(19)国家知识产权局

(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 118401530 A
(43)申请公布日 2024.07.26

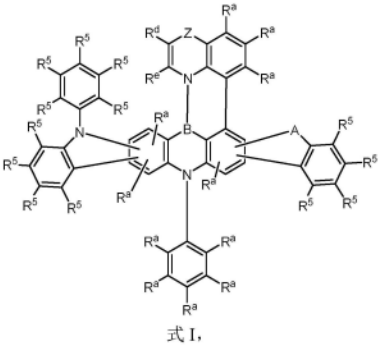
(21)申请号 202280083187.9
(22)申请日 2022.12.16
(30)优先权数据
21215159.1 2021.12.16 EP
(85)PCT国际申请进入国家阶段日
2024.06.14
(86)PCT国际申请的申请数据
PCT/KR2022/020552 2022.12.16
(87)PCT国际申请的公布数据
WO2023/113524 EN 2023.06.22
(71)申请人 三星显示有限公司
地址 韩国京畿道龙仁市
(72)发明人 D·津克 D·蒂里翁
(74)专利代理机构 北京铭硕知识产权代理有限公司 11286
专利代理师 于冰 陈宇
(51)Int.Cl.
C07F 5/02(2006.01)
H10K 99/00(2006.01)
H10K 50/00(2006.01)

权利要求书9页 说明书63页

(54)发明名称

用于光电器件的有机分子

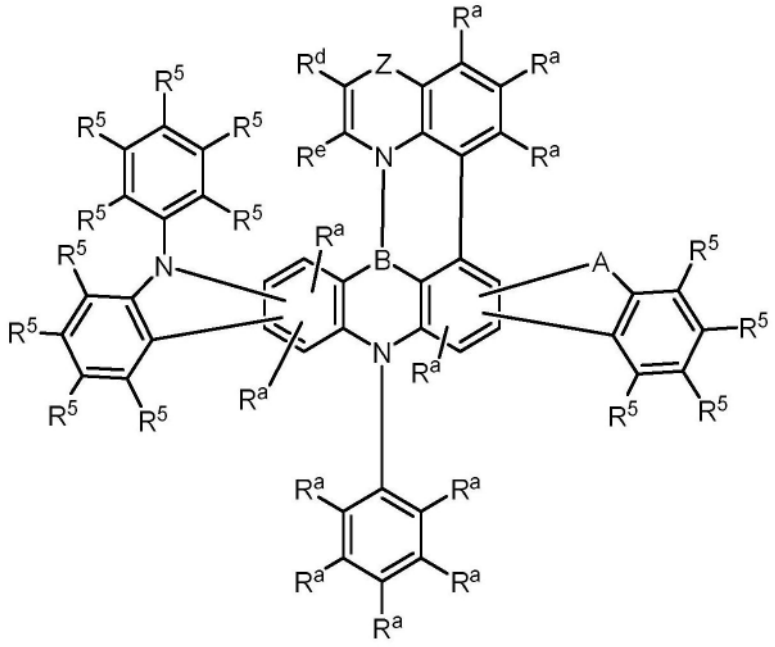
(57)摘要

发明涉及一种(具体地,应用于光电器件中的)有机分子。根据发明,有机分子具有式I的结构:其中,R^a、R^d和R^e独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;$N(R^a)_2$;OR^a;$Si(R^a)_3$;$B(OR^a)_2$;$B(R^a)_2$;OSO_2R^a;CF_3;CN;F;Cl;Br;I;C_1-C_{40}烷基;C_1-C_{40}烷氧基;C_1-C_{40}硫代烷氧基;C_2-C_{40}烯基;C_2-C_{40}炔基;C_6-C_{60}芳基;以及C_2-C_{57}杂芳基。

式I.

CN 118401530 A

1.一种有机分子,所述有机分子包括由式I表示的结构:



式I,

其中,

Z在每次出现时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;

A选自于由O、S和NR^5组成的组;

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;$N(R^a)_2$;OR^a;$Si(R^a)_3$;$B(OR^a)_2$;$B(R^a)_2$;OSO_2R^a;CF_3;CN;F;Cl;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$R^aC=CR^a$、C≡C、$Si(R^a)_2$、$Ge(R^a)_2$、$Sn(R^a)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^a、P(=O)(R^a)、SO、SO_2、NR^a、O、S或$CONR^a$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^a,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^aC=CR^a$、C≡C、$Si(R^a)_2$、$Ge(R^a)_2$、$Sn(R^a)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^a、P(=O)(R^a)、SO、SO_2、NR^a、O、S或$CONR^a$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^a,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^aC=CR^a$、C≡C、$Si(R^a)_2$、$Ge(R^a)_2$、$Sn(R^a)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^a、P(=O)(R^a)、SO、SO_2、NR^a、O、S或$CONR^a$取代;C_2-C_{40}烯基,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$R^aC=CR^a$、C≡C、$Si(R^a)_2$、$Ge(R^a)_2$、$Sn(R^a)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^a、P(=O)(R^a)、SO、SO_2、NR^a、O、S或$CONR^a$取代;C_2-C_{40}炔基,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$R^aC=CR^a$、C≡C、$Si(R^a)_2$、$Ge(R^a)_2$、$Sn(R^a)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^a、P(=O)(R^a)、SO、SO_2、NR^a、O、S或$CONR^a$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;

R^a、R^3和R^4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;Cl;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,

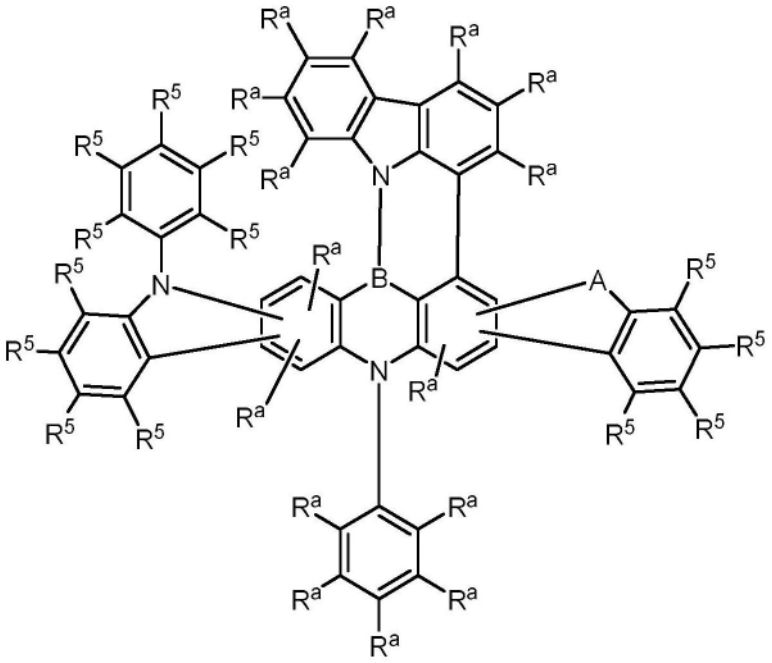
可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S或$CONR^5$取代;C_1-C_{40}硫代烷氧基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、S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

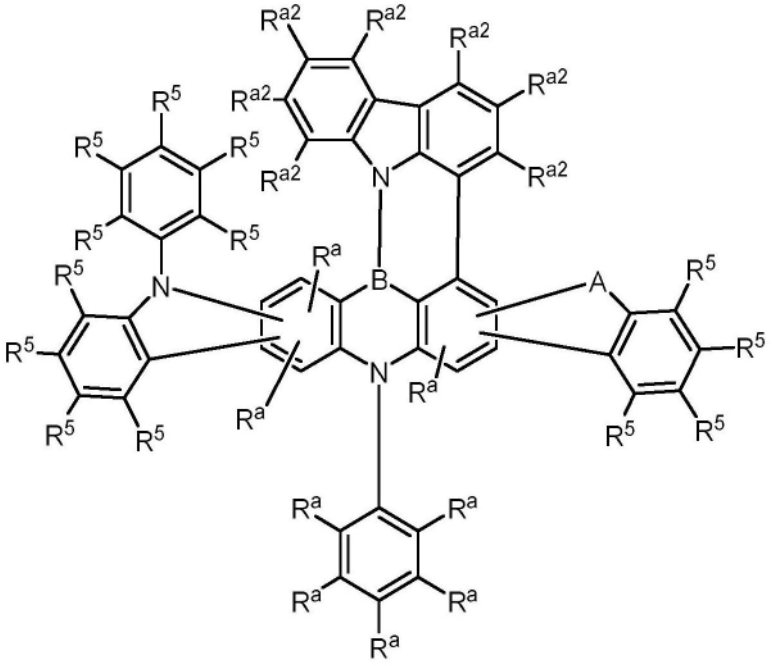
其中,可选地,取代基R^a、R^3、R^4、R^d、R^e、R^5和R^6中的任一个独立地与一个或更多个取代基R^a、R^3、R^4、R^d、R^e、R^5和/或R^6形成单环或多环的脂肪族、芳香族、杂芳香族和/或苯并稠合环体系。

2.根据权利要求1所述的有机分子,所述有机分子包括式Ia的结构:



式 Ia。

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Ia-2的结构:

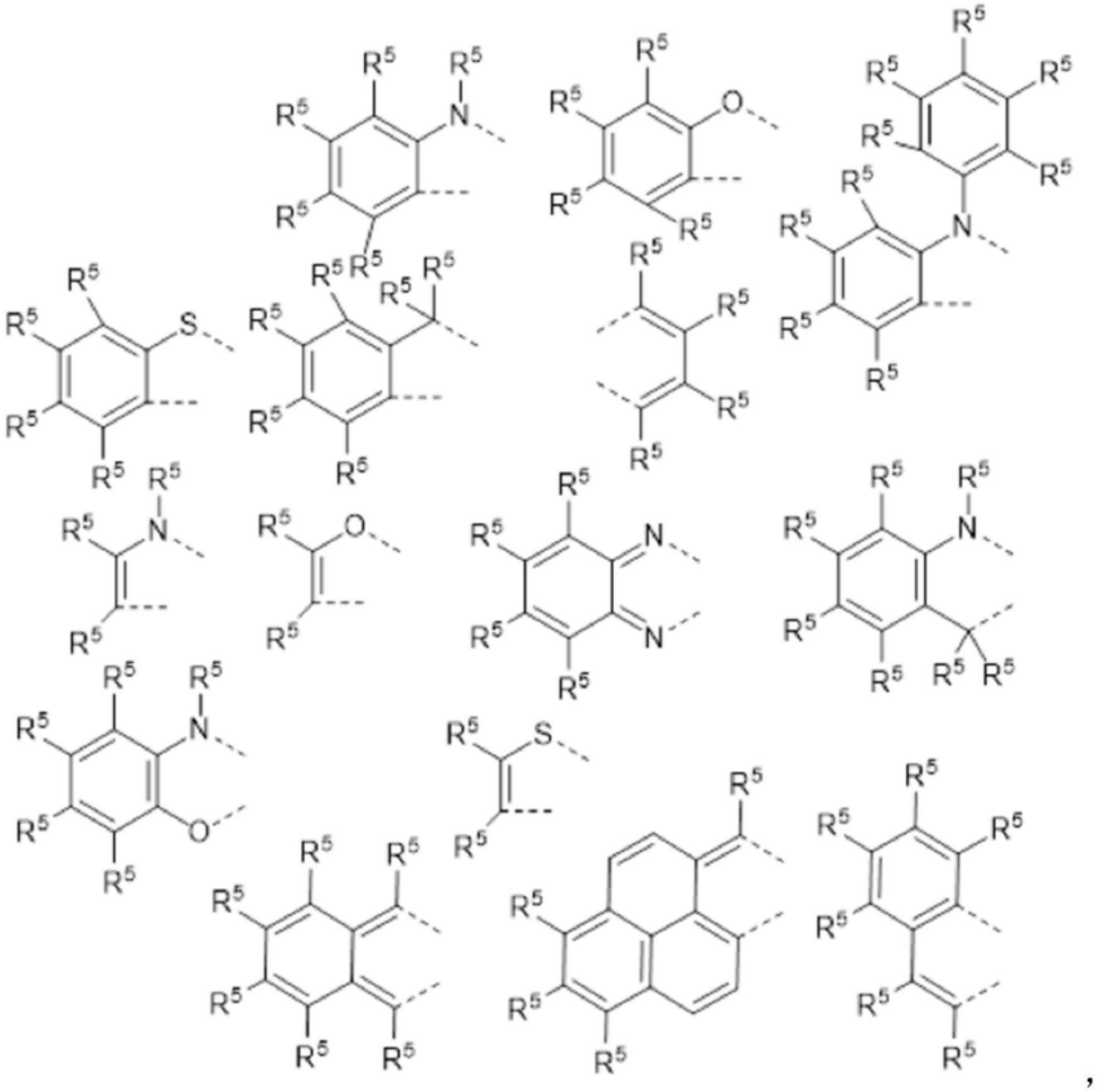


式 Ia-2,

其中,R^{a2}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,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;吡啶基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;嘧啶基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;咔唑基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;三嗪基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;以及N(Ph)$_2$,可选地取代

有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基；

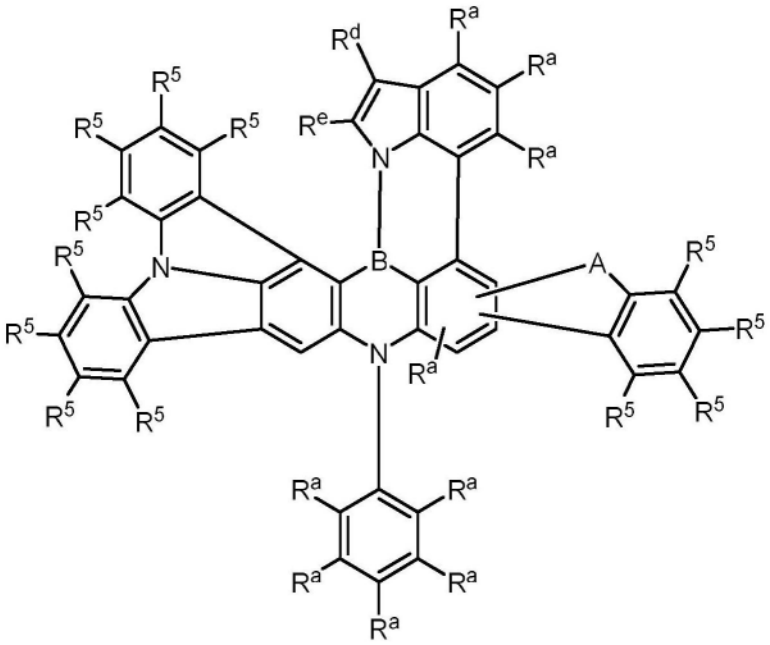
其中，两个或更多个相邻的取代基R^a能够形成用于环体系的连接点，所述环体系选自于由以下组成的组：



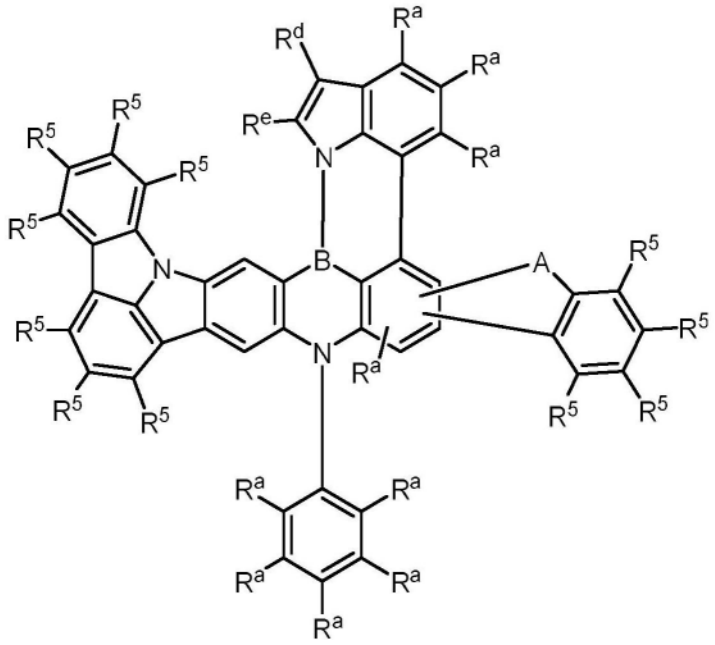
，

其中，每条虚线表示将上面示出的环体系中的一个连接到两个相邻的取代基R^{a2}的位置的直连键，使得上面示出的基团的环体系稠合到如式Ia-2中所示的结构。

4.根据权利要求1至3中任一项所述的有机分子，所述有机分子包括式IIa或式IIb的结构：

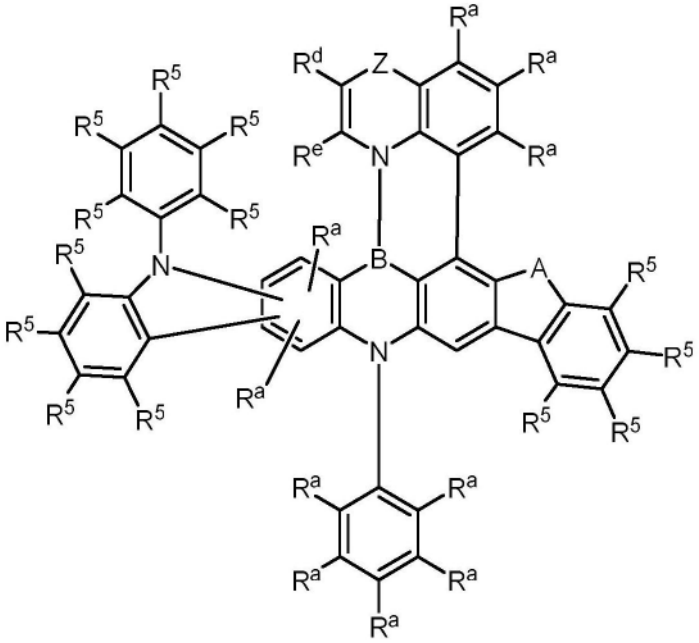


式 IIa，

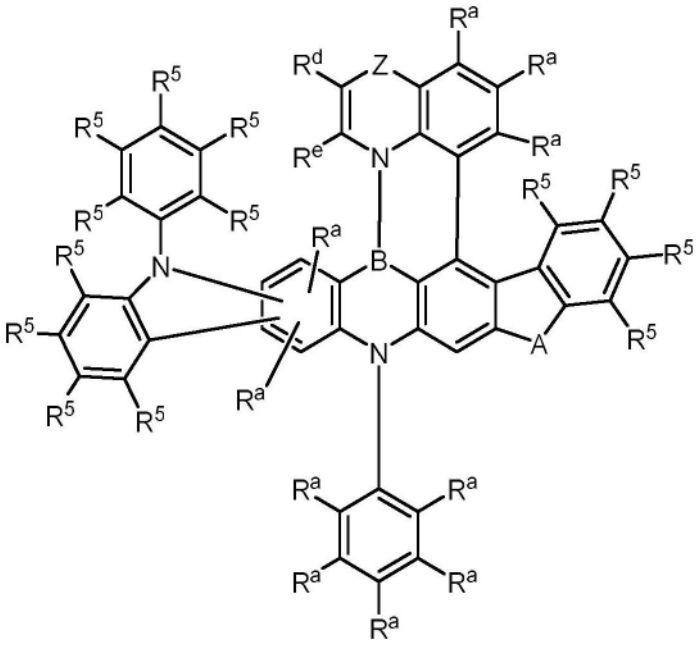


式 IIb。

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IIIa或式IIIb的结构:

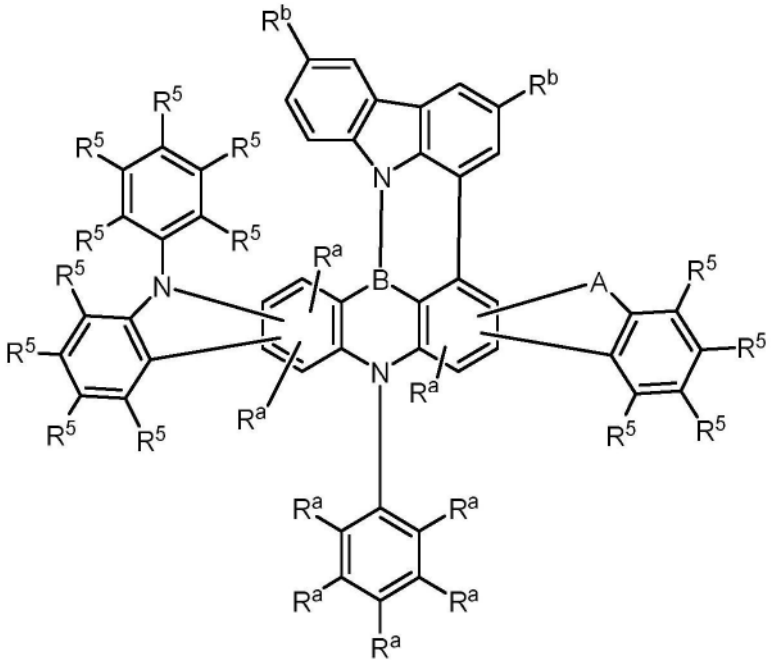


式 IIIa，



式 IIIb。

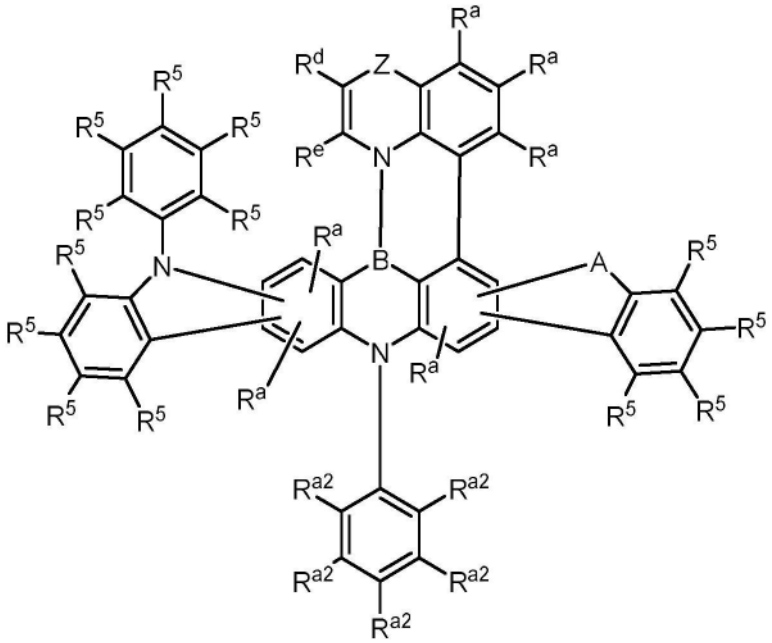
6.根据权利要求1至5中任一项所述的有机分子,所述有机分子包括式Ib的结构：



式 Ib，

其中，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；$N(R^5)_2$；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。

7.根据权利要求1至6中任一项所述的有机分子，所述有机分子包括式IV的结构：



式 IV，

其中，R^{a2}在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；F；Me；^{i}Pr；^{t}Bu；Ph，可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基。

8.一种组合物，所述组合物包括：

(a)根据权利要求1至7中任一项所述的有机分子，具体地，呈发射体的形式；以及

(b)不同于所述有机分子的主体材料；以及

(c)可选地，染料和/或溶剂。

9.根据权利要求8所述的组合物，所述组合物包含0.1重量％至30重量％(优选地，0.5重量％至15重量％，具体地，0.7重量％至5重量％)的所述有机分子。

10.根据权利要求8或9所述的组合物，所述组合物包括TADF材料和/或磷光材料。

11.一种光电器件，所述光电器件包括根据权利要求1至7中任一项所述的有机分子(具体地，作为发光发射体)或者根据权利要求8至10中任一项所述的组合物。

12.根据权利要求11所述的光电器件，所述光电器件选自于由以下组成的组：

有机二极管；

有机发光二极管(OLED)；

发光电化学电池；

OLED传感器；

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。

13.根据权利要求11或12所述的光电器件，所述光电器件包括包含铱的磷光材料。

14.根据权利要求11至13中任一项所述的光电器件，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并且包括所述有机分子或所述组合物。

15.一种用于产生在510nm至550nm的波长处的光的方法,所述方法包括以下步骤:

(i)提供根据权利要求11至14中任一项所述的光电器件;以及

(ii)向所述光电器件施加电流。

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。

发明内容

[0002] 技术问题

[0003] 本发明的目的在于提供适用于光电器件中的有机分子。

[0004] 技术方案

[0005] 该目的通过提供了一种新型的有机分子的发明来实现。

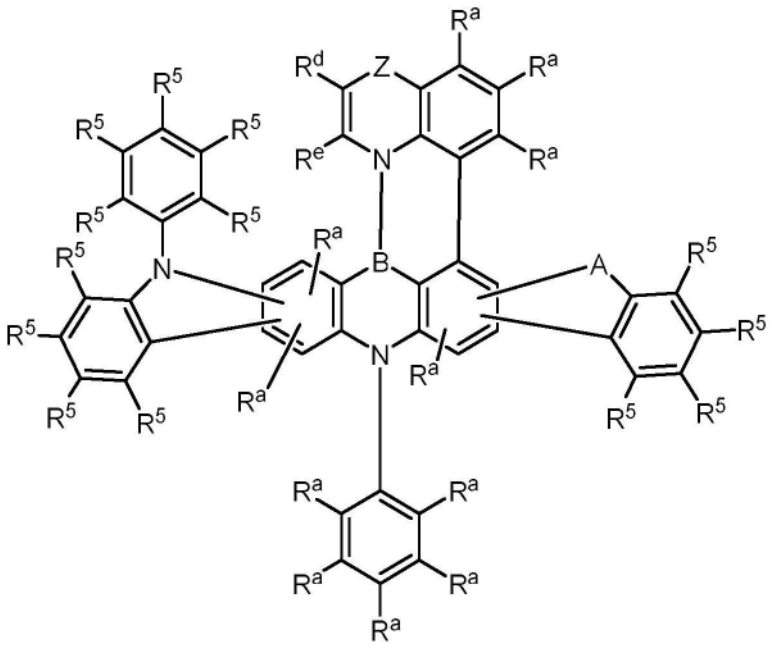
[0006] 根据发明,有机分子是纯有机分子,即,与已知用于光电器件中的金属配合物相比,它们不包含任何金属离子。

[0007] 根据本发明,有机分子在蓝色或天蓝色光谱范围内表现出发射最大值。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。其通常将高于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。在例如有机发光二极管(OLED)的光电器件中使用根据发明的有机分子导致光电器件的较高效率或由发射的半峰全宽(FWHM)表示的较高色纯度。对应的OLED具有比具有已知的发射体材料的OLED高的稳定性和相当的颜色。具体地,有机分子可以与热激活延迟荧光(TADF)材料和/或磷光材料组合使用,以分别实现所谓的超荧光和/或超磷光。

[0008] 根据发明的有机分子

[0009] 发明的有机分子包括式I的结构或由式I的结构组成:

[0010]



式I,

[0011] 其中,

[0012] Z在每次出现时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;

[0013] A选自于由O、S和NR^5组成的组;

[0014] 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;$N(R^a)_2$;OR^a;$Si(R^a)_3$;$B(OR^a)_2$;$B(R^a)_2$;OSO_2R^a;CF_3;CN;F;Cl;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$R^aC=CR^a$、C≡C、$Si(R^a)_2$、$Ge(R^a)_2$、$Sn(R^a)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^a、P(=O)(R^a)、SO、SO_2、NR^a、O、S或$CONR^a$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^a,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^aC=CR^a$、C≡C、$Si(R^a)_2$、$Ge(R^a)_2$、$Sn(R^a)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^a、P(=O)(R^a)、SO、SO_2、NR^a、O、S或$CONR^a$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^a,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^aC=CR^a$、C≡C、$Si(R^a)_2$、$Ge(R^a)_2$、$Sn(R^a)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^a、P(=O)(R^a)、SO、SO_2、NR^a、O、S或$CONR^a$取代;C_2-C_{40}烯基,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$R^aC=CR^a$、C≡C、$Si(R^a)_2$、$Ge(R^a)_2$、$Sn(R^a)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^a、P(=O)(R^a)、SO、SO_2、NR^a、O、S或$CONR^a$取代;C_2-C_{40}炔基,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$R^aC=CR^a$、C≡C、$Si(R^a)_2$、$Ge(R^a)_2$、$Sn(R^a)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^a、P(=O)(R^a)、SO、SO_2、NR^a、O、S或$CONR^a$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;

[0015] R^a、R^3和R^4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;Cl;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;

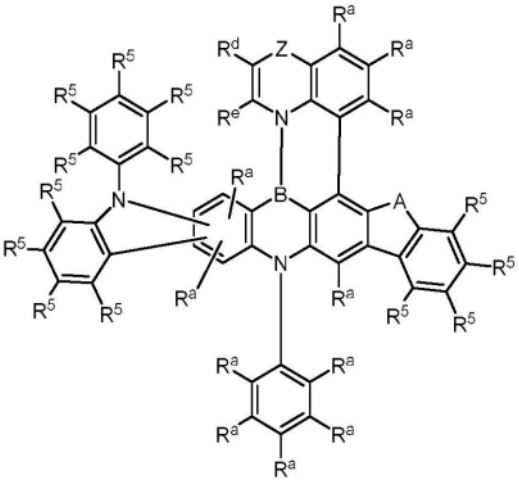
[0016] R^5在每次出现时独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;$N(R^6)_2$;OR^6;$Si(R^6)_3$;$B(OR^6)_2$;$B(R^6)_2$;OSO_2R^6;CF_3;CN;F;Br;I;C_1-C_{40}烷基,可选地取代有一个或更多个取代基R^6,并且其中,一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、C=NR^6、P(=O)(R^6)、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代;C_1-C_{40}烷氧基,可选地取代有一个或更多个取代基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;

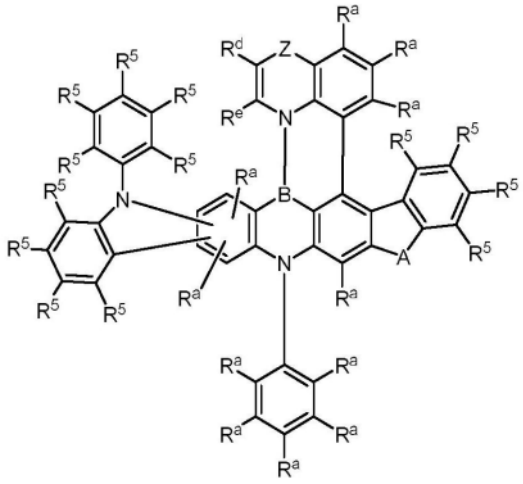
[0017] R^6在每次出现时独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;OPh;CF_3;CN;F;C_1-C_5烷基,其中,一个或更多个氢原子可选地独立地被氘、CN、CF_3或F取代;C_1-C_5烷氧基,其中,一个或更多个氢原子可选地独立地被氘、CN、CF_3或F取代;C_1-C_5硫代烷氧基,其中,一个或更多个氢原子可选地独立地被氘、CN、CF_3或F取代;C_2-C_5烯基,其中,一个或更多个氢原子可选地独立地被氘、CN、CF_3或F取代;C_2-C_5炔基,其中,一个或更多个氢原子可选地独立地被氘、CN、CF_3或F取代;C_6-C_{18}芳基,可选地取代有一个或更多个C_1-C_5烷基取代基;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);

[0018] 其中,取代基R^a、R^3、R^4、R^d、R^e、R^5和R^6中的任一个可选地独立地与一个或更多个取代基R^a、R^3、R^4、R^d、R^e、R^5和/或R^6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。

[0019] 在下面提供了根据式I的有机分子的示例性实施例:

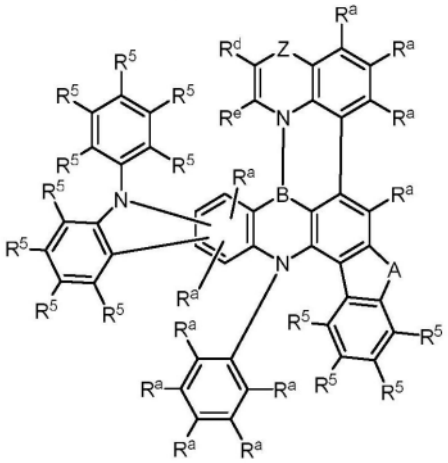


式 I-1

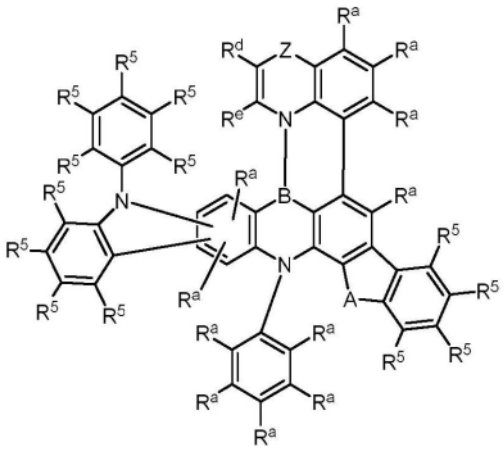


式 I-2

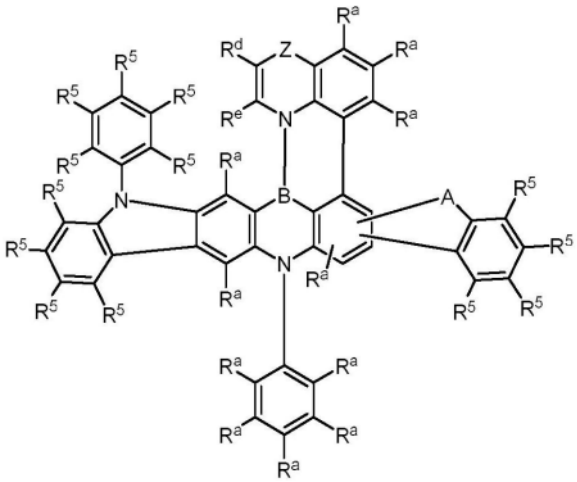
[0020]



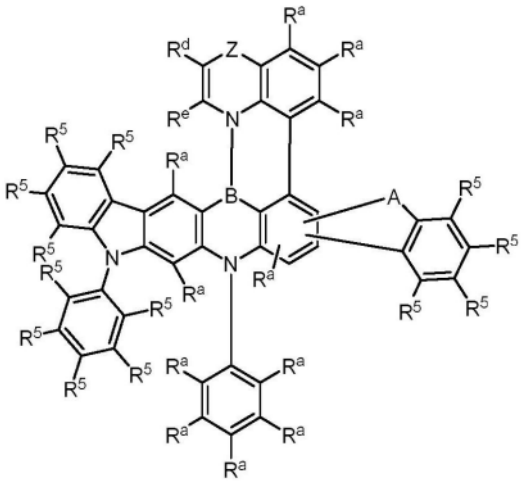
式 I-3



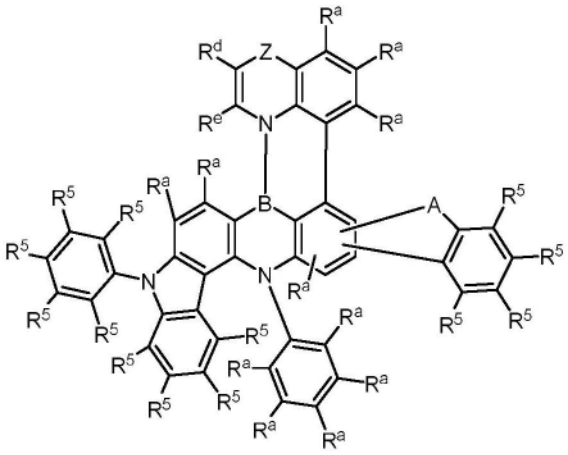
式 I-4



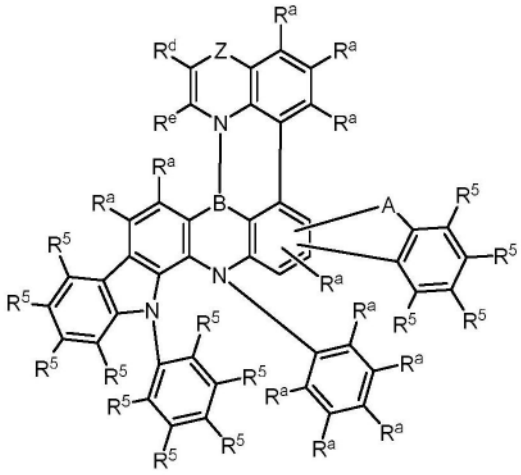
式 I-5



式 I-6

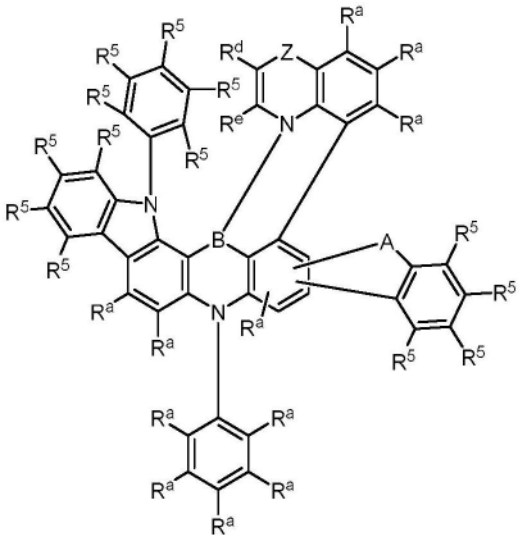


式 I-7

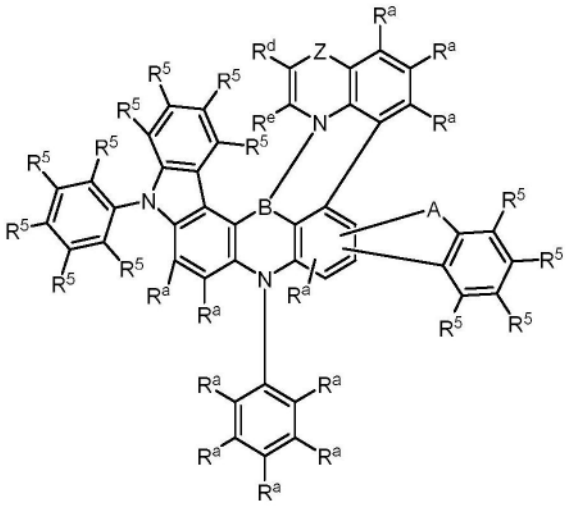


式 I-8

[0021]



式 I-9



式 I-10。

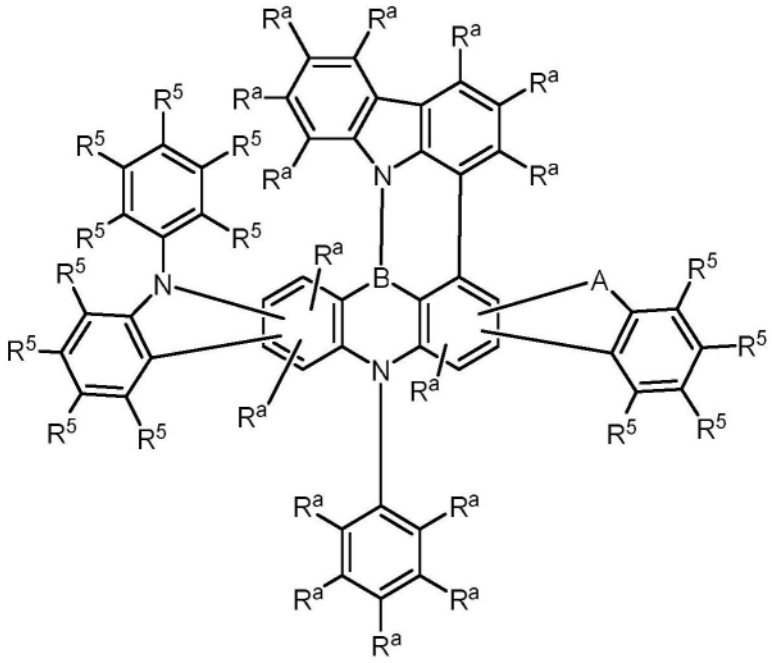
[0022] 在一个实施例中,Z选自于由直连键、C=O和NR^3组成的组。

[0023] 在优选的实施例中,Z是直连键。

[0024] 在优选的实施例中,A是O。

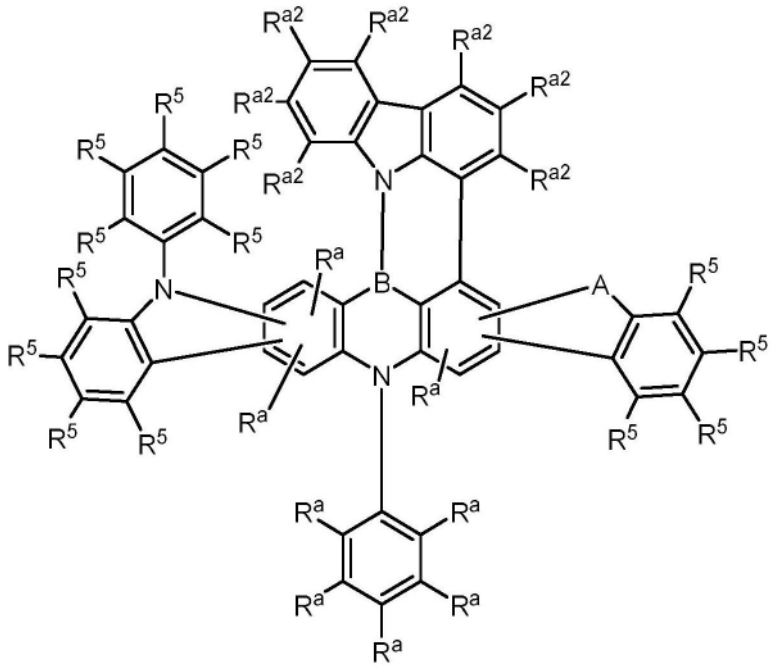
[0025] 在一个实施例中,R^d和R^e是氢。

[0026] 在一个实施例中,有机分子包括式Ia的结构或由式Ia的结构组成:

[0027] 

式 Ia。

[0028] 在一个实施例中,有机分子包括式Ia-2的结构或由式Ia-2的结构组成:

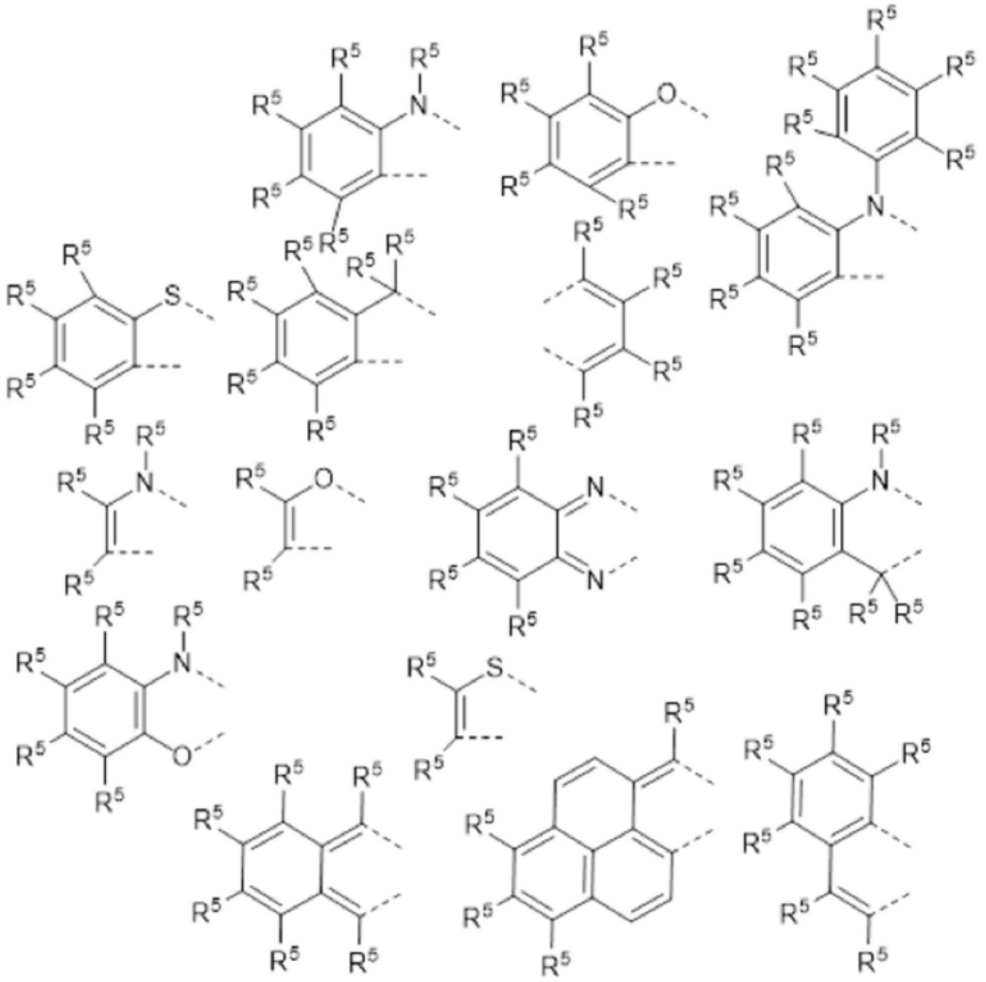
[0029] 

式 Ia-2,

[0030] 其中,R^{a2}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,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;吡啶基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;嘧啶基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;咔唑基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;三嗪基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;以及N(Ph)$_2$,可

选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;

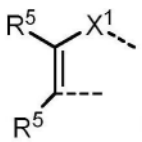
[0031] 其中,两个或更多个相邻的取代基R^a可以形成用于环体系的连接点,所述环体系选自于由以下组成的组:

[0032] ,

[0033] 其中,每条虚线表示将上面示出的环体系中的一个连接到两个相邻的取代基R^{a2}的位置的直连键,使得上面示出的基团的环体系稠合到如式Ia-2中所示的结构。

[0034] 在发明的另一实施例中,R^{a2}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R^5;吡啶基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;嘧啶基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;咔唑基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;三嗪基,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;以及$N(Ph)_2$,可选地取代有一个或更多个取代基R^5;

[0035] 其中,彼此相邻定位的基团R^a中的任两个可选地彼此结合并且形成环体系:

[0036] ,

[0037] 其中,X^1是S、O或NR^5。

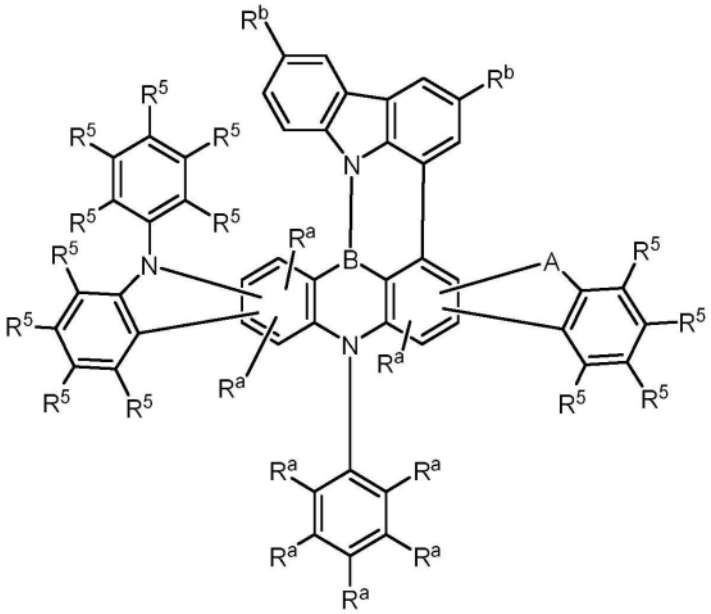
[0038] 在发明的另一实施例中,R^{a2}在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;Me;^{i}Pr;^{t}Bu;CN;CF_3;Ph,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的

组中的一个或更多个取代基;吡啶基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;嘧啶基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;以及三嗪基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基。

[0039] 在发明的另一实施例中,R^{a2}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;Ph,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基。

[0040] 在一个实施例中,有机分子包括式Ib的结构或由式Ib的结构组成:

[0041]



[0042] 式 Ib,

[0043] 其中,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;$N(R^5)_2$;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。

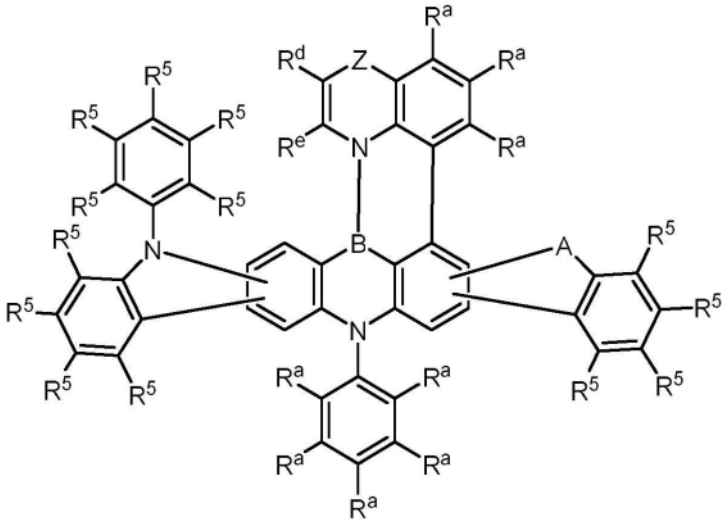
[0044] 在发明的另一实施例中,R^{b}在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;氘;Me;^{i}Pr;^{t}Bu;CN;CF_3;Ph,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成

的组中的一个或更多个取代基;吡啶基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;咔唑基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;三嗪基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;以及$N(Ph)_2$。

[0045] 在发明的另一实施例中,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,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;吡啶基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;咔唑基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;三嗪基,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基;以及$N(Ph)_2$。

[0046] 在一个实施例中,有机分子包括式II的结构或由式II的结构组成:

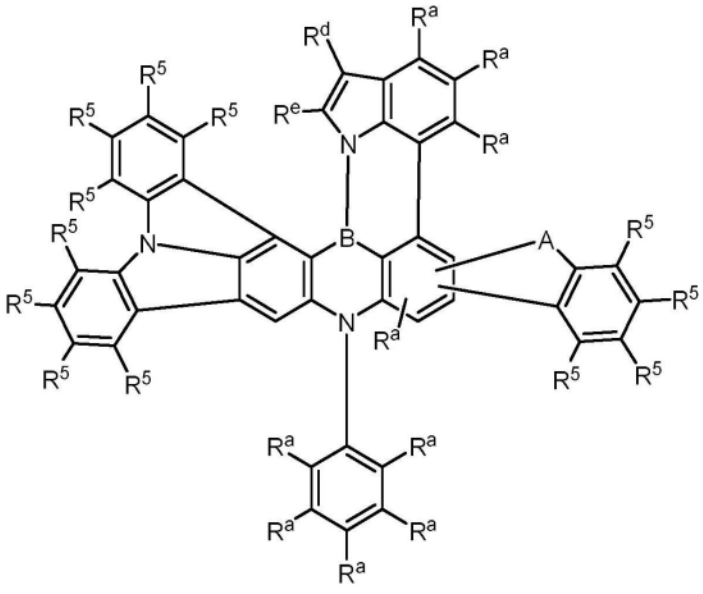
[0047]



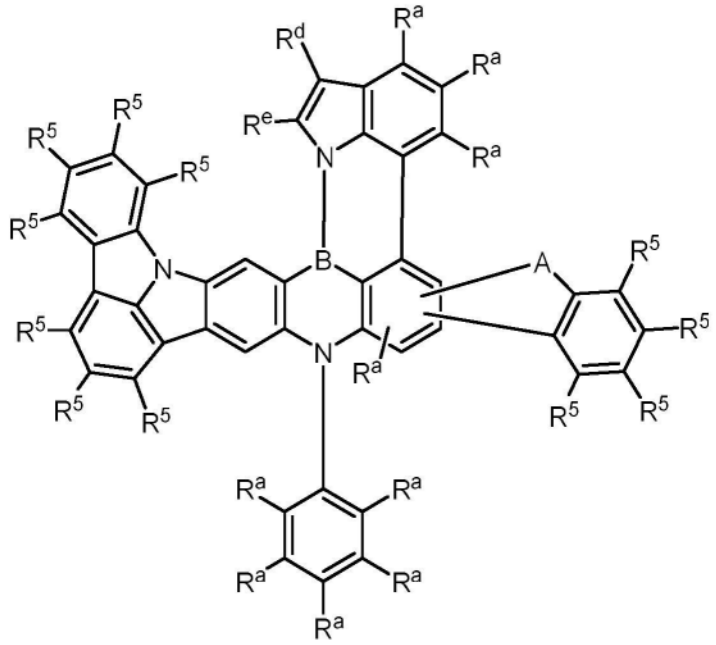
式 II。

[0048] 在一个实施例中,有机分子包括式IIa或式IIb的结构或者由式IIa或式IIb的结构组成:

[0049]



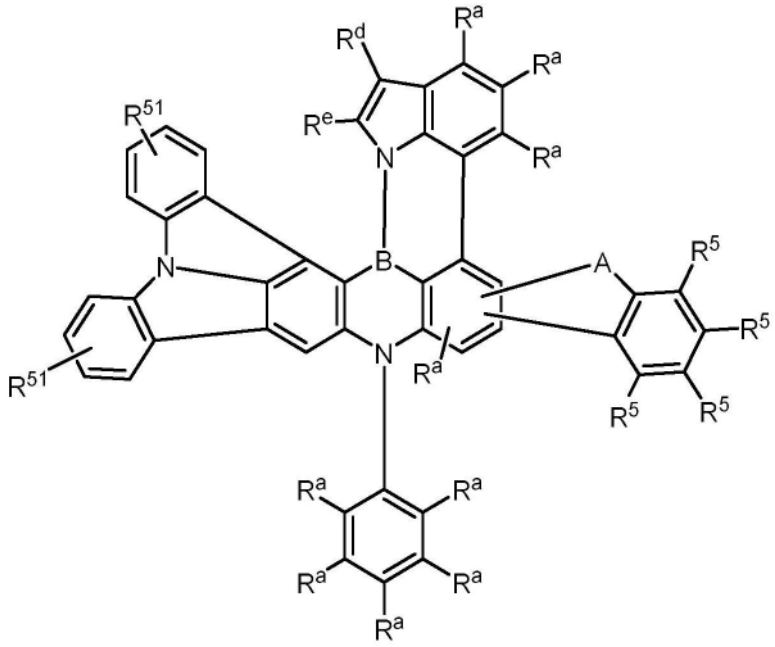
式 IIa,

[0050] 

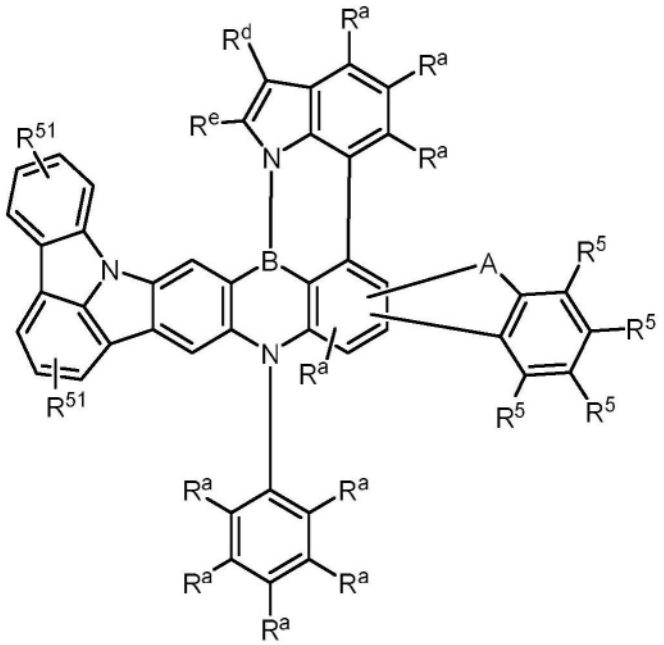
式 IIb。

[0051] 在优选的实施例中,有机分子包括式IIa的结构或由式IIa的结构组成。

[0052] 在一个实施例中,有机分子包括式IIa-2或式IIb-2的结构或者由式IIa-2或式IIb-2的结构组成:

[0053] 

式 IIa-2,

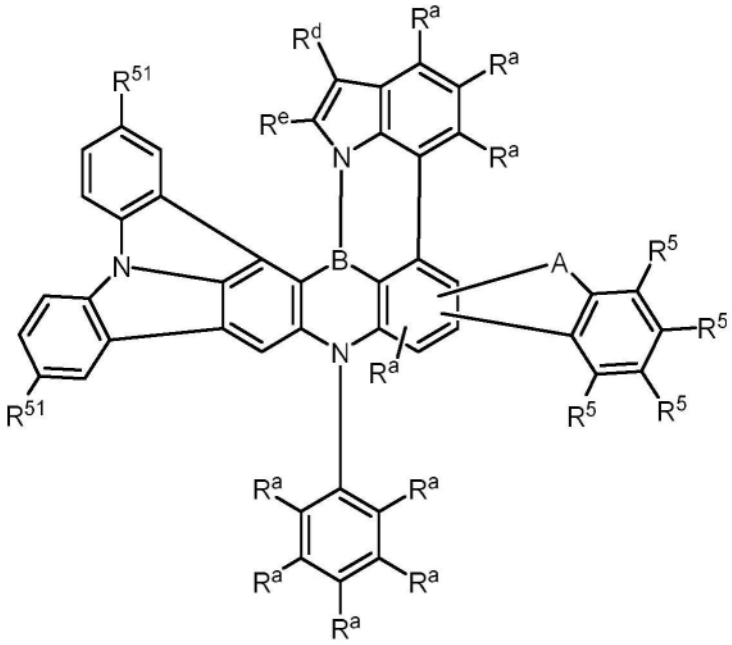
[0054] 

式 IIb-2，

[0055] 其中，R^{51}在每次出现时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。

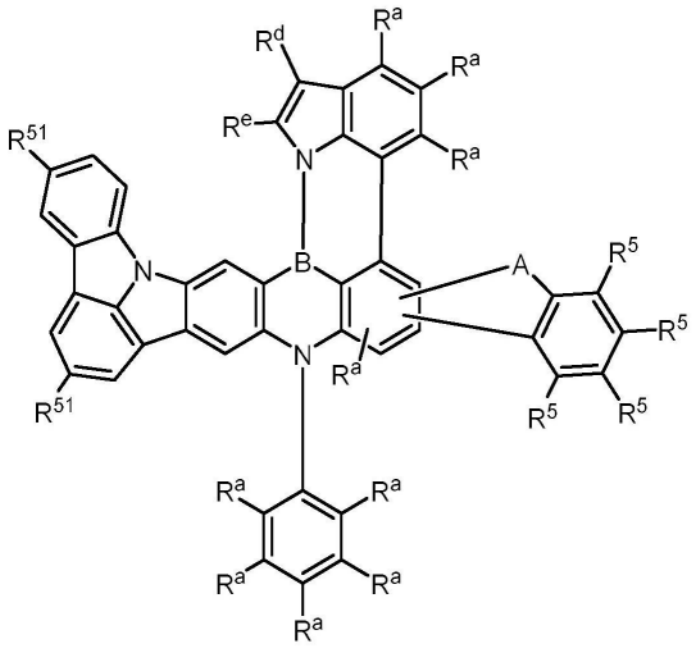
[0056] 在一个实施例中，R^{51}在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；Me；^{i}Pr；^{t}Bu；Ph，可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基。

[0057] 在一个实施例中，有机分子包括式IIa-3或式IIb-3的结构或者由式IIa-3或式IIb-3的结构组成：



式 IIa-3，

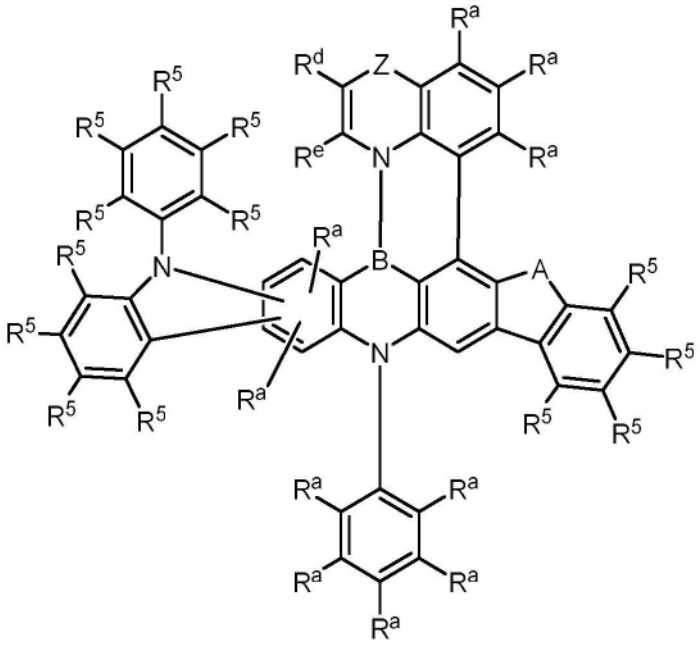
[0058]



式 IIb-3。

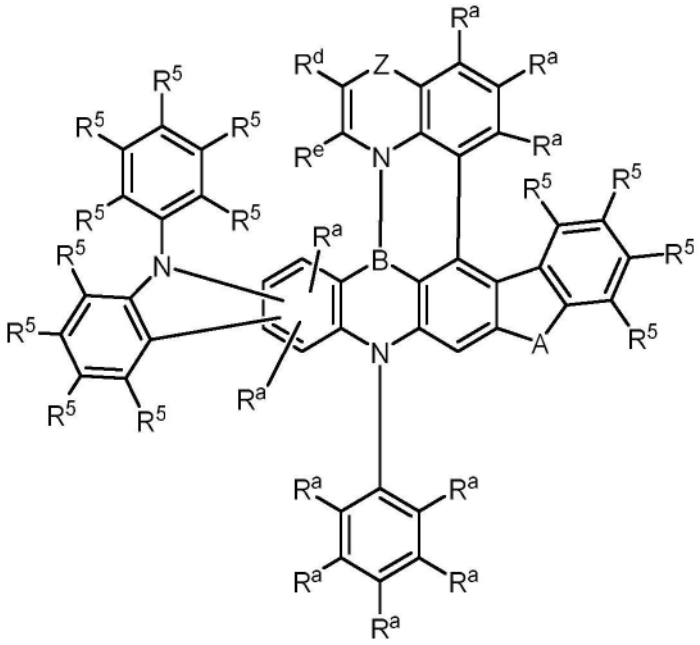
[0059] 在一个实施例中，R^{51}在每次出现时为氢。

[0060] 在一个实施例中，有机分子包括式IIIa或式IIIb的结构或者由式IIIa或式IIIb的结构组成：



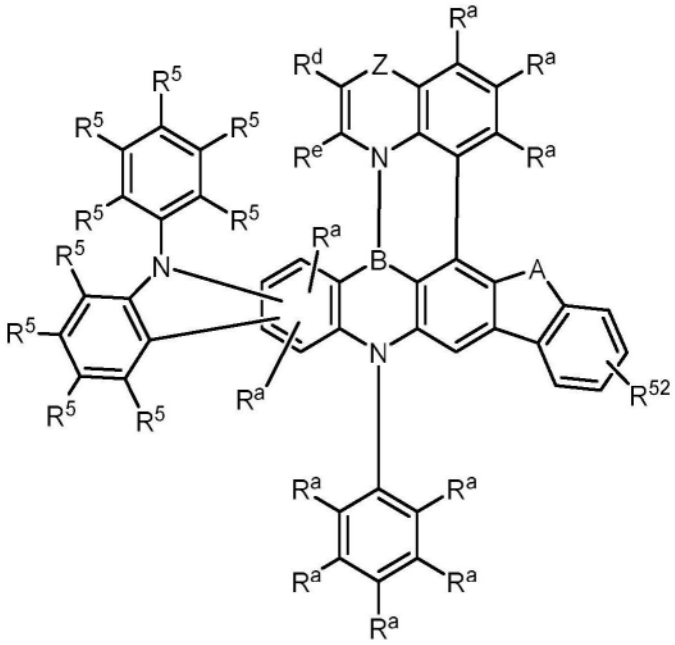
式 IIIa，

[0061]



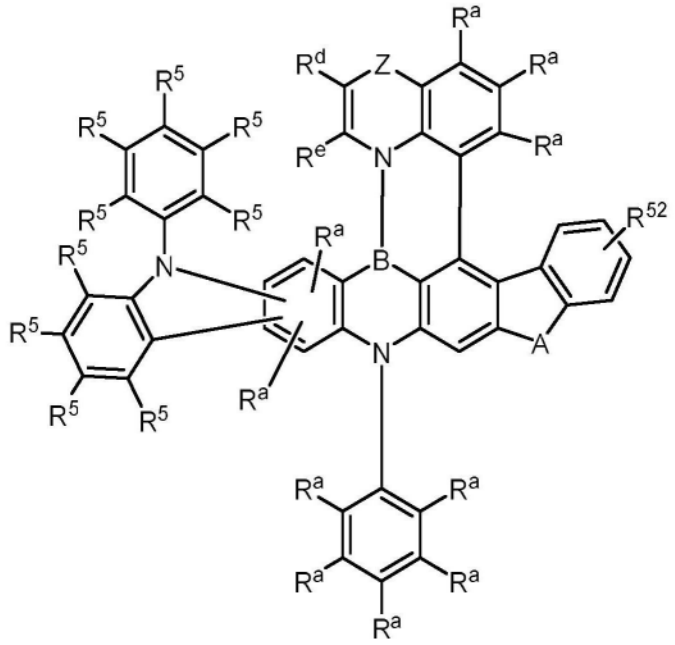
式 IIIb。

[0062] 在一个实施例中，有机分子包括式IIIa-2或式IIIb-2的结构或者由式IIIa-2或式IIIb-2的结构组成：



式 IIIa-2，

[0063]



式 IIIb-2，

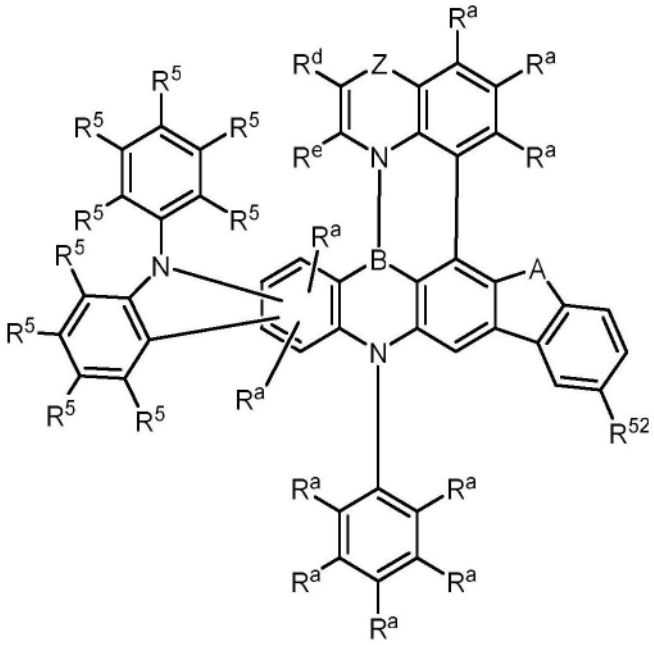
[0064] 其中，R^{52}在每次出现时独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；$N(R^6)_2$；OR^6；$Si(R^6)_3$；$B(OR^6)_2$；$B(R^6)_2$；OSO_2R^6；CF_3；CN；F；Br；I；C_1-C_{40}烷基，可选地取代有一个或更多个取代基R^6，并且其中，一个或更多个不相邻的CH_2基团可选地被$R^6C=CR^6$、C≡C、$Si(R^6)_2$、$Ge(R^6)_2$、$Sn(R^6)_2$、C=O、C=S、C=Se、$C=NR^6$、$P(=O)(R^6)$、SO、SO_2、NR^6、O、S或$CONR^6$取代；C_1-C_{40}烷氧基，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。

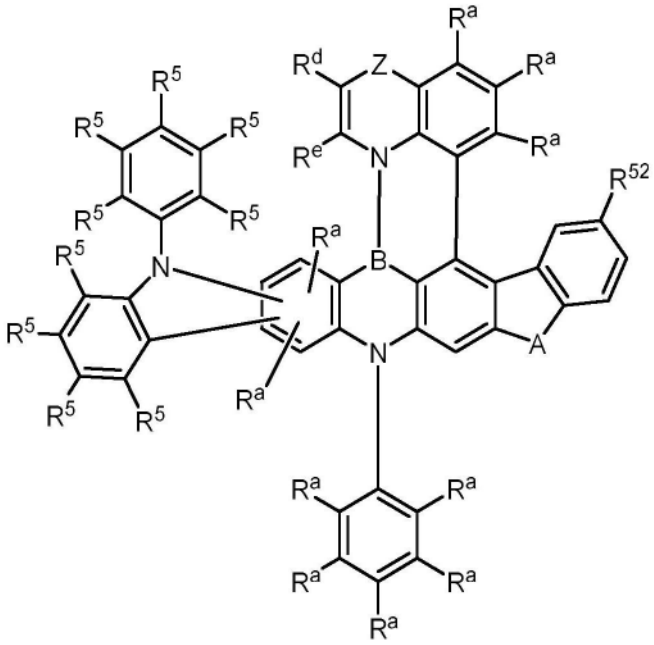
[0065] 在一个实施例中,R^{52}在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;Me;^{i}Pr;^{t}Bu;Ph,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基。

[0066] 在一个实施例中,有机分子包括式IIIa-3或式IIIb-3的结构或者由式IIIa-3或式IIIb-3的结构组成:

[0067]



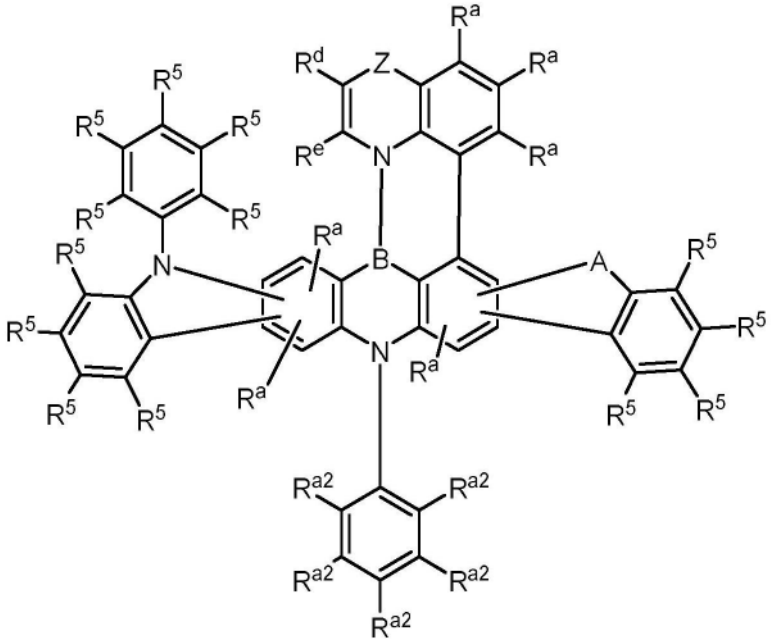
式 IIIa-3,

[0068] 

式 IIIb-3。

[0069] 在一个实施例中,R^{52}在每次出现时为氢。

[0070] 在一个实施例中,有机分子包括式IV的结构或由式IV的结构组成:

[0071] 

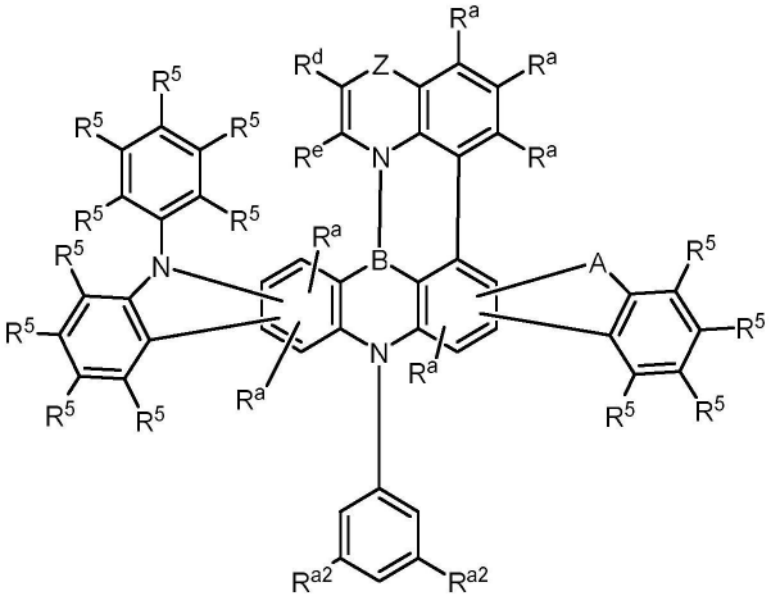
式 IV,

[0072] 其中,R^{a2}在每次出现时彼此独立地选自于R^a,并且取代基R^a、R^5和R^6中的任一个可选地独立地与一个或更多个取代基R^a、R^5和/或R^6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。

[0073] 在一个实施例中,R^{a2}在每次出现时彼此独立地选自于由以下组成的组:氢;F;Me;^{i}Pr;^{t}Bu;Ph,可选地取代有彼此独立地选自于由Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3和Ph组成的组中的一个或更多个取代基。

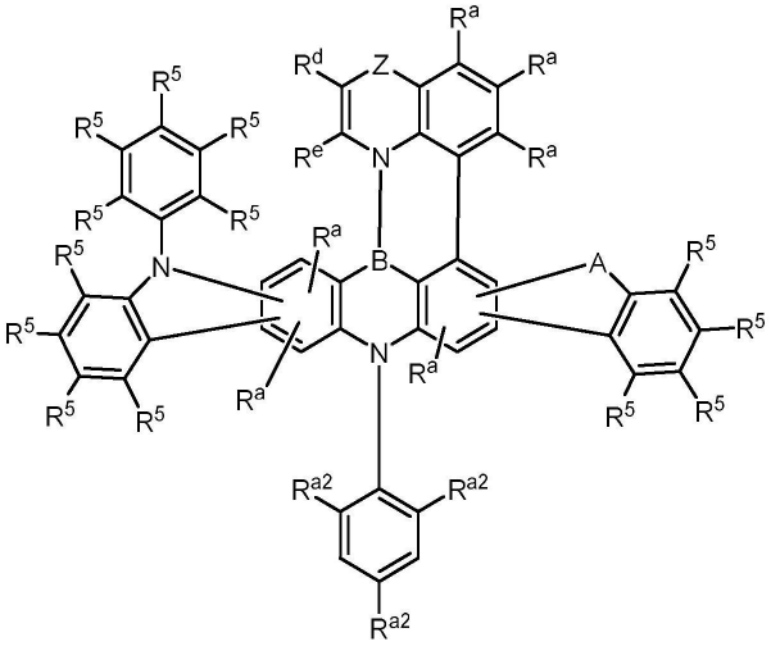
[0074] 在一个实施例中,有机分子包括式IVa、式IVb或式IVc的结构或者由式IVa、式IVb

或式IVc的结构组成：

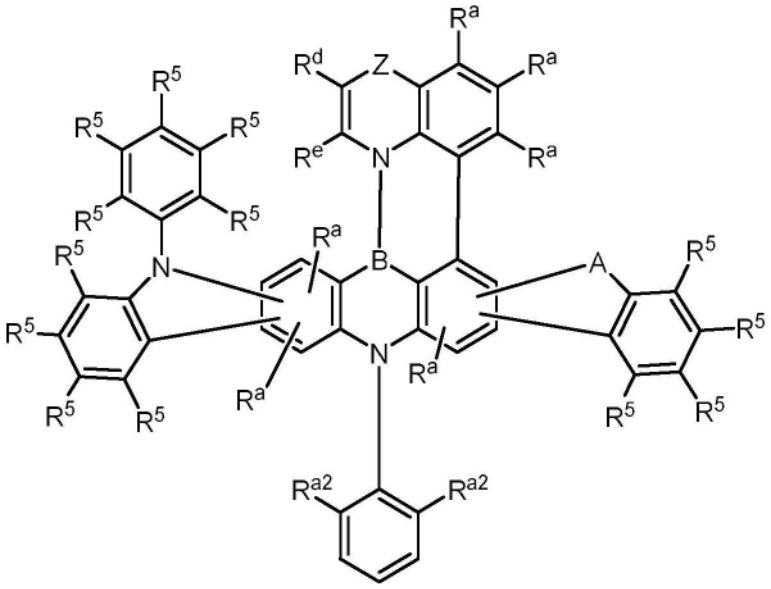


式 IVa，

[0075]



式 IVb，

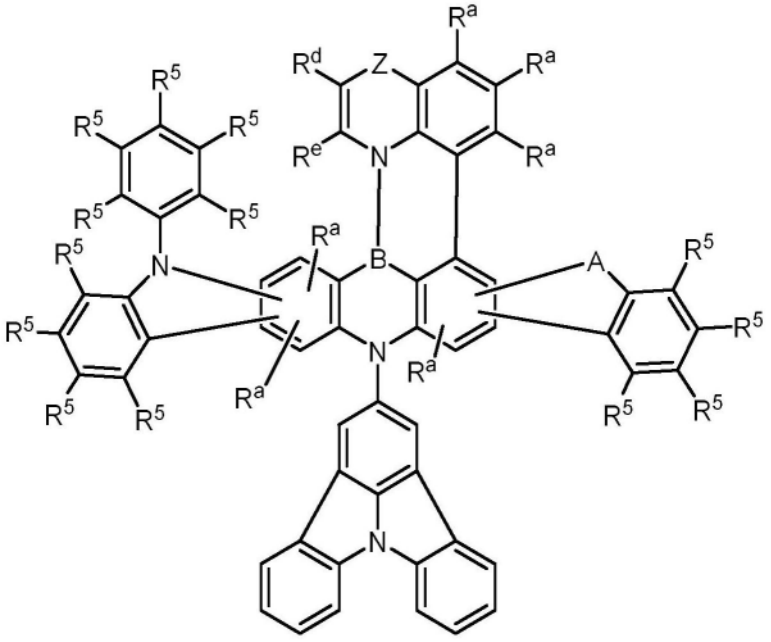
[0076] 

式 IVc。

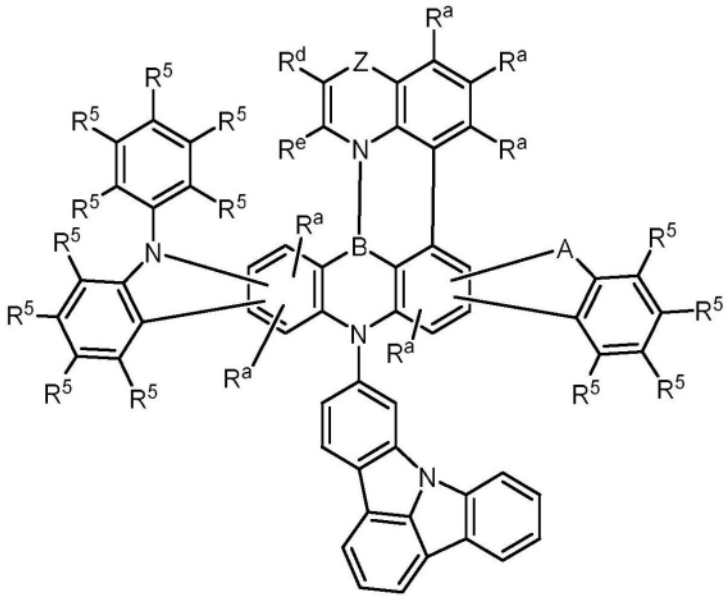
[0077] 在一个实施例中,有机分子包括式IV的结构或由式IV的结构组成,

[0078] 其中,取代基R^{a2}中的至少两个(优选地,两个相邻的取代基R^{a2})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。

[0079] 在一个实施例中,有机分子包括式IV-1、式IV-2、式IV-3、式IV-4和式IV-5的结构或者由式IV-1、式IV-2、式IV-3、式IV-4和式IV-5的结构组成:

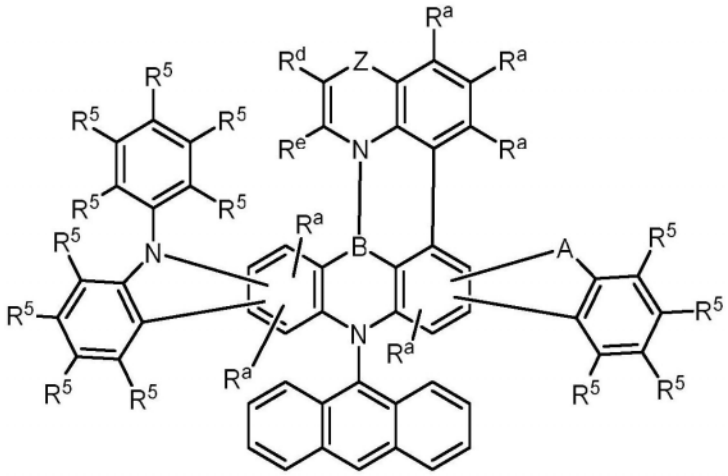
[0080] 

式 IV-1,

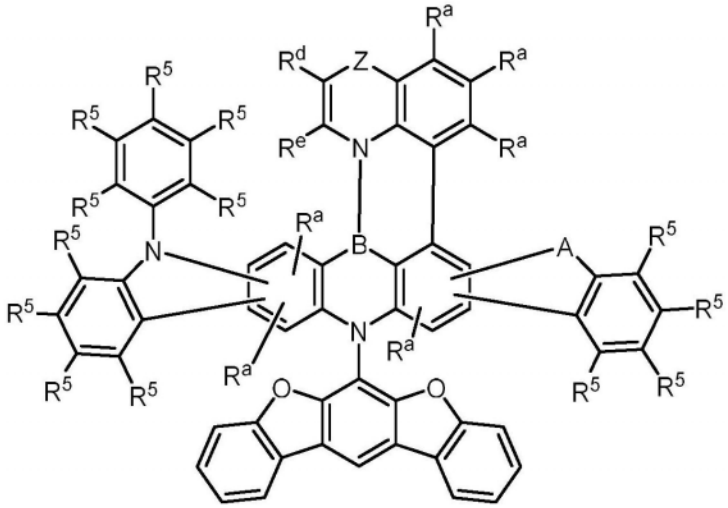


式 IV-2，

[0081]

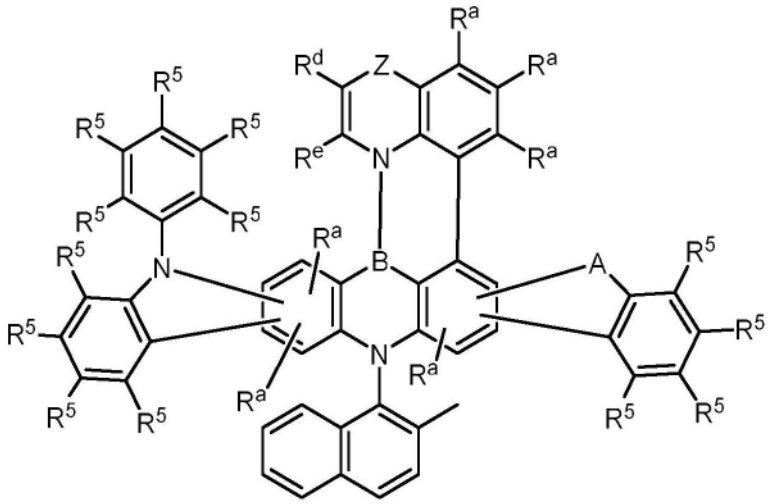


式 IV-3，



式 IV-4，

[0082]



式 IV-5。

具体实施方式

[0083] 定义

[0084] 在此,术语“层”指具有广泛平面几何形状的主体。光电器件可以由若干层构成,这形成了本领域技术人员的公知常识的一部分。

[0085] 在本发明的上下文中的发光层(EML)是光电器件的层,其中,当向光电器件施加电压和电流时观察到来自所述层的光发射。本领域技术人员理解的是,来自光电器件的光发射归因于来自至少一个EML的光发射。本领域技术人员理解的是,来自EML的光发射通常不(主要)归因于包括在所述EML中的所有材料(不归因于特定的发射体材料)。

[0086] 在本发明的上下文中,“发射体材料”(也称为“发射体”)是当其包括在光电器件的发光层(EML)中时发射光的材料(参见下文),条件是向所述光电器件施加电压和电流。本领域技术人员知道的是,发射体材料通常是“发射掺杂剂”材料,本领域技术人员理解的是,掺杂剂材料(其可以是发射性的或不是发射性的)是嵌入基质材料中的材料,所述基质材料通常(并且在此)被称为主体材料。在此,当主体材料包括在包含至少一种根据本发明的有机分子的光电器件(优选地,OLED)中时,主体材料通常也称为H^B。

[0087] 在本发明的上下文中,术语“环基团”可以在最广泛的意义上被理解为任何单环、双环或多环部分。

[0088] 在本发明的上下文中,当提及化学结构时,术语“环”可以在最广泛的意义上被理解为任何单环部分。沿着相同的思路,当提及化学结构时,术语“环”可以在最广泛的意义上被理解为任何双环或多环部分。

[0089] 在本发明的上下文中,术语“环体系”可以在最广泛的意义上被理解为任何单环、双环或多环部分。

[0090] 在本发明的上下文中,术语“环原子”指作为环或环体系的环核的一部分并且不是可选地附着到环核的非环状取代基的一部分的任何原子。

[0091] 在本发明的上下文中,术语“碳环”可以在最广泛的意义上被理解为其中环核结构仅包括碳原子的任何环基团,所述碳原子当然可以取代有氢或在发明的具体实施例中所定义的任何其它取代基。理解的是,术语“碳环”作为形容词指其中环核结构仅包括碳原子的

环基团,所述碳原子当然可以取代有氢或在发明的具体实施例中所定义的任何其它取代基。

[0092] 在本发明的上下文中,术语“杂环”可以在最广泛的意义上被理解为其中环核结构不仅包括碳原子而且包括至少一个杂原子的任何环基团。理解的是,术语“杂环”作为形容词指其中环核结构不仅包括碳原子而且包括至少一个杂原子的环基团。除非在具体实施例中另有说明,否则杂原子在每次出现时可以相同或不同,并且优选地单独地选自于由B、Si、N、O、S和Se(更优选地,B、N、O和S,最优选地,N、O和S)组成的组。包括在发明的上下文中的杂环中的所有碳原子或杂原子当然可以取代有氢或在发明的具体实施例中所定义的任何其它取代基。

[0093] 本领域技术人员理解的是,任何环基团(即,任何碳环和杂环)可以是脂肪族或芳香族或杂芳香族。

[0094] 在本发明的上下文中,当提及环基团(即,提及环、提及多个环、提及环体系、提及碳环、提及杂环)时,术语脂肪族意指环核结构(不计算可选地附着到其的取代基)包含至少一个不是芳香族或杂芳香族的环或环体系的一部分的环原子。优选地,脂肪族环基内的大部分环原子和更优选的所有环原子不是芳香族或杂芳香族的环或环体系的一部分(诸如以在环己烷或哌啶中为例)。在此,当通常提及脂肪族环或环体系时,碳环基与杂环基之间没有区别,由此,术语“脂肪族”可以用作形容词来描述碳环或杂环,以指示杂原子是否包括在脂肪族环基中。

[0095] 如本领域技术人员所理解的,术语“芳基”和“芳香(芳香族)”可以在最广泛的意义上被理解为任何单环、双环或多环芳香部分,即,其中所有环原子是芳香环体系的一部分(优选地,相同芳香环体系的一部分)的环基团。然而,在整个本申请中,术语“芳基”和“芳香(芳香族)”限于单环、双环或多环芳香部分,其中,所有芳香环原子是碳原子。相反,在此的术语“杂芳基”和“杂芳香(杂芳香族)”指任何单环、双环或多环芳香部分,其中,至少一个芳香碳环原子被杂原子(即,不是碳)替代。除非在发明的具体实施例中另有说明,否则“杂芳基”或“杂芳香(杂芳香族)”内的至少一个杂原子在每次出现时可以相同或不同,并且独立地选自于由N、O、S和Se(更优选地,N、O和S)组成的组。本领域技术人员理解的是,形容词“芳香(芳香族)”和“杂芳香(杂芳香族)”可以用于描述任何环基团(即,任何环体系)。也就是说,芳香族环基(即,芳香族环体系)是芳基,并且杂芳香族环基(即,杂芳香族环体系)是杂芳基。

[0096] 除非在发明的具体实施例中不同地说明,否则在此的芳基优选地包含6个至60个芳香环原子,更优选地6个至40个芳香环原子,甚至更优选地6个至18个芳香环原子。除非在发明的具体实施例中不同地说明,否则在此的杂芳基优选地包含5个至60个芳香环原子,优选地5个至40个芳香环原子,更优选地5个至20个芳香环原子,其中,至少一个是杂原子,杂原子优选地选自于N、O、S和Se,更优选地选自于N、O和S。如果杂芳香族基团包括大于一个的杂原子,则所有杂原子优选地彼此独立地选自于N、O、S和Se,更优选地选自于N、O和S。

[0097] 在本发明的上下文中,对于芳香族和杂芳香族基团(例如,芳基或杂芳基取代基)两者,芳香环碳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,例如以“C_6-C_{60}芳基”的形式,这意指相应的芳基取代基包括6个至60个芳香碳环原子。相同的下标数字在此也用于表示所有其它种类的取代基中允许的碳原子数,而与它们是脂肪族取代基、芳香

族取代基还是杂芳香族取代基无关。例如,表述“C_1-C_{40}烷基”指包括1个至40个碳原子的烷基取代基。

[0098] 芳基的优选示例包括衍生自苯、萘、蒽、菲、芘、二氢芘、䓛、苝、荧蒽、苯并蒽、苯并菲、并四苯、并五苯、苯并芘或这些基团的组合的基团。

[0099] 杂芳基的优选示例包括衍生自呋喃、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、吲哚并咔唑、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、1,2,4-三嗪、1,2,3-三嗪、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、1,2,4,5-四嗪、噻吟、蝶啶、中氮茚和苯并噻二唑或这些基团的组合的基团。

[0100] 如在整个本申请中所使用的,术语“亚芳基”指具有与其它分子结构的两个结合位、因此用作连接基结构的二价芳基取代基。沿着相同的思路,术语“亚杂芳基”指具有与其它分子结构的两个结合位、因此用作连接基结构的二价杂芳基取代基。

[0101] 在本发明的上下文中,当提及芳香族环体系或杂芳香族环体系时,术语“稠合”意指“稠合”的芳香环或杂芳香环共享至少一个键,所述至少一个键是两个环体系的一部分。例如,萘(或当被称为取代基时的萘基)或苯并噻吩(或当被称为取代基时的苯并噻吩基)在本发明的上下文中被认为是稠合的芳香族环体系,其中,(对于萘的)两个苯环或者(对于苯并噻吩的)噻吩和苯共享一个键。还理解的是,在该上下文中共享键包括共享构成相应键的两个原子,并且稠合的芳香族环体系或杂芳香族环体系可以被理解为一个芳香族环体系或杂芳香族环体系。另外,理解的是,大于一个键可以被构成稠合的芳香族环体系或杂芳香族环体系的芳香环或杂芳香环共享(例如,在芘中)。此外,将理解的是,脂肪族环体系也可以是稠合的,并且这具有与针对芳香族环体系或杂芳香族环体系相同的含义,当然除了稠合的脂肪族环体系不是芳香的之外。此外,理解的是,芳香族环体系或杂芳香族环体系也可以稠合到脂肪族环体系(换句话说:与脂肪族环体系共享至少一个键)。

[0102] 在本发明的上下文中,术语“缩合”环体系具有与“稠合”环体系相同的含义。

[0103] 在发明的某些实施例中,结合到环或环体系的相邻取代基可以一起形成另外的单环或多环的脂肪族、芳香族或杂芳香族环体系,其稠合到取代基所结合的芳香族或杂芳香族环或环体系。理解的是,可选地如此形成的稠合环体系将比相邻取代基所结合的芳香族或杂芳香族环或环体系大(意指其包括更多的环原子)。在这些情况下(并且如果提供这样的数目),包括在稠合环体系中的环原子的“总”量被理解为相邻取代基所结合的芳香族或杂芳香族环或环体系中所包括的环原子以及由相邻取代基形成的另外的环体系的环原子的总和,然而,其中,被稠合环共享的环原子被计数一次而不是两次。例如,苯环可以具有两个相邻的取代基,两个相邻的取代基一起形成另一苯环,使得构建成萘核。因为两个碳原子被两个苯环共享并且因此仅被计数一次而不是两次,所以该萘核于是包括10个环原子。

[0104] 通常,在本发明的上下文中,术语“相邻取代基”或“相邻基团”指结合到相同或相邻原子的取代基或基团。

[0105] 在本发明的上下文中,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。作为取代基的烷基的优选示例包括甲基(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、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。

[0106] 例如,s-丁基、s-戊基和s-己基中的“s”指“仲”;或者换句话说:s-丁基、s-戊基和s-己基分别等同于仲丁基、仲戊基和仲己基。例如,t-丁基、t-戊基和t-己基中的“t”指“叔”;或者换句话说:t-丁基、t-戊基和t-己基分别等同于叔丁基、叔戊基和叔己基。

[0107] 如在此所使用的,术语“烯基”包括直链、支链和环状的烯基取代基。术语烯基示例性地包括取代基乙烯基、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。

[0108] 如在此所使用的,术语“炔基”包括直链、支链和环状的炔基取代基。术语炔基示例性地包括乙炔基、丙炔基、丁炔基、戊炔基、己炔基、庚炔基或辛炔基。

[0109] 如在此所使用的,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。

[0110] 如在此所使用的,术语“硫代烷氧基”包括直链、支链和环状的硫代烷氧基取代基,其中,对应的烷氧基的氧原子O被硫S替代。

[0111] 如在此所使用的,术语“卤素”(或当在化学命名法中被称为取代基时的“卤代”)可以在最广泛的意义上被理解为元素周期表的第7主族(换句话说:17族)的元素的任何原子,优选地氟、氯、溴或碘。

[0112] 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)或好像它是整个基团(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同的。

[0113] 此外,在此,每当提及诸如“C_6-C_{60}芳基”或“C_1-C_{40}烷基”的取代基而没有指明该取代基内的结合位的名称时,这是意指相应的取代基可以经由任何原子结合。例如,“C_6-C_{60}芳基”取代基可以经由6个至60个芳香碳原子中的任一个结合,并且“C_1-C_{40}烷基”取代基可以经由1个至40个脂肪族碳原子中的任一个结合。另一方面,“2-氰基苯基”取代基只能以其CN基团与结合位相邻的方式结合,以允许化学命名正确。

[0114] 在本发明的上下文中,每当没有进一步详细地提及诸如“丁基”、“联苯基”或“三联苯基”的取代基时,这是意指相应取代基的任何异构体都可允许作为特定取代基。在这方

面,例如,术语“丁基”作为取代基包括正丁基、仲丁基、叔丁基和异丁基作为取代基。沿着相同的思路,作为取代基的术语“联苯基”包括邻联苯基、间联苯基或对联苯基,其中,邻、间和对相对于联苯基取代基与具有联苯基取代基的相应化学部分的结合位定义。类似地,作为取代基的术语“三联苯基”包括3-邻三联苯基、4-邻三联苯基、4-间三联苯基、5-间三联苯基、2-对三联苯基或3-对三联苯基,其中,如本领域技术人员已知的,邻、间和对表示三联苯基内的两个Ph部分相对于彼此的位置,并且“2-”、“3-”、“4-”和“5-”表示三联苯基取代基与具有三联苯基取代基的相应化学部分的结合位。

[0115] 理解的是,上文定义的所有基团和实际上的所有化学部分可以根据在此所描述的具体实施例进一步被取代,无论它们是环状的还是非环状的脂肪族、芳香族或杂芳香族。

[0116] 在没有特别指出的情况下,包括在这里提及的任何结构中的所有氢原子(H)在每次出现时可以独立地被氘(D)替代。对于本领域技术人员来说,用氘代替氢是惯例。因此,有可以通过其实现这一点的许多已知方法,并且几篇综述文章对其进行了描述。

[0117] 如果比较实验或计算数据,则必须通过相同的方法确定值。例如,如果通过特定方法确定实验ΔE_{ST}低于0.4eV,则仅使用包括相同条件的相同特定方法进行比较才有效。为了给出具体示例,不同化合物的光致发光量子产率(PLQY)的比较仅在如果在相同反应条件下进行PLQY值的确定(在室温下在10％ PMMA膜中测量)的情况下有效。类似地,需要通过相同的计算方法(使用相同的函数和相同的基组)确定计算的能量值。

[0118] 包括至少一种根据发明的有机分子的光电器件

[0119] 发明的又一方面涉及一种包括至少一种根据本发明的有机分子的光电器件。

[0120] 在一个实施例中,包括至少一种根据本发明的有机分子的光电器件选自于由以下组成的组:

[0121] 有机发光二极管(OLED);

[0122] 发光电化学电池;

[0123] OLED传感器,具体地,未与外部密封地隔离的气体和蒸汽传感器;

[0124] 有机二极管;

[0125] 有机太阳能电池;

[0126] 有机晶体管;

[0127] 有机场效应晶体管;

[0128] 有机激光器;以及

[0129] 下变频元件。

[0130] 发光电化学电池由三个层组成,即,阴极、阳极和可以包含根据发明的有机分子的活性层。

[0131] 在优选的实施例中,包括至少一种根据本发明的有机分子的光电器件选自于由有机发光二极管(OLED)、发光电化学电池(LEC)、有机激光器和发光晶体管组成的组。

[0132] 在甚至更优选的实施例中,包括至少一种根据本发明的有机分子的光电器件是有机发光二极管(OLED)。

[0133] 在某些实施例中,发明的光电器件可以包括包含铱的磷光材料。

[0134] 在一个实施例中,包括至少一种根据本发明的有机分子的光电器件是OLED,其可以表现出以下层结构:

[0135] 1、基底

[0136] 2、阳极层,A

[0137] 3、空穴注入层,HIL

[0138] 4、空穴传输层,HTL

[0139] 5、电子阻挡层,EBL

[0140] 6、发光层(也称为发射层),EML

[0141] 7、空穴阻挡层,HBL

[0142] 8、电子传输层,ETL

[0143] 9、电子注入层,EIL

[0144] 10、阴极层,C,

[0145] 其中,OLED仅可选地包括除了阳极层(A)、阴极层(C)和发光层(EML)之外的每个层,其中,不同的层可以合并,并且OLED可以包括以上定义的每种层类型中的多于一个的层。

[0146] 此外,包括至少一种根据本发明的有机分子的光电器件可以可选地包括一个或更多个保护层,一个或更多个保护层保护光电器件免受暴露于环境中的有害物质(示例性地包括湿气、蒸气和/或气体)的损坏。

[0147] 在一个实施例中,包括至少一种根据本发明的有机分子的光电器件是OLED,其可以表现出以下(倒置)层结构:

[0148] 1、基底

[0149] 2、阴极层,C

[0150] 3、电子注入层,EIL

[0151] 4、电子传输层,ETL

[0152] 5、空穴阻挡层,HBL

[0153] 6、发光层(也称为发射层),EML

[0154] 7、电子阻挡层,EBL

[0155] 8、空穴传输层,HTL

[0156] 9、空穴注入层,HIL

[0157] 10、阳极层,A,

[0158] 其中,(具有倒置层结构的)OLED仅可选地包括除了阳极层(A)、阴极层(C)和发光层(EML)之外的每个层,其中,不同的层可以合并,并且OLED可以包括以上定义的每个层类型中的多于一个的层。

[0159] 根据精确的结构和取代基,根据发明的有机分子(根据上面所指示的实施例)可以用于各种层中。在使用的情况下,根据发明的有机分子在光电器件中(更具体地,在OLED中)的相应层中的分数是0.1重量%至99重量%、更具体地1重量%至80重量%。在可选的实施例中,相应层中的有机分子的比例是100重量%。

[0160] 在一个实施例中,包括至少一种根据本发明的有机分子的光电器件是可以表现出堆叠结构的OLED。在该结构中,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来产生白光。此外,表现出堆叠结构的OLED可以可选地包括电荷产生层

(CGL),电荷产生层(CGL)典型地位于两个OLED子单元之间并且典型地由n掺杂层和p掺杂层组成且一个CGL的n掺杂层典型地定位为靠近阳极层。

[0161] 在一个实施例中,包括至少一种根据本发明的有机分子的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,并且可选地可以在各个发射层之间进一步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。

[0162] 在一个实施例中,包括至少一种根据本发明的有机分子的光电器件可以是基本上白色光电器件,也就是说,该光电器件发射白光。示例性地,这种发白光的光电器件可以包括至少一种(深)蓝色发射体分子以及一种或更多种发射绿光和/或红光的发射体分子。然后,还可以可选地存在如该上下文的后面部分中所描述的两种或更多种分子之间的能量传输(参见下文)。

[0163] 在光电器件包括至少一种根据本发明的有机分子的情况下,优选的是,至少一种根据本发明的有机分子包括在光电器件的发光层(EML)中,最优选地,包括在OLED的EML中。然而,根据发明的有机分子也可以例如用于电子传输层(ETL)中和/或电子阻挡层(EBL)或激子阻挡层中和/或空穴传输层(HTL)和/或空穴阻挡层(HBL)中。在使用的情况下,根据发明的有机分子在光电器件中(更具体地,在OLED中)的相应层中的分数是0.1重量%至99重量%、更具体地0.5重量%至80重量%,具体地0.5重量%至10重量%。在可选的实施例中,相应层中的有机分子的比例是100重量%。

[0164] 用于光电器件(具体地,OLED)的各个层的合适材料的选择标准是本领域技术人员的公知常识。现有技术描述了在各个层中使用的大量材料,并且还教导了哪些材料适合于彼此并排使用。理解的是,现有技术中使用的任何材料也可以用于包括根据本发明的有机分子的光电器件中。在下文中,将给出用于各个层的材料的优选示例。理解的是,这不暗示下面列出的所有类型的层必须存在于包括至少一种根据本发明的有机分子的光电器件中。另外,理解的是,包括至少一种根据本发明的有机分子的光电器件可以包括多于一个的以下列出的层中的每个,例如,两个或更多个发光层(EML)。还理解的是,相同类型的两个或更多个层(例如,两个或更多个EML或者两个或更多个HTL)不必包括相同的材料或甚至相同比例的相同材料。此外,理解的是,包括至少一种根据本发明的有机分子的光电器件不必包括以下列出的所有层类型,其中,阳极层、阴极层和发光层通常将在所有情况下存在。

[0165] 基底可以由任何材料或材料的组合形成。最常见地,玻璃载片被用作基底。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)透明膜的材料构成。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)通常是透明的。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。

[0166] 优选地,阳极层(A)(基本上)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(1,4,5,8,9,12-六氮杂苯并菲-六甲腈)和/或螺-NPD(N,N'-二苯基-N,N'-双(1-萘基)-9,9'-螺二芴-2,7-二胺)。

[0167] 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材料。示例性地,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最低激发三重态(T1)能级。示例性地,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(N,N'-双(萘-1-基)-N,N'-双(苯基)-2,2'-二甲基联苯胺)、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(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(1,4,5,8,9,12-六氮杂苯并菲-六甲腈)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)的星形杂环化合物。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构成的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用作有机掺杂剂。

[0168] EBL可以例如包括mCP(1,3-双(咔唑-9-基)苯)、TCTA(三(4-咔唑-9-基苯基)胺)、2-TNATA(4,4',4"-三[2-萘基(苯基)氨基]三苯胺)、mCBP(3,3-二(9H-咔唑-9-基)联苯)、Tris-Pcz(9-苯基-3,6-双(9-苯基-9H-咔唑-3-基)-9H-咔唑)、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)。

[0169] 与空穴传输层(HTL)或(如果存在的)电子阻挡层(EBL)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(即,发射体材料)。典型地,EML附加地包括一种或更多种主体材料(也被称为基质材料)。示例性地,主体材料可以选自于CBP(4,4'-双(N-咔唑基)联苯)、mCP(1,3-双(咔唑-9-基)苯)、mCBP(3,3-二(9H-咔唑-9-基)联苯)、Sif87(二苯并[b,d]噻吩-2-基三苯基硅烷)、CzSi(9-(4-叔丁基苯基)-3,6-双(三苯基甲硅烷基)-9H-咔唑)、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)。如本领域技术人员已知的,主体材料典型地应被选择为表现出在能量上高于嵌入在相应主体材料中的至少一种有机分子的第一(即,最低)激发三重态(T1)能级和第一(即,最低)激发单重态(S1)能级的第一(即,最低)激发三重态(T1)能级和第一(即,最低)激发单重态(S1)能级。

[0170] 如前所述,优选的是,在发明的上下文中,光电器件的至少一个EML包括至少一种根据本发明的有机分子。包括至少一种根据本发明的有机分子的光电器件的EML的优选组合物在本文的后面部分中更详细地描述(参见下文)。

[0171] 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材料。示例性地,可以使用诸如以苯并咪唑、吡啶、三唑、三嗪、噁二唑(例如,1,3,4-噁二唑)、氧化膦和砜为例的具有贫电子基团的化合物。电子传输材料也可以是诸如1,3,5-三(1-苯基-1H-苯并[d]咪唑-2-基)苯(TPBi)的星形杂环化合物。ETL可以例如包括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)苯并[9,10]菲)、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((8-羟基喹啉)锂)的材料。电子传输层(ETL)也可以阻挡空穴,或者典型地在EML与ETL之间引入空穴阻挡层(HBL)。

[0172] 空穴阻挡层(HBL)可以例如包括BCP(2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-菲咯啉,即,浴铜灵)、4,6-二苯基-2-(3-(三苯基甲硅烷基)苯基)-1,3,5-三嗪、9,9'-(5-(6-([1,1'-联苯]-3-基)-2-苯基嘧啶-4-基)-1,3-亚苯基)双(9H-咔唑)、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)。

[0173] 阴极层(C)可以定位为与电子传输层(ETL)相邻。例如,阴极层(C)可以包括金属(例如,Al、Au、Ag、Pt、Cu、Zn、Ni、Fe、Pb、Li、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、Li、Ca、Ba、Mg、In、W或Pd)或金属合金组成。出于实际原因,阴极层可以由诸如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)也可以包括纳米级银线或由纳米级银线组成。

[0174] 包括至少一种根据本发明的有机分子的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。

[0175] 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材料。

[0176] 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:

[0177] 紫色:>380nm至420nm的波长范围;

[0178] 深蓝色:>420nm至480nm的波长范围;

[0179] 天蓝色:>480nm至500nm的波长范围;

[0180] 绿色:>500nm至560nm的波长范围;

[0181] 黄色:>560nm至580nm的波长范围;

[0182] 橙色:>580nm至620nm的波长范围;

[0183] 红色:>620nm至800nm的波长范围。

[0184] 关于有机分子(换句话说:发射体材料),这种颜色指主发射峰的发射最大值。因此,示例性地,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。

[0185] 深蓝色发射体可以优选地具有低于475nm、更优选地低于470nm、甚至更优选地低于465nm或甚至低于460nm的发射最大值。其通常将高于420nm、优选地高于430nm、更优选地高于440nm或甚至高于450nm。在优选的实施例中,根据本发明的有机分子表现出在420nm与500nm之间、更优选地在430nm与490nm之间、甚至更优选地在440nm与480nm之间、并且最优选地在450nm与470nm之间的发射最大值,该发射最大值典型地在室温(即,(近似)20℃)下通过在聚(甲基丙烯酸甲酯)(PMMA)、mCBP中采用1重量%至5重量%(优选地,2重量%)的根据发明的有机分子或者可选地在有机溶剂(优选地,DCM或甲苯)中采用0.001mg/mL的根据发明的有机分子的旋涂膜来测量。

[0186] 又一实施例涉及一种OLED,该OLED包括至少一种根据本发明的有机分子并且发射具有接近CIEx(=0.131)和CIEy(=0.046)色坐标的CIEx和CIEy色坐标的光,CIEx(=0.131)和CIEy(=0.046)色坐标作为如由ITU-RRecommendation BT.2020(Rec.2020)所定义的基色蓝色(CIEx=0.131,CIEy=0.046),并且因此该OLED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包括至少一种根据本发明的有机分子的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。

[0187] 又一实施例涉及一种OLED,该OLED包括至少一种根据本发明的有机分子并且在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%或甚至大于20%的外量子效率,并且/或者表现出在420nm与500nm之间、更优选地在430nm与490nm之间、甚至更优选地在440nm与480nm之间、最优选地在450nm与470nm之间的发射最大值,或者仍然和/或在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小时或甚至大于1000小时的LT80值。

[0188] 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或甚至低于540nm的发射最大值。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或甚至高于520nm。

[0189] 绿色发射体材料可以优选地具有在500nm与560nm之间、更优选地在510nm与550nm

之间、甚至更优选地在520nm与540nm之间的发射最大值。

[0190] 在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%或甚至大于70%的光致发光量子产率(PLQY)。

[0191] 又一优选的实施例涉及一种OLED,该OLED包括至少一种根据本发明的有机分子并且在不同的颜色点处发射光。优选地,OLED发射具有窄发射带(小半峰全宽(FWHM))的光。在优选的实施例中,包括至少一种根据发明的有机分子的OLED发射具有小于0.30eV、优选地小于0.25eV、更优选地小于0.20eV、甚至更优选地小于0.10eV或者甚至小于0.17eV的主发射峰的FWHM的光。

[0192] 根据发明,包括至少一种根据本发明的有机分子的光电器件可以例如用于显示器、用作照明应用中的光源和用作医疗和/或美容应用(例如,光疗法)中的光源。

[0193] 根据发明的有机分子与其它材料的组合

[0194] 光电器件(在此优选地是OLED)内的任何层(具体地,发光层(EML))可以由单种材料或不同材料的组合构成,这形成了本领域技术人员的公知常识的一部分。

[0195] 例如,本领域技术人员理解的是,EML可以由当向所述光电器件施加电压(和电流)时能够发射光的单种材料构成。然而,本领域技术人员还理解的是,在光电器件(在此优选地是OLED)的EML中组合不同材料可以是有益的,具体地,一种或更多种主体材料(换句话说:基质材料;当包括在包括至少一种根据发明的有机分子的光电器件中时,在此称为主体材料(H^B))以及一种或更多种掺杂剂材料,其中,至少一种在向光电器件施加电压和电流时是发射性的(即,发射体材料)。

[0196] 在根据发明的有机分子在光电器件中的应用的优选实施例中,所述光电器件在EML中或在与EML直接相邻的层中或在这些层中的多于一个的层中包括至少一种根据发明的有机分子。

[0197] 在根据发明的有机分子在光电器件中的应用的优选实施例中,所述光电器件是OLED,并且在EML中或在与EML直接相邻的层中或在这些层中的多于一个的层中包括至少一种根据发明的有机分子。

[0198] 在根据发明的有机分子在光电器件中的应用的甚至更优选的实施例中,所述光电器件是OLED,并且在EML中包括至少一种根据发明的有机分子。

[0199] 在提及包括至少一种根据发明的有机分子的光电器件(优选地,OLED)的一个实施例中,至少一种(优选地每种)根据发明的有机分子用作发光层(EML)中的发射体材料,也就是说,其在向所述光电器件施加电压(和电流)时发射光。

[0200] 如本领域技术人员已知的,例如在有机发光二极管(OLED)中,来自发射体材料(即,发射掺杂剂)的光发射可以包括来自激发单重态(通常最低激发单重态(S1))的荧光和来自激发三重态(通常最低激发三重态(T1))的磷光。

[0201] 荧光发射体(F)能够在电子激发(例如,在光电器件中)时在室温(即,(近似)20℃)下发射光,其中,发射激发态是单重态。当初始电子激发(例如,通过电子空穴复合)提供发射体的激发单重态时,荧光发射体通常在纳秒的时间尺度上显示即时(即,直接)荧光。

[0202] 在发明的上下文中,延迟荧光材料是能够通过反向系间窜越(RISC;换言之:向上系间窜越或反向系间窜越)的方式从激发三重态(典型地从最低激发三重态(T1))达到激发

单重态(典型地最低激发单重态(S1))并且还能够在从如此达到的激发单重态(典型地S1)返回到其电子基态时发射光的材料。在RISC之后从激发三重态(典型地T1)到发射激发单重态(典型地S1)观察到的荧光发射在时间尺度(典型地在微秒的范围内)上发生,该时间尺度慢于直接(即,即时)荧光发生的时间尺度(典型地在纳秒的范围内),因此被称为延迟荧光(DF)。当通过热激活发生从激发三重态(典型地从T1)到激发单重态(典型地到S1)的RISC时,并且如果如此填充的激发单重态发光(延迟荧光发射),则该过程被称为热激活延迟荧光(TADF)。因此,如上面所解释的,TADF材料是能够发射热激活延迟荧光(TADF)的材料。本领域技术人员已知的是,当荧光发射体(F)的最低激发单重态能级($E(S1^E)$)与最低激发三重态能级($E(T1^E)$)之间的能量差(ΔE_{ST})减小时,可以通过RISC的方式以高效率从最低激发三重态产生最低激发单重态的群。因此,TADF材料典型地将具有小的ΔE_{ST}值(参见下文),这形成了本领域技术人员的公知常识的一部分。如本领域技术人员已知的,TADF材料可以不仅仅是本身能够从激发三重态到激发单重态的RISC以及随后如上所述的TADF发射的材料。本领域技术人员已知的是,TADF材料实际上也可以是由两种材料(优选地由两种主体材料(H^B)、更优选地由p主体(H^P)和n主体(H^N))形成的激基复合物(参见下文)。

[0203] (热激活)延迟荧光的发生可以例如基于从时间分辨(即,瞬态)光致发光(PL)测量获得的衰减曲线来分析。为此目的,可以使用相应发射体(即,假设的TADF材料)在聚(甲基丙烯酸甲酯)(PMMA)中采用1重量%至10重量%(具体地,10重量%)的相应发射体的旋涂膜作为样品。可以例如使用来自爱丁堡仪器(Edinburgh instruments)的FS5荧光光谱仪进行分析。可以将样品PMMA膜放置在比色皿中并且在测量期间保持在氮气氛下。可以使用公认的时间相关单光子计数(TCSPC,参见下文)技术来进行数据采集。为了收集几个数量级的时间和信号强度的全衰减动力学,可以进行并且组合在四个时间窗(200ns、1μs和20μs,以及跨越>80μs的更长测量)中的测量(参见下文)。

[0204] TADF材料优选地满足关于上述全衰减动力学的以下两个条件:

[0205] (i)衰减动力学表现出两个时间区,一个在纳秒(ns)范围内,另一个在微秒(μs)范围内;以及

[0206] (ii)在两个时间区中的发射光谱的形状一致;

[0207] 其中,在第一衰减区中发射的部分光被视为即时荧光,并且在第二衰减区中发射的部分光被视为延迟荧光。

[0208] 延迟荧光与即时荧光的比可以以所谓的n值的形式表示,根据以下等式,n值可以通过相应的光致发光衰减在时间上的积分来计算:

[0209] $\frac{\int I_{DF}(t)dt}{\int I_{PF}(t)dt} = n$。

[0210] 在本发明的上下文中,TADF材料优选地表现出大于0.05(n>0.05)(更优选地大于0.1(n>0.1),甚至更优选地大于0.15(n>0.15),特别优选地大于0.2(n>0.2),或者甚至大于0.25(n>0.25))的n值(延迟荧光与即时荧光的比)。

[0211] 在优选的实施例中,根据发明的有机分子表现出大于0.05(n>0.05)的n值(延迟荧光与即时荧光的比)。

[0212] 在本发明的上下文中,TADF材料(E^B)的特征在于表现出小于0.4eV、优选地小于0.3eV、更优选地小于0.2eV、甚至更优选地小于0.1eV或甚至小于0.05eV的$\triangle E_{ST}$值,ΔE_{ST}值

对应于最低激发单重态能级(E(S1^E))与最低激发三重态能级(E(T1^E))之间的能量差。确定TADF材料(E^B)的ΔE_{ST}值的方法在本文的后面的子章节中给出。

[0213] 用于设计TADF材料的一种常见方法是将其上分布有HOMO的一个或更多个(电子)供体部分以及其上分布有LUMO的一个或更多个(电子)受体部分共价附着到同一桥,在此称为连接基团。TADF材料(E^B)可以例如还包括结合到同一受体部分的两个或三个连接基团,并且附加的供体和受体部分可以结合到这两个或三个连接基团中的每个。

[0214] 一个或更多个供体部分以及一个或更多个受体部分也可以(在不存在连接基团的情况下)彼此直接结合。

[0215] 典型的供体部分是二苯基胺、吲哚、咔唑、吖啶、吩噁嗪和相关结构的衍生物。具体地,脂肪族、芳香族或杂芳香族环体系可以稠合到上述供体部分以得到例如吲哚并咔唑。

[0216] 苯衍生物、联苯衍生物以及在某种程度上还有三联苯衍生物是常见的连接基团。

[0217] 腈基是TADF材料中常见的受体部分,其已知示例包括:

[0218] (i)咔唑基二氰基苯化合物

[0219] 诸如2CzPN(4,5-二(9H-咔唑-9-基)邻苯二甲腈)、DCzIPN(4,6-二(9H-咔唑-9-基)间苯二甲腈)、4CzPN(3,4,5,6-四(9H-咔唑-9-基)邻苯二甲腈)、4CzIPN(2,4,5,6-四(9H-咔唑-9-基)间苯二甲腈)、4CzTPN(2,4,5,6-四(9H-咔唑-9-基)对苯二甲腈)及其衍生物;

[0220] (ii)咔唑基氰基吡啶化合物

[0221] 诸如4CzCNPy(2,3,5,6-四(9H-咔唑-9-基)-4-氰基吡啶)及其衍生物;

[0222] (iii)咔唑基氰基联苯化合物

[0223] 诸如CNBPCz(4,4',5,5'-四(9H-咔唑-9-基)-[1,1'-联苯]-2,2'-二甲腈)、CzBPCN(4,4',6,6'-四(9H-咔唑-9-基)-[1,1'-联苯]-3,3'-二甲腈)、DDCzIPN(3,3',5,5'-四(9H-咔唑-9-基)-[1,1'-联苯]-2,2',6,6'-四甲腈)及其衍生物;

[0224] 其中,在这些材料中,腈基中的一个或更多个可以被作为受体部分的氟(F)或三氟甲基(CF_3)替代。

[0225] 诸如三嗪衍生物、嘧啶衍生物、三唑衍生物、噁二唑衍生物、噻二唑衍生物、庚嗪衍生物、1,4-二氮杂苯并[9,10]菲衍生物、苯并噻唑衍生物、苯并噁唑衍生物、喹喔啉衍生物和二氮杂芴衍生物的氮杂环也是用于构建TADF材料的公知的受体部分。包括例如三嗪受体的TADF材料的已知示例包括PIC-TRZ(7,7'-(6-([1,1'-联苯]-4-基)-1,3,5-三嗪-2,4-二基)双(5-苯基-5,7-二氢吲哚并[2,3-b]咔唑))、mBFCzTrz(5-(3-(4,6-二苯基-1,3,5-三嗪-2-基)苯基)-5H-苯并呋喃并[3,2-c]咔唑)和DCzTrz(9,9'-(5-(4,6-二苯基-1,3,5-三嗪-2-基)-1,3-亚苯基)双(9H-咔唑))。

[0226] 另一组TADF材料包括诸如二苯甲酮的二芳基酮或者诸如4-苯甲酰基吡啶、9,10-蒽醌、9H-呫吨-9-酮及其衍生物的(杂芳基)芳基酮作为受体部分,(通常为咔唑基取代基的)供体部分结合到受体部分。这种TADF材料的示例分别包括BPBCz(双(4-(9'-苯基-9H,9'H-[3,3'-二咔唑]-9-基)苯基)甲酮)、mDCBP((3,5-二(9H-咔唑-9-基)苯基)(吡啶-4-基)甲酮)、AQ-DTBu-Cz(2,6-双(4-(3,6-二叔丁基-9H-咔唑-9-基)苯基)蒽-9,10-二酮)和MCz-XT(3-(1,3,6,8-四甲基-9H-咔唑-9-基)-9H-呫吨-9-酮)。

[0227] 亚砜(具体地,二苯基亚砜)通常也用作用于构建TADF材料的受体部分,并且已知的示例包括4-PC-DPS(9-苯基-3-(4-(苯基磺酰基)苯基)-9H-咔唑)、DitBu-DPS(9,9'-(磺

酰基双(4,1-亚苯基))双(9H-咔唑))和TXO-PhCz(2-(9-苯基-9H-咔唑-3-基)-9H-噻吨-9-酮-10,10-二氧化物)。

[0228] 理解的是,荧光发射体(F)还可以显示如在此所定义的TADF并且甚至是如在此所定义的TADF材料(E^B)。因此,如在此所定义的小FWHM发射体(S^B)可以是或也可以不是如在此所定义的TADF材料(E^B)。

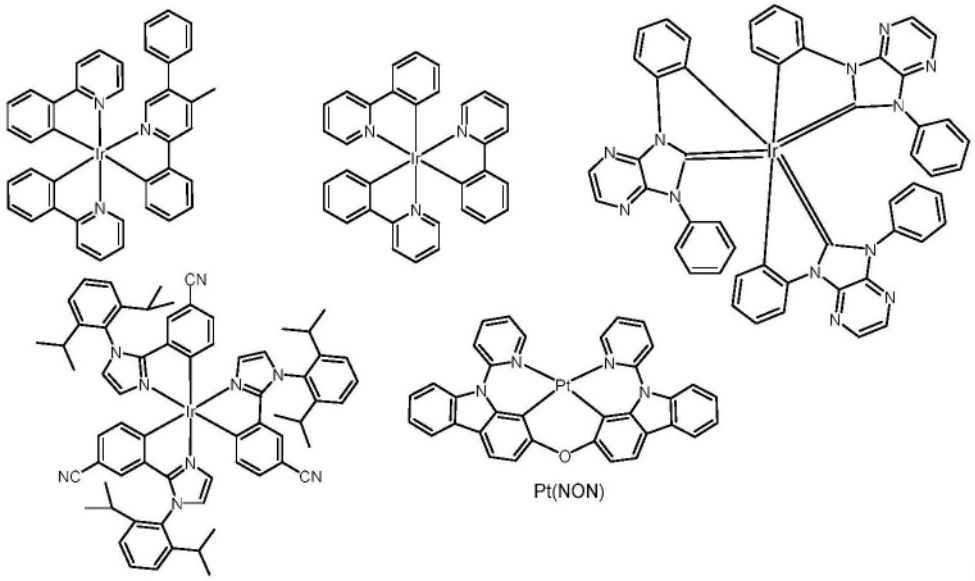
[0229] 磷光(即,来自激发三重态(典型地来自最低激发三重态(T1))的光发射)是自旋禁止过程。如本领域技术人员已知的,可以通过利用(分子内)自旋-轨道相互作用(所谓的(内部)重原子效应)来促进(增强)磷光。在发明的上下文中的磷光材料(P^B)是能够在室温(即,(近似)20℃)下发射磷光的磷光发射体。

[0230] 在此,优选的是,磷光材料(P^B)包括具有比钙(Ca)的标准原子量大的标准原子量的元素的至少一个原子。甚至更优选地,在发明的上下文中,磷光材料(P^B)包括过渡金属原子,具体地,具有比锌(Zn)的标准原子量大的标准原子量的元素的过渡金属原子。优选地包括在磷光材料(P^B)中的过渡金属原子可以以任何氧化态存在(并且还可以作为相应元素的离子存在)。

[0231] 本领域技术人员公知的是,在光电器件中使用的磷光材料(P^B)通常是Ir、Pd、Pt、Au、Os、Eu、Ru、Re、Ag和Cu的配合物,在本发明的上下文中优选地是Ir、Pt和Pd的配合物,更优选地是Ir和Pt的配合物。本领域技术人员知道哪些材料适合作为光电器件中的磷光材料(P^B)以及如何合成它们。此外,本领域技术人员熟悉用作光电器件中的磷光材料的磷光配合物的设计原理,并且知道如何借助于结构变化来调节配合物的发射。

[0232] 本领域技术人员知道哪些材料适合作为光电器件中使用的磷光材料(P^B)以及如何合成它们。在这方面,本领域技术人员特别熟悉用作光电器件中的磷光材料(P^B)的磷光配合物的设计原理,并且知道如何借助于结构变化来调节配合物的发射。

[0233] 在现有技术中公开了可以与根据本发明的有机分子一起使用的磷光材料(P^B)的示例(例如,以组合物的形式或在光电器件的EML中,参见下文)。例如,以下金属配合物是可以与根据本发明的有机分子一起使用的磷光材料(P^B):

[0234] 

。

[0235] 在发明的上下文中,小半峰全宽(FWHM)发射体(S^B)是具有发射光谱的任何发射体

(即,发射体材料),所述发射光谱表现出小于或等于0.35eV(≤0.35eV)、优选地小于或等于0.30eV(≤0.30eV)、具体地小于或等于0.25eV(≤0.25eV)的FWHM。除非另有说明,否则这是基于相应发射体在室温(即,(近似)20℃)下的发射光谱来判断,通常在聚(甲基丙烯酸甲酯)(PMMA)或mCBP中采用1重量%至5重量%(具体地,采用2重量%)的发射体测量。可选地,小FWHM发射体(S^B)的发射光谱可以在室温(即,(近似)20℃)下在溶液中测量(通常在二氯甲烷或甲苯中采用0.001mg/mL至0.2mg/mL的小FWHM发射体(S^B)来测量)。

[0236] 小FWHM发射体(S^B)可以是荧光发射体(F)、磷光发射体(例如,磷光材料(P^B))和/或TADF发射体(例如,TADF材料(E^B))。对于如上所述的TADF材料(E^B)和磷光材料(P^B),在室温(即,(近似)20℃)下通过相应材料在聚(甲基丙烯酸甲酯)(PMMA)中采用10重量%的相应的发明的有机分子、E^B或P^B的旋涂膜来记录发射光谱。

[0237] 如本领域技术人员已知的,发射体(例如,小FWHM发射体(S^B))的半峰全宽(FWHM)通过相应的发射光谱(对于荧光发射体的荧光光谱和对于磷光发射体的磷光光谱)容易地确定。所有报告的FWHM值通常指主发射峰(即,具有最高强度的峰)。确定(在此优选地以电子伏特eV报告的)FWHM的方式是本领域技术人员的公知常识的一部分。例如,考虑到发射光谱的主发射峰在两个波长λ_1和λ_2处达到其半最大发射(即,最大发射强度的50%)(所述两个波长λ_1和λ_2两者通过发射光谱以纳米(nm)获得),呈电子伏特(eV)的FWHM通常(并且在此)使用以下等式确定:

[0238] $$\mathrm{FWHM\ [eV]} = \left| \frac{1239.84\,[eV\cdot nm]}{\lambda_2\,[nm]} - \frac{1239.84[eV\cdot nm]}{\lambda_1\,[nm]} \right|。$$

[0239] 在发明的上下文中,小FWHM发射体(S^B)是有机发射体,在发明的上下文中,这意指它不包含任何过渡金属。优选地,发明的上下文中的小FWHM发射体(S^B)主要由元素氢(H)、碳(C)、氮(N)和硼(B)组成,但是可以例如还包括氧(O)、硅(Si)、氟(F)和溴(Br)。

[0240] 此外,优选的是,发明的上下文中的小FWHM发射体(S^B)是可以另外表现出或可以不另外表现出TADF的荧光发射体(F)。

[0241] 优选地,在发明的上下文中,小FWHM发射体(S^B)优选地满足以下要求中的至少一个:

[0242] (i)它是含硼(B)发射体,这意指相应的小FWHM发射体(S^B)内的至少一个原子是硼(B);

[0243] (ii)它包括多环芳香族或杂芳香族核结构,其中,至少两个芳香环稠合在一起(例如,蒽、芘或其氮杂衍生物)。

[0244] 如本领域技术人员已知的,EML的主体材料(H^B)可以通过所述EML传输电子或正电荷,并且还可以将激发能量转移到掺杂在主体材料(H^B)中的至少一种发射体材料。本领域技术人员理解的是,包括在光电器件(例如,OLED)的EML中的主体材料(H^B)通常在施加电压和电流时不显著参与来自所述光电器件的光发射。本领域技术人员还熟悉以下事实:任何主体材料(H^B)可以是表现出高空穴迁移率的p主体(H^P)、表现出高电子迁移率的n主体(H^N)或表现出高空穴迁移率和高电子迁移率两者的双极主体材料(H^{BP})。

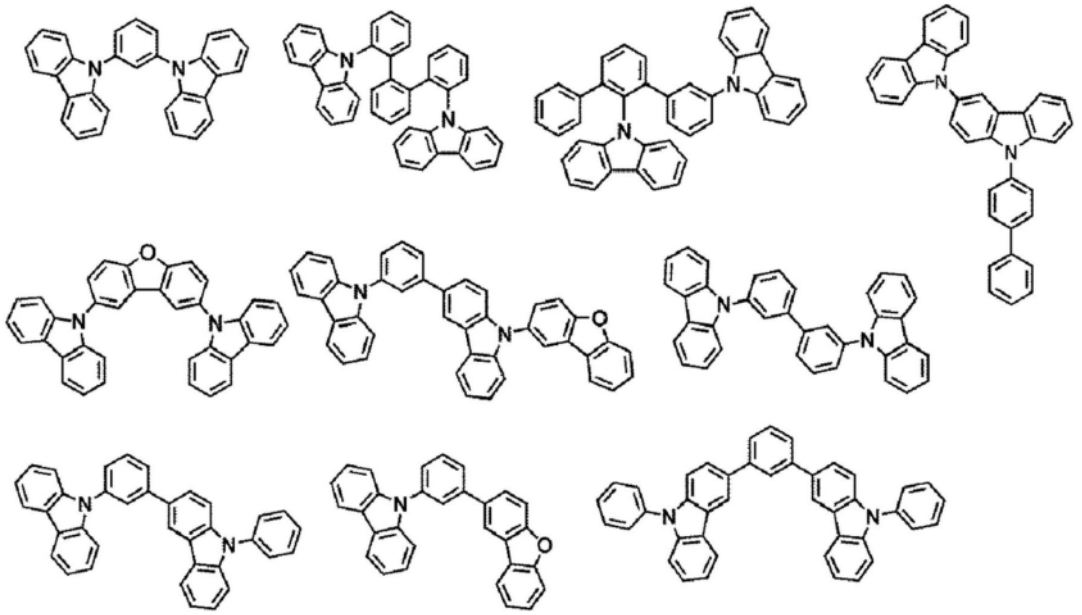
[0245] 如本领域技术人员已知的,EML还可以包括具有至少一种p主体(H^P)和一种n主体(H^N)的所谓的混合主体体系。具体地,EML可以包括恰好一种根据发明的发射体材料和混合主体体系,该混合主体体系包括T2T(2,4,6-三(联苯-3-基)-1,3,5-三嗪)作为n主体(H^N)和

选自于CBP、mCP、mCBP、4,6-二苯基-2-(3-(三苯基甲硅烷基)苯基)-1,3,5-三嗪、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-咔唑的主体作为p主体(H^P)。

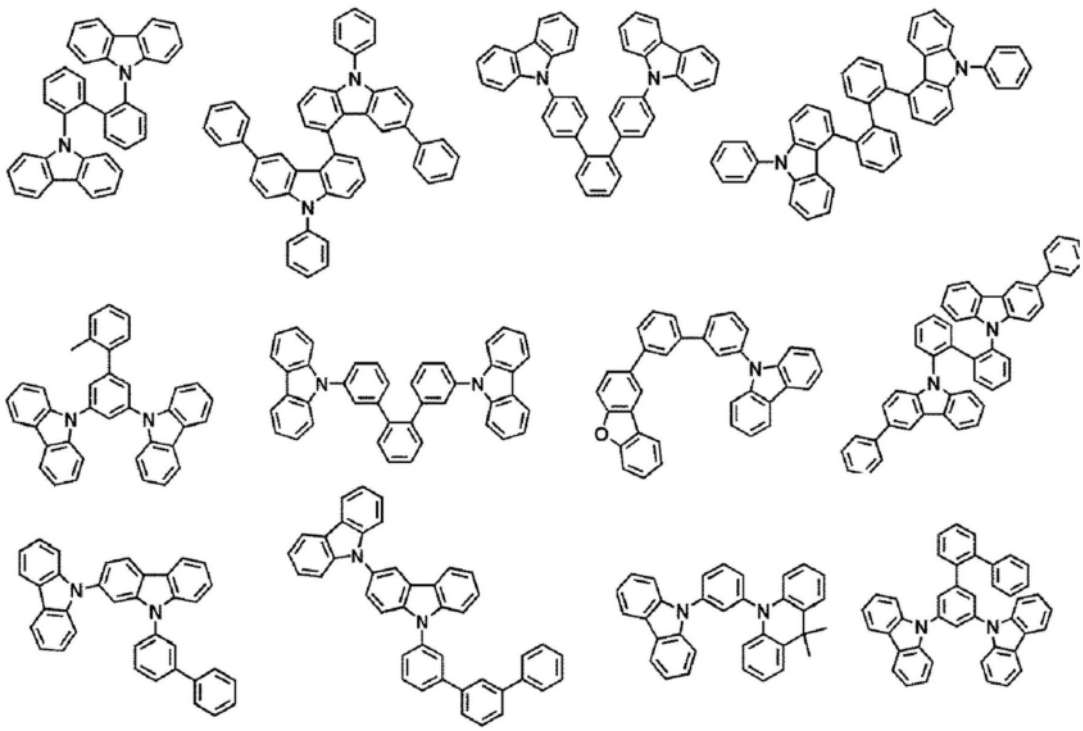
[0246] EML可以包括具有至少一种p主体(H^P)和一种n主体(H^N)的所谓的混合主体体系;其中,n主体(H^N)包括衍生自吡啶、嘧啶、苯并嘧啶、1,3,5-三嗪、1,2,4-三嗪和1,2,3-三嗪的基团,而p主体(H^P)包括衍生自吲哚、异吲哚和优选的咔唑的基团。

[0247] 本领域技术人员知道哪些材料是用于光电器件的合适的主体材料。理解的是,现有技术中使用的任何主体材料可以是在发明的上下文中的合适的主体材料(H^B)。

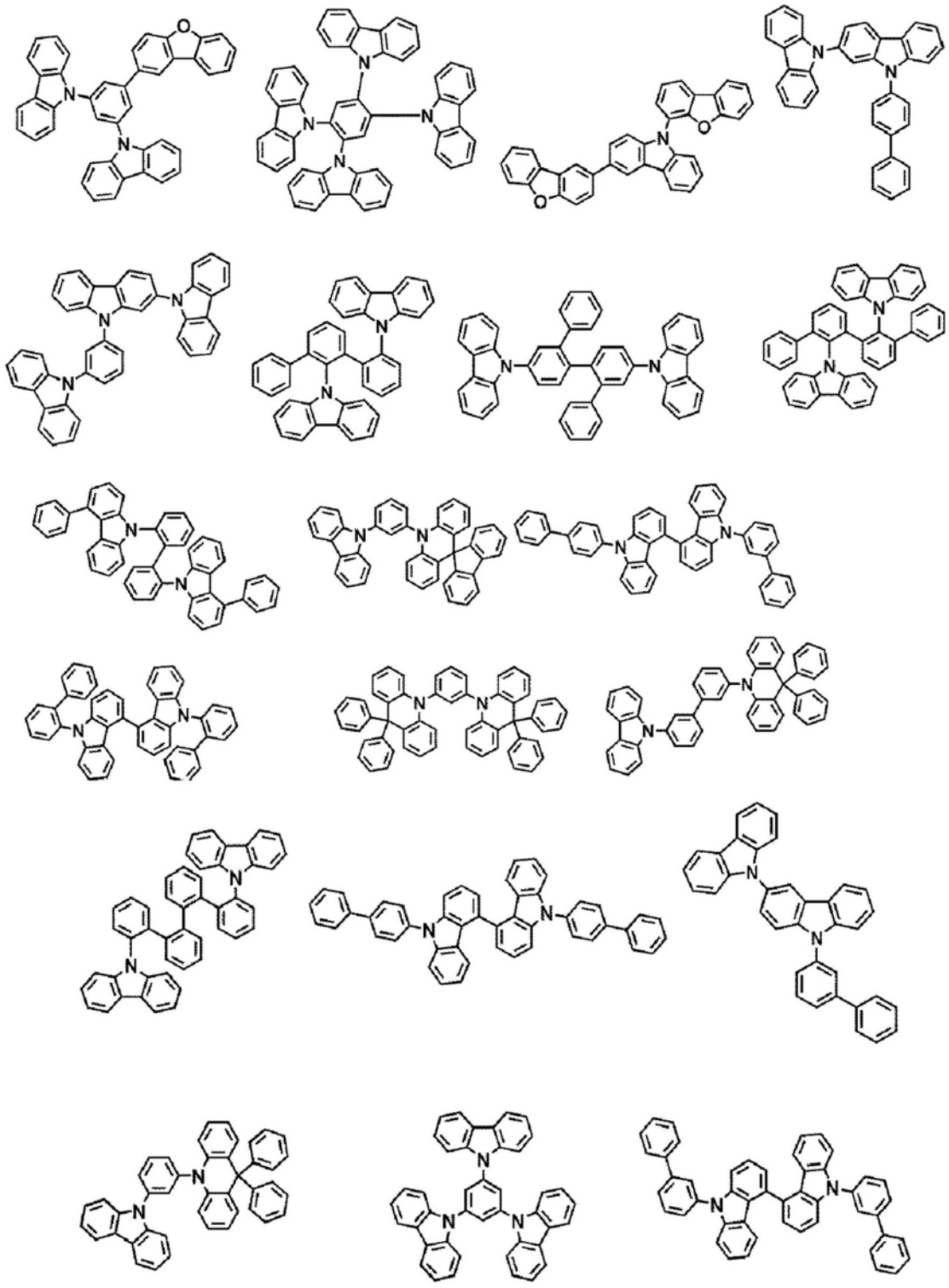
[0248] 在发明的上下文中作为p主体(H^P)的主体材料(H^B)的示例在以下列出:

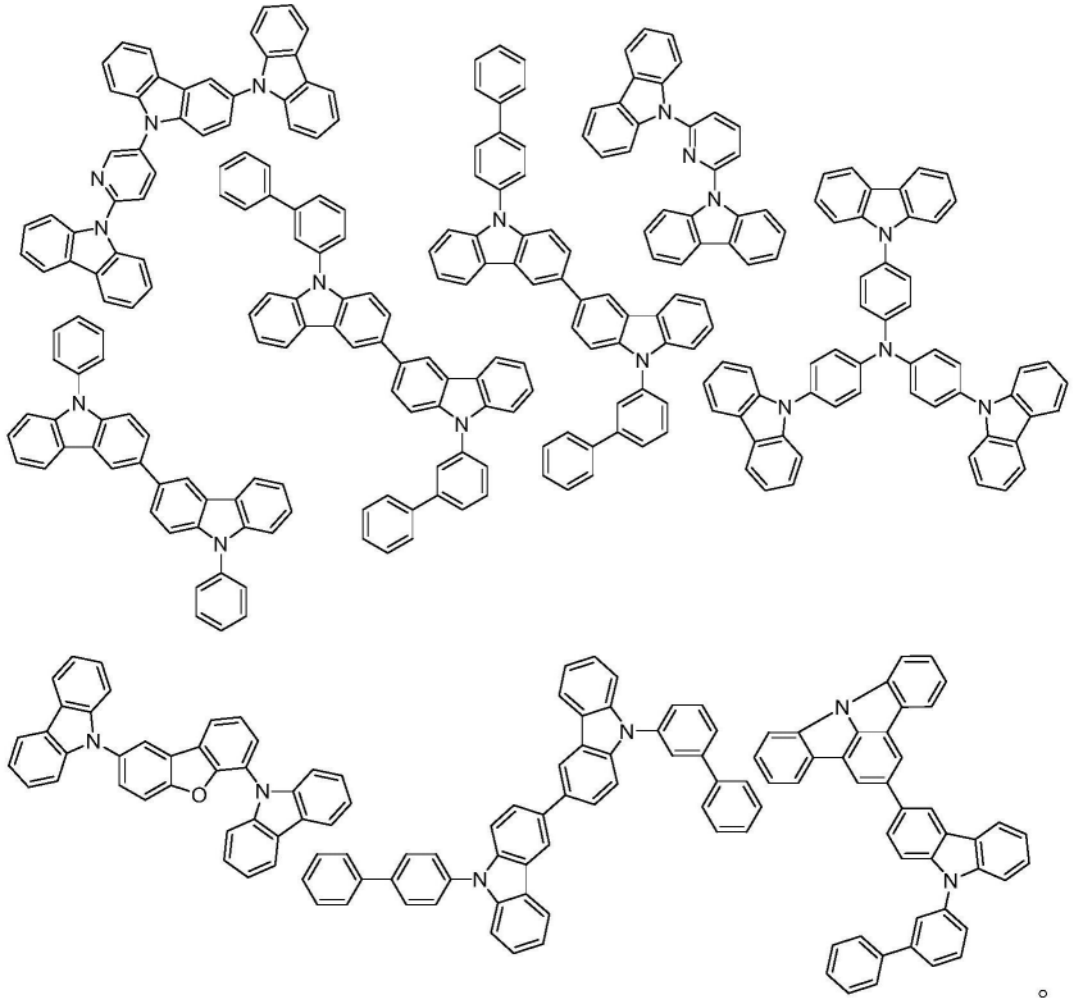


[0249]

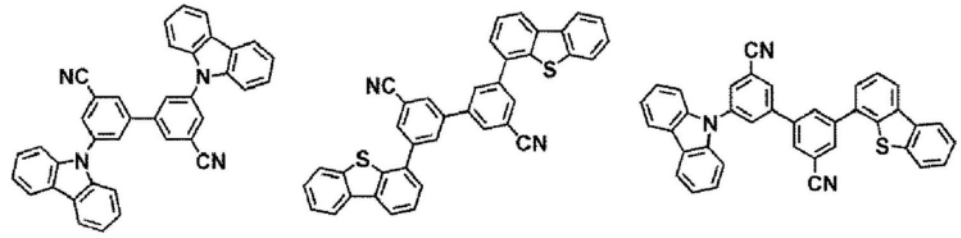


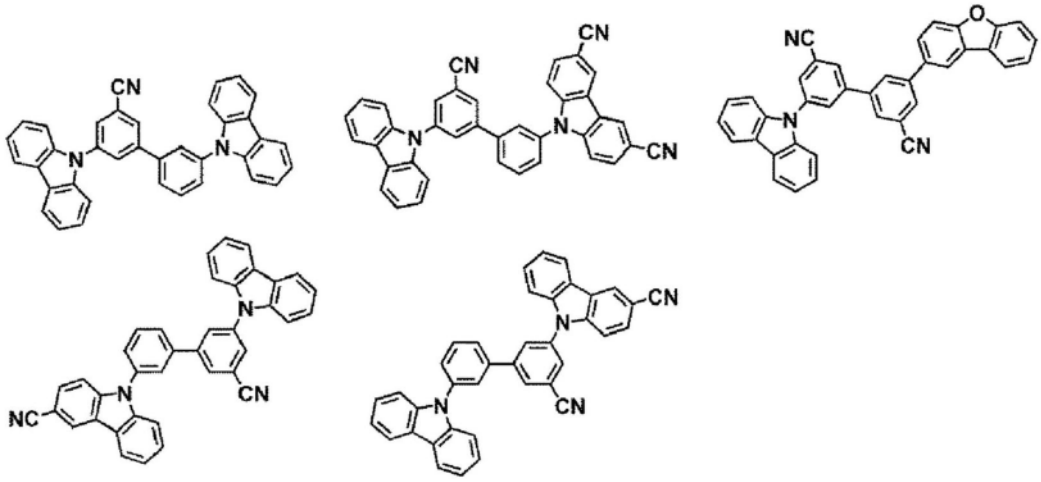
[0250]

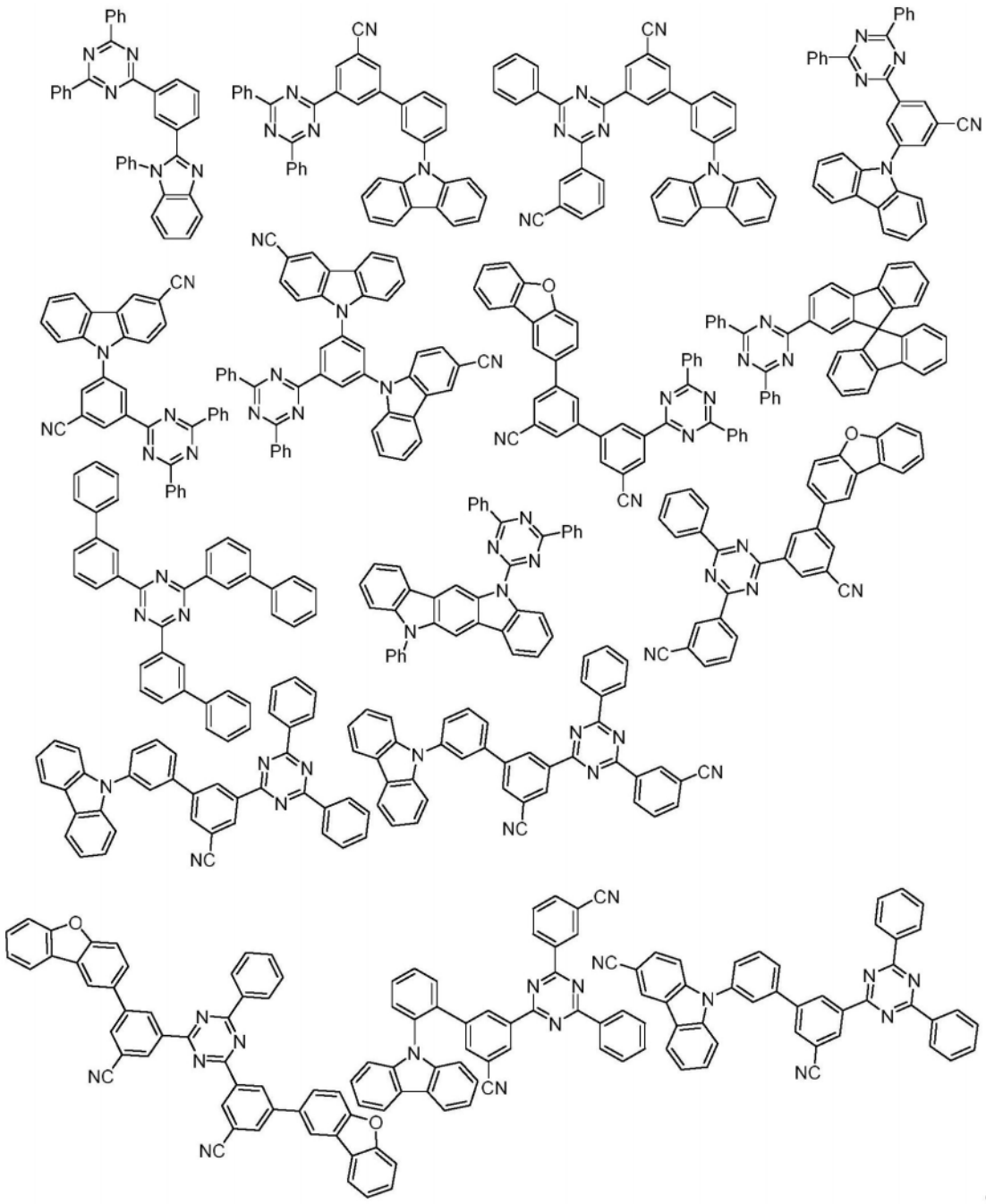


[0251] 

[0252] 在发明的上下文中作为n主体(H^N)的主体材料(H^P)的示例在以下列出：



[0253] 

[0254] 

[0255] 本领域技术人员理解的是,包括在同一层中(具体地,在同一EML中)的任何材料以及在相邻层中并且在这些相邻层之间的界面处紧密接近的材料可以一起形成激基复合物。本领域技术人员知道如何选择形成激基复合物的材料对(具体地,p主体(H^P)和n主体(H^N)的对)以及所述材料对的两种组分的包括HOMO能级和/或LUMO能级要求的选择标准。也就是说,在可以期望激基复合物形成的情况下,一种组分(例如,p主体(H^P))的最高占据分子轨道(HOMO)在能量上可以比另一组分(例如,n主体(H^N))的HOMO高至少0.20eV,并且一种组分(例如,p主体(H^P))的最低未占分子轨道(LUMO)在能量上可以比另一组分(例如,n主体(H^N))的LUMO高至少0.20eV。属于本领域技术人员公知常识的是,如果存在于光电器件(具体地,OLED)的EML中,则激基复合物可以具有发射体材料的功能,并且当向所述光电器件施加电压和电流时发射光。如从现有技术中也通常已知的,激基复合物也可以是非发射性的,并且

如果包括在光电器件的EML中,则可以例如将激发能量转移到发射体材料。

[0256] 如本领域技术人员已知的,三重态-三重态湮灭(TTA)材料可以用作主体材料(H^B)。TTA材料能够实现三重态-三重态湮灭。三重态-三重态湮灭可以优选地引起光子向上转换。因此,两个、三个或甚至更多个光子可以促进从TTA材料(H^{TTA})的最低激发三重态($T1^{TTA}$)到第一激发单重态($S1^{TTA}$)的光子向上转换。在优选的实施例中,两个光子促进从$T1^{TTA}$到$S1^{TTA}$的光子向上转换。因此,三重态-三重态湮灭可以是通过许多能量转移步骤的过程,可以将两个(或可选地大于两个)低频光子组合为一个更高频率的光子。

[0257] 可选地,TTA材料可以包括吸收部分、敏化剂部分和发射部分(或湮灭剂部分)。在该上下文中,发射部分可以例如是多环芳香族部分(诸如苯、联苯、三联苯、苯并[9,10]菲、萘、蒽、非那烯、菲、芴、芘、䓛、苝、甘菊环)。在优选的实施例中,多环芳香族部分包括蒽部分或其衍生物。敏化剂部分和发射部分可以位于两种不同的化学化合物(即,单独的化学实体)中,或者可以是被一种化学化合物所包含的两个部分。

[0258] 根据发明,三重态-三重态湮灭(TTA)材料通过三重态-三重态湮灭将能量从第一激发三重态($T1^N$)转换为第一激发单重态($S1^N$)。

[0259] 根据本发明,TTA材料的特征在于其从最低激发三重态($T1^N$)表现出三重态-三重态湮灭,导致三重态-三重态湮灭的第一激发单重态($S1^N$)具有高达$T1^N$的能量的两倍的能量。

[0260] 在本发明的一个实施例中,TTA材料的特征在于其表现出来自$T1^N$的三重态-三重态湮灭,导致$S1^N$具有是$T1^N$的能量的1.01倍至2倍、1.1倍至1.9倍、1.2倍至1.5倍、1.4倍至1.6倍或1.5倍至2倍的能量。

[0261] 如在此所使用的,术语“TTA材料”和“TTA化合物”可以互换地理解。

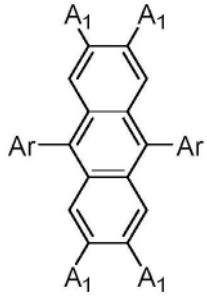
[0262] “TTA材料”通常可以在与蓝色荧光OLED相关的现有技术中找到,如由Kondakov所描述的(Philosophical Transactions of the Royal Society A:Mathematical, Physical and Engineering Sciences、2015、373:20140321)。这种蓝色荧光OLED采用诸如蒽衍生物的芳香烃作为EML中的主要组分(主体)。

[0263] 在优选的实施例中,TTA材料能够实现敏化的三重态-三重态湮灭。可选地,TTA材料可以包括一种或更多种多环芳香族结构。在优选的实施例中,TTA材料包括至少一种多环芳香族结构和至少一种另一芳香族残基。

[0264] 在优选的实施例中,TTA材料具有更大的单重态-三重态能量分裂,即,其第一激发单重态($S1^N$)与其最低激发三重态($T1^N$)之间的能量差是至少1.1倍、至少1.2倍、至少1.3倍、至少1.5倍、优选地不超过2倍。

[0265] 在发明的优选实施例中,TTA材料(H^{TTA})是蒽衍生物。

[0266] 在一个实施例中,TTA材料(H^{TTA})是下面的式4的蒽衍生物:

[0267] 

式4，

[0268] 其中，

[0269] 每个Ar彼此独立地选自于由以下组成的组：C_6-C_{60}芳基，可选地取代有选自于由C_6-C_{60}芳基、C_3-C_{57}杂芳基、卤素和C_1-C_{40}(杂)烷基组成的组中的一个或更多个残基；以及C_3-C_{57}杂芳基，可选地取代有选自于由C_6-C_{60}芳基、C_3-C_{57}杂芳基、卤素和C_1-C_{40}(杂)烷基组成的组中的一个或更多个残基；并且

[0270] 每个A_1彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；C_6-C_{60}芳基，可选地取代有选自于由C_6-C_{60}芳基、C_3-C_{57}杂芳基、卤素和C_1-C_{40}(杂)烷基组成的组中的一个或更多个残基；C_3-C_{57}杂芳基，可选地取代有选自于由C_6-C_{60}芳基、C_3-C_{57}杂芳基、卤素和C_1-C_{40}(杂)烷基组成的组中的一个或更多个残基；以及C_1-C_{40}(杂)烷基，可选地取代有选自于由C_6-C_{60}芳基、C_3-C_{57}杂芳基、卤素和C_1-C_{40}(杂)烷基组成的组中的一个或更多个残基。

[0271] 在一个实施例中，TTA材料(H^{TTA})是式4的蒽衍生物，其中，

[0272] 每个Ar彼此独立地选自于由以下组成的组：C_6-C_{20}芳基，可选地取代有选自于由C_6-C_{20}芳基、C_3-C_{20}杂芳基、卤素和C_1-C_{10}(杂)烷基组成的组中的一个或更多个残基；以及C_3-C_{20}杂芳基，可选地取代有选自于由C_6-C_{20}芳基、C_3-C_{20}杂芳基、卤素和C_1-C_{10}(杂)烷基组成的组中的一个或更多个残基；并且

[0273] 每个A_1彼此独立地选自于由以下组成的组：氢；氘；C_6-C_{20}芳基，可选地取代有选自于由C_6-C_{20}芳基、C_3-C_{20}杂芳基、卤素和C_1-C_{10}(杂)烷基组成的组中的一个或更多个残基；C_3-C_{20}杂芳基，可选地取代有选自于由C_6-C_{20}芳基、C_3-C_{20}杂芳基、卤素和C_1-C_{10}(杂)烷基组成的组中的一个或更多个残基；以及C_1-C_{10}(杂)烷基，可选地取代有选自于由C_6-C_{20}芳基、C_3-C_{20}杂芳基、卤素和C_1-C_{10}(杂)烷基组成的组中的一个或更多个残基。

[0274] 在一个实施例中，H^{TTA}是式4的蒽衍生物，其中，A_1中的至少一个是氢。在一个实施例中，H^{TTA}是式4的蒽衍生物，其中，A_1中的至少两个是氢。在一个实施例中，H^{TTA}是式4的蒽衍生物，其中，A_1中的至少三个是氢。在一个实施例中，H^{TTA}是式4的蒽衍生物，其中，A_1中的全部均是氢。

[0275] 在一个实施例中，H^{TTA}是式4的蒽衍生物，其中，Ar中的一个是选自于由苯基、萘基、菲基、芘基、苯并[9,10]菲基、二苯并蒽基、芴基、苯并芴基、蒽基、苯并萘并呋喃基、苯并萘并噻吩基、二苯并呋喃基和二苯并噻吩基组成的组中的残基，

[0276] 上述基团均可以可选地取代有选自于由C_6-C_{60}芳基、C_3-C_{57}杂芳基、卤素和C_1-C_{40}(杂)烷基组成的组中的一个或更多个残基。

[0277] 在一个实施例中，H^{TTA}是式4的蒽衍生物，其中，两个Ar是均彼此独立地选自于由苯基、萘基、菲基、芘基、苯并[9,10]菲基、二苯并蒽基、芴基、苯并芴基、蒽基、苯并萘并呋喃基、苯并萘并噻吩基、二苯并呋喃基和二苯并噻吩基组成的组中的残基，

[0278] 上述基团均可以可选地取代有选自于由C_6-C_{60}芳基、C_3-C_{57}杂芳基、卤素和C_1-C_{40}(杂)烷基组成的组中的一个或更多个残基。

[0279] 包括根据发明的有机分子的组合物

[0280] 发明的一个方面涉及一种包括至少一种根据发明的有机分子的组合物。发明的一个方面涉及该组合物在光电器件(优选地,OLED)中(具体地,在所述光电器件的EML中)的应用。

[0281] 以下,当描述上述组合物时,在一些情况下以百分比的形式参考相应的组合物中的某些材料的含量。将注意的是,除非针对特定实施例另有说明,否则全部百分比指重量百分比,其具有与重量百分比或重量%((重量/重量),(w/w),wt%)相同的含义。理解的是,当例如说明一种或更多种根据发明的有机分子在特定组合物中的含量是示例性30%时,这意指一种或更多种根据发明的有机分子的总重量(即,这些分子组合中的所有)是30重量%,即,占相应的组合物的总重量的30%。理解的是,每当通过以重量%计提供其组分的优选含量来指定组合物时,全部组分的总含量相加达100重量%(即,组合物的总重量)。

[0282] 当以下描述提及包括至少一种根据发明的有机分子的组合物的发明的实施例时,将参照当在光电器件中(优选地在光电器件的EML中,最优选地在OLED的EML中)使用所述组合物时可以在这些组合物内的组分之间发生的能量转移过程。本领域技术人员理解的是,当在光电器件的EML中使用组合物时,这种激发能量转移过程可以增强发射效率。

[0283] 当描述包括至少一种根据本发明的有机分子的组合物时,还将指出某些材料与其它材料“不同”。这意指彼此“不同”的材料不具有相同的化学结构。

[0284] 在一个实施例中,组合物包括以下组分或由以下组分组成:

[0285] (a)一种或更多种根据发明的有机分子;以及

[0286] (b)一种或更多种与(a)的有机分子不同的主体材料(H^B);以及

[0287] (c)可选地,一种或更多种溶剂。

[0288] 在一个实施例中,组合物包括以下组分或由以下组分组成:

[0289] (a)一种或更多种根据发明的有机分子;以及

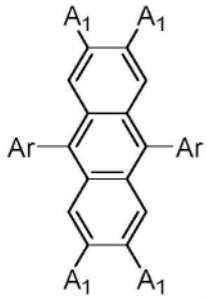
[0290] (b)一种或更多种与(a)的有机分子不同的主体材料(H^B),

[0291] 其中,组合物中的主体材料(H^B)的以重量%计的分数高于根据发明的有机分子的以重量%计的分数,优选地,组合物中的主体材料(H^B)的以重量%计的分数是根据发明的有机分子的以重量%计的分数的两倍高。

[0292] 在一个实施例中,组合物包括以下组分或由以下组分组成:

[0293] (a)0.1重量%至30重量%(优选地0.8重量%至15重量%,具体地1.5重量%至5重量%)的根据发明的有机分子;以及

[0294] (b)作为根据下面的式4的主体材料(H^B)的TTA材料:

[0295] 

式4。

[0296] 在一个实施例中,组合物包括以下组分或由以下组分组成:

[0297] (a)根据发明的有机分子;以及

[0298] (b)与(a)的有机分子不同的主体材料(H^B);

[0299] (c)TADF材料(E^B)和/或磷光材料(P^B)。

[0300] 在一个实施例中,组合物包括以下组分或由以下组分组成:

[0301] (a)0.1重量%至20重量%(优选地0.5重量%至12重量%,具体地1重量%至5重量%)的根据发明的有机分子;以及

[0302] (b)0重量%至98.8重量%(优选地35重量%至94重量%,具体地60重量%至88重量%)的一种或更多种与根据发明的有机分子不同的主体材料(H^B);以及

[0303] (c)0.1重量%至20重量%(优选地0.5重量%至10重量%,具体地1重量%至3重量%)的一种或更多种与(a)的有机分子不同的磷光材料(P^B);以及

[0304] (d)1重量%至99.8重量%(优选地5重量%至50重量%,具体地10重量%至30重量%)的一种或更多种与(a)的有机分子不同的TADF材料(E^B);以及

[0305] (e)0重量%至98.8重量%(优选地0重量%至59重量%,具体地0重量%至28重量%)的一种或更多种溶剂。

[0306] 在又一方面,发明涉及一种光电器件,该光电器件包括这里所描述的类型的有机分子或组合物,更具体地,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(更具体地,未与外部密封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。

[0307] 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。

[0308] 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。

[0309] 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。

[0310] 当光电器件是OLED时,其可以例如具有以下层结构:

[0311] 1、基底

[0312] 2、阳极层,A

[0313] 3、空穴注入层,HIL

[0314] 4、空穴传输层,HTL

[0315] 5、电子阻挡层,EBL

[0316] 6、发射层,EML

[0317] 7、空穴阻挡层,HBL

[0318] 8、电子传输层,ETL

[0319] 9、电子注入层,EIL

[0320] 10、阴极层,C,

[0321] 其中,OLED仅可选地包括选自于HIL、HTL、EBL、HBL、ETL和EIL的组中的每个层,不同的层可以合并,OLED可以包括以上所定义的每个层类型中的大于一个的层。

[0322] 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,该保护层保护光电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。

[0323] 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:

[0324] 1、基底

[0325] 2、阴极层,C

[0326] 3、电子注入层,EIL

[0327] 4、电子传输层,ETL

[0328] 5、空穴阻挡层,HBL

[0329] 6、发射层,EML

[0330] 7、电子阻挡层,EBL

[0331] 8、空穴传输层,HTL

[0332] 9、空穴注入层,HIL

[0333] 10、阳极层,A,

[0334] 其中,OLED仅可选地包括选自于HIL、HTL、EBL、HBL、ETL和EIL的组中的每个层,不同的层可以合并,OLED可以包括以上所定义的每个层类型中的大于一个的层。

[0335] 在发明的一个实施例中,光电器件是可以具有堆叠结构的OLED。在这种结构中,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掺杂层组成且一个CGL的n掺杂层典型地定位为靠近阳极层。

[0336] 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、阻挡层或传输层的其它层。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。

[0337] 基底可以由任何材料或材料的组合形成。最常见地,玻璃载片被用作基底。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)透明膜的材料构成。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。

[0338] 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(1,4,5,8,9,12-六氮杂苯并菲-六甲腈)和/或螺-NPD(N,N'-二苯基-N,N'-双(1-萘基)-9,9'-螺二芴-2,7-二胺)。

[0339] 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(N,N'-双(萘-1-基)-N,N'-双(苯基)-2,2'-二甲基联苯胺)、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构成的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。

[0340] 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)、Tris-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)。

[0341] 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)能级和第一单重态(S1)能级高的第一三重态(T1)能级和第一单重态(S1)能级。

[0342] 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包括恰好一种根据发明的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。

[0343] 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体。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)苯并[9,10]菲)、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)。

[0344] HBL可以例如包括BCP(2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-菲咯啉,即,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)。

[0345] 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、Li、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、Li、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。

[0346] 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。

[0347] 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)。

[0348] 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)。这种发射体分子(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)。

[0349] 可选地,光电器件(例如,OLED)可以例如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一种或更多种发射绿光和/或红光的发射体分子。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(energy transmittance)。

[0350] 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:

[0351] 紫色:>380nm至420nm的波长范围;

[0352] 深蓝色:>420nm至480nm的波长范围;

[0353] 天蓝色:>480nm至500nm的波长范围;

[0354] 绿色:>500nm至560nm的波长范围;

[0355] 黄色:>560nm至580nm的波长范围;

[0356] 橙色:>580nm至620nm的波长范围;

[0357] 红色:>620nm至800nm的波长范围。

[0358] 对于发射体分子,这种颜色指发射最大值。因此,例如,深蓝色发射体具有在>420nm至480nm的范围内的发射最大值,天蓝色发射体具有在>480nm至500nm的范围内的发射最大值,绿色发射体具有在>500nm至560nm的范围内的发射最大值,红色发射体具有在>620nm至800nm的范围内的发射最大值。

[0359] 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。其通常将高于420nm、优选地高于430nm、更优选地高于440nm或者甚至高于450nm。

[0360] 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。其通常将高于500nm、更优选地高于510nm、甚至更优选地高于515nm或者甚至高于520nm。

[0361] 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。

[0362] 本发明的又一方面涉及一种OLED,该OLED发射具有接近CIEx(=0.170)和CIEy(=0.797)色坐标的CIEx和CIEy色坐标的光,CIEx(=0.170)和CIEy(=0.797)色坐标作为如由ITU-R Recommendation BT.2020(Rec.2020)所定义的基色绿色(CIEx=0.170,CIEy=0.797),并且因此该OLED适用于在超高清(UHD)显示器(例如,UHD-TV)中应用。在本文中,术语"接近"指在本段末尾提供的CIEx和CIEy坐标的范围。在商业应用中,通常使用顶部发射(顶部电极是透明的)器件,而如在整个本申请中使用的测试器件表示底部发射器件(底部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0.05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。

[0363] 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%、甚至大于17%或甚至大于20%的外量子效率,并且/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,并且/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小时或甚至大于1000小时的LT97值。

[0364] 本发明的又一方面涉及一种OLED,该OLED在不同的颜色点处发射光。根据本发明,OLED发射具有窄发射带(小半峰全宽(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。

[0365] 在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)。

[0366] 在又一方面,发明涉及一种用于制造光电器件的方法。在这种情况下,使用发明的有机分子。

[0367] 在又一方面,发明涉及一种用于产生在510nm至550nm(优选地520nm至540nm)的波长范围处的光的方法,该方法包括以下步骤:

[0368] (i)提供包括发明的有机分子的光电器件;以及

[0369] (ii)向所述光电器件施加电流。

[0370] 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:

[0371] -通过升华工艺的方式制备;

[0372] -通过有机气相沉积工艺的方式制备;

[0373] -通过载气升华工艺的方式制备;或者

[0374] -溶液处理或印刷。

[0375] 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

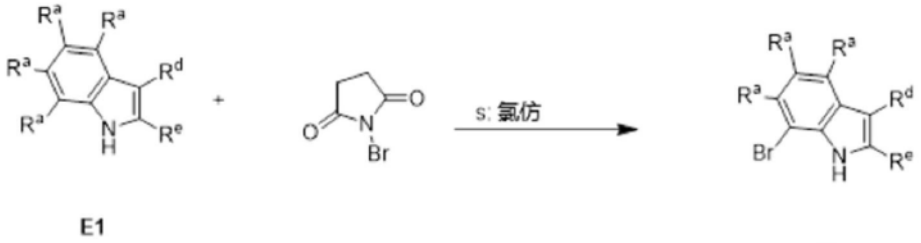
同的沉积方法来沉积各个层。

[0376] 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。

[0377] 示例

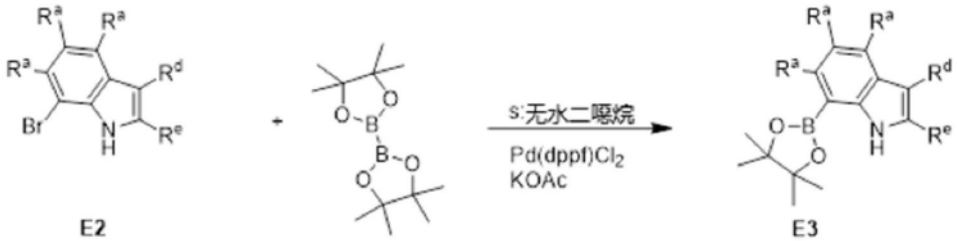
[0378] 一般合成方案I

[0379] (以Z为直连键为例,其中,以下合成方案也可以应用于不同于直连键的Z)

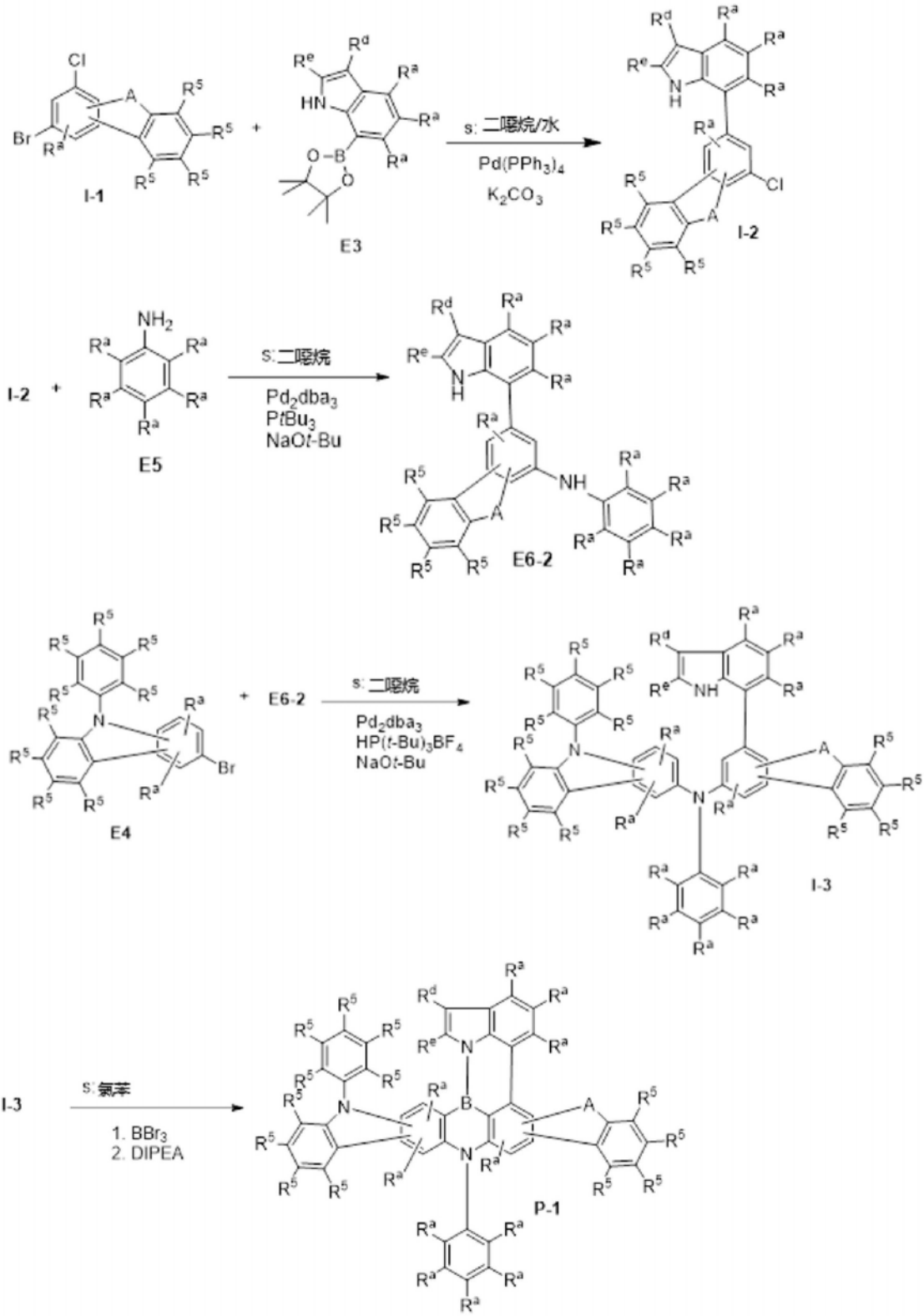


E1 E2

[0380]



E2 E3



[0381]

[0382] 用于合成的一般步骤:

[0383] AAV1:

[0384] 将E1(1.00当量)溶解在无水氯仿中,并且在氮气氛下在0℃下分批加入N-溴代琥珀酰亚胺(CAS:128-08-5,1.05当量)。将混合物在室温下搅拌2小时,随后在氯仿与水之间萃取,并且减压浓缩合并的有机层。通过柱色谱法或重结晶纯化粗产物,获得作为固体的

E2。

[0385] AAV2：

[0386] 将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)(Pd(dppf)Cl_2,CAS:72287-26-4,0.02当量)和乙酸钾(KOAc;CAS:127-08-2,3.00当量)在氮气氛下在无水二噁烷中在95℃下搅拌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。通过柱色谱法或重结晶纯化粗产物,获得作为固体的E3。

[0387] AAV3：

[0388] 将E3(1.00当量)、I-1(1.05当量)、四(三苯基膦)钯(0)(Pd(PPh_3)$_4$,CAS:14221-01-3,0.05当量)和碳酸钾(K_2CO_3;CAS:584-08-7,2.00当量)在氮气氛下在二噁烷/水(按体积计10:1)中在80℃下搅拌直至反应完成(TLC监测)。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。通过柱色谱法或重结晶纯化粗产物,获得作为固体的I-2。

[0389] AAV4：

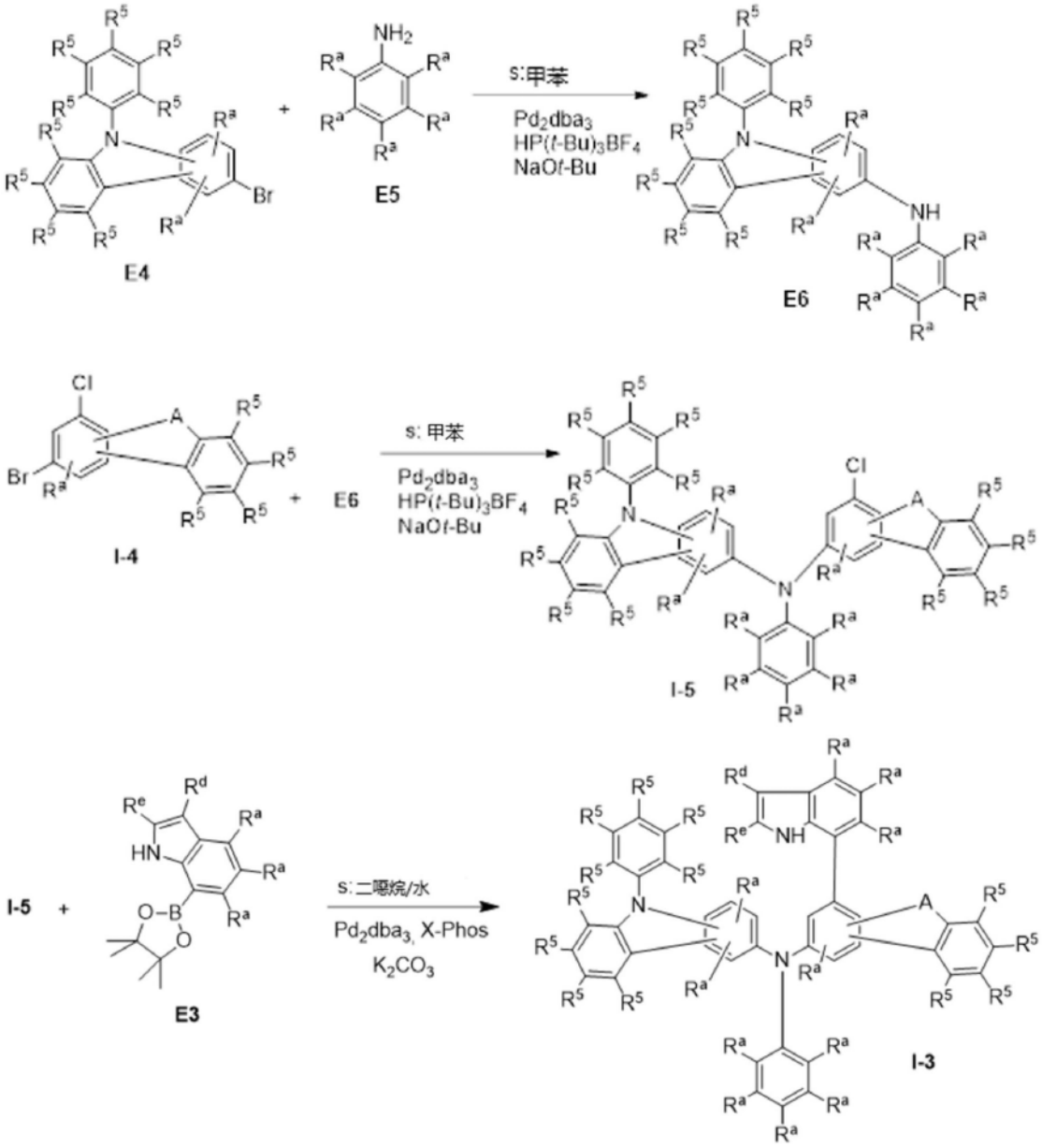
[0390] 将I-2(1.00当量)、E5(1.60当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(Pd_2dba_3,CAS:51364-51-3,0.02当量)、叔丁醇钠(NaOt-Bu,CAS:865-48-5,2.40当量)和三叔丁基膦(Pt-Bu_3;CAS:13716-12-6,0.08当量)在氮气氛下在无水二噁烷中在95℃下搅拌直至反应完成(TLC监测)。在冷却至室温(rt)之后,将反应混合物在乙酸乙酯与盐水之间萃取,并且减压浓缩合并的有机层。通过柱色谱法或通过重结晶纯化粗物质,获得作为固体的E6-2。

[0391] AAV5:将E6-2(1.00当量)、E4(1.12当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.015当量)、叔丁醇钠(NaOt-Bu,CAS:865-48-5,2.20当量)和三叔丁基膦四氟硼酸盐(HP(t-Bu)$_3$$BF_4$;CAS:131274-22-1,0.06当量)在氮气氛下在无水二噁烷中在80℃下搅拌直至反应完成(TLC监测)。在冷却至室温(rt)之后,将反应混合物在乙酸乙酯与盐水之间萃取,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I-3。

[0392] AAV6:在氮气下,在无水氯苯中,使I-3(1.00当量)与BBr_3(4.00当量,CAS:10294-33-4)在-10℃下反应1小时,在rt下反应1小时,在60℃下反应5小时。然后,将混合物冷却至rt,随后加入DIPEA(10.0当量,CAS:7087-68-5)。加入水,分离相,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,以得到作为固体的化合物P-1。

[0393] 一般合成方案II

[0394]



[0395] 用于合成的一般步骤:

[0396] AAV7:

[0397] 将E4(1.00当量)、E5(1.60当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS:51364-51-3,0.005当量)、叔丁醇钠(NaOt-Bu,CAS:865-48-5,2.10当量)和三叔丁基膦四氟硼酸盐(HP(t-Bu)$_3$BF$_4$;CAS:131274-22-1,0.02当量)在氮气氛下在无水甲苯中在60℃下搅拌直至反应完成(TLC监测)。在冷却至室温(rt)之后,将反应混合物在乙酸乙酯与盐水之间萃取,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E6。

[0398] AAV8:

[0399] 将I-4(1.15当量)、E6(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(NaOt-Bu,CAS:865-48-5,2.00当量)和三叔丁基膦四氟硼酸盐(HP(t-Bu)$_3$BF$_4$;CAS:131274-22-1,0.08当量)在氮气氛下在无水甲苯中在80℃下搅拌直至反应完成(TLC监测)。在冷却至室温(rt)之后,将反应混合物在乙酸乙酯与盐水之间萃取,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I-5。

[0400] AAV9:

[0401] 将E3(1.25当量)、I-5(1.00当量)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(CAS号51364-51-3,0.04当量)、X-Phos(CAS号564483-18-7,0.16当量)和K_2CO_3(CAS号584-08-7,2.50当量)在氮气氛下在二噁烷/水(按体积计10:1)中在80℃下搅拌直至反应完成(TLC监测)。在冷却至室温(rt)之后,将反应混合物在乙酸乙酯与水之间萃取,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I-3。

[0402] 循环伏安法

[0403] 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。

[0404] 密度泛函理论计算

[0405] 采用BP86泛函和一致性检验方法(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程序包用于所有计算。

[0406] 光物理测量

[0407] 样品预处理:旋涂。

[0408] 仪器:Spin150,SPS euro。

[0409] 样品浓度是10mg/mL,溶解在合适的溶剂中。

[0410] 程序:1)在400U/min下3秒。2)在1000U/min下以1000Upm/s 20秒。3)在4000U/min下以1000Upm/s 10秒。在涂覆之后,将膜在70℃下干燥1分钟。

[0411] 吸收测量

[0412] 使用Thermo Scientific Evolution 201UV-可见分光光度计来确定样品在270nm以上的波长区域中的吸收最大值的波长。所述波长用作用于光致发光光谱和光致发光量子产率测量的激发波长。

[0413] 光致发光光谱

[0414] 使用配备有150W氙弧灯、激发和发射单色器的Horiba Scientific,Modell FluoroMax-4来记录稳态发射光谱。将样品放置在比色皿中并且在测量期间用氮冲洗。

[0415] 光致发光光谱和时间相关单光子计数(TCSPC)

[0416] 通过配备有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。

[0417] 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。

[0418] 激发源:

[0419] 纳米LED 370(波长:371nm,脉冲持续时间:1.1ns)

[0420] 纳米LED 290(波长:294nm,脉冲持续时间:<1ns)

[0421] 光谱LED 310(波长:314nm)

[0422] 光谱LED 355(波长:355nm)。

[0423] 使用软件套件DataStation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。

[0424] 光致发光量子产率测量

[0425] 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版确定光致发光量子产率和CIE坐标。

[0426] 发射最大值以nm给出,光致发光量子产率Φ_{PL}以%给出,CIE坐标作为x值、y值。

[0427] 使用以下协议确定PLQY:

[0428] 1)质量保证:使用乙醇中的蒽(已知浓度)作为参考

[0429] 2)激发波长:确定有机分子的吸收最大值,使用该波长激发有机分子

[0430] 3)测量

[0431] 对于溶液或膜的样品,在氮气氛下测量光致发光量子产率。使用等式计算光致发光量子产率:

[0432] $$\Phi_{PL} = \frac{n_{光子}^{发射}}{n_{光子}^{吸收}} = \frac{\int\frac{\lambda}{hc}\left[Int_{发射}^{样品}(\lambda) - Int_{吸收}^{样品}(\lambda)\right]d\lambda}{\int\frac{\lambda}{hc}\left[Int_{发射}^{参考}(\lambda) - Int_{吸收}^{参考}(\lambda)\right]d\lambda},$$

[0433] 其中,$n_{光子}$表示光子计数,Int.表示强度。

[0434] 光电器件的制造和表征

[0435] 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)。如果层包含大于一种的化合物,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。

[0436] 使用标准方法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%的时间点对应,类似地,LT80值与测量的亮度降低至初始亮度的80%的时间点对应,LT95值与测量的亮度降低至初始亮度的95%的时间点对应等。

[0437] (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:

[0438] $$\mathrm{LT80}\left(500\frac{cd^2}{m^2}\right) = \mathrm{LT80}(L_0)\left(\frac{L_0}{500\frac{cd^2}{m^2}}\right)^{1.6},$$

[0439] 其中,L_0表示施加电流密度下的初始亮度。

[0440] 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。

[0441] HPLC-MS:

[0442] 通过具有MS检测器(Thermo LTQ XL)的安捷伦(Agilent)(1100系列)对HPLC进行HPLC-MS分析。

[0443] 示例性地,典型的HPLC法如下:在HPLC中使用来自安捷伦的反相色谱柱4.6mm×

150mm,粒径3.5μm(ZORBAX Eclipse Plus 95Å C18,4.6mm×150mm、3.5μm HPLC柱)。在室温(rt)下以以下梯度进行HPLC-MS测量:

[0444]

流速[mL/min]	时间[分钟]	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

[0445] 使用以下溶剂混合物:

[0446]

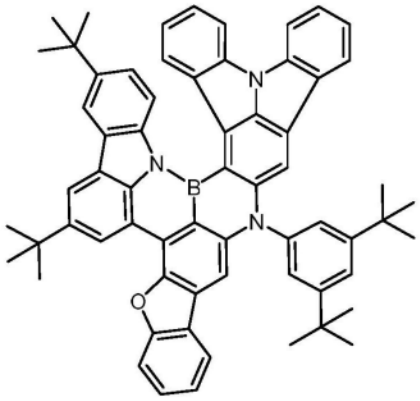
溶剂A:	H_2O(90%)	MeCN(10%)
溶剂B:	H_2O(10%)	MeCN(90%)
溶剂C:	THF(50%)	MeCN(50%)

[0447] 从具有0.5mg/mL的浓度的分析物的溶液中取出5μL的进样量用于测量。

[0448] 使用APCI(大气压化学电离)源在正(APCI+)或负(APCI-)电离模式下进行探头的电离。

[0449] 示例1

[0450]



[0451] 根据以下步骤合成示例1:

[0452] AAV1(99%产率),其中,起始材料E1由3,6-二叔丁基咔唑(CAS号37500-95-1)表示;

[0453] AAV2(63%产率);

[0454] AAV3(87%产率),其中,化合物I-1由4-溴-2-氯二苯并[b,d]呋喃(CAS号2087889-86-7)表示;

[0455] AAV4(47%产率),其中,起始材料E5由3,5-二叔丁基苯胺(CAS号2380-36-1)表示;

[0456] AAV5(83%产率),其中,起始材料E4由2-溴吲哚并[3,2,1-jk]咔唑(CAS号1174032-81-5)表示;

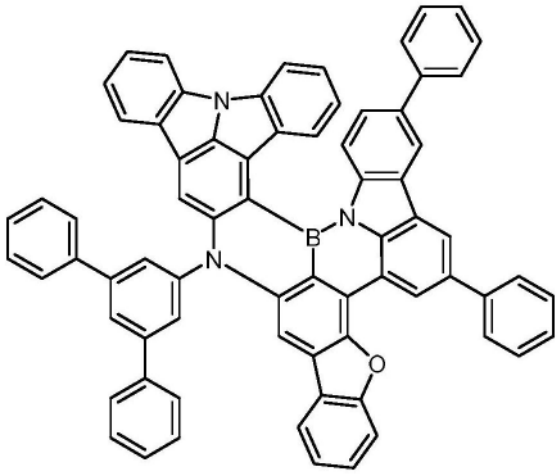
[0457] 以及AAV6(49%产率)

[0458] MS(LC-MS,APPI离子源):897m/z,rt处于9.20分钟。

[0459] 示例1(0.001mg/mL,在甲苯中)的发射最大值在520nm处,半峰全宽(FWHM)为19nm,CIEx坐标为0.24,CIEy坐标为0.70。光致发光量子产率(PLQY)为69%。

[0460] 示例1(0.01mg/mL,在甲苯中)的吸收最大值在513nm处,并且在吸收最大值处具有39000$M^{-1}cm^{-1}$的吸收系数。

[0461] 示例2

[0462] 

[0463] 根据以下步骤合成示例2:

[0464] AAV1(85%产率),其中,起始材料E1由3,6-二苯基咔唑(CAS号56525-79-2)表示;

[0465] AAV2(54%产率);

[0466] AAV7(38%产率),其中,起始材料E4和E5由2-溴吲哚并[3,2,1-jk]咔唑(CAS号1174032-81-5)和3,5-二苯基苯胺(CAS号63006-66-6)表示;

[0467] AAV8(91%产率),其中,化合物I-4由2-溴-4-氯-二苯并呋喃(CAS号1960445-63-9)表示;

[0468] AAV9(66%产率);

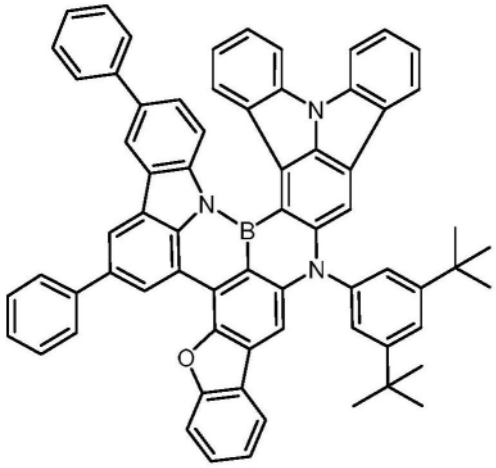
[0469] 和AAV6(19%产率)

[0470] MS(LC-MS,APPI离子源):977m/z,rt处于10.41分钟。

[0471] 示例2(0.001mg/mL,在甲苯中)的发射最大值在521nm处,半峰全宽(FWHM)为19nm,CIEx坐标为0.24,CIEy坐标为0.69。光致发光量子产率(PLQY)为80%。

[0472] 示例2(0.01mg/mL,在甲苯中)的吸收最大值在514nm处,并且在吸收最大值处具有51000$M^{-1}cm^{-1}$的吸收系数。

[0473] 示例3

[0474] 

[0475] 根据以下步骤合成示例3：

[0476] AAV1(85％产率)，其中，起始材料E1由3,6-二苯基咔唑(CAS号56525-79-2)表示；

[0477] AAV2(54％产率)；

[0478] AAV3(56％产率)，其中，化合物I-1由4-溴-2-氯二苯并[b,d]呋喃(CAS号2087889-86-7)表示；

[0479] AAV4(83％产率)，其中，起始材料E5由3,5-二叔丁基苯胺(CAS号2380-36-1)表示；

[0480] AAV5(68％产率)，其中，化合物E4由2-溴吲哚并[3,2,1-jk]咔唑(CAS号1174032-81-5)表示；

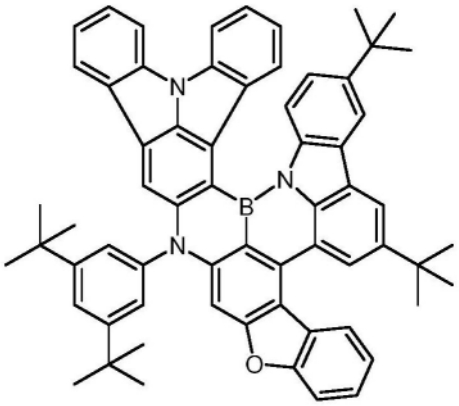
[0481] 以及AAV6(32％产率)

[0482] MS(LC-MS,APCI离子源)：937m/z，rt处于8.72分钟。

[0483] 示例3(0.001mg/mL，在甲苯中)的发射最大值在524nm处，半峰全宽(FWHM)为19nm，CIEx坐标为0.26，CIEy坐标为0.70。光致发光量子产率(PLQY)为80％。

[0484] 示例3(0.01mg/mL，在甲苯中)的吸收最大值在517nm处，并且在吸收最大值处具有49000$M^{-1}cm^{-1}$的吸收系数。

[0485] 示例4

[0486] 

[0487] 根据以下步骤合成示例4：

[0488] AAV1(99％产率)，其中，起始材料E1由3,6-二叔丁基咔唑(CAS号37500-95-1)表示；

[0489] AAV2(63％产率)；

[0490] AAV3(16％产率)，其中，化合物I-1由1-溴-3-氯二苯并[b,d]呋喃(CAS号2043962-13-4)表示；

[0491] AAV7(73％产率)，其中，起始材料E4和E5由2-溴吲哚并[3,2,1-jk]咔唑(CAS号1174032-81-5)和3,5-二叔丁基苯胺(CAS号2380-36-1)表示；

[0492] AAV8(28％产率)；

[0493] 以及AAV6(52％产率)

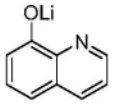
[0494] MS(LC-MS,APCI离子源)：897m/z，rt处于9.31分钟。

[0495] 示例4(0.001mg/mL，在甲苯中)的发射最大值在509nm处，半峰全宽(FWHM)为24nm，CIEx坐标为0.19，CIEy坐标为0.65。光致发光量子产率(PLQY)为55％。

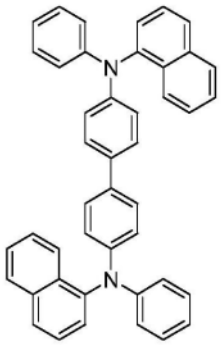
[0496] 示例4(0.01mg/mL，在甲苯中)的吸收最大值在499nm处，并且在吸收最大值处具有30000$M^{-1}cm^{-1}$的吸收系数。

[0497] 示例OLED器件D1

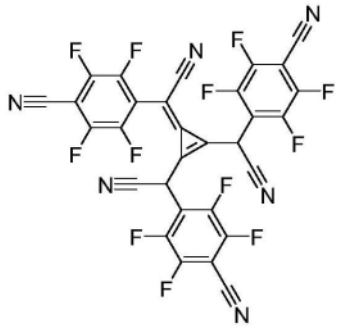
[0498] 堆叠材料



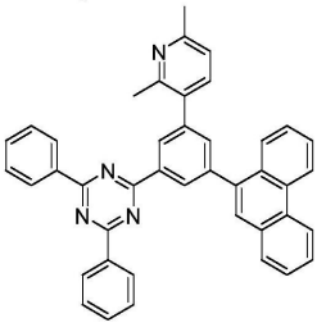
Liq



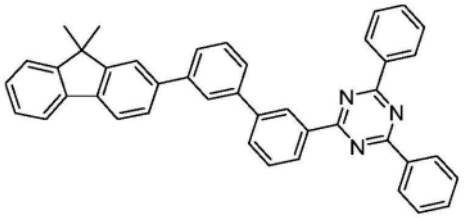
NPB



NDP-9

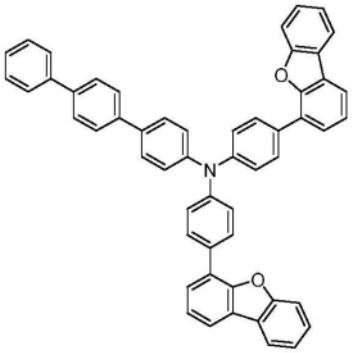


ETM1（电子传输材料）

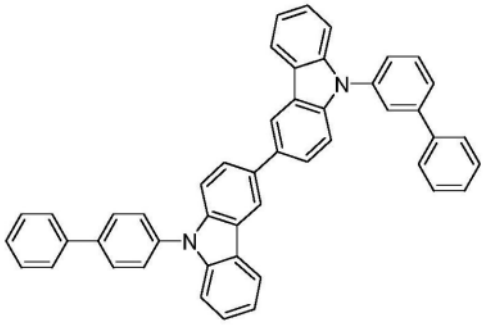


ETM2（电子传输材料）

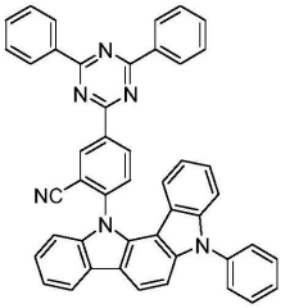
[0499]



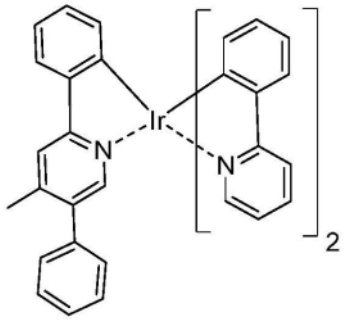
EBM1（电子阻挡材料）



Host1（主体材料）



TADF1（TADF 材料）



Phos1（磷光材料）

[0500] 在OLED D1中测试示例2,所述OLED D1用以下层结构制造:

[0501]

层号	厚度	D1
9	100nm	Al
8	2nm	Liq

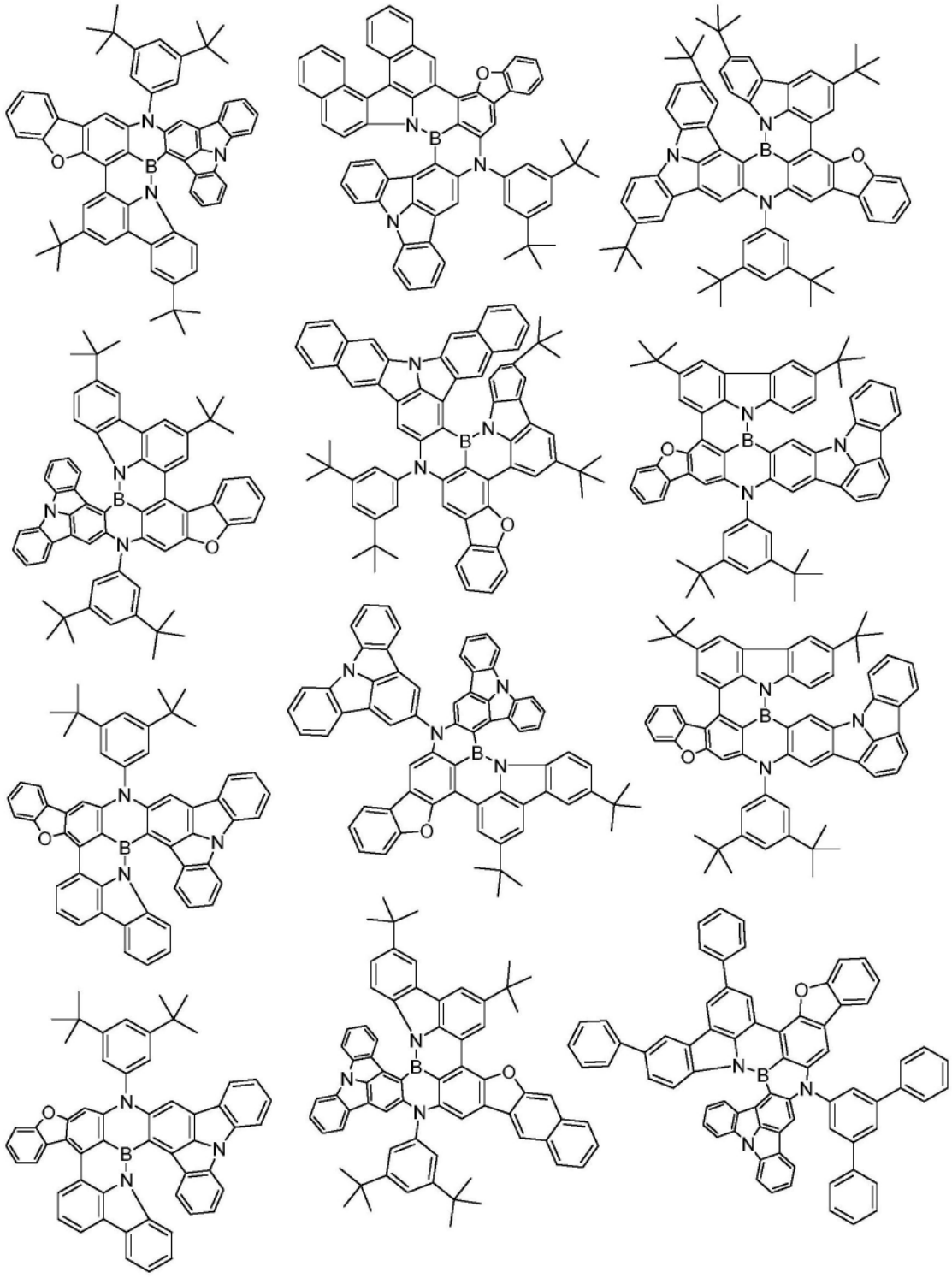
[0502]

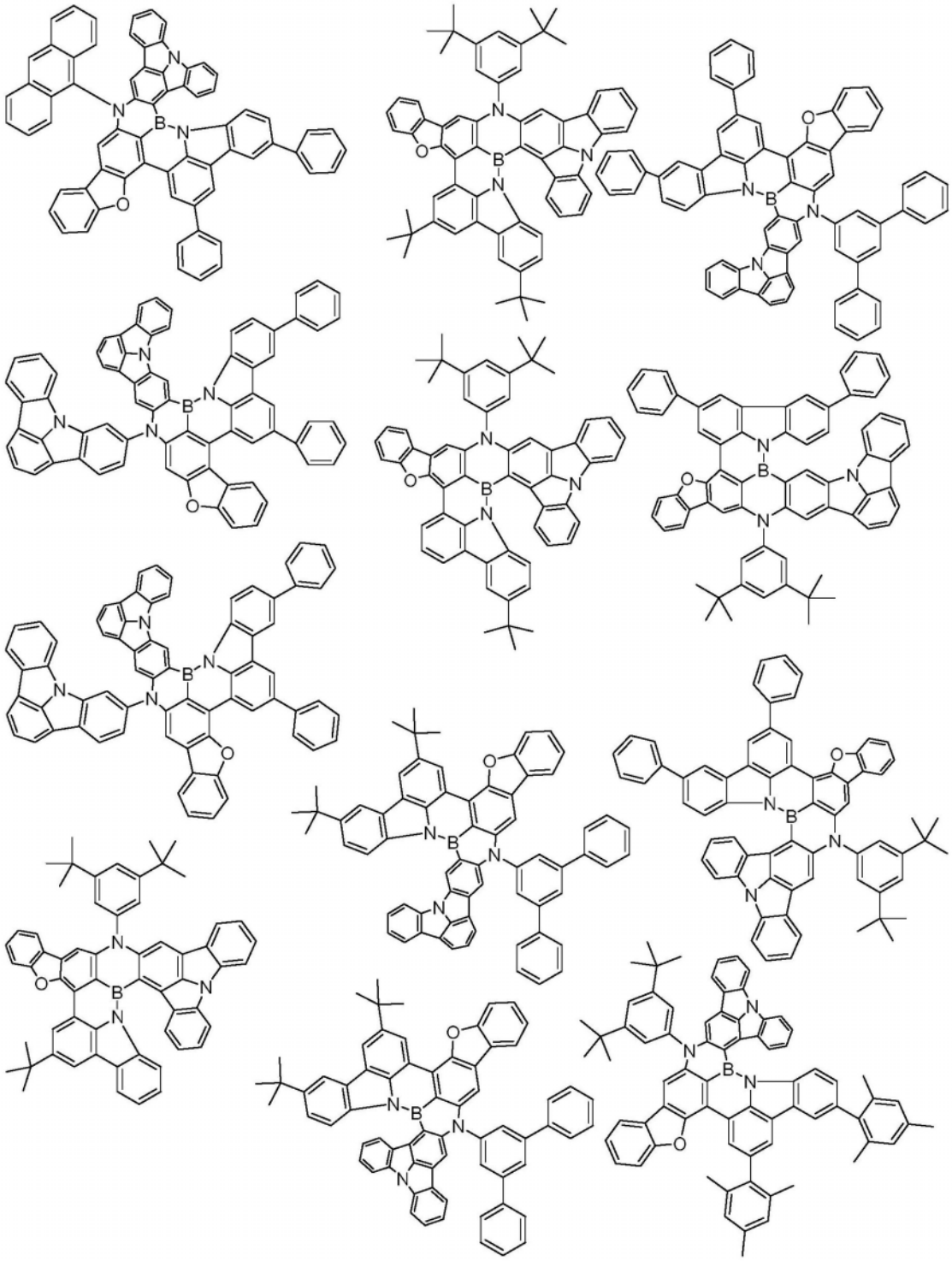
7	27nm	ETM1（50%）：Liq（50%）
6	5nm	ETM2
5	60nm	Host1（66.3%）：TADF1（30%）：Phos1（3%）：示例 **2**（0.7%）
4	10nm	EBM1
3	44nm	NPB
2	9nm	NPB（95%）：NDP-9（5%）
1	50nm	ITO
基底		玻璃

[0503] OLED D1在1000cd/m^2下产生20.4％的外量子效率(EQE)。发射最大值在532nm处，在5.2V下具有28nm的FWHM。对应的CIEx值为0.32,CIEy值为0.65。

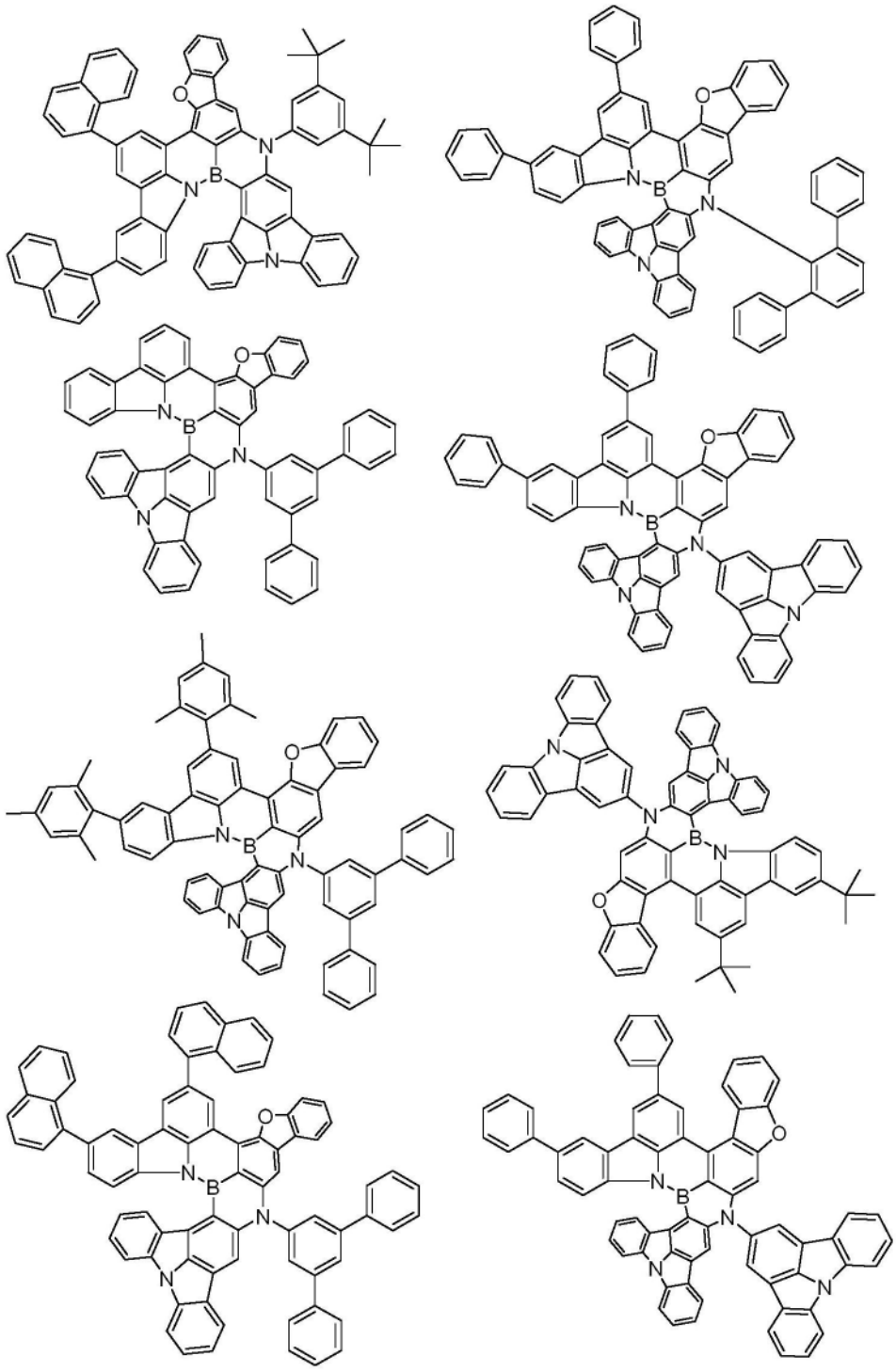
[0504] 发明的有机分子的附加示例

[0505]

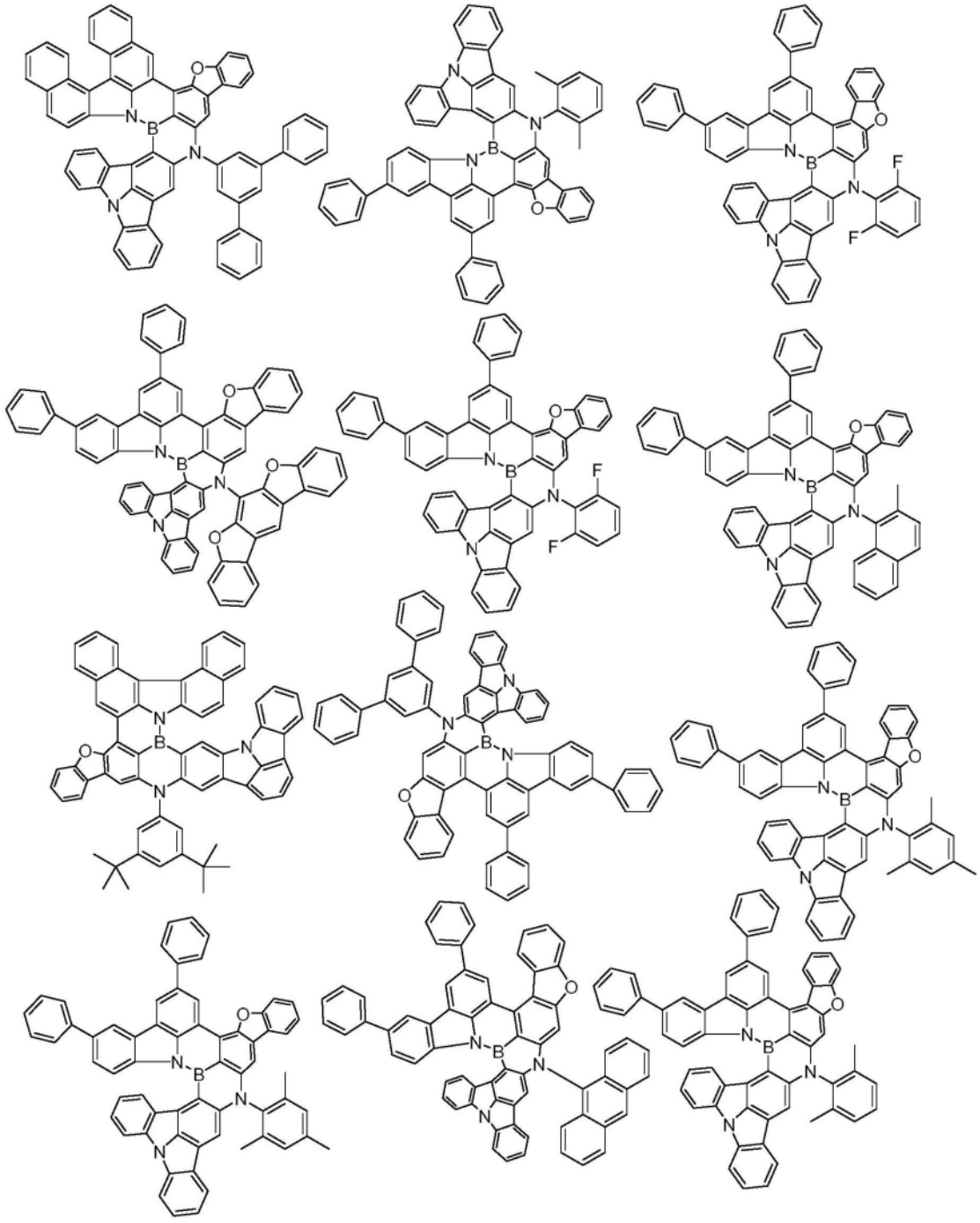


[0506] 

[0507]



[0508]



[0509] 