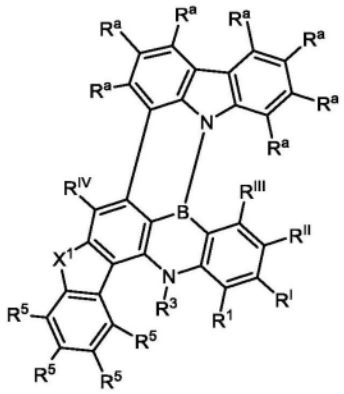


式 III-2d-I

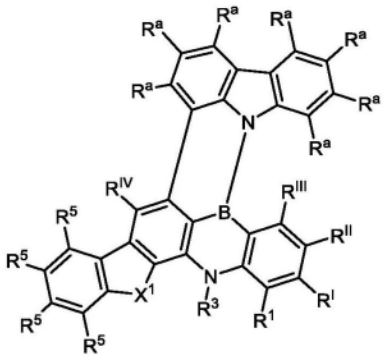


式 III-2d-II

[0255]



式 III-2d-III



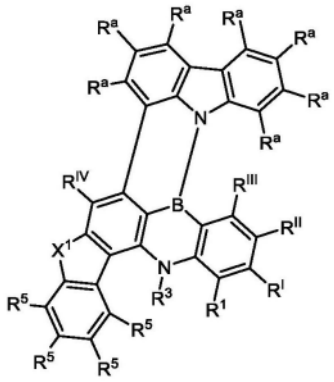
式 III-2d-IV。

[0256] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式III-2d-I、式III-2d-II、式III-2d-III和式III-2d-IV的结构，或者由式III-2d-I、式III-2d-II、式III-2d-III和式III-2d-IV的结构组成，其中，至少一个R^a与氢不同。

[0257] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式III-2d-I、式III-2d-II、式III-2d-III和式III-2d-IV的结构，或者由式III-2d-I、式III-2d-II、式III-2d-III和式III-2d-IV的结构组成，其中，X^1是O。

[0258] 在发明的更优选的实施例中，有机分子包括式III-2d-III的结构或由式III-2d-III的结构组成：

[0259]

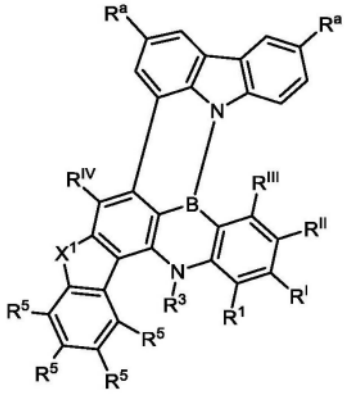


式 III-2d-III。

[0260] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式III-2d-III的结构或由式III-2d-III的结构组成，其中，至少一个R^a与氢不同。

[0261] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式III-2d-III的结构或由式III-2d-III的结构组成，其中，X^1是O。

[0262] 在发明的更优选的实施例中，有机分子包括式III-2d-IIIa的结构或由式III-2d-IIIa的结构组成：

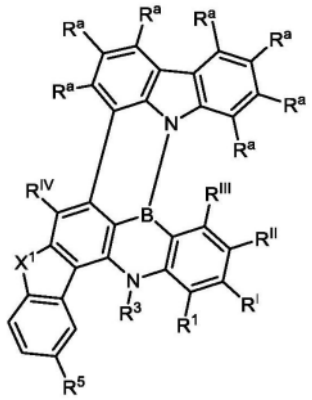
[0263] 

式 III-2d-IIIa。

[0264] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式III-2d-IIIa的结构或由式III-2d-IIIa的结构组成，其中，至少一个R^a与氢不同。

[0265] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式III-2d-IIIa的结构或由式III-2d-IIIa的结构组成，其中，X^1是O。

[0266] 在发明的更优选的实施例中，有机分子包括式III-2d-IIIb的结构或由式III-2d-IIIb的结构组成：

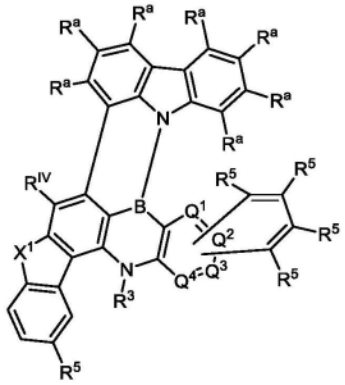
[0267] 

式 III-2d-IIIb。

[0268] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式III-2d-IIIb的结构或由式III-2d-IIIb的结构组成，其中，至少一个R^a与氢不同。

[0269] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式III-2d-IIIb的结构或由式III-2d-IIIb的结构组成，其中，X^1是O。

[0270] 在发明的特定实施例中，有机分子包括式III-2d-IIIc的结构或由式III-2d-IIIc的结构组成：

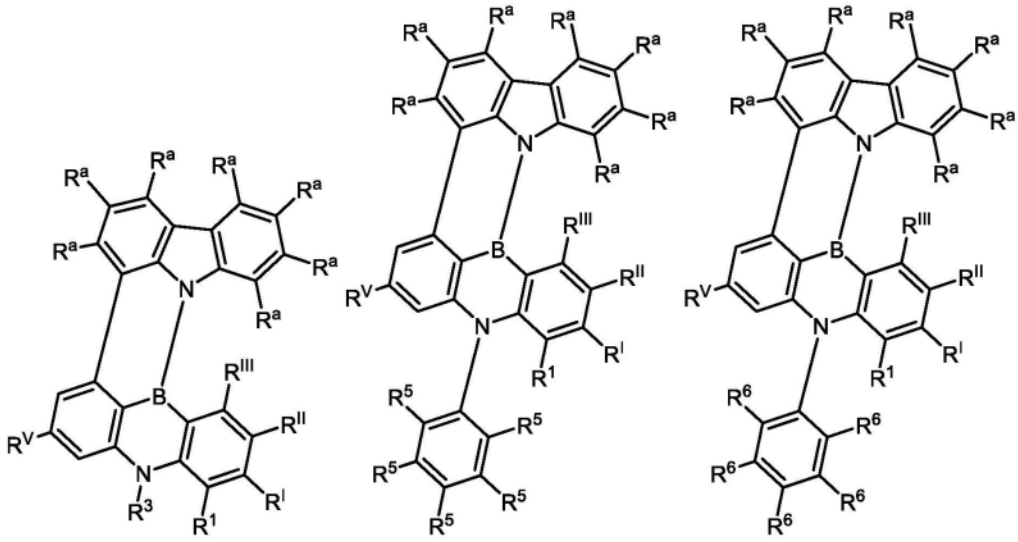
[0271] 

式 III-2d-IIIc。

[0272] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式III-2d-IIIc的结构或由式III-2d-IIIc的结构组成，其中，至少一个R^a与氢不同。

[0273] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式III-2d-IIIc的结构或由式III-2d-IIIc的结构组成，其中，X^1是O。

[0274] 在发明的另一优选的实施例中，有机分子包括式III-3、式III-4或式III-5的结构，或者由式III-3、式III-4或式III-5的结构组成：

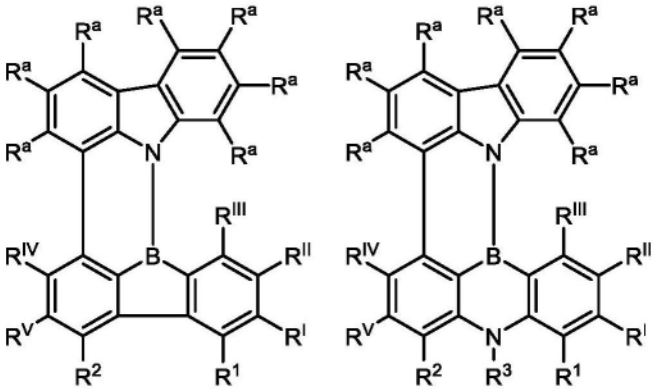
[0275] 

式 III-3 式 III-4 式 III-5。

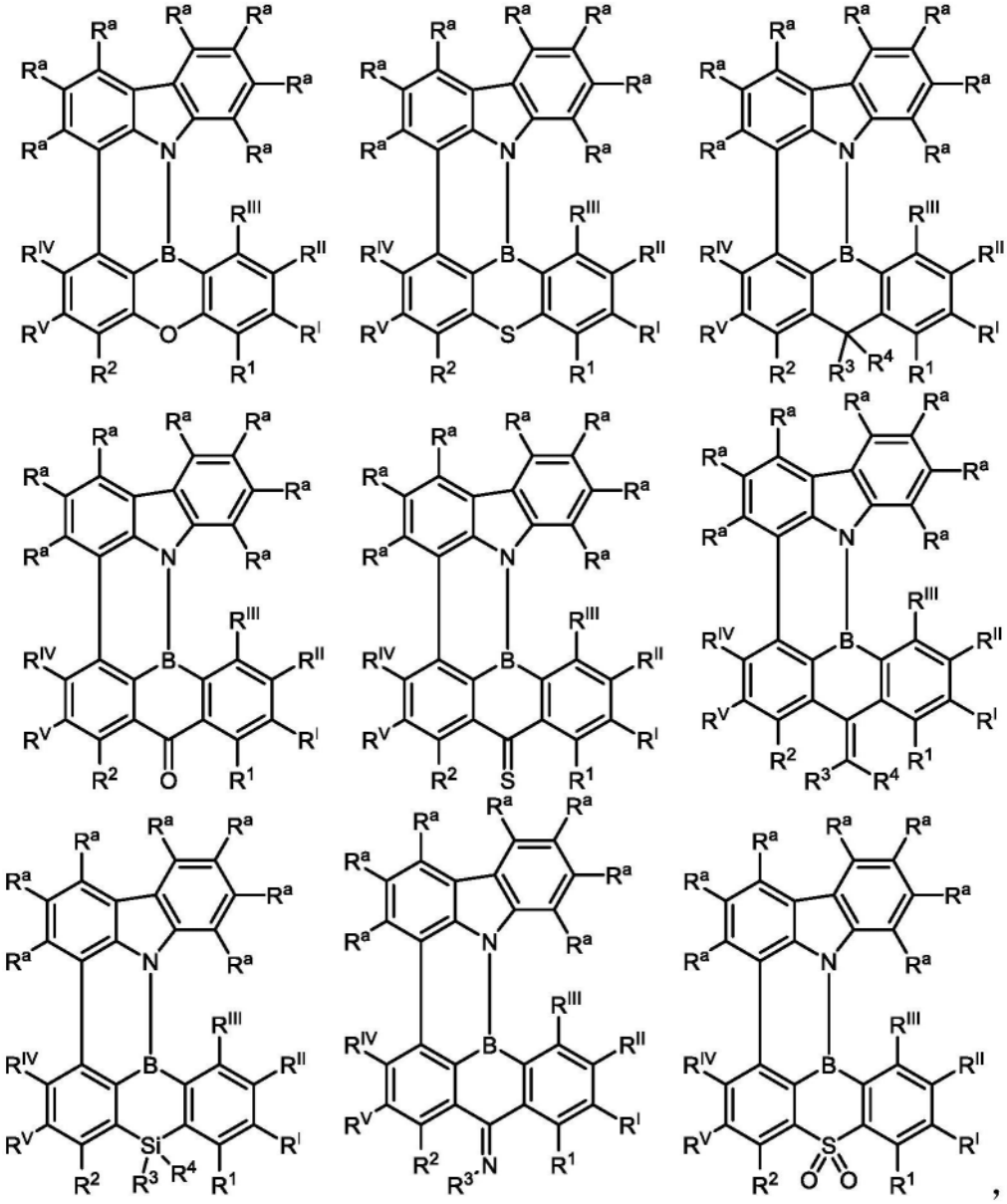
[0276] 在一个实施例中，有机分子包括式III-3、式III-4或式III-5的结构，或者由式III-3、式III-4或式III-5的结构组成，其中，R^V选自于由以下组成的组：OPh；CF_3；CN；F；C_1-C_5烷基，其中，一个或更多个氢原子可选地彼此独立地被氘、CN、CF_3或F取代；C_1-C_5烷氧基，其中，一个或更多个氢原子可选地彼此独立地被氘、CN、CF_3或F取代；C_1-C_5硫代烷氧基，其中，一个或更多个氢原子可选地彼此独立地被氘、CN、CF_3或F取代；C_2-C_5烯基，其中，一个或更多个氢原子可选地彼此独立地被氘、CN、CF_3或F取代；C_2-C_5炔基，其中，一个或更多个氢原子可选地彼此独立地被氘、CN、CF_3或F取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基；C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基；N(C_6-C_{18}芳基)$_2$；N(C_2-C_{17}杂芳基)$_2$；以及N(C_2-C_{17}杂芳基)(C_6-C_{18}芳基)。

[0277] 在下面中示出了针对式III的不同的示例性实施例：

[0278]



[0279]

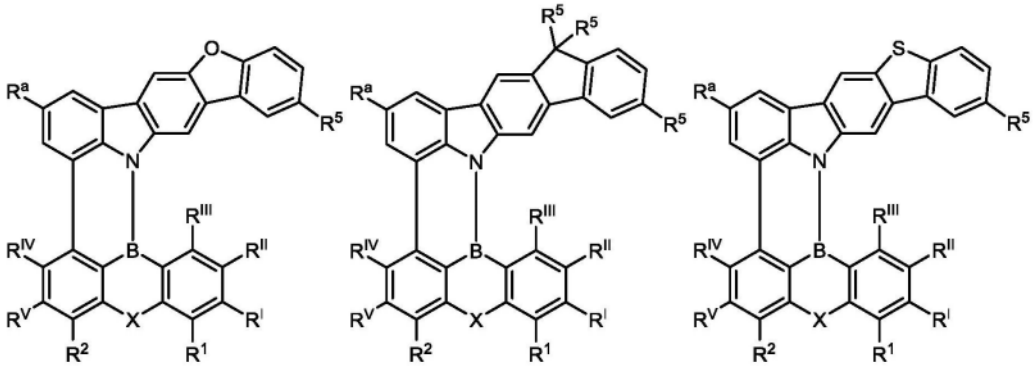


[0280] 其中，取代基R^a和R^5彼此独立地可选地与一个或更多个取代基R^a和R^5形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系；

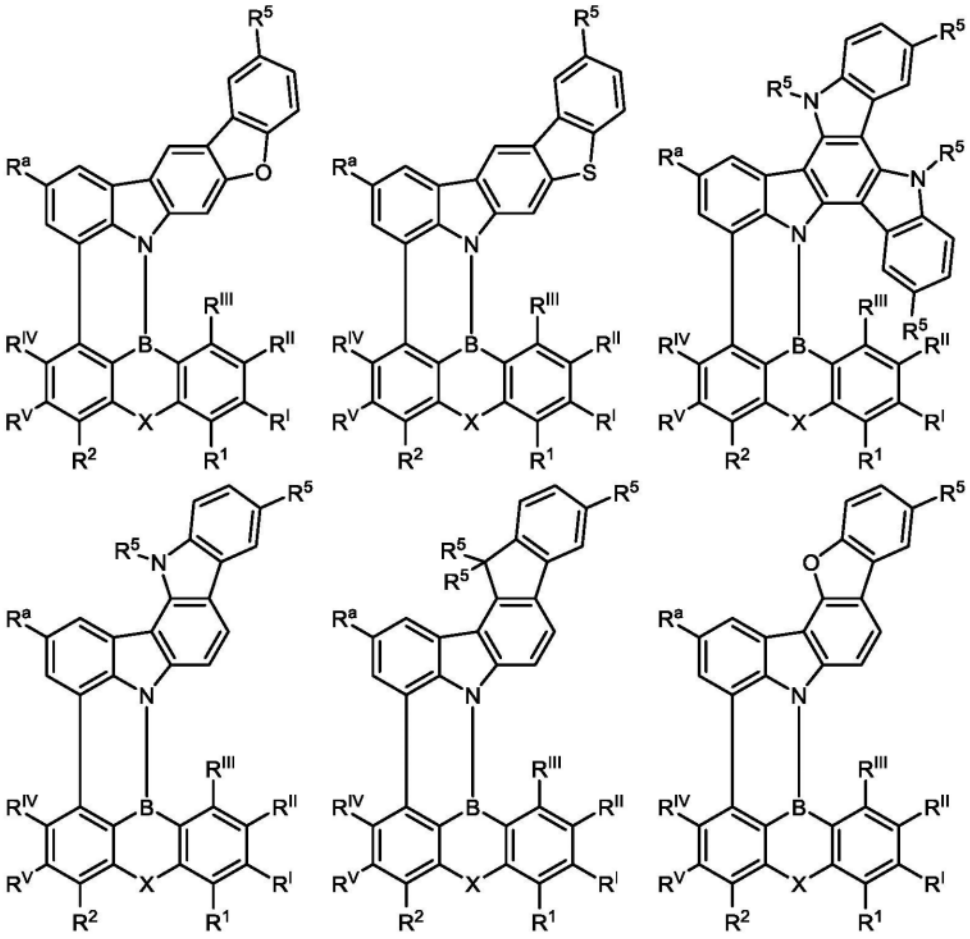
[0281] 并且其中，除此之外，适用上述定义中的任何一个。

[0282] 有机分子的附加的示例：

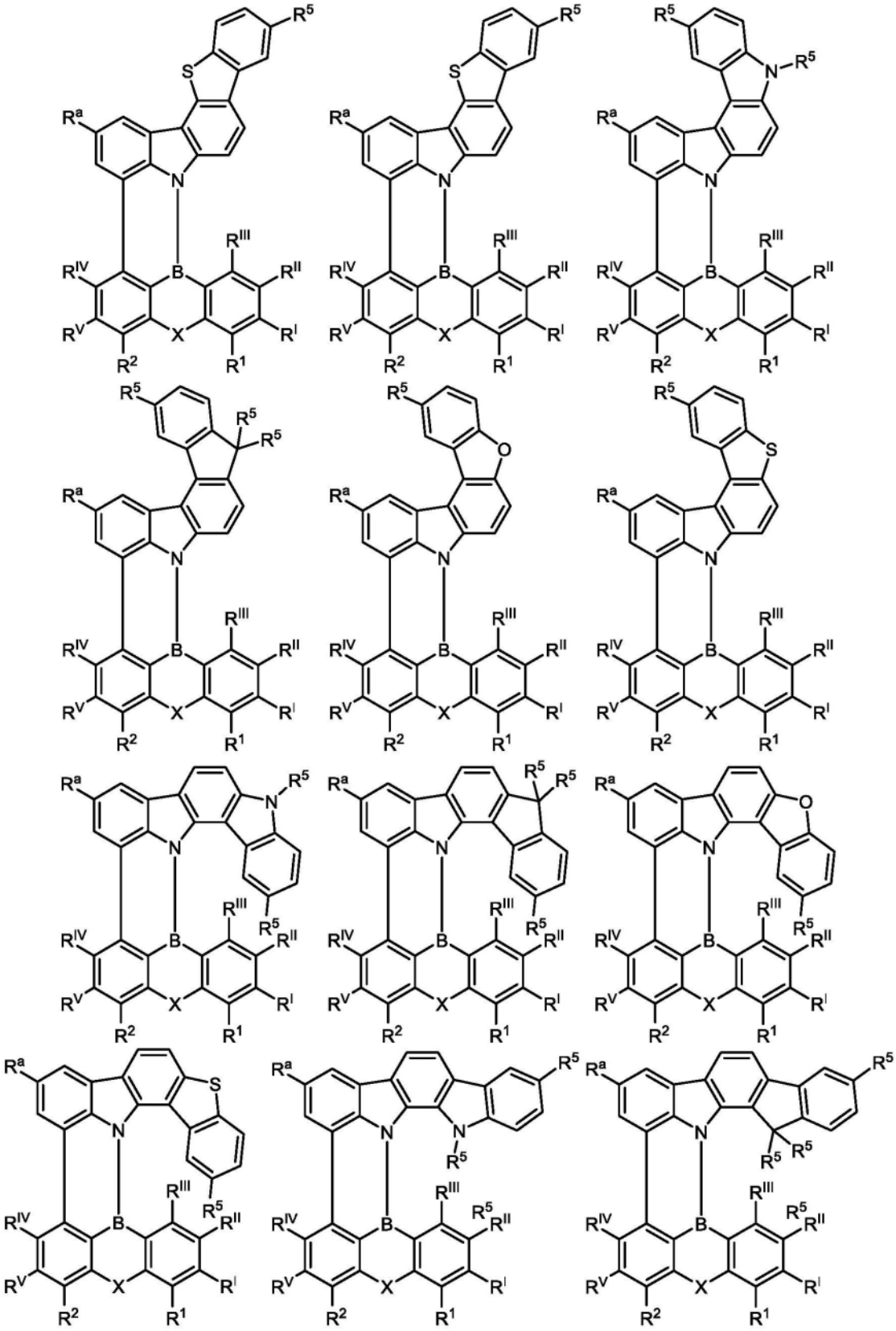
[0283]

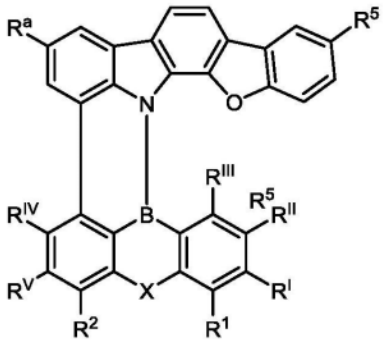
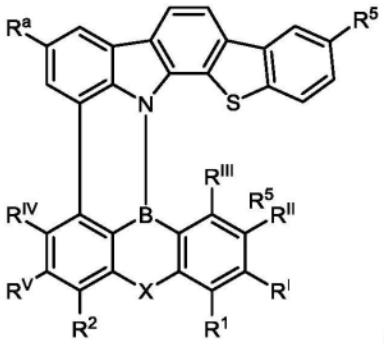


[0284]



[0285]

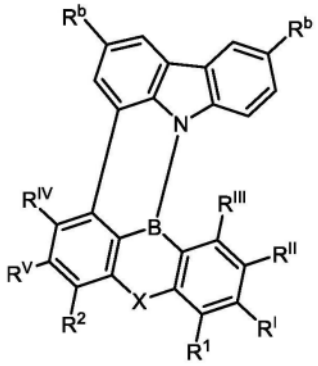


[0286]  ,

[0287] 其中,适用上述定义中的任何一个。

[0288] 在一个实施例中,R^a和R^5在每次出现时彼此独立地选自于由氢(H)、甲基(Me)、异丙基($CH(CH_3)_2$)(^iPr)、叔丁基(^tBu)、苯基(Ph)、CN、CF_3和二苯胺基(NPh_2)组成的组。

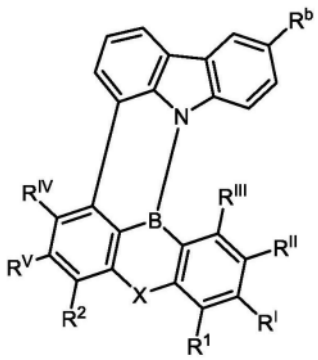
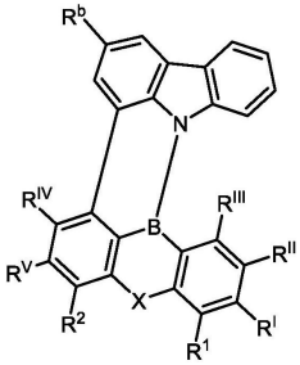
[0289] 在发明的优选的实施例中,有机分子包括式IIIa的结构或由式IIIa的结构组成:

[0290] 

式 IIIa。

[0291] 在优选的实施例中,发明的有机发光分子包括式IIIa的结构或由式IIIa的结构组成,且前提条件是如果X是NR^3,则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

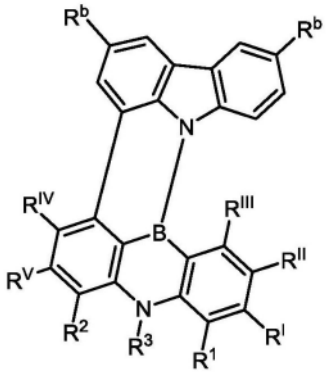
[0292] 在发明的优选的实施例中,有机分子包括选自于由式IIIa-1和式IIIa-2组成的组中的结构,或者由选自于由式IIIa-1和式IIIa-2组成的组中的结构组成:

[0293]  

式 IIIa-1 式 IIIa-2。

[0294] 在优选的实施例中,发明的有机发光分子包括式IIIa-1或式IIIa-2的结构,或者由式IIIa-1或式IIIa-2的结构组成,且前提条件是如果X是NR^3,则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

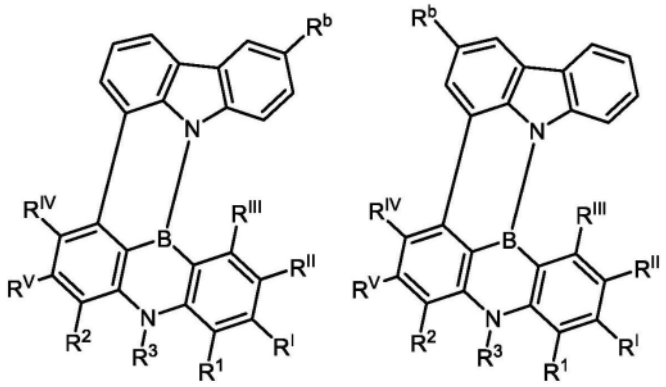
[0295] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括式IIIb的结构或由式IIIb的结构组成：

[0296] 

式 IIIb。

[0297] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIb的结构或由式IIIb的结构组成，其中，R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

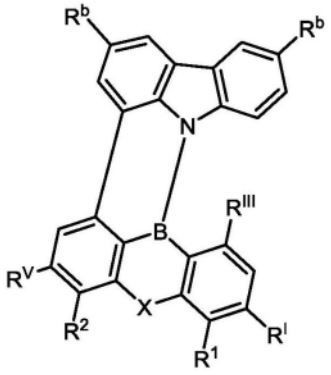
[0298] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括选自于由式IIIb-1和式IIIb-2组成的组中的结构，或者由选自于由式IIIb-1和式IIIb-2组成的组中的结构组成：

[0299] 

式 IIIb-1 式 IIIb-2。

[0300] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIb-1或式IIIb-2的结构，或者由式IIIb-1或式IIIb-2的结构组成，其中，R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0301] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括式IIIc的结构或由式IIIc的结构组成：

[0302] 

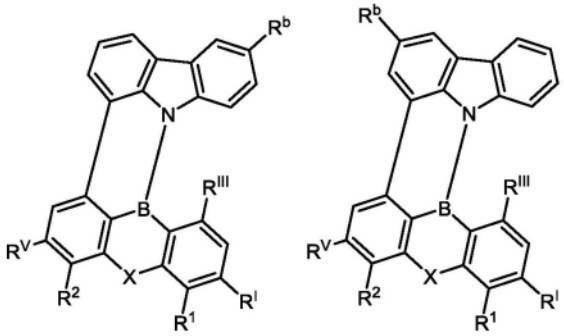
式 IIIc。

[0303] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIc的结构或由式IIIc的结构组

成，且前提条件是如果X是NR^3，则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3和R^5形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0304] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括选自于由式IIIc-1和式IIIc-2组成的组中的结构，或者由选自于由式IIIc-1和式IIIc-2组成的组中的结构组成：

[0305]

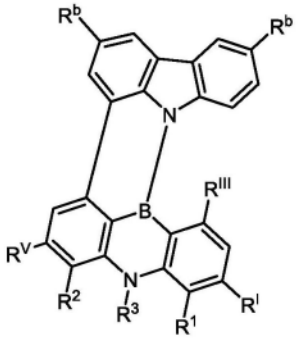


式 IIIc-1 式 IIIc-2。

[0306] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIc-1或式IIIc-2的结构，或者由式IIIc-1或式IIIc-2的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3，则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3和R^5形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0307] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括式IIId的结构或由式IIId的结构组成：

[0308]

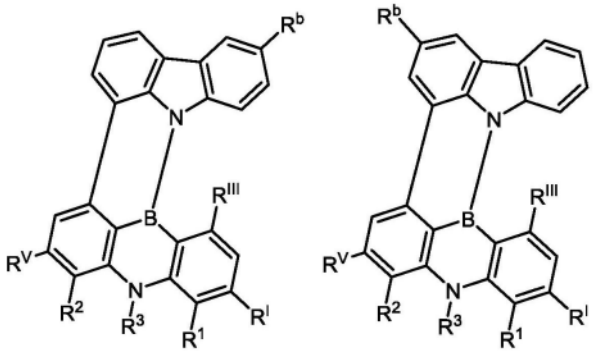


式 IIId。

[0309] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式IIId的结构或由式IIId的结构组成，其中，R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3和R^5形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0310] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括选自于由式IIId-1和式IIId-2组成的组中结构，或者由选自于由式IIId-1和式IIId-2组成的组中结构组成：

[0311]

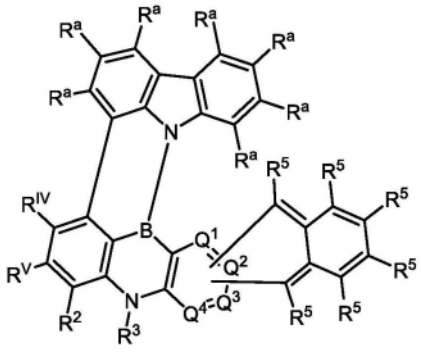


式 IIId-1 式 IIId-2。

[0312] 在优选的实施例中，R^V选自于由以下组成的组：C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及$N(R^5)_2$。

[0313] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式IIId-1或式IIId-2的结构，或者由式IIId-1或式IIId-2的结构组成，其中，R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3和R^5形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0314] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括式IIIe-0的结构或由式IIIe-0的结构组成：

[0315] 

式 IIIe-0，

[0316] 其中，

[0317] Q^1选自于由C和CR^{III}组成的组；

[0318] Q^2选自于由C和CR^{II}组成的组；

[0319] Q^3选自于由C和CR^I组成的组；

[0320] Q^4选自于由C和CR^1组成的组；

[0321] 其中，选自于由Q^2和Q^3组成的组中的至少一个取代基是C；

[0322] 如果选自于由Q^2和Q^3组成的组中的恰好一个取代基是C，则选自于由Q^1和Q^4组成的组中的恰好一个取代基是C，并且另一个是CR^{III}或CR^1。

[0323] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-0的结构或由式IIIe-0的结构组成，其中，R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0324] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-0的结构或由式IIIe-0的结构组成，其中，R^V与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0325] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-0的结构或由式IIIe-0的结构组成，其中，选自于由R^1、R^2、R^{III}、R^{IV}和R^V组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和/或R^V形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0326] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-0的结构或由式IIIe-0的结构组成，其中，R^3彼此独立地选自于由以下组成的组：C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0327] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-0的结构或由式IIIe-0的结构组成，其中，R^3彼此独立地选自于由以下组成的组：C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个

取代基R^5。

[0328] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-0的结构或由式IIIe-0的结构组成，其中，Q^4是CR^1。

[0329] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-0的结构或由式IIIe-0的结构组成，其中，R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；SR^5；$Si(R^5)_3$；$B(OR^5)_2$；$B(R^5)_2$；OSO_2R^5；CF_3；CN；卤素；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{18}烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{18}硫代烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{18}烯基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{18}炔基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0330] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-0的结构或由式IIIe-0的结构组成，其中，R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0331] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-0的结构或由式IIIe-0的结构组成，其中，R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；以及C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

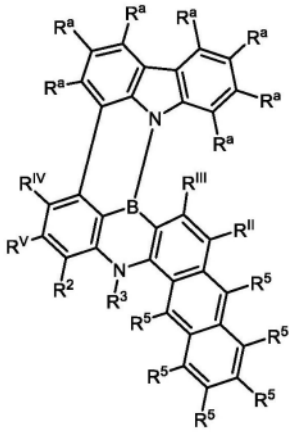
[0332] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-0的结构或由式IIIe-0的结构组成，其中，R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；$Si(R^5)_3$；$B(R^5)_2$；CF_3；CN；卤素；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；并且

[0333] R^5在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^6)_2$；OR^6；$Si(R^6)_3$；$B(R^6)_2$；CF_3；CN；F；Br；I；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，

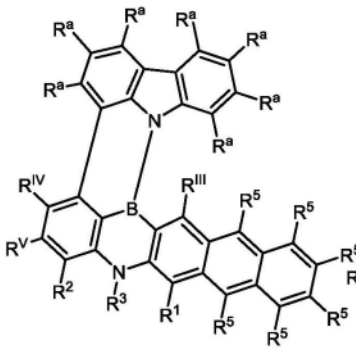
[0334] 其中，基团R^1、R^2、R^3、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}、R^5和R^V可选地彼此结合而形成可选地取代有

一个或更多个C_1-C_5烷基取代基、氘、卤素、CN或CF_3的芳环或杂芳环。

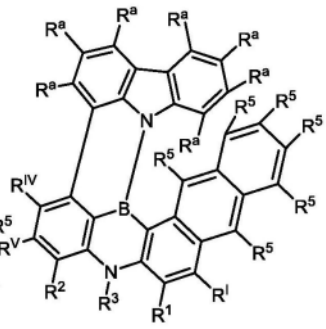
[0335] 这意味着式IIIe-0的结构由以下三种结构式IIIe-0a、式IIIe和式IIIe-0b构成：

[0336] 

式 IIIe-0a

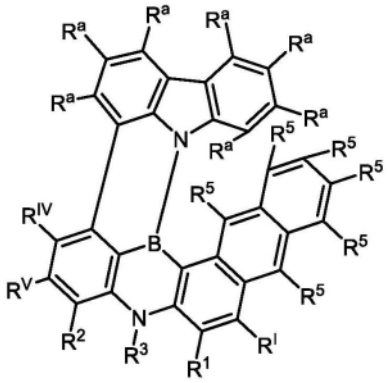


式 IIIe



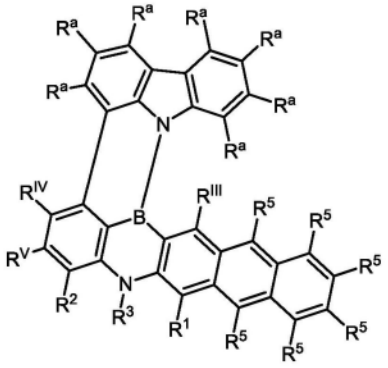
式 IIIe-0b。

[0337] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括式IIIe-0b的结构或由式IIIe-0b的结构组成：

[0338] 

式 IIIe-0b。

[0339] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括式IIIe的结构或由式IIIe的结构组成：

[0340] 

式 IIIe。

[0341] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe的结构或由式IIIe的结构组成，其中，R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0342] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe的结构或由式IIIe的结构组成，其中，R^V与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香

族和/或苯并稠合环体系。

[0343] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe的结构或由式IIIe的结构组成，其中，选自于由R^1、R^2、R^{III}、R^{IV}和R^V组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0344] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe的结构或由式IIIe的结构组成，其中，R^3彼此独立地选自于由以下组成的组：C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0345] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe的结构或由式IIIe的结构组成，其中，R^3彼此独立地选自于由以下组成的组：C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0346] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe的结构或由式IIIe的结构组成，其中，R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；SR^5；$Si(R^5)_3$；$B(OR^5)_2$；$B(R^5)_2$；OSO_2R^5；CF_3；CN；卤素；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{18}烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{18}硫代烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{18}烯基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{18}炔基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0347] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe的结构或由式IIIe的结构组成，其中，R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0348] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe的结构或由式IIIe的结构组成，其中，R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

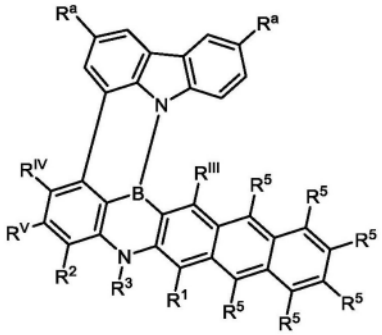
[0349] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe的结构或由式IIIe的结构组成，其中，R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；$Si(R^5)_3$；$B(R^5)_2$；CF_3；CN；卤素；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可

选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;并且

[0350] R^5在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;$N(R^6)_2$;OR^6;$Si(R^6)_3$;$B(R^6)_2$;CF_3;CN;F;Br;I;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^6、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,

[0351] 其中,基团R^1、R^2、R^3、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}、R^5和R^V可选地彼此结合而形成可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基、氘、卤素、CN或CF_3的芳环或杂芳环。

[0352] 在发明的优选的实施例中,有机分子包括式IIIe-2的结构或由式IIIe-2的结构组成:

[0353] 

式 IIIe-2。

[0354] 在一个实施例中,发明的有机发光分子包括式IIIe-2的结构或由式IIIe-2的结构组成,其中,R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0355] 在一个实施例中,发明的有机发光分子包括式IIIe-2的结构或由式IIIe-2的结构组成,其中,R^V与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0356] 在一个实施例中,发明的有机发光分子包括式IIIe-2的结构或由式IIIe-2的结构组成,其中,选自于由R^1、R^2、R^{III}、R^{IV}和R^V组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0357] 在一个实施例中,发明的有机发光分子包括式IIIe-2的结构或由式IIIe-2的结构组成,其中,R^3彼此独立地选自于由以下组成的组:C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0358] 在一个实施例中,发明的有机发光分子包括式IIIe-2的结构或由式IIIe-2的结构组成,其中,R^3彼此独立地选自于由以下组成的组:C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0359] 在一个实施例中,发明的有机发光分子包括式IIIe-2的结构或由式IIIe-2的结构组成,其中,R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;$N(R^5)_2$;OR^5;SR^5;$Si(R^5)_3$;$B(OR^5)_2$;$B(R^5)_2$;OSO_2R^5;CF_3;CN;卤素;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、Sn

$(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^5、P(=O)(R^5)、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_1-C_{18}烷氧基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、Si$(R^5)_2$、Ge$(R^5)_2$、Sn$(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^5、P(=O)(R^5)、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_1-C_{18}硫代烷氧基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、Si$(R^5)_2$、Ge$(R^5)_2$、Sn$(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^5、P(=O)(R^5)、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_2-C_{18}烯基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、Si$(R^5)_2$、Ge$(R^5)_2$、Sn$(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^5、P(=O)(R^5)、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_2-C_{18}炔基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、Si$(R^5)_2$、Ge$(R^5)_2$、Sn$(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^5、P(=O)(R^5)、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0360] 在一个实施例中,发明的有机发光分子包括式IIIe-2的结构或由式IIIe-2的结构组成,其中,R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

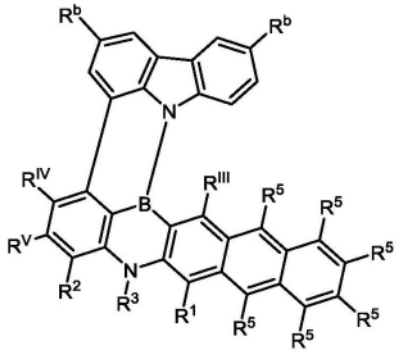
[0361] 在一个实施例中,发明的有机发光分子包括式IIIe-2的结构或由式IIIe-2的结构组成,其中,R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;以及C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0362] 在一个实施例中,发明的有机发光分子包括式IIIe-2的结构或由式IIIe-2的结构组成,其中,R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;N$(R^5)_2$;OR^5;Si$(R^5)_3$;B$(R^5)_2$;CF_3;CN;卤素;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、Si$(R^5)_2$、Ge$(R^5)_2$、Sn$(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^5、P(=O)(R^5)、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;并且

[0363] R^5在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;N$(R^6)_2$;OR^6;Si$(R^6)_3$;B$(R^6)_2$;CF_3;CN;F;Br;I;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、Si$(R^6)_2$、Ge$(R^6)_2$、Sn$(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^6、P(=O)(R^6)、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,

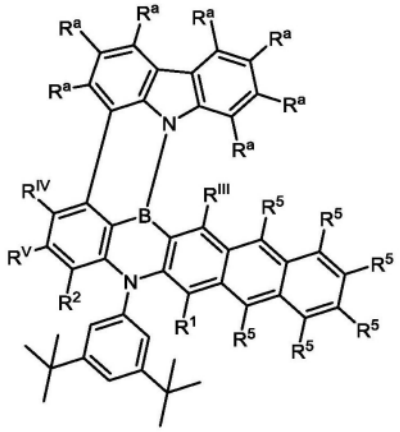
[0364] 其中,基团R^1、R^2、R^3、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}、R^5和R^V可选地彼此结合而形成可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基、氘、卤素、CN或CF_3的芳环或杂芳环。

[0365] 在发明的优选的实施例中,有机分子包括式IIIe-3的结构或由式IIIe-3的结构组成:

[0366] 

式 IIIe-3。

[0367] 在发明的优选的实施例中，有机分子包括式IIIe-4的结构或由式IIIe-4的结构组成：

[0368] 

式 IIIe-4。

[0369] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-4的结构或由式IIIe-4的结构组成，其中，R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0370] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-4的结构或由式IIIe-4的结构组成，其中，R^V与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0371] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-4的结构或由式IIIe-4的结构组成，其中，选自于由R^1、R^2、R^{III}、R^{IV}和R^V组成的组中的至少一个取代基与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0372] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-4的结构或由式IIIe-4的结构组成，其中，R^3彼此独立地选自于由以下组成的组：C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0373] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-4的结构或由式IIIe-4的结构组成，其中，R^3彼此独立地选自于由以下组成的组：C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0374] 在一个实施例中，发明的有机发光分子包括式IIIe-4的结构或由式IIIe-4的结构组成，其中，R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；SR^5；Si

$(R^5)_3$;$B(OR^5)_2$;$B(R^5)_2$;OSO_2R^5;CF_3;CN;卤素;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_1-C_{18}烷氧基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_1-C_{18}硫代烷氧基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_2-C_{18}烯基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_2-C_{18}炔基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0375] 在一个实施例中,发明的有机发光分子包括式IIIe-4的结构或由式IIIe-4的结构组成,其中,R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0376] 在一个实施例中,发明的有机发光分子包括式IIIe-4的结构或由式IIIe-4的结构组成,其中,R^a在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;以及C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0377] 在一个实施例中,发明的有机发光分子包括式IIIe-4的结构或由式IIIe-4的结构组成,其中,R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;$N(R^5)_2$;OR^5;$Si(R^5)_3$;$B(R^5)_2$;CF_3;CN;卤素;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;并且

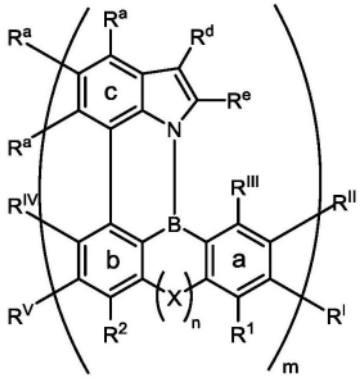
[0378] R^5在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;$N(R^6)_2$;OR^6;$Si(R^6)_3$;$B(R^6)_2$;CF_3;CN;F;Br;I;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,

[0379] 其中,基团R^1、R^2、R^3、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}、R^5和R^V可选地彼此结合而形成可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基、氘、卤素、CN或CF_3的芳环或杂芳环。

[0380] 在优选的实施例中,选自于R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V的组中的至少一个取代基与氢不同。

[0381] 本发明还提供了用作光电器件中的发射体的呈低聚物的形式的有机分子。低聚物包括多个(即,2个、3个、4个、5个或6个)由式IV表示的单元,或者由多个(即,2个、3个、4个、5

个或6个)由式IV表示的单元组成：

[0382] 

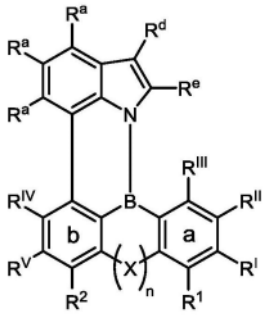
式 IV。

[0383] 低聚物是二聚物至六聚物(m＝2至6)(具体地，二聚物(m＝2)至三聚物(m＝3)，或者优选地二聚物)。低聚物：

[0384] -可以呈具有多个如式IV所示的单元的形式；或者

[0385] -可以呈其中多个如式IV所示的单元经由连接基连接的形式，所述连接基选自于由单键、具有1个至3个碳原子的亚烷基、亚苯基或亚萘基、蒽基、芘基或吡啶基、嘧啶基或三嗪基组成的组；或者

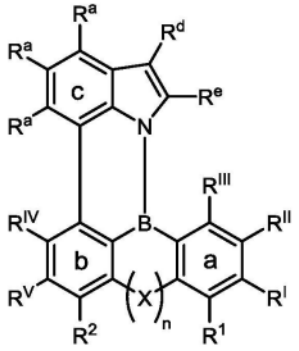
[0386] -可以呈其中将多个所述单元连接使得包含在根据式I-AB的单元中的环a和/或环b被低聚物的至少一个其它相邻的单元共享的形式；或者

[0387] 

式 I-AB

[0388] -可以呈其中将低聚物的单元连接使得单元的环a和/或环b与低聚物的相邻的单元的环a和/或环b稠合的形式；

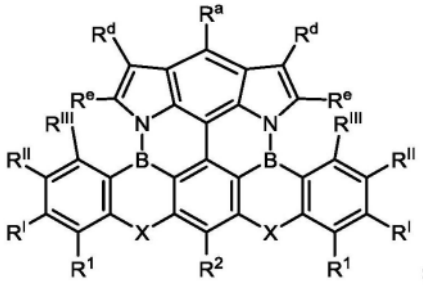
[0389] -可以呈其中将多个所述单元连接使得包含在根据式I-ABC的单元中的环a和/或环b和/或环c被低聚物的至少一个其它相邻的单元共享的形式；或者

[0390] 

式 I-ABC

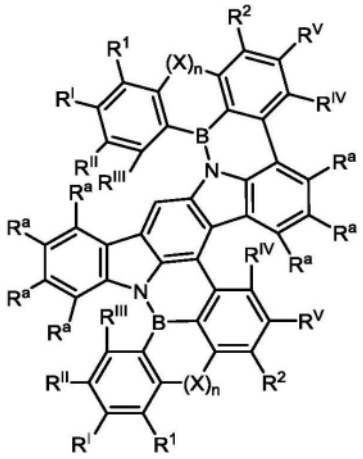
[0391] -可以呈其中将低聚物的单元连接使得单元的环a和/或环b和/或环c与低聚物的相邻的单元的环a和/或环b和/或环c稠合的形式，

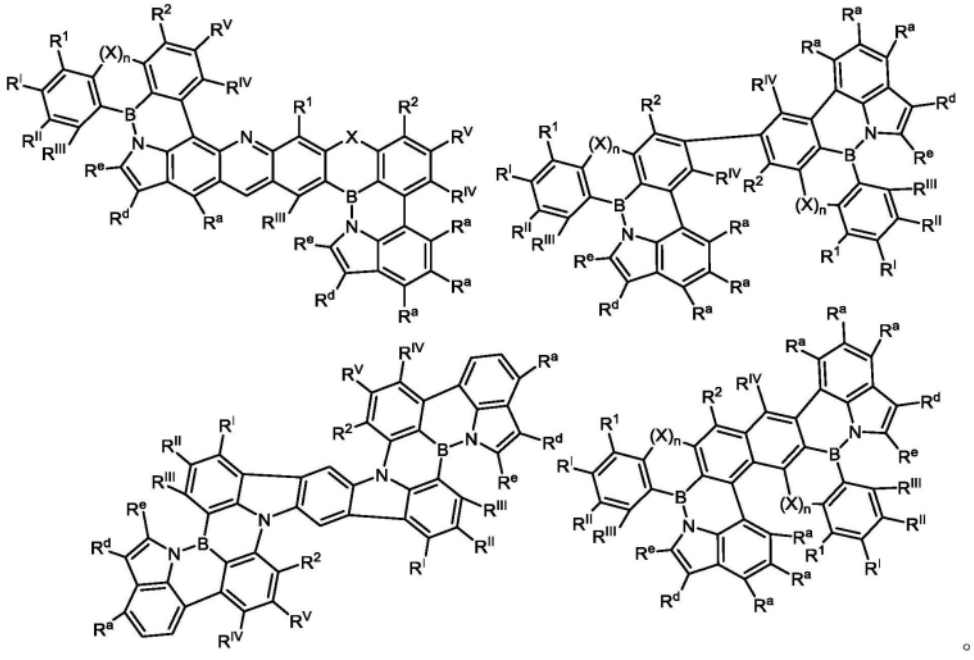
[0392] 其中，如果低聚物的一个单元的环b和环c被相邻的低聚物的环b和环c共享，则环b与环c之间的直连键可以被共享，如在以下示例性结构中所示的：

[0393] ；

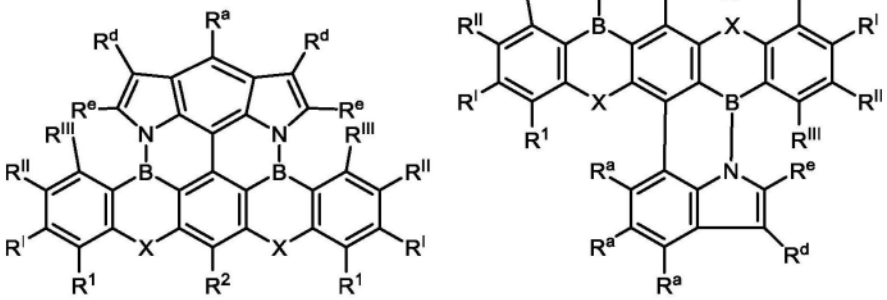
[0394] 并且其中，式IV中所示的单元的任何取代基R^a、R^d、R^e、R^{IV}、R^V、R^2、R^1、R^I、R^{II}、R^{III}、R^3或R^4能够结合到相邻的单元的任何取代基R^a、R^d、R^e、R^{IV}、R^V、R^2、R^1、R^I、R^{II}、R^{III}、R^3或R^4，以形成直连键或者通过稠合形成可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基、Ph、氘、卤素、CN或CF_3的芳环或杂芳环，并且其中，两个相邻的环也能够共享键。

[0395] 在下面示出了不同的示例：

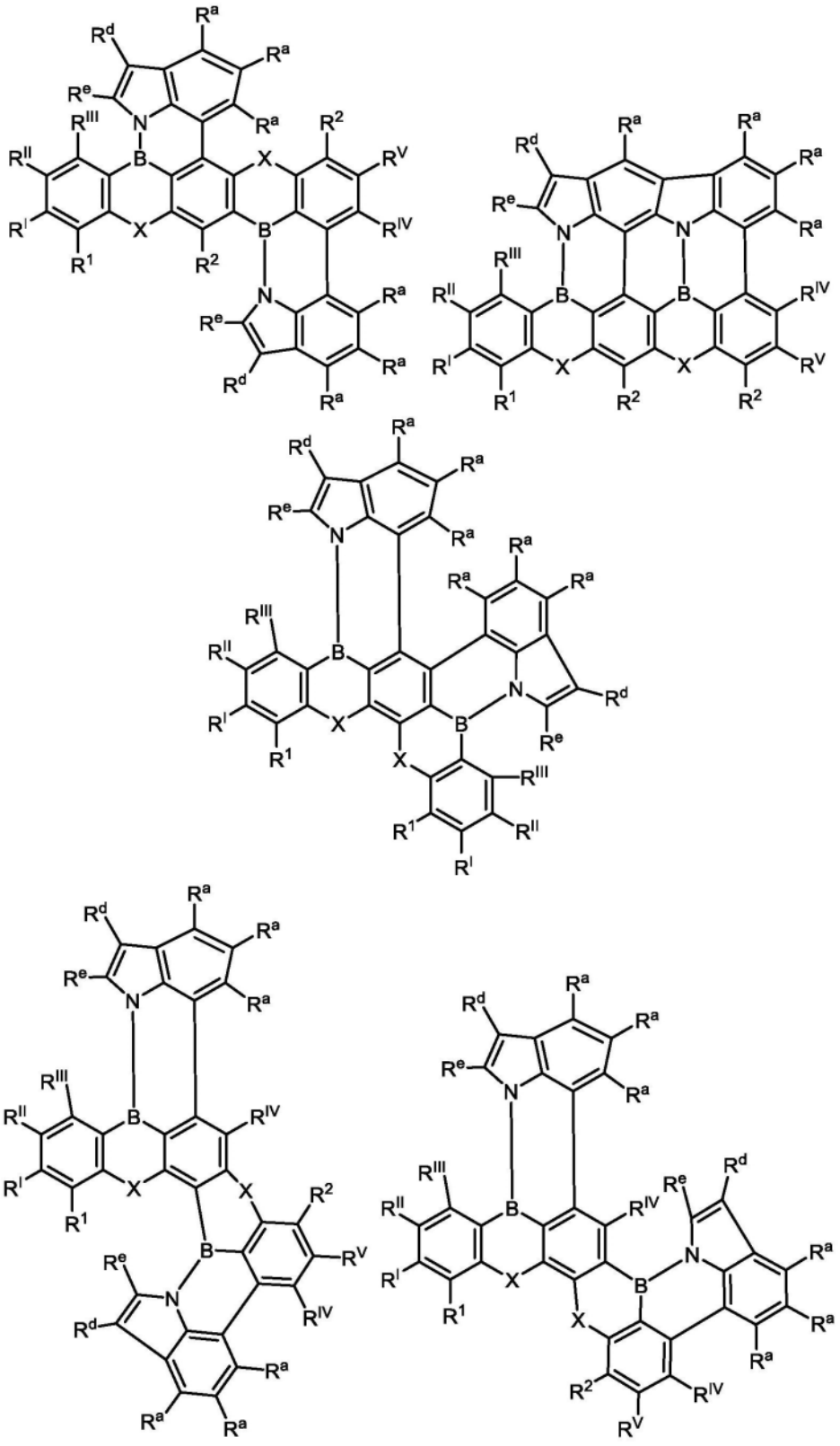
[0396] 

[0397] 。

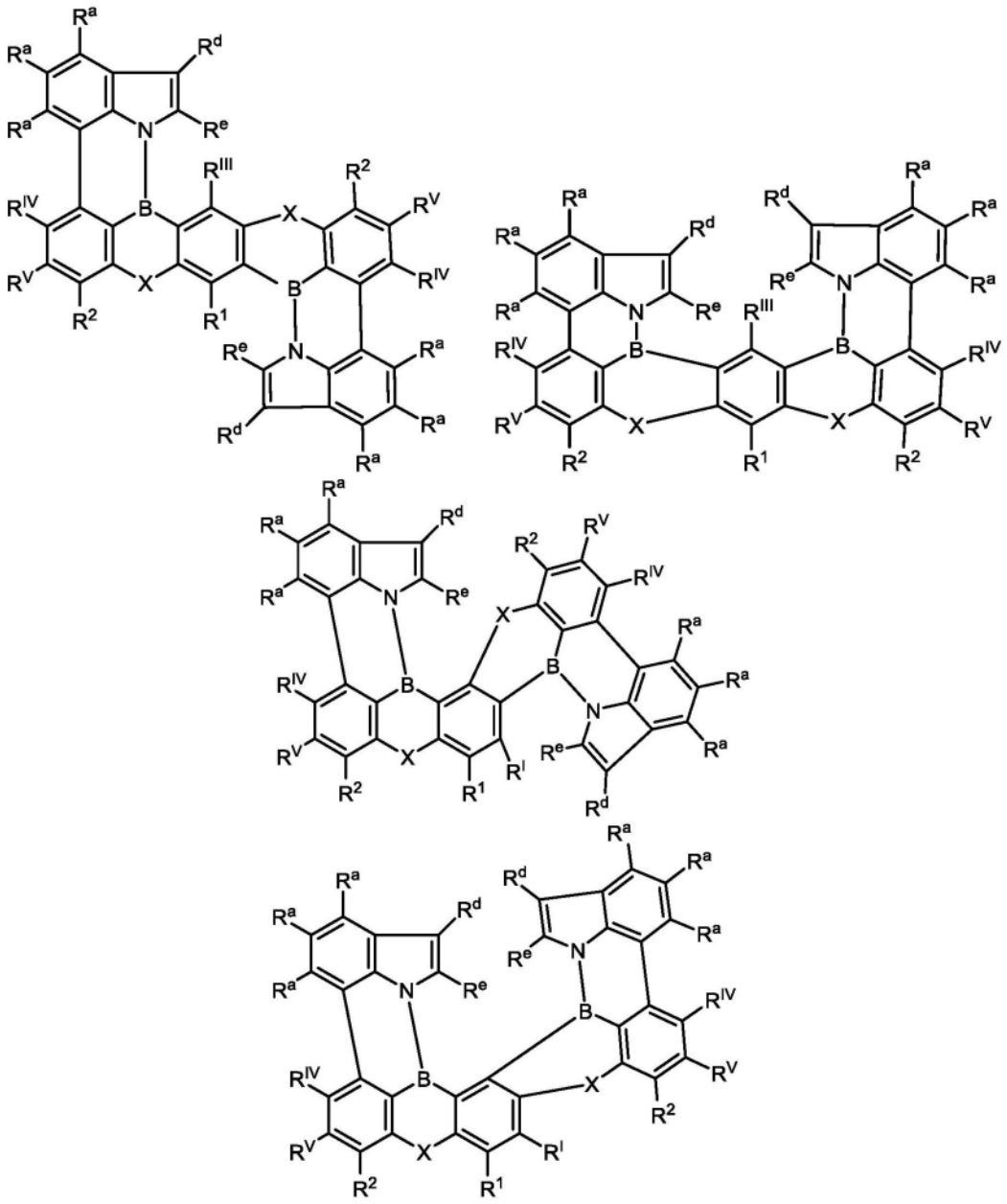
[0398] 在低聚物的一些实施例中，式VI中所示的单元的一部分(环a和/或环b和/或环c)结合以便被相邻的单元共享，如在以下示例性结构中所示的：

[0399] 

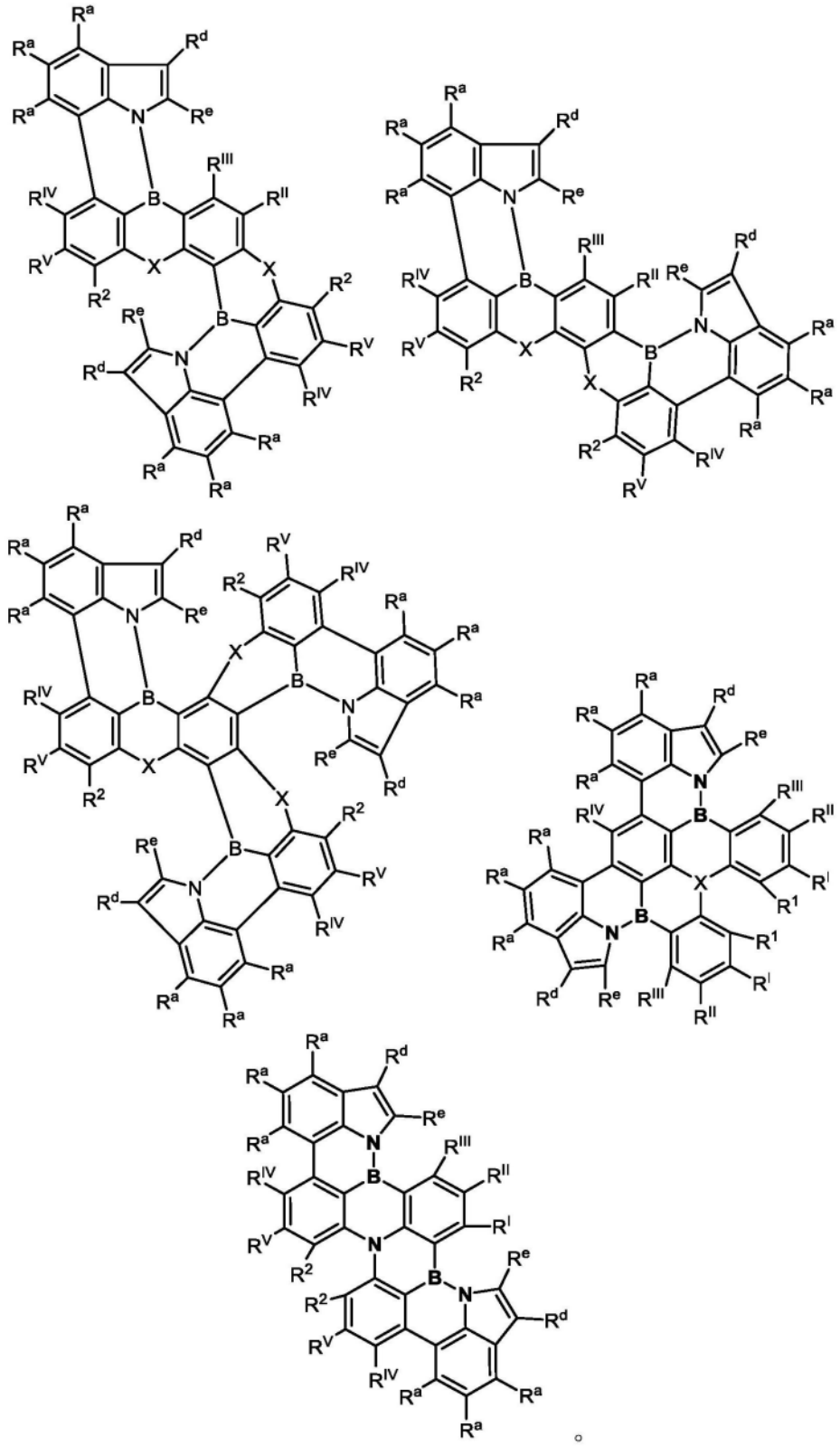
[0400]



[0401]

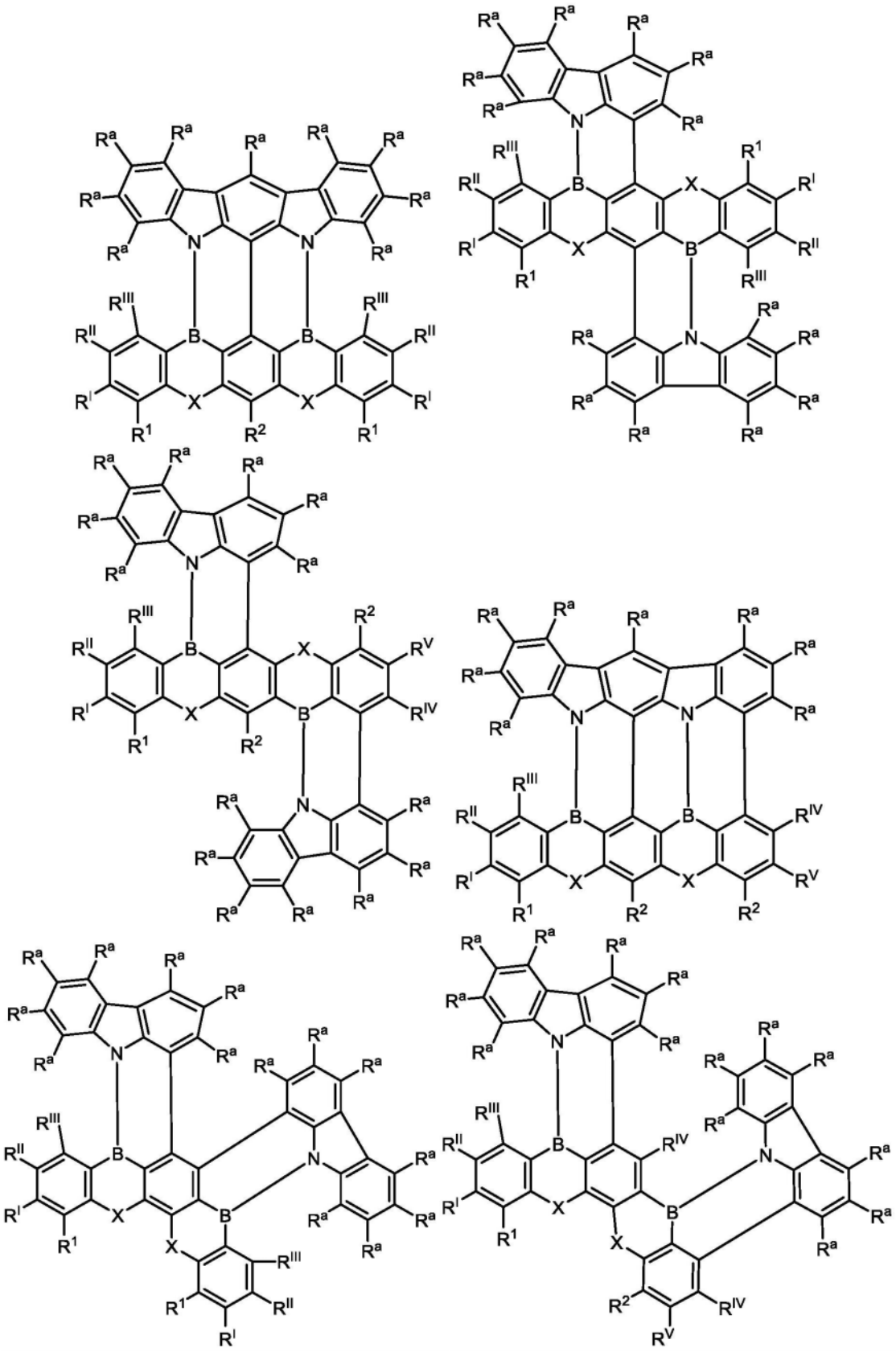


[0402]

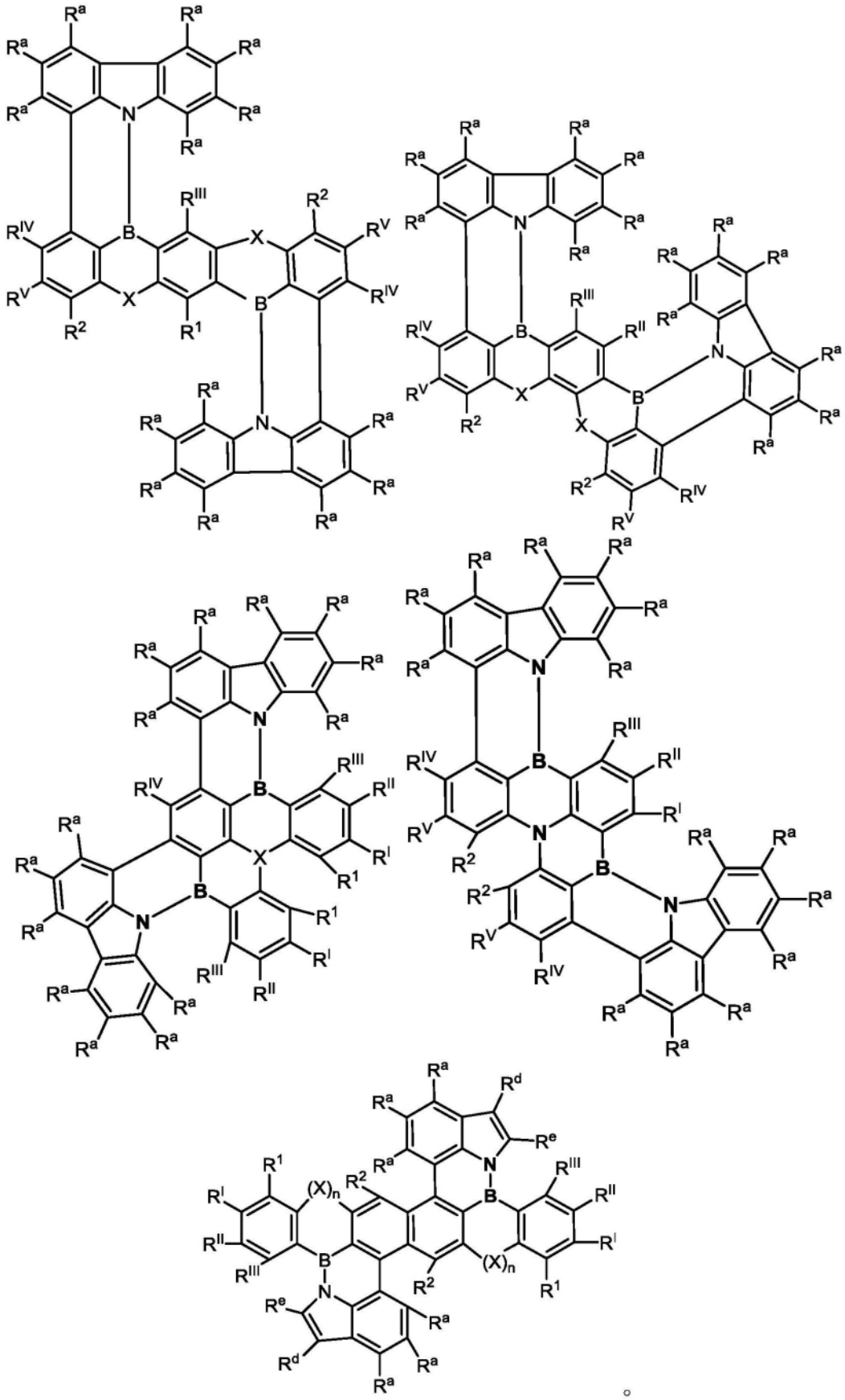


[0403] 针对根据发明的呈二聚物(m＝2)的形式的有机分子/低聚物的附加的示例：

[0404]

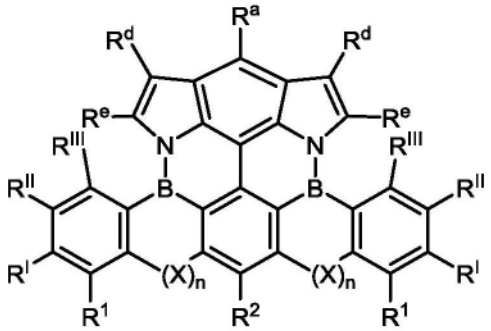


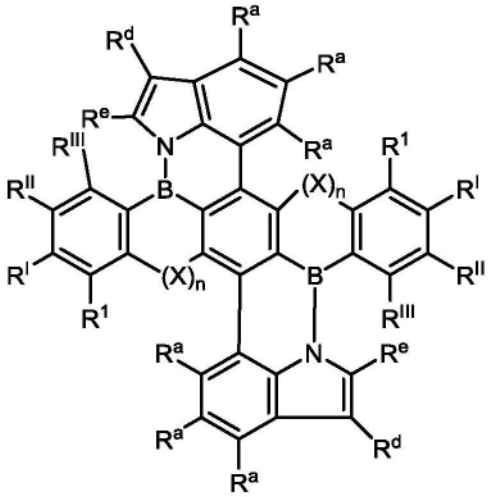
[0405]

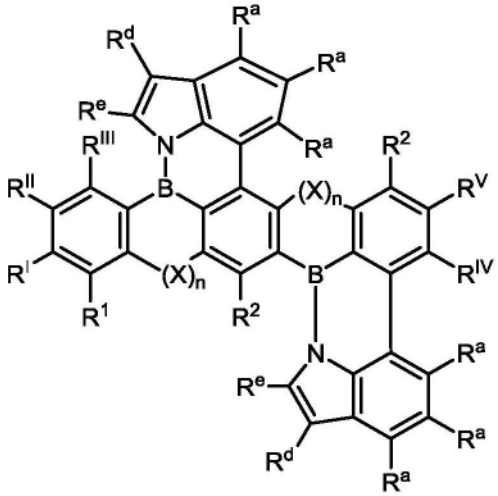


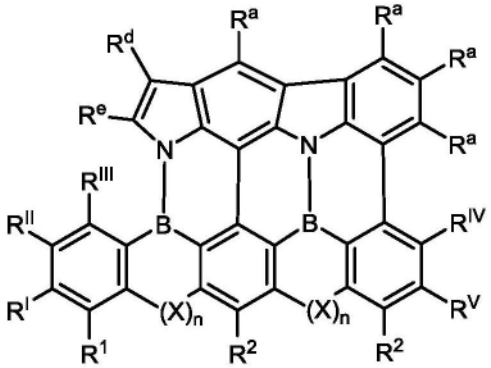
[0406] 在发明的一个实施例中,低聚物包括选自于以下组中的结构或由选自于以下组中的结构组成:

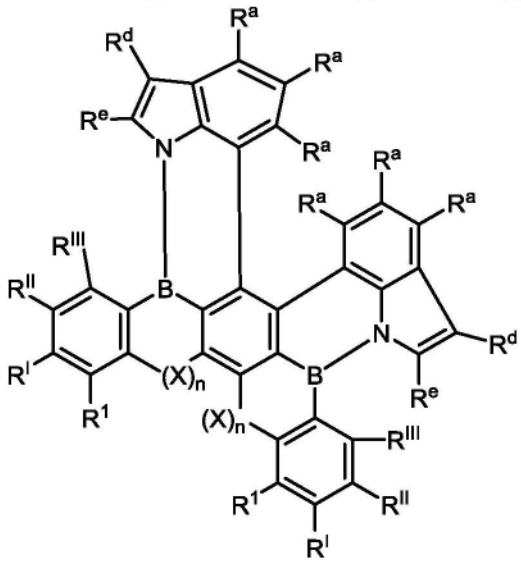
[0407]

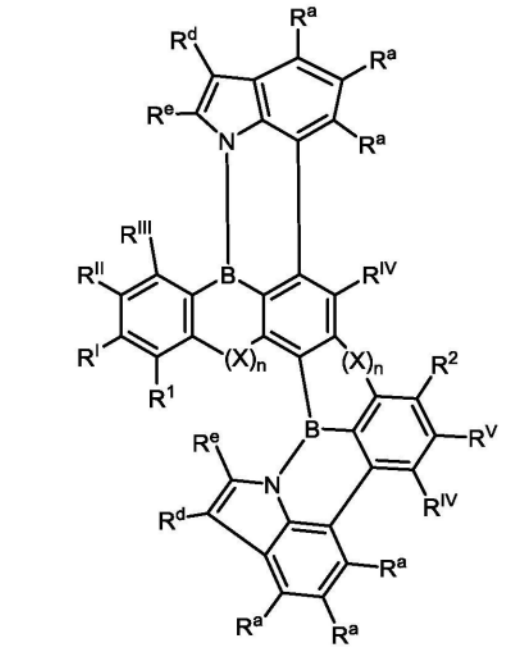


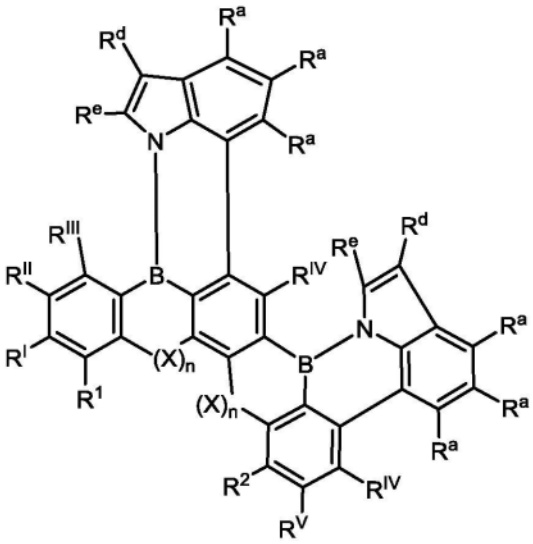




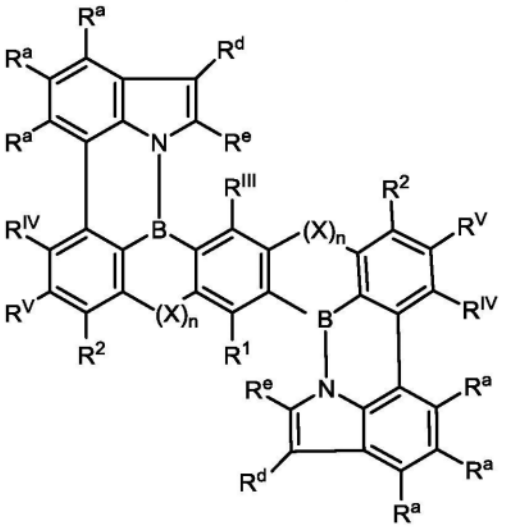


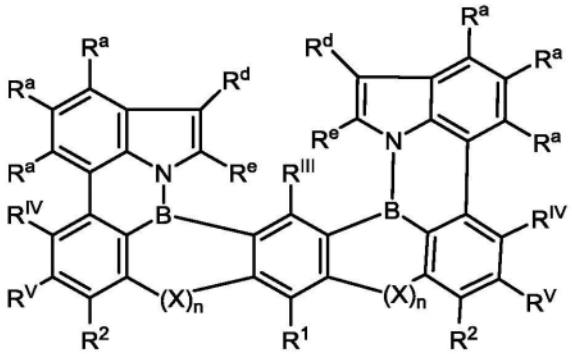


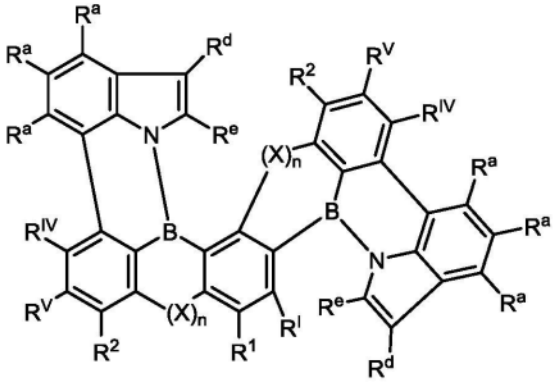




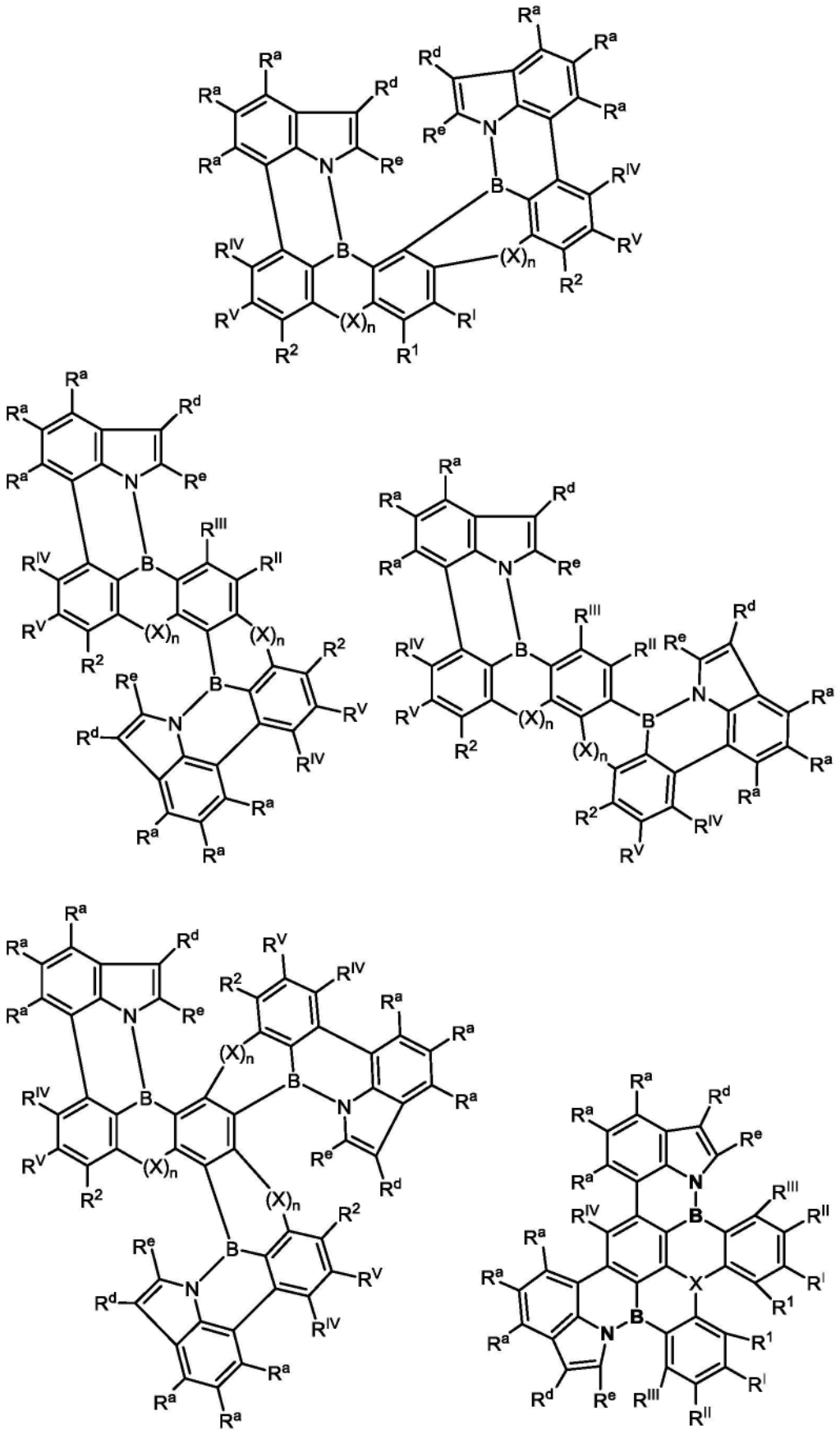
[0408]



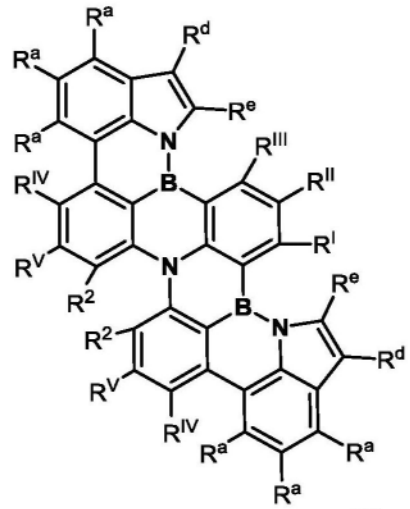


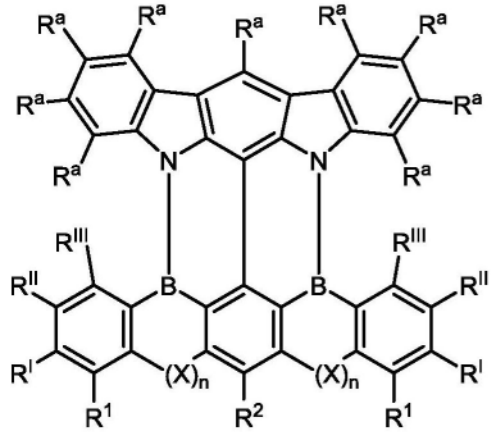


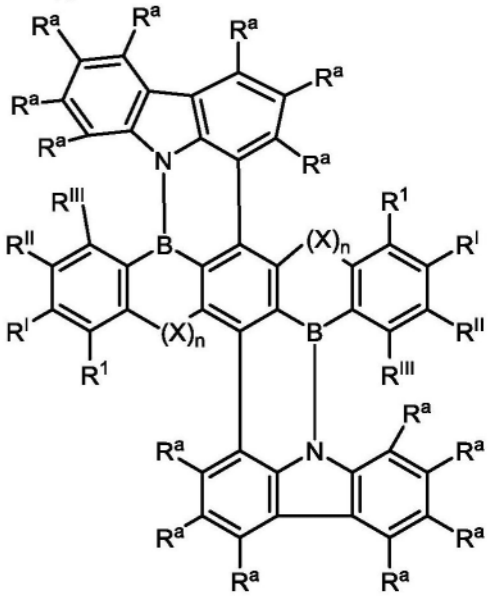
[0409]

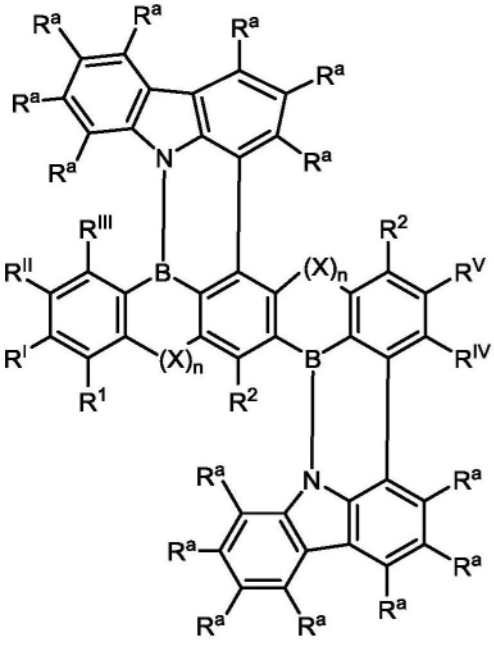


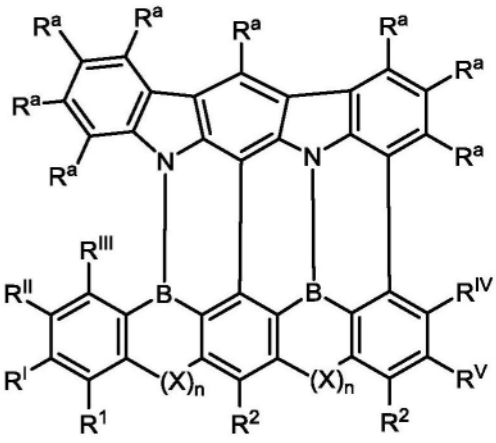
[0410]



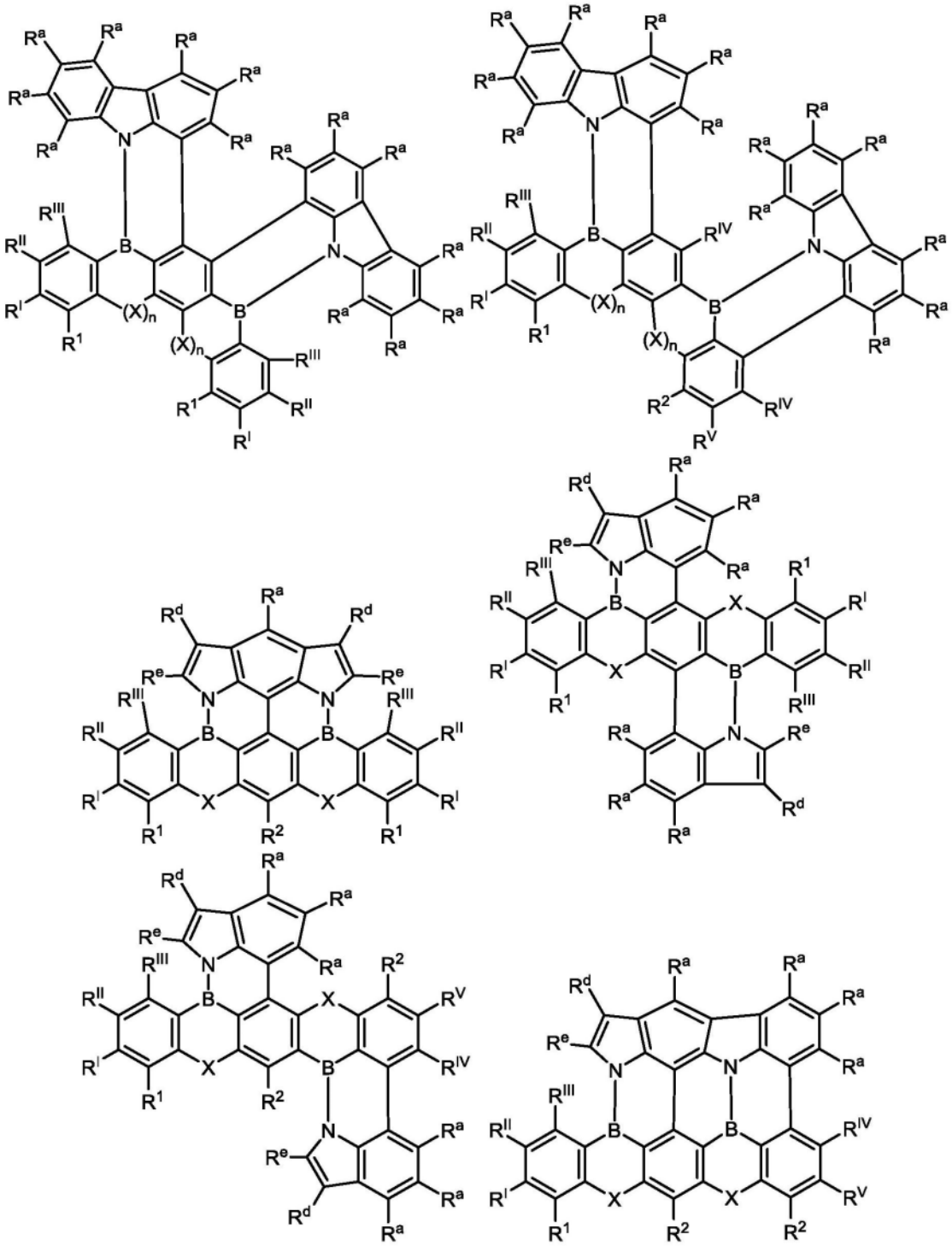




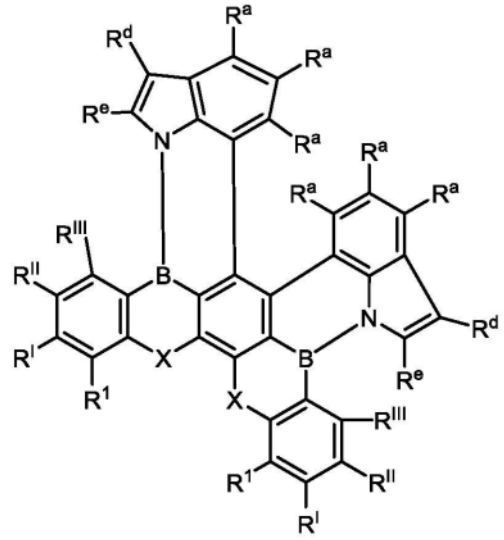


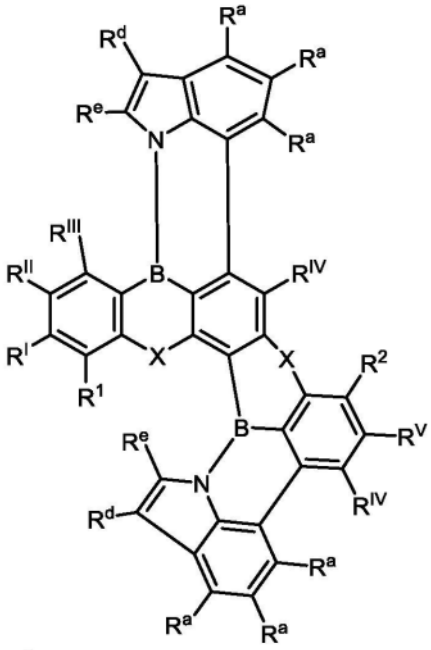


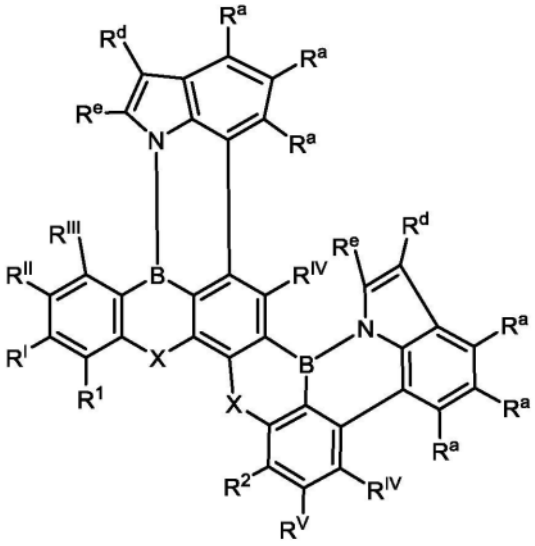
[0411]

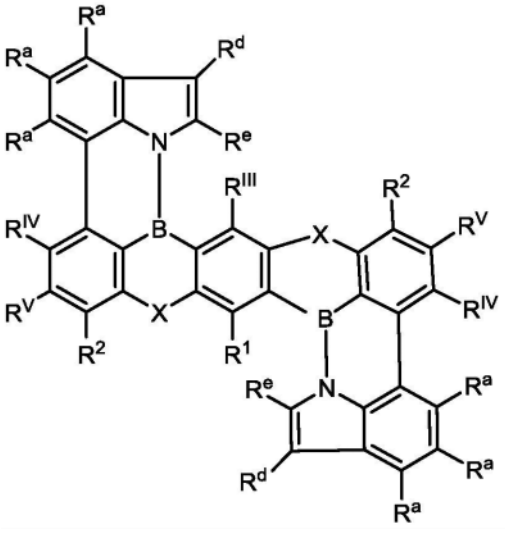


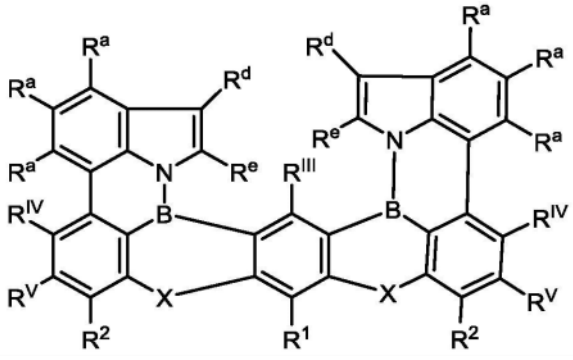
[0412]



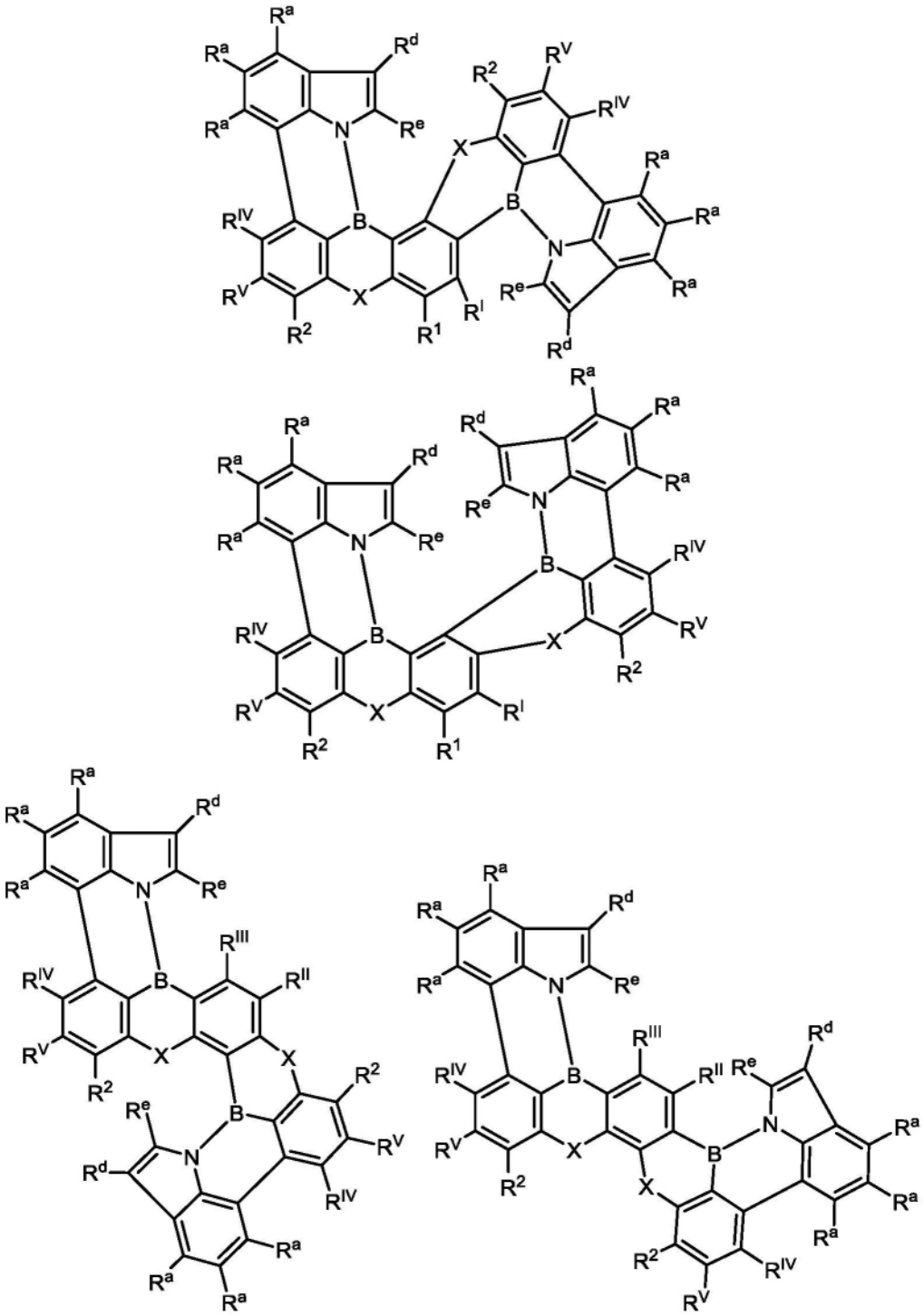




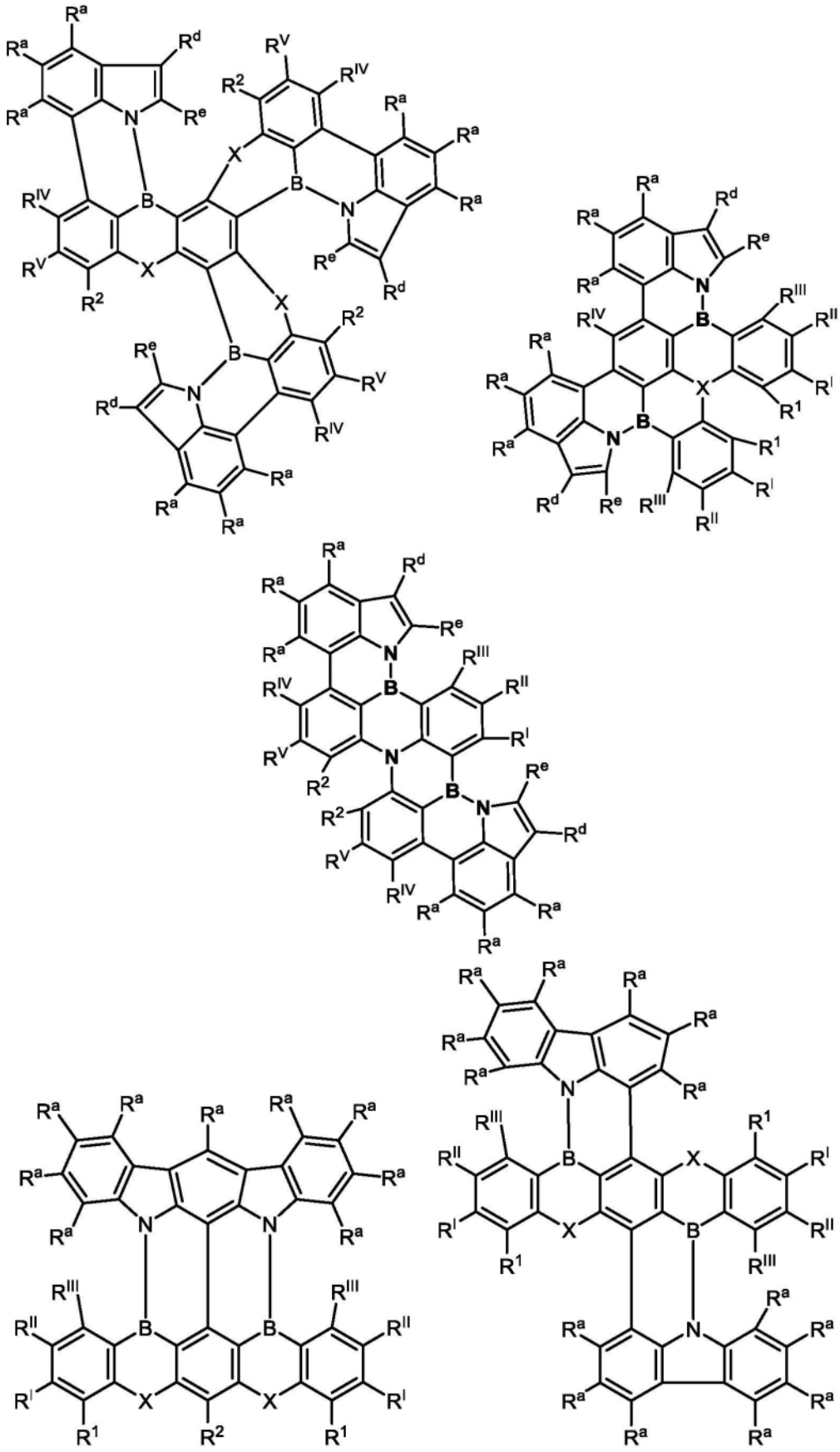




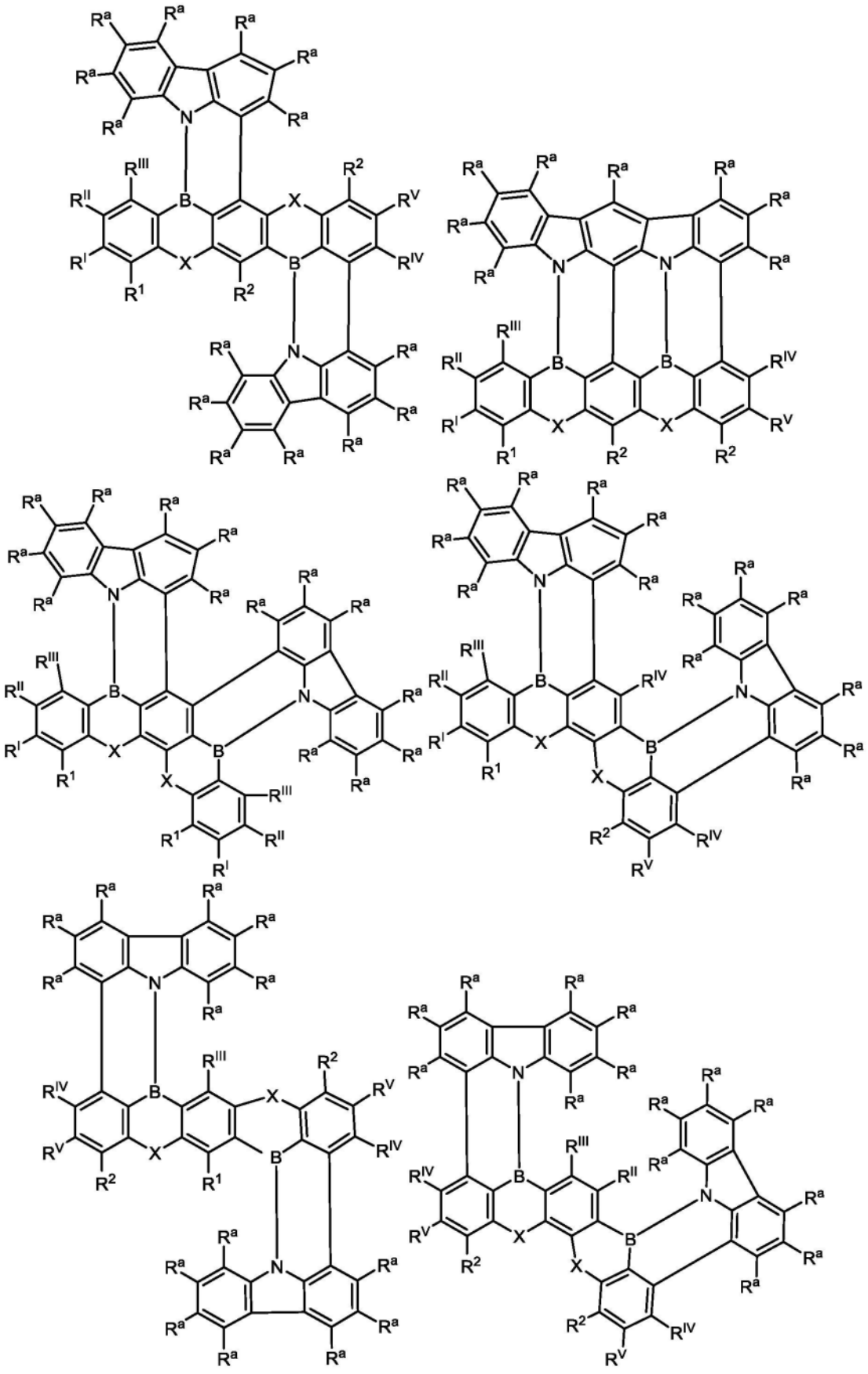
[0413]



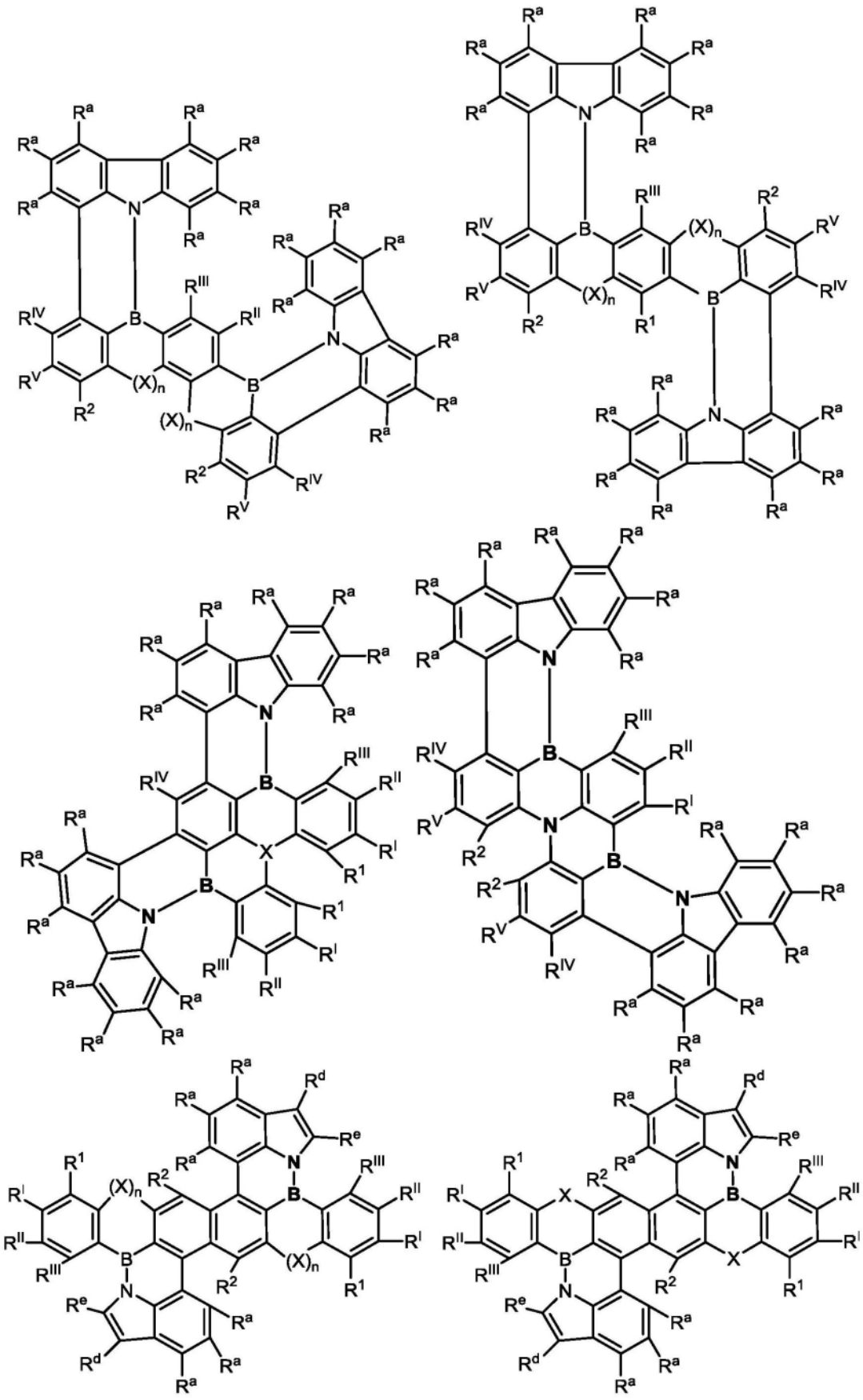
[0414]

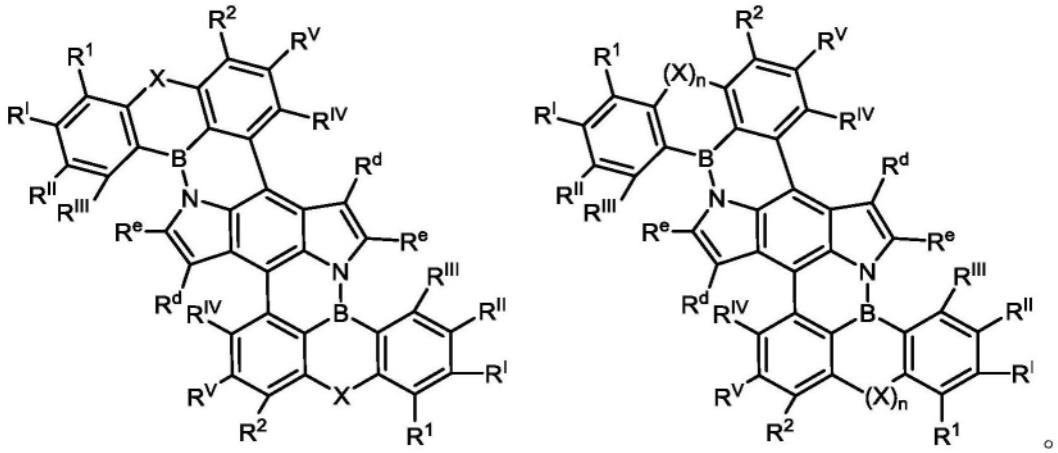


[0415]



[0416]



[0417] 

[0418] 在发明的特定实施例中，低聚物是二聚物或三聚物(m＝3)(优选地，二聚物)。

[0419] 在优选的实施例中，R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；$Si(R^5)_3$；$B(R^5)_2$；CF_3；CN；卤素；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C＝CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C＝O、C＝S、C＝Se、$C＝NR^5$、$P(＝O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；并且

[0420] R^5在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^6)_2$；OR^6；$Si(R^6)_3$；$B(R^6)_2$；CF_3；CN；F；Br；I；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C＝CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C＝O、C＝S、C＝Se、$C＝NR^6$、$P(＝O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，

[0421] 其中，基团R^1、R^2、R^3、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}、R^5和R^V可选地彼此结合而形成可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基、氘、卤素、CN或CF_3的芳环或杂芳环。

[0422] 在低聚物的特定实施例中，R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；$Si(R^5)_3$；$B(R^5)_2$；CF_3；CN；卤素；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C＝CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C＝O、C＝S、C＝Se、$C＝NR^5$、$P(＝O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；并且

[0423] R^5在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^6)_2$；OR^6；$Si(R^6)_3$；$B(R^6)_2$；CF_3；CN；F；Br；I；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C＝CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C＝O、C＝S、C＝Se、$C＝NR^6$、$P(＝O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，

[0424] 其中，彼此相邻定位的基团R^1、R^2、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}、R^5和R^V可选地彼此结合而形成可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基、氘、卤素、CN或CF_3的芳环或杂芳环。

[0425] 在低聚物的特定实施例中，R^1、R^2、R^3、R^4、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}、R^V和R^a彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^5)_2$；OR^5；SR^5；$Si(R^5)_3$；$B(OR^5)_2$；$B(R^5)_2$；OSO_2R^5；CF_3；CN；卤素；C_1-

C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{18}烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_1-C_{18}硫代烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{18}烯基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_2-C_{18}炔基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；

[0426] R^5在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^6)_2$；OR^6；$Si(R^6)_3$；$B(OR^6)_2$；$B(R^6)_2$；OSO_2R^6；CF_3；CN；F；Br；I；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代；C_1-C_{18}烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代；C_1-C_{18}硫代烷氧基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代；C_2-C_{18}烯基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代；C_2-C_{18}炔基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6；

[0427] 其中，取代基R^a、R^d、R^e和R^5彼此独立地可选地与一个或更多个取代基R^a、R^d、R^e和R^5形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系；

[0428] 其中，取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V彼此独立地可选地与一个或更多个取代基R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0429] 在发明的一个实施例中，有机分子由二聚物或三聚物组成，其中，R^1、R^2、R^a、R^d、R^e、R^I、R^{II}、R^{III}、R^{IV}和R^V在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；Me；^{i}Pr；^{t}Bu；CN；CF_3；Ph，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组；吡啶基，可选地取代有一个或更多个取代基，所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组；嘧啶基，可选地取代有一个或更多个取代基，所

述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组;咔唑基,可选地取代有一个或更多个取代基,所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组;三嗪基,可选地取代有一个或更多个取代基,所述取代基彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组;以及$N(Ph)_2$。

[0430] 在发明的一个实施例中,有机分子/低聚物包括式IV的结构或由式IV的结构组成,其中,至少一个R^a与氢不同。

[0431] 在优选的实施例中,发明的有机发光分子包括式IV的结构或由式IV的结构组成,且前提条件是如果X是NR^3并且R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系,则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0432] 在发明的优选的实施例中,有机分子/低聚物包括式IV的结构或由式IV的结构组成,其中,X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、NR^3、CR^3R^4、S和O组成的组。

[0433] 在发明的更优选的实施例中,有机分子/低聚物包括式IV的结构或由式IV的结构组成,其中,X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、NR^3、S和O组成的组。

[0434] 在发明的特定实施例中,有机分子/低聚物包括式IV的结构或由式IV的结构组成,其中,X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键和NR^3组成的组。

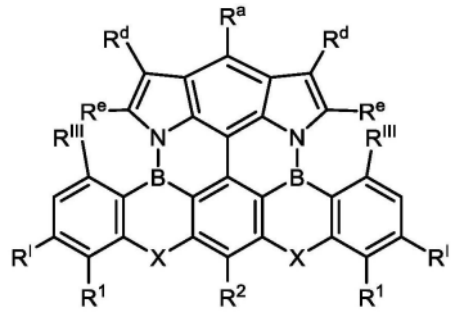
[0435] 在发明的特定实施例中,有机分子/低聚物包括式IV的结构或由式IV的结构组成,其中,X是NR^3。

[0436] 在发明的优选的实施例中,有机分子/低聚物包括式IV的结构或由式IV的结构组成,其中,R^3彼此独立地选自于由以下组成的组:C_1-C_{40}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_2-C_{17}杂芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0437] 在发明的优选的实施例中,有机分子/低聚物包括式IV的结构或由式IV的结构组成,其中,R^V在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:$N(R^5)_2$;OR^5;C_1-C_{18}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被R^5C=CR^5、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及C_2-C_{17}杂芳基,

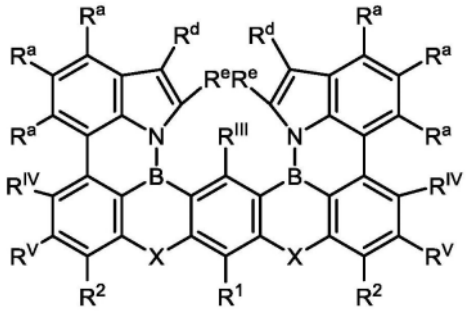
[0438] 其中,R^V彼此独立地可选地与一个或更多个取代基R^2和R^{IV}形成可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基、氘、卤素、CN或CF_3的单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0439] 在发明的优选的实施例中,有机分子/低聚物包括式IVa-0、式IVb-0和式IVf的结构,或者由式IVa-0、式IVb-0和式IVf的结构组成:



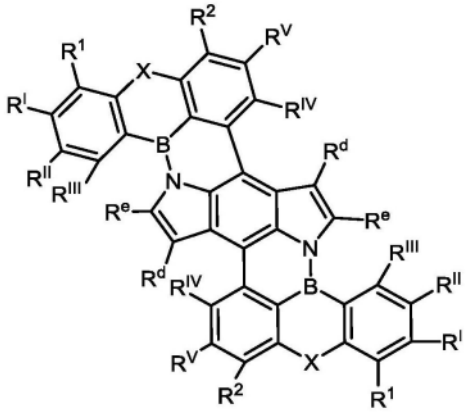
式 IVa-0

[0440]



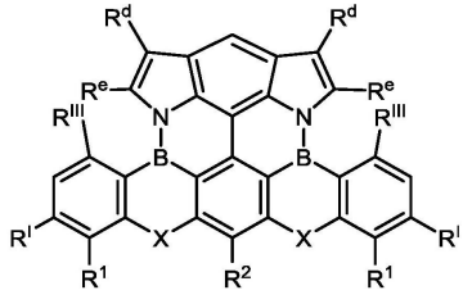
式 IVb-0

[0441]



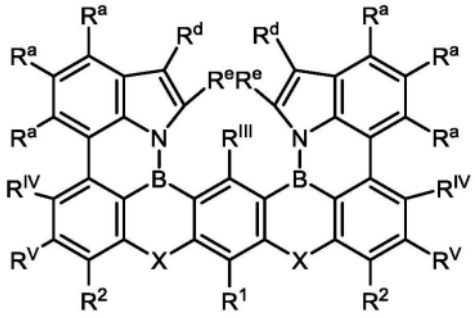
式 IVf。

[0442] 在发明的优选的实施例中,有机分子/低聚物包括式IVa、式IVb-0和式IVf的结构,或者由式IVa、式IVb-0和式IVf的结构组成:



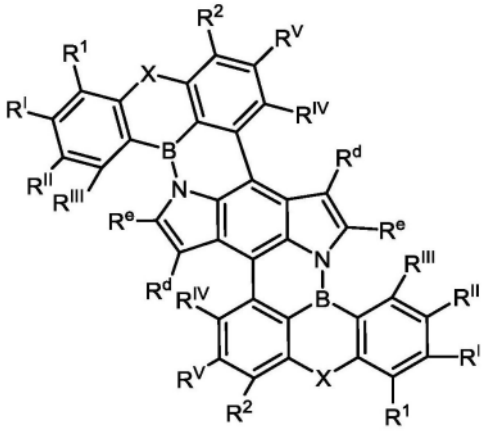
式 IVa

[0443]



式 IVb-0

[0444]



式 IVf。

[0445] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVa、式IVb-0和式IVf的结构，或者由式IVa、式IVb-0和式IVf的结构组成，其中，至少一个R^a与氢不同。

[0446] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式IVa、式IVb-0和式IVf的结构，或者由式IVa、式IVb-0和式IVf的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3并且R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系，则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0447] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVa、式IVb-0和式IVf的结构，或者由式IVa、式IVb-0和式IVf的结构组成，其中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、NR^3、CR^3R^4、S和O组成的组。

[0448] 在发明的更优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVa、式IVb-0和式IVf的结构，或者由式IVa、式IVb-0和式IVf的结构组成，其中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、NR^3、S和O组成的组。

[0449] 在发明的特定实施例中，有机分子/低聚物包括式IVa、式IVb-0和式IVf的结构，或者由式IVa、式IVb-0和式IVf的结构组成，其中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键和NR^3组成的组。

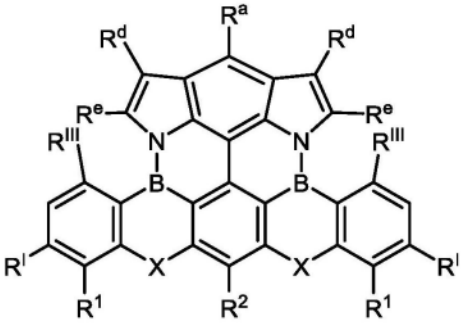
[0450] 在发明的特定实施例中，有机分子/低聚物包括式IVa、式IVb-0和式IVf的结构，或者由式IVa、式IVb-0和式IVf的结构组成，其中，X是NR^3。

[0451] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVa、式IVb-0和式IVf的结构，或者由式IVa、式IVb-0和式IVf的结构组成，其中，R^3彼此独立地选自于由以下组成的组：C_1-C_{40}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5。

[0452] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVa、式IVb-0和式IVf的结构，或者由式IVa、式IVb-0和式IVf的结构组成，其中，R^V在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：$N(R^5)_2$；OR^5；C_1-C_{18}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、$C\equiv C$、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代；C_6-C_{18}芳基，可选地取代有一个或更多个取代基R^5；以及C_2-C_{17}杂芳基，

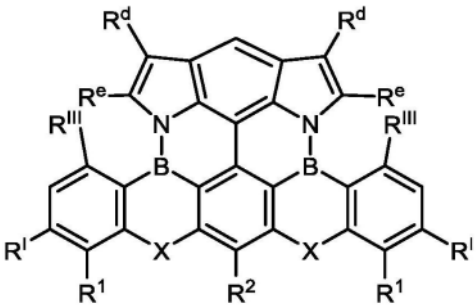
[0453] 其中，R^V彼此独立地可选地与一个或更多个取代基R^2和R^{IV}形成可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基、氘、卤素、CN或CF_3的单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0454] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVa-0的结构或由式IVa-0的结构组成：

[0455] 

式 IVa-0。

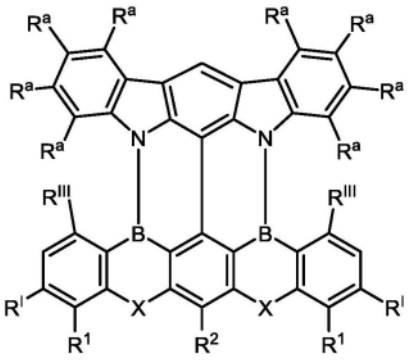
[0456] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVa的结构或由式IVa的结构组成：

[0457] 

[0458] 式 IVa。

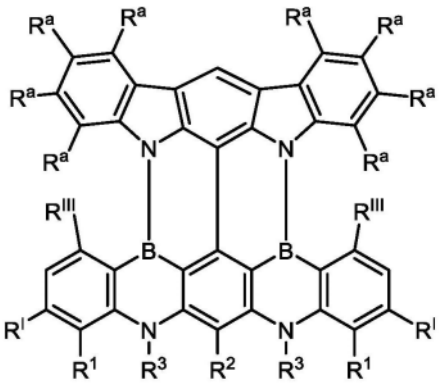
[0459] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVa-2的结构或由式IVa-2的结

构组成：

[0460] 

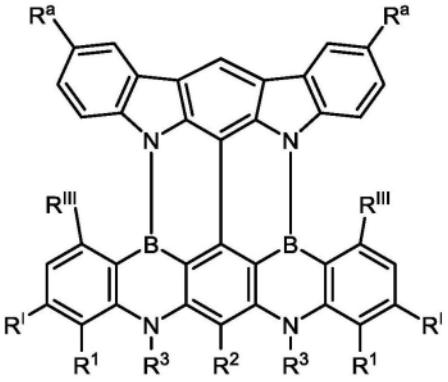
式 IVa-2。

[0461] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVa-3的结构或由式IVa-3的结构组成：

[0462] 

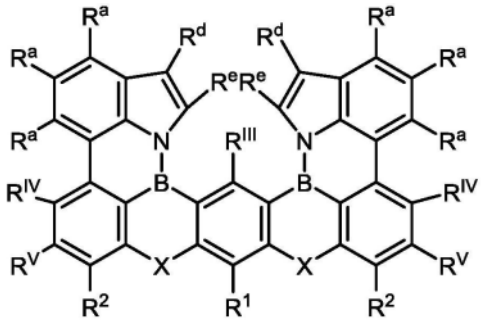
式 IVa-3。

[0463] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVa-4的结构或由式IVa-4的结构组成：

[0464] 

式 IVa-4。

[0465] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0的结构或由式IVb-0的结构组成：

[0466] 

式 IVb-0。

[0467] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0的结构或由式IVb-0的结构组成，其中，至少一个R^a与氢不同。

[0468] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式IVb-0的结构或由式IVb-0的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3并且R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系，则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

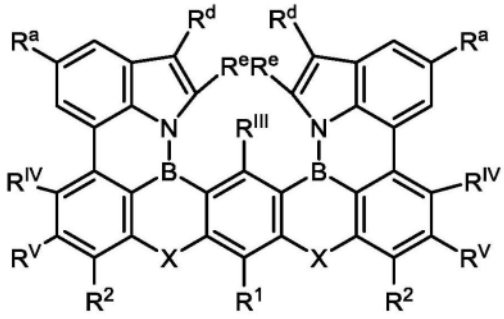
[0469] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0的结构或由式IVb-0的结构组成，其中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、NR^3、CR^3R^4、S和O组成的组。

[0470] 在发明的更优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0的结构或由式IVb-0的结构组成，其中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、NR^3、S和O组成的组。

[0471] 在发明的特定实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0的结构或由式IVb-0的结构组成，其中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键和NR^3组成的组。

[0472] 在发明的特定实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0的结构或由式IVb-0的结构组成，其中，X是NR^3。

[0473] 在发明的更优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0a的结构或由式IVb-0a的结构组成：

[0474] 

式 IVb-0a。

[0475] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0a的结构或由式IVb-0a的结构组成，其中，至少一个R^a与氢不同。

[0476] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式IVb-0a的结构或由式IVb-0a的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3并且R^d和R^e彼此连接以形成芳香族环体系，则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0477] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0a的结构或由式IVb-0a

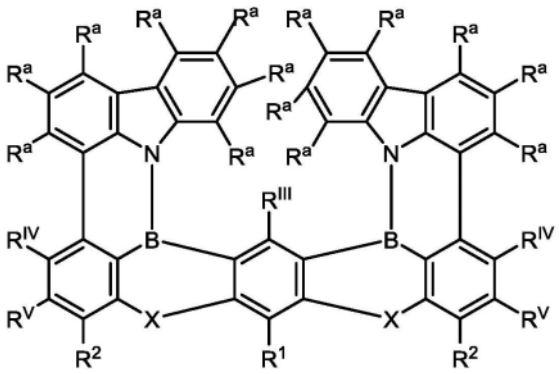
的结构组成，其中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、NR^3、CR^3R^4、S和O组成的组。

[0478] 在发明的更优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0a的结构或由式IVb-0a的结构组成，其中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、NR^3、S和O组成的组。

[0479] 在发明的特定实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0a的结构或由式IVb-0a的结构组成，其中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键和NR^3组成的组。

[0480] 在发明的特定实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0a的结构或由式IVb-0a的结构组成，其中，X是NR^3。

[0481] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0b的结构或由式IVb-0b的结构组成：

[0482] 

式 IVb-0b。

[0483] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0b的结构或由式IVb-0b的结构组成，其中，至少一个R^a与氢不同。

[0484] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式IVb-0b的结构或由式IVb-0b的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3，则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

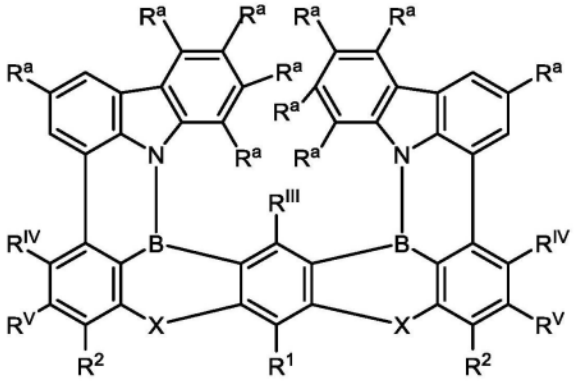
[0485] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0b的结构或由式IVb-0b的结构组成，其中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、NR^3、CR^3R^4、S和O组成的组。

[0486] 在发明的更优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0b的结构或由式IVb-0b的结构组成，其中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、NR^3、S和O组成的组。

[0487] 在发明的特定实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0b的结构或由式IVb-0b的结构组成，其中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键和NR^3组成的组。

[0488] 在发明的特定实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0b的结构或由式IVb-0b的结构组成，其中，X是NR^3。

[0489] 在发明的更优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0c的结构或由式IVb-0c的结构组成：

[0490] 

式 IVb-0c。

[0491] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0c的结构或由式IVb-0c的结构组成，其中，至少一个R^a与氢不同。

[0492] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式IVb-0c的结构或由式IVb-0c的结构组成，且前提条件是如果X是NR^3，则R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

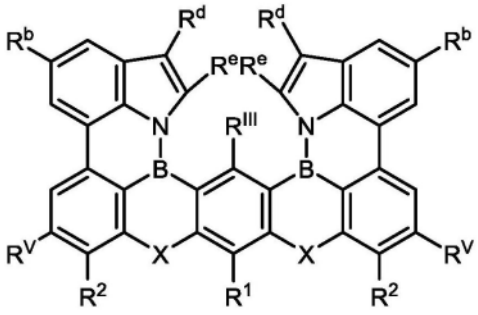
[0493] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0c的结构或由式IVb-0c的结构组成，其中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、NR^3、CR^3R^4、S和O组成的组。

[0494] 在发明的更优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0c的结构或由式IVb-0c的结构组成，其中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键、NR^3、S和O组成的组。

[0495] 在发明的特定实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0c的结构或由式IVb-0c的结构组成，其中，X在每次出现时彼此独立地选自于由直连键和NR^3组成的组。

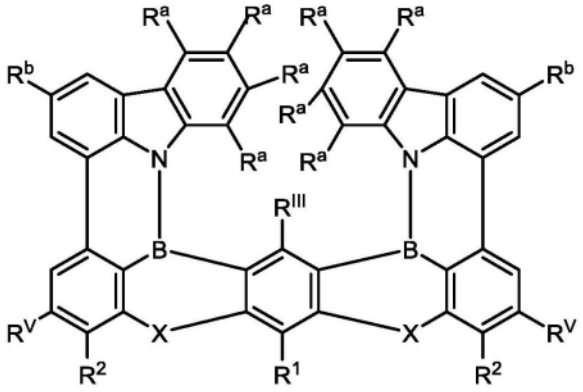
[0496] 在发明的特定实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-0c的结构或由式IVb-0c的结构组成，其中，X是NR^3。

[0497] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb的结构或由式IVb的结构组成：

[0498] 

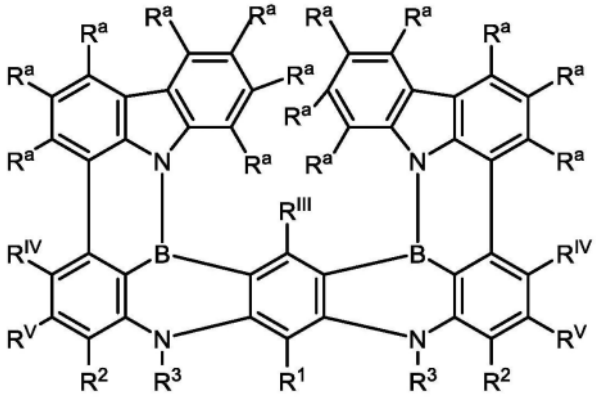
式 IVb。

[0499] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-2的结构或由式IVb-2的结构组成：

[0500] 

式 IVb-2。

[0501] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-3的结构或由式IVb-3的结构组成：

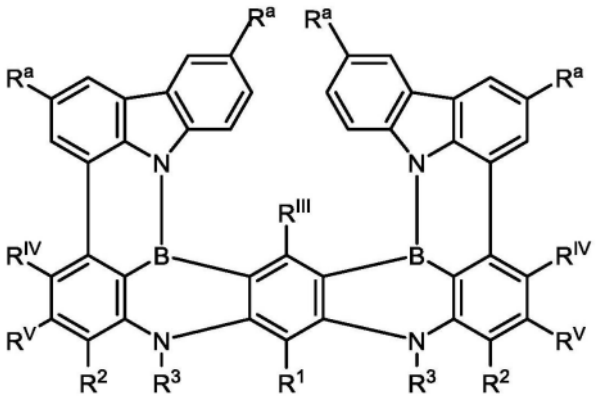
[0502] 

式 IVb-3。

[0503] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-3的结构或由式IVb-3的结构组成，其中，至少一个R^a与氢不同。

[0504] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式IVb-3的结构或由式IVb-3的结构组成，其中，R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0505] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-4的结构或由式IVb-4的结构组成：

[0506] 

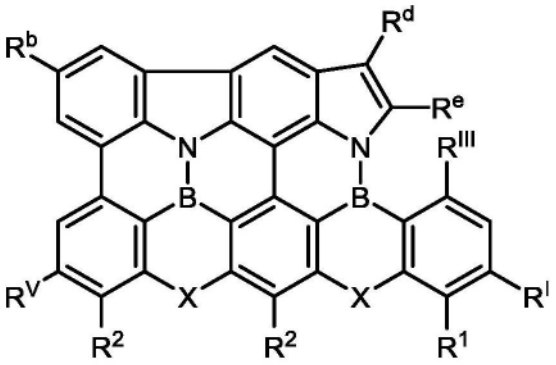
式 IVb-4。

[0507] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVb-4的结构或由式IVb-4的结

构组成，其中，至少一个R^a与氢不同。

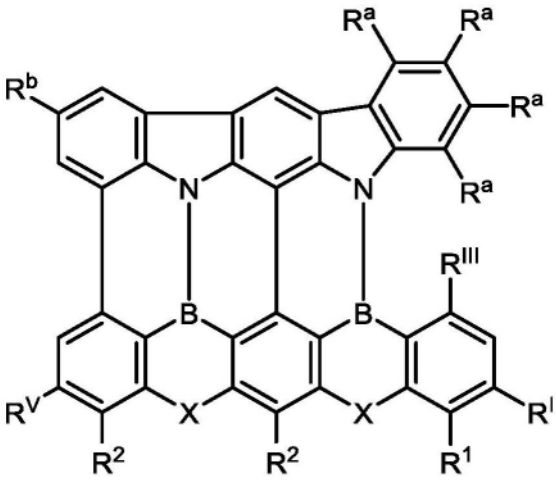
[0508] 在优选的实施例中，发明的有机发光分子包括式IVb-3的结构或由式IVb-3的结构组成，其中，R^V是$N(R^5)_2$或者与一个或更多个取代基R^2、R^3、R^5和R^{IV}形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

[0509] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVc的结构或由式IVc的结构组成：

[0510] 

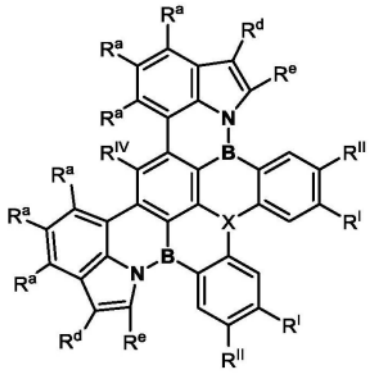
式 IVc。

[0511] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVc-2的结构或由式IVc-2的结构组成：

[0512] 

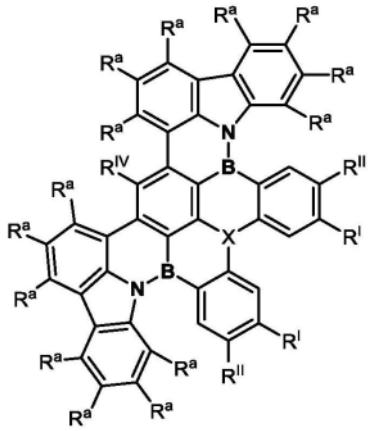
式 IVc-2。

[0513] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVd的结构或由式IVd的结构组成：

[0514] 

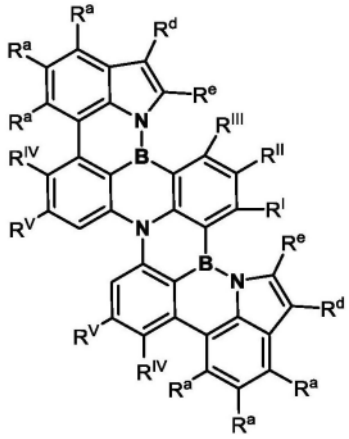
式 IVd。

[0515] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVd-2的结构或由式IVd-2的结构组成：

[0516] 

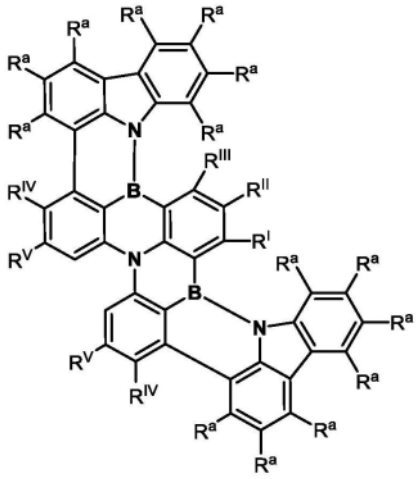
式 IVd-2。

[0517] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVe的结构或由式IVe的结构组成：

[0518] 

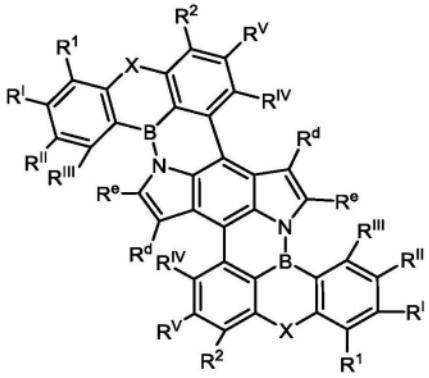
式 IVe。

[0519] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVe-2的结构或由式IVe-2的结构组成：

[0520] 

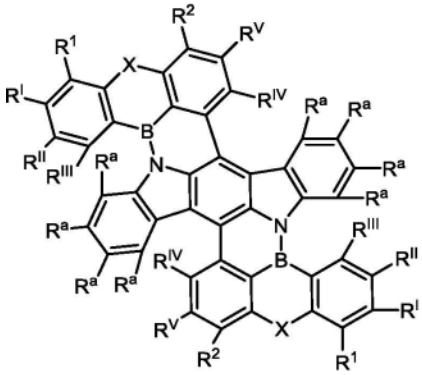
式 IVe-2。

[0521] 在发明的一个实施例中，有机分子/低聚物包括式IVf的结构或由式IVf的结构组成：

[0522] 

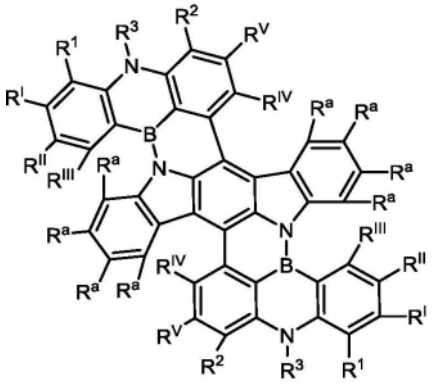
式 IVf。

[0523] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVf-2的结构或由式IVf-2的结构组成：

[0524] 

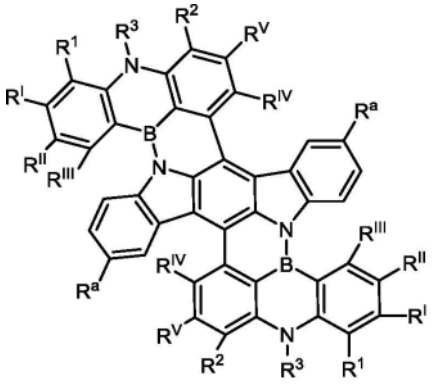
式 IVf-2。

[0525] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVf-3的结构或由式IVf-3的结构组成：

[0526] 

式 IVf-3。

[0527] 在发明的优选的实施例中，有机分子/低聚物包括式IVf-4的结构或由式IVf-4的结构组成：

[0528] 

式 IVf-4。

具体实施方式

[0529] 如在整个本申请中所使用的，术语“芳基”和“芳香族”可以在最广泛的意义上被理解为任何单环、双环或多环芳香族部分。因此，芳基包含6个至60个芳香环原子，杂芳基包含其至少一个是杂原子的5个至60个芳香环原子。尽管如此，在整个申请中，芳香环原子的数量可以在某些取代基的定义中作为下标数字给出。具体地，杂芳香环包括一个至三个杂原子。同样，术语“杂芳基”和“杂芳香族”可以在最广泛的意义上被理解为包括至少一个杂原子的任何单环、双环或多环杂芳香族部分。杂原子在每次出现时可以相同或不同，并且可以单独地选自于由N、O和S组成的组。因此，术语“亚芳基”指具有与其它分子结构的两个结合点并且因此用作连接基结构的二价取代基。在示例性实施例中的基团被定义为与这里所给出的定义不同(例如，芳香环原子的数量或杂原子的数量与给定的定义不同)的情况下，将应用示例性实施例中的定义。根据发明，缩合(环化)芳香多环或杂芳香多环由经由缩合反应形成多环的两个或更多个单芳香环或杂芳香环构成。

[0530] 具体地，如通篇所使用的，术语“芳基或杂芳基”包括可以经由芳香族基团或杂香芳族基团的任何位置结合的基团，该基团衍生自苯、萘、蒽、菲、芘、二氢芘、䓛、苉、荧蒽、苯并蒽、苯并菲、并四苯、并五苯、苯并芘、呋喃、苯并呋喃、异苯并呋喃、二苯并呋喃、噻吩、苯并噻吩、异苯并噻吩、二苯并噻吩、吡咯、吲哚、异吲哚、咔唑、吡啶、喹啉、异喹啉、吖啶、菲啶、苯并-5,6-喹啉、苯并-6,7-喹啉、苯并-7,8-喹啉、吩噻嗪、吩噁嗪、吡唑、吲唑、咪唑、苯

并咪唑、萘并咪唑、菲并咪唑、吡啶并咪唑、吡嗪并咪唑、喹喔啉并咪唑、噁唑、苯并噁唑、萘并噁唑、蒽并噁唑、菲并噁唑、异噁唑、1,2-噻唑、1,3-噻唑、苯并噻唑、哒嗪、苯并哒嗪、嘧啶、苯并嘧啶、1,3,5-三嗪、喹喔啉、吡嗪、吩嗪、萘啶、咔啉、苯并咔啉、菲咯啉、1,2,3-三唑、1,2,4-三唑、苯并三唑、1,2,3-噁二唑、1,2,4-噁二唑、1,2,5-噁二唑、1,2,3,4-四嗪、噻吟、蝶啶、中氮茚和苯并噻二唑或者上述基团的组合。

[0531] 如通篇所使用的,术语“环基团”可以在最广泛的意义上被理解为任何单环部分、双环部分或多环部分。

[0532] 如通篇所使用的,作为取代基的术语“联苯”可以在最广泛的意义上被理解为邻联苯、间联苯或对联苯,其中,邻、间和对是关于与另一化学部分的结合位所定义的。

[0533] 如通篇所使用的,术语“烷基”可以在最广泛的意义上被理解为任何直链、支链或环状的烷基取代基。具体地,术语烷基包括这样的取代基:甲基(Me)、乙基(Et)、正丙基(^{n}Pr)、异丙基(^{i}Pr)、环丙基、正丁基(^{n}Bu)、异丁基(^{i}Bu)、仲丁基(^{s}Bu)、叔丁基(^{t}Bu)、环丁基、2-甲基丁基、正戊基、仲戊基、叔戊基、2-戊基、新戊基、环戊基、正己基、仲己基、叔己基、2-己基、3-己基、新己基、环己基、1-甲基环戊基、2-甲基戊基、正庚基、2-庚基、3-庚基、4-庚基、环庚基、1-甲基环己基、正辛基、2-乙基己基、环辛基、1-双环[2,2,2]辛基、2-双环[2,2,2]辛基、2-(2,6-二甲基)辛基、3-(3,7-二甲基)辛基、金刚烷基、2,2,2-三氟乙基、1,1-二甲基-正己-1-基、1,1-二甲基-正庚-1-基、1,1-二甲基-正辛-1-基、1,1-二甲基-正癸-1-基、1,1-二甲基-正十二烷-1-基、1,1-二甲基-正十四烷-1-基、1,1-二甲基-正十六烷-1-基、1,1-二甲基-正十八烷-1-基、1,1-二乙基-正己-1-基、1,1-二乙基-正庚-1-基、1,1-二乙基-正辛-1-基、1,1-二乙基-正癸-1-基、1,1-二乙基-正十二烷-1-基、1,1-二乙基-正十四烷-1-基、1,1-二乙基-正十六烷-1-基、1,1-二乙基-正十八烷-1-基、1-(正丙基)-环己-1-基、1-(正丁基)-环己-1-基、1-(正己基)-环己-1-基、1-(正辛基)-环己-1-基和1-(正癸基)-环己-1-基。

[0534] 如通篇所使用的,术语“烯基”包括直链、支链和环状的烯基取代基。术语“烯基”例如包括这样的取代基:乙烯基、丙烯基、丁烯基、戊烯基、环戊烯基、己烯基、环己烯基、庚烯基、环庚烯基、辛烯基、环辛烯基或环辛二烯基。

[0535] 如通篇所使用的,术语“炔基”包括直链、支链和环状的炔基取代基。术语“炔基”例如包括乙炔基、丙炔基、丁炔基、戊炔基、己炔基、庚炔基或辛炔基。

[0536] 如通篇所使用的,术语“烷氧基”包括直链、支链和环状的烷氧基取代基。术语“烷氧基”示例性地包括甲氧基、乙氧基、正丙氧基、异丙氧基、正丁氧基、异丁氧基、仲丁氧基、叔丁氧基和2-甲基丁氧基。

[0537] 如通篇所使用的,术语“硫代烷氧基”包括其中示例性地烷氧基的O被S代替的直链、支链和环状的硫代烷氧基取代基。

[0538] 如通篇所使用的,术语“卤素”和“卤代”可以在最广泛的意义上被理解为优选地氟、氯、溴或碘。

[0539] 每当在此提到氢(H)时,氢(H)也可以在每次出现时被氘代替。

[0540] 将理解的是,当分子片段被描述为取代基或以其它方式附着到另一部分时,其名称可以被写成好像它是一个片段(例如,萘基、二苯并呋喃基)或好像它是整个分子(例如,萘、二苯并呋喃)。如在此所使用的,指定取代基或附着片段的这些不同方式被认为是等效

的。

[0541] 在一个实施例中,根据发明的有机分子在室温下在具有1重量%至5重量%(具体地,具有2重量%)的有机分子的聚(甲基丙烯酸甲酯)(PMMA)的膜中具有不超过5μs、不超过2.5μs、具体地不超过2.0μs、更优选地不超过1.0μs或者不超过0.7μs的激发态寿命。

[0542] 在发明的又一实施例中,根据发明的有机分子在室温下在具有1重量%至5重量%(具体地,具有2重量%)的有机分子的聚(甲基丙烯酸甲酯)(PMMA)的膜中具有在可见光或最接近紫外光范围内(即,在380nm至800nm的波长的范围内)的发射峰并且小于0.25eV(优选地小于0.22eV,更优选地小于0.18eV,甚至更优选地小于0.15eV,或者甚至小于0.12eV)的半峰全宽。

[0543] 轨道和激发态能量也可以通过实验方法的方式确定。最高占据分子轨道能量(E^{HOMO})通过本领域技术人员已知的方法经由具有0.1eV的精度的循环伏安法测量确定。最低未占分子轨道能量(E^{LUMO})被计算为$E^{HOMO}+E^{gap}$,其中,E^{gap}如下确定:对于主体化合物,除非另有说明,否则在聚(甲基丙烯酸甲酯)(PMMA)中具有10重量%的主体的膜的发射光谱的起始点被用作E^{gap}。对于发射体分子,E^{gap}被确定为在PMMA中具有1重量%至5重量%(具体地,具有2重量%)的发射体的膜的激发光谱和发射光谱交叉所处的能量。对于根据发明的有机分子,E^{gap}被确定为在PMMA中具有1重量%至5重量%(具体地,具有2重量%)的有机分子的膜的激发光谱和发射光谱交叉所处的能量。

[0544] 第一激发三重态T1的能量是通过低温下(通常地,77K下)的发射光谱的起始点确定的。对于其中第一激发单重态和最低三重态在能量上相差>0.4eV的主体化合物,在2-Me-THF中在稳态光谱中磷光通常是可见的。因此,三重态能量可以被确定为磷光光谱的起始点。对于TADF发射体分子,如果没有另外说明,则第一激发三重态T1的能量是通过77K下的延迟发射光谱的起始点确定的,该延迟发射光谱是在具有1重量%至5重量%(具体地,具有2重量%)的发射体并且在根据发明的有机分子的情况下具有1重量%至5重量%(具体地,具有2重量%)的根据发明的有机分子的PMMA的膜中所测量的。对于主体和发射体化合物两者,如果没有另外说明,则第一激发单重态S1的能量是通过发射光谱的起始点确定的,该发射光谱是在具有10重量%的主体或发射体化合物并且在根据发明的有机分子的情况下具有1重量%至5重量%(具体地,具有2重量%)的根据发明的有机分子的PMMA的膜中所测量的。

[0545] 发射光谱的起始点是通过计算发射光谱的切线与x轴的交点所确定的。发射光谱的切线被设定在发射带的高能侧处并且在发射光谱的最大强度的半高度(half maximum)的点处。

[0546] 发明的又一方面涉及发明的有机分子在光电器件中作为发光发射体或作为吸收体以及/或者作为主体材料和/或作为电子传输材料和/或作为空穴注入材料和/或作为空穴阻挡材料的应用。

[0547] 优选的实施例涉及根据发明的有机分子在光电器件中作为发光发射体的应用。

[0548] 光电器件可以在最广泛的意义上被理解为基于有机材料的任何器件,该有机材料适用于发射可见光或最接近紫外光(UV)范围内(即,380nm至800nm的波长的范围内)的光。更优选地,光电器件可以能够发射可见光范围(即,400nm至800nm)内的光。

[0549] 在这种应用的背景下,光电器件更具体地选自于由以下组成的组:

[0550] • 有机发光二极管(OLED)；

[0551] • 发光电化学电池；

[0552] • OLED传感器，尤其是未与周围环境密封地隔离的气体和蒸汽传感器；

[0553] • 有机二极管；

[0554] • 有机太阳能电池；

[0555] • 有机晶体管；

[0556] • 有机场效应晶体管；

[0557] • 有机激光器；以及

[0558] • 下变频元件。

[0559] 在这种应用的背景下的优选的实施例中，光电器件是选自于由有机发光二极管(OLED)、发光电化学电池(LEC)和发光晶体管组成的组中的器件。

[0560] 在该应用的情况下，光电器件中(更具体地，OLED中)的发射层中的根据发明的有机分子的分数是0.1重量％至99重量％(更具体地，1重量％至80重量％)。在替代实施例中，发射层中的有机分子的比例是100重量％。

[0561] 在一个实施例中，发光层(或称为“发射层”)不仅包括根据发明的有机分子，而并且包括其三重态(T1)能级和单重态(S1)能级在能量上比有机分子的三重态(T1)能级和单重态(S1)能级高的主体材料。

[0562] 发明的又一方面涉及一种组合物，该组合物包括以下成分或由以下成分组成：

[0563] (a)至少一种根据发明的有机分子，具体地呈发射体和/或主体的形式；和

[0564] (b)与根据发明的有机分子不同的一种或更多种发射体和/或主体材料；以及

[0565] (c)可选地，一种或更多种染料以及/或者一种或更多种溶剂。

[0566] 在一个实施例中，发光层包括组合物(或基本上由组合物组成)，该组合物包括以下成分或由以下成分组成：

[0567] (a)至少一种根据发明的有机分子，具体地呈发射体和/或主体的形式；和

[0568] (b)与根据发明的有机分子不同的一种或更多种发射体和/或主体材料；以及

[0569] (c)可选地，一种或更多种染料以及/或者一种或更多种溶剂。

[0570] 在具体的实施例中，发光层(EML)包括组合物(或基本上由组合物组成)，该组合物包括以下成分或由以下成分组成：

[0571] (i)0.1重量％至10重量％(优选地，0.5重量％至5重量％，具体地1重量％至3重量％)的一种或更多种根据发明的有机分子(E)；

[0572] (ii)5重量％至99重量％(优选地，15重量％至85重量％，具体地20重量％至75重量％)的至少一种主体化合物(H)；和

[0573] (iii)0.9重量％至94.9重量％(优选地，14.5重量％至80重量％，具体地24重量％至77重量％)的至少一种另一主体化合物(D)，该另一主体化合物(D)具有与根据发明的有机分子的结构不同的结构；以及

[0574] (iv)可选地，0重量％至94重量％(优选地，0重量％至65重量％，具体地0重量％至50重量％)的溶剂；以及

[0575] (v)可选地，0重量％至30重量％(具体地，0重量％至20重量％，优选地0重量％至5重量％)的至少一种另一发射体分子(F)，该另一发射体分子(F)具有与根据发明的有机分

子的结构不同的结构。

[0576] 优选地，能量可以从主体化合物(H)转移到一种或更多种根据发明的有机分子，具体地，能量可以从主体化合物(H)的第一激发三重态(T1(H))转移到一种或更多种根据发明的有机分子(E)的第一激发三重态(T1(E))，以及/或者从主体化合物(H)的第一激发单重态(S1(H))转移到一种或更多种根据发明的有机分子(E)的第一激发单重态(S1(E))。

[0577] 在一个实施例中，主体化合物(H)具有具备在-5eV至-6.5eV的范围内的能量(E^{HOMO}(H))的最高占据分子轨道(HOMO(H))，至少一种另一主体化合物(D)具有具备能量(E^{HOMO}(D))的最高占据分子轨道(HOMO(D))，其中，E^{HOMO}(H)>E^{HOMO}(D)。

[0578] 在又一实施例中，主体化合物(H)具有具备能量(E^{LUMO}(H))的最低未占分子轨道(LUMO(H))，至少一种另一主体化合物(D)具有具备能量(E^{LUMO}(D))的最低未占分子轨道(LUMO(D))，其中，E^{LUMO}(H)>E^{LUMO}(D)。

[0579] 在一个实施例中，主体化合物(H)具有具备能量(E^{HOMO}(H))的最高占据分子轨道(HOMO(H))和具备能量(E^{LUMO}(H))的最低未占分子轨道(LUMO(H))，并且

[0580] 至少一种另一主体化合物(D)具有具备能量(E^{HOMO}(D))的最高占据分子轨道(HOMO(D))和具备能量(E^{LUMO}(D))的最低未占分子轨道(LUMO(D))，

[0581] 根据发明的有机分子(E)具有具备能量(E^{HOMO}(E))的最高占据分子轨道(HOMO(E))和具备能量(E^{LUMO}(E))的最低未占分子轨道(LUMO(E))，

[0582] 其中，

[0583] E^{HOMO}(H)>E^{HOMO}(D)，并且根据发明的有机分子(E)的最高占据分子轨道(HOMO(E))的能级(E^{HOMO}(E))与主体化合物(H)的最高占据分子轨道(HOMO(H))的能级(E^{HOMO}(H))之间的差在-0.5eV与0.5eV之间(更优选地在-0.3eV与0.3eV之间，甚至更优选地在-0.2eV与0.2eV之间，或者甚至在-0.1eV与0.1eV之间)；以及

[0584] E^{LUMO}(H)>E^{LUMO}(D)，并且根据发明的有机分子(E)的最低未占分子轨道(LUMO(E))的能级(E^{LUMO}(E))与至少一种另一主体化合物D的最低未占分子轨道(LUMO(D))的能级(E^{LUMO}(D))之间的差在-0.5eV与0.5eV之间(更优选地在-0.3eV与0.3eV之间，甚至更优选地在-0.2eV与0.2eV之间，或者甚至在-0.1eV与0.1eV之间)。

[0585] 在发明的一个实施例中，主体化合物(D)和/或主体化合物(H)是热激活延迟荧光(TADF)材料。TADF材料表现出同小于2500cm^{-1}的第一激发单重态(S1)与第一激发三重态(T1)之间的能量差对应的ΔE_{ST}值。优选地，TADF材料表现出小于3000cm^{-1}、更优选地小于1500cm^{-1}、甚至更优选地小于1000cm^{-1}或者甚至小于500cm^{-1}的ΔE_{ST}值。

[0586] 在一个实施例中，主体化合物(D)是TADF材料，主体化合物(H)表现出大于2500cm^{-1}的ΔE_{ST}值。在具体的实施例中，主体化合物(D)是TADF材料，主体化合物(H)选自于由CBP、mCP、mCBP、9-[3-(二苯并呋喃-2-基)苯基]-9H-咔唑、9-[3-(二苯并噻吩-2-基)苯基]-9H-咔唑、9-[3,5-双(2-二苯并呋喃基)苯基]-9H-咔唑和9-[3,5-双(2-二苯并噻吩基)苯基]-9H-咔唑组成的组。

[0587] 在一个实施例中，主体化合物(H)是TADF材料，主体化合物(D)表现出大于2500cm^{-1}的ΔE_{ST}值。在具体的实施例中，主体化合物(H)是TADF材料，主体化合物(D)选自于由T2T(2,4,6-三(联苯-3-基)-1,3,5-三嗪)、T3T(2,4,6-三(三联苯-3-基)-1,3,5-三嗪)和/或TST(2,4,6-三(9,9'-螺二芴-2-基)-1,3,5-三嗪)组成的组。

[0588] 在又一方面，发明涉及一种光电器件，光电器件包括这里所描述的有机分子或这里所描述类型的组合物，光电器件更具体地呈选自于由有机发光二极管(OLED)、发光电化学电池、OLED传感器(更具体地，未密封外部地隔离的气体和蒸汽传感器)、有机二极管、有机太阳能电池、有机晶体管、有机场效应晶体管、有机激光器和下变频元件组成的组中的器件的形式。

[0589] 在优选的实施例中，光电器件是选自于由有机发光二极管(OLED)、发光电化学电池(LEC)和发光晶体管组成的组中的器件。

[0590] 在发明的光电器件的一个实施例中，根据发明的有机分子(E)用作发光层(EML)中的发射材料。

[0591] 在发明的光电器件的一个实施例中，发光层(EML)由这里所描述的根据发明的组合物组成。

[0592] 当光电器件是OLED时，其可以例如具有以下层结构：

[0593] 1、基底

[0594] 2、阳极层，A

[0595] 3、空穴注入层，HIL

[0596] 4、空穴传输层，HTL

[0597] 5、电子阻挡层，EBL

[0598] 6、发射层，EML

[0599] 7、空穴阻挡层，HBL

[0600] 8、电子传输层，ETL

[0601] 9、电子注入层，EIL

[0602] 10、阴极层，C，

[0603] 其中，OLED包括选自于HIL、HTL、EBL、HBL、ETL和EIL的组中的每个层，仅可选地，不同的层可以合并，OLED可以包括以上定义的每个层类型中的一个以上的层。

[0604] 此外，在一个实施例中，光电器件可以包括一个或更多个保护层，该保护层保护器件免受暴露于环境中的有害物质(包括例如湿气、蒸汽和/或气体)的损坏。

[0605] 在发明的一个实施例中，光电器件是具有以下倒置层结构的OLED：

[0606] 1、基底

[0607] 2、阴极层，C

[0608] 3、电子注入层，EIL

[0609] 4、电子传输层，ETL

[0610] 5、空穴阻挡层，HBL

[0611] 6、发射层，EML

[0612] 7、电子阻挡层，EBL

[0613] 8、空穴传输层，HTL

[0614] 9、空穴注入层，HIL

[0615] 10、阳极层，A，

[0616] 其中，OLED包括选自于HIL、HTL、EBL、HBL、ETL和EIL的组中的每个层，仅可选地，不同的层可以合并，OLED可以包括以上定义的每个层类型中的一个以上的层。

[0617] 在发明的一个实施例中，光电器件是可以具有堆叠体系结构的OLED。在这种体系结构中，与其中OLED并排放置的典型布置相反，各个单元堆叠在彼此的顶部上。可以用表现出堆叠体系结构的OLED产生混合光，具体地，可以通过堆叠蓝色OLED、绿色OLED和红色OLED产生白光。此外，表现出堆叠体系结构的OLED可以包括电荷产生层(CGL)，电荷产生层(CGL)典型地定位在两个OLED子单元之间并且典型地由n掺杂层和p掺杂层组成并且一个CGL的n掺杂层典型地定位为靠近阳极层。

[0618] 在发明的一个实施例中，光电器件是在阳极与阴极之间包括两个或更多个发射层的OLED。具体地，这种所谓的串联OLED包括三个发射层，其中，一个发射层发射红光，一个发射层发射绿光，一个发射层发射蓝光，并且可选地可以进一步在各个发射层之间包括诸如电荷产生层、阻挡层或传输层的层。在又一实施例中，发射层相邻地堆叠。在又一实施例中，串联OLED包括在每两个发射层之间的电荷产生层。另外，可以合并相邻的发射层或被电荷产生层分开的发射层。

[0619] 基底可以由任何材料或材料的组合形成。最常见地，载玻片被用作基底。可选地，可以使用薄金属层(例如，铜、金、银或铝膜)或者塑料膜或载玻片。这可以允许较高程度的柔性。阳极层(A)主要地由允许获得(基本上)透明膜的材料组成。由于两个电极中的至少一个应(基本上)透明以允许从OLED发射光，因此阳极层(A)或阴极层(C)是透明的。优选地，阳极层(A)包括大量的透明导电氧化物(TCO)，或者甚至由透明导电氧化物(TCO)组成。这种阳极层(A)可以例如包括氧化铟锡、氧化铝锌、氟掺杂的氧化锡、氧化铟锌、PbO、SnO、氧化锆、氧化钼、氧化钒、氧化钨、石墨、掺杂的Si、掺杂的Ge、掺杂的GaAs、掺杂的聚苯胺、掺杂的聚吡咯和/或掺杂的聚噻吩。

[0620] 阳极层(A)(基本上)可以由氧化铟锡(ITO)(例如，$(InO_3)_{0.9}(SnO_2)_{0.1}$)组成。可以通过使用空穴注入层(HIL)来补偿由透明导电氧化物(TCO)引起的阳极层(A)的粗糙度。此外，因为准电荷载流子从TCO到空穴传输层(HTL)的传输被促进，所以HIL可以促进准电荷载流子(即，空穴)的注入。空穴注入层(HIL)可以包括聚(3,4-乙撑二氧噻吩)(PEDOT)、聚苯乙烯磺酸盐(PSS)、MoO_2、V_2O_5、CuPC或CuI(具体地，PEDOT和PSS的混合物)。空穴注入层(HIL)也可以防止金属从阳极层(A)扩散到空穴传输层(HTL)中。HIL可以例如包括PEDOT:PSS(聚(3,4-乙撑二氧噻吩):聚苯乙烯磺酸盐)、PEDOT(聚(3,4-乙撑二氧噻吩))、mMTDATA(4,4',4"-三[苯基(间甲苯基)氨基]三苯胺)、螺-TAD(2,2',7,7'-四(n,n-二苯基氨基)-9,9'-螺二芴)、DNTPD(N1,N1'-(联苯-4,4'-二基)双(N1-苯基-N4,N4-二-间甲苯基苯-1,4-二胺))、NPB(N,N'-双(1-萘基)-N,N'-双-苯基-(1,1'-联苯)-4,4'-二胺)、NPNPB(N,N'-二苯基-N,N'-二-[4-(N,N-二苯基-氨基)苯基]联苯胺)、MeO-TPD(N,N,N',N'-四(4-甲氧基苯基)联苯胺)、HAT-CN(2,3,6,7,10,11-六氰基-1,4,5,8,9,12-六氮杂三亚苯)和/或螺-NPD(N,N'-二苯基-N,N'-双(1-萘基)-9,9'-螺二芴-2,7-二胺)。

[0621] 与阳极层(A)或空穴注入层(HIL)相邻，典型地定位有空穴传输层(HTL)。在此，可以使用任何空穴传输化合物。例如，诸如三芳胺和/或咔唑的富电子杂芳香族化合物可以用作空穴传输化合物。HTL可以降低阳极层(A)与发光层(EML)之间的能量势垒。空穴传输层(HTL)也可以是电子阻挡层(EBL)。优选地，空穴传输化合物具有相当高的其三重态T1的能级。例如，空穴传输层(HTL)可以包括诸如三(4-咔唑-9-基苯基)胺(TCTA)、聚-TPD(聚(4-丁基苯基-二苯基-胺))、α-NPD(2,2'-二甲基-N,N'-二-[(1-萘基)-N,N'-二苯基]-1,1'-联

苯-4,4'-二胺)、TAPC(4,4'-环己基-双[N,N-双(4-甲基苯基)苯胺])、2-TNATA(4,4',4"-三[2-萘基(苯基)氨基]三苯胺)、螺-TAD、DNTPD、NPB、NPNPB、MeO-TPD、HAT-CN和/或Tris-Pcz(9,9'-二苯基-6-(9-苯基-9H-咔唑-3-基)-9H,9'H-3,3'-联咔唑)的星形杂环。另外,HTL可以包括可以由有机空穴传输基质中的无机掺杂剂或有机掺杂剂组成的p掺杂层。诸如氧化钒、氧化钼或氧化钨的过渡金属氧化物可以例如用作无机掺杂剂。四氟四氰基醌二甲烷(F_4-TCNQ)、五氟苯甲酸铜(Cu(I)pFBz)或过渡金属配合物可以例如用作有机掺杂剂。

[0622] EBL可以例如包括mCP(1,3-双(咔唑-9-基)苯)、TCTA、2-TNATA、mCBP(3,3-二(9H-咔唑-9-基)联苯)、三-Pcz、CzSi(9-(4-叔丁基苯基)-3,6-双(三苯基甲硅烷基)-9H-咔唑)和/或DCB(N,N'-二咔唑基-1,4-二甲基苯)。

[0623] 与空穴传输层(HTL)相邻,典型地定位有发光层(EML)。发光层(EML)包括至少一种有机分子。具体地,EML包括至少一种根据发明的有机分子(E)。在一个实施例中,发光层仅包括根据发明的有机分子。典型地,EML附加地包括一种或更多种主体材料(H)。例如,主体材料(H)选自于CBP(4,4'-双(N-咔唑基)联苯)、mCP、mCBP、Sif87(二苯并[b,d]噻吩-2-基三苯基硅烷)、CzSi、Sif88(二苯并[b,d]噻吩-2-基二苯基硅烷)、DPEPO(双[2-(二苯基膦基)苯基]醚氧化物)、9-[3-(二苯并呋喃)-2-基)苯基]-9H-咔唑、9-[3-(二苯并噻吩-2-基)苯基]-9H-咔唑、9-[3,5-双(2-二苯并呋喃基)苯基]-9H-咔唑、9-[3,5-双(2-二苯并噻吩基)苯基]-9H-咔唑、T2T(2,4,6-三(联苯-3-基)-1,3,5-三嗪)、T3T(2,4,6-三(三联苯-3-基)-1,3,5-三嗪)和/或TST(2,4,6-三(9,9'-螺二芴-2-基)-1,3,5-三嗪)。主体材料(H)典型地应被选择为表现出在能量上比有机分子的第一三重态(T1)和第一单重态(S1)能级高的第一三重态(T1)和第一单重态(S1)能级。

[0624] 在发明的一个实施例中,EML包括具有至少一种空穴主导主体和一种电子主导主体的所谓的混合主体体系。在具体的实施例中,EML恰好包括根据发明的一种有机分子和混合主体体系,该混合主体体系包括作为电子主导主体的T2T以及作为空穴主导主体的选自于CBP、mCP、mCBP、9-[3-(二苯并呋喃-2-基)苯基]-9H-咔唑、9-[3-(二苯并噻吩-2-基)苯基]-9H-咔唑、9-[3,5-双(2-二苯并呋喃基)苯基]-9H-咔唑和9-[3,5-双(2-二苯并噻吩基)苯基]-9H-咔唑的主体。在又一实施例中,EML包括50重量%至80重量%(优选地,60重量%至75重量%)的主体、10重量%至45重量%(优选地,15重量%至30重量%)的T2T以及5重量%至40重量%(优选地,10重量%至30重量%)的根据发明的有机分子,该主体选自于CBP、mCP、mCBP、9-[3-(二苯并呋喃-2-基)苯基]-9H-咔唑、9-[3-(二苯并噻吩-2-基)苯基]-9H-咔唑、9-[3,5-双(2-二苯并呋喃基)苯基]-9H-咔唑和9-[3,5-双(2-二苯并噻吩基)苯基]-9H-咔唑。

[0625] 与发光层(EML)相邻,可以定位有电子传输层(ETL)。在此,可以使用任何电子传输剂。示例性地,可以使用诸如以苯并咪唑、吡啶、三唑、噁二唑(例如,1,3,4-噁二唑)、氧化膦和砜为例的贫电子化合物。电子传输体也可以是诸如1,3,5-三(1-苯基-1H-苯并[d]咪唑-2-基)苯(TPBi)的星形杂环。ETL可以包括NBphen(2,9-双(萘-2-基)-4,7-二苯基-1,10-菲咯啉)、Alq_3(三(8-羟基喹啉)铝)、TSPO1(二苯基-4-三苯基甲硅烷基苯基-膦氧化物)、BPyTP2(2,7-二(2,2'-联吡啶-5-基)三亚苯基)、Sif87(二苯并[b,d]噻吩-2-基三苯基硅烷)、Sif88(二苯并[b,d]噻吩-2-基二苯基硅烷)、BmPyPhB(1,3-双[3,5-二(吡啶-3-基)苯基]苯)和/或BTB(4,4'-双[2-(4,6-二苯基-1,3,5-三嗪基)]-1,1'-联苯)。可选地,ETL可以

掺杂有诸如Liq的材料。电子传输层(ETL)也可以阻挡空穴,或者引入空穴阻挡层(HBL)。

[0626] HBL可以例如包括BCP(2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-菲咯啉=浴铜灵)、BAlq(双(8-羟基-2-甲基喹啉)-(4-苯基苯氧基)铝)、NBphen(2,9-双(萘-2-基)-4,7-二苯基-1,10-菲咯啉)、Alq_3(三(8-羟基喹啉)铝)、TSPO1(二苯基-4-三苯基甲硅烷基苯基-膦氧化物)、T2T(2,4,6-三(联苯-3-基)-1,3,5-三嗪)、T3T(2,4,6-三(三联苯-3-基)-1,3,5-三嗪)、TST(2,4,6-三(9,9'-螺二芴-2-基)-1,3,5-三嗪)和/或TCB/TCP(1,3,5-三(N-咔唑基)苯/1,3,5-三(咔唑-9-基)苯)。

[0627] 与电子传输层(ETL)相邻,可以定位有阴极层(C)。阴极层(C)可以例如包括金属(例如,Al、Au、Ag、Pt、Cu、Zn、Ni、Fe、Pb、LiF、Ca、Ba、Mg、In、W或Pd)或金属合金,或者可以由金属(例如,Al、Au、Ag、Pt、Cu、Zn、Ni、Fe、Pb、LiF、Ca、Ba、Mg、In、W或Pd)或金属合金组成。出于实际原因,阴极层也可以由诸如Mg、Ca或Al的(基本上)不透明的金属组成。可选地或附加地,阴极层(C)也可以包括石墨和/或碳纳米管(CNT)。可选地,阴极层(C)也可以由纳米级银线组成。

[0628] OLED可以进一步可选地包括在电子传输层(ETL)与阴极层(C)之间的保护层(其可以被指定为电子注入层(EIL))。该层可以包括氟化锂、氟化铯、银、Liq(8-羟基喹啉锂)、Li_2O、BaF_2、MgO和/或NaF。

[0629] 可选地,电子传输层(ETL)和/或空穴阻挡层(HBL)也可以包括一种或更多种主体化合物(H)。

[0630] 为了进一步修改发光层(EML)的发射光谱和/或吸收光谱,发光层EML可以进一步包括一种或更多种另一发射体分子(F)。这样的发射体分子(F)可以是本领域已知的任何发射体分子。优选地,这种发射体分子(F)是具有与根据发明的有机分子(E)的结构不同的结构的分子。发射体分子(F)可以可选地是TADF发射体。可选地,发射体分子(F)可以可选地是能够使发光层(EML)的发射光谱和/或吸收光谱移位的荧光和/或磷光发射体分子。示例性地,通过发射与通过有机分子发射的光相比典型地红移的光,三重态和/或单重态激子可以在弛豫到基态(S0)之前从根据发明的有机分子转移到发射体分子(F)。可选地,发射体分子(F)也可以引起双光子效应(即,两个光子对吸收最大值的能量的一半的吸收)。

[0631] 可选地,光电器件(例如,OLED)例如可以是基本上白色的光电器件。例如,这种白色光电器件可以包括至少一种(深)蓝色发射体分子以及发射绿光和/或红光的一种或更多种发射体分子。然后,如上所述的两种或更多种分子之间也可以可选地存在能量转移性(energy transmittance)。

[0632] 如在此所使用的,如果在具体上下文中没有更具体地定义,则发射和/或吸收光的颜色的指定如下:

[0633] 紫色:>380nm至420nm的波长范围;

[0634] 深蓝色:>420nm至480nm的波长范围;

[0635] 天蓝色:>480nm至500nm的波长范围;

[0636] 绿色:>500nm至560nm的波长范围;

[0637] 黄色:>560nm至580nm的波长范围;

[0638] 橙色:>580nm至620nm的波长范围;

[0639] 红色:>620nm至800nm的波长范围。

[0640] 对于发射体分子,这种颜色指发射最大值。因此,例如,深蓝色发射体具有>420nm至480nm的范围内的发射最大值,天蓝色发射体具有>480nm至500nm的范围内的发射最大值,绿色发射体具有>500nm至560nm的范围内的发射最大值,红色发射体具有>620nm至800nm的范围内的发射最大值。

[0641] 深蓝色发射体可以优选地具有低于480nm、更优选地低于470nm、甚至更优选地低于465nm或者甚至低于460nm的发射最大值。它将典型地高于420nm、优选地高于430nm、更优选地高于440nm或者甚至高于450nm。

[0642] 绿色发射体具有低于560nm、更优选地低于550nm、甚至更优选地低于545nm或者甚至低于540nm的发射最大值。它将典型地高于500nm、更优选地高于510nm、甚至更优选地高于515nm或者甚至高于520nm。

[0643] 因此,本发明的又一方面涉及一种OLED,该OLED在1000cd/m^2下表现出大于8%(更优选地大于10%,更优选地大于13%,甚至更优选地大于15%,或者甚至大于20%)的外量子效率,以及/或者表现出在420nm与500nm之间(优选地在430nm与490nm之间,更优选地在440nm与480nm之间,甚至更优选地在450nm与470nm之间)的发射最大值,以及/或者在500cd/m^2下表现出大于100小时(优选地大于200小时,更优选地大于400小时,甚至更优选地大于750小时,或者甚至大于1000小时)的LT80值。因此,本发明的又一方面涉及一种OLED,该OLED的发射表现出小于0.45(优选地小于0.30,更优选地小于0.20,或者甚至更优选地小于0.15,或者甚至小于0.10)的CIEy色坐标。

[0644] 本发明的又一方面涉及一种以不同的颜色点发射光的OLED。根据本发明,OLED发射具有窄发射带(小的半峰全宽(FWHM))的光。一方面,根据发明的OLED发射具有小于0.25eV(优选地小于0.20eV,更优选地小于0.17eV,甚至更优选地小于0.15eV,或者甚至小于0.13eV)的主发射峰的FWHM的光。

[0645] 本发明的又一方面涉及一种OLED,该OLED发射具有CIEx和CIEy色坐标(CIEx=0.131,CIEy=0.046)(该CIEx和CIEy色坐标(CIEx=0.131,CIEy=0.046)接近如由ITU-R Recommendation BT.2020(Rec.2020)所定义的基色蓝色的CIEx(=0.131)和CIEy(=0.046)色坐标)的光,并且因此适用于在超高清(UHD)显示器(例如,UHD-TV)中应用。因此,本发明的又一方面涉及一种OLED,该OLED的发射表现出在0.02与0.30之间(优选地在0.03与0.25之间,更优选地在0.05与0.20之间,或者甚至更优选地在0.08与0.18之间,或者甚至在0.10与0.15之间)的CIEx色坐标以及/或者在0.00与0.45之间(优选地在0.01与0.30之间,更优选地在0.02与0.20之间,或者甚至更优选地在0.03与0.15之间,或者甚至在0.04与0.10之间)的CIEy色坐标。

[0646] 本发明的另一实施例涉及一种OLED,该OLED发射具有CIEx和CIEy色坐标(CIEx=0.170,CIEy=0.797)(该CIEx和CIEy色坐标(CIEx=0.170,CIEy=0.797)接近如由ITU-R Recommendation BT.2020(Rec.2020)所定义的基色绿色的CIEx(=0.170)和CIEy(=0.797)色坐标)的光,并且因此适用于在超高清(UHD)显示器(例如,UHD-TV)中应用。在此上下文中,术语“接近”指本段的末尾处提供的CIEx和CIEy坐标的范围。在商业应用中,典型地使用顶部发射(顶电极是透明的)器件,而在整个本申请中所使用的测试器件代表底部发射器件(底电极和基底是透明的)。因此,本发明的又一方面涉及一种OLED,该OLED的发射表现出在0.15与0.45之间(优选地在0.15与0.35之间,更优选地在0.15与0.30之间,或者甚至更

优选地在0.15与0.25之间,或者甚至在0.15与0.20之间)的CIEx色坐标以及/或者在0.60与0.92之间(优选地在0.65与0.90之间,更优选地在0.70与0.88之间,或者甚至更优选地在0.75与0.86之间,或者甚至在0.79与0.84之间)的CIEy色坐标。

[0647] 因此,本发明的又一方面涉及一种OLED,该OLED在14500cd/m^2下表现出大于8%(更优选地大于10%,更优选地大于13%,甚至更优选地大于15%,或者甚至大于17%,或者甚至大于20%)的外量子效率,以及/或者表现出在485nm与560nm之间(优选地在500nm与560nm之间,更优选地在510nm与550nm之间,甚至更优选地在515nm与540nm之间)的发射最大值,以及/或者在14500cd/m^2下表现出大于100小时(优选地大于250小时,更优选地大于500小时,甚至更优选地大于750小时,或者甚至大于1000小时)的LT97值。

[0648] 在本发明的又一实施例中,组合物在室温下具有大于20%(优选地大于30%,更优选地大于35%,更优选地大于40%,更优选地大于45%,更优选地大于50%,更优选地大于55%,甚至更优选地大于60%,或者甚至大于70%)的光致发光量子产率(PLQY)。

[0649] 在又一方面,发明涉及一种用于制造光电组件的方法。在这种情况下,使用发明的有机分子。

[0650] 可以通过气相沉积和/或液体处理的任何方式来制造根据本发明的光电器件(具体地,OLED)。因此,至少一层:

[0651] -通过升华工艺的方式制备,

[0652] -通过有机气相沉积工艺的方式制备,

[0653] -通过载气升华工艺的方式制备,

[0654] -溶液处理或印刷。

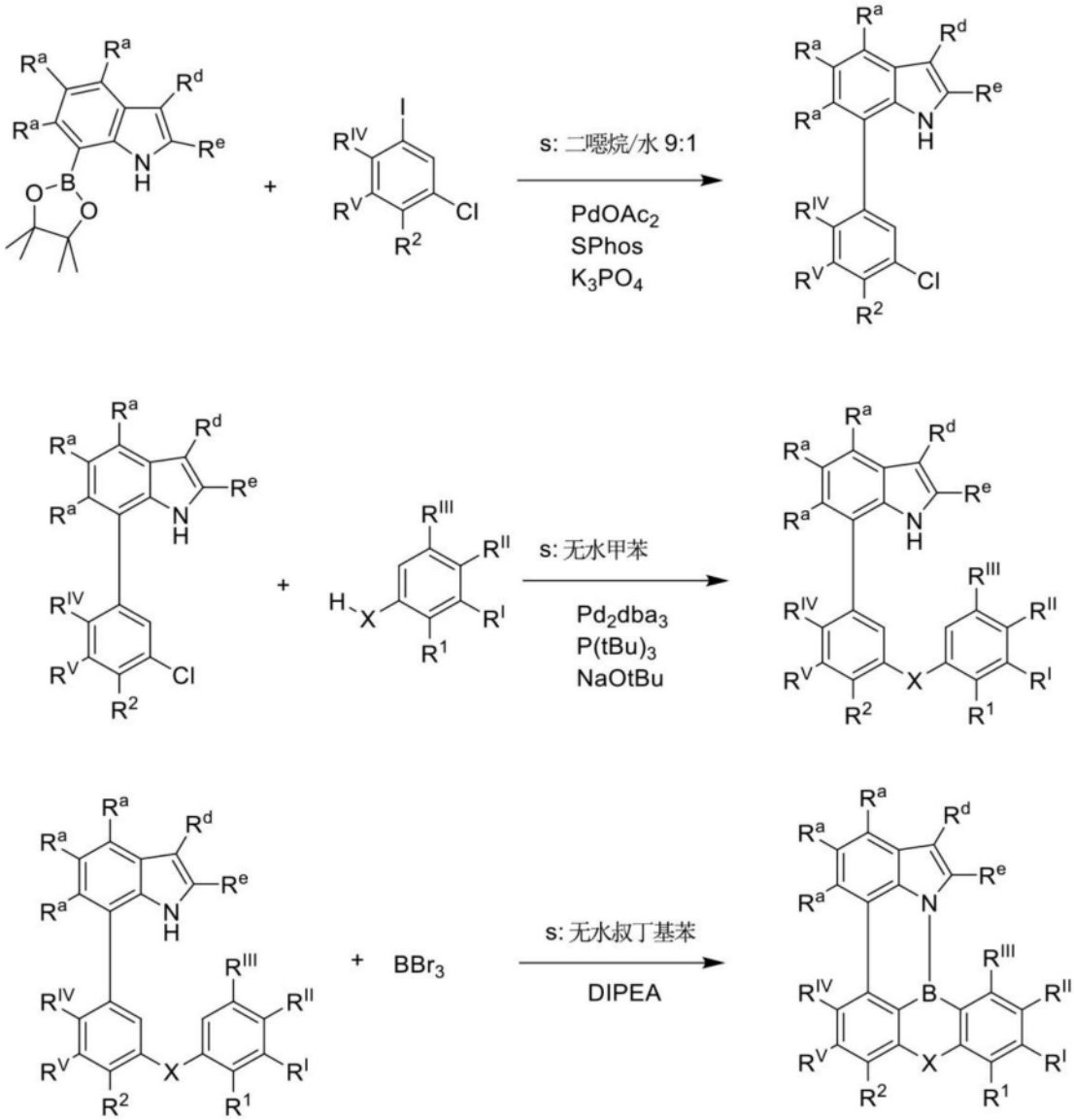
[0655] 根据本发明的用于制造光电器件(具体地,OLED)的方法是本领域已知的。通过随后的沉积工艺的方式,在合适的基底上单独地并且连续地沉积不同的层。可以使用相同或不同的沉积方法来沉积各个层。

[0656] 气相沉积工艺例如包括热(共)蒸发、化学气相沉积和物理气相沉积。对于有源矩阵OLED显示器,AMOLED背板用作基底。可以采用适当的溶剂从溶液或分散体处理各个层。溶液沉积工艺例如包括旋涂、浸涂和喷射印刷。可以可选地在惰性气氛中(例如,在氮气氛中)进行液体处理,可以通过本领域已知的方式完全地或部分地去除溶剂。

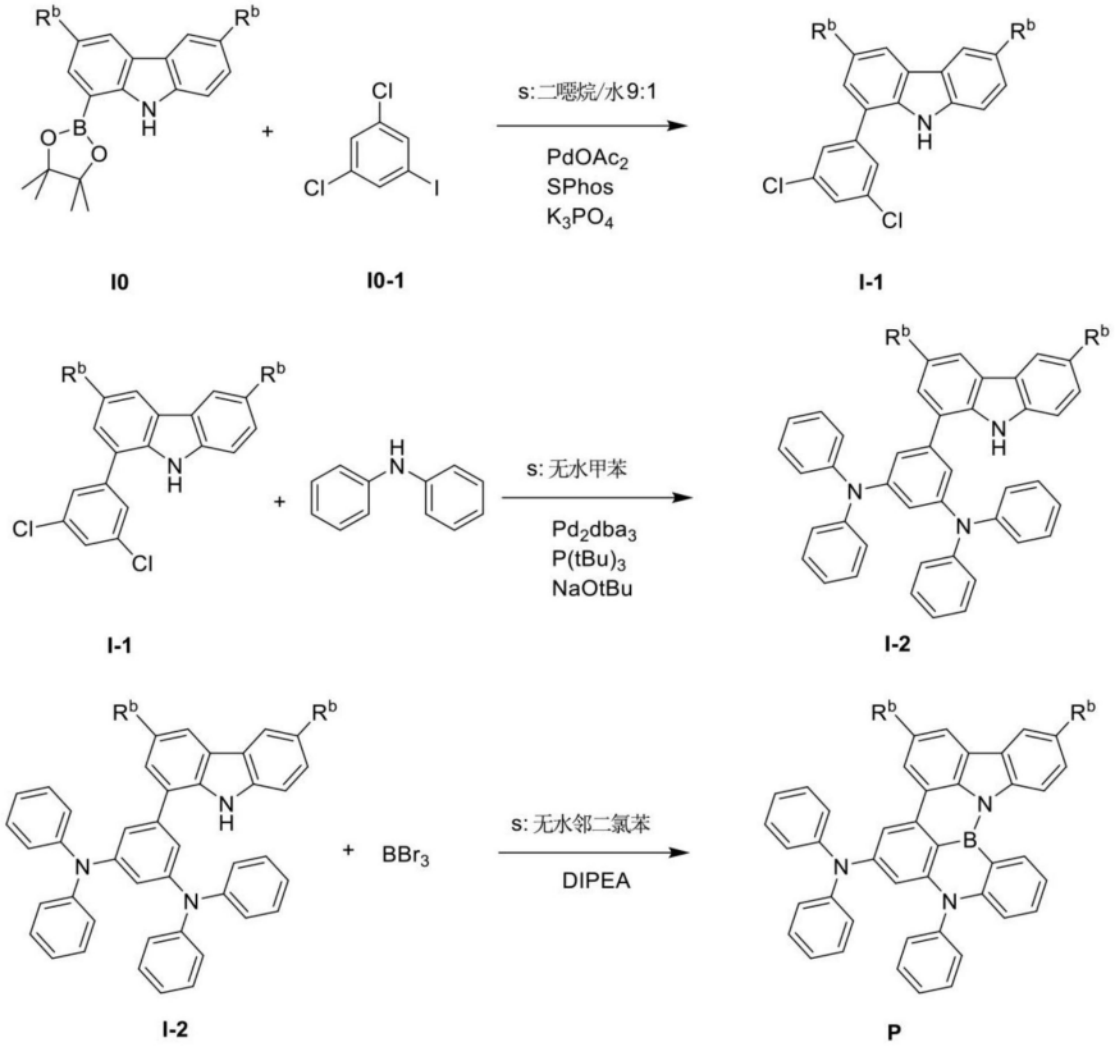
[0657] 示例

[0658] 一般合成方案I

[0659]



[0660] 一般合成方案II

[0661] 

[0662] 用于合成的一般步骤：

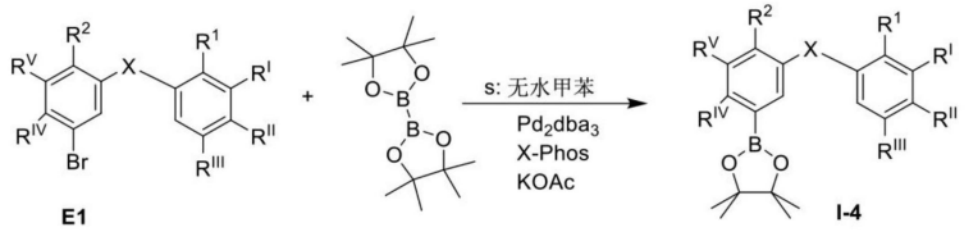
[0663] AAV1：在氮气氛下在二噁烷/水混合物中在90℃下搅拌I0(1.00当量)、3,5-二氯-碘苯(I0-1,0.8当量)、醋酸钯(II)(0.03当量)、2-二环己基膦基-2',6'-二甲氧基联苯(SPhos,CAS:657408-07-6,0.06当量)和磷酸三钾(K_3PO_4;3.00当量)12小时。在冷却至室温(rt)之后,在DCM与盐水之间萃取反应混合物且分离相,然后减压去除溶剂。通过柱色谱法纯化粗物质,以84％的产率获得I-1。GC-MS:313.02m/z。

[0664] AAV2：在氮气氛下在无水甲苯中在100℃下搅拌I-1(1.00当量)、二苯胺(CAS:122-39-4,2.5当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.01当量)、三叔丁基膦(CAS:13716-12-6,0.04当量)和叔丁醇钠(CAS:865-48-5,4.00当量)12小时。在冷却至室温(rt)之后,用水和盐水洗涤反应混合物且分离相,然后减压去除溶剂。通过重结晶纯化粗物质,以45％的产率获得I-2。LC-MS:578.40m/z,rt(保留时间)处于:4.69min。

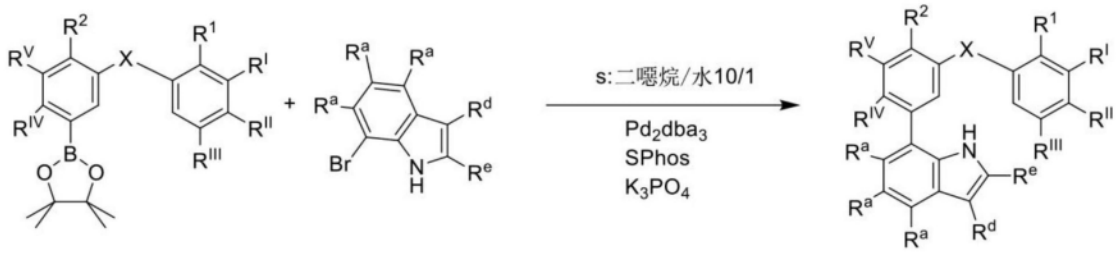
[0665] AAV3：在氮下将I-2(1.00当量)置于圆底烧瓶中。加入溶剂1,2-二氯苯。逐滴加入三溴化硼(CAS:10294-33-4,6.00当量),并且将其加热至180℃。在冷却至rt之后,将其进一步冷却至0℃。加入DIPEA(CAS:7087-68-5,10.00当量),并且将其搅拌1小时。用水洗涤反应混合物且分离相,然后减压去除溶剂。通过柱色谱法纯化粗物质,以32％的产率获得P。LC-MS:586m/z,rt处于:5.73min。

[0666] 一般合成方案III

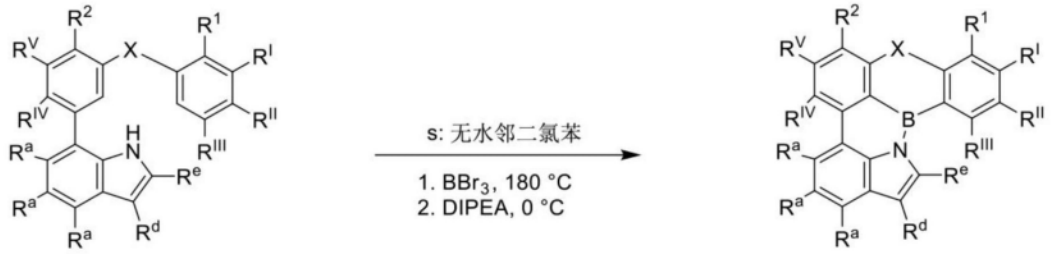
[0667]



E1 I-4



I-4 E2 I-5



I-5 P-1

[0668] 用于合成的一般步骤：

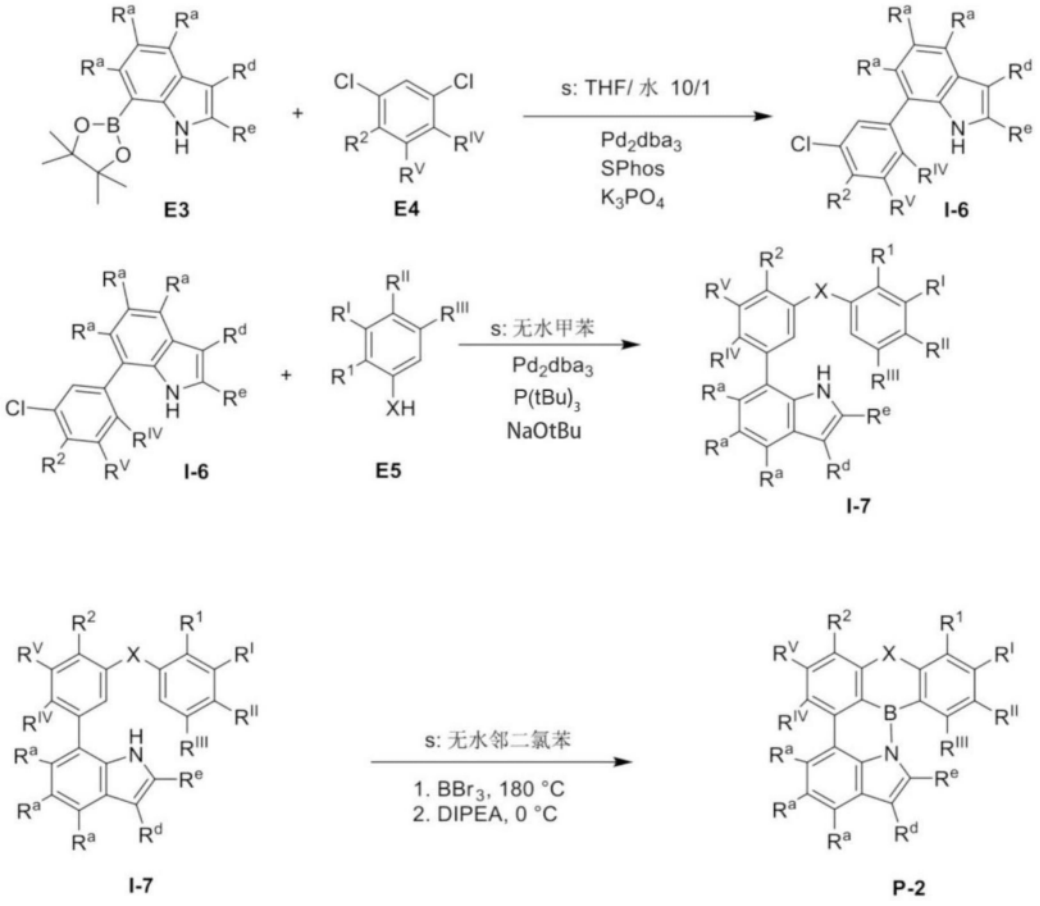
[0669] AAV4：在氮气氛下在无水甲苯中在105℃搅拌E1(1.00当量)、双(频哪醇合)二硼(CAS:73183-34-3,1.0当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(CAS:51364-51-3,0.02当量)、2-二环己基膦基-2',4',6'-三异丙基-1,1'-联苯(X-Phos,CAS:564483-18-7,0.08当量)和乙酸钾(KOAc,CAS:127-08-2,2.00当量)24小时。在冷却至室温(rt)之后，在乙酸乙酯与盐水之间萃取反应混合物，并且减压浓缩合并的有机层。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质，获得作为固体的I-4。

[0670] AAV5：在氮气氛下在二噁烷/水混合物中在100℃下搅拌I-4(1.00当量)、E2(1.0当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.01当量)、SPhos(CAS:657408-07-6,0.04当量)和磷酸三钾(K_3PO_4,CAS:7778-53-2,3.00当量)2小时。在冷却至室温(rt)之后，用水和盐水洗涤反应混合物。用无水$MgSO_4$干燥合并的有机层，过滤并且减压浓缩。通过重结晶或柱色谱法纯化粗物质，获得作为固体的I-5。

[0671] AAV6：在氮下将I-5(1.00当量)置于圆底烧瓶中。加入溶剂1,2-二氯苯。逐滴加入三溴化硼(CAS:10294-33-4,4.00当量)，并且将其加热至180℃过夜。在冷却至rt之后，将其进一步冷却至0℃。加入DIPEA(CAS:7087-68-5,10.00当量)，并且将其搅拌1小时。用水洗涤反应混合物且分离相，然后减压去除溶剂。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质，获得作为固体的P-1。

[0672] 一般合成方案IV

[0673]



[0674] 用于合成的一般步骤：

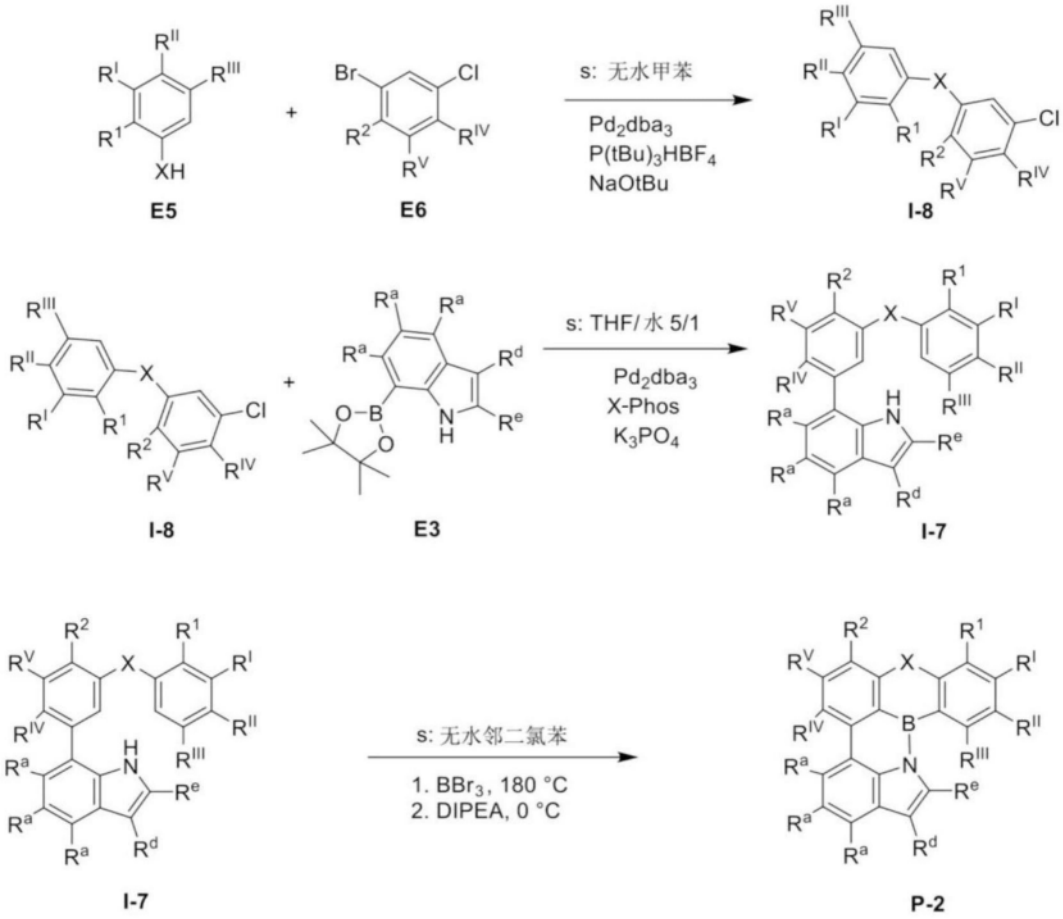
[0675] AAV7：在氮气氛下在THF/水混合物中在80℃下搅拌E3(2.00当量)、E4(1.0当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.01当量)、2-二环己基膦基-2',6'-二甲氧基联苯(SPhos,CAS:657408-07-6,0.04当量)和磷酸三钾(K_3PO_4,3.00当量)。在冷却至室温(rt)之后,在乙酸乙酯与盐水之间萃取反应混合物且分离相,然后减压去除溶剂。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质,获得作为固体的I-6。

[0676] AAV8：在氮气氛下在无水甲苯中在110℃下搅拌I-6(1.00当量)、E5(1.00当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.01当量)、三叔丁基膦(CAS:13716-12-6,0.04当量)和叔丁醇钠(CAS:865-48-5,3.00当量)72小时。在冷却至室温(rt)之后,用水和盐水洗涤反应混合物且分离相,然后减压去除溶剂。通过重结晶或柱色谱法纯化粗物质,获得作为固体的I-7。

[0677] AAV9：在氮下将I-7(1.00当量)置于圆底烧瓶中。加入溶剂1,2-二氯苯。逐滴加入三溴化硼(CAS:10294-33-4,4.00当量),并且将其加热至180℃。在冷却至rt之后,将其进一步冷却至0℃。加入DIPEA(CAS:7087-68-5,10.00当量),并且将其搅拌1小时。用水洗涤反应混合物且分离相,然后减压去除溶剂。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质,获得作为固体的P-2。

[0678] 一般合成方案V

[0679]



[0680] 用于合成的一般步骤：

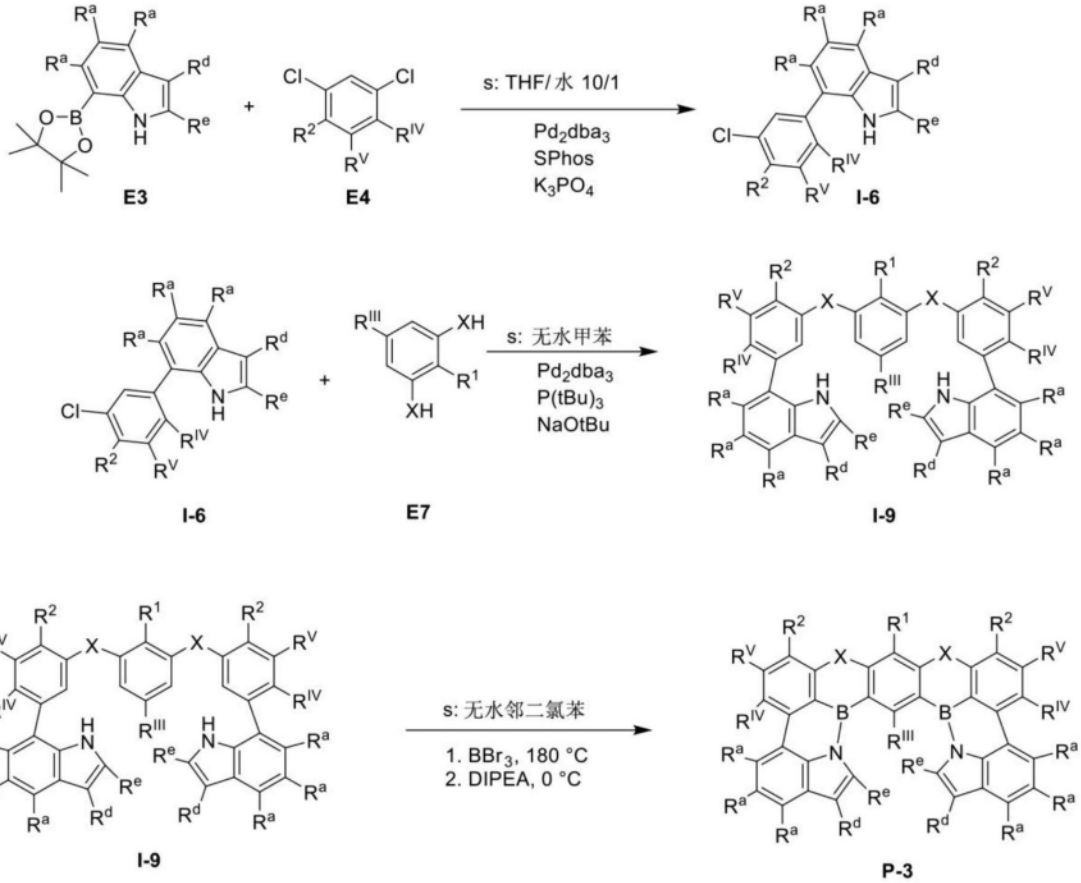
[0681] AAV10：在氮气氛下在无水甲苯中在100℃下搅拌E5(1.05当量)、E6(1.00当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.005当量)、叔丁醇钠(NaOtBu,CAS:865-48-5,1.50当量)和三叔丁基鏻四氟硼酸盐($P(tBu)_3HBF_4$;CAS:131274-22-1,0.02当量)过夜。在冷却至室温(rt)之后，向反应混合物加入水，分离相，并且用无水$MgSO_4$干燥合并的有机层，过滤并且减压浓缩。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质，获得作为固体的I-8。

[0682] AAV11：在氮气氛下在THF/水混合物中在80℃下搅拌I-8(1.00当量)、E3(1.2当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.01当量)、X-Phos(CAS:564483-18-7,0.04当量)和磷酸三钾(K_3PO_4,CAS:7778-53-2,2.00当量)96小时。在冷却至室温(rt)之后，用水和盐水洗涤反应混合物，用无水$MgSO_4$干燥合并的有机层，过滤并且减压浓缩。通过重结晶或柱色谱法纯化粗物质，获得作为固体的I-7。

[0683] 如AAV9中所述进行最后的反应步骤，其中使用1,2-二氯苯作为溶剂，并且其中反应温度是180℃。

[0684] 一般合成方案VI

[0685]



[0686] 用于合成的一般步骤：

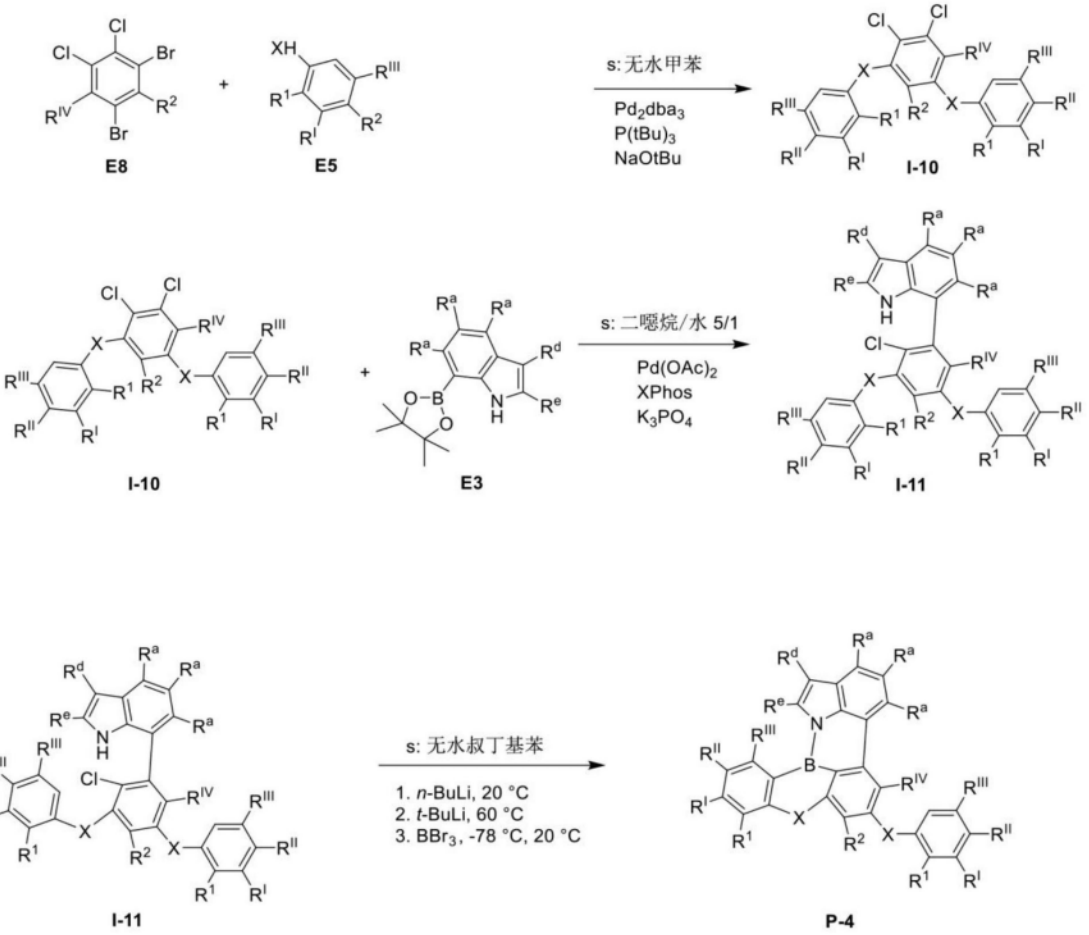
[0687] 如AAV7中所述进行第一反应步骤。

[0688] AAV12:在氮气氛下在无水甲苯中在110℃下搅拌I-6(2.00当量)、E7(1.0当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.01当量)、三叔丁基膦(CAS:13716-12-6,0.04当量)和叔丁醇钠(CAS:865-48-5,6.00当量)72小时。在冷却至室温(rt)之后,在乙酸乙酯与盐水之间萃取反应混合物且分离相,并且减压去除溶剂。通过重结晶或通过柱色谱法纯化粗物质,获得作为固体的I-9。

[0689] AAV13:在氮下将I-9(1.00当量)置于圆底烧瓶中。加入溶剂1,2-二氯苯。逐滴加入三溴化硼(CAS:10294-33-4,6.00当量),并且将其加热至180℃。在冷却至rt之后,将其进一步冷却至0℃。加入DIPEA(CAS:7087-68-5,10.00当量),并且将其搅拌1小时。用水洗涤反应混合物且分离相,然后减压去除溶剂。通过柱色谱法或重结晶纯化粗物质,获得作为固体的P-3。

[0690] 一般合成方案VII

[0691]



[0692] 用于合成的一般步骤:

[0693] AAV14:在氮气氛下在无水甲苯中在110℃下搅拌E5(2.10当量)、E8(1.00当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.01当量)、叔丁醇钠(NaOtBu,CAS:865-48-5,3.15当量)和三叔丁基膦(P(tBu)$_3$;CAS:13716-12-6,0.04当量)1小时。在冷却至室温(rt)之后,在乙酸乙酯与盐水之间萃取反应混合物,并且减压浓缩合并的有机层。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质,获得作为固体的I-10。

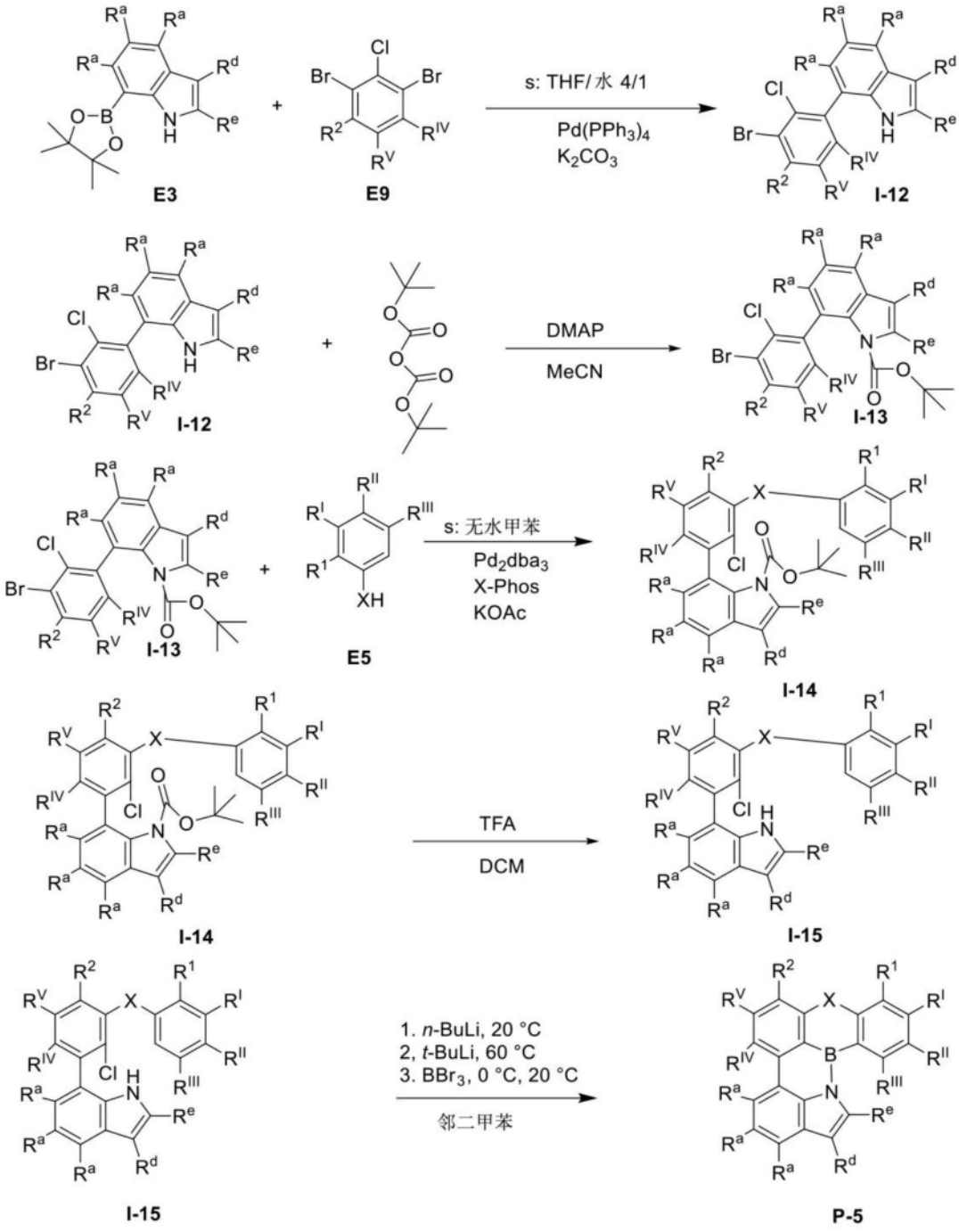
[0694] AAV15:在氮气氛下在二噁烷/水混合物中在100℃下搅拌I-10(1.00当量)、E3(1.2当量)、醋酸钯(II)(CAS:3375-31-3,0.06当量)、XPhos(CAS:564483-18-7,0.12当量)和磷酸三钾(K_3PO_4,CAS:7778-53-2,3.00当量)55小时。在冷却至室温(rt)之后,在甲苯与盐水之间萃取反应混合物,并且减压浓缩合并的有机层。通过重结晶或柱色谱法纯化粗物质,获得作为固体的I-11。

[0695] AAV0-3:

[0696] 在氮下,将I-11(1.00当量)溶解在叔丁基苯中。在20℃下,注入n-BuLi(2.5M于己烷中,CAS:109-72-8,1.1当量),并且将混合物搅拌15min。随后,加入t-BuLi(1M于戊烷中,CAS:594-19-4,2.2当量),并且在60℃下搅拌混合物2小时。随后,将混合物冷却至低于-78℃,然后逐滴加入BBr_3(CAS:10294-33-4,1.3当量)。将混合物温热至rt,然后在rt下搅拌16小时。在乙酸乙酯与水之间萃取混合物,并且减压浓缩合并的有机层。用柱色谱法或通过重结晶纯化粗产物,以获得作为固体的目标化合物P-4。

[0697] 一般合成方案VIII

[0698]



[0699] 用于合成的一般步骤：

[0700] AAV16：在氮气氛下在THF/水混合物中在80℃下搅拌E3(1.00当量)、E9(1.1当量)、四(三苯基膦)钯(0)(Pd(PPh$_3$)$_4$，CAS：14221-01-3，0.02当量)和碳酸钾(K_2CO_3；2.00当量)48小时。在冷却至室温(rt)之后，分离相，并且用乙酸乙酯萃取水层。用无水$MgSO_4$干燥合并的有机层，过滤并且减压浓缩。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质，获得作为固体的I-12。

[0701] AAV17：在氮气氛下在无水MeCN中在室温下搅拌I-12(1.00当量)、二碳酸二叔丁酯(CAS：24424-99-5，1.4当量)、4-二甲氨基吡啶(4-DMAP，CAS：1122-58-3，1.00当量)16小时。向反应混合物加入NaOH溶液(1M)，分离相，并且用乙酸乙酯萃取水层。用水和盐水洗涤合并的有机层，用无水$MgSO_4$干燥，过滤并且减压浓缩。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质，

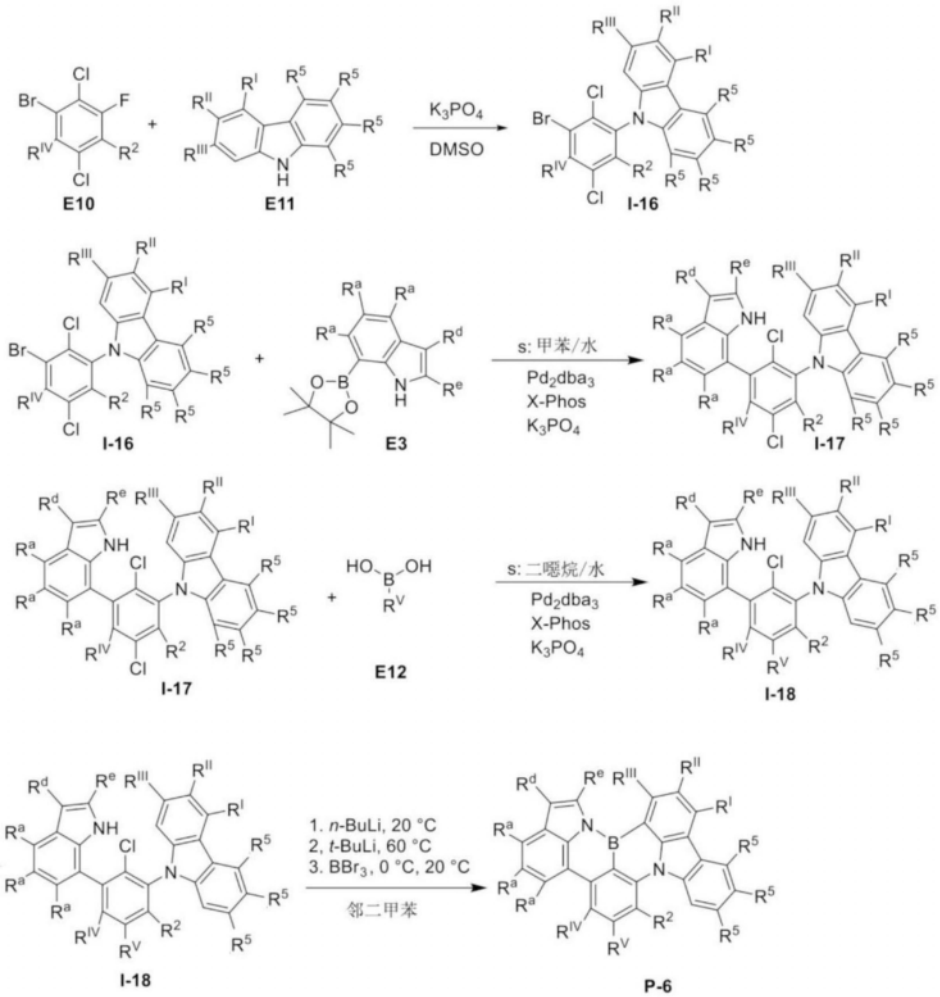
获得作为固体的I-13。

[0702] AAV18:在氮气氛下在无水甲苯中在110℃下搅拌I-13(1.00当量)、E5(1.20当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.01当量)、三叔丁基鏻四氟硼酸盐(CAS:131274-22-1,0.04当量)和叔丁醇钠(CAS:865-48-5,2.00当量)16小时。在冷却至室温(rt)之后,用水洗涤反应混合物,并且用乙酸乙酯萃取水层。用无水$MgSO_4$干燥合并的有机层,过滤并且减压浓缩。通过重结晶或柱色谱法纯化粗物质,获得作为固体的I-14。

[0703] AAV19:将I-14(1.00当量)溶解于二氯甲烷(DCM)中。在室温下加入三氟乙酸(CAS:76-05-1;99.7当量),并且搅拌反应混合物2小时。随后,分离相,并且用DCM萃取TFA层。用饱和$NaHCO_3$溶液和水洗涤合并的有机层,用无水$MgSO_4$干燥并且过滤。在减压去除溶剂之后,通过重结晶或柱色谱法纯化粗物质,获得作为固体的I-15。

[0704] AAV20:在氮下将I-15(1.00当量)置于圆底烧瓶中。加入溶剂邻二甲苯。在20℃下,逐滴加入正丁基锂(2.5M于己烷中,CAS:109-72-8,1.10当量),并且搅拌混合物15min。随后,逐滴加入叔丁基锂(1.6M于己烷中,CAS:594-19-4,2.20当量),将温度升至60℃并且搅拌反应混合物2小时。将反应混合物冷却至室温。在0℃下,逐滴加入三溴化硼(1M于庚烷中,CAS:10294-33-4,1.30当量),在0℃下搅拌混合物1小时,随后在rt下搅拌6小时。将反应混合物倒入5% NH_3溶液中,分离相并且用水洗涤有机层。用无水$MgSO_4$干燥有机层,过滤并且减压浓缩。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质,获得作为固体的P-5。

[0705] 一般合成方案IX



[0706]

[0707] 用于合成的一般步骤：

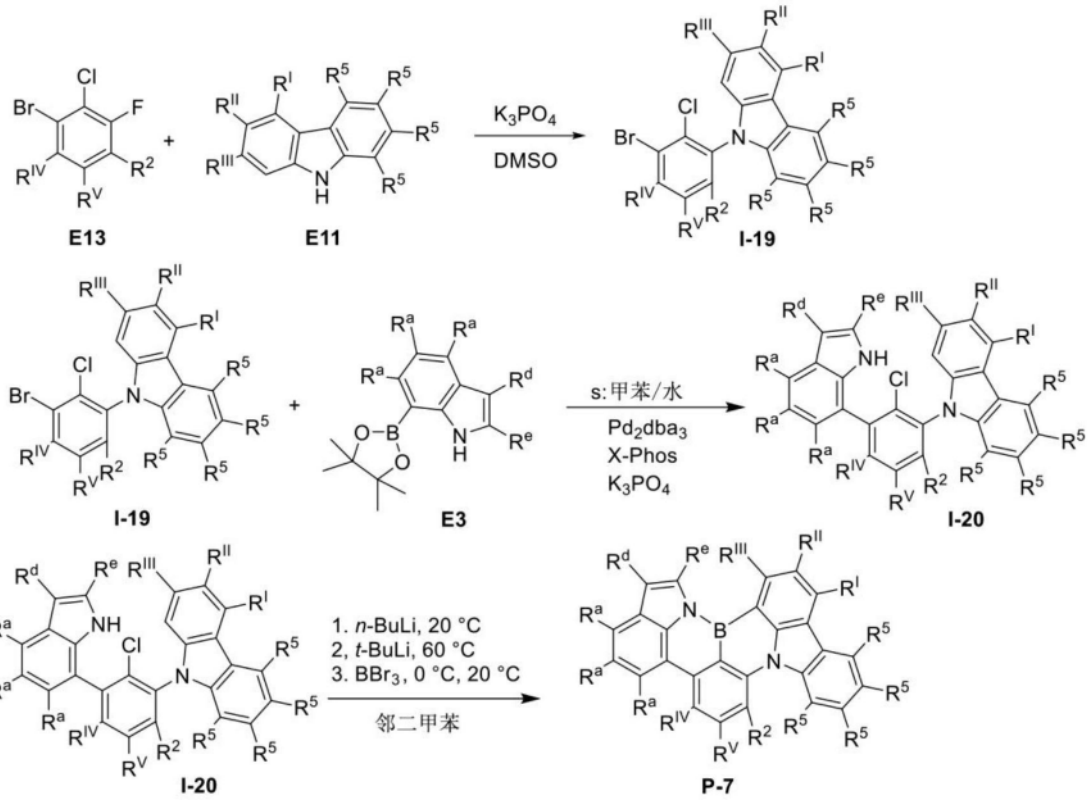
[0708] AAV21：在无水DMSO中，在100℃下加热E10(1.10当量)、E11(1.00当量)和磷酸三钾(1.50当量，CAS：7778-53-2)48小时。在冷却至rt之后，将混合物倒入到冰水中。滤出沉淀，用水和乙醇洗涤并且收集。通过重结晶或柱色谱法纯化粗产物，以获得作为固体的化合物I-16。

[0709] AAV22：在氮下，在甲苯/水(按体积计8:1)的混合物中，在95℃下使I-16(1.00当量)与E3(1.00当量)、磷酸三钾(1.80当量，CAS：7778-53-2)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(0.01当量，CAS：51364-51-3)和X-Phos(0.04当量，CAS：564483-18-7)反应48小时。在冷却至rt之后，分离相并且用乙酸乙酯萃取水层。用无水$MgSO_4$干燥合并的有机层，过滤并且减压浓缩。通过柱色谱法或重结晶纯化粗产物，以获得作为固体的化合物I-17。

[0710] AAV23：在氮下，在二噁烷/水(按体积计5:1)的混合物中，在100℃下使I-17(1.00当量)与E12(1.50当量)、磷酸三钾(3.00当量，CAS：7778-53-2)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(0.01当量，CAS：51364-51-3)和X-Phos(0.04当量，CAS：564483-18-7)反应5小时。在冷却至rt之后，分离相并且用乙酸乙酯萃取水层。用无水$MgSO_4$干燥合并的有机层，过滤并且减压浓缩。通过柱色谱法或重结晶纯化粗产物，以获得作为固体的化合物I-18。

[0711] 如AAV20中所述进行最后的反应步骤。

[0712] 一般合成方案X

[0713] 

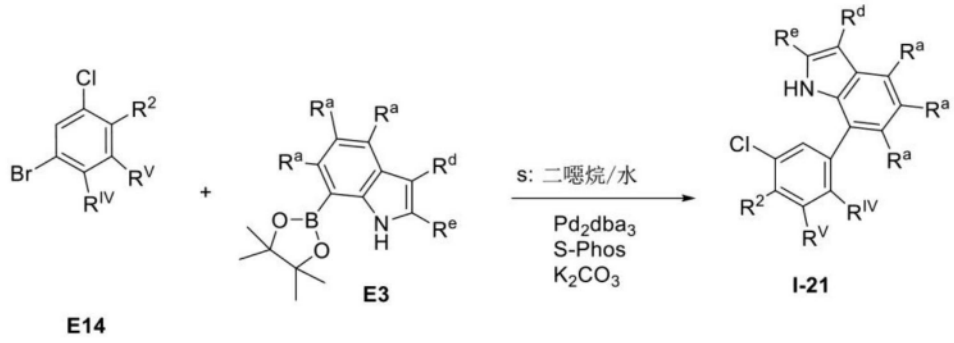
[0714] 用于合成的一般步骤：

[0715] AAV24：在无水DMSO中，在100℃下加热E13(1.10当量)、E11(1.00当量)和磷酸三钾(1.50当量，CAS：7778-53-2)48小时。在冷却至rt之后，将混合物倒入到冰水中。滤出沉淀，用水和乙醇洗涤并且收集。通过重结晶或柱色谱法纯化粗产物，以获得作为固体的化合物I-19。

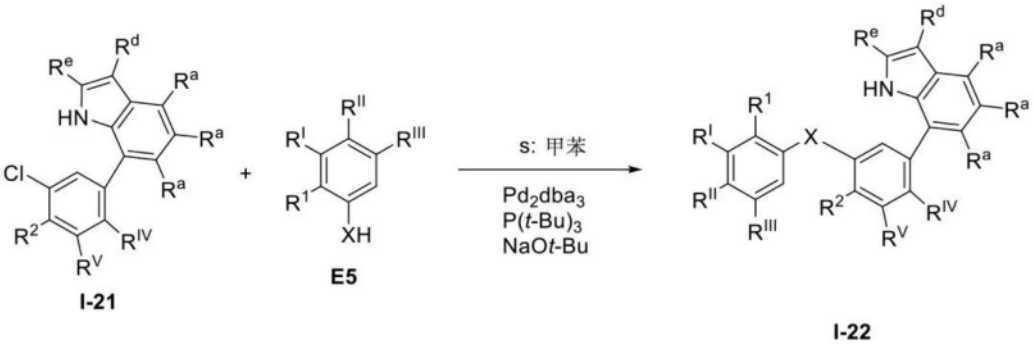
[0716] AAV25:在氮下,在甲苯/水(按体积计8:1)的混合物中,在100℃下使I-19(1.00当量)与E3(1.20当量)、磷酸三钾(2.00当量,CAS:7778-53-2)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(0.01当量,CAS:51364-51-3)和X-Phos(0.04当量,CAS:564483-18-7)反应5小时。在冷却至rt之后,分离相并且用乙酸乙酯萃取水层。用无水$MgSO_4$干燥合并的有机层,过滤并且减压浓缩。通过柱色谱法或重结晶纯化粗产物,以获得作为固体的化合物I-20。

[0717] 如AAV0-3中所述进行最后的反应步骤。

[0718] 一般合成方案XI



[0719]





[0720] 用于合成的一般步骤:

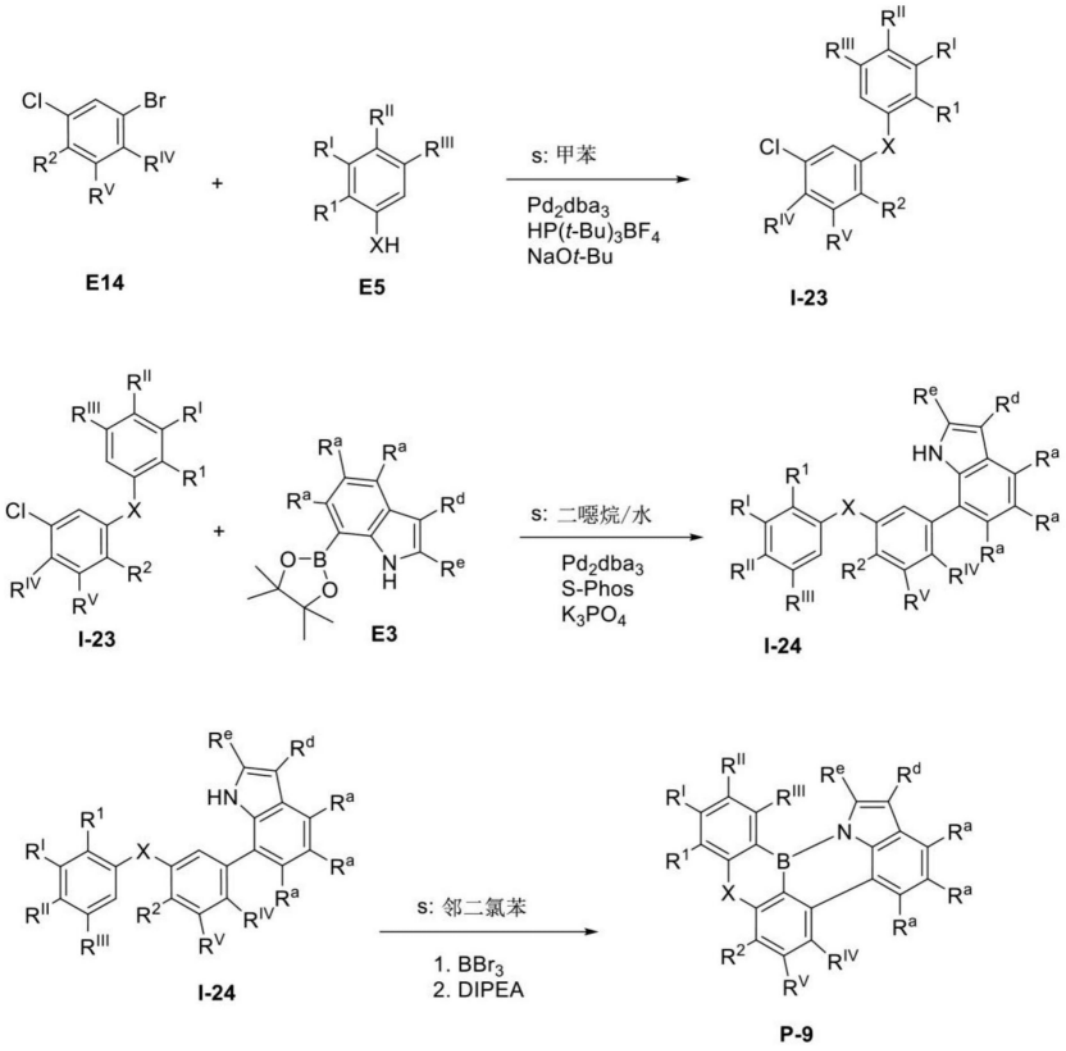
[0721] AAV26:在氮下,在二噁烷/水(按体积计10:1)的混合物中,在90℃下使E14(1.00当量)与E3(1.00当量)、碳酸钾(2.00当量,CAS:584-08-7)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(0.02当量,CAS:51364-51-3)和S-Phos(0.08当量,CAS:657408-07-6)反应72小时。在冷却至rt之后,分离相并且用乙酸乙酯萃取水层。用无水$MgSO_4$干燥合并的有机层,过滤并且减压浓缩。通过柱色谱法或重结晶纯化粗产物,以获得作为固体的化合物I-21。

[0722] AAV27:在氮气氛下在无水甲苯中在110℃下搅拌E5(1.00当量)、I-21(1.00当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.01当量)、叔丁醇钠(NaOtBu,CAS:865-48-5,3.00当量)和三叔丁基膦(P(tBu)$_3$;CAS:13716-12-6,0.04当量)24小时。在冷却至室温

(rt)之后,在乙酸乙酯与盐水之间萃取反应混合物,并且减压浓缩合并的有机层。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质,获得作为固体的I-22。

[0723] AAV28:在氮下,在无水二氯苯中,在135℃下使I-22(1.00当量)与BBr_3(3.00当量,CAS:10294-33-4)反应45min。在冷却至rt之后,将混合物进一步冷却至0℃,然后加入DIPEA(10.0当量,CAS:7087-68-5)。加入水,分离相,并且用二氯甲烷萃取水层。用水洗涤合并的有机层,用无水$MgSO_4$干燥,过滤并且浓缩。通过柱色谱法或重结晶纯化粗产物,以获得作为固体的化合物P-8。

[0724] 一般合成方案XII

[0725] 

[0726] 用于合成的一般步骤:

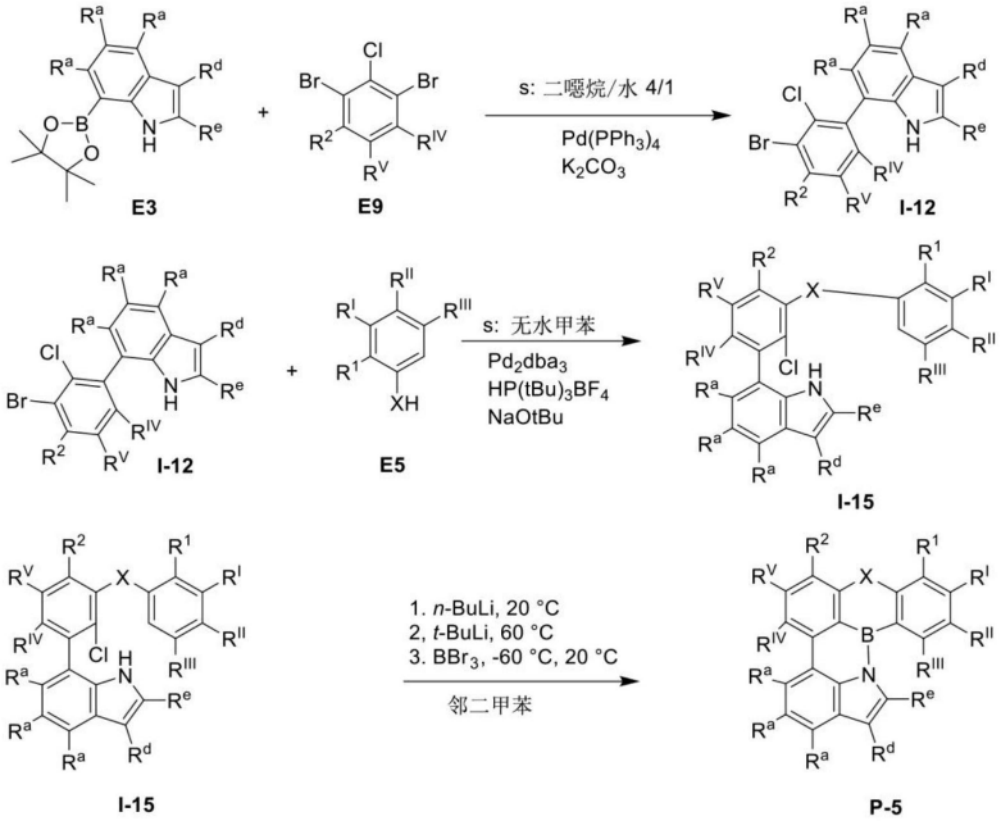
[0727] AAV29:在氮气氛下在无水甲苯中在100℃下搅拌E5(1.05当量)、E14(1.00当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.005当量)、叔丁醇钠(NaOtBu,CAS:865-48-5,1.50当量)和三叔丁基鏻四氟硼酸盐($HP(tBu)_3BF_4$;CAS:131274-22-1,0.02当量)1小时。在冷却至室温(rt)之后,在乙酸乙酯与盐水之间萃取反应混合物,并且减压浓缩合并的有机层。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质,获得作为固体的I-23。

[0728] AAV30:在氮下,在二噁烷/水(按体积计5:1)的混合物中,在100℃下使I-23(1.00当量)与E3(1.10当量)、磷酸三钾(2.00当量,CAS:7778-53-2)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(0.01当量,CAS:51364-51-3)和S-Phos(0.04当量,CAS:657408-07-6)反应48小时。在冷却

至rt之后，分离相并且用乙酸乙酯萃取水层。用无水$MgSO_4$干燥合并的有机层，过滤并且减压浓缩。通过柱色谱法或重结晶纯化粗产物，以获得作为固体的化合物I-24。

[0729] AAV31：在氮下，在无水二氯苯中，在90℃下使I-24(1.00当量)与BBr_3(3.00当量，CAS:10294-33-4)反应1小时。在冷却至rt之后，将混合物进一步冷却至0℃，然后加入DIPEA(10.0当量，CAS:7087-68-5)。加入水，分离相，并且用二氯甲烷萃取水层。用水洗涤合并的有机层，用无水$MgSO_4$干燥，过滤并且浓缩。通过柱色谱法或重结晶纯化粗产物，以获得作为固体的化合物P-9。

[0730] 一般合成方案XIII

[0731] 

[0732] 用于合成的一般步骤：

[0733] AAV32：在氮下，在二噁烷/水(按体积计4:1)的混合物中，在80℃下使E3(1.00当量)与E9(1.30当量)、碳酸钾(2.00当量，CAS:584-08-7)和四(三苯基膦)钯(0)(0.03当量，CAS:14221-01-3)反应8小时。在冷却至rt之后，分离相并且用乙酸乙酯萃取水层。用无水$MgSO_4$干燥合并的有机层，过滤并且减压浓缩。通过柱色谱法或重结晶纯化粗产物，以获得作为固体的化合物I-12。

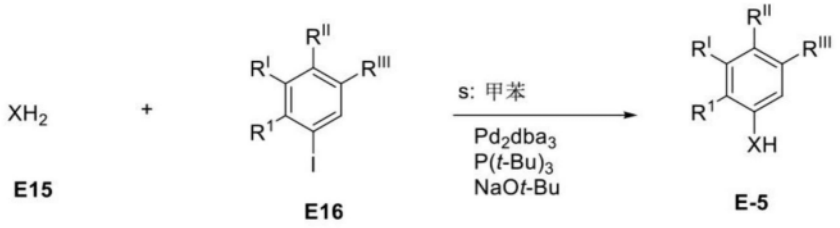
[0734] AAV33：在氮气氛下在无水甲苯中在110℃下搅拌E5(1.10当量)、I-12(1.00当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3，0.01当量)、叔丁醇钠(NaOtBu，CAS:865-48-5，3.20当量)和三叔丁基鏻四氟硼酸盐($HP(tBu)_3BF_4$；CAS:131274-22-1，0.04当量)3小时。在冷却至室温(rt)之后，在乙酸乙酯与盐水之间萃取反应混合物，并且减压浓缩合并的有机层。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质，获得作为固体的I-15。

[0735] AAV34：在氮下，在rt下向I-15(1.00当量)的无水邻二甲苯溶液加入n-BuLi(2.5M于己烷中，1.10当量，CAS:109-72-8)。在搅拌15min之后，加入t-BuLi(1.6M于戊烷中，2.20

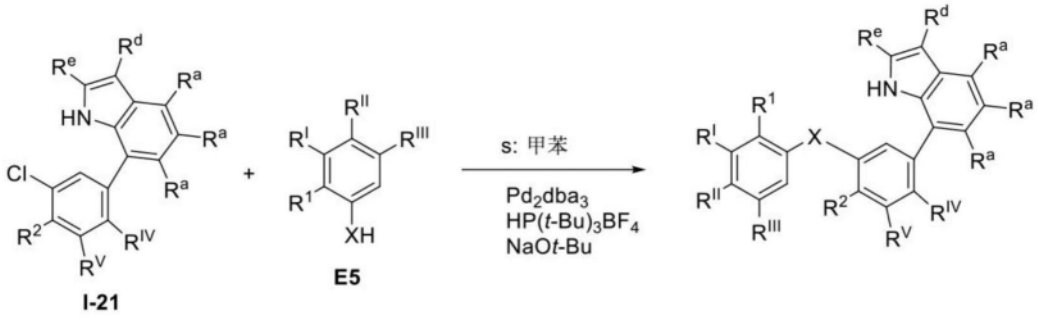
当量,CAS:594-19-4),并且在60℃下加热混合物2小时。随后,将混合物冷却至低于-60℃,然后逐滴加入BBr_3(1.50当量,CAS:10294-33-4)。随后,在0℃下搅拌混合物1小时,然后在rt下搅拌16小时。将混合物倒入到饱和$NaHCO_3$溶液中。分离相,并且用乙酸乙酯萃取水层。用水洗涤合并的有机层,用无水$MgSO_4$干燥,过滤并且浓缩。通过柱色谱法或重结晶纯化粗产物,以获得作为固体的化合物P-5。

[0736] 一般合成方案XIV

[0737] 对于第一反应步骤X=N-(C_6-C_{18}芳基)



[0738]





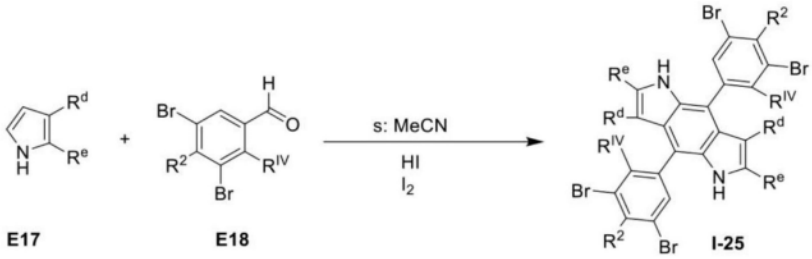
[0739] 用于合成的一般步骤:

[0740] AAV35:在氮气氛下在无水甲苯中在60℃下搅拌E15(1.10当量)、E16(1.00当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.01当量)、叔丁醇钠(NaOtBu,CAS:865-48-5,2.00当量)和三叔丁基膦(P(tBu)$_3$;CAS:13716-12-6,0.04当量)直至反应完成(TLC控制)。在冷却至室温(rt)之后,在乙酸乙酯与盐水之间萃取反应混合物,并且减压浓缩合并的有机层。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质,获得作为固体的E-5。

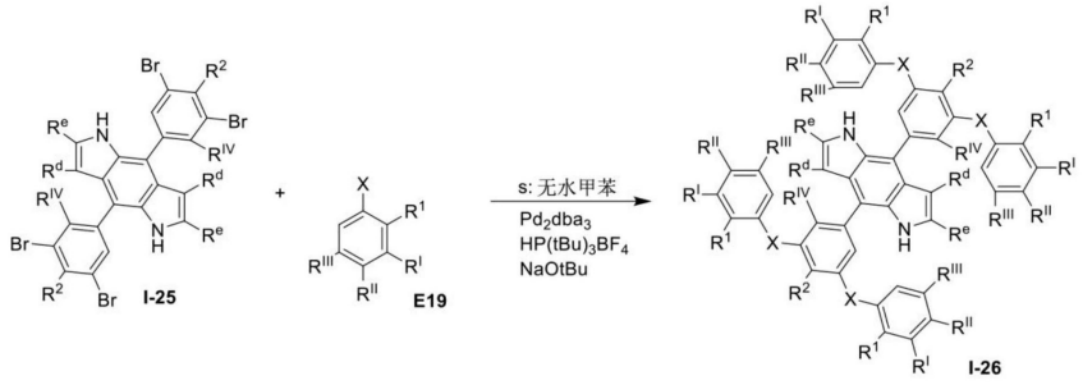
[0741] AAV36:在氮气氛下在无水甲苯中回流搅拌E5(1.00当量)、I-21(1.00当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.01当量)、叔丁醇钠(NaOtBu,CAS:865-48-5,2.00当量)和三叔丁基鏻四氟硼酸盐(HP(t-Bu)$_3$$BF_4$;CAS:131274-22-1,0.02当量)直至反应完成(TLC控制)。在冷却至室温(rt)之后,在甲苯与盐水之间萃取反应混合物,并且减压浓缩合并的有机层。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质,获得作为固体的I-22。

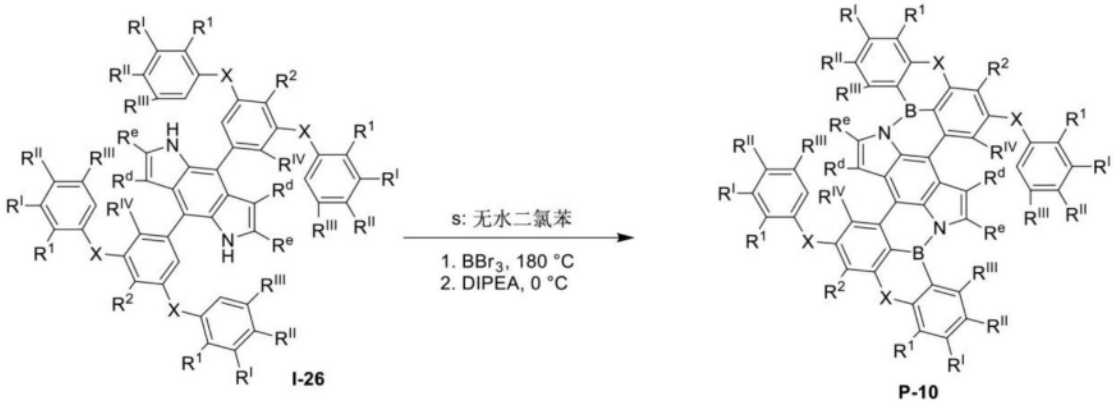
[0742] AAV37:在氮下将I-22(1.00当量)置于圆底烧瓶中。加入溶剂1,2-二氯苯。逐滴加入三溴化硼(CAS:10294-33-4,3.00当量),将其加热至180℃直至反应完成(TLC控制)。在冷却至rt之后,将其进一步冷却至0℃。加入DIPEA(CAS:7087-68-5,10.00当量),并且将其搅拌1小时。用水洗涤反应混合物且分离相,然后减压去除溶剂。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质,获得作为固体的P-8。

[0743] 一般合成方案XV



[0744]





[0745] 用于合成的一般步骤:

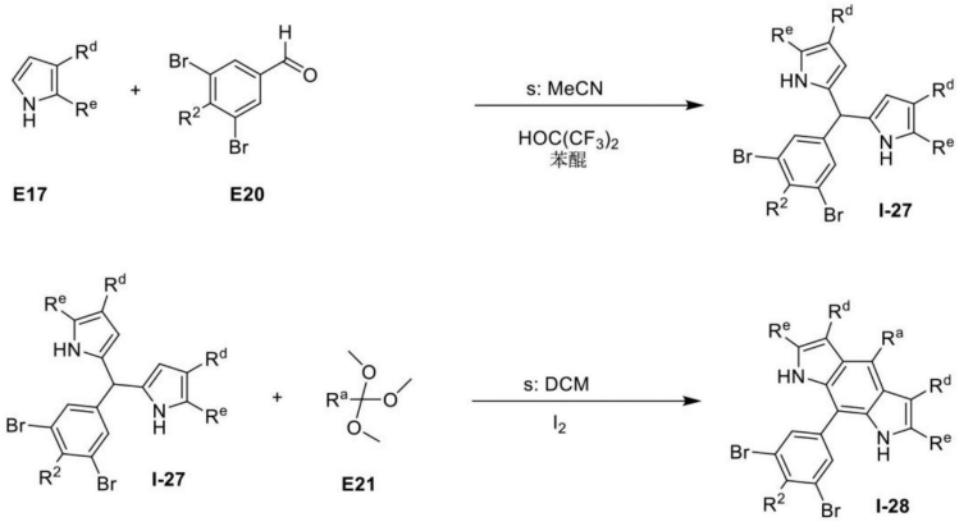
[0746] AAV38:在氮气氛下在无水乙腈中在100℃下搅拌E17(1.40当量)、E18(0.9当量)、氢碘酸(CAS:10034-85-2,0.20当量)16小时。将反应混合物冷却至0℃;过滤沉淀物并且用冷乙腈(cold acetonitrile,低温乙腈)洗涤。将固体溶解在乙腈中;加入碘(CAS:7553-56-2,0.40当量),并且在100℃下搅拌混合物直至反应完成(通过TLC监测)。用饱和硫代亚硫酸钠溶液淬灭反应混合物,并且用冷乙腈、甲醇和己烷洗涤沉淀物。通过重结晶或通过柱色谱法纯化粗物质,获得作为固体的I-25。

[0747] AAV39:在氮气氛下在无水甲苯中在110℃下搅拌I-25(1.00当量)、E19(6.0当量)、

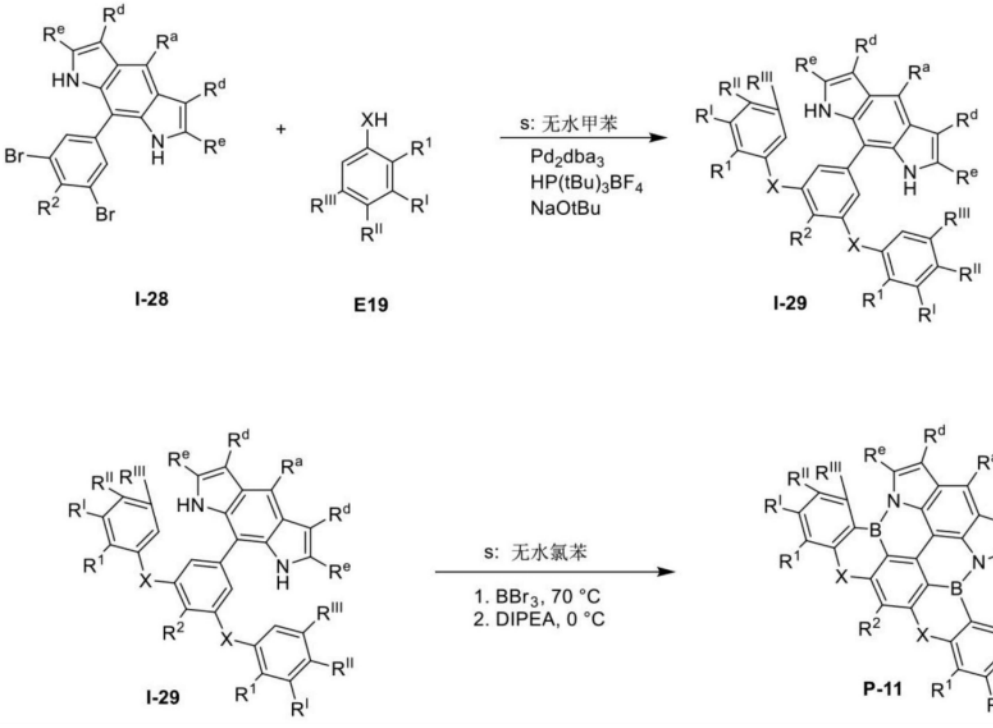
三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.04当量)、三叔丁基鏻四氟硼酸盐(CAS:131274-22-1,0.16当量)和叔丁醇钠(CAS:865-48-5,7.00当量)72小时。在冷却至室温(rt)之后,在乙酸乙酯与盐水之间萃取反应混合物且分离相,并且减压去除溶剂。通过重结晶或通过柱色谱法纯化粗物质,获得作为固体的I-26。

[0748] AAV40:在氮下将I-26(1.00当量)置于圆底烧瓶中。加入溶剂1,2-二氯苯。逐滴加入三溴化硼(CAS:10294-33-4,4.00当量),并且将其加热至180℃直至反应完成(TLC控制)。在冷却至rt之后,将其进一步冷却至0℃。加入DIPEA(CAS:7087-68-5,10.00当量),并且将其搅拌1小时。用水洗涤反应混合物且分离相,然后减压去除溶剂。通过柱色谱法或重结晶纯化粗物质,获得作为固体的P-10。

[0749] 一般合成方案XVI



[0750]



[0751] 用于合成的一般步骤：

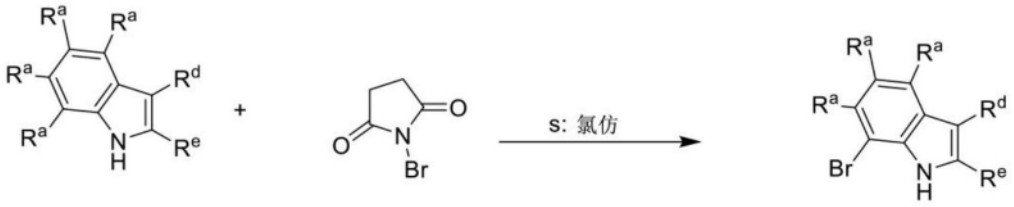
[0752] AAV41：在氮气氛下在室温下搅拌E17(2.00当量)、E20(1.0当量)和双(三氟甲基)甲醇(CAS：920-66-1，300mL)直至反应完成(TLC控制)。将反应混合物冷却至0℃；过滤沉淀物并且用冷乙腈洗涤。将固体再溶解于乙腈中；加入1,4-苯醌(CAS：106-51-4，0.20当量)，并且在室温下搅拌混合物直至反应完成(通过TLC监测)。减压去除溶剂。通过重结晶或通过柱色谱法纯化粗物质，获得作为固体的I-27。

[0753] AAV42：在氮气氛下在二氯甲烷中在室温下搅拌I-27(1.00当量)和E21(1.00当量)。加入碘(CAS：7553-56-2，0.03当量)，并且在室温下搅拌混合物直至反应完成(通过TLC监测)。减压去除溶剂。通过重结晶或通过柱色谱法纯化粗物质，获得作为固体的I-28。

[0754] AAV43：在氮气氛下在无水甲苯中在110℃搅拌I-28(1.00当量)、E19(2.5当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS：51364-51-3，0.03当量)、三叔丁基鏻四氟硼酸盐(CAS：131274-22-1，0.12当量)和叔丁醇钠(CAS：865-48-5，4.00当量)直至反应完成(TLC控制)。在冷却至室温(rt)之后，在乙酸乙酯与盐水之间萃取反应混合物且分离相，并且减压去除溶剂。通过重结晶或通过柱色谱法纯化粗物质，获得作为固体的I-29。

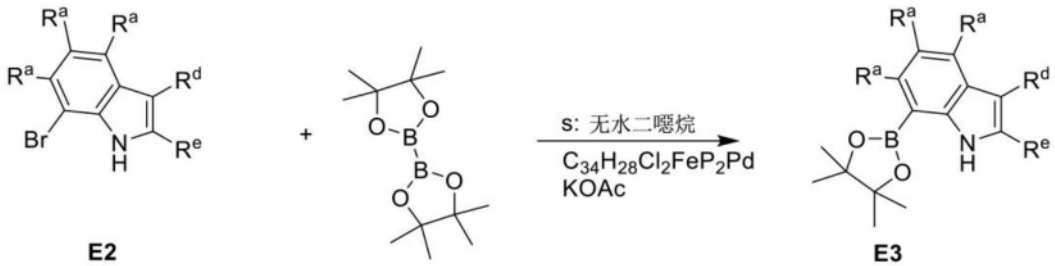
[0755] AAV44：在氮下将I-29(1.00当量)置于圆底烧瓶中。加入溶剂氯苯。逐滴加入三溴化硼(CAS：10294-33-4，4.00当量)，并且将其加热至70℃直至反应完成(TLC控制)。在冷却至rt之后，将其进一步冷却至0℃。加入DIPEA(CAS：7087-68-5，10.00当量)，并且将其搅拌1小时。用水洗涤反应混合物且分离相，然后减压去除溶剂。通过柱色谱法或重结晶纯化粗物质，获得作为固体的P-11。

[0756] 制备E3



E22 E2

[0757]



E2 E3

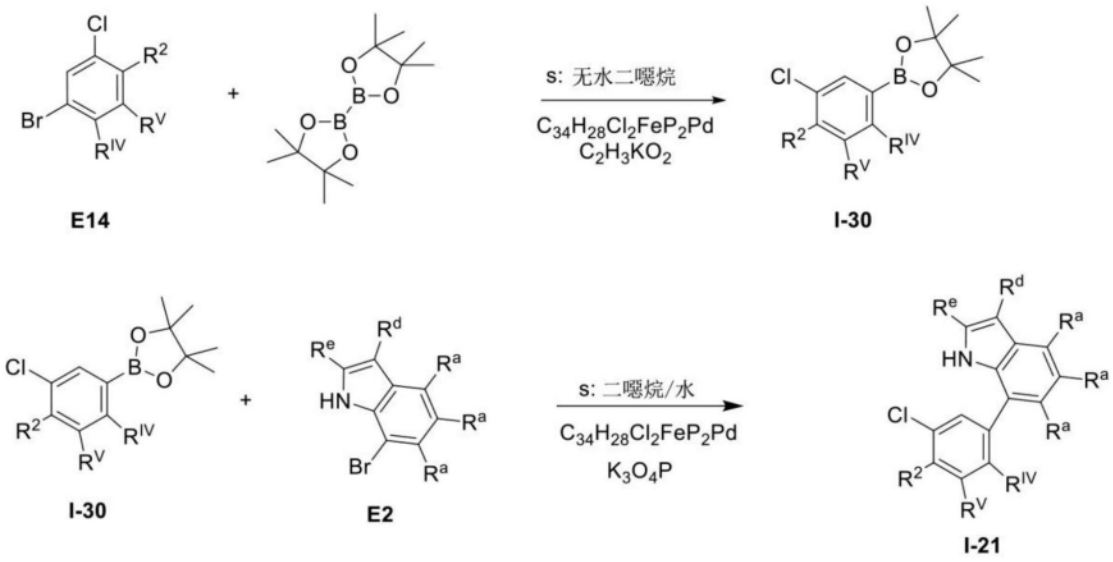
[0758] 用于合成的一般步骤：

[0759] AAV45：将E22(1.00当量)溶解于无水氯仿中，并且在氮气氛下在0℃下分批加入N-溴代丁二酰亚胺(CAS：128-08-5，1.1当量)。在室温下搅拌混合物4小时，随后在二氯甲烷与水之间萃取，并且减压浓缩合并的有机层。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质，获得作为固体的E2。

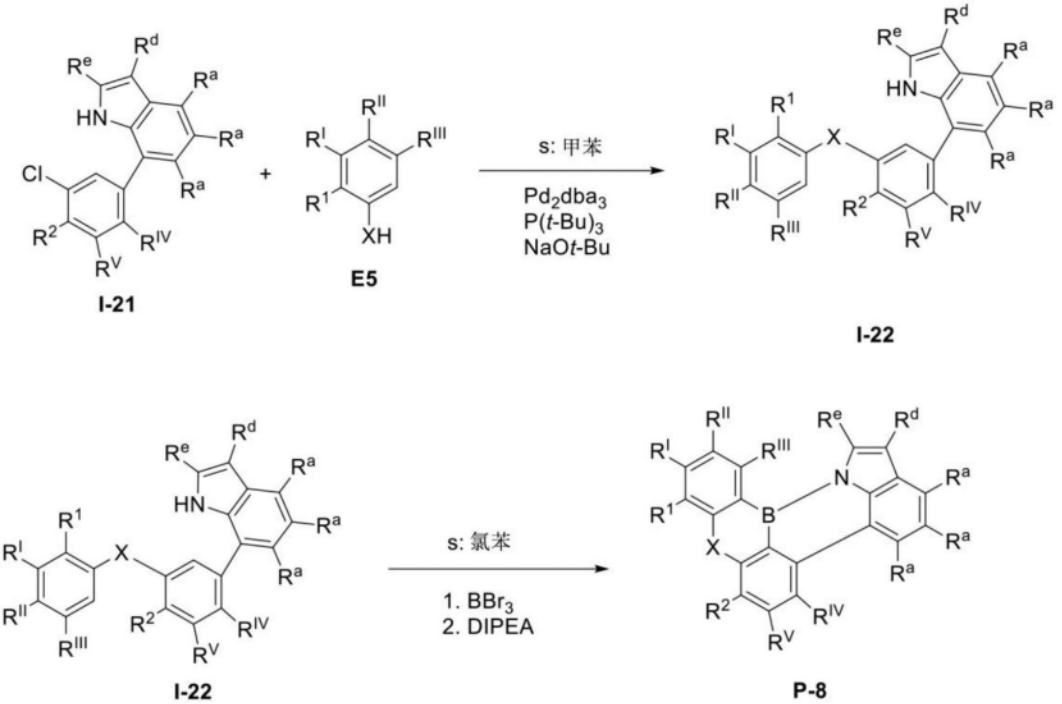
[0760] AAV46：在氮气氛下在无水二噁烷中在95℃下搅拌E2(1.00当量)、双(频哪醇合)二

硼(CAS:73183-34-3,1.5当量)、[1,1'-双(二苯基膦基)二茂铁]二氯化钯(II)(CAS:72287-26-4,0.02当量)和乙酸钾(KOAc;CAS:127-08-2,3.00当量)24小时。在冷却至室温(rt)之后,在二氯甲烷与水之间萃取反应混合物,并且减压浓缩合并的有机层。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质,获得作为固体的E3。

[0761] 一般合成方案XVII



[0762]



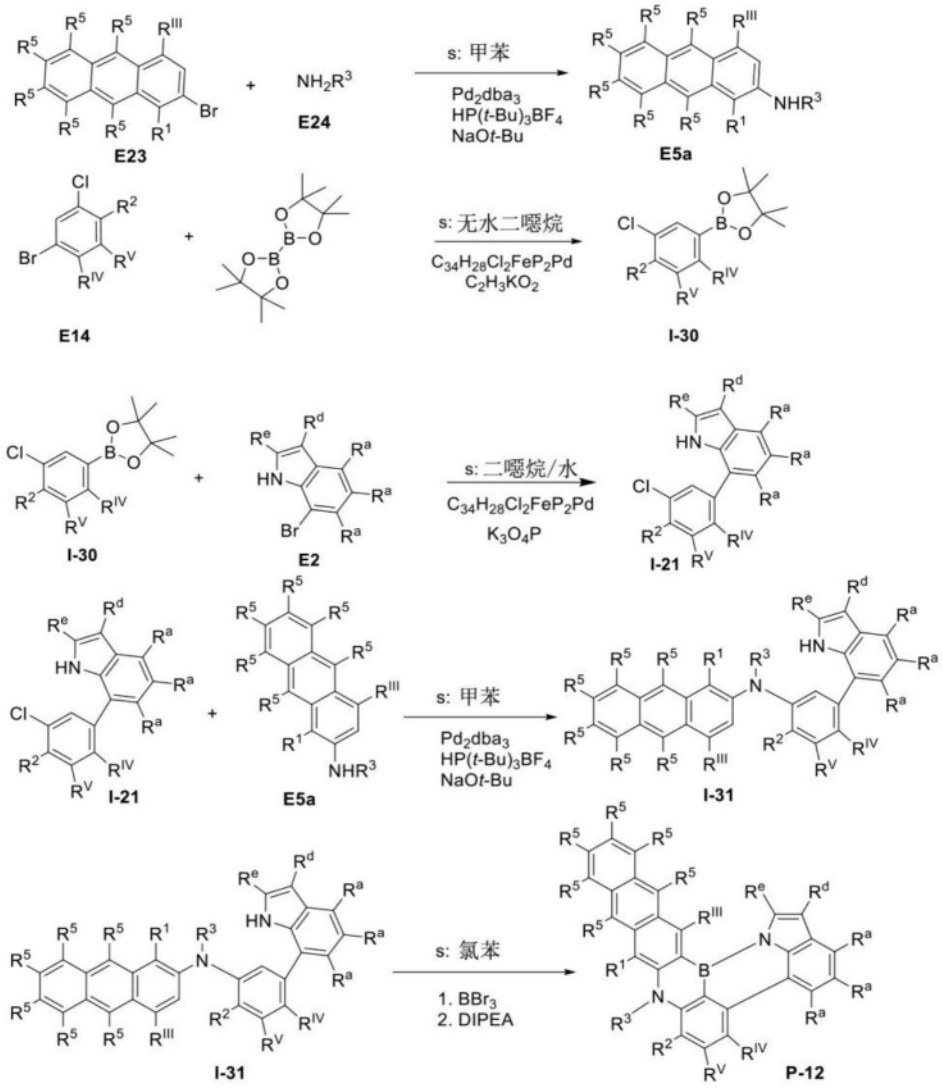
[0763] 用于合成的一般步骤:

[0764] AAV47:在氮下,在无水二噁烷的混合物中,在100℃下使E14(1.00当量)与双(频哪醇合)二硼(1.50当量,CAS:73183-34-3)、乙酸钾(3.00当量,CAS:127-08-2)、[1,1'-双(二苯基膦基)二茂铁]二氯化钯(II)(0.04当量,CAS:72287-26-4)反应16小时。在冷却至rt之后,加入水,分离相,并且用乙酸乙酯萃取水层。用无水$MgSO_4$干燥合并的有机层,过滤并且减压浓缩。通过柱色谱法或重结晶纯化粗产物,以获得作为固体的化合物I-30。

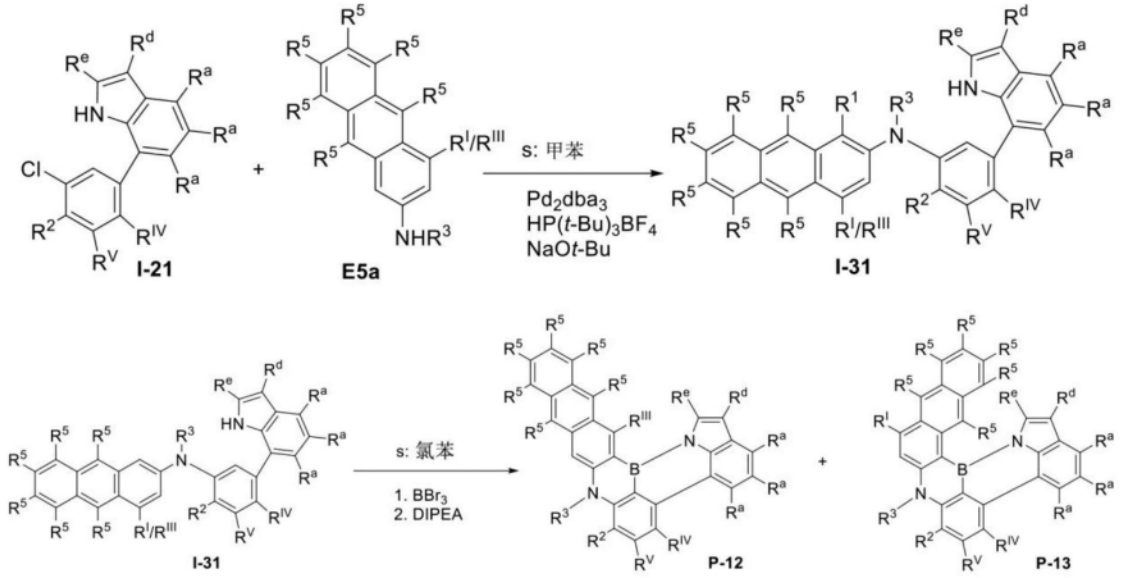
[0765] AAV48:在氮气氛下在二噁烷/水(按体积计4:1)中在80℃下搅拌E2(1.00当量)、I-30(1.00当量)、[1,1'-双(二苯基膦基)二茂铁]二氯化钯(II)(CAS:72287-26-4,0.02当量)和磷酸三钾(K_3O_4P;CAS:7778-53-2,3.00当量)4小时。在冷却至室温(rt)之后,在乙酸乙酯与水之间萃取反应混合物,并且减压浓缩合并的有机层。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质,获得作为固体的I-21。

[0766] 如AAV27和AAV28中所述进行最后两个反应步骤。

[0767] 一般合成方案XVIII

[0768] 

[0769] 对于R^1=H,两种异构体可以在最后的反应步骤中制得:

[0770] 

[0771] 用于合成的一般步骤：

[0772] AAV49：在氮气氛下在无水甲苯中在70℃下搅拌E23(1.00当量)、E24(1.15当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS：51364-51-3，0.01当量)、叔丁醇钠(NaOtBu，CAS：865-48-5，3.20当量)和三叔丁基鏻四氟硼酸盐(HP(t-Bu)$_3$BF$_4$；CAS：131274-22-1，0.04当量)直至反应完成(TLC控制)。在冷却至室温(rt)之后，在乙酸乙酯与盐水之间萃取反应混合物，并且减压浓缩合并的有机层。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质，获得作为固体的E5a。

[0773] AAV50：在氮下，在无水二噁烷的混合物中，在100℃下使E14(1.00当量)与双(频哪醇合)二硼(1.50当量，CAS：73183-34-3)、乙酸钾(3.00当量，CAS：127-08-2)、[1,1'-双(二苯基膦基)二茂铁]二氯化钯(II)(0.04当量，CAS：72287-26-4)反应16小时。在冷却至rt之后，加入水，分离相，并且用乙酸乙酯萃取水层。用无水$MgSO_4$干燥合并的有机层，过滤并且减压浓缩。通过柱色谱法或重结晶纯化粗产物，以获得作为固体的化合物I-30。

[0774] AAV51：在氮气氛下在二噁烷/水(按体积计4:1)中在80℃下搅拌E2(1.00当量)、I-30(1.00当量)、[1,1'-双(二苯基膦基)二茂铁]二氯化钯(II)(CAS：72287-26-4，0.02当量)和磷酸三钾(K_3O_4P；CAS：7778-53-2，3.00当量)4小时。在冷却至室温(rt)之后，在乙酸乙酯与水之间萃取反应混合物，并且减压浓缩合并的有机层。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质，获得作为固体的I-21。

[0775] AAV52：在氮气氛下在无水邻二甲苯中在120℃下搅拌E5a(1.10当量)、I-21(1.00当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS：51364-51-3，0.02当量)、叔丁醇钠(NaOtBu，CAS：865-48-5，3.20当量)和三叔丁基鏻四氟硼酸盐(HP(t-Bu)$_3$BF$_4$；CAS：131274-22-1，0.08当量)直至反应完成(TLC控制)。在冷却至室温(rt)之后，在乙酸乙酯与盐水之间萃取反应混合物，并且减压浓缩合并的有机层。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质，获得作为固体的I-31。

[0776] AAV53：在氮下，在无水氯苯中，在-10℃下使I-31(1.00当量)与BBr_3(4.00当量，CAS：10294-33-4)反应3小时，在rt下反应2小时，在50℃下反应16小时，并且附加地在70℃下反应2小时。在冷却至rt之后，随后向混合物加入DIPEA(10.0当量，CAS：7087-68-5)。加入水，分离相，并且用乙酸乙酯萃取水层。用水洗涤合并的有机层，用无水$MgSO_4$干燥，过滤并且浓缩。通过柱色谱法或重结晶纯化粗产物，以获得作为固体的化合物P-12(并且对于R^1=

H,附加地是P-13)。

[0777] 循环伏安法

[0778] 循环伏安图是通过在二氯甲烷或合适的溶剂以及合适的支持电解质(例如,0.1mol/L的四丁基六氟磷酸铵)中具有浓度为10^{-3}mol/L的有机分子的溶液测量的。在室温下在氮气氛下使用三电极组件(工作电极和对电极:Pt线,参比电极:Pt线)进行测量,并且使用$FeCp_2/FeCp_2^+$作为内标进行校准。使用二茂铁作为内标对饱和甘汞电极(SCE)校正HOMO数据。

[0779] 密度泛函理论计算

[0780] 采用BP86泛函和分辨率同一性方法(RI,resolution of identity approach)优化分子结构。采用时间依赖DFT(TD-DFT)法使用(BP86)优化的结构计算激发能量。用B3LYP泛函计算轨道和激发态能量。使用Def2-SVP基组和用于数值积分法的m4网格。Turbomole步骤包用于所有计算。

[0781] 光物理测量

[0782] 样品预处理:旋涂。

[0783] 仪器:Spin150,SPS euro。

[0784] 样品浓度是10mg/mL,溶解在合适的溶剂中。

[0785] 步骤:1)在400U/min下3秒。2)以1000Upm/s在1000U/min下20秒。3)以1000Upm/s在4000U/min下10秒。在涂覆之后,在70℃下干燥膜1min。

[0786] 光致发光光谱和时间相关单光子计数(TCSPC)

[0787] 由配备有150W氙弧灯、激发和发射单色器以及Hamamatsu R928光电倍增管和时间相关单光子计数选项的Horiba Scientific Modell FluoroMax-4测量稳态发射光谱。使用标准校正拟合校正发射和激发光谱。

[0788] 使用TCSPC法与FM-2013设备和Horiba Yvon TCSPC集线器采用同一体系确定激发态寿命。

[0789] 激发源:

[0790] 纳米LED 370(波长:371nm,脉冲持续时间:1.1ns)

[0791] 纳米LED 290(波长:294nm,脉冲持续时间:<1ns)

[0792] 光谱LED 310(波长:314nm)

[0793] 光谱LED 355(波长:355nm)。

[0794] 使用软件套件Data Station和DAS6分析软件完成数据分析(指数拟合)。使用卡方检验指定拟合。

[0795] 光致发光量子产率测量

[0796] 对于光致发光量子产率(PLQY)测量,使用绝对PL量子产率测量C9920-03G系统(Hamamatsu Photonics)。使用软件U6039-05 3.6.0版确定量子产率和CIE坐标。

[0797] 发射最大值以nm给出,量子产率Φ以%给出,CIE坐标作为x值、y值。

[0798] 使用以下协议确定PLQY:

[0799] 1)质量保证:使用乙醇中的蒽(已知浓度)作为参考

[0800] 2)激发波长:确定有机分子的吸收最大值,使用该波长激发分子

[0801] 3)测量

[0802] 对于样品，在氮气氛下测量溶液或膜的量子产率。使用等式计算产率：

[0803] $$\Phi_{PL}=\frac{n_{光子,发射}}{n_{光子,吸收}}=\frac{\int\frac{\lambda}{hc}\left[Int_{发射}^{样品}(\lambda)-Int_{吸收}^{样品}(\lambda)\right]d\lambda}{\int\frac{\lambda}{hc}\left[Int_{发射}^{参考}(\lambda)-Int_{吸收}^{参考}(\lambda)\right]d\lambda}$$

[0804] 其中，$n_{光子}$表示光子计数，Int.表示强度。

[0805] 光电器件的制造和表征

[0806] 可以经由真空沉积法来制造包括根据发明的有机分子的光电器件(诸如OLED器件)。如果层包含一种以上的化合物，则一种或更多种化合物的重量百分比以％给出。总重量百分比值是100％，因此如果未给出值，则该化合物的分数等于给定值与100％之间的差。

[0807] 使用标准方法并且测量电致发光光谱、依赖于强度的外量子效率(以％计)对未完全地优化的OLED进行表征，依赖于强度的外量子效率(以％计)是使用由光电二极管检测的光和电流计算的。OLED器件寿命是从在恒定电流密度下操作期间的亮度的改变提取的。LT50值与测量的亮度降低至初始亮度的50％的时间对应，类似地，LT80与测量的亮度降低至初始亮度的80％的时间点对应，LT95与测量的亮度降低至初始亮度的95％的时间点对应等。

[0808] (例如，应用增大的电流密度)进行加速寿命测量。例如，使用以下等式确定在500cd/m^2下的LT80值：

[0809] $$\mathrm{LT80}\left(500\frac{cd}{m^2}\right)=\mathrm{LT80}\ (L_0)\left(\frac{L_0}{500\frac{cd}{m^2}}\right)^{1.6}$$

[0810] 其中，L_0表示施加电流密度下的初始亮度。

[0811] 该值与几个(典型地两个至八个)像素的平均值对应，给出了这些像素之间的标准偏差。

[0812] HPLC-MS：

[0813] 在通过具有MS检测器(Thermo LTQ XL)的安捷伦(Agilent)(1100系列)的HPLC上进行HPLC-MS分析。

[0814] 示例性地，典型的HPLC法如下：在HPLC中使用安捷伦的反相色谱柱4.6mm×150mm，粒径3.5μm(ZORBAX Eclipse Plus 95Å C18，4.6×150mm，3.5μm HPLC色谱柱)。在室温(rt)下按照梯度进行HPLC-MS测量。

[0815] 流动率

[0816]

[mL/min]	时间[min]	A[%]	B[%]	C[%]
2.5	0	40	50	10
2.5	5	40	50	10
2.5	25	10	20	70
2.5	35	10	20	70
2.5	35.01	40	50	10
2.5	40.01	40	50	10
2.5	41.01	40	50	10

[0817] 使用以下溶剂混合物：

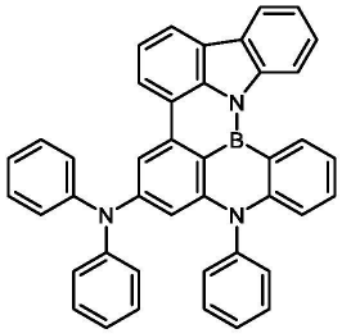
[0818]

溶剂A：	H_2O(90％)	MeCN(10％)
溶剂B：	H_2O(10％)	MeCN(90％)
溶剂C：	THF(50％)	MeCN(50％)

[0819] 从具有浓度为0.5mg/mL的分析物的溶液取样5μL的进样量用于测量。

[0820] 使用APCI(大气压力化学电离)源在正(APCI+)或负(APCI-)电离模式下进行探头的电离。

[0821] 示例1

[0822] 

[0823] 根据以下步骤合成示例1：

[0824] AAV1(84％产率)，

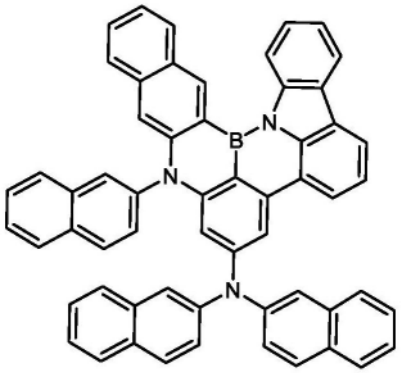
[0825] AAV2(45％产率)，

[0826] AAV3(32％产率)。

[0827] MS(LC-MS)：586m/z，rt处于：5.73min。

[0828] (在PMMA中2重量％的)示例1的发射最大值在428nm处，半峰全宽(FWHM)是0.27eV。CIEx坐标是0.16，CIEy坐标是0.08。光致发光量子产率(PLQY)是54％。

[0829] 示例2

[0830] 

[0831] 根据一般合成方案VII合成示例2。

[0832] AAV14(33％产率)，其中，1,5-二溴-2,3-二氯苯(CAS:81067-42-73)和2,2'-二萘胺(CAS:532-18-3)分别用作反应物E8和E5，

[0833] AAV15(34％产率)，其中，1-(四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)-9H-咔唑(CAS:1219637-88-3)用作反应物E3，

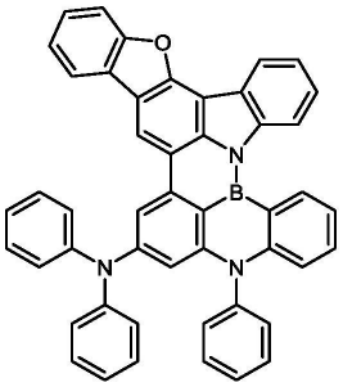
[0834] AAV0-3(3％产率)。

[0835] MS(LC-MS，APCI离子源)：786.5m/z，rt处于：7.00min。

[0836] (在PMMA中2重量％的)示例2的发射最大值在434nm处，CIEx坐标是0.16，CIEy坐标

是0.11。

[0837] 示例3

[0838] 

[0839] 根据一般合成方案III合成示例3。

[0840] AAV4(30％产率),其中,5-溴-N1,N1,N3,N3-四苯基-1,3-苯二胺(CAS:1290039-73-4)用作反应物E1,

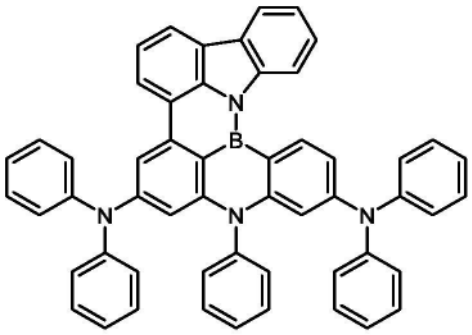
[0841] AAV5(21％产率),其中,6-溴-5H-苯并呋喃并[3,2-c]咔唑(CAS:1438427-35-0)用作反应物E2,

[0842] AAV6(4％产率)。

[0843] MS(LC-MS,APCI离子源):676.7m/z,rt处于:6.87min。

[0844] (在PMMA中2重量％的)示例3的发射最大值在440nm处,半峰全宽(FWHM)是0.21eV。CIEx坐标是0.15,CIEy坐标是0.06。光致发光量子产率(PLQY)是56％。

[0845] 示例4

[0846] 

[0847] 根据一般合成方案IV合成示例4。

[0848] AAV7(71％产率),其中,1-(四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)-9H-咔唑(CAS:1219637-88-3)和3,5-二氯-N,N-二苯基苯胺(CAS:1329428-05-8)分别用作反应物E3和E4,

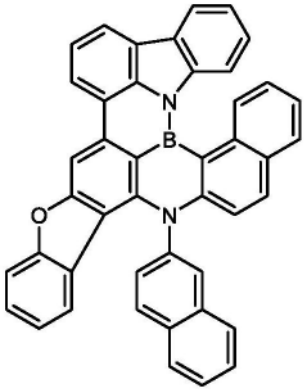
[0849] AAV8(52％产率),其中,N,N,N'-三苯基-苯-1,3-二胺(CAS:1554227-26-7)用作反应物E5,

[0850] AAV9(3％产率)。

[0851] MS(LC-MS,APCI离子源):753.9m/z,rt处于:6.62min。

[0852] (在PMMA中2重量％的)示例4的发射最大值在427nm处,半峰全宽(FWHM)是0.13eV。CIEx坐标是0.16,CIEy坐标是0.05。光致发光量子产率(PLQY)是58％。

[0853] 示例5

[0854] 

[0855] 根据一般合成方案V合成示例5。

[0856] AAV10(68％产率),其中,2,2'-二萘胺(CAS:532-18-3)和1-溴-3-氯二苯并[b,d]呋喃(CAS:2043962-13-4)分别用作反应物E5和E6,

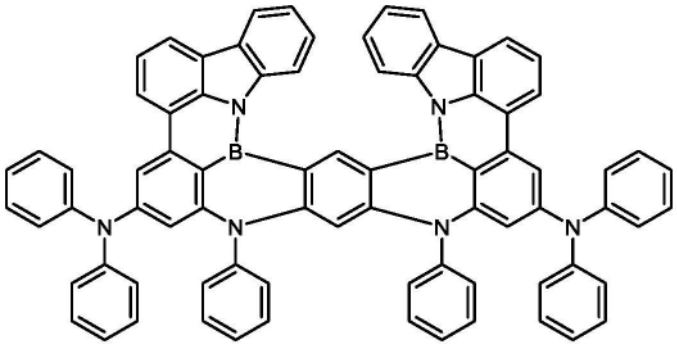
[0857] AAV11(90％产率),其中,1-(四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)-9H-咔唑(CAS:1219637-88-3)用作反应物E3,

[0858] AAV9(38％产率)。

[0859] MS(LC-MS,APCI离子源):609.5m/z,rt处于:6.26min。

[0860] (在PMMA中2重量％的)示例5的发射最大值在462nm处,半峰全宽(FWHM)是0.14eV。CIEx坐标是0.14,CIEy坐标是0.22。光致发光量子产率(PLQY)是65％。

[0861] 示例6

[0862] 

[0863] 根据以下步骤合成示例6:

[0864] AAV7(71％产率),其中,1-(四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)-9H-咔唑(CAS:1219637-88-3)和3,5-二氯-N,N-二苯基苯胺(CAS:1329428-05-8)分别用作反应物E3和E4,

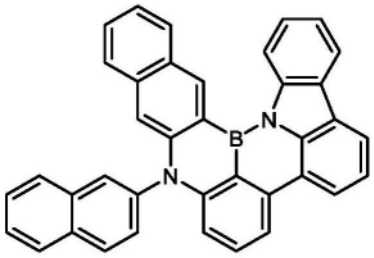
[0865] AAV12(54％产率),其中,N,N'-二苯基间苯二胺(CAS:5905-36-2)用作反应物E7,

[0866] AAV13(2％产率)。

[0867] MS(LC-MS,APCI离子源):1094.1m/z,rt处于:8.18min。

[0868] (在PMMA中2重量％的)示例6的发射最大值在443nm处,半峰全宽(FWHM)是0.13eV。CIEx坐标是0.15,CIEy坐标是0.07。光致发光量子产率(PLQY)是61％。

[0869] 示例7

[0870] 

[0871] 根据以下步骤合成示例7：

[0872] AAV16(49％产率)，其中，1-(四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)-9H-咔唑(CAS:1219637-88-3)和1,3-二溴-2-氯苯(CAS:19230-27-4)分别用作反应物E3和E9，

[0873] AAV17(78％产率)，

[0874] AAV18(56％产率)，其中，2,2'-二萘胺(CAS:532-18-3)用作反应物E5，

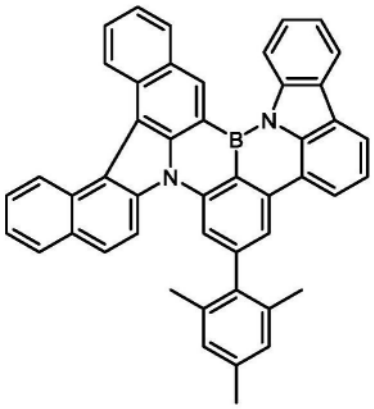
[0875] AAV19(69％产率)，

[0876] AAV20(5％产率)。

[0877] MS(LC-MS,APCI离子源):519.6m/z,rt处于:5.54min。

[0878] (在PMMA中2重量％的)示例7的发射最大值在480nm处，半峰全宽(FWHM)是0.18eV。CIEx坐标是0.13,CIEy坐标是0.33。光致发光量子产率(PLQY)是53％。

[0879] 示例8

[0880] 

[0881] 根据以下步骤合成示例8：

[0882] AAV21(85％产率)，其中，1-溴-2,5-二氯-3-氟苯(CAS:202865-57-4)和7H-二苯并[c,g]咔唑(CAS:194-59-2)分别用作反应物E10和E11；

[0883] AAV22(62％产率)，其中，1-(四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)-9H-咔唑(CAS:1219637-88-3)用作底物E3；

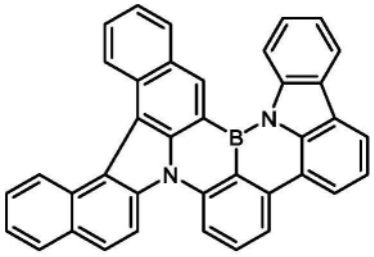
[0884] AAV23(78％产率)，其中，2,4,6-三甲基苯基硼酸(CAS:5980-97-2)代表反应物E12；

[0885] 以及AAV0-3(2％产率)。

[0886] MS(LC-MS,APCI离子源):在rt＝7.72min下m/z＝635.7。

[0887] (在PMMA中2重量％的)示例8的发射最大值在470nm处，半峰全宽(FWHM)是0.24eV。CIEx坐标是0.15,CIEy坐标是0.25。光致发光量子产率(PLQY)是48％。

[0888] 示例9

[0889] 

[0890] 根据以下步骤合成示例9：

[0891] AAV24(70％产率)，其中，1-溴-2-氯-3-氟苯(CAS:883499-24-9)和7H-二苯并[c,g]咔唑(CAS:194-59-2)分别用作反应物E13和E11；

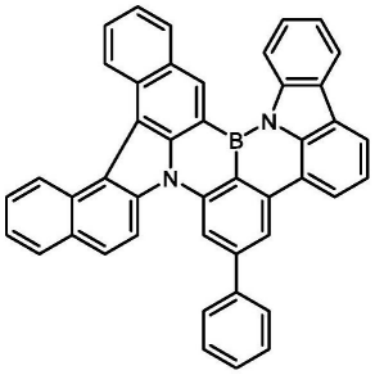
[0892] AAV25(51％产率)，其中，1-(四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)-9H-咔唑(CAS:1219637-88-3)用作反应物E3；

[0893] 以及AAV0-3(2％产率)。

[0894] MS(LC-MS,APCI离子源)：在rt＝6.45min下m/z＝517。

[0895] (在PMMA中2重量％的)示例9的发射最大值在478nm处，半峰全宽(FWHM)是0.26eV。CIEx坐标是0.16，CIEy坐标是0.36。光致发光量子产率(PLQY)是37％。

[0896] 示例10

[0897] 

[0898] 根据以下步骤合成示例10：

[0899] AAV21(85％产率)，其中，1-溴-2,5-二氯-3-氟苯(CAS:202865-57-4)和7H-二苯并[c,g]咔唑(CAS:194-59-2)分别用作反应物E10和E11；

[0900] AAV22(62％产率)，其中，1-(四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)-9H-咔唑(CAS:1219637-88-3)用作底物E3；

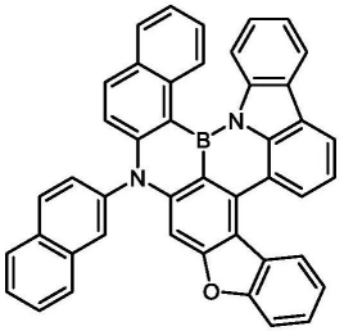
[0901] AAV23(69％产率)，其中苯基硼酸(CAS:98-80-6)代表反应物E12；

[0902] 以及AAV0-3(1％产率)。

[0903] MS(LC-MS,APCI离子源)：在rt＝7.25min下m/z＝593。

[0904] (在PMMA中2重量％的)示例10的发射最大值在485nm处。

[0905] 示例11

[0906] 

[0907] 根据以下步骤合成示例11：

[0908] AAV26(34％产率)，其中，1-溴-3-氯二苯并[b,d]呋喃(CAS:2043962-13-4)和1-(四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)-9H-咔唑(CAS:1219637-88-3)用作反应物E14和E3；

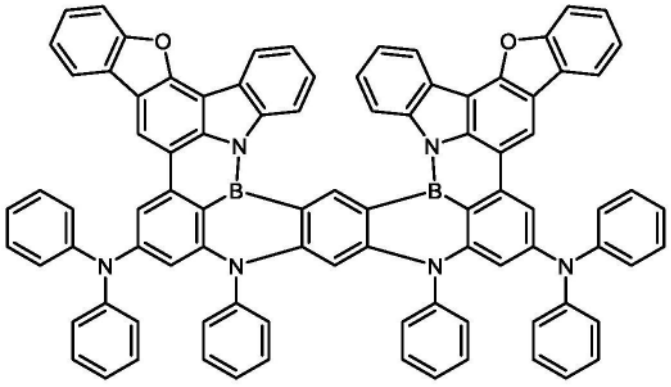
[0909] AAV27(37％产率)，其中，2,2'-二萘胺(CAS:532-18-3)用作反应物E5；

[0910] 以及AAV28(3％产率)。

[0911] MS(LC-MS,APCI离子源)：在rt＝6.38min下m/z＝609.5。

[0912] (在PMMA中2重量％的)示例11的发射最大值在456nm处，半峰全宽(FWHM)是0.22eV。CIEx坐标是0.15，CIEy坐标是0.13。光致发光量子产率(PLQY)是45％。

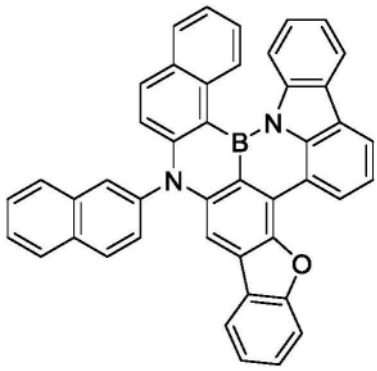
[0913] 示例12

[0914] 

[0915] MS(LC-MS,APCI离子源)：在rt＝8.99min下m/z＝1275.2。

[0916] (在PMMA中2重量％的)示例12的发射最大值在459nm处，半峰全宽(FWHM)是0.15eV。CIEx坐标是0.14，CIEy坐标是0.13。光致发光量子产率(PLQY)是53％。

[0917] 示例13

[0918] 

[0919] 根据以下步骤合成示例13：

[0920] AAV29(71％产率),其中,4-溴-3-氯二苯并[b,d]呋喃(CAS:1960445-63-9)和2,2'-二萘胺(CAS:532-18-3)分别用作反应物E14和E5;

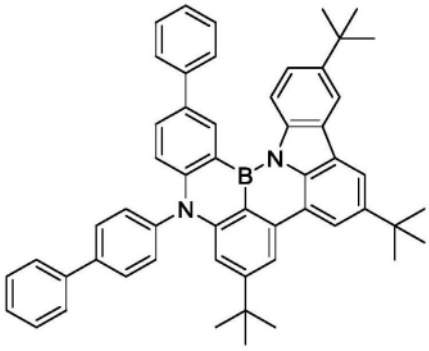
[0921] AAV30(54％产率),其中,1-(四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)-9H-咔唑(CAS:1219637-88-3)用作化合物E3;

[0922] 以及AAV31(31％产率)。

[0923] MS(LC-MS,APCI离子源):在rt＝6.23min下m/z＝609.7。

[0924] (在PMMA中2重量％的)示例13的发射最大值在464nm处,半峰全宽(FWHM)是0.13eV。CIEx坐标是0.14,CIEy坐标是0.18。光致发光量子产率(PLQY)是58％。

[0925] 示例14

[0926] 

[0927] 根据以下步骤合成示例14:

[0928] AAV32(31％产率),其中,3,6-双(1,1-二甲基乙基)-1-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)-9H-咔唑(CAS:1510810-80-6)和1,3-二溴-5-叔丁基-2-氯苯(CAS:1000578-25-5)分别用作反应物E3和E9;

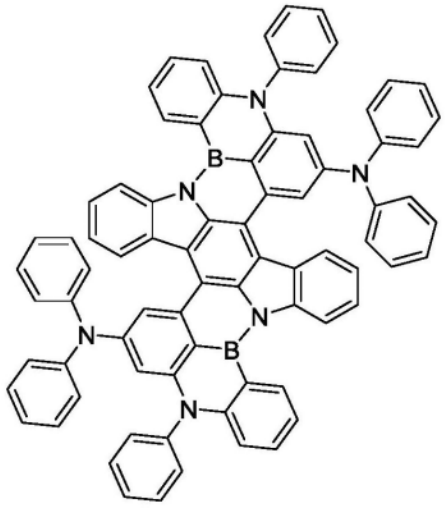
[0929] AAV33(48％产率),其中,N-[1,1'-联苯]-4-基-[1,1'-联苯]-4-胺(CAS:102113-98-4)用作化合物E5;以及

[0930] AAV33(24％产率)。

[0931] MS(LC-MS,APCI电离源):在rt＝7.90min下m/z＝740.0。

[0932] (在PMMA中2重量％的)示例14的发射最大值在440nm处,半峰全宽(FWHM)是0.22eV。CIEx坐标是0.15,CIEy坐标是0.06。光致发光量子产率(PLQY)是74％。

[0933] 示例15

[0934] 

[0935] 根据以下步骤合成示例15：

[0936] AAV38(25％产率)，其中，吲哚(CAS:120-72-9)和3,5-二溴苯甲醛(CAS:56990-02-4)分别用作反应物E17和E18；

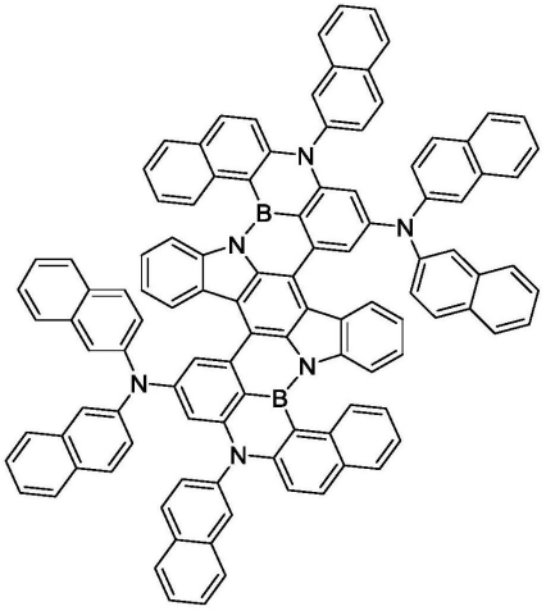
[0937] AAV39(51％产率)，其中，二苯胺(CAS:122-39-4)用作E19；

[0938] 以及AAV40(38％产率)。

[0939] MS(LC-MS,APCI电离源)：在rt＝8.14min下m/z＝1094.0。

[0940] (在PMMA中2重量％的)示例15的发射最大值在515nm处，半峰全宽(FWHM)是0.13eV。CIEx坐标是0.31，CIEy坐标是0.64。光致发光量子产率(PLQY)是31％。

[0941] 示例16

[0942] 

[0943] 根据以下步骤合成示例16：

[0944] AAV38(25％产率)，其中，吲哚(CAS:120-72-9)和3,5-二溴苯甲醛(CAS:56990-02-4)分别用作反应物E17和E18；

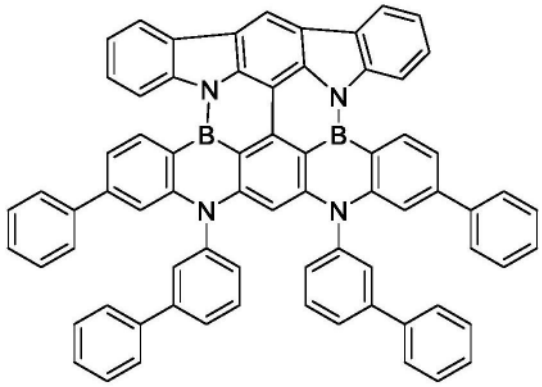
[0945] AAV39(70％产率)，其中，2,2'-二萘胺(CAS:532-18-3)用作E19；

[0946] 以及AAV40(47％产率)。

[0947] MS(LC-MS,APCI电离源)：在rt＝8.74min下m/z＝1494.0。

[0948] (在PMMA中2重量％的)示例16的发射最大值在522nm处，半峰全宽(FWHM)是0.09eV。光致发光量子产率(PLQY)是48％。

[0949] 示例17

[0950] 

[0951] 根据以下步骤合成示例17：

[0952] AAV41(34％产率)，其中，4,7-二氢-1H-吲哚(CAS:26686-10-2)和3,5-二溴苯甲醛(CAS:56990-02-4)用作反应物E17和E20；

[0953] AAV42(15％产率)，其中，原甲酸三甲酯(CAS:149-73-5)用作E21；

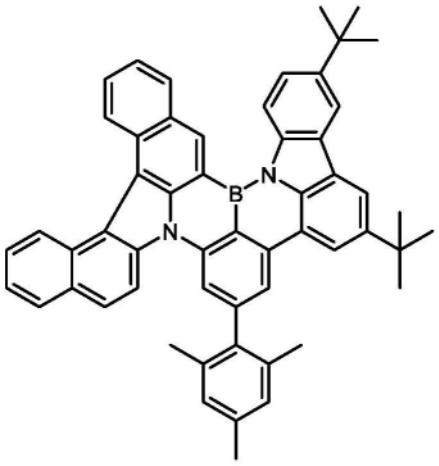
[0954] AAV43(19％产率)，其中，双(3-联苯基)胺(CAS:169224-65-1)用作E19；

[0955] 以及AAV44(27％产率)。

[0956] MS(LC-MS,APCI电离源)：在rt＝8.56min下m/z＝988.0。

[0957] (在PMMA中2重量％的)示例17的发射最大值在444nm处，半峰全宽(FWHM)是0.29eV。CIEx坐标是0.15，CIEy坐标是0.09。光致发光量子产率(PLQY)是45％。

[0958] 示例18

[0959] 

[0960] 根据以下步骤合成示例18：

[0961] AAV45(85％产率)，其中，3,6-二叔丁基咔唑(CAS:37500-95-1)用作底物E22；

[0962] AAV46(83％产率)；

[0963] AAV21(85％产率)，其中，1-溴-2,5-二氯-3-氟苯(CAS:202865-57-4)和7H-二苯并[c,g]咔唑(CAS:194-59-2)分别用作反应物E10和E11；

[0964] AAV22(46％产率)；

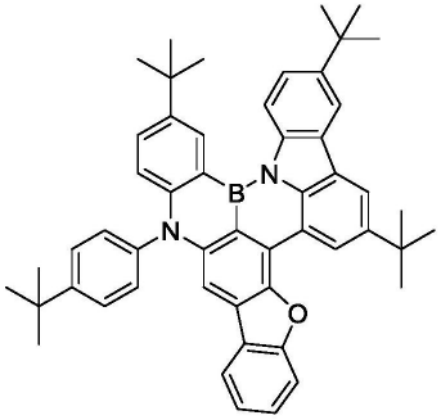
[0965] AAV23(87％产率)，其中，2,4,6-三甲基苯基硼酸(CAS:5980-97-2)代表反应物E12；

[0966] 以及AAV0-3(7.2％产率)。

[0967] MS(LC-MS,APCI离子源)：在rt＝8.90min下m/z＝746。

[0968] (在PMMA中2重量％的)示例18的发射最大值在471nm处,半峰全宽(FWHM)是0.24eV。CIEx坐标是0.14,CIEy坐标是0.25。光致发光量子产率(PLQY)是48％。

[0969] 示例19

[0970] 

[0971] 根据以下步骤合成示例19:

[0972] AAV47(74％产率),其中,4-溴-2-氯二苯并[b,d]呋喃(CAS:2087889-86-7)用作底物E14;

[0973] AAV45(85％产率),其中,3,6-二叔丁基咔唑(CAS:37500-95-1)用作底物E22;

[0974] AAV48(74％产率);

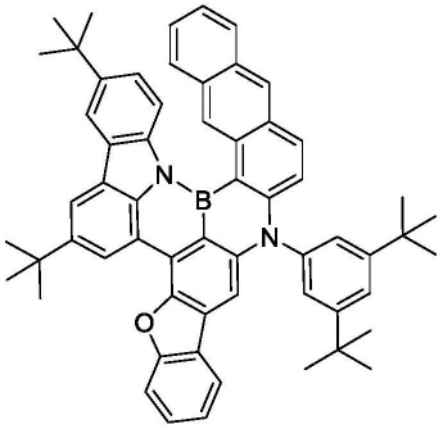
[0975] AAV27(33％产率),其中,双(4-叔丁基苯基)胺(CAS:4627-22-9)用作化合物E5;

[0976] 以及AAV28(6.1％产率)。

[0977] MS(LC-MS,APCI离子源):在rt＝8.73min下m/z＝734.8。

[0978] (在PMMA中2重量％的)示例19的发射最大值在471nm处,半峰全宽(FWHM)是0.16eV。CIEx坐标是0.13,CIEy坐标是0.26。光致发光量子产率(PLQY)是76％。

[0979] 示例20

[0980] 

[0981] 根据以下步骤合成示例20:

[0982] AAV49(50％产率),其中,2-溴蒽(CAS:7321-27-9)和3,5-二叔丁基苯胺(CAS:2380-36-1)分别用作底物E23和E24;

[0983] AAV45(85％产率),其中,3,6-二叔丁基咔唑(CAS:37500-95-1)用作底物E22;

[0984] AAV50(74％产率),其中,4-溴-2-氯二苯并[b,d]呋喃(CAS:2087889-86-7)用作E14;

[0985] AAV51(74％产率)；

[0986] AAV52(49％产率)；

[0987] 以及AAV53(48％产率)。

[0988] MS(LC-MS,APCI离子源)：在rt＝8.96min下m/z＝834.3。

[0989] (在PMMA中2重量％的)示例20的发射最大值在486nm处，半峰全宽(FWHM)是0.24eV。CIEx坐标是0.14，CIEy坐标是0.42。光致发光量子产率(PLQY)是69％。

[0990] 示例D1

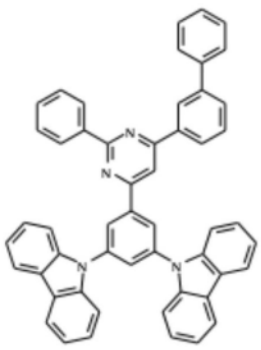
[0991] 在被制造有以下层结构的OLED D1中测试示例5：

[0992]

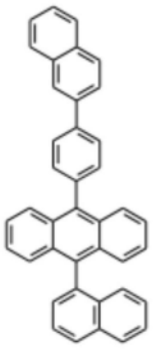
层号	厚度	D1
9	100nm	Al
8	2nm	Liq
7	11nm	NBPhen
6	20nm	MAT1
5	20nm	MAT2（98%）:示例 5（2%）
4	10nm	MAT3
3	50nm	MAT4
2	7nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
基底		玻璃

[0993]

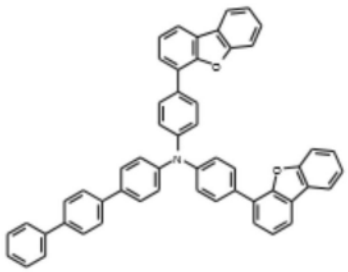
[0994]



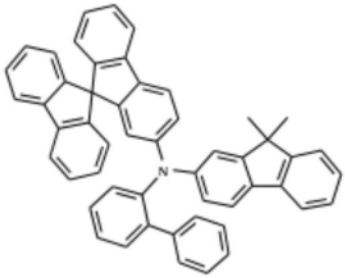
MAT1



MAT2



MAT3

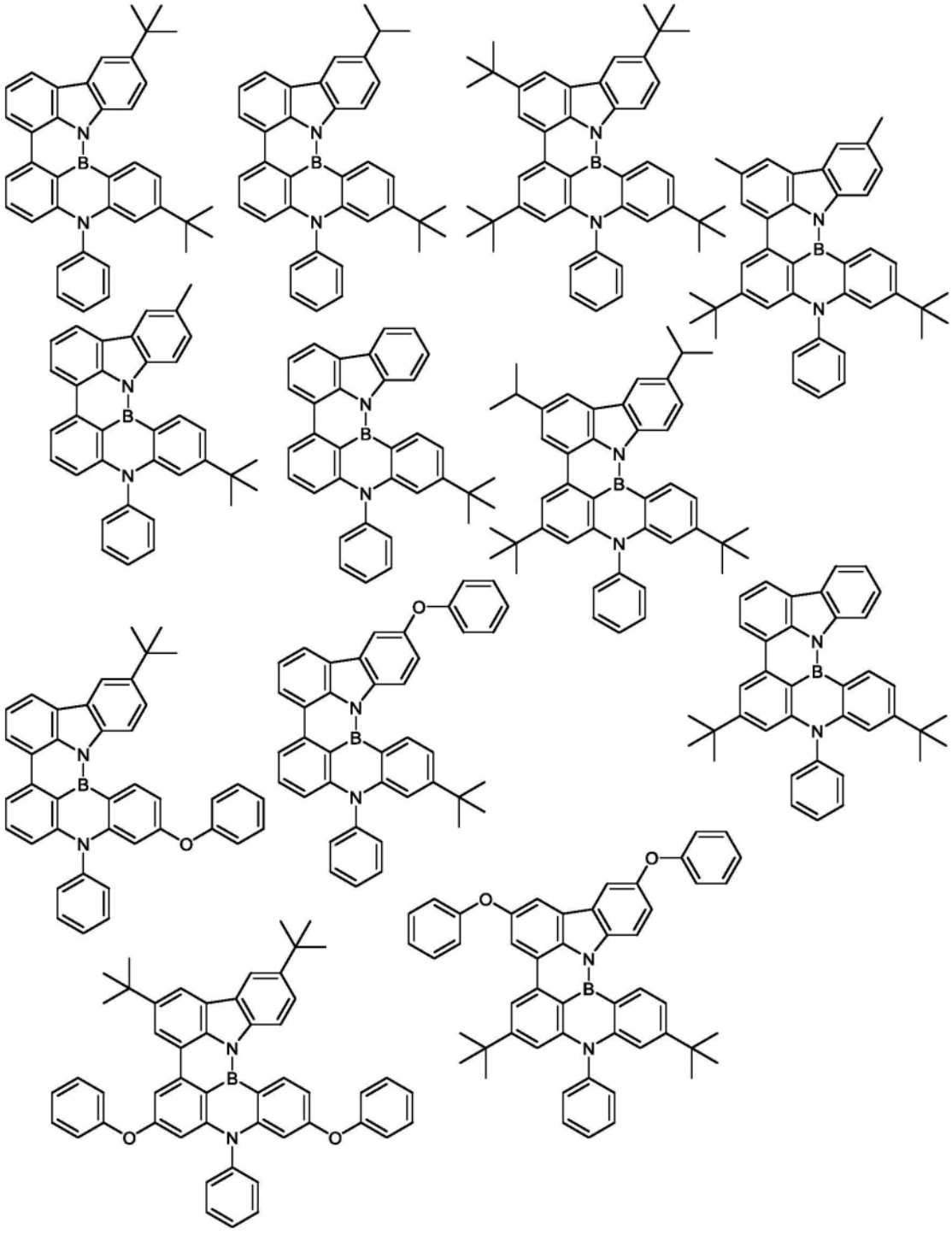


MAT4

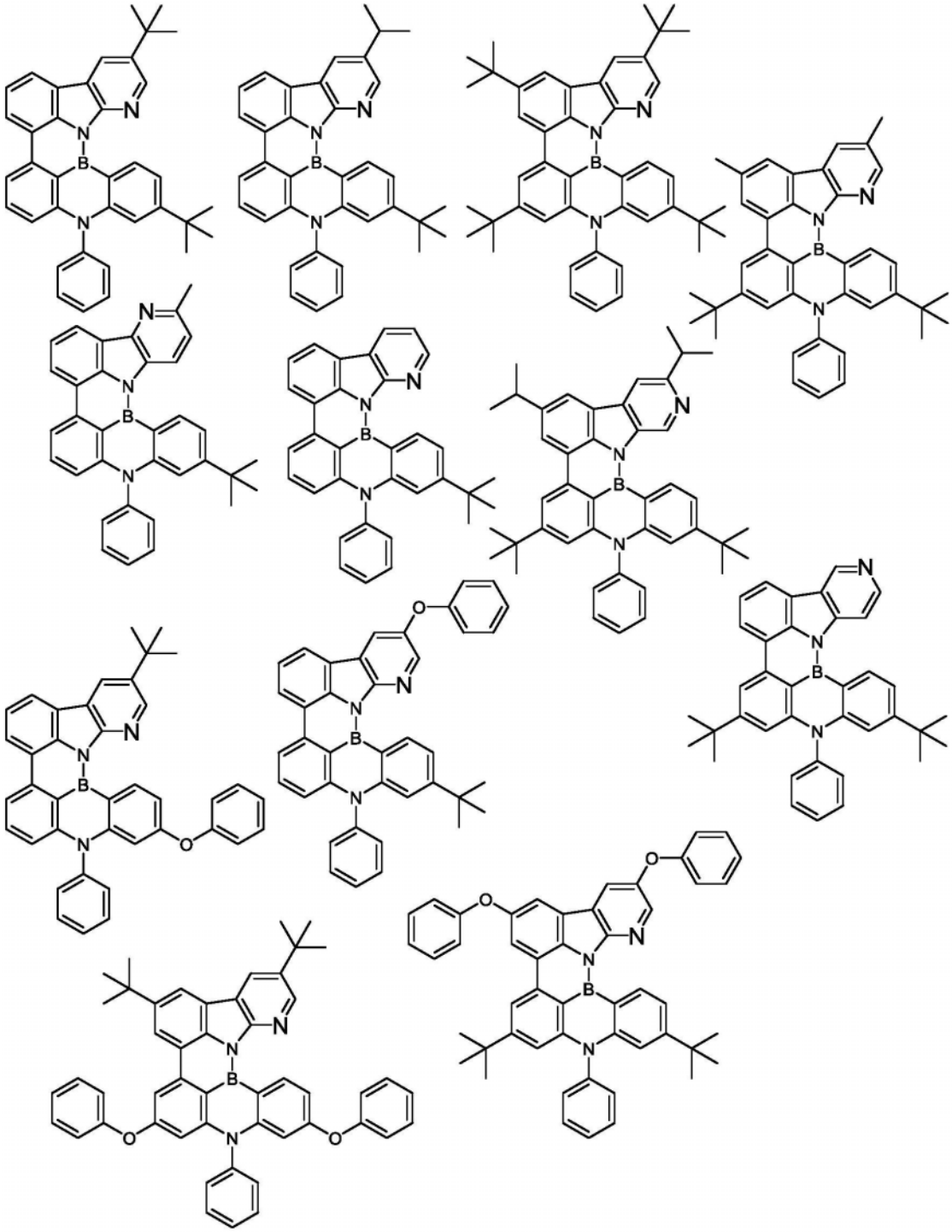
[0995] OLED D1在1000cd/m^2下产生了8.7%的外量子效率(EQE)。在3.9V下发射最大值在466nm处且FWHM是18nm。对应的CIEx值是0.13,CIEy值是0.16。确定1200cd/m^2下的LT95值是55.2h。

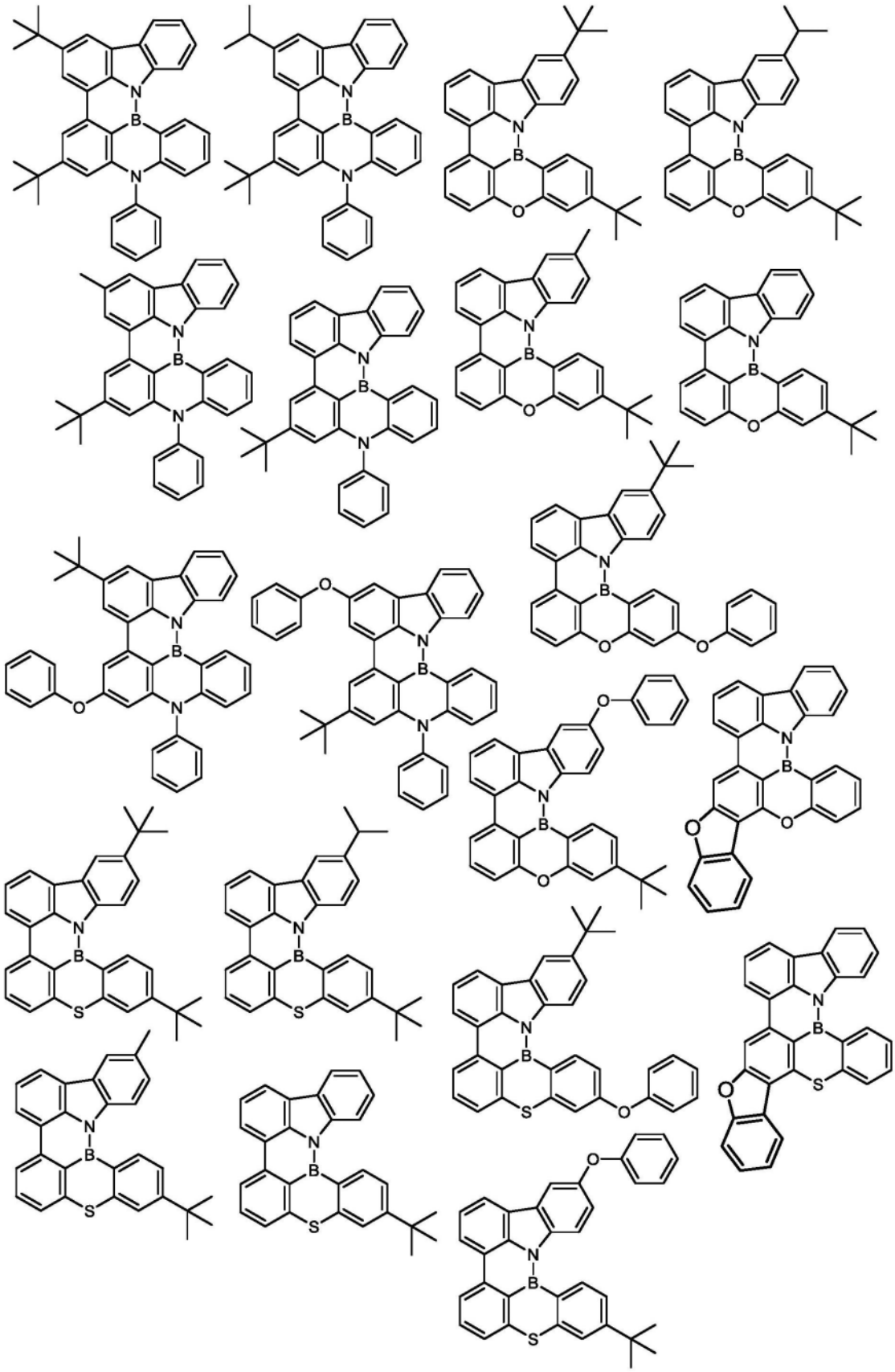
[0996] 发明的有机分子/低聚物的附加的示例

[0997]

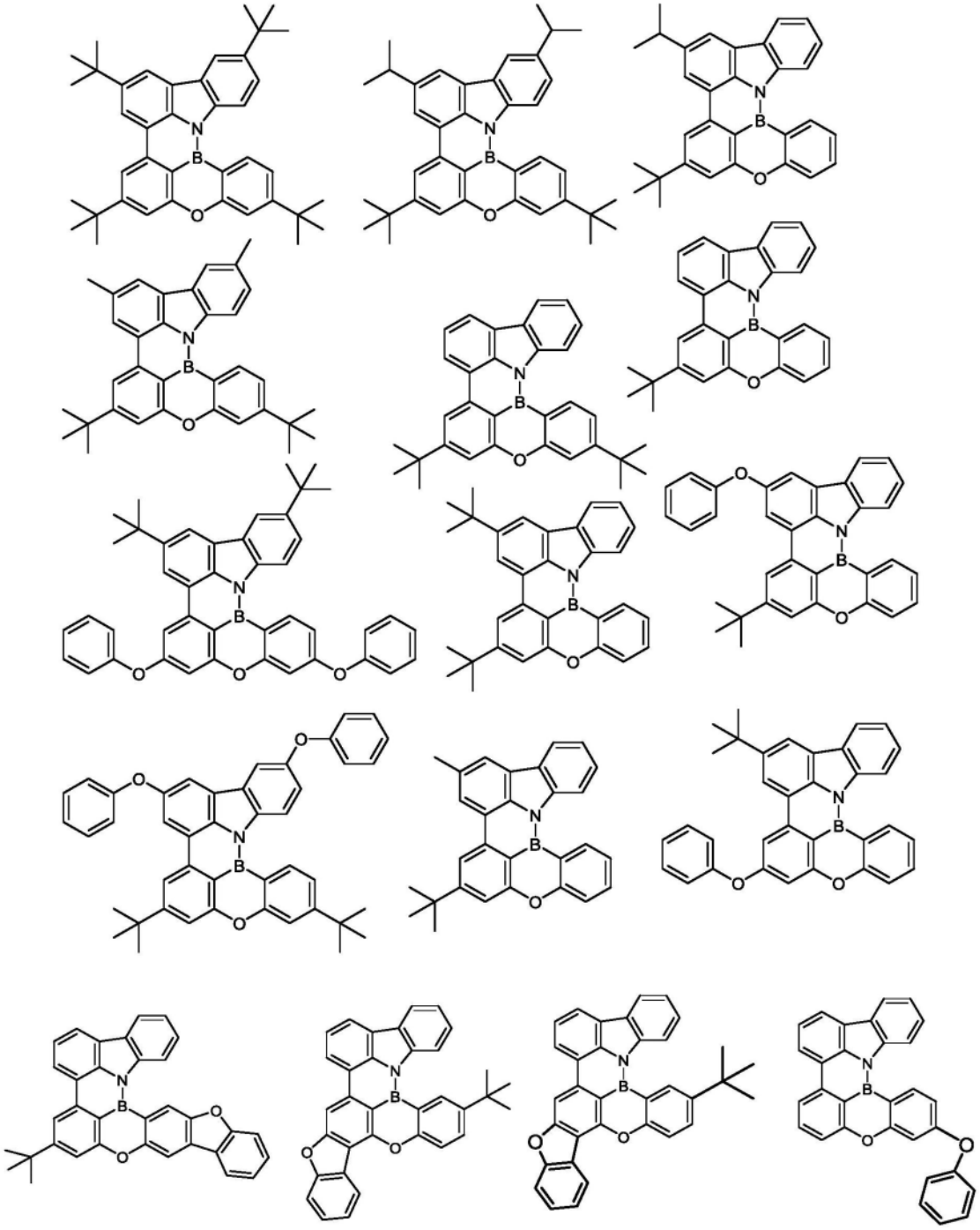


[0998]

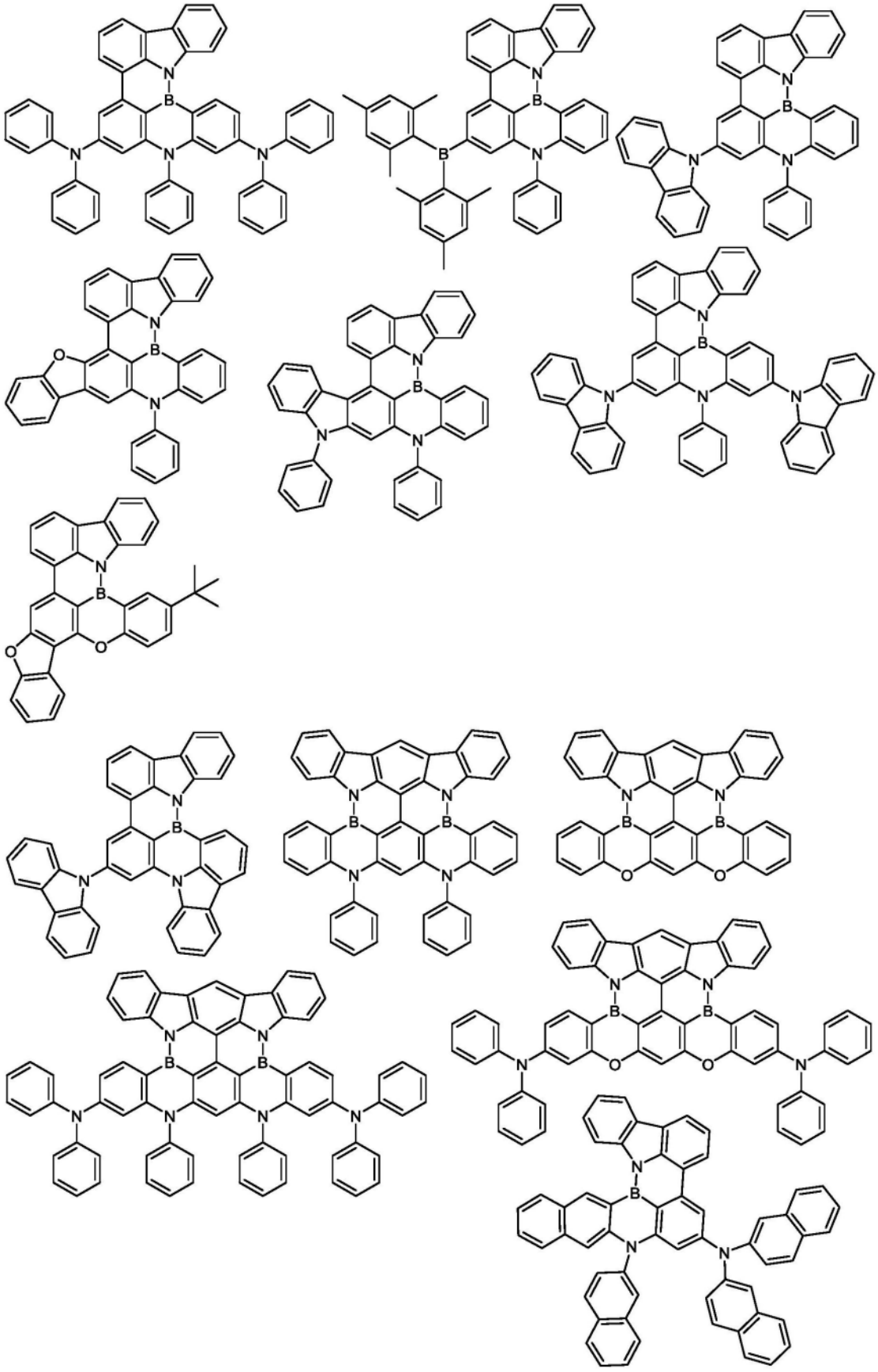


[0999] 

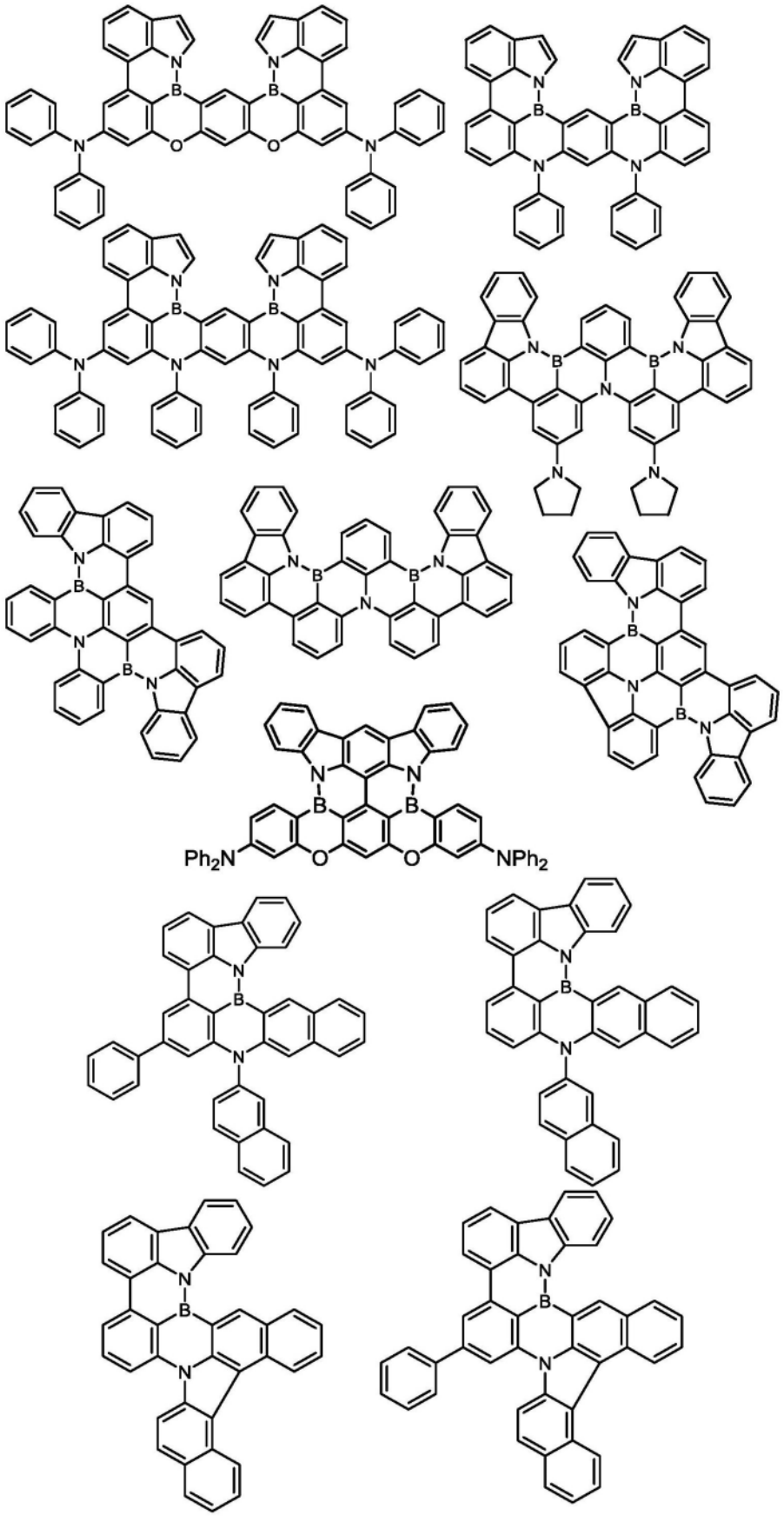
[1000]



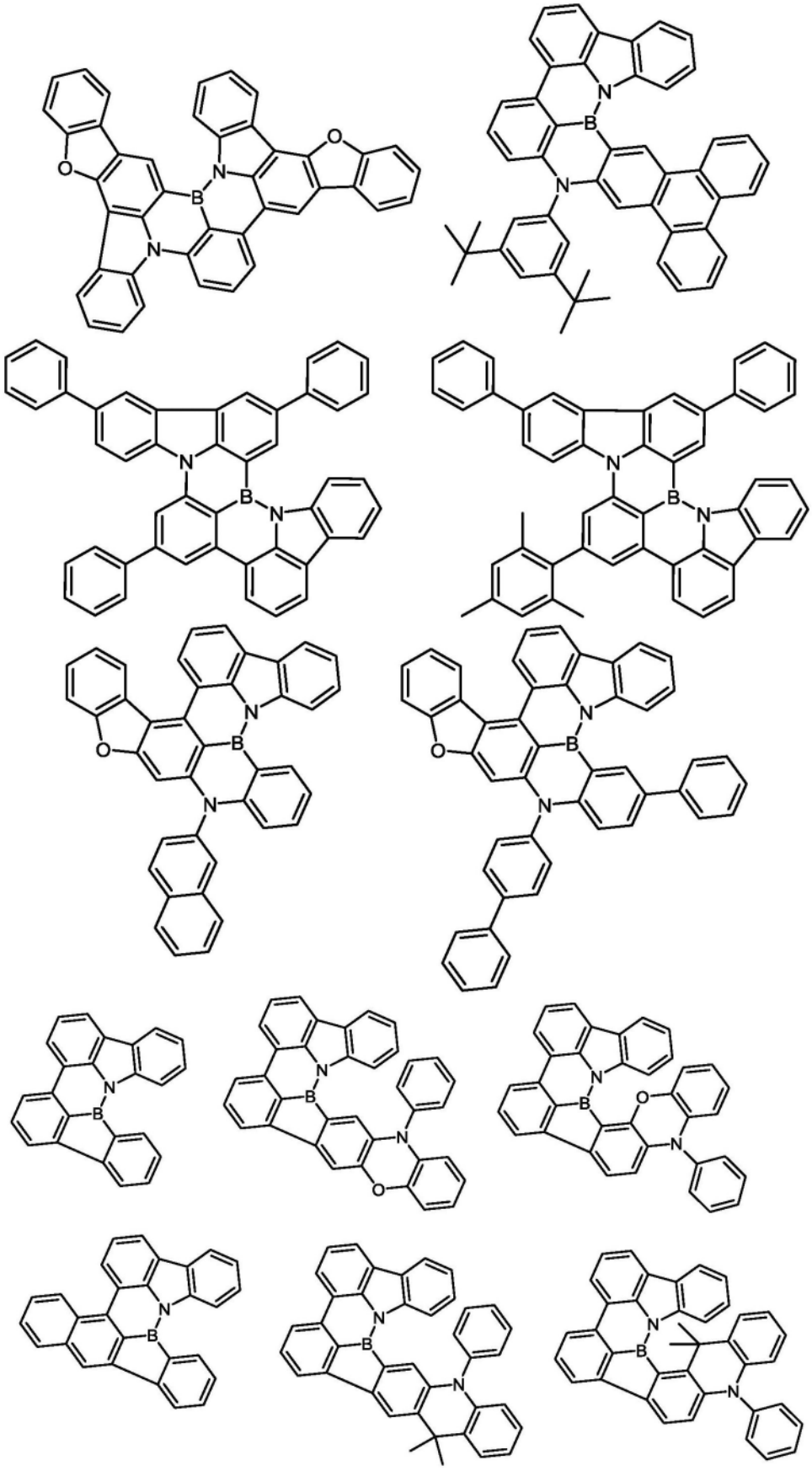
[1001]



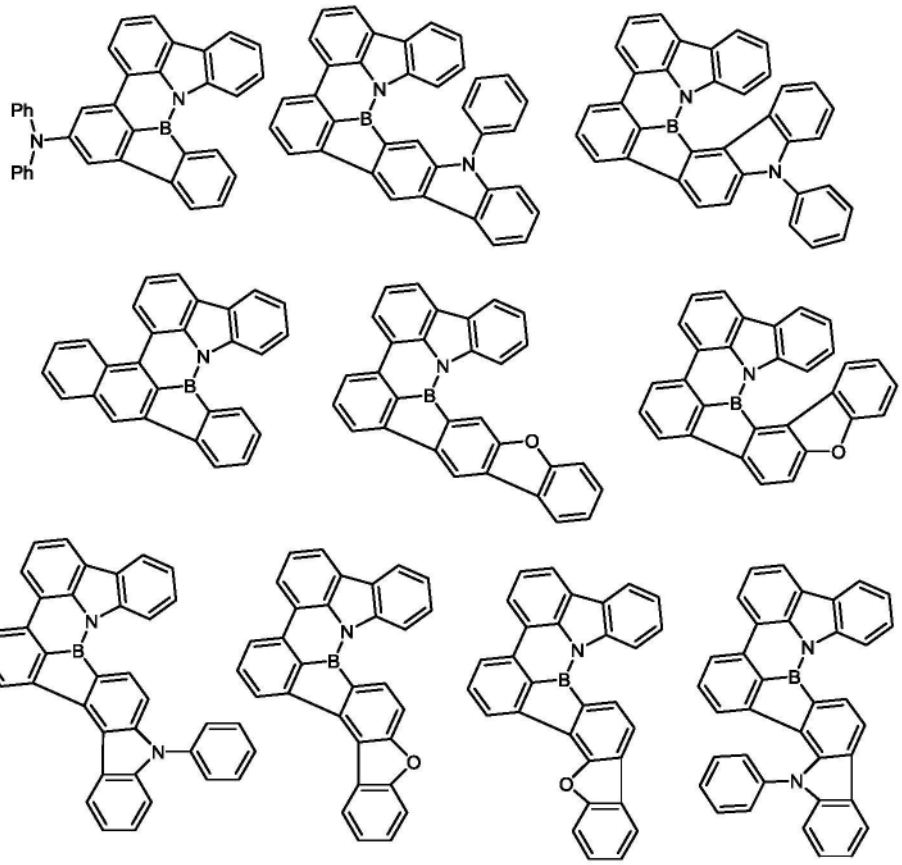
[1002]



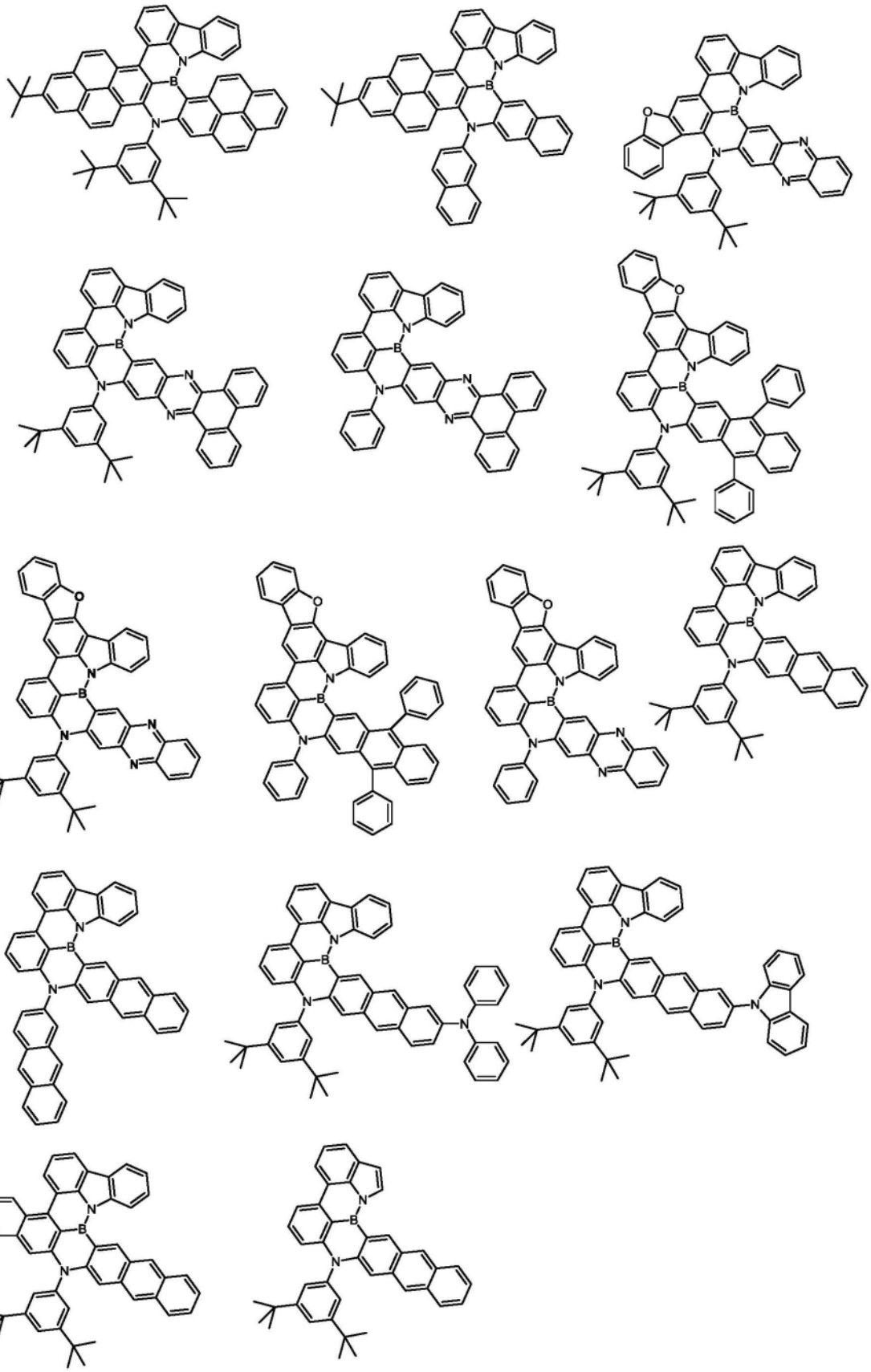
[1003]



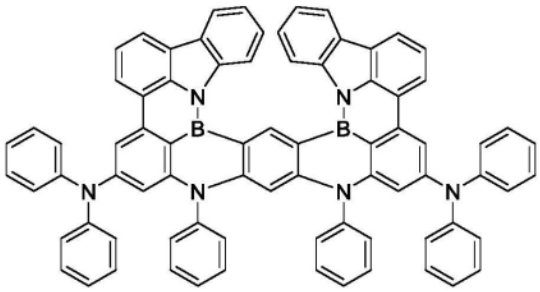
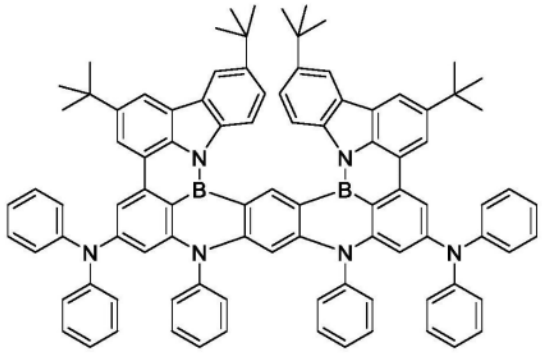
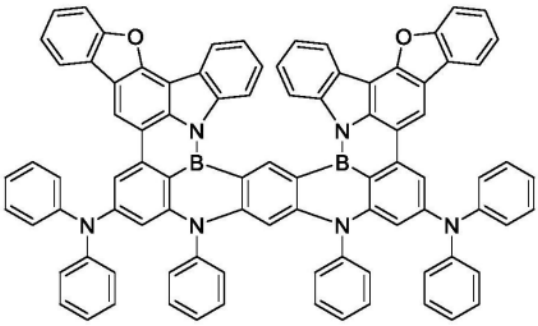
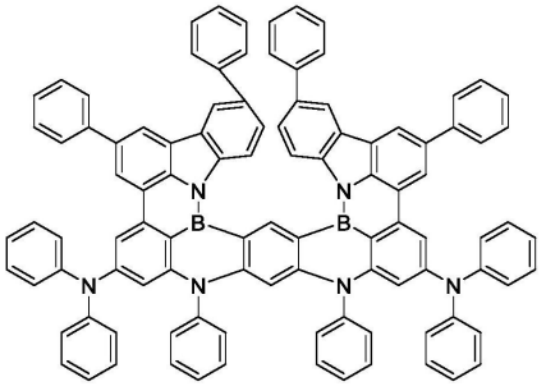
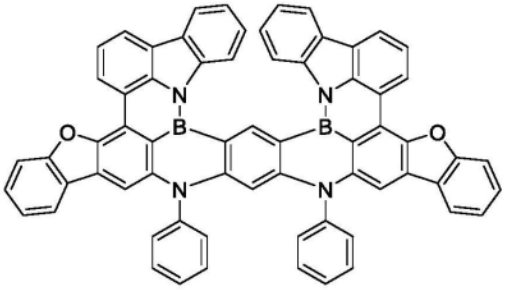
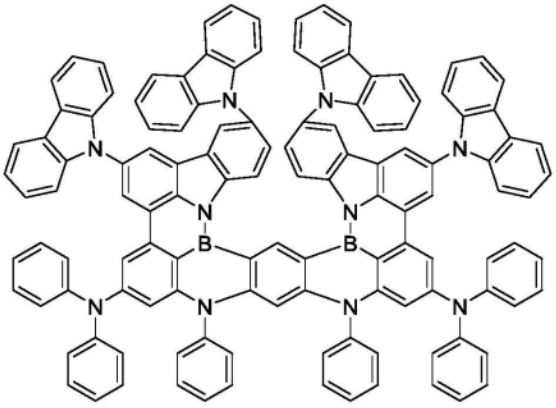
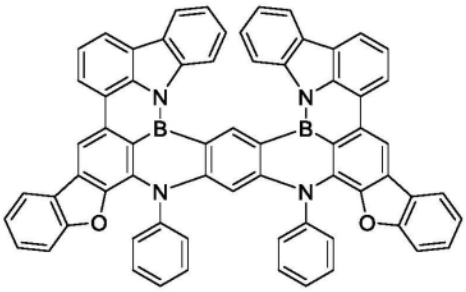
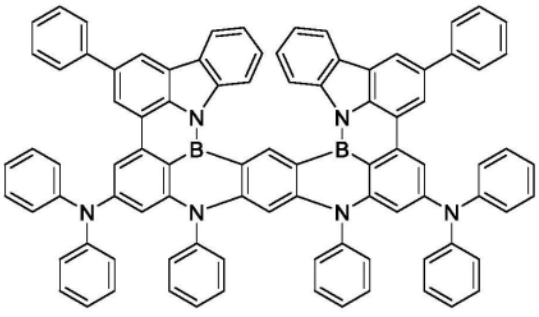
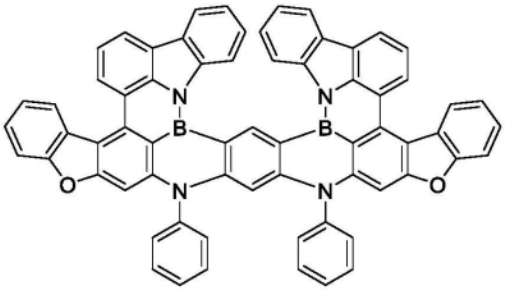
[1004]

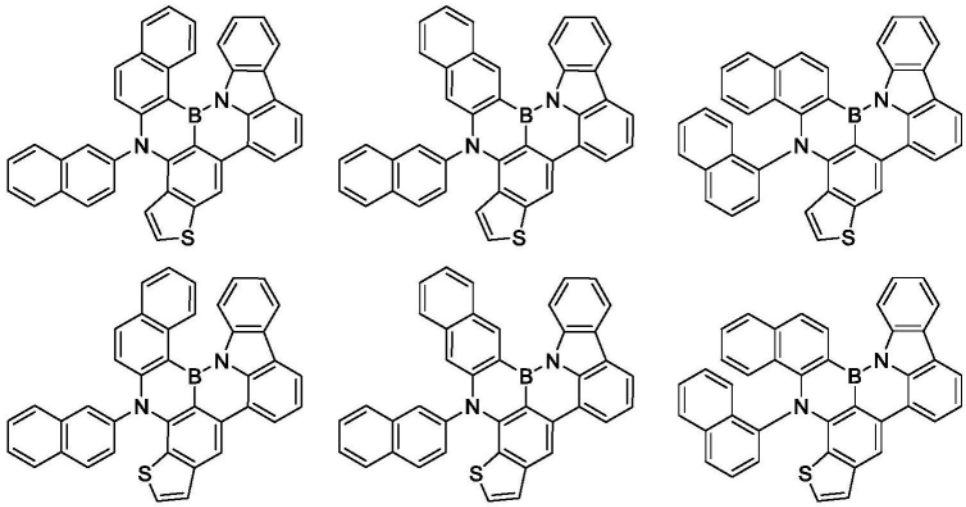


[1005]

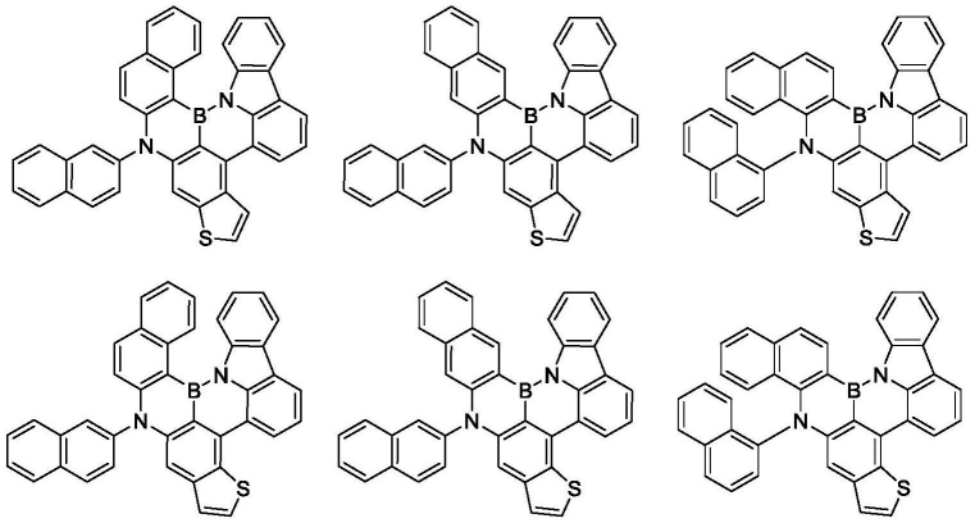


[1006]

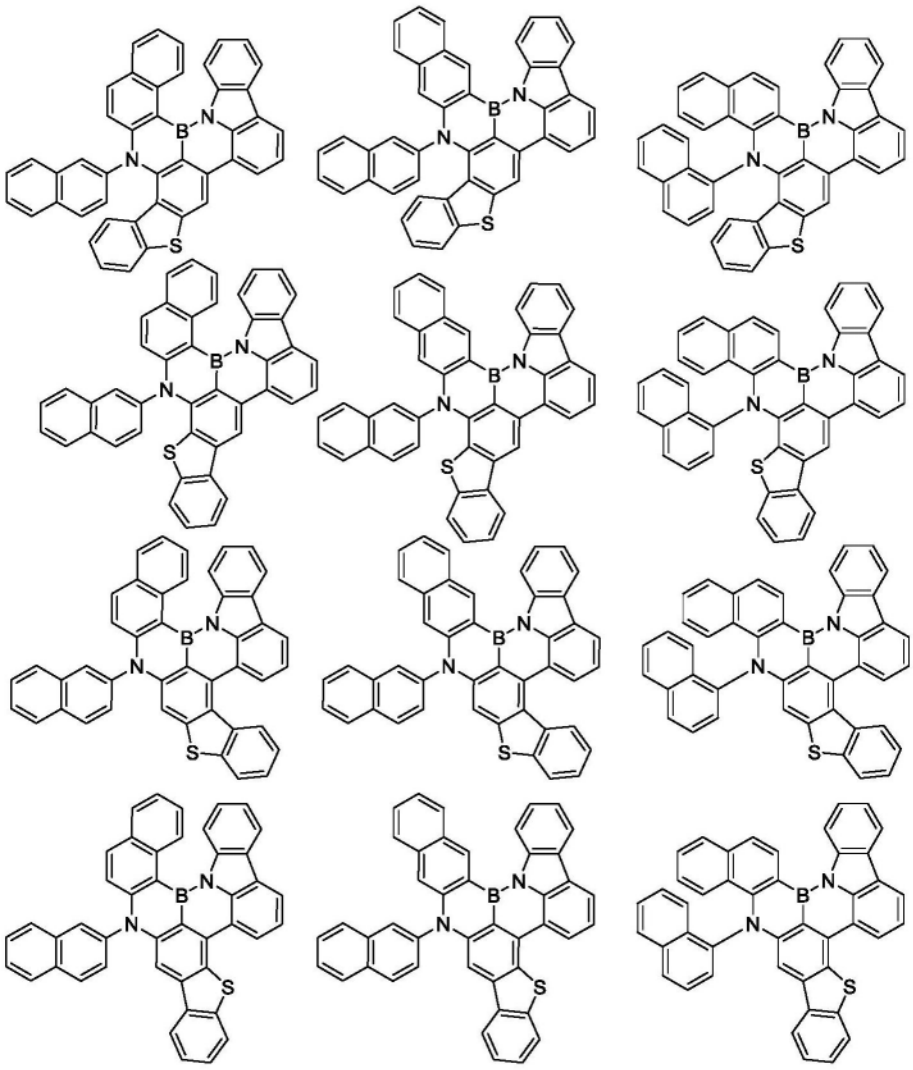










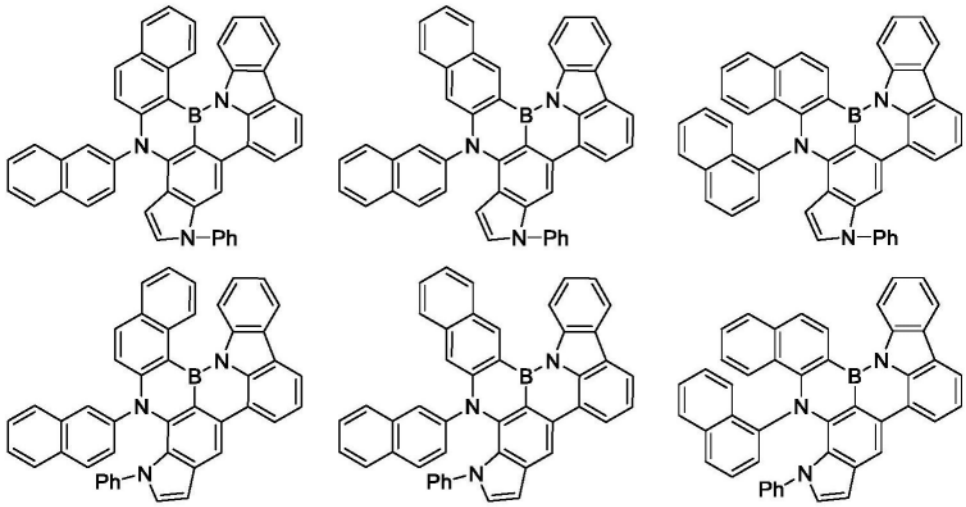


[1007]

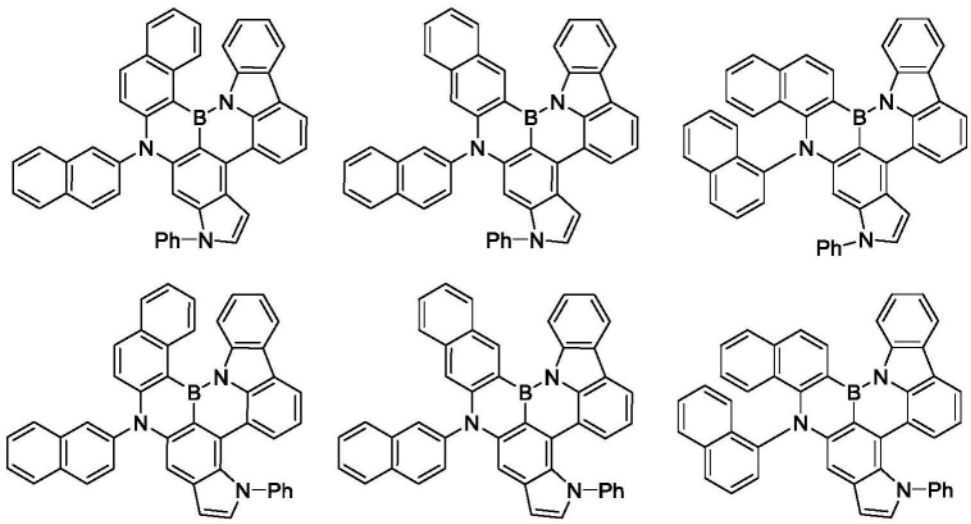


[1008]

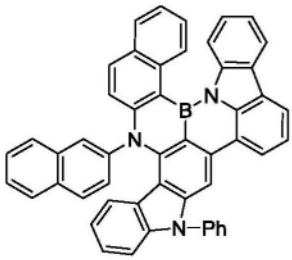
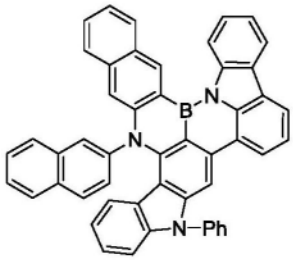
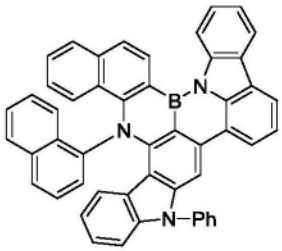
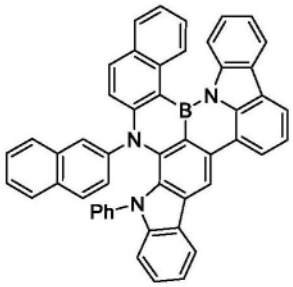
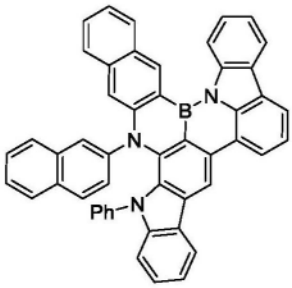
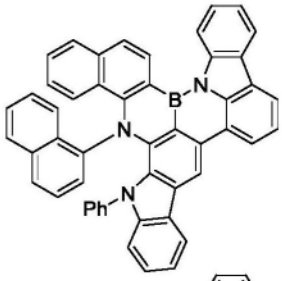
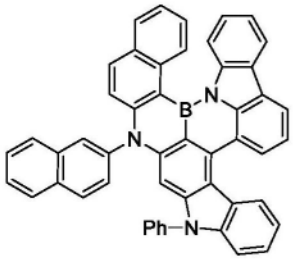
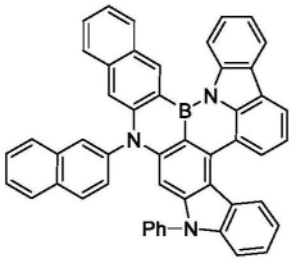
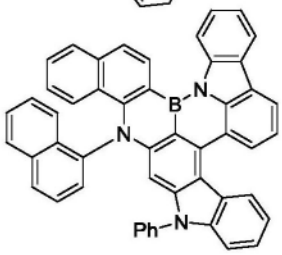
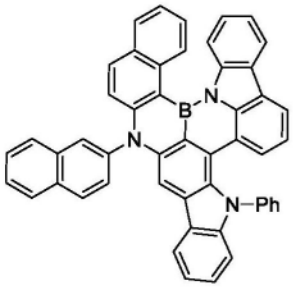
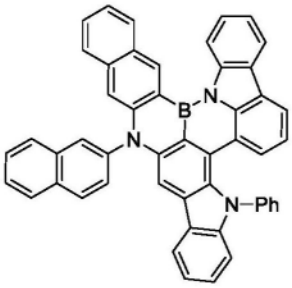
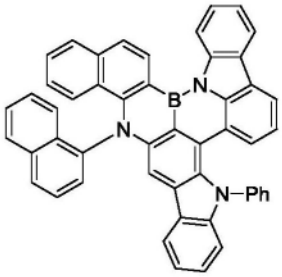


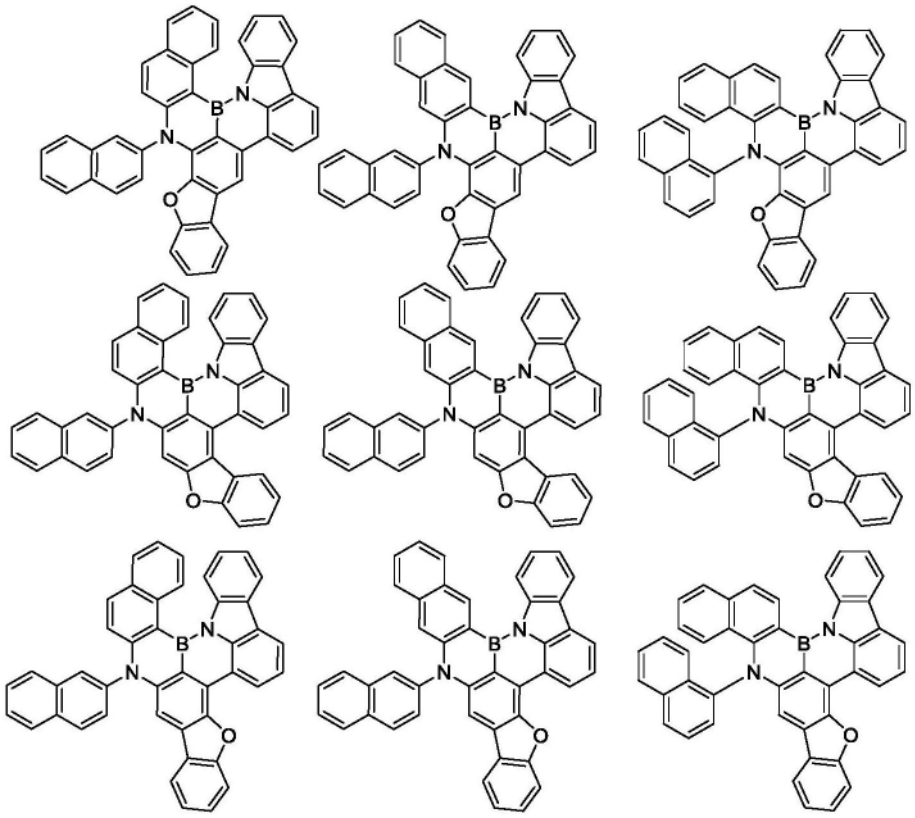


[1009]

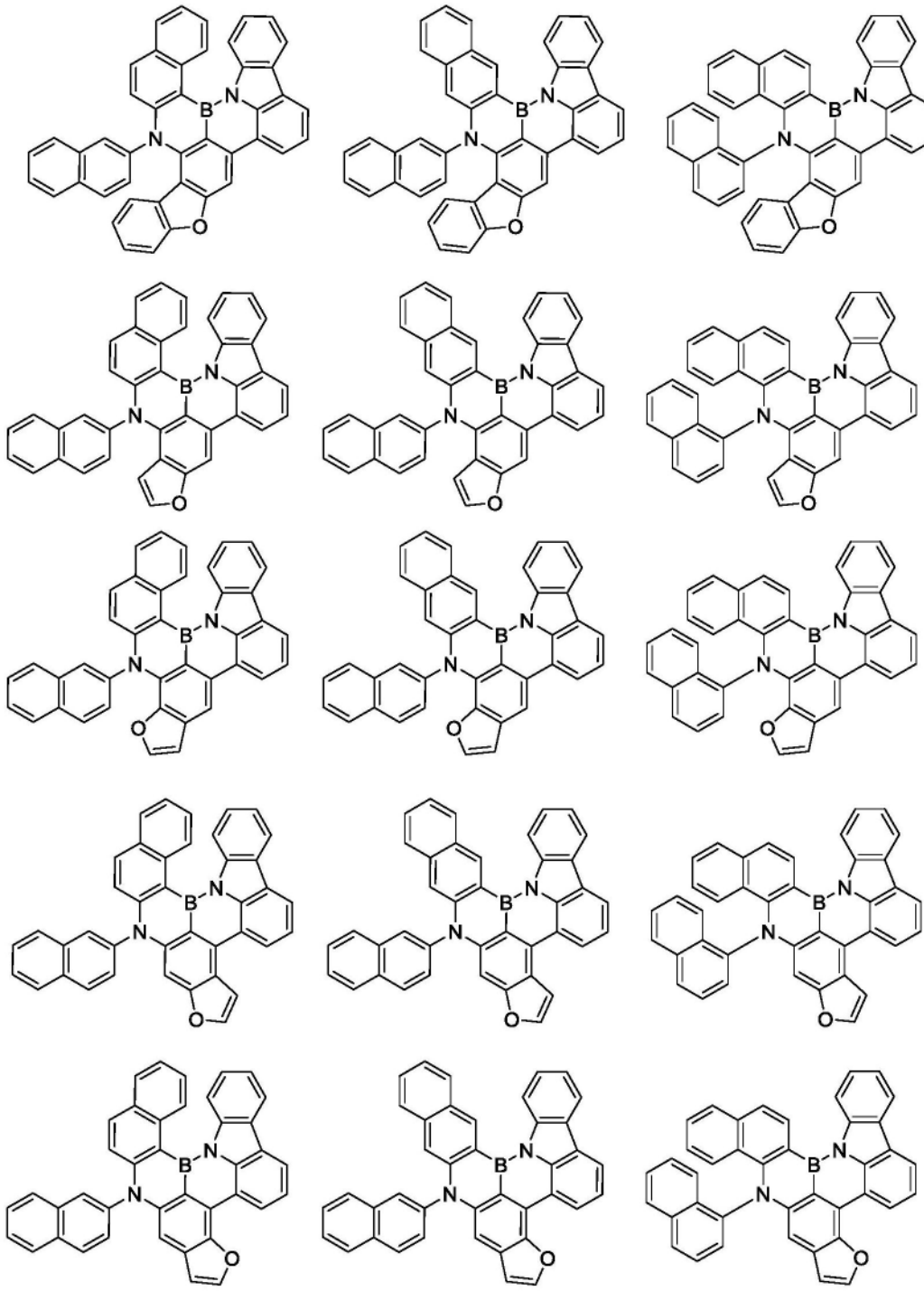


[1010]

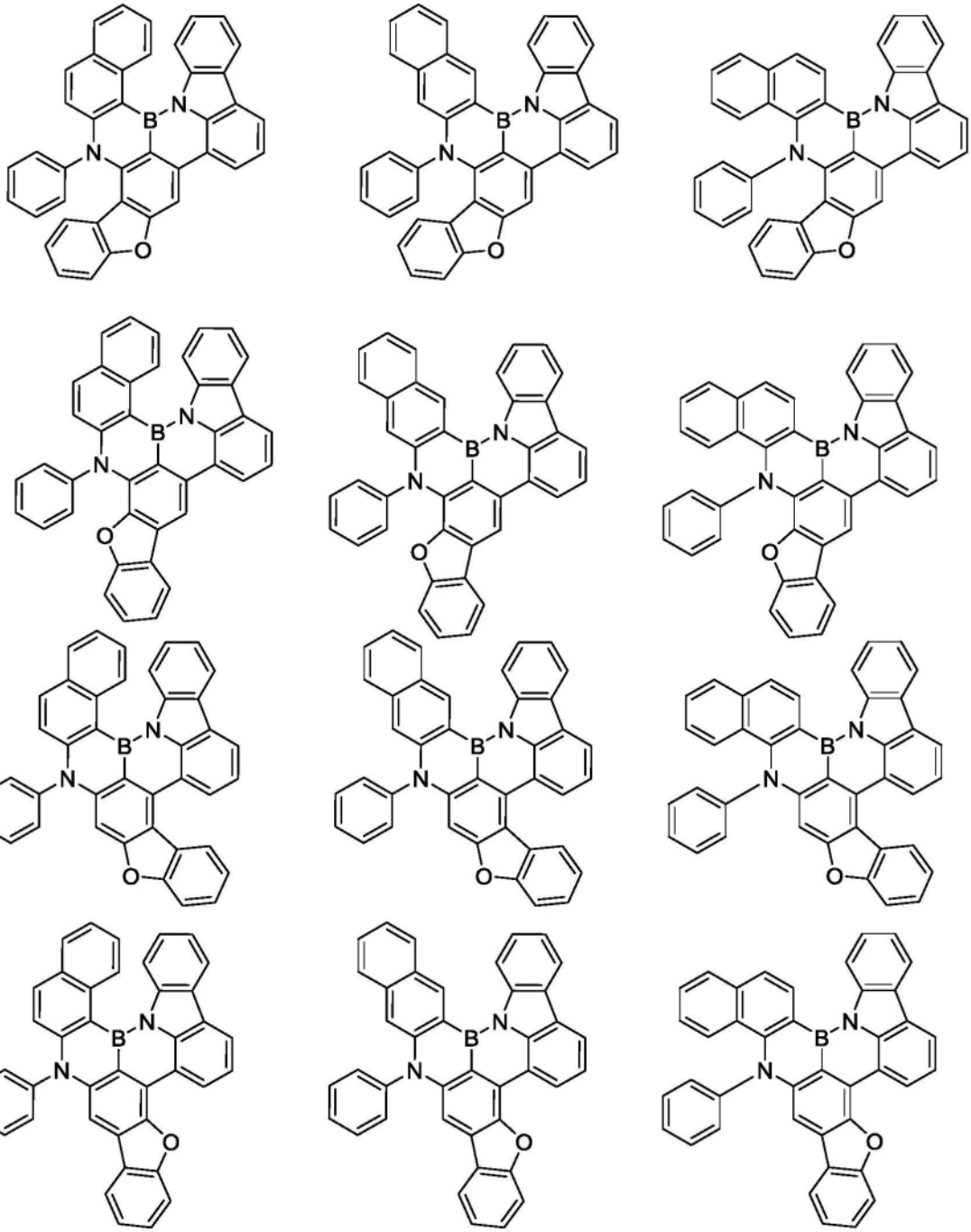













[1011] 

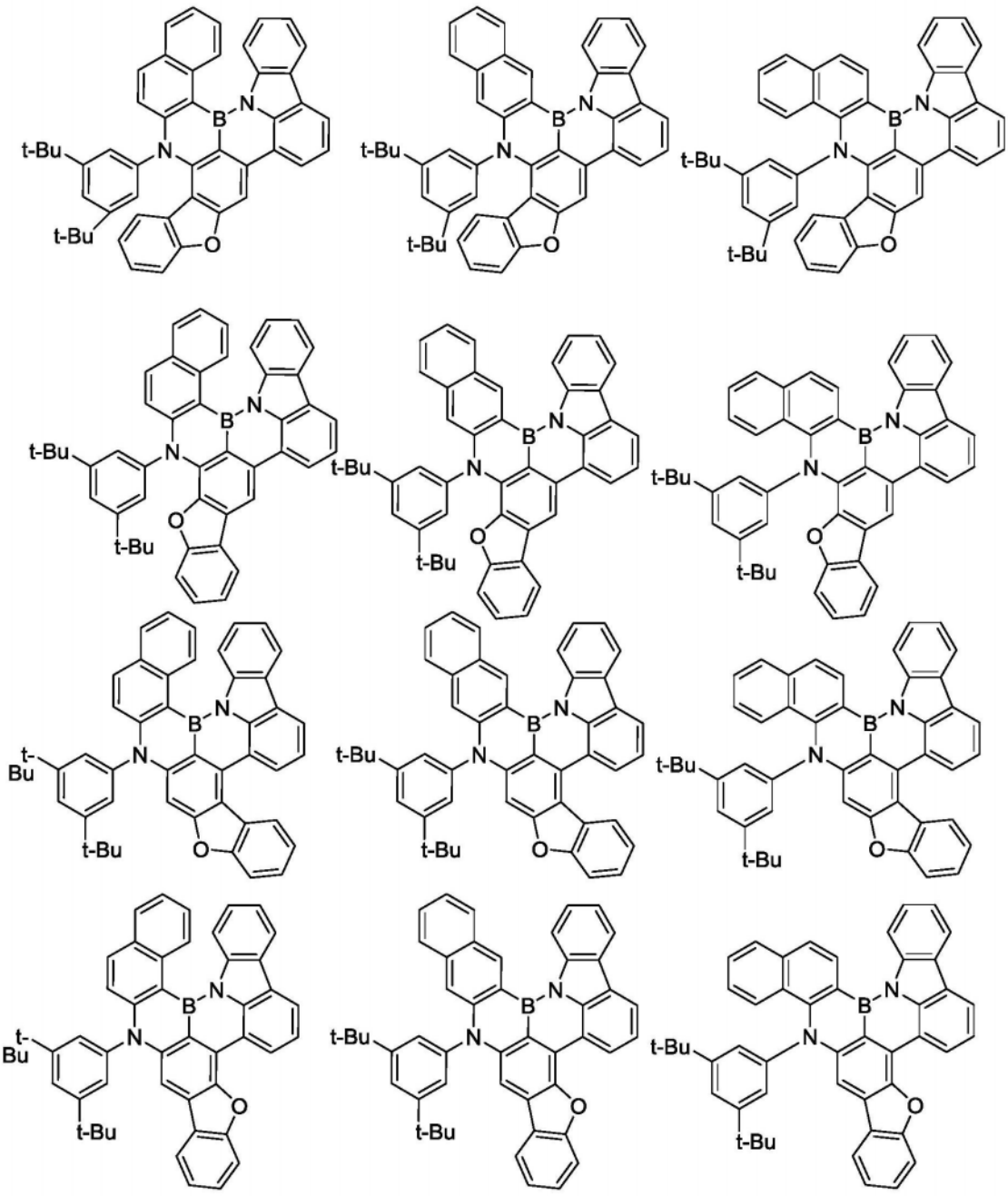
[1012]



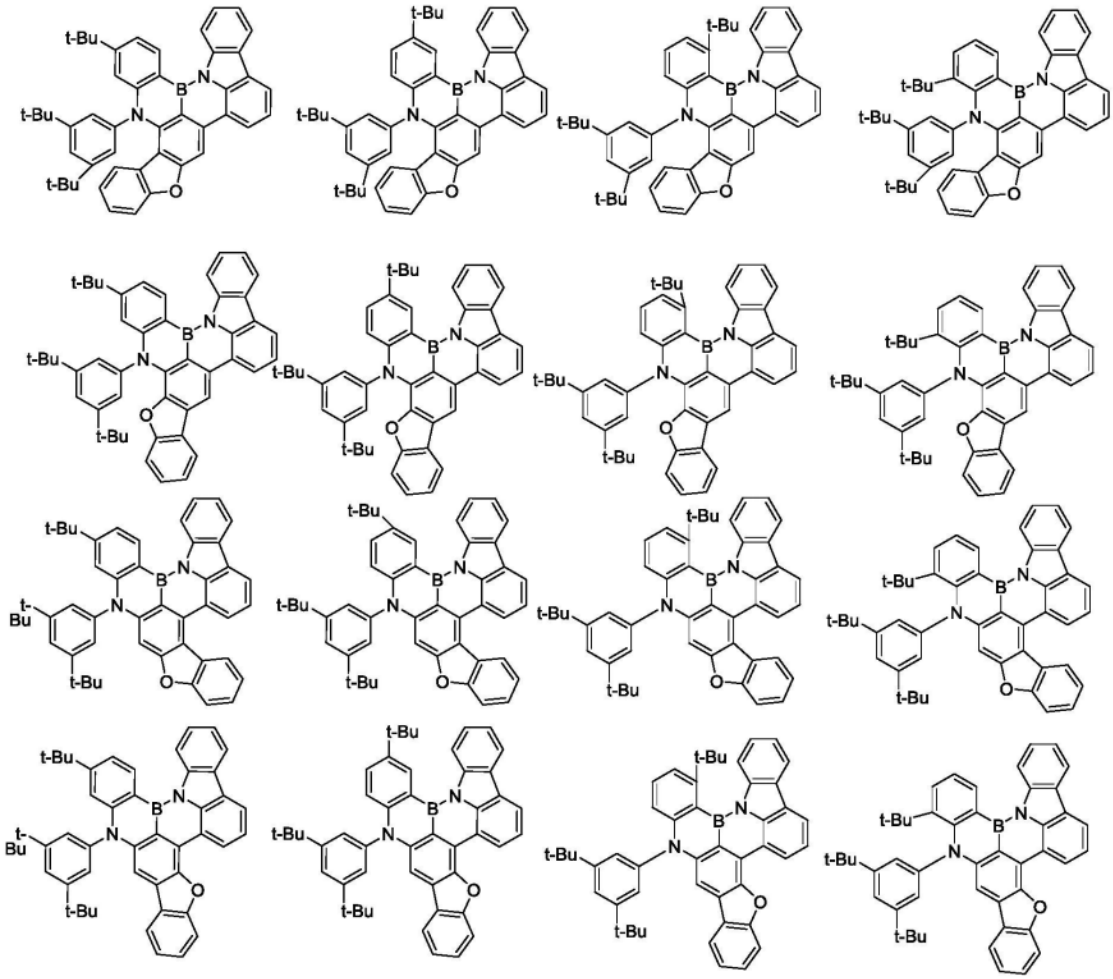
[1013]



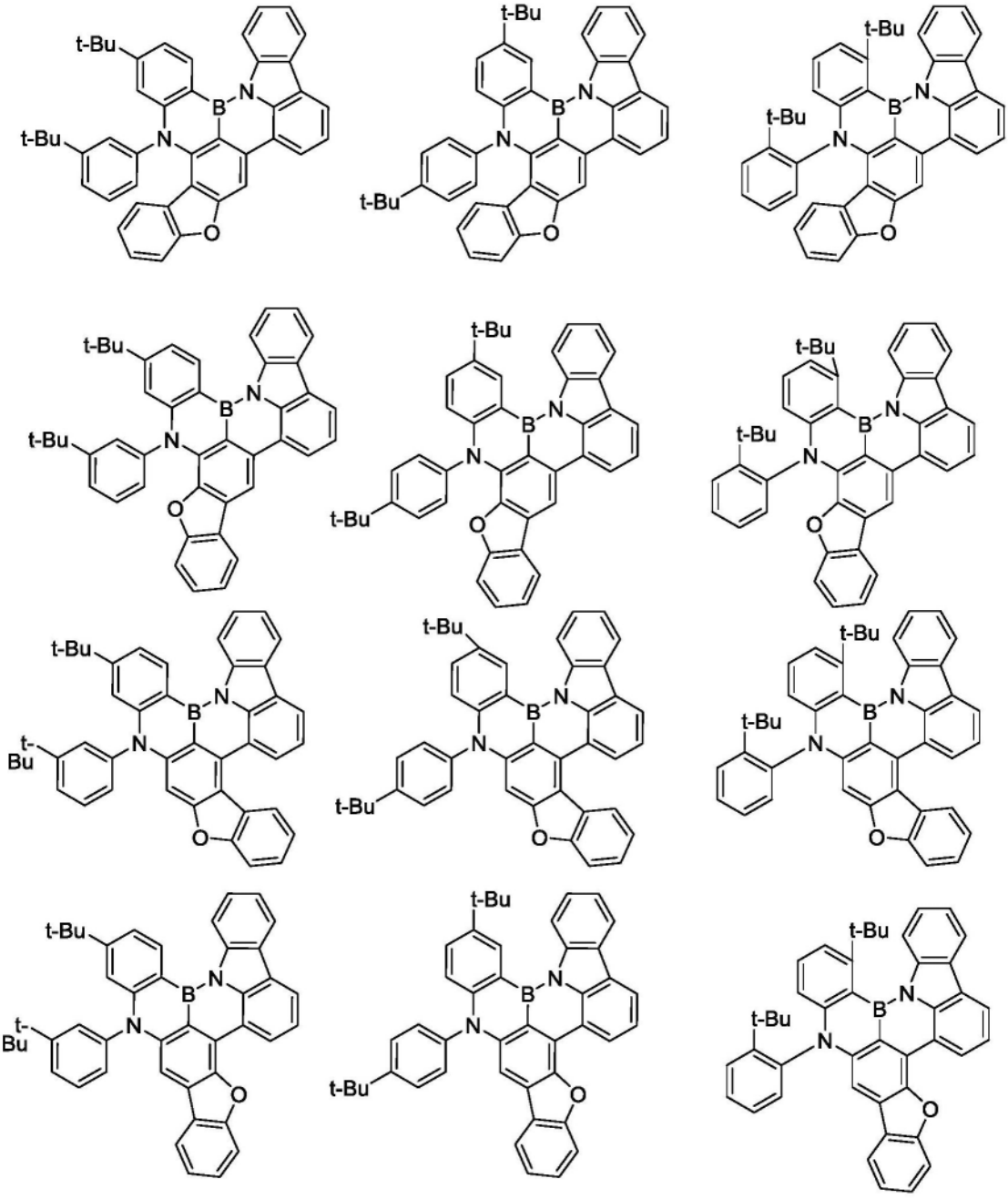
[1014]



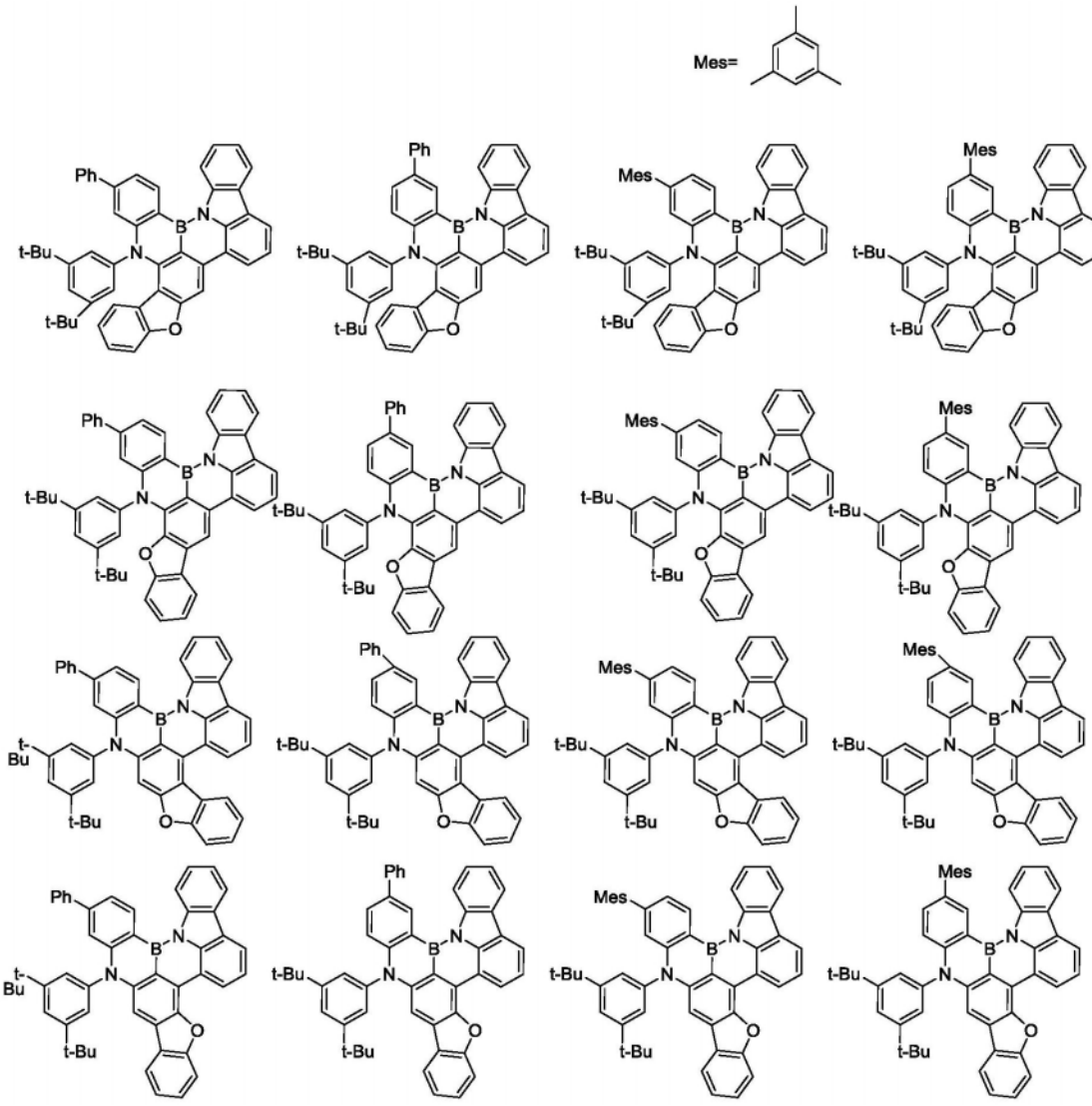
[1015]



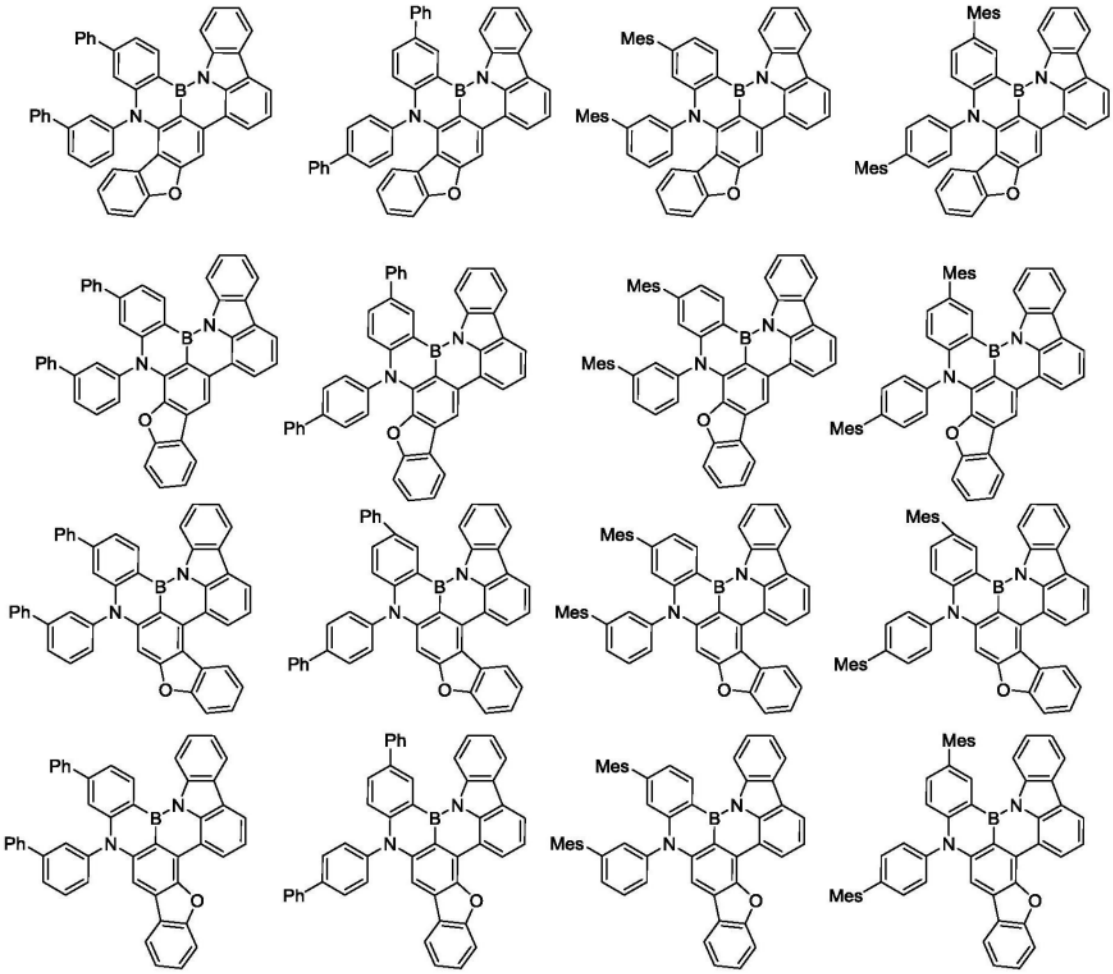
[1016]



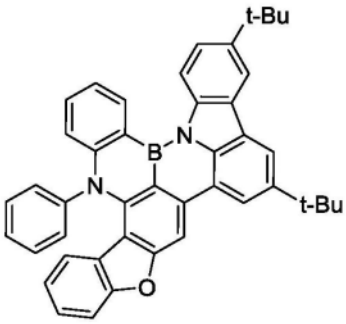
[1017]

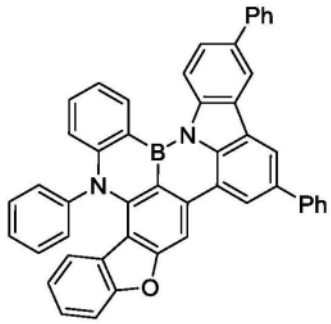


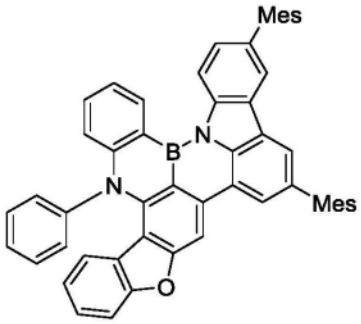
[1018]

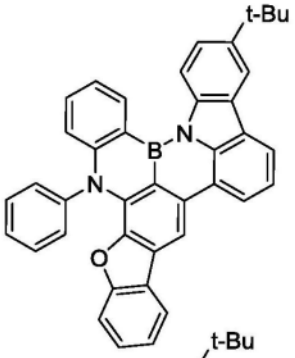


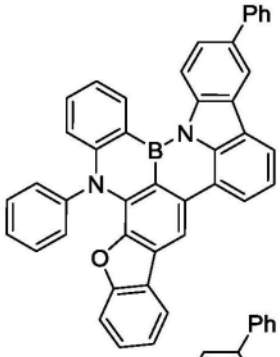
[1019]

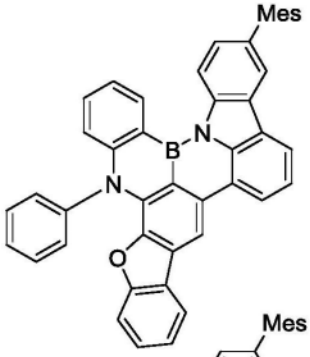

t-Bu
t-Bu
B
N
N
O

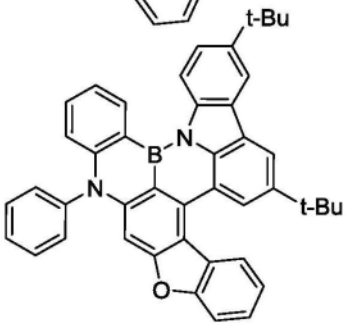

Ph
Ph
B
N
N
O

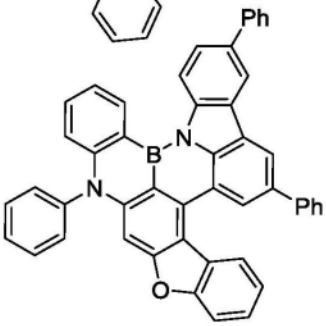

Mes
Mes
B
N
N
O

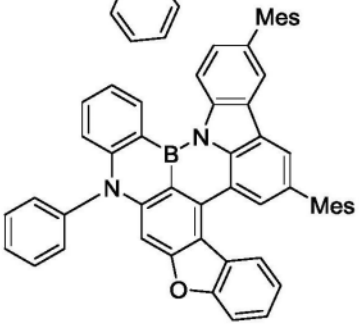

t-Bu
B
N
N
O

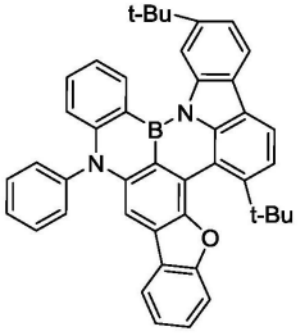

Ph
B
N
N
O

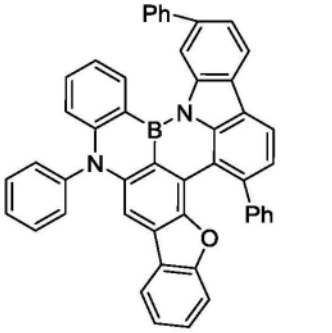

Mes
B
N
N
O

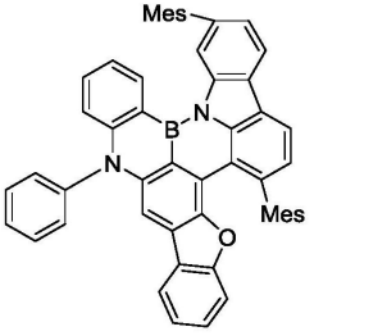

t-Bu
t-Bu
B
N
N
O


Ph
Ph
B
N
N
O

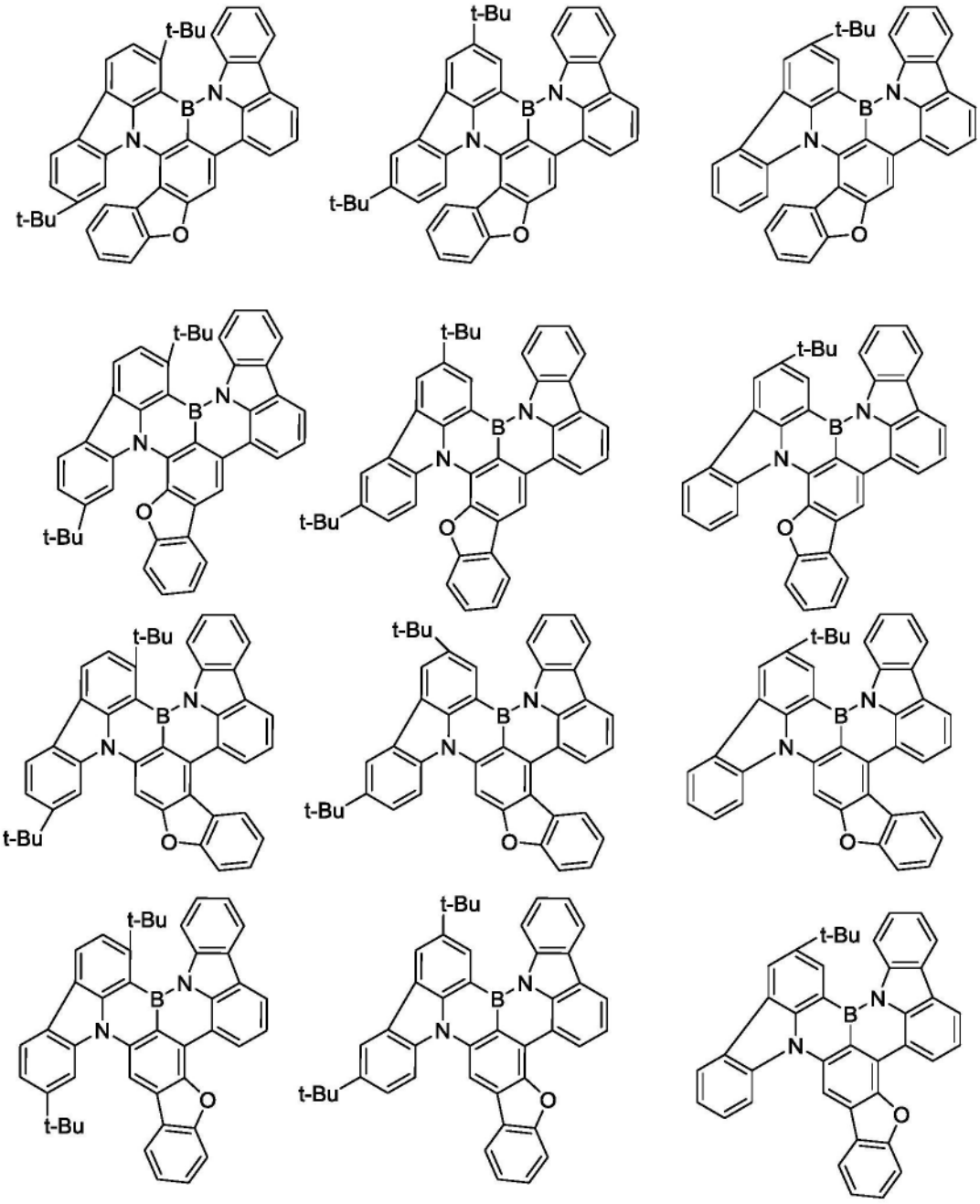

Mes
Mes
B
N
N
O


t-Bu
t-Bu
B
N
N
O

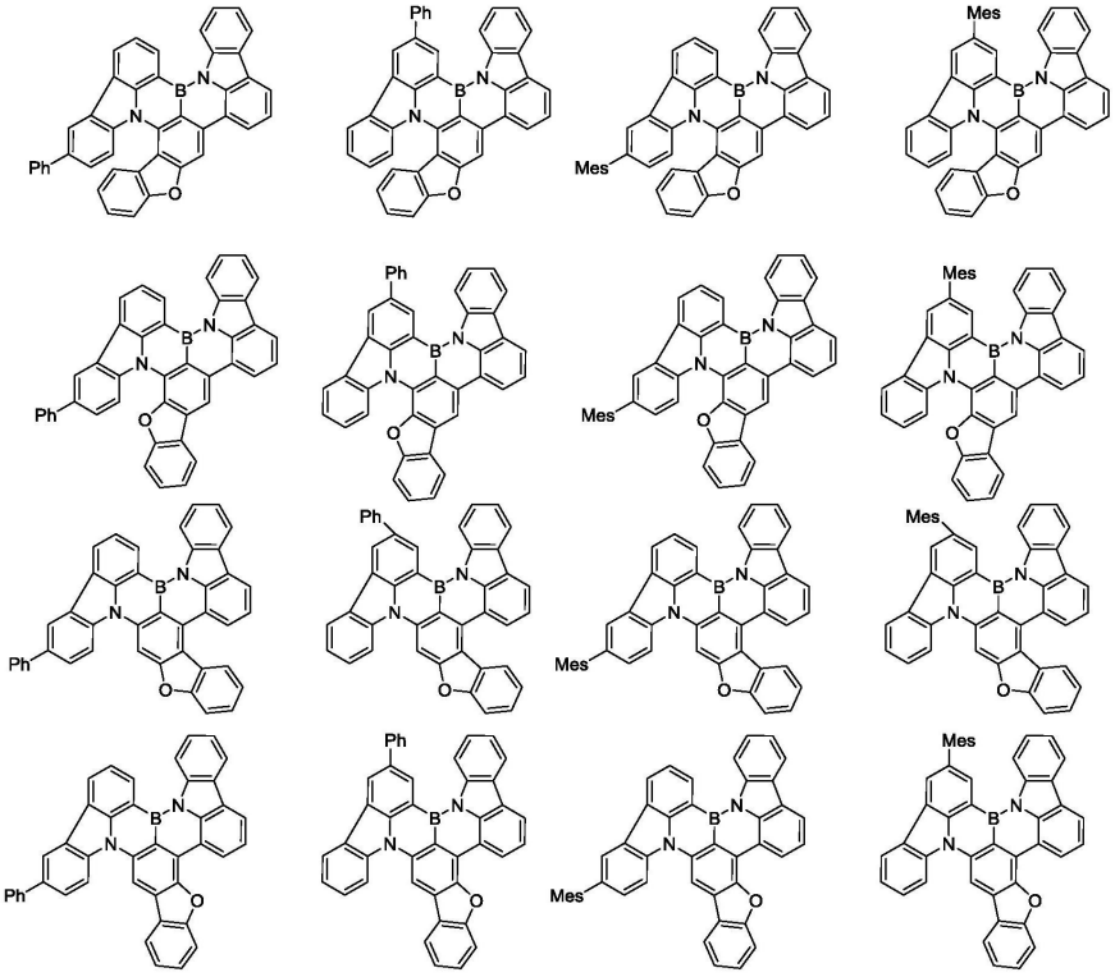

Ph
Ph
B
N
N
O


Mes
Mes
B
N
N
O

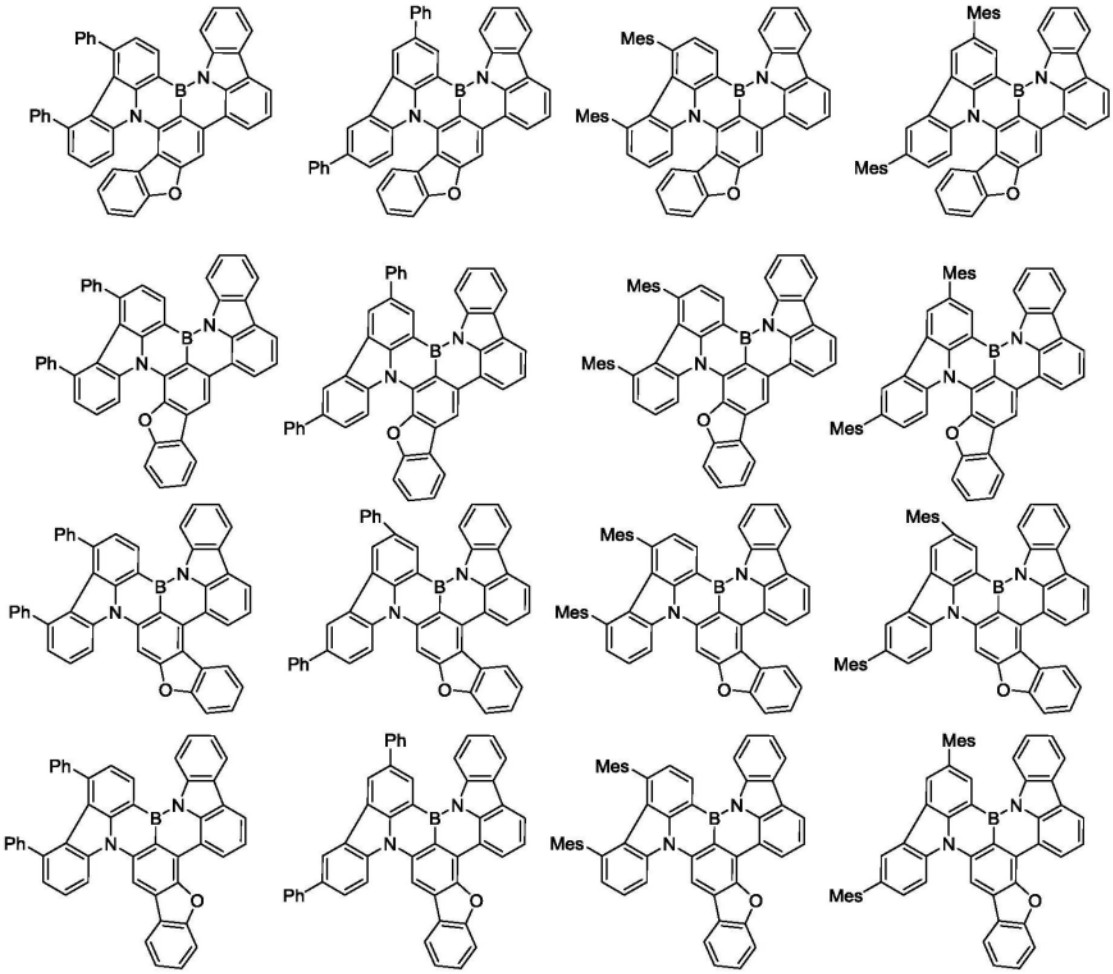
[1020]



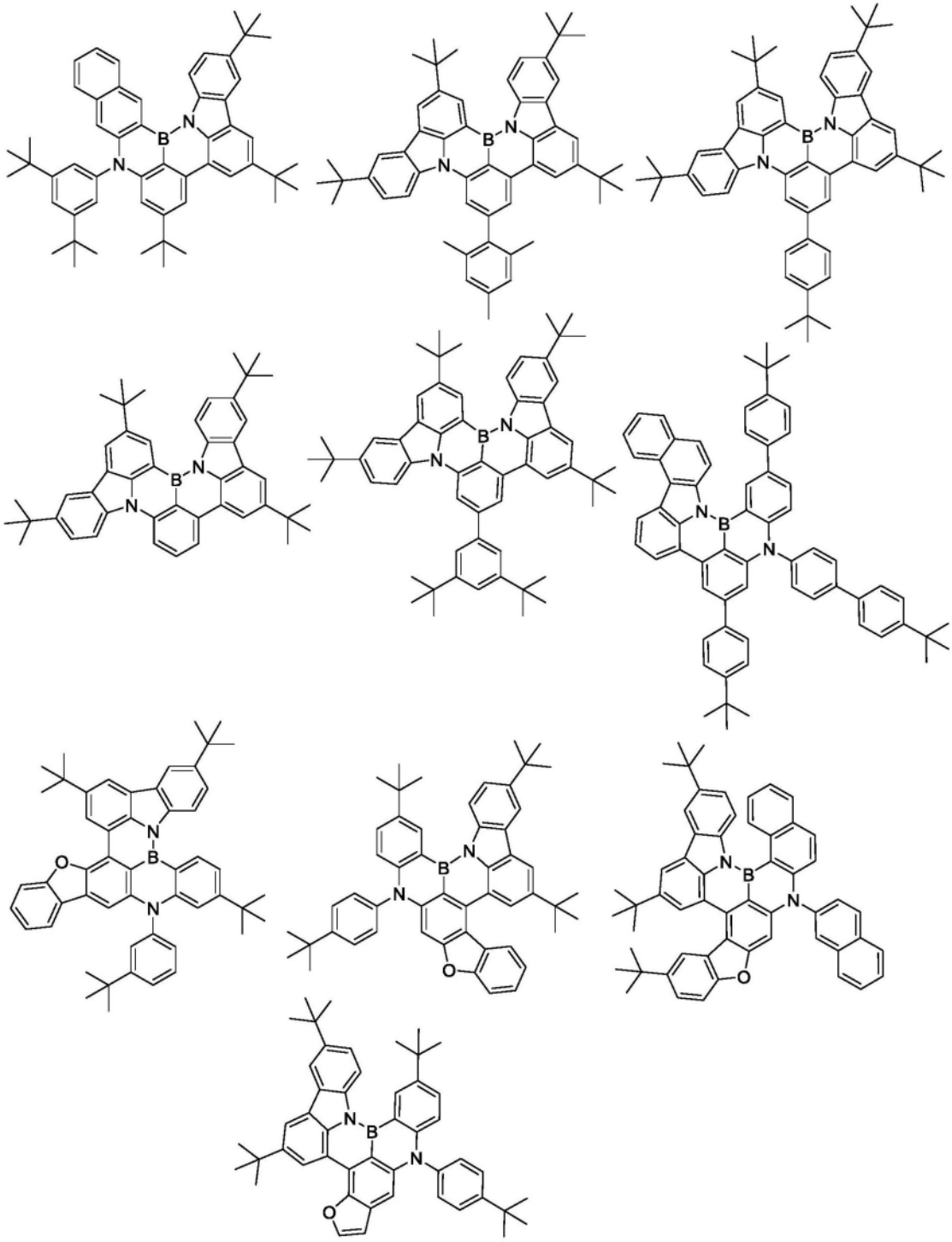
[1021]

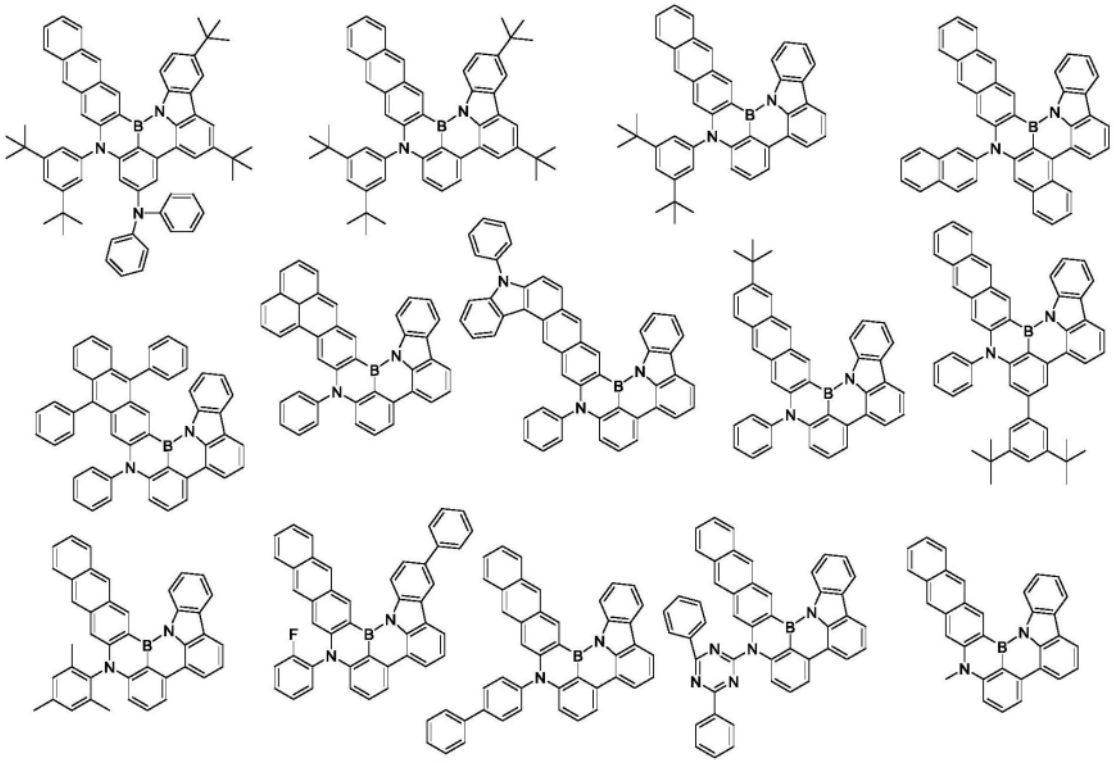


[1022]

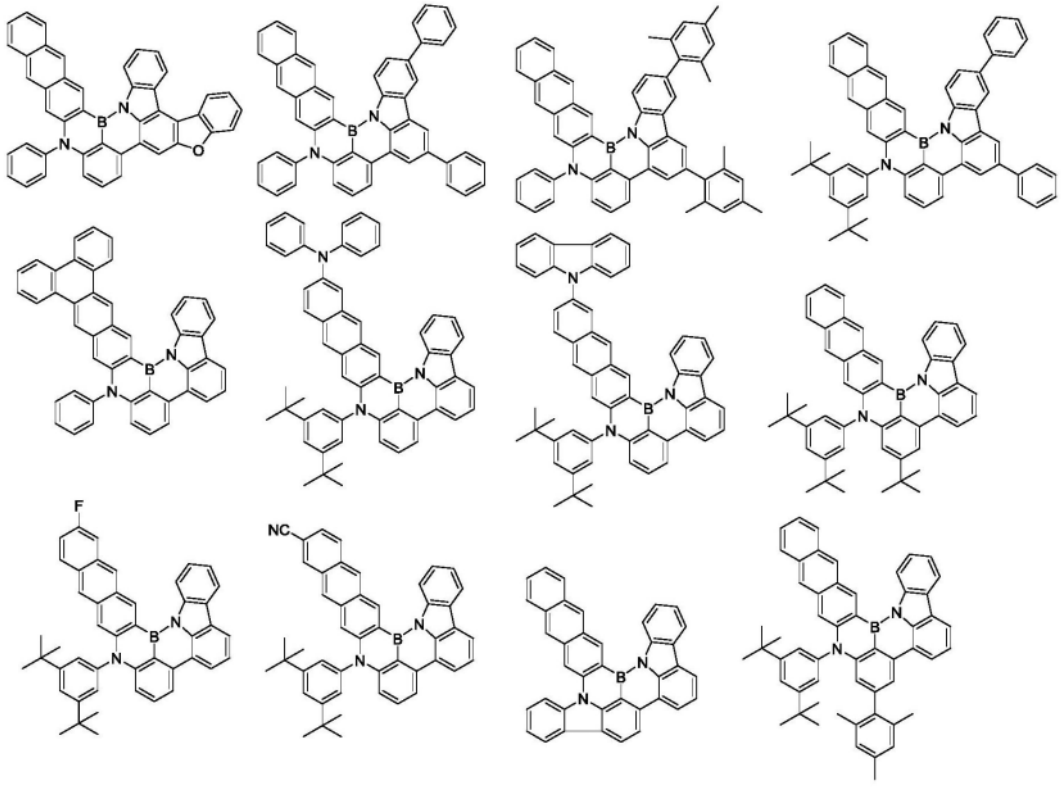


[1023]

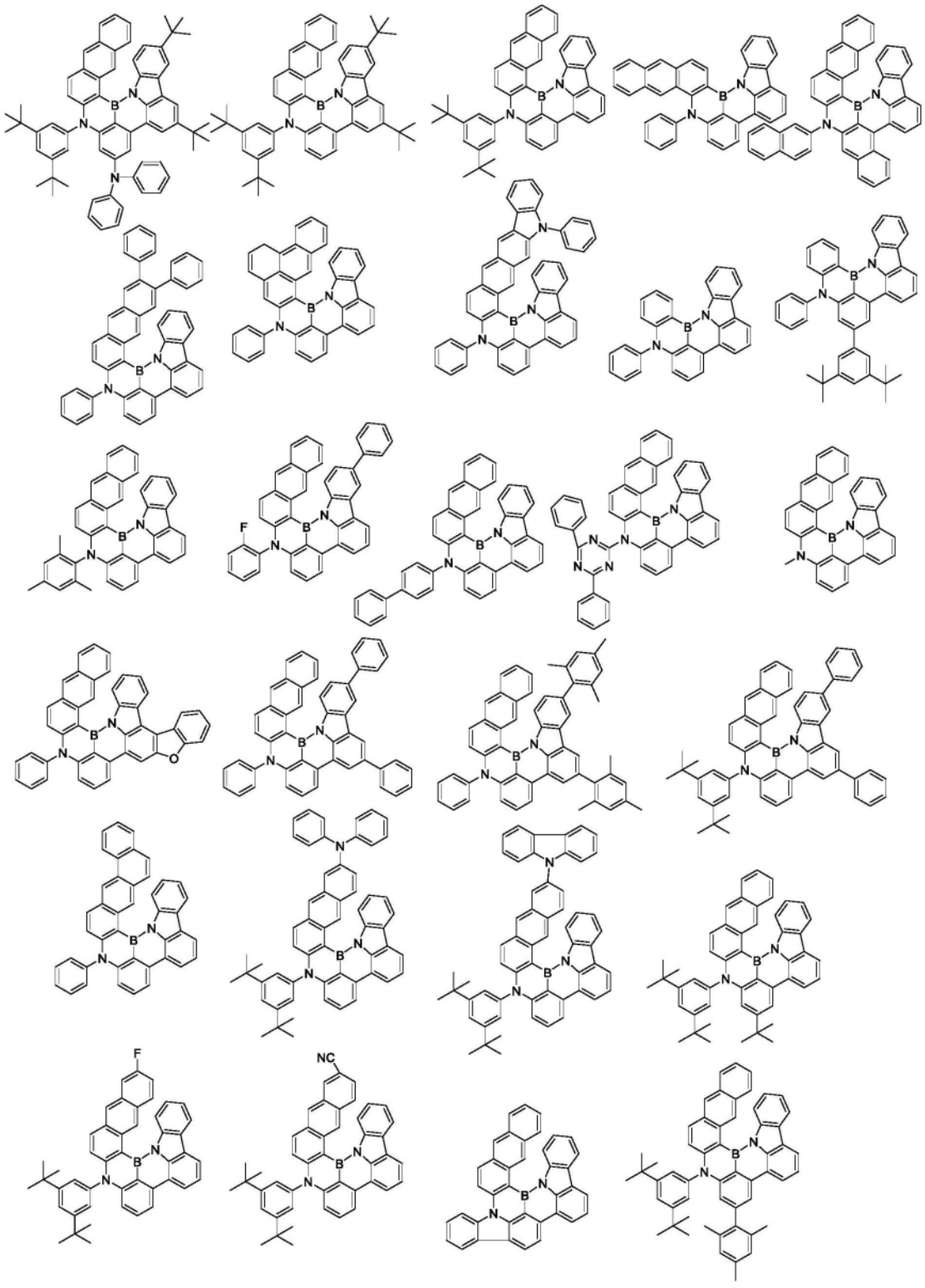


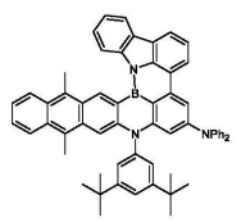
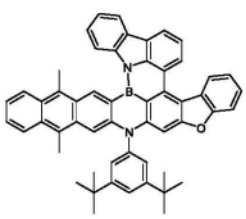
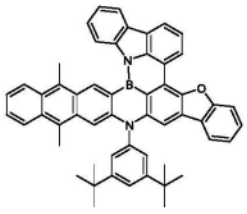
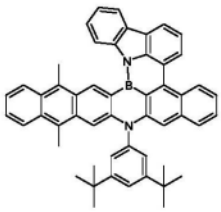
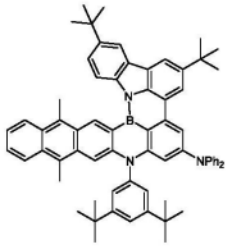
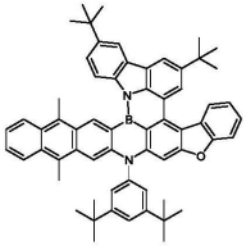
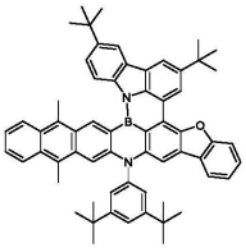
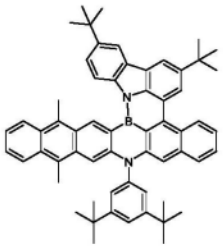
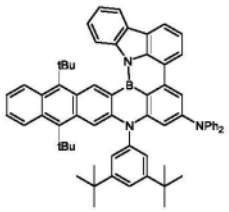
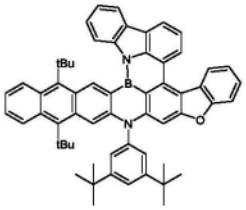
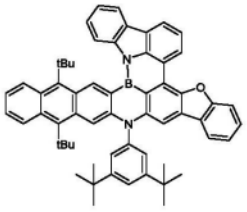
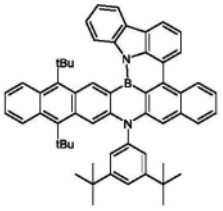


[1024]

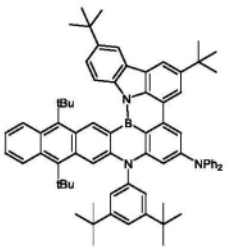
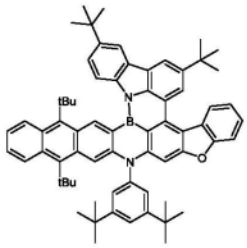
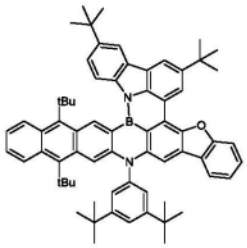
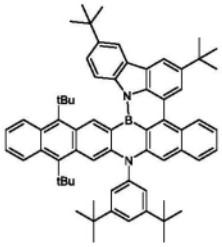
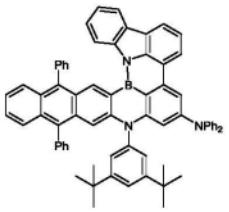
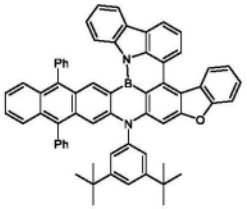
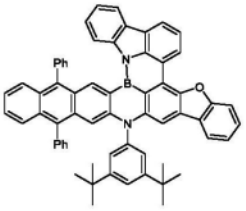
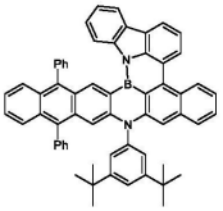
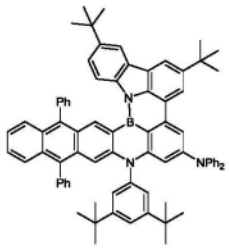
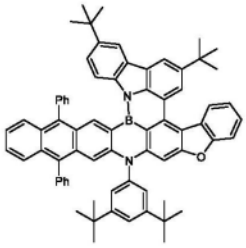
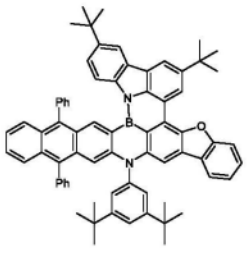
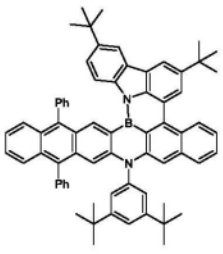


[1025]

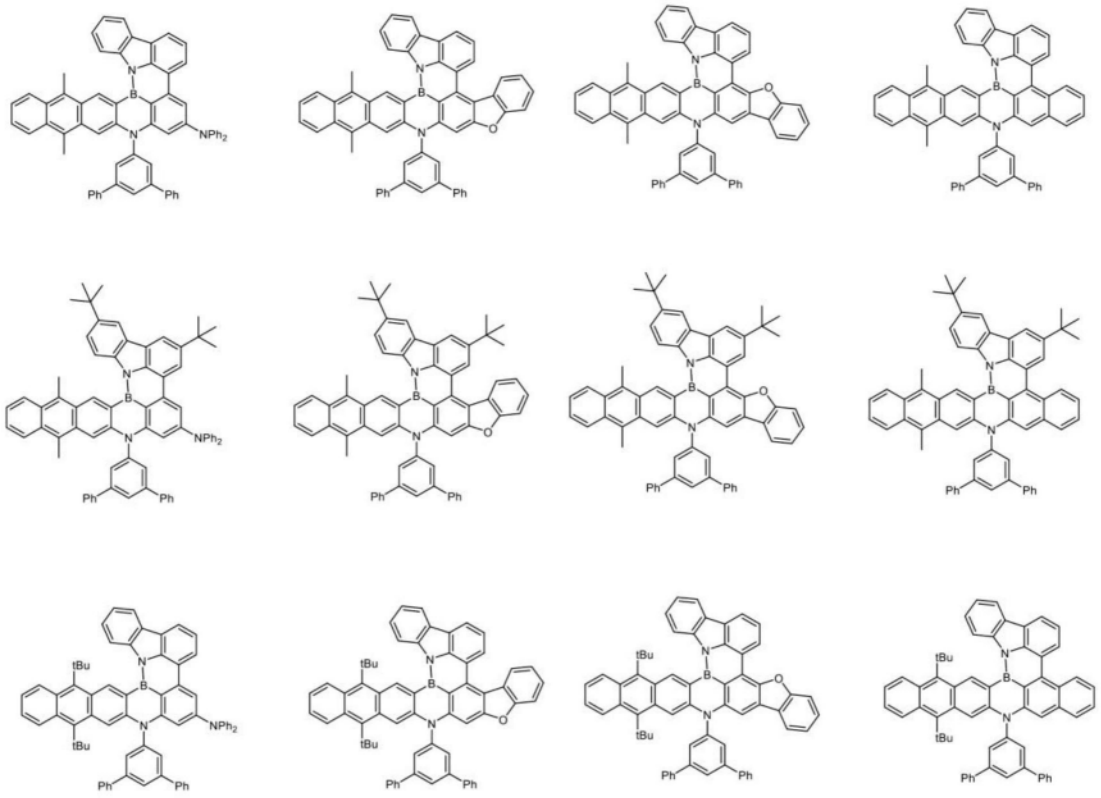


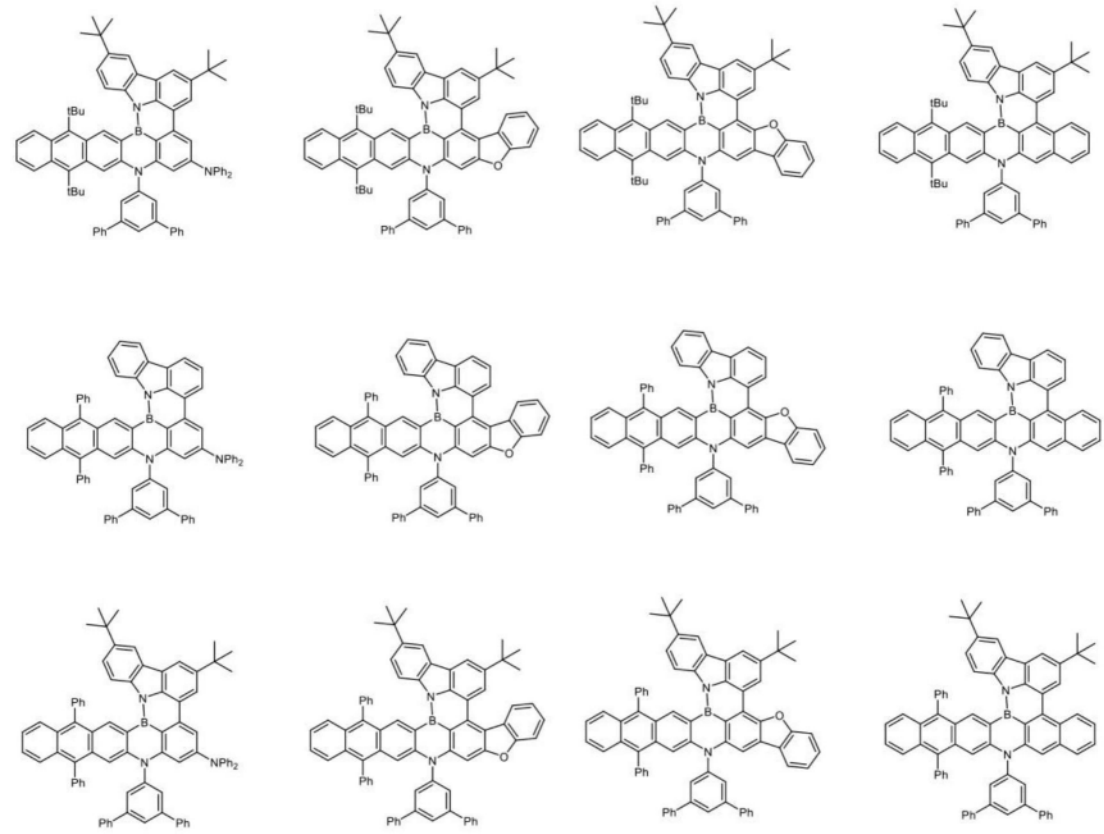
[1026]

Ph = 苯基

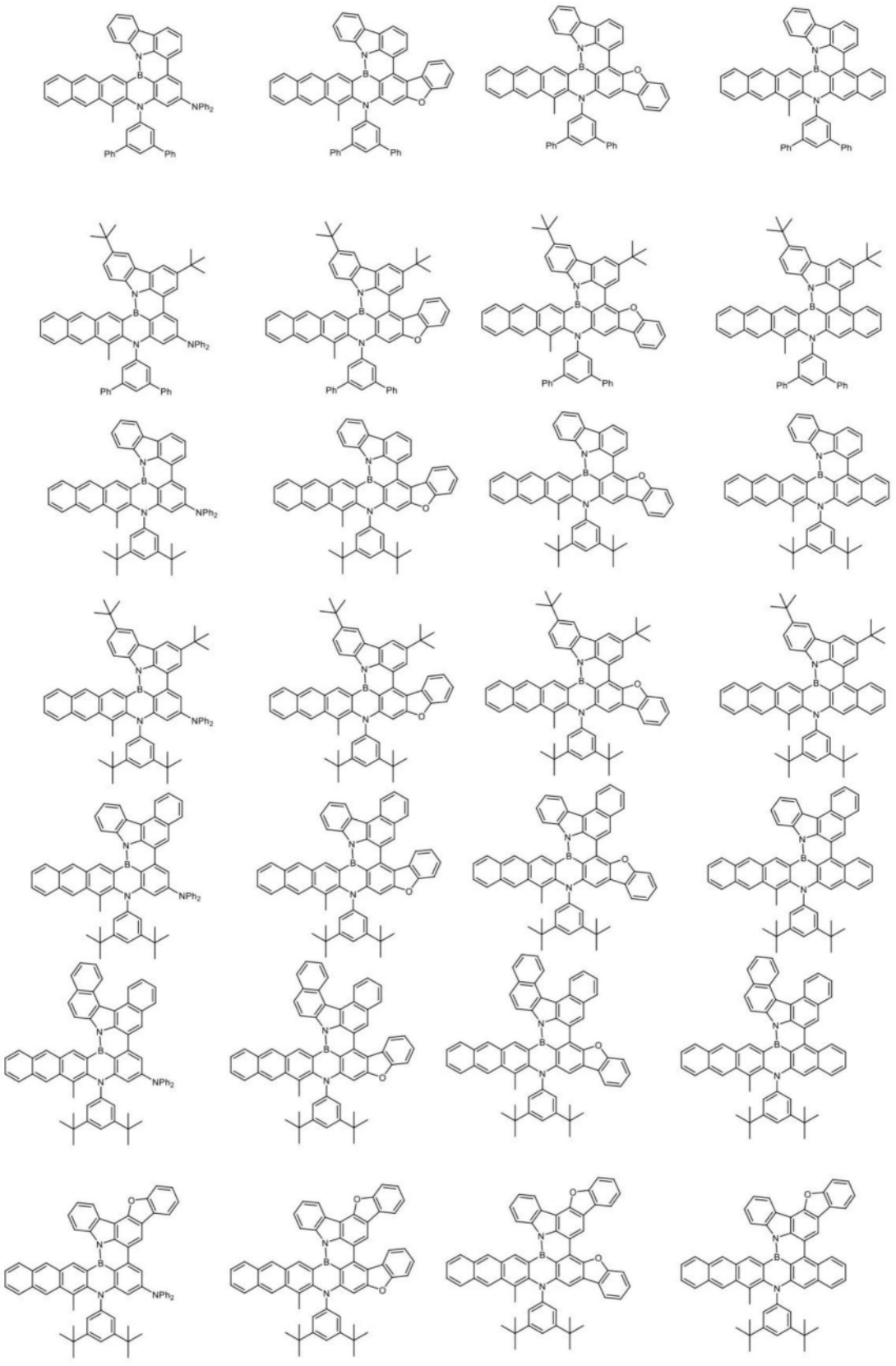


[1027]

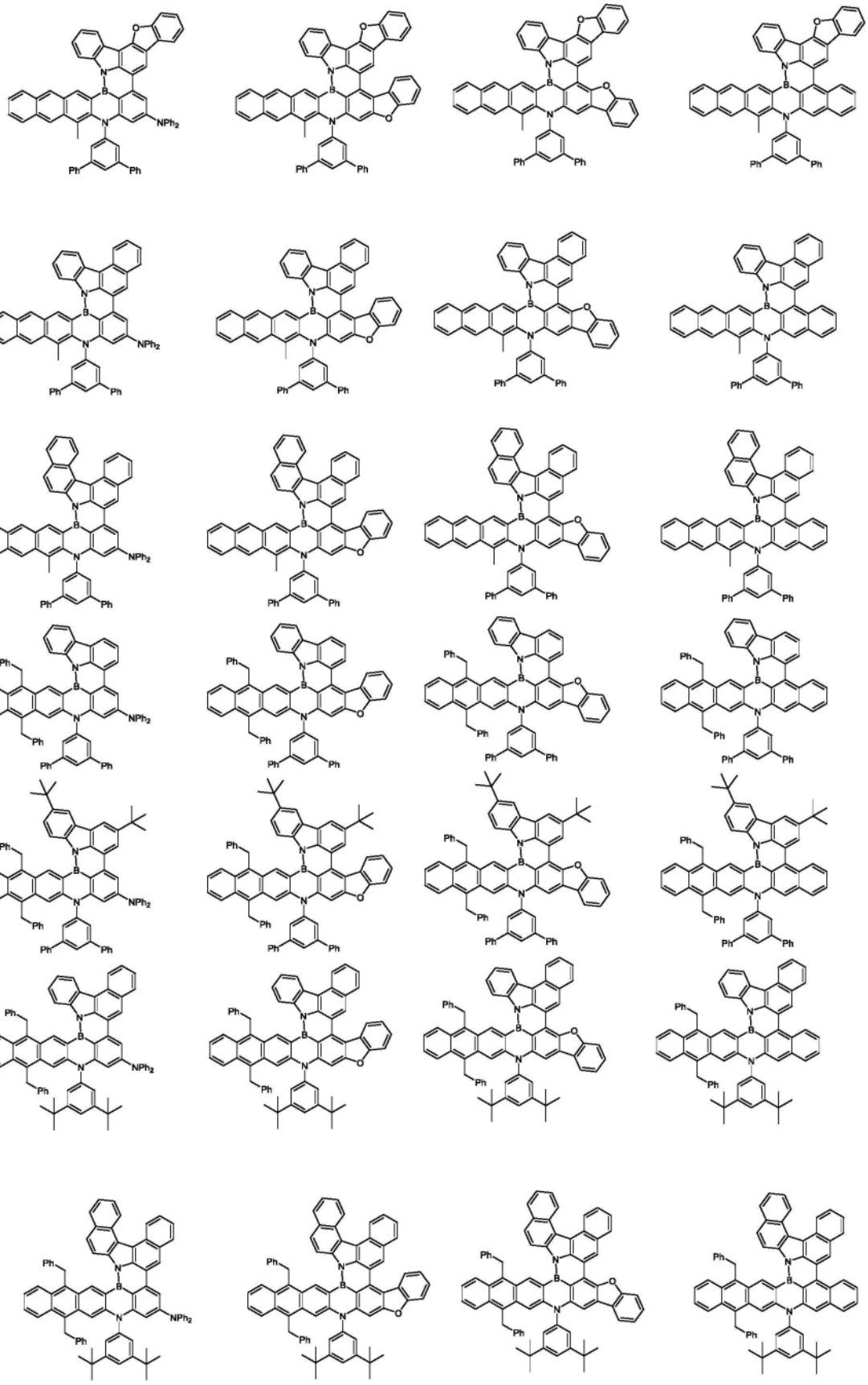


Ph = 苯基

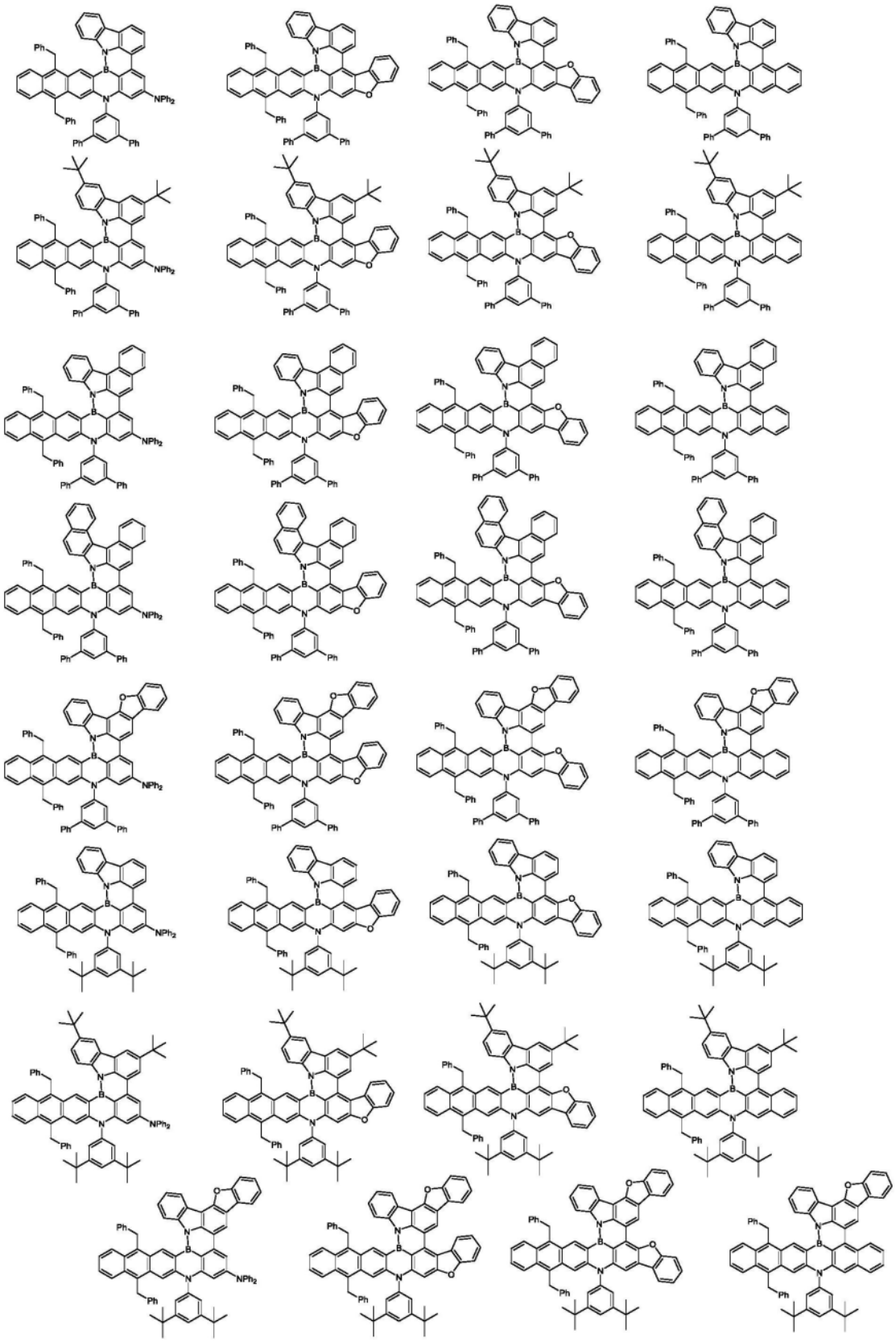
[1028]



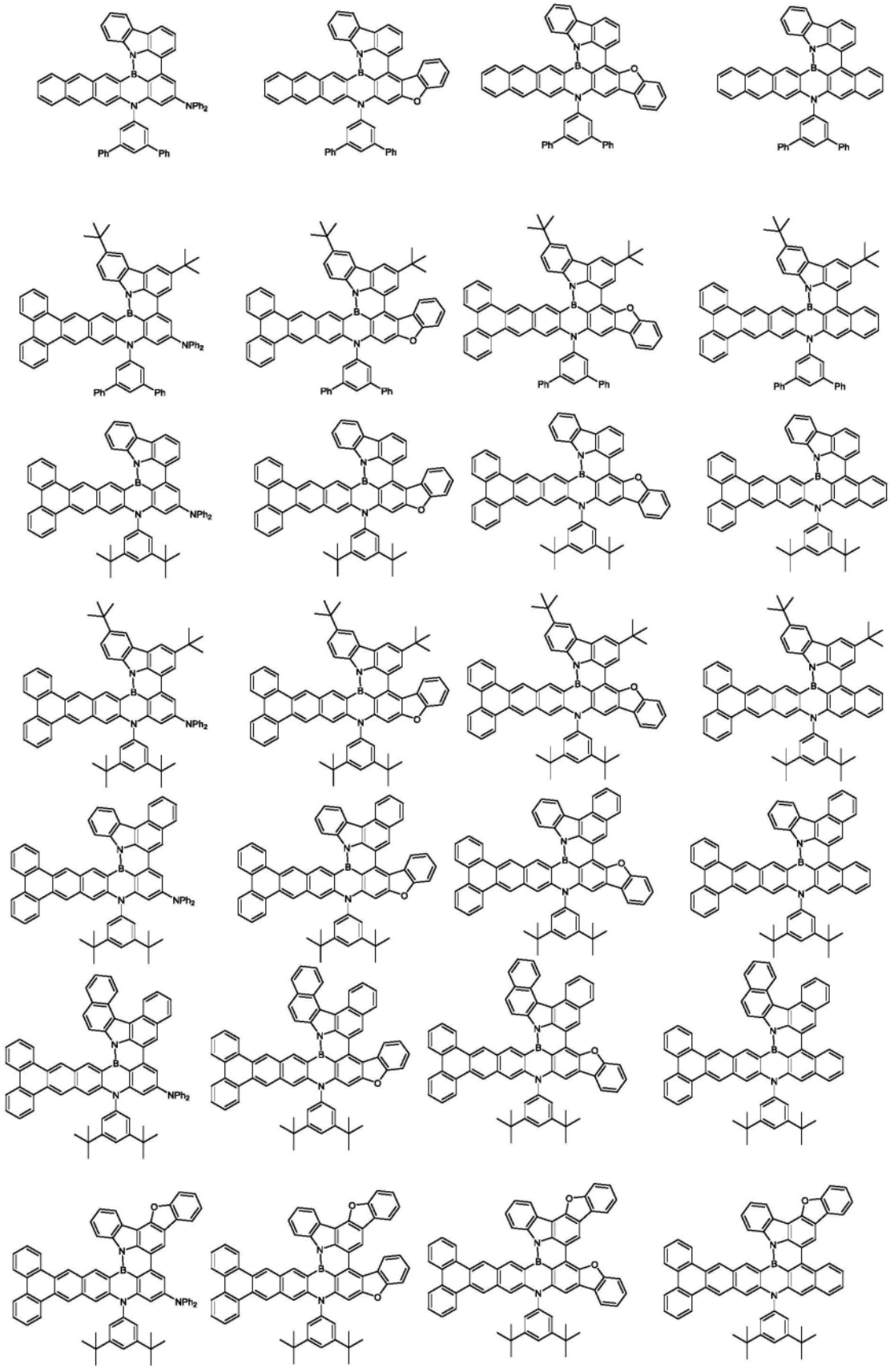
[1029]



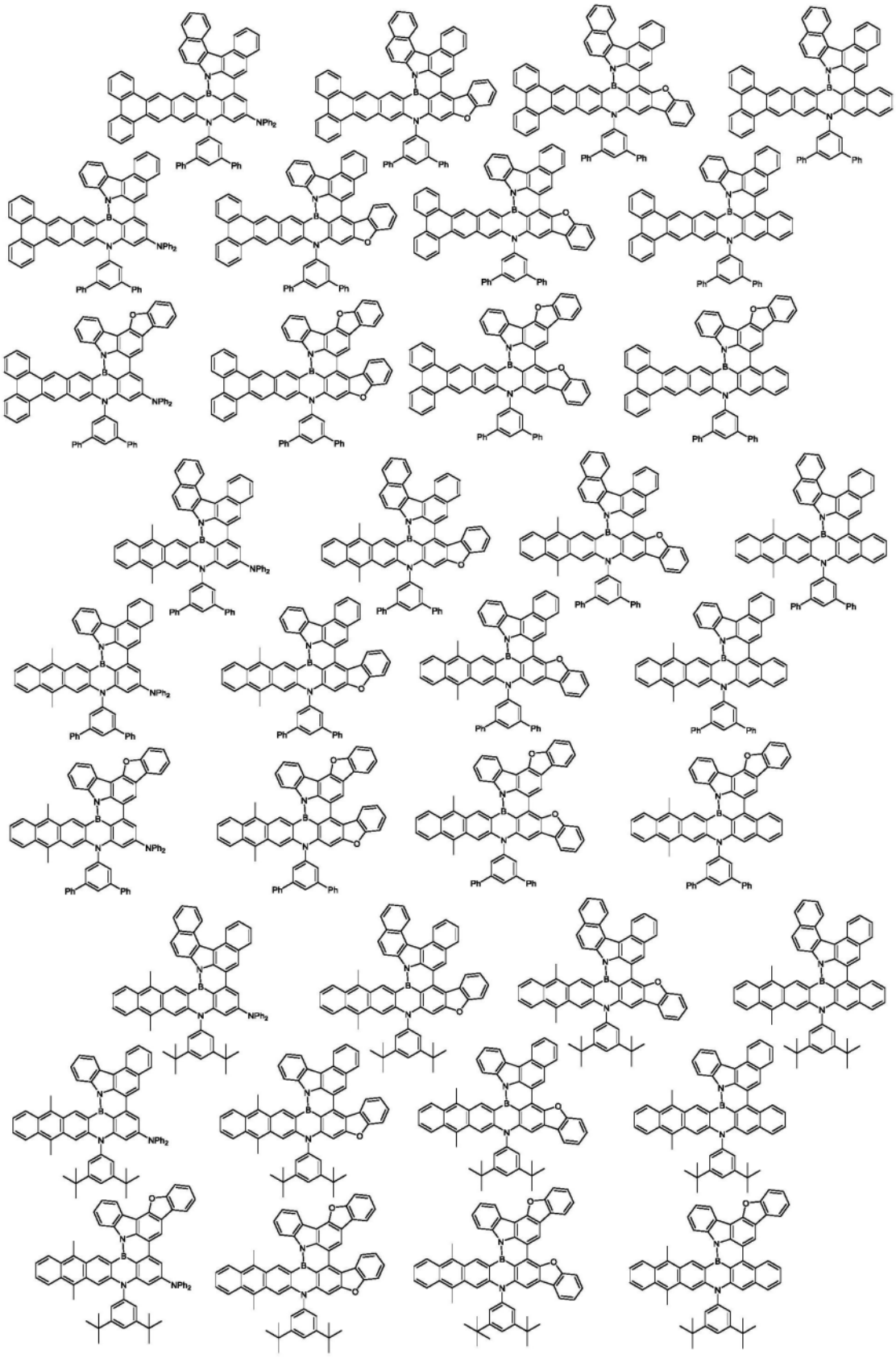
[1030]



[1031]



[1032]



[1033]

