



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 113646315 A

(43) 申请公布日 2021.11.12

(21) 申请号 202080026766.0

(22) 申请日 2020.04.08

(30) 优先权数据

19168728.4 2019.04.11 EP

(85) PCT国际申请进入国家阶段日

2021.09.30

(86) PCT国际申请的申请数据

PCT/EP2020/059951 2020.04.08

(87) PCT国际申请的公布数据

W02020/208051 EN 2020.10.15

(71) 申请人 默克专利有限公司

地址 德国达姆施塔特

(72) 发明人 伊洛娜·施滕格尔 阿伦·莱克纳

拉拉-伊莎贝尔·罗德里格斯

夏洛特·沃尔特 阿梅尔·梅基奇

(74) 专利代理机构 中原信达知识产权代理有限  
责任公司 11219

代理人 郭国清 宫方斌

(51) Int.Cl.

*G07F 5/02* (2006.01)

*H01L 51/50* (2006.01)

权利要求书13页 说明书79页 附图2页

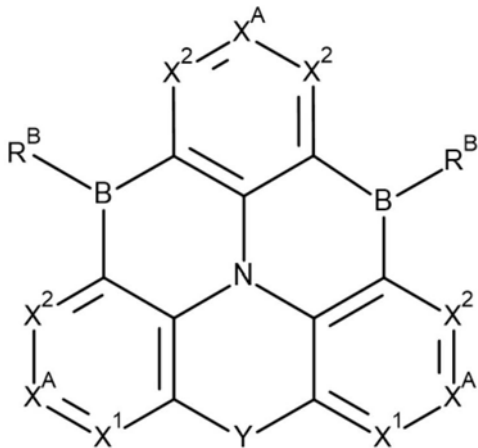
(54) 发明名称

用于有机电致发光器件的材料

(57) 摘要

本发明涉及适用于电子器件,特别是有机电致发光器件的式(1)化合物,以及包含这些化合物的电子器件。

1. 一种式(1)化合物,



式(1)

其中以下适用于所使用的符号和标记:

$X^1$ 在每次出现时相同地或不同地代表 $CR^1$ 或N;

$X^2$ 在每次出现时相同地或不同地代表 $CR^2$ 或N;

$X^A$ 在每次出现时相同地或不同地代表 $CR^A$ 或N;

Y是单键或选自 $-C(R^Y)_2-$ 、 $-C(R^Y)_2-C(R^Y)_2-$ 的烷亚基基团;

$R^B$ 在每次出现时相同地或不同地代表CN,  $N(Ar)_2$ ,  $C(=O)Ar$ ,  $P(=O)(Ar)_2$ ,  $S(=O)Ar$ ,  $S(=O)_2Ar$ ,  $N(R)_2$ ,  $Si(R)_3$ ,  $OSO_2R$ , 具有1至40个碳原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷氧基基团, 或具有2至40个碳原子的烯基或炔基基团, 或具有3至40个碳原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷氧基基团, 所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代, 其中在每种情况下一个或多个非相邻的 $CH_2$ 基团可以被 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R)_2$ 、 $Ge(R)_2$ 、 $Sn(R)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 、 $S$ 或 $CONR$ 代替并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br、I、CN或 $NO_2$ 代替, 或具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系, 所述芳族或杂芳族环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代, 或具有5至60个芳族环原子的芳氧基基团, 所述芳氧基基团可以被一个或多个基团R取代, 或具有5至60个芳族环原子的芳烷基或杂芳烷基基团, 所述芳烷基或杂芳烷基基团可以被一个或多个R基团取代;

$R^Y$ 在每次出现时相同地或不同地代表H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN,  $N(Ar)_2$ ,  $C(=O)Ar$ ,  $P(=O)(Ar)_2$ ,  $S(=O)Ar$ ,  $S(=O)_2Ar$ ,  $NO_2$ ,  $N(R)_2$ ,  $Si(R)_3$ ,  $B(OR)_2$ ,  $OSO_2R$ , 具有1至40个碳原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷氧基基团, 或具有2至40个碳原子的烯基或炔基基团, 或具有3至40个碳原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷氧基基团, 所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代, 其中在每种情况下一个或多个非相邻的 $CH_2$ 基团可以被 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R)_2$ 、 $Ge(R)_2$ 、 $Sn(R)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 、 $S$ 或 $CONR$ 代替, 并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br、I、CN或 $NO_2$ 代替, 或具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系, 所述芳族或杂芳族环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代, 或具有5至60个芳族环原子的芳氧基基团, 所述芳氧基基团可以被一个或多个基团R取代, 或具有5至60个芳族环原子的芳烷基或杂芳烷基基团, 所述芳烷基或杂芳烷基基团可以被一个或多个R基团取代; 其中两个相邻的取代基 $R^Y$ 可以形成单环或多环的脂族环系或芳族环系, 所述脂

族环系或芳族环系可以被一个或多个基团R'取代;

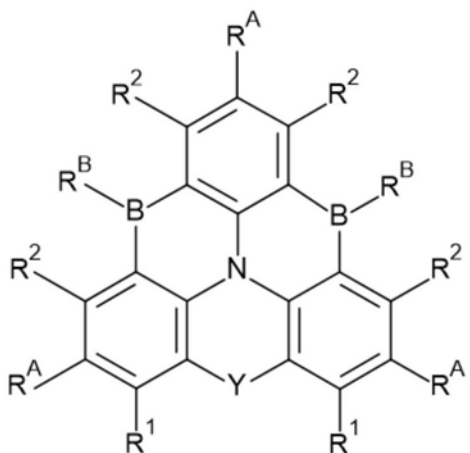
$R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^A$ 在每次出现时相同地或不同地代表H,D,F,Cl,Br,I,CHO,CN, $N(Ar)_2$ , $C(=O)Ar$ , $P(=O)(Ar)_2$ , $S(=O)Ar$ , $S(=O)_2Ar$ , $NO_2$ , $Si(R)_3$ , $B(OR)_2$ , $OSO_2R$ ,具有1至40个C原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,或具有3至40个C原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,其中在每种情况下一个或多个非相邻的 $CH_2$ 基团可以被 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R)_2$ 、 $Ge(R)_2$ 、 $Sn(R)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 、 $S$ 或 $CONR$ 代替并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br、I、CN或 $NO_2$ 代替,具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述芳族或杂芳族环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代,具有5至60个芳族环原子的芳氧基基团,所述芳氧基基团可以被一个或多个基团R取代,或具有5至60个芳族环原子的芳烷基或杂芳烷基基团,所述芳烷基或杂芳烷基基团可以被一个或多个R基团取代;其中选自 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^A$ 的两个相邻基团可以形成单环或多环的脂族环系或芳族环系,所述脂族环系或芳族环系可以被一个或多个基团R取代;

R在每次出现时相同地或不同地代表H,D,F,Cl,Br,I,CHO,CN, $N(Ar)_2$ , $C(=O)Ar$ , $P(=O)(Ar)_2$ , $S(=O)Ar$ , $S(=O)_2Ar$ , $NO_2$ , $Si(R')$ , $B(OR')$ , $OSO_2R'$ ,具有1至40个C原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,或具有3至40个C原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R'取代,其中在每种情况下一个或多个非相邻的 $CH_2$ 基团可以被 $R'C=CR'$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R')_2$ 、 $Ge(R')_2$ 、 $Sn(R')_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R')$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 、 $S$ 或 $CONR'$ 代替,并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br、I、CN或 $NO_2$ 代替,具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述芳族或杂芳族环系在每种情况下可以被一个或多个基团R'取代,或具有5至60个芳族环原子的芳氧基基团,所述芳氧基基团可以被一个或多个基团R'取代,其中两个相邻基团R可以形成单环或多环的脂族环系或芳族环系,所述脂族环系或芳族环系可以被一个或多个基团R'取代;

Ar在每次出现时相同地或不同地是具有5至24个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述芳族或杂芳族环系在每种情况下也可以被一个或多个基团R'取代;

R'在每次出现时相同地或不同地代表H,D,F,Cl,Br,I,CN,具有1至20个C原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,或具有3至20个C原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,其中在每种情况下一个或多个非相邻的 $CH_2$ 基团可以被 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 、 $S$ 代替,并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br或I代替,或具有5至24个C原子的芳族或杂芳族环系。

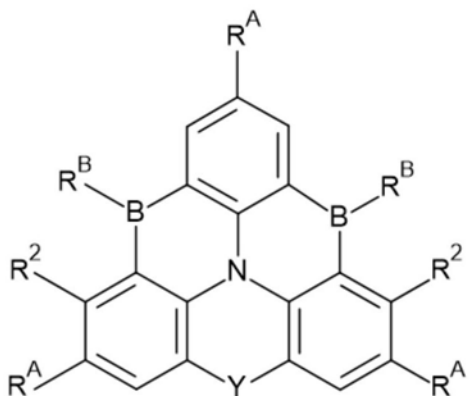
2. 根据权利要求1所述的化合物,其特征在于所述化合物选自式(2)化合物,



式(2)

其中符号具有与权利要求1中相同的含义。

3. 根据权利要求1或2所述的化合物,其特征在于所述化合物选自式(3)化合物,



式(3)

其中符号具有与权利要求1中相同的含义。

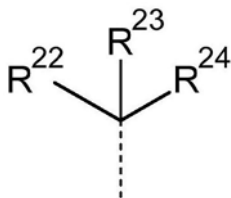
4. 根据前述权利要求中的一项或多项所述的化合物,其特征在于 $R^B$ 在每次出现时相同地或不同地代表具有1至40个碳原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷氧基基团,或具有2至40个碳原子的烯基或炔基基团,或具有3至40个碳原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷氧基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,其中在每种情况下一个或多个非相邻的 $CH_2$ 基团可以被 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R)_2$ 、 $Ge(R)_2$ 、 $Sn(R)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 、 $S$ 或 $CONR$ 代替,并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br、I、CN或 $NO_2$ 代替,或具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述芳族或杂芳族环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代,或具有5至60个芳族环原子的芳烷基或杂芳烷基基团,所述芳烷基或杂芳烷基基团可以被一个或多个R基团取代。

5. 根据前述权利要求中的一项或多项所述的化合物,其特征在于 $R^B$ 在每次出现时相同地或不同地代表具有1至20个碳原子的直链的烷基或烷氧基基团,或具有2至20个碳原子的烯基或炔基基团,或具有3至20个碳原子的支链或环状的烷基或烷氧基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl或CN代替,或具有5至60个芳族环原子的芳族环系,所述芳族环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代,

或具有5至60个芳族环原子的芳烷基或杂芳烷基基团,所述芳烷基或杂芳烷基基团可以被一个或多个R基团取代。

6. 根据前述权利要求中的一项或多项所述的化合物,其特征在于R<sup>B</sup>在每次出现时相同地或不同地,

选自自由以下通式 (RS-a) 表示的支链或环状的烷基基团



(RS-a)

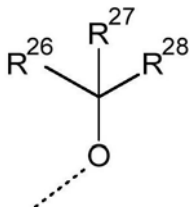
其中

R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>、R<sup>24</sup>在每次出现时相同地或不同地选自H,具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,其中上述基团可以各自被一个或多个基团R<sup>25</sup>取代,并且其中基团R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>、R<sup>24</sup>中的两个或所有基团R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>、R<sup>24</sup>可以连接形成(多)环状烷基基团,所述(多)环状烷基基团可以被一个或多个基团R<sup>25</sup>取代;

R<sup>25</sup>在每次出现时相同地或不同地选自具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团;

条件是在每次出现时,基团R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>和R<sup>24</sup>中的至少一个不是H,条件是在每次出现时,所有基团R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>和R<sup>24</sup>总共具有至少4个碳原子,并且条件是在每次出现时,如果基团R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>和R<sup>24</sup>中的两个是H,则其余基团不是直链;

或选自自由以下通式 (RS-b) 表示的支链或环状的烷氧基基团



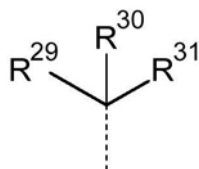
(RS-b)

其中

R<sup>26</sup>、R<sup>27</sup>、R<sup>28</sup>在每次出现时相同地或不同地选自H,具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,其中上述基团可以各自被一个或多个如上定义的基团R<sup>25</sup>取代,并且其中基团R<sup>26</sup>、R<sup>27</sup>、R<sup>28</sup>中的两个或所有基团R<sup>26</sup>、R<sup>27</sup>、R<sup>28</sup>可以连接形成(多)环状烷基基团,所述(多)环状烷基基团可以被一个或多个如上定义的基团R<sup>25</sup>取代;

条件是在每次出现时,基团R<sup>26</sup>、R<sup>27</sup>和R<sup>28</sup>中仅一个可以是H;

或选自自由以下通式 (RS-c) 表示的芳烷基基团



(RS-c)

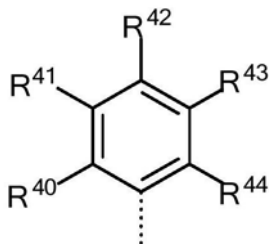
其中

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ 、 $R^{31}$ 在每次出现时相同地或不同地选自H,具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代,或具有6至30个芳族环原子的芳族环系,所述芳族环系在每种情况下可以被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代,并且其中基团 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ 、 $R^{31}$ 中的两个或全部可以连接形成(多)环状烷基基团或芳族环系,所述(多)环状烷基基团或芳族环系中的每个可以被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代;

$R^{32}$ 在每次出现时相同地或不同地选自具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,或具有6至24个芳族环原子的芳族环系;

条件是在每次出现时,基团 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ 和 $R^{31}$ 中的至少一个不是H,并且在每次出现时,基团 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ 和 $R^{31}$ 中的至少一个是具有至少6个芳族环原子的芳族环系或者含有具有至少6个芳族环原子的芳族环系;

或选自由以下通式(RS-d)表示的芳族环系



(RS-d)

其中

$R^{40}$ 至 $R^{44}$ 在每次出现时相同地或不同地选自H,具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代,或具有6至30个芳族环原子的芳族环系,所述芳族环系在每种情况下可以被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代,并且其中基团 $R^{40}$ 至 $R^{44}$ 中的两个或更多个可以连接形成(多)环状烷基基团或芳族环系,所述(多)环状烷基基团或芳族环系中的每个可以被一个或多个如上定义的基团 $R^{32}$ 取代。

7. 根据前述权利要求中的一项或多项所述的化合物,其特征在于 $R^2$ 和 $R^A$ 在每次出现时相同地或不同地代表H,D,F,Cl,Br,I,CN, $N(Ar)_2$ ,具有1至40个C原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,或具有3至40个C原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,其中在每种情况下一个或多个非相邻的 $CH_2$ 基团可以被 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R)_2$ 、 $Ge(R)_2$ 、 $Sn(R)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 、 $S$ 或 $CONR$ 代替,并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br、I、CN或 $NO_2$ 代替,具有5至60个芳

族环原子的芳族或杂芳族环系,所述芳族或杂芳族环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代,或具有5至60个芳族环原子的芳烷基或杂芳烷基基团,所述芳烷基或杂芳烷基基团可以被一个或多个R基团取代。

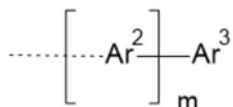
8. 根据前述权利要求中的一项或多项所述的化合物,其特征在于 $R^2$ 和 $R^A$ 在每次出现时相同地或不同地代表H,D,F,CN,具有1至40个C原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,或具有3至40个C原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,其中在每种情况下一个或多个非相邻的 $CH_2$ 基团可以被 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、O或S代替,并且其中一个或多个H原子可以被D、F代替,具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述芳族或杂芳族环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代,或具有5至60个芳族环原子的芳烷基或杂芳烷基基团,所述芳烷基或杂芳烷基基团可以被一个或多个R基团取代。

9. 根据前述权利要求中的一项或多项所述的化合物,其特征在于 $R^2$ 和 $R^A$ 在每次出现时相同地或不同地代表,

H,D,F,CN;或

式(RS-a)的基团、式(RS-b)的基团、式(RS-c)的基团或式(RS-d)的基团,其中所述式(RS-a)、(RS-b)、(RS-c)和(RS-d)的基团具有与权利要求6中相同的定义;或

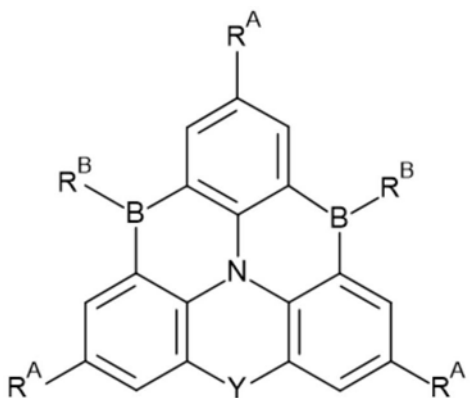
式(ArL-1)的基团,



式(ArL-1)

其中式(ArL-1)中的虚线键表示与式(1)结构的键合,其中 $Ar^2$ 、 $Ar^3$ 在每次出现时相同地或不同地代表具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述芳族或杂芳族环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代;并且其中m是选自1至10的整数。

10. 根据前述权利要求中的一项或多项所述的化合物,其特征在于所述化合物选自式(4)化合物,



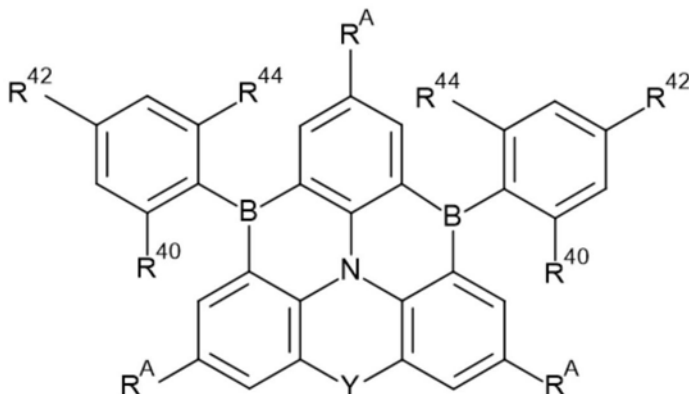
式(4)

其中符号具有与权利要求1中相同的含义。

11. 根据前述权利要求中的一项或多项所述的化合物,其特征在于 $R^B$ 和 $R^A$ 在每次出现时相同地或不同地选自式(RS-a)、(RS-b)、(RS-c)和(RS-d)的基团,其中所述式(RS-a)、(RS-

b)、(RS-c) 和 (RS-d) 的基团具有与权利要求6中相同的定义。

12. 根据前述权利要求中的一项或多项所述的化合物,其特征在于所述化合物选自式(5)或(6)的化合物,



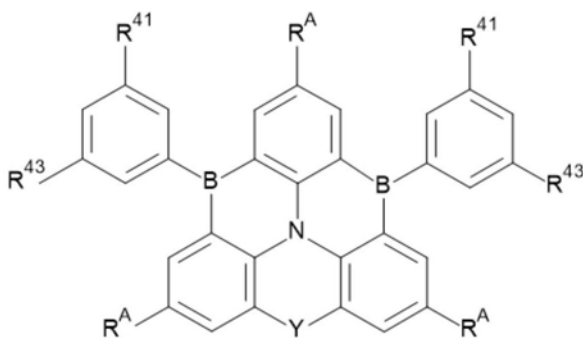
式(5)

其中基团 $R^A$ 具有与权利要求1中相同的含义,并且  
其中,在式(5)中,

$R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$ 在每次出现时相同地或不同地选自H,具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代,或具有6至30个芳族环原子的芳族环系,所述芳族环系在每种情况下可以被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代;其中 $R^{32}$ 具有与权利要求6中相同的含义;

条件是 $R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$ 中的至少一个不是H;

或



式(6)

其中,在式(6)中,

$R^{41}$ 、 $R^{43}$ 在每次出现时相同地或不同地选自H,具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代,或具有6至30个芳族环原子的芳族环系,所述芳族环系在每种情况下可以被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代;其中 $R^{32}$ 具有与权利要求6中相同的含义;

条件是 $R^{41}$ 、 $R^{43}$ 中的至少一个不是H。

13. 根据权利要求12所述的化合物,其特征在于

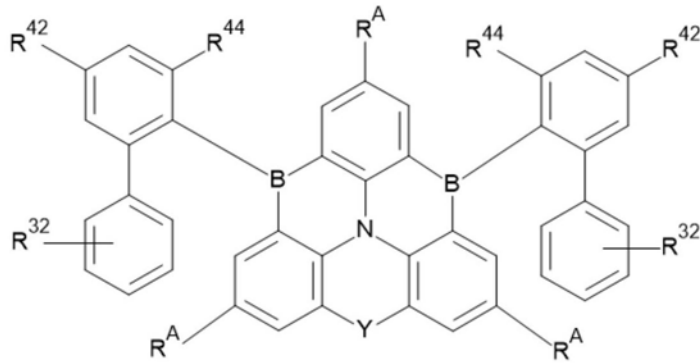
$R^{42}$ 在每次出现时相同地或不同地选自H,具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取



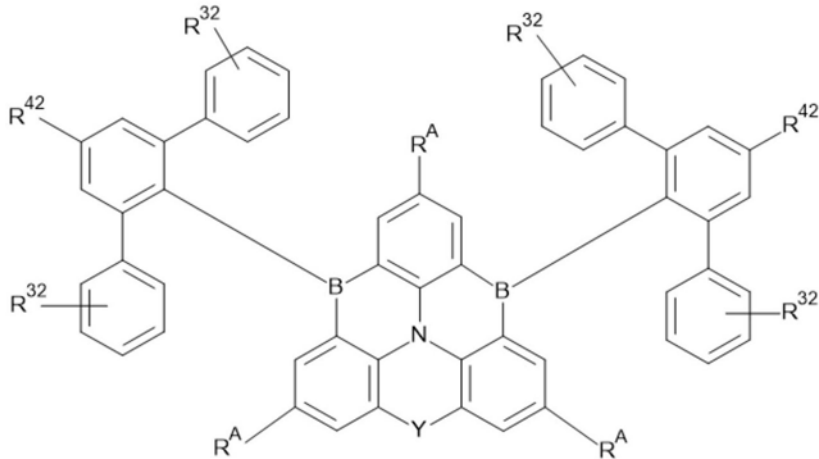
代,或具有6至30个芳族环原子的芳族环系,所述芳族环系在每种情况下可以被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代,其中 $R^{32}$ 具有与权利要求6中相同的含义;

$R^{40}$ 、 $R^{44}$ 在每次出现时相同地或不同地选自具有6至30个芳族环原子的芳族环系,所述芳族环系在每种情况下可以被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代;其中 $R^{32}$ 具有与权利要求6中相同的含义。

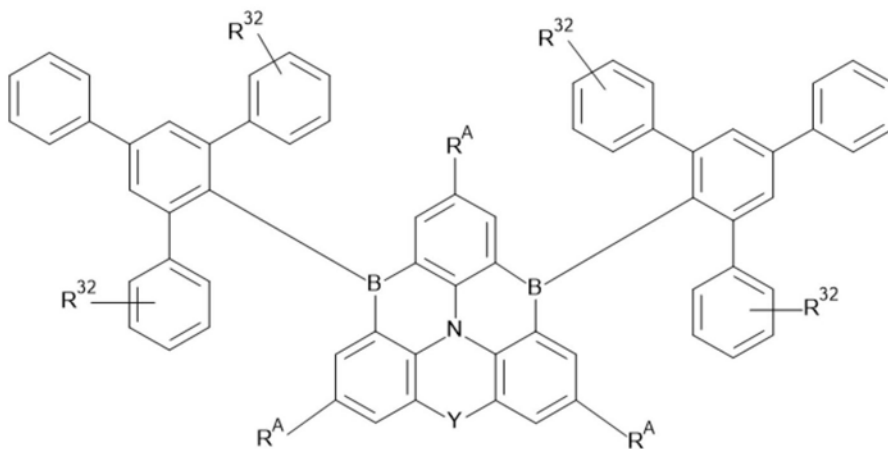
14. 根据前述权利要求中的一项或多项所述的化合物,其特征在于所述化合物选自式(5-1)、(5-2)和(5-3)的化合物,



式(5-1)



式(5-2)



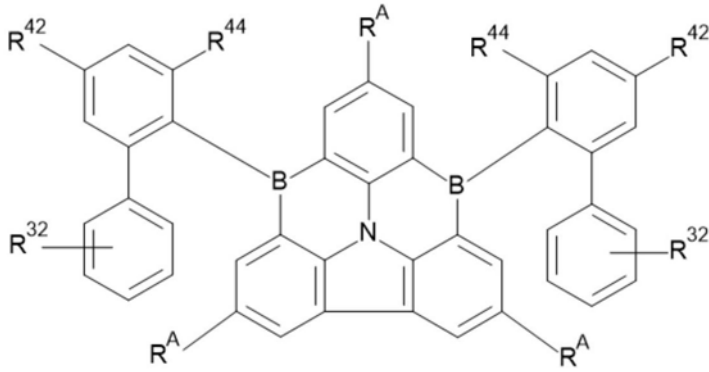
式(5-3)

其中基团 $R^A$ 具有与权利要求1中相同的含义,并且其中

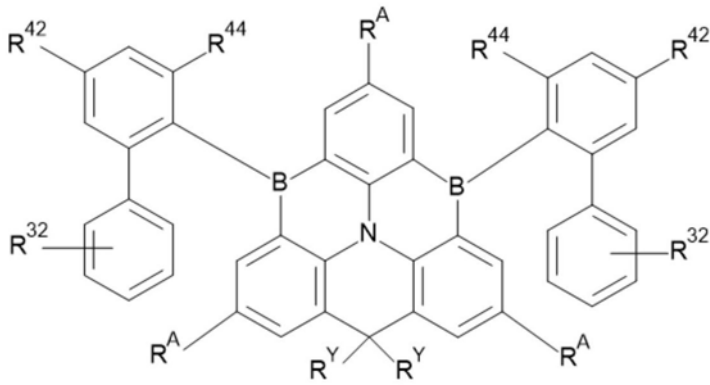
在式(5-1)、(5-2)和(5-3)中的每一个中,用 $R^{32}$ 指出的苯基基团未被取代或被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代;

$R^{42}$ 和 $R^{44}$ 在每次出现时相同地或不同地选自H,具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代;其中 $R^{32}$ 具有与权利要求6中相同的含义。

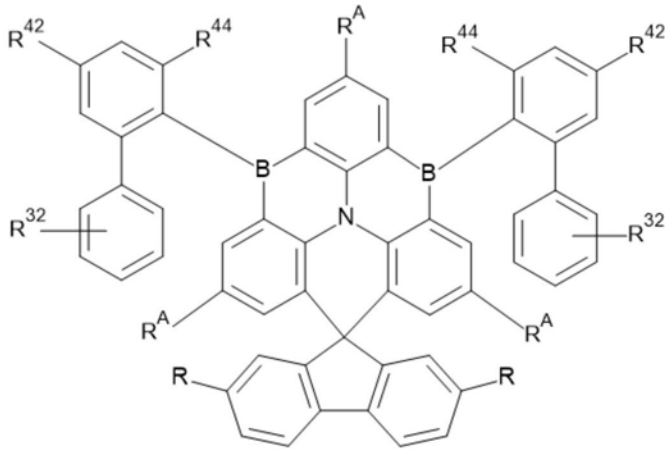
15. 根据前述权利要求中的一项或多项所述的化合物,其特征在于所述化合物选自式(5-1-1Y)至(5-3-Y3)的化合物,



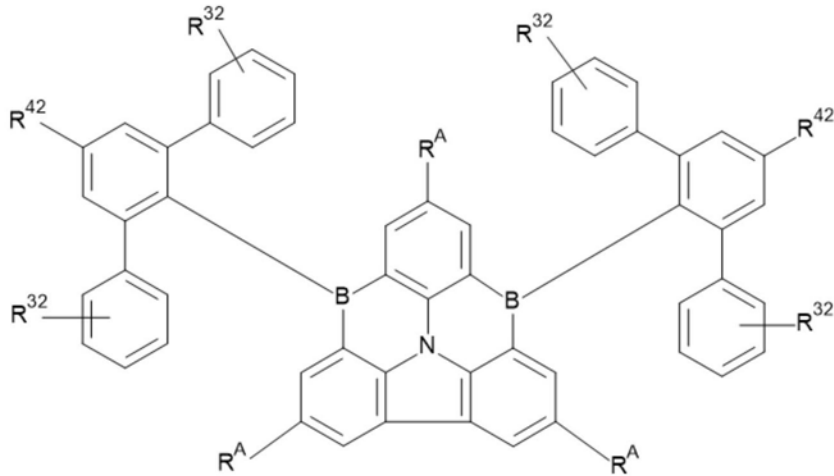
式(5-1-Y1)



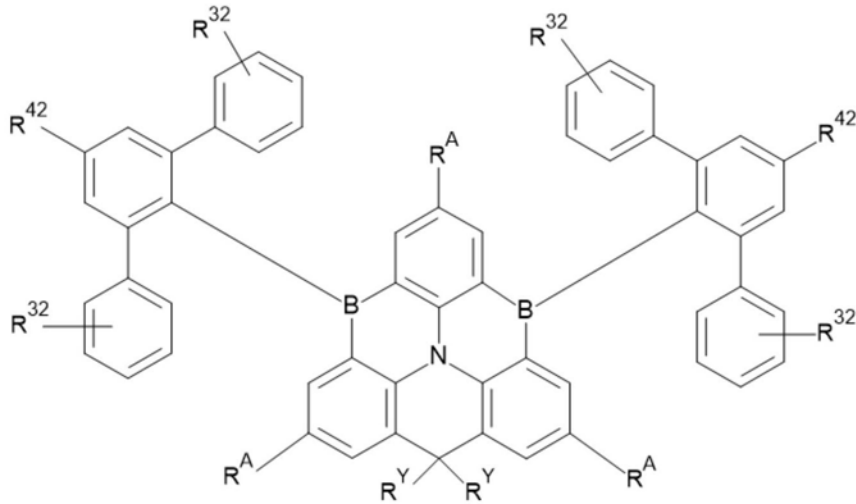
式(5-1-Y2)



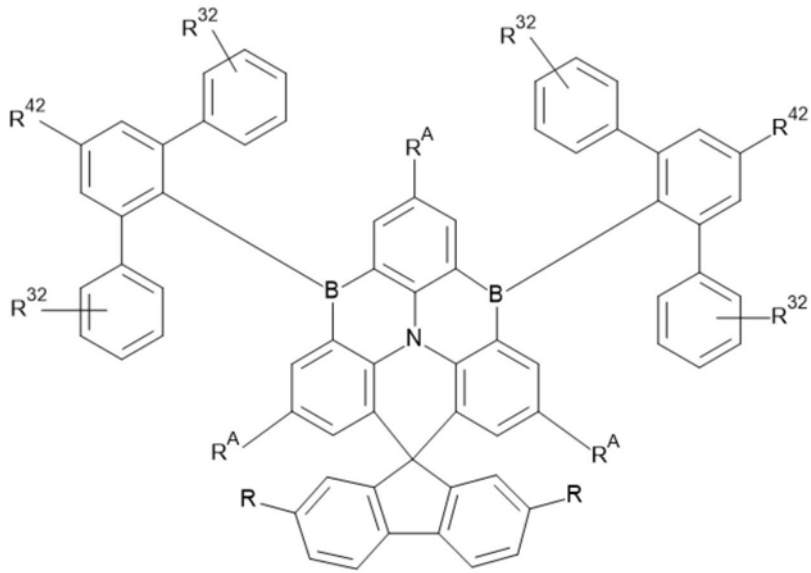
式(5-1-Y3)



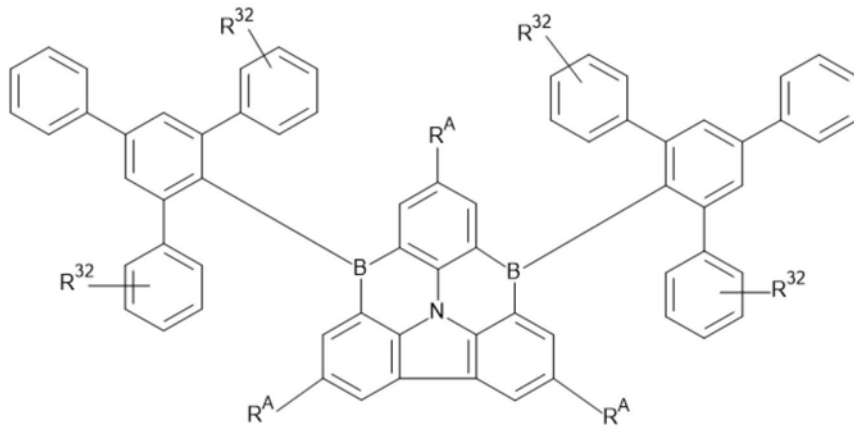
式(5-2-Y1)



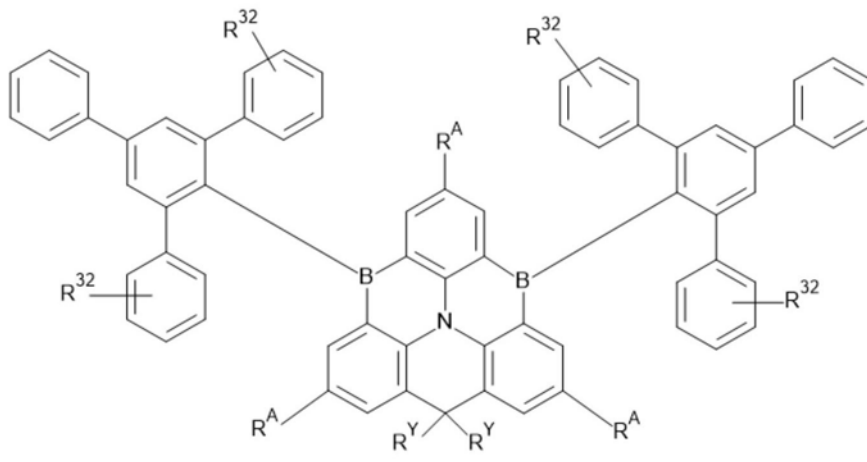
式(5-2-Y2)



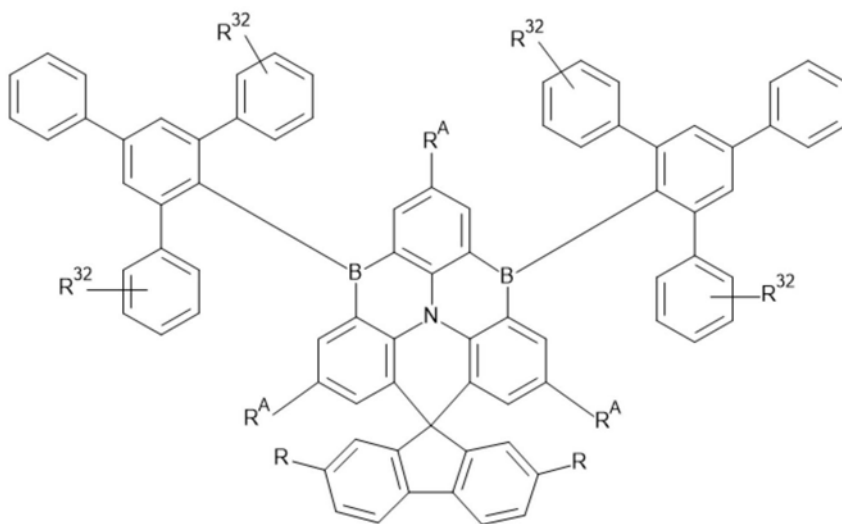
式(5-2-Y3)



式(5-3-Y1)



式(5-3-Y2)



式(5-3-Y3)

其中基团 $R^A$ 、 $R^Y$ 和 $R$ 具有与权利要求1中相同的含义,并且

其中在式(5-1-Y1)至(5-3-Y3)中的每一个中,用 $-R^{32}$ 指出的苯基基团未被取代或被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代;

$R^{42}$ 和 $R^{44}$ 在每次出现时相同地或不同地选自H,具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代;其中 $R^{32}$ 具有与权利要求6中相同的含义。

16. 根据权利要求12所述的化合物,其特征在于基团 $R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$ 在每次出现时相同地或不同地选自具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代,其中 $R^{32}$ 具有与权利要求6中相同的含义。

17. 一种聚合物、低聚物或树枝状大分子,所述聚合物、低聚物或树枝状大分子含有一种或多种根据权利要求1所述的化合物,其中与所述聚合物、低聚物或树枝状大分子连接的键可以位于式(1)中被 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^A$ 、 $R^B$ 或 $R$ 取代的任何位置。

18. 一种制剂,所述制剂包含至少一种根据权利要求1至16中的一项或多项所述的化合物或至少一种根据权利要求17所述的聚合物、低聚物或树枝状大分子和至少一种溶剂。

19. 一种电子器件,所述电子器件包含至少一种根据权利要求1至16中的一项或多项所述的化合物或至少一种根据权利要求17所述的聚合物、低聚物或树枝状大分子,所述电子器件选自有机电致发光器件、有机集成电路、有机场效应晶体管、有机薄膜晶体管、有机发光晶体管、有机太阳能电池、染料敏化有机太阳能电池、有机光学检测器、有机光感受器、有机场猝熄器件、发光电化学电池、有机激光二极管和有机等离激元发光器件。

20. 一种有机电致发光器件,所述有机电致发光器件包含至少一种根据权利要求1至16中的一项或多项所述的化合物或至少一种根据权利要求17所述的聚合物、低聚物或树枝状大分子,其特征在于根据权利要求1至16中的一项或多项所述的化合物或根据权利要求17所述的聚合物、低聚物或树枝状大分子被用作发光层中的发光体。

21. 根据权利要求20所述的有机电致发光器件,其特征在于根据权利要求1至16中的一项或多项所述的化合物或根据权利要求17所述的聚合物、低聚物或树枝状大分子被用作发

光层中的荧光发光体,其中所述发光层包含至少一种选自基质材料的其它组分。

22. 根据权利要求20所述的有机电致发光器件,其特征在于根据权利要求1至16中的一项或多项所述的化合物或根据权利要求17所述的聚合物、低聚物或树枝状大分子被用作发光层中的显示热激活延迟荧光的发光体,其中所述发光层包含至少一种选自基质材料的其它组分。

23. 根据权利要求20所述的有机电致发光器件,其特征在于根据权利要求1至16中的一项或多项所述的化合物或根据权利要求17所述的聚合物、低聚物或树枝状大分子被用作发光层中的荧光发光体,其中所述发光层包含至少一种选自磷光化合物和热激活延迟荧光化合物的敏化剂。

24. 根据权利要求23所述的有机电致发光器件,其特征在于所述发光层还包含至少一种选自基质材料的有机功能材料。

## 用于有机电致发光器件的材料

[0001] 本发明涉及式(1)化合物,所述化合物在电子器件中的用途,以及包含式(1)化合物的电子器件。本发明还涉及制备式(1)化合物的方法和包含一种或多种式(1)化合物的制剂。

[0002] 用于电子器件的功能化合物的开发目前是深入研究的主题。特别是,目的在于开发化合物以在一个或多个相关方面实现电子器件的改进性能,例如器件的功率效率和寿命以及所发光的颜色坐标。

[0003] 根据本发明,术语电子器件尤其应被认为是指有机集成电路(OIC)、有机场效应晶体管(OFET)、有机薄膜晶体管(OTFT)、有机发光晶体管(OLET)、有机太阳能电池(OSC)、有机光学检测器、有机光感受器、有机场猝熄器件(OFQD)、有机发光电化学电池(OLEC)、有机激光二极管(O-激光器)和有机电致发光器件(OLED)。

[0004] 特别令人感兴趣的是提供用于最后提到的称为OLED的电子器件的化合物。OLED的一般结构和功能原理是本领域技术人员已知的并且在例如US 4539507中进行了描述。

[0005] 关于OLED的性能数据,仍然需要进一步改进,特别是考虑到广泛的商业用途,例如在显示设备中或作为光源。在这方面特别重要的是OLED的寿命、效率和工作电压以及所达到的色值。特别是,在发蓝光的OLED的情况下,在器件的寿命、效率和发光体的色纯度方面存在改进的潜力。

[0006] 实现所述改进的一个重要起点是电子器件中使用的发光体化合物和主体化合物的选择。

[0007] 根据现有技术已知的蓝色荧光发光体是多种化合物。含有一种或多种稠合芳基的芳基胺是根据现有技术已知的。含有二苯并咪唑基团(如US 2017/0012214中所公开)或茚并二苯并咪唑基团(如CN 10753308中所公开)的芳基胺也是根据现有技术已知的。

[0008] 在过去十年中,显示热激活延迟荧光(TADF)的化合物(例如H.Uoyama等人,Nature 2012,第492卷,234)也已经进行了深入研究。TADF材料通常是有机材料,所述有机材料的最低三重态 $T_1$ 与第一激发单重态 $S_1$ 之间的能隙足够小以使得可从 $T_1$ 态以热方式达到 $S_1$ 态。出于量子统计学原因,在OLED中的电子激发时,75%的激发态处于三重态并且25%处于单重态。由于纯有机分子通常不能有效地从三重态发光,因此75%的激发态不能用于发光,这意味着原则上可以仅能将25%的激发能转化为光。然而,如果最低三重态与最低激发单重态之间的能隙足够小,则分子的第一激发单重态可以通过热激发从三重态达到并且可以热填充。由于该单重态是可以发出荧光的发光状态,因此该状态可以用于产生光。因此,原则上,当纯有机材料用作发光体时,可将高达100%的电能转化为光。

[0009] 最近,已经描述了包含硼和氮原子的多环芳族化合物(例如在US2015/0236274A1、CN107501311A、W02018/047639A1中)。这些化合物可以用作荧光发光体,其中荧光发光主要是瞬发荧光或作为TADF化合物。

[0010] 然而,仍然需要另外的荧光发光体,尤其是蓝色荧光发光体,其可用于OLED并导致OLED在寿命、颜色发光和效率方面具有非常好的特性。更特别是,需要结合了非常高的效率、非常好的寿命和合适的颜色坐标以及高色纯度的蓝色荧光发光体。

[0011] 最近,已经描述了在发光层中具有作为敏化剂的TADF化合物和作为发光体的相对于其环境具有高空间屏蔽的荧光化合物的有机电致发光器件(例如在W02015/135624中)。这种器件构造使得可以提供以所有发射颜色发光的有机电致发光器件,从而可以使用已知的荧光发光体的基础结构,其仍然表现出具有TADF的电致发光器件的高效率。这也称为超荧光。

[0012] 作为替代方案,现有技术描述了有机电致发光器件,其在发光层中包含磷光有机金属络合物作为敏化剂,该敏化剂由于大的自旋轨道耦合而显示出S1态和T1态的混合,以及包含荧光化合物作为发光体,从而可以显著缩短发光衰减时间。这也称为超磷光。

[0013] 超荧光和超磷光也是改进OLED性能的有前途的技术,尤其是在深蓝色发光方面。

[0014] 然而,这里仍然需要进一步改进OLED的性能数据,特别是考虑到广泛的商业用途,例如在显示设备中或作为光源。在这方面特别重要的是OLED的寿命、效率、工作电压和所达到的色值,特别是颜色纯度。

[0015] 在超荧光和超磷光体系中实现所述改进的一个重要起点是空间位阻荧光发光体化合物的选择。

[0016] 在W0 2015/135624中,描述了基于红荧烯的空间位阻荧光发光体。然而,仍然需要另外的空间位阻荧光发光体,尤其是空间位阻蓝色荧光发光体,这导致OLED在效率和颜色发光方面具有非常好的特性。更特别是,需要结合了非常高的效率、非常长的寿命和合适的颜色坐标以及高色纯度的深蓝色荧光发光体。

[0017] 此外,已知OLED可以包括不同的层,所述层可以通过真空室中的气相沉积或通过从溶液加工来施加。基于气相沉积的工艺导致良好的结果,但此类工艺复杂且昂贵。因此,还需要能够轻松且可靠地从溶液加工的OLED材料。在这种情况下,材料在包含它们的溶液中应该具有良好的溶解性。此外,从溶液加工的OLED材料应该能够在沉积的薄膜中自身取向,以改进OLED的整体效率。术语取向在这里是指化合物的水平分子取向,如Zhao等人,溶液加工的有机发光二极管中的水平分子取向(Horizontal molecular orientation in solution-processed organic light-emitting diodes),Appl.Phys.Lett.106063301, 2015中所说明。

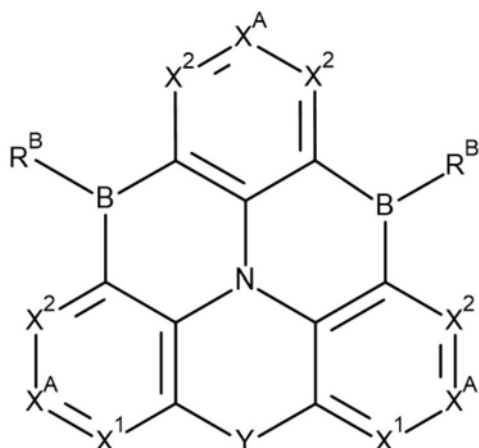
[0018] 因此,本发明是基于提供显示瞬发荧光和/或延迟荧光的发光体的技术目的。本发明还基于提供空间位阻荧光发光体的技术目的,所述荧光发光体可在超荧光或超磷光体系中与敏化剂化合物组合使用。本发明还基于提供适用于电子器件如OLED,更特别是用作发光体并且适于真空加工或溶液加工的化合物的技术目的。

[0019] 在对用于电子器件的新型化合物的研究中,现已发现,如下定义的式(1)化合物非常适用于电子器件。特别是,它们实现了一个或多个,优选全部的上述技术目的。

[0020] 本发明因此涉及式(1)化合物,



[0021]



式(1)

[0022] 其中以下适用于所使用的符号和标记:

[0023] X<sup>1</sup>在每次出现时相同或不同地代表CR<sup>1</sup>或N;[0024] X<sup>2</sup>在每次出现时相同或不同地代表CR<sup>2</sup>或N;[0025] X<sup>A</sup>在每次出现时相同或不同地代表CR<sup>A</sup>或N;[0026] Y是单键或选自-C(R<sup>Y</sup>)<sub>2</sub>-、-C(R<sup>Y</sup>)<sub>2</sub>-C(R<sup>Y</sup>)<sub>2</sub>-的亚烷基基团;

[0027] R<sup>B</sup>在每次出现时相同或不同地代表CN, N(Ar)<sub>2</sub>, C(=O)Ar, P(=O)(Ar)<sub>2</sub>, S(=O)Ar, S(=O)<sub>2</sub>Ar, N(R)<sub>2</sub>, Si(R)<sub>3</sub>, OSO<sub>2</sub>R, 具有1至40个碳原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷氧基基团, 或具有2至40个碳原子的烯基或炔基基团, 或具有3至40个碳原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷氧基基团, 所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代, 其中在每种情况下一个或多个非相邻的CH<sub>2</sub>基团可以被RC=CR、C≡C、Si(R)<sub>2</sub>、Ge(R)<sub>2</sub>、Sn(R)<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、P(=O)(R)、SO、SO<sub>2</sub>、O、S或CONR代替, 并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br、I、CN或NO<sub>2</sub>代替, 或具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系, 所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代, 或具有5至60个芳族环原子的芳氧基基团, 所述基团可以被一个或多个基团R取代, 或具有5至60个芳族环原子的芳烷基或杂芳烷基基团, 所述基团可以被一个或多个R基团取代;

[0028] R<sup>Y</sup>在每次出现时相同或不同地代表H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN, N(Ar)<sub>2</sub>, C(=O)Ar, P(=O)(Ar)<sub>2</sub>, S(=O)Ar, S(=O)<sub>2</sub>Ar, NO<sub>2</sub>, N(R)<sub>2</sub>, Si(R)<sub>3</sub>, B(OR)<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R, 具有1至40个碳原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷氧基基团, 或具有2至40个碳原子的烯基或炔基基团, 或具有3至40个碳原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷氧基基团, 所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代, 其中在每种情况下一个或多个非相邻的CH<sub>2</sub>基团可以被RC=CR、C≡C、Si(R)<sub>2</sub>、Ge(R)<sub>2</sub>、Sn(R)<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、P(=O)(R)、SO、SO<sub>2</sub>、O、S或CONR代替, 并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br、I、CN或NO<sub>2</sub>代替, 或具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系, 所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代, 或具有5至60个芳族环原子的芳氧基基团, 所述基团可以被一个或多个基团R取代, 或具有5至60个芳族环原子的芳烷基或杂芳烷基基团, 所述基团可以被一个或多个R基团取代; 其中两个相邻的取代基R<sup>Y</sup>可以形成单环或多环的脂族环系或芳族环系, 所述环系可以被一个或多个基团R'取代;

[0029] R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>A</sup>在每次出现时相同地或不同地代表H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN, N(Ar)<sub>2</sub>, C(=O)Ar, P(=O)(Ar)<sub>2</sub>, S(=O)Ar, S(=O)<sub>2</sub>Ar, NO<sub>2</sub>, Si(R)<sub>3</sub>, B(OR)<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R, 具有1至40个C原子的

直链的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,或具有3至40个C原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,其中在每种情况下一个或多个非相邻的CH<sub>2</sub>基团可以被RC=CR、C≡C、Si(R)<sub>2</sub>、Ge(R)<sub>2</sub>、Sn(R)<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、P(=O)(R)、SO、SO<sub>2</sub>、O、S或CONR代替,并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br、I、CN或NO<sub>2</sub>代替,具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代,具有5至60个芳族环原子的芳氧基基团,所述基团可以被一个或多个基团R取代,或具有5至60个芳族环原子的芳烷基或杂芳烷基基团,所述基团可以被一个或多个R基团取代;其中选自R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>A</sup>的两个相邻基团可以形成单环或多环的脂族环系或芳族环系,所述环系可以被一个或多个基团R取代;

[0030] R在每次出现时相同或不同地代表H、D、F、Cl、Br、I、CH<sub>3</sub>、CN、N(Ar)<sub>2</sub>、C(=O)Ar、P(=O)(Ar)<sub>2</sub>、S(=O)Ar、S(=O)<sub>2</sub>Ar、NO<sub>2</sub>、Si(R')<sub>3</sub>、B(OR')<sub>2</sub>、OSO<sub>2</sub>R',具有1至40个C原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,或具有3至40个C原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R'取代,其中在每种情况下一个或多个非相邻的CH<sub>2</sub>基团可以被R'C=CR'、C≡C、Si(R')<sub>2</sub>、Ge(R')<sub>2</sub>、Sn(R')<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、P(=O)(R')、SO、SO<sub>2</sub>、O、S或CONR'代替,并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br、I、CN或NO<sub>2</sub>代替,具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R'取代,或具有5至60个芳族环原子的芳氧基基团,所述基团可以被一个或多个基团R'取代,其中两个相邻基团R可以形成单环或多环的脂族环系或芳族环系,所述环系可以被一个或多个基团R'取代;

[0031] Ar在每次出现时相同地或不同地是具有5至24个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述环系在每种情况下也可以被一个或多个基团R'取代;

[0032] R'在每次出现时相同或不同地代表H、D、F、Cl、Br、I、CN,具有1至20个C原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,或具有3至20个C原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,其中在每种情况下一个或多个非相邻的CH<sub>2</sub>基团可以被SO、SO<sub>2</sub>、O、S代替并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br或I代替,或具有5至24个C原子的芳族或杂芳族环系。

[0033] 在本发明的意义上,相邻的取代基是与彼此直接键合的原子键合的取代基或者键合到同一原子的取代基。

[0034] 此外,以下化学基团的定义适用于本申请的目的:

[0035] 在本发明意义上的芳基基团含有6至60个芳族环原子,优选6至40个芳族环原子,更优选6至20个芳族环原子;在本发明意义上的杂芳基基团含有5至60个芳族环原子,优选5至40个芳族环原子,更优选5至20个芳族环原子,其中的至少一个是杂原子。所述杂原子优选地选自N、O和S。这代表了基本的定义。如果在本发明说明书中例如在芳族环原子数量或所存在杂原子方面指出了其它优选特征,则适用这些优选特征。

[0036] 此处芳基基团或杂芳基基团被认为是指简单的芳族环,即苯,或者简单的杂芳族环,例如吡啶、嘧啶或噻吩,或者稠合(增环)的芳族或杂芳族的多环化合物,例如萘、菲、喹啉或咪唑。在本申请意义上的稠合(增环)的芳族或杂芳族多环化合物由两个或更多个彼此稠合的简单的芳族或杂芳族环组成。

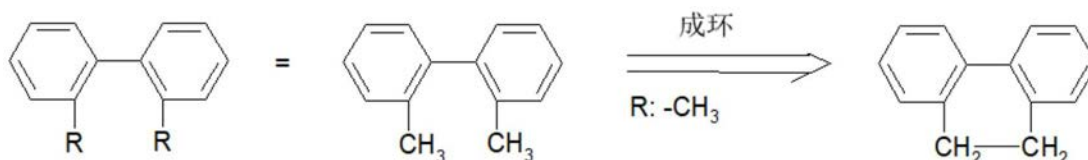
[0037] 在每种情况下可以被上述基团取代并且可以经由任何希望的位置与所述芳族或杂芳族环系连接的芳基或杂芳基基团,特别被认为是指衍生于如下物质的基团:苯、萘、蒽、



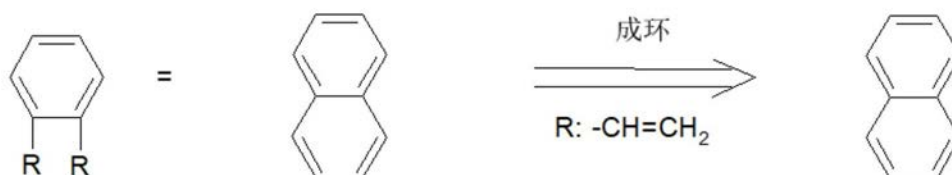
唑、1,2,4-噻二唑、1,2,5-噻二唑、1,3,4-噻二唑、1,3,5-三嗪、1,2,4-三嗪、1,2,3-三嗪、四唑、1,2,4,5-四唑、1,2,3,4-四唑、1,2,3,5-四唑、嘌呤、蝶啶、吡啶和苯并噻二唑,或这些基团的组合。

[0042] 出于本发明的目的,其中个别的H原子或CH<sub>2</sub>基团还可以被上文在所述基团定义下提及的基团取代的具有1至40个C原子的直链烷基基团或者具有3至40个C原子的支链或环状的烷基基团或者具有2至40个C原子的烯基或炔基基团,优选被认为是指如下的基团:甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、2-甲基丁基、正戊基、仲戊基、环戊基、新戊基、正己基、环己基、新己基、正庚基、环庚基、正辛基、环辛基、2-乙基己基、三氟甲基、五氟乙基、2,2,2-三氟乙基、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、乙炔基、丙炔基、丁炔基、戊炔基、己炔基或辛炔基。具有1至40个C原子的烷氧基或硫代烷基基团优选被认为是指甲氧基、三氟甲氧基、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、正戊氧基、仲戊氧基、2-甲基丁氧基、正己氧基、环己氧基、正庚氧基、环庚氧基、正辛氧基、环辛氧基、2-乙基己氧基、五氟乙氧基、2,2,2-三氟乙氧基、甲硫基、乙硫基、正丙硫基、异丙硫基、正丁硫基、异丁硫基、仲丁硫基、叔丁硫基、正戊硫基、仲戊硫基、正己硫基、环己硫基、正庚硫基、环庚硫基、正辛硫基、环辛硫基、2-乙基己硫基、三氟甲硫基、五氟乙硫基、2,2,2-三氟乙硫基、乙烯硫基、丙烯硫基、丁烯硫基、戊烯硫基、环戊烯硫基、己烯硫基、环己烯硫基、庚烯硫基、环庚烯硫基、辛烯硫基、环辛烯硫基、乙炔硫基、丙炔硫基、丁炔硫基、戊炔硫基、己炔硫基、庚炔硫基或辛炔硫基。

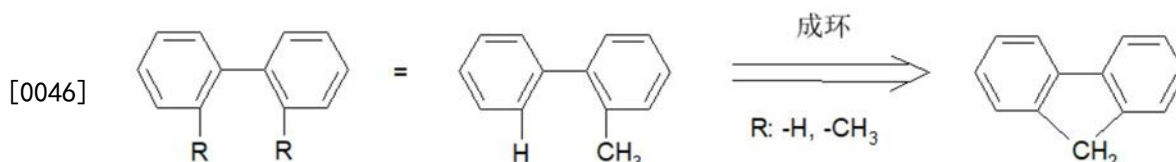
[0043] 出于本申请的目的,两个或更多个基团可以彼此形成环的表述旨在被认为尤其是指两个基团通过化学键彼此连接。这由以下方案示例:



[0044]



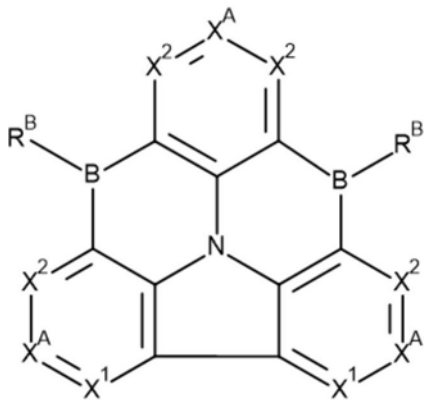
[0045] 然而,此外,上述表述也旨在被认为是指,在其中两个基团之一代表氢的情况下,第二个基团键合在氢原子所键合的位置,从而形成环。这由以下方案示例:



[0047] 优选地,基团Y是单键或基团-C(R<sup>Y</sup>)<sub>2</sub>,更优选是单键。

[0048] 根据一个优选的实施方式,基团Y代表单键并且式(1)化合物对应于式(1-Y1)化合物,

[0049]

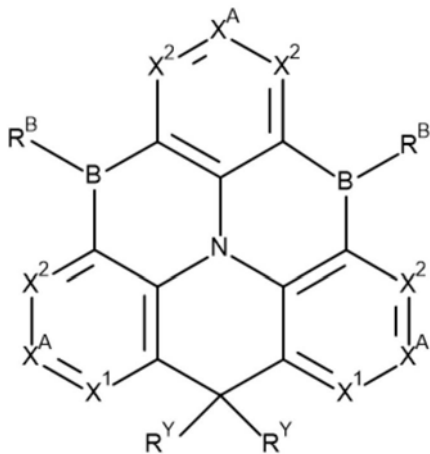


式(1-Y1)

[0050] 其中符号具有与上文相同的含义。

[0051] 根据另一优选实施方式,基团Y代表基团 $-C(R^Y)_2-$ 并且式(1)化合物对应于式(1-Y2)化合物,

[0052]

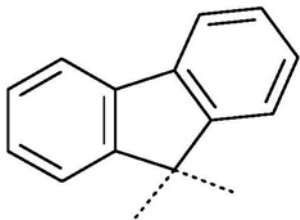


式(1-Y2)

[0053] 其中符号具有与上文相同的含义。

[0054] 优选地,基团 $R^Y$ 在每次出现时相同或不同地代表H,D,具有1至20个、优选1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有2至20个、优选2至10个碳原子的烯基或炔基基团,或具有3至20个、优选3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,或具有5至60个、优选5至40个、更优选5至30个、非常优选5至18个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代;其中两个相邻的取代基 $R^Y$ 可以形成单环或多环的脂族环系或芳族环系,所述环系可以被一个或多个基团R取代。根据一个优选的实施方式,两个相邻的取代基 $R^Y$ 形成式 $(R^Y-1)$ 的环,

[0055]

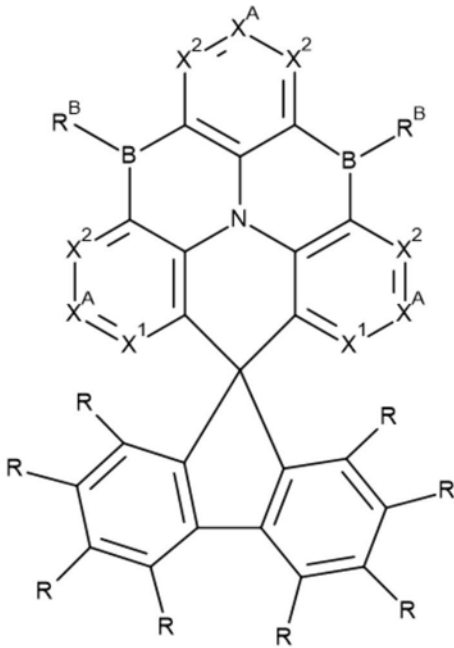


(RY-1)

[0056] 其中式(RY-1)的基团可以被一个或多个基团R取代并且其中虚线键表示与式(1)结构的键合。

[0057] 如果两个相邻的取代基 $R^Y$ 形成式(R<sup>Y</sup>-1)的环,则式(1)的化合物对应于式(1-Y3)的化合物,

[0058]

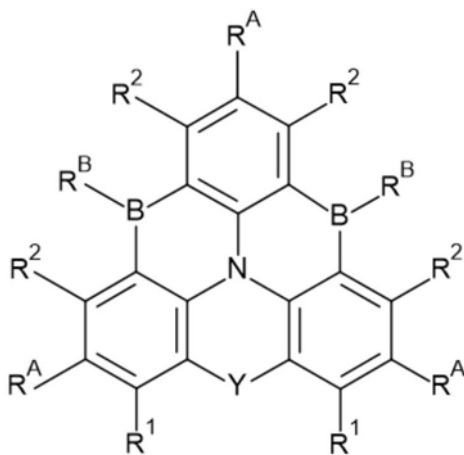


式(1-Y3)

[0059] 其中符号具有与上文相同的含义。

[0060] 根据一个优选的实施方式,式(1)化合物选自式(2)化合物,

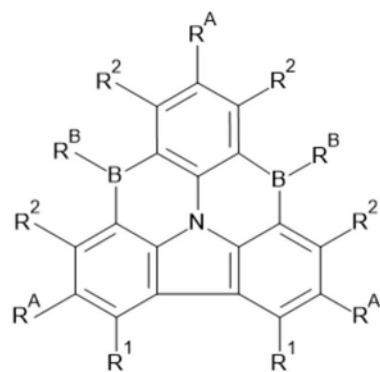
[0061]



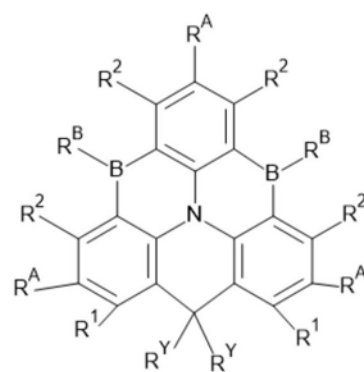
式(2)

[0062] 其中符号具有与上文相同的含义。

[0063] 优选地,式(2)化合物对应于式(2-Y1)、(2-Y2)和(2-Y3)的化合物,

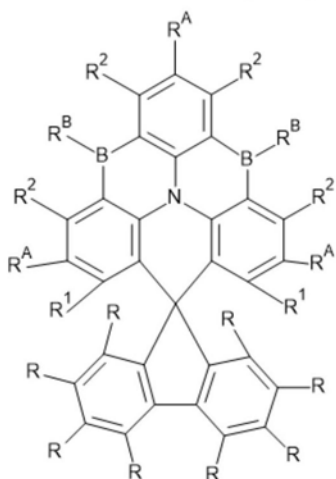


式(2-Y1)



式(2-Y2)

[0064]

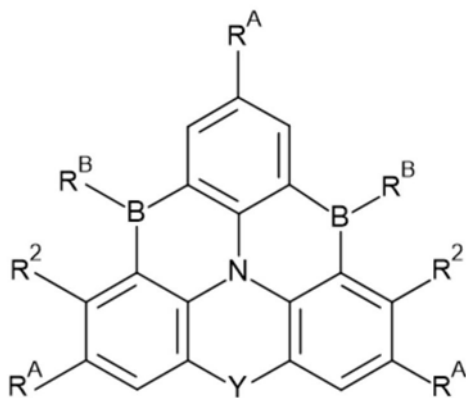


式(2-Y3)

[0065] 其中符号具有与上文相同的含义。

[0066] 根据一个非常优选的实施方式,式(1)化合物选自式(3)化合物,

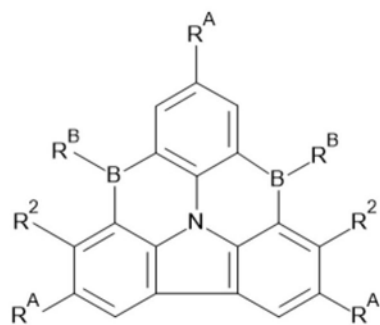
[0067]



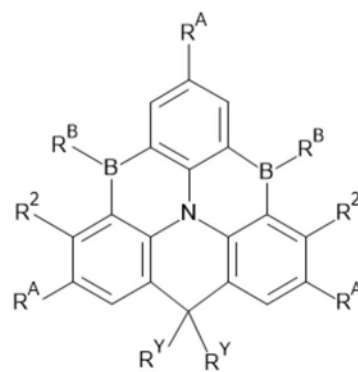
式(3)

[0068] 其中符号具有与上文相同的含义。

[0069] 优选地,式(3)化合物对应于式(3-Y1)、(3-Y2)和(3-Y3)的化合物,

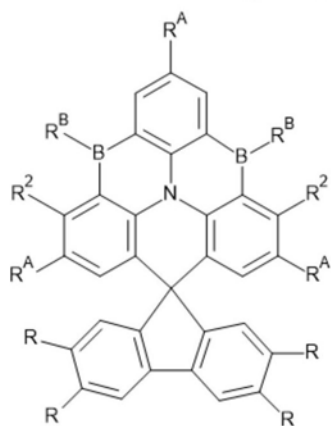


式(3-Y1)



式(3-Y2)

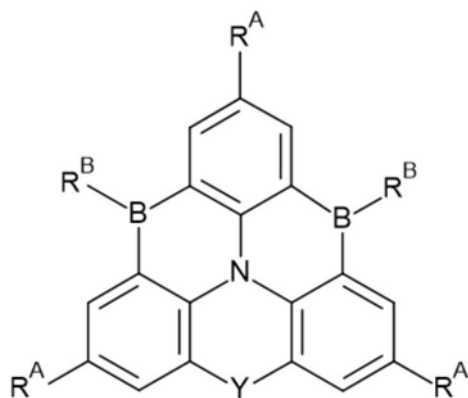
[0070]



式(3-Y3)

[0071] 其中符号具有与上文相同的含义。

[0072] 根据一个特别优选的实施方式,式(1)化合物选自式(4)化合物,



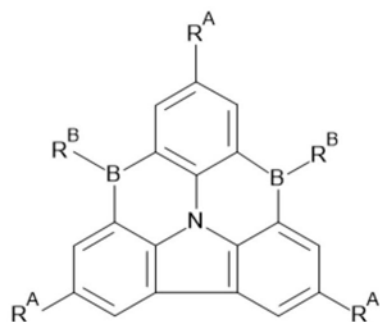
式(4)

[0073]

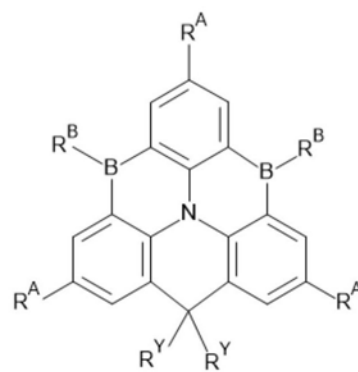
[0074] 其中符号和标记具有与上文相同的含义。

[0075] 优选地,式(4)化合物对应于式(4-Y1)、(4-Y2)和(4-Y3)的化合物,



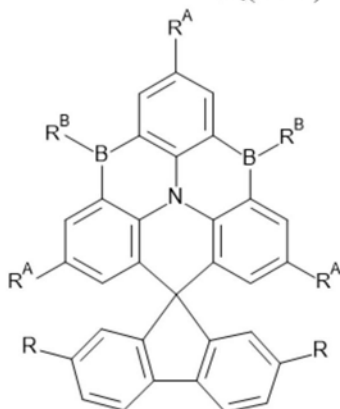


式(4-Y1)



式(4-Y2)

[0076]



式(4-Y3)

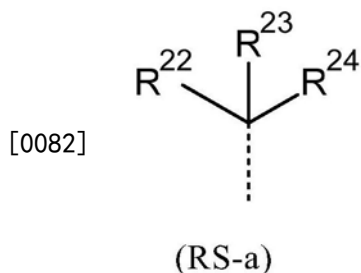
[0077] 其中符号具有与上文相同的含义。

[0078] 优选地,基团 $R^B$ 在每次出现时相同或不同地代表具有1至40个、优选1至20个、更优选1至10个碳原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷氧基基团,或具有2至40个、优选2至20个、更优选1至10个碳原子的烯基或炔基基团,或具有3至40个、优选3至20个、更优选3至10个碳原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷氧基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,其中在每种情况下一个或多个非相邻的 $CH_2$ 基团可以被 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R)_2$ 、 $Ge(R)_2$ 、 $Sn(R)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 、 $S$ 或 $CONR$ 代替,并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br、I、CN或 $NO_2$ 代替,或具有5至60个、优选5至40个、更优选5至30个、非常优选5至18个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代,或具有5至60个、优选5至40个、更优选5至30个、非常优选5至18个芳族环原子的芳烷基或杂芳烷基基团,所述基团可以被一个或多个R基团取代。

[0079] 更优选地,基团 $R^B$ 在每次出现时相同或不同地代表具有1至20个、优选1至10个碳原子的直链的烷基或烷氧基基团,或具有2至20个、优选2至10个碳原子的烯基或炔基基团,或具有3至20个、优选3至10个碳原子的支链或环状的烷基或烷氧基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl或CN代替,或具有5至60个、优选5至40个、更优选5至30个、非常优选5至18个芳族环原子的芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代,或具有5至60个、优选5至40个、更优选5至30个、非常优选5至18个芳族环原子的芳烷基或杂芳烷基基团,所述基团可以被一个或多个R基团取代。

[0080] 非常优选地,基团 $R^B$ 在每次出现时相同地或不同地

[0081] 选自以下通式 (RS-a) 表示的支链或环状的烷基基团



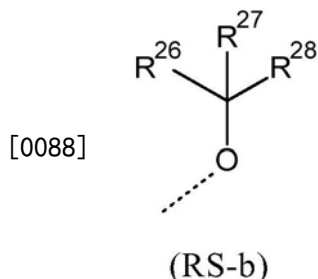
[0083] 其中

[0084]  $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、 $R^{24}$  在每次出现时相同地或不同地选自 H, 具有 1 至 10 个碳原子的直链烷基基团, 或具有 3 至 10 个碳原子的支链或环状的烷基基团, 其中上述基团可以各自被一个或多个基团  $R^{25}$  取代, 并且其中基团  $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、 $R^{24}$  中的两个或所有基团  $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、 $R^{24}$  可以连接形成 (多) 环状烷基基团, 所述基团可以被一个或多个基团  $R^{25}$  取代;

[0085]  $R^{25}$  在每次出现时相同地或不同地选自具有 1 至 10 个碳原子的直链烷基基团, 或具有 3 至 10 个碳原子的支链或环状的烷基基团;

[0086] 条件是在每次出现时, 基团  $R^{22}$ 、 $R^{23}$  和  $R^{24}$  中的至少一个不是 H, 条件是在每次出现时, 所有基团  $R^{22}$ 、 $R^{23}$  和  $R^{24}$  一起具有至少 4 个碳原子, 并且条件是在每次出现时, 如果基团  $R^{22}$ 、 $R^{23}$  和  $R^{24}$  中的两个是 H, 则其余基团不是直链;

[0087] 或选自由以下通式 (RS-b) 表示的支链或环状的烷氧基基团

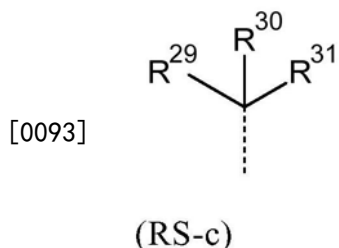


[0089] 其中

[0090]  $R^{26}$ 、 $R^{27}$ 、 $R^{28}$  在每次出现时相同地或不同地选自 H, 具有 1 至 10 个碳原子的直链烷基基团, 或具有 3 至 10 个碳原子的支链或环状的烷基基团, 其中上述基团可以各自被一个或多个如上定义的基团  $R^{25}$  取代, 并且其中基团  $R^{26}$ 、 $R^{27}$ 、 $R^{28}$  中的两个或所有基团  $R^{26}$ 、 $R^{27}$ 、 $R^{28}$  可以连接形成 (多) 环状烷基基团, 所述基团可以被一个或多个如上定义的基团  $R^{25}$  取代;

[0091] 条件是在每次出现时基团  $R^{26}$ 、 $R^{27}$  和  $R^{28}$  中仅一个可以是 H;

[0092] 或选自由以下通式 (RS-c) 表示的芳烷基基团



[0094] 其中

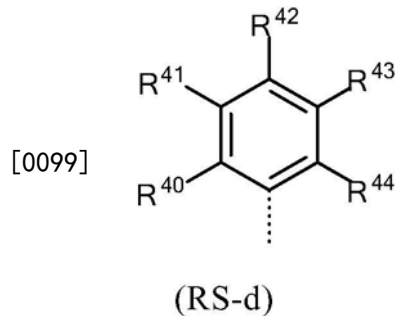
[0095]  $R^{29}$ 、 $R^{30}$ 、 $R^{31}$  在每次出现时相同地或不同地选自 H, 具有 1 至 10 个碳原子的直链烷基

基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代,或具有6至30个芳族环原子的芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代,并且其中基团 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ 、 $R^{31}$ 中的两个或全部可以连接形成(多)环状烷基基团或芳族环系,所述基团或环系中的每个可以被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代;

[0096]  $R^{32}$ 在每次出现时相同地或不同地选自具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,或具有6至24个芳族环原子的芳族环系;

[0097] 条件是在每次出现时,基团 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ 和 $R^{31}$ 中的至少一个不是H,并且在每次出现时,基团 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ 和 $R^{31}$ 中的至少一个是具有至少6个芳族环原子的芳族环系或者含有具有至少6个芳族环原子的芳族环系;

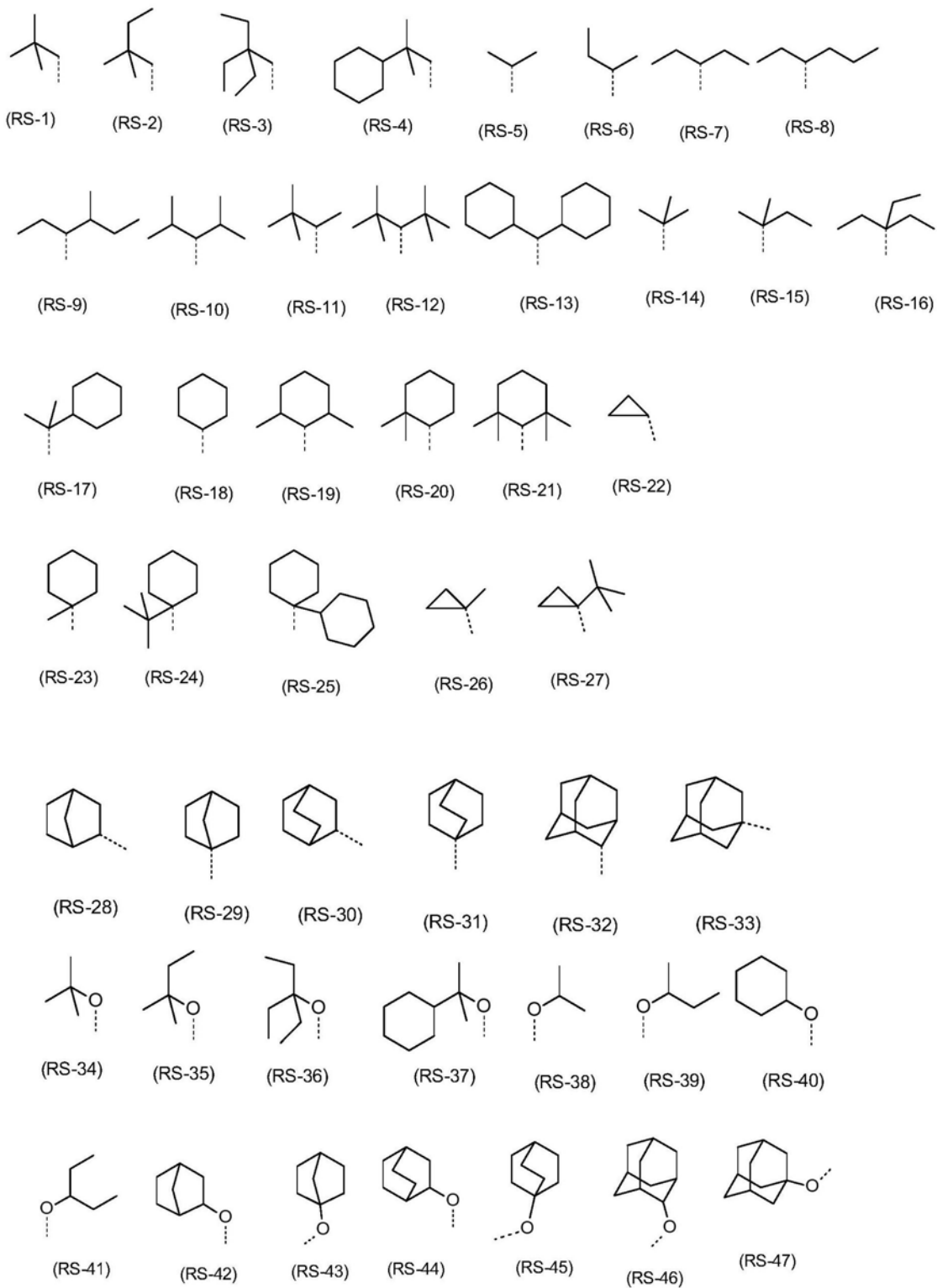
[0098] 或选自由以下通式(RS-d)表示的芳族环系

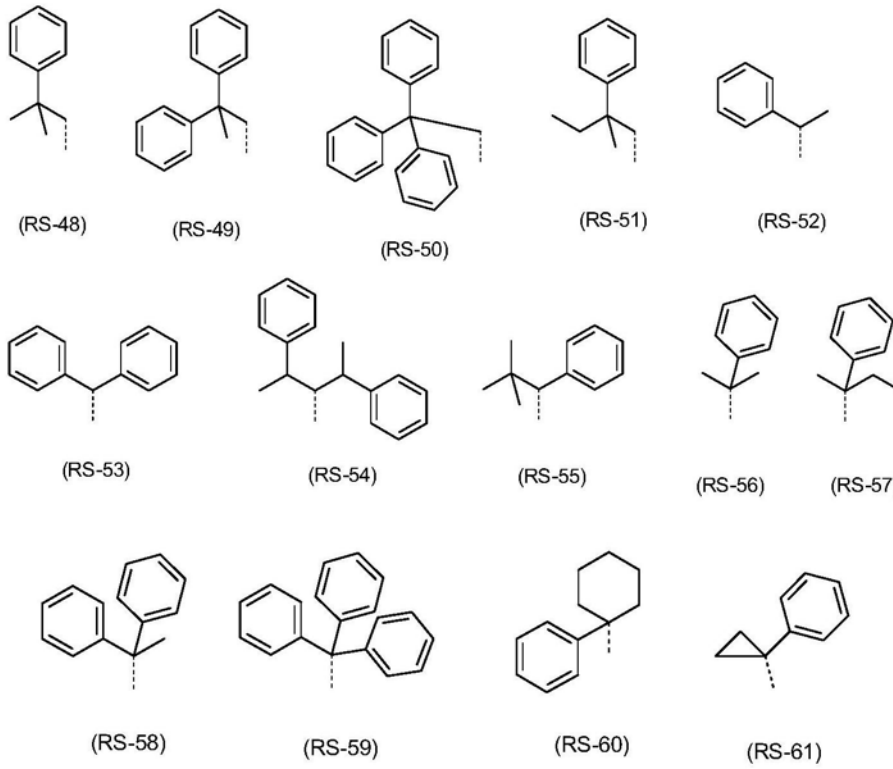


[0100] 其中

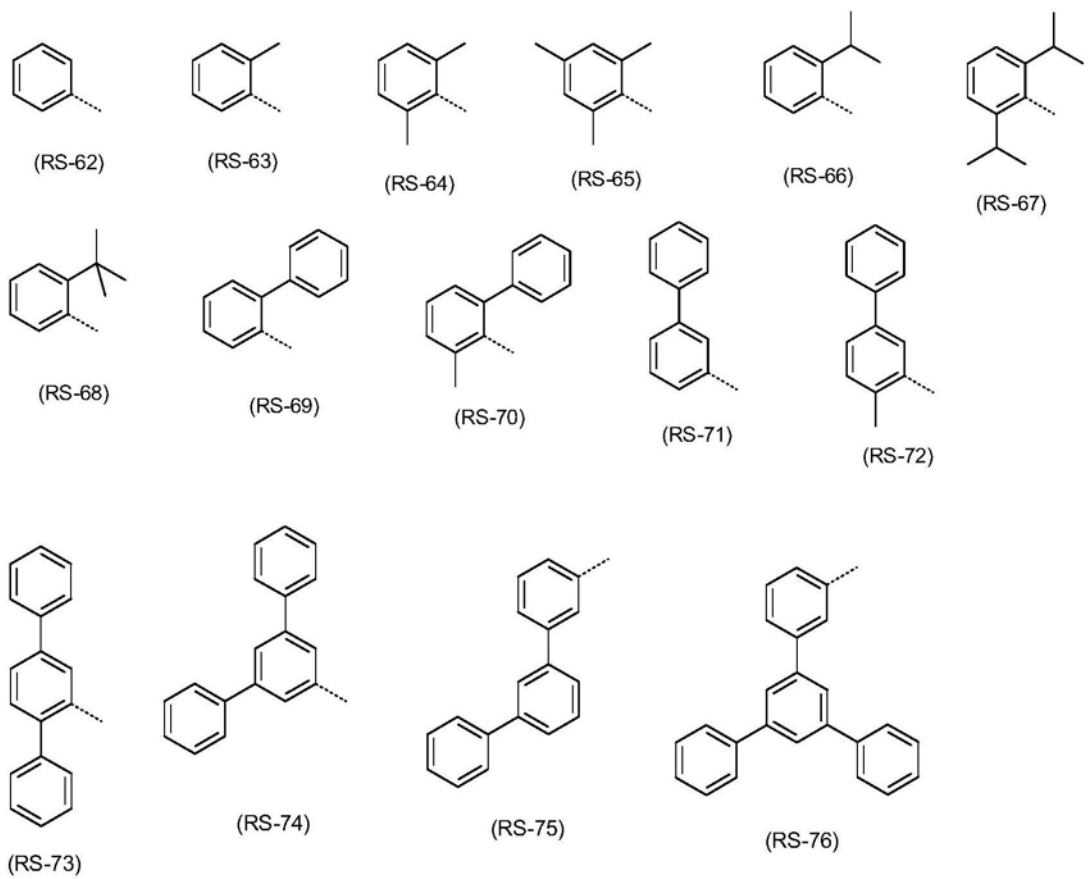
[0101]  $R^{40}$ 至 $R^{44}$ 在每次出现时相同地或不同地选自H,具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代,或具有6至30个芳族环原子的芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代,并且其中基团 $R^{40}$ 至 $R^{44}$ 中的两个或更多个可以连接形成(多)环状烷基基团或芳族环系,所述基团或环系中的每个可以被一个或多个如上定义的基团 $R^{32}$ 取代。

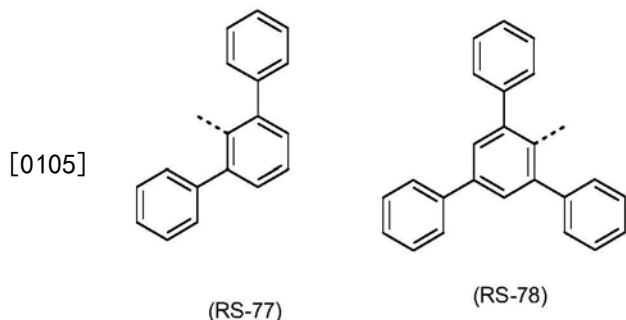
[0102] 合适的式(RS-a)至(RS-d)的基团的实例是基团(RS-1)至(RS-78):





[0104]





[0106] 其中虚线键表示这些基团与式(1)结构的键合,并且其中式(RS-1)至(RS-47)的基团还可以被至少一个如上定义的基团 $R^{25}$ 取代并且基团(RS-48)至(RS-78)还可以被至少一个如上定义的基团 $R^{32}$ 取代。

[0107] 在式(RS-1)至(RS-78)的基团中,基团(RS-62)、(RS-64)、(RS-65)、(RS-67)、(RS-70)、(RS-77)和(RS-78)是优选的。

[0108] 优选地, $R^1$ 在每次出现时相同地或不同地代表H,D,F,CN, $N(Ar)_2$ ,具有1至40个、优选1至20个、更优选1至10个C原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,或具有3至40个、优选3至20个、更优选3至10个C原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,具有5至60个、优选5至40个、更优选5至30个、非常优选5至18个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代。更优选地, $R^1$ 在每次出现时相同地或不同地代表H,D,F,CN,具有1至10个C原子的直链烷基,或具有3至10个C原子的支链或环状的烷基,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代。非常优选地, $R^1$ 代表H。

[0109] 优选地, $R^2$ 和 $R^A$ 在每次出现时相同地或不同地代表H,D,F,Cl,Br,I,CN, $N(Ar)_2$ ,具有1至40个、优选1至20个、更优选1至10个C原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,或具有3至40个、优选3至20个、更优选3至10个C原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,其中在每种情况下一个或多个非相邻的 $CH_2$ 基团可以被 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R)_2$ 、 $Ge(R)_2$ 、 $Sn(R)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 、 $S$ 或 $CONR$ 代替,并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br、I、CN或 $NO_2$ 代替,具有5至60个、优选1至40个、更优选1至30个、非常优选1至18个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代,或具有5至60个、优选1至40个、更优选1至30个、非常优选1至18个芳族环原子的芳烷基或杂芳烷基基团,所述基团可以被一个或多个R基团取代。

[0110] 更优选地, $R^2$ 和 $R^A$ 在每次出现时相同地或不同地代表H,D,F,CN,具有1至40个、优选1至20个、更优选1至10个C原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,或具有3至40个、优选3至20个、更优选3至10个C原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,其中在每种情况下一个或多个非相邻的 $CH_2$ 基团可以被 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $O$ 或 $S$ 代替,并且其中一个或多个H原子可以被D、F代替,具有5至60个、优选1至40个、更优选1至30个、非常优选1至18个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代,或具有5至60个、优选1至40个、更优选1至30个、非常优选1至18个芳族环原子的芳烷基或杂芳烷基基团,所述基团可以被一个或多个R基团取代。

[0111] 非常优选地,  $R^2$ 和 $R^A$ 在每次出现时相同地或不同地代表,

[0112] H,D,F,CN;或

[0113] 式(RS-a)的基团、式(RS-b)的基团、式(RS-c)的基团或式(RS-d)的基团,其中所述式(RS-a)、(RS-b)、(RS-c)和(RS-d)的基团具有与权利要求6中相同的定义;或

[0114] 式(ArL-1)的基团,



式(ArL-1)

[0116] 其中式(ArL-1)中的虚线键表示与式(1)结构的键合,其中 $\text{Ar}^2$ 、 $\text{Ar}^3$ 在每次出现时相同地或不同地代表具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代;并且其中m是选自1至10的整数。

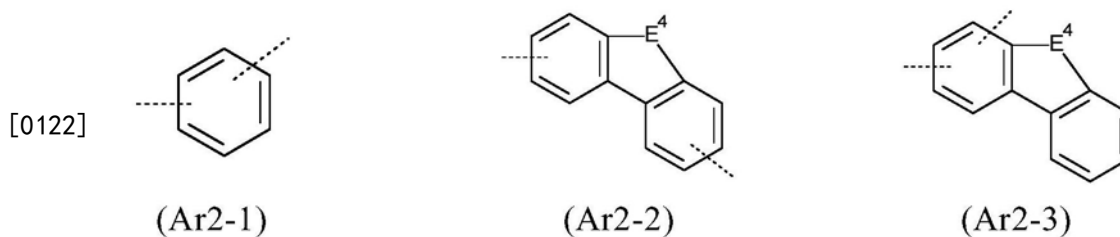
[0117] 根据一个优选的实施方式,基团 $R^2$ 或 $R^A$ 中的至少一个代表式(RS-a)的基团、式(RS-b)的基团、式(RS-c)的基团或式(RS-d)的基团,其中所述式(RS-a)、(RS-b)、(RS-c)和(RS-d)的基团如上所定义。

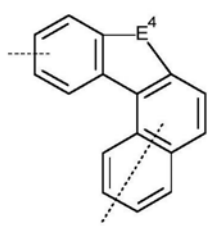
[0118] 根据一个优选的实施方式,基团 $R^B$ 和 $R^A$ 在每次出现时相同地或不同地选自式(RS-a)、(RS-b)、(RS-c)和(RS-d)的基团,其中所述式(RS-a)、(RS-b)、(RS-c)和(RS-d)的基团具有与上文相同的定义。

[0119] 根据一个优选的实施方式,基团R、 $R^2$ 或 $R^A$ 中的至少一个代表如上定义的式(ArL-1)的基团。

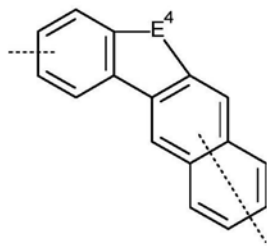
[0120] 优选地,式(ArL-1)基团中的标记m是选自1至6、非常优选1至4的整数。

[0121] 在式(ArL-1)中,优选地,基团 $\text{Ar}^2$ 选自式(Ar2-1)至(Ar2-25)的基团,

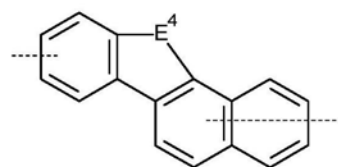




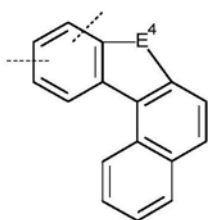
(Ar2-4)



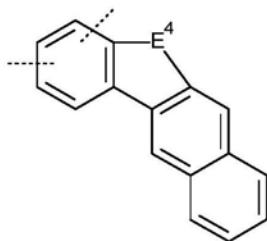
(Ar2-5)



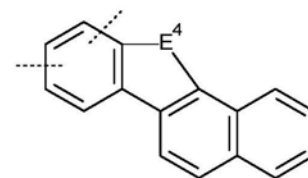
(Ar2-6)



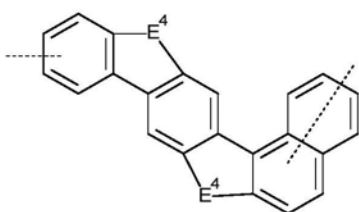
(Ar2-7)



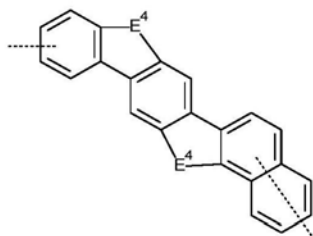
(Ar2-8)



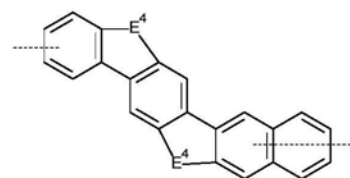
(Ar2-9)



(Ar2-10)

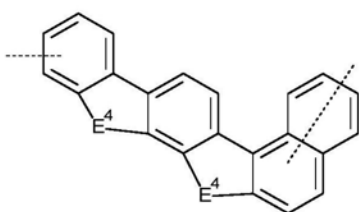


(Ar2-11)

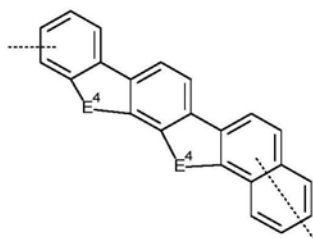


(Ar2-12)

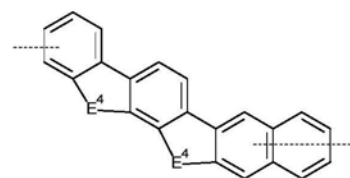
[0123]



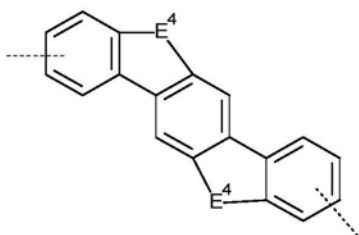
(Ar2-13)



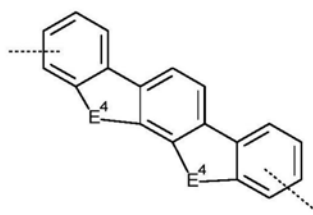
(Ar2-14)



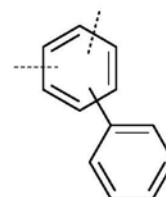
(Ar2-15)



(Ar2-16)

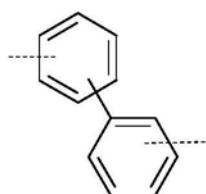


(Ar2-17)

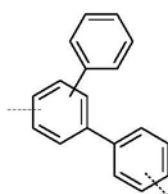


(Ar2-18)

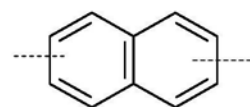




(Ar2-19)

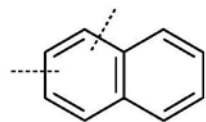


(Ar2-20)

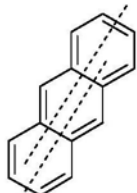


(Ar2-21)

[0124]



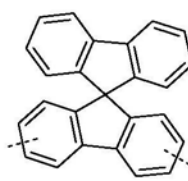
(Ar2-22)



(Ar2-23)



(Ar2-24)



(Ar2-25)

[0125] 其中虚线键表示与式(1)结构的键合和与基团 $Ar^2$ 或 $Ar^3$ 的键合,并且式(Ar2-1)至(Ar2-25)的基团可以在每个自由位置被基团R取代,所述基团R具有与上文相同的含义,并且其中:

[0126]  $E^4$ 选自 $-B(R^0)$ 、 $-C(R^0)_2$ 、 $-C(R^0)_2-C(R^0)_2$ 、 $-Si(R^0)_2$ 、 $-C(=O)-$ 、 $-C(=NR^0)-$ 、 $-C(C(R^0))_2$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(=O)-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-N(R^0)-$ 、 $-P(R^0)-$ 和 $-P((=O)R^0)-$ ;

[0127]  $R^0$ 在每次出现时相同地或不同地代表H,D,F,CN,具有1至40个C原子的直链烷基基团,或具有3至40个C原子的支链或环状的烷基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,其中在每种情况下一个或多个非相邻的 $CH_2$ 基团可以被 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $S_0$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 或S代替并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br、I、CN或 $NO_2$ 代替,具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代;其中两个相邻的取代基 $R^0$ 可以形成单环或多环的脂族环系或芳族环系,所述环系可以被一个或多个基团R取代,所述基团R具有与上文相同的含义。

[0128] 优选地, $E^4$ 选自 $-C(R^0)_2$ 、 $-Si(R^0)_2$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 或 $-N(R^0)-$ ,其中取代基 $R^0$ 具有与上文相同的含义。

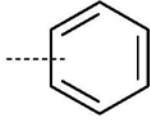
[0129] 优选地, $R^0$ 在每次出现时相同地或不同地代表H,D,F,CN,具有1至40个、优选1至20个、更优选1至10个C原子的直链烷基基团,或具有3至40个、优选3至20个、更优选3至10个C原子的支链或环状的烷基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,具有5至60个、优选5至40个、更优选5至30个、非常优选5至18个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代;其中两个相邻的取代基 $R^0$ 可以形成单环或多环的脂族环系或芳族环系,所述环系可以被一个或多个基团R取代,所述基团R具有与上文相同的含义。合适的基团 $R^0$ 的实例是H、甲基、乙基、丙基、丁基、取代和未取代的苯基、取代和未取代的联苯、取代和未取代的萘基以及取代和未取代的茚。

[0130] 在式(Ar2-1)至(Ar2-25)中,优选下式:

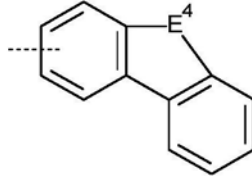
[0131] (Ar2-1)、(Ar2-2)、(Ar2-3)、(Ar2-18)、(Ar2-19)、(Ar2-20)、(Ar2-21)、(Ar2-22)和(Ar2-25)。

[0132] 此外,在式(ArL-1)中,优选的是Ar<sup>3</sup>在每次出现时相同地或不同地选自式(Ar3-1)至(Ar3-27)的基团,

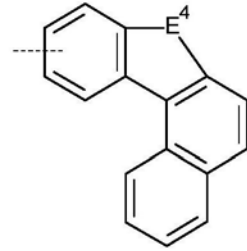
[0133]



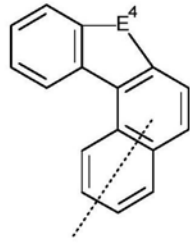
(Ar3-1)



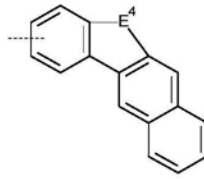
(Ar3-2)



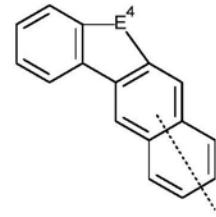
(Ar3-3)



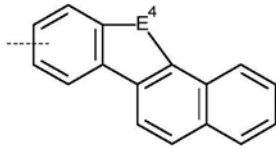
(Ar3-4)



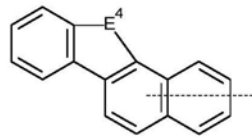
(Ar3-5)



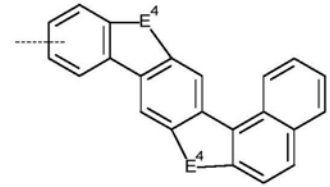
(Ar3-6)



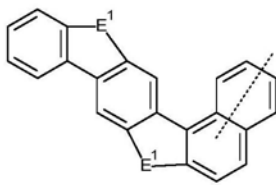
(Ar3-7)



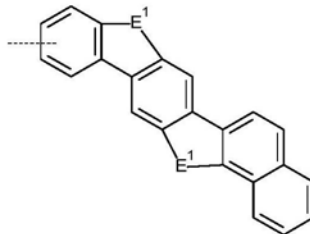
(Ar3-8)



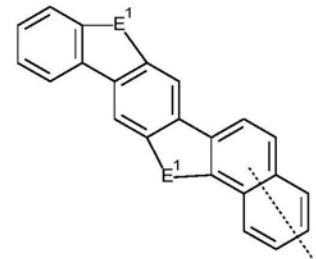
(Ar3-9)



(Ar3-10)

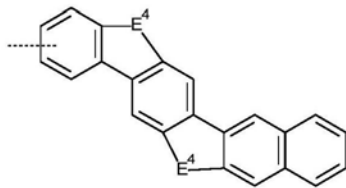


(Ar3-11)

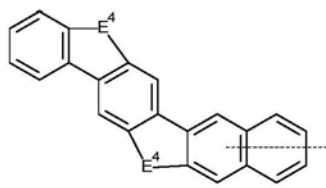


(Ar3-12)

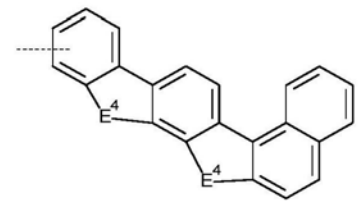
[0134]



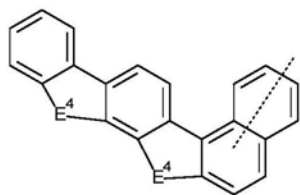
(Ar3-13)



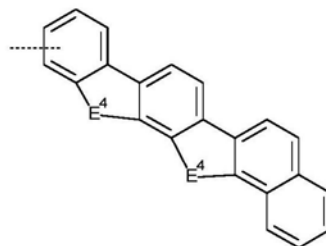
(Ar3-14)



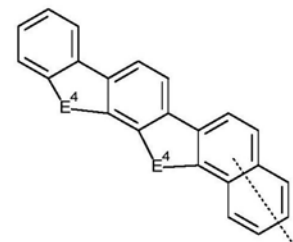
(Ar3-15)



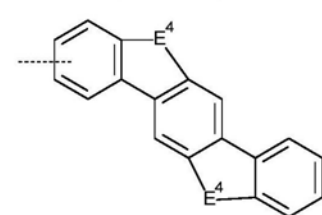
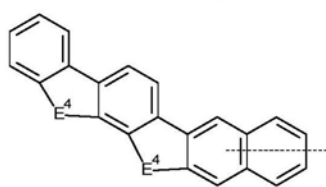
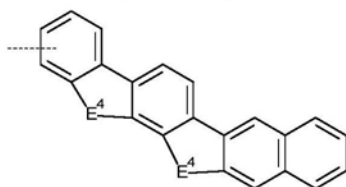
(Ar3-16)

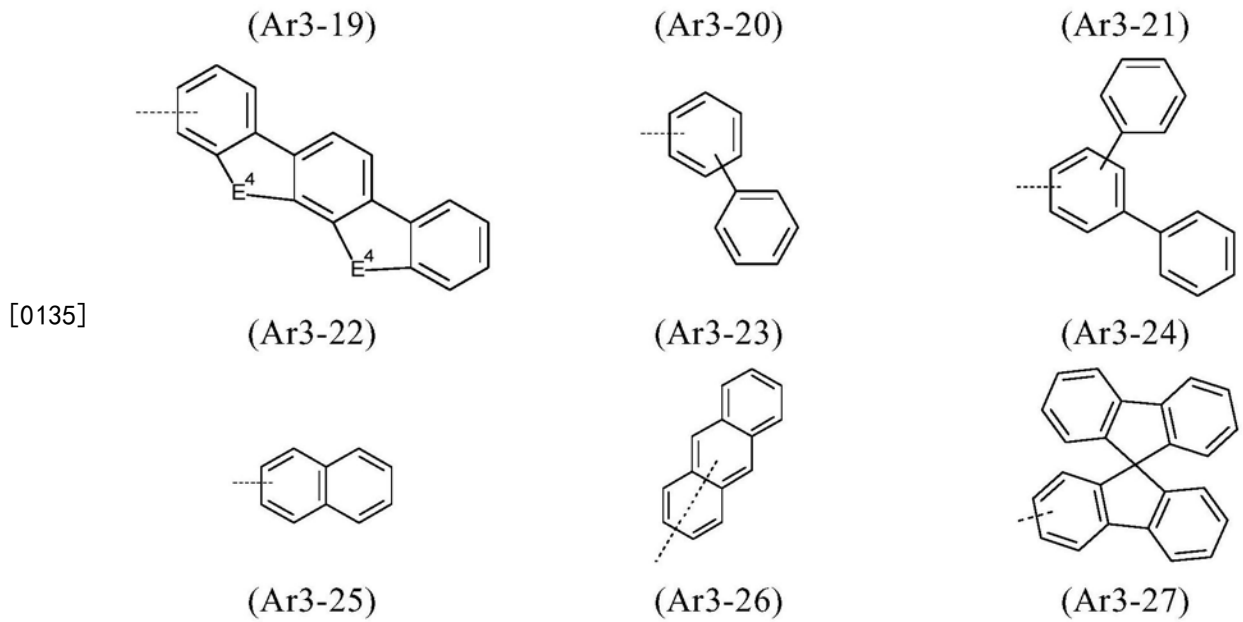


(Ar3-17)



(Ar3-18)



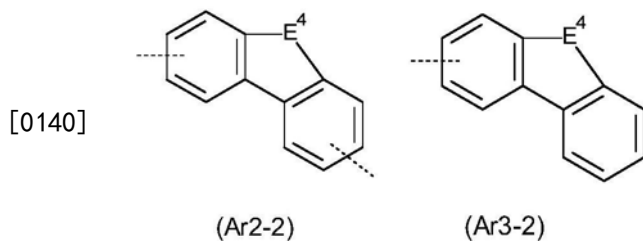


[0136] 其中虚线键表示与 $Ar^2$ 的键合并且其中 $E^4$ 具有与上文相同的含义,并且式(Ar3-1)至(Ar3-27)的基团可以在每个自由位置被基团R取代,所述基团R具有与上文相同的含义。

[0137] 在式(Ar3-1)至(Ar2-27)中,优选下式:

[0138] (Ar3-1)、(Ar3-2)、(Ar3-23)、(Ar3-24)、(Ar3-25)和(Ar3-27)。

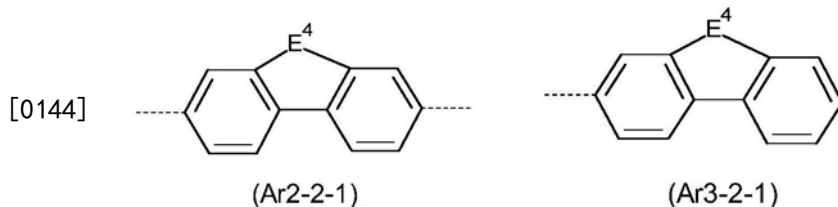
[0139] 根据一个优选的实施方式,至少一个基团 $Ar^2$ 代表式(Ar2-2)的基团和/或至少一个基团 $Ar^3$ 代表式(Ar3-2)的基团,



[0141] 其中

[0142] 式(Ar2-2)中的虚线键指示与式(1)结构的键合和与基团 $Ar^2$ 或 $Ar^3$ 的键合;并且式(Ar3-2)中的虚线键表示与 $Ar^2$ 的键合;并且 $E^4$ 具有与上文相同的含义;并且式(Ar2-2)和(Ar3-2)的基团可以在每个自由位置被基团R取代,所述基团R具有与上文相同的含义。

[0143] 根据一个非常优选的实施方式,至少一个基团 $Ar^2$ 代表式(Ar2-2-1)的基团和/或至少一个基团 $Ar^3$ 代表式(Ar3-2-1)的基团,



[0145] 其中

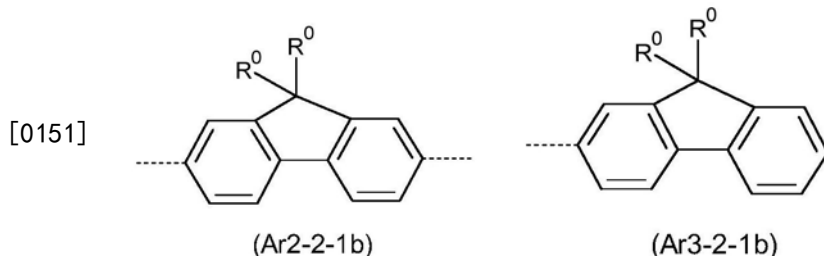
[0146] 式(Ar2-2-1)中的虚线键表示与式(1)结构的键合和与基团 $Ar^2$ 或 $Ar^3$ 的键合;

[0147] 式(Ar3-2-1)中的虚线键表示与 $Ar^2$ 的键合;

[0148] E<sup>4</sup>具有与上文相同的含义;并且

[0149] 式 (Ar2-2-1) 和 (Ar3-2-1) 的基团可以在每个自由位置被基团R取代,所述基团R具有与上文相同的含义。

[0150] 根据一个特别优选的实施方式,至少一个基团Ar<sup>2</sup>代表式 (Ar2-2-1b) 的基团和/或至少一个基团Ar<sup>3</sup>代表式 (Ar3-2-1b) 的基团,



[0152] 其中

[0153] 式 (Ar2-2-1b) 中的虚线键表示与式 (1) 结构的键合和与基团Ar<sup>2</sup>或Ar<sup>3</sup>的键合;

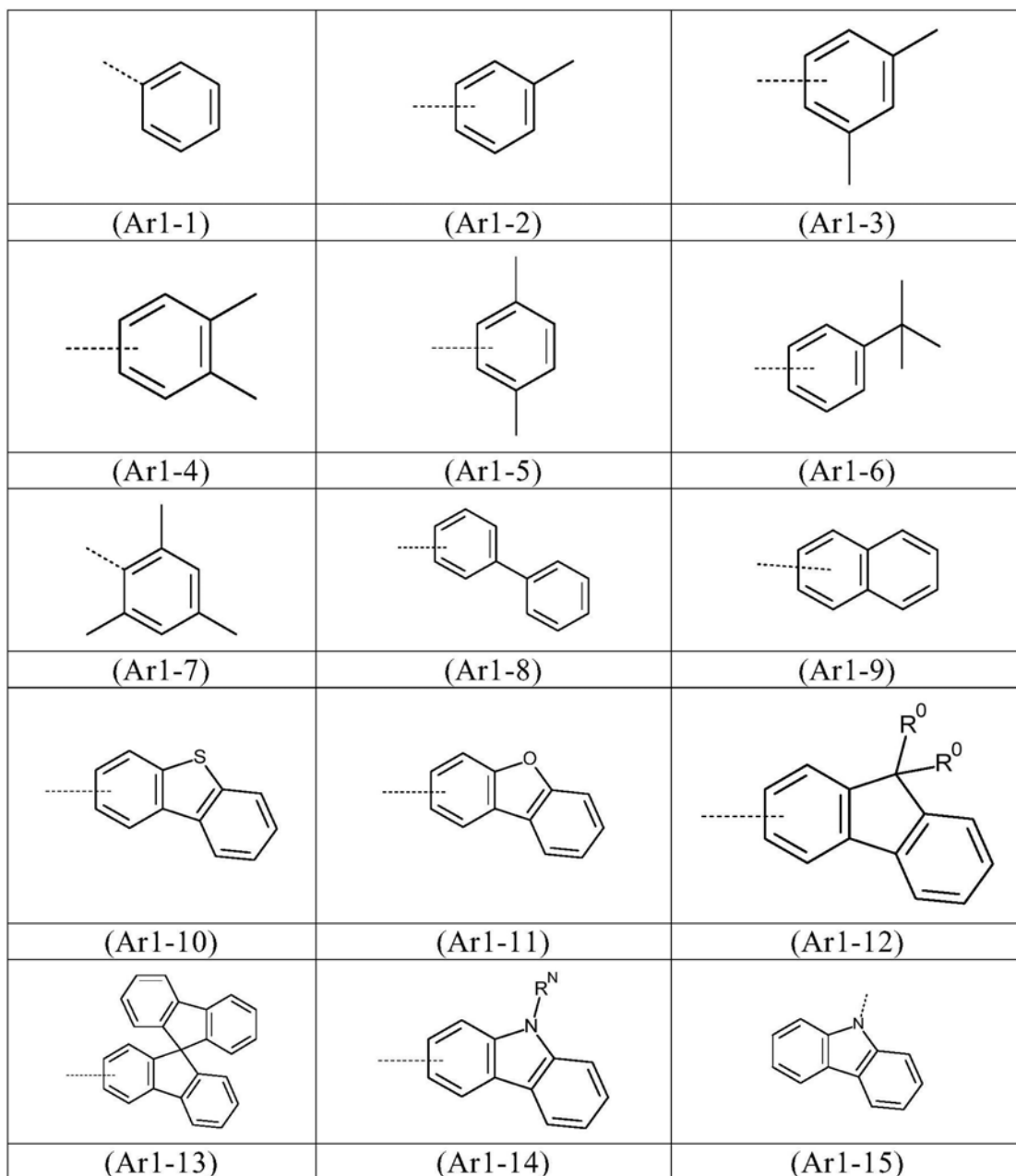
[0154] 式 (Ar3-2-1b) 中的虚线键表示与Ar<sup>2</sup>的键合;

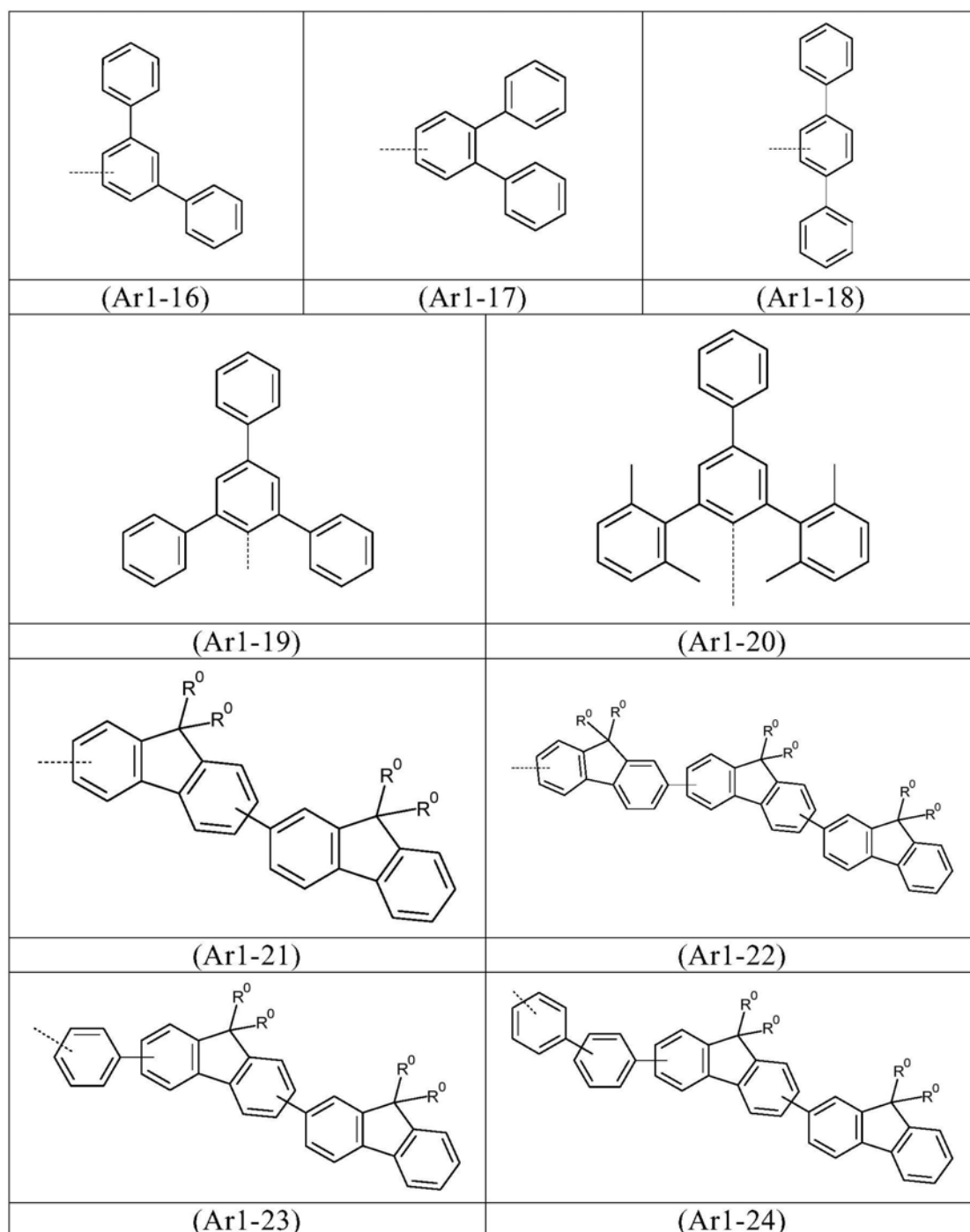
[0155] R<sup>0</sup>具有与上文相同的含义;并且

[0156] 式 (Ar2-2-1b) 和 (Ar3-2-1b) 的基团可以在每个自由位置被基团R取代,所述基团R具有与上文相同的含义。

[0157] 非常合适的基团R<sup>2</sup>和R<sup>A</sup>的实例是H,D,F,CN,具有1至10个C原子的取代和未取代的直链烷基基团,更特别地,甲基、乙基、丙基、丁基、具有3至10个C原子的取代和未取代的支链或环状的烷基基团,更特别是叔丁基,以及选自式 (Ar1-1) 至 (Ar1-24) 的基团的芳族或杂芳族环系,

[0158]





[0159]

[0160] 其中在式 (Ar1-1) 至 (Ar1-24) 中：

[0161] -虚线键表示与式 (1) 结构的键合；

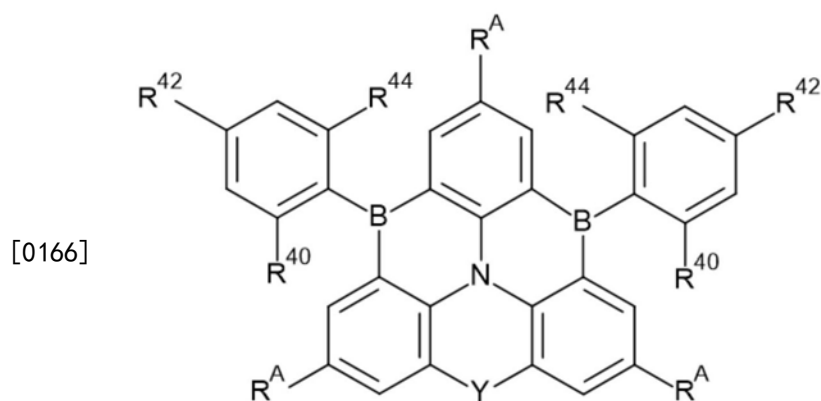
[0162] -式 (Ar1-14) 中的 $R^N$ 在每次出现时相同地或不同地代表H,D,具有1至40个、优选1至20个、更优选1至10个C原子的直链烷基基团,或具有3至40个、优选3至20个、更优选3至10个C原子的支链或环状的烷基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,其中在每种情况下一个或多个非相邻的 $CH_2$ 基团可以被 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 或S代替,并且其中一个或多个H原子可以被D、F或CN代替,具有5至60个、优选5至40个、更优选5至30个、特别优选5至18个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代,其中两个相邻的取代基 $R^N$ 可以形成单环或多环的脂族环系或芳族环

系,所述环系可以被一个或多个基团R取代,其中R具有与权利要求1中相同的含义;

[0163] -式(Ar1-12)和(Ar1-21)至(Ar1-24)中的 $R^0$ 在每次出现时相同地或不同地代表H, D, F, CN, 具有1至40个C原子的直链烷基基团,或具有3至40个C原子的支链或环状的烷基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R取代,其中在每种情况下一个或多个非相邻的 $CH_2$ 基团可以被 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 或S代替并且其中一个或多个H原子可以被D、F、Cl、Br、I、CN或 $NO_2$ 代替,具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R取代;其中两个相邻的取代基 $R^0$ 可以形成单环或多环的脂族环系或芳族环系,所述环系可以被一个或多个基团R取代,所述基团R具有与上文相同的含义;

[0164] -式(Ar1-1)至(Ar1-24)的基团可以在每个自由位置被基团R取代,所述基团R具有与上文相同的含义。

[0165] 根据一个特别优选的实施方式,式(1)化合物选自式(5)化合物,



式(5)

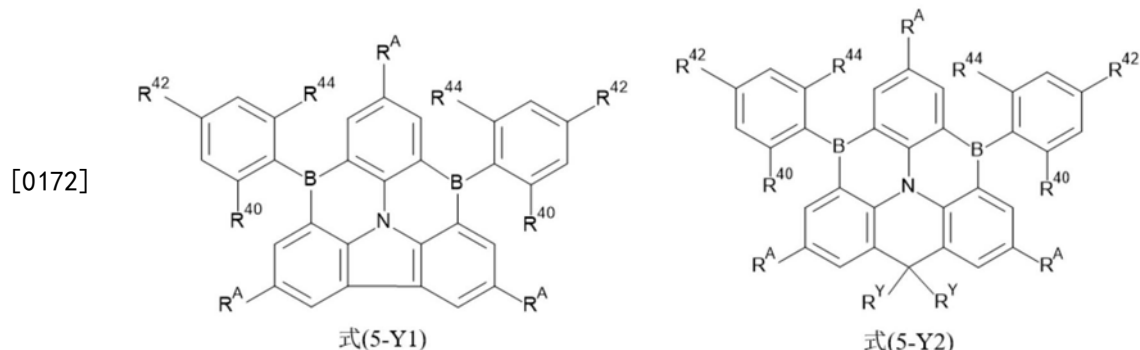
[0167] 其中:

[0168]  $R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$ 在每次出现时相同地或不同地选自H, 具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代,或具有6至30个芳族环原子的芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代;其中 $R^{32}$ 如上文所定义;

[0169] 条件是 $R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$ 中的至少一个不是H;

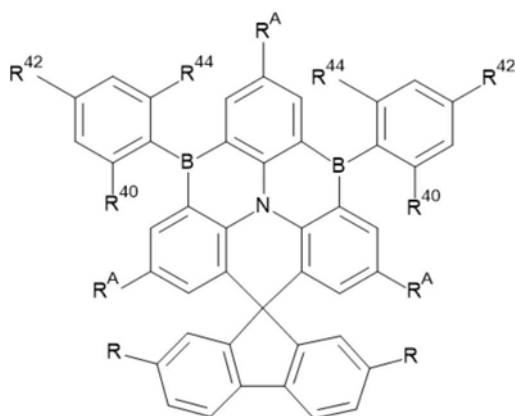
[0170] 并且其它符号具有与上文相同的含义。

[0171] 优选地,式(5)化合物对应于式(5-Y1)、(5-Y2)和(5-Y3)化合物,





[0173]

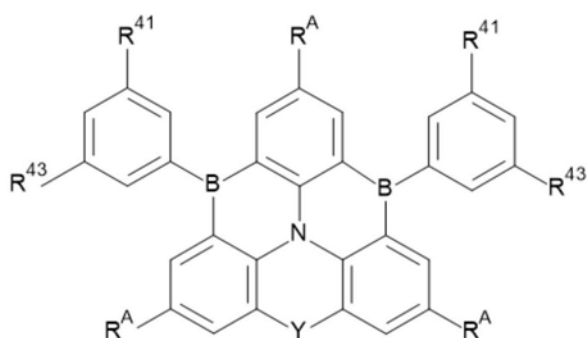


式(5-Y3)

[0174] 其中符号具有与上文相同的含义。

[0175] 根据另一个特别优选的实施方式,式(1)化合物选自式(6)化合物,

[0176]



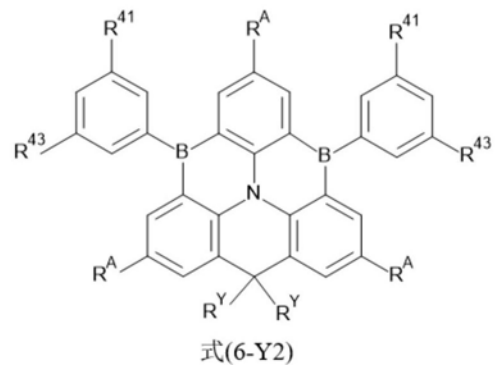
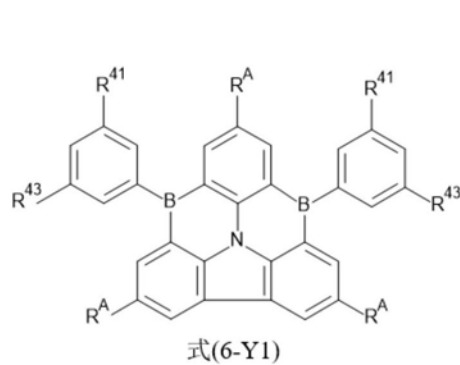
式(6)

[0177] 其中:

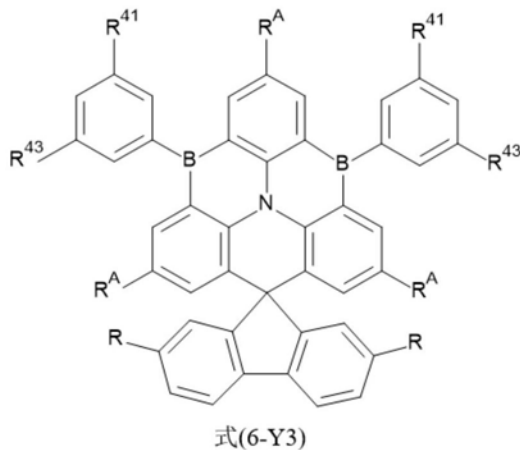
[0178]  $R^{41}$ 、 $R^{43}$ 在每次出现时相同地或不同地选自H,具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代,或具有6至30个芳族环原子的芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代;其中 $R^{32}$ 如上文所定义;

[0179] 条件是 $R^{41}$ 、 $R^{43}$ 中的至少一个不是H。

[0180] 优选地,式(6)化合物对应于式(6-Y1)、(6-Y2)和(6-Y3)化合物,



[0181]

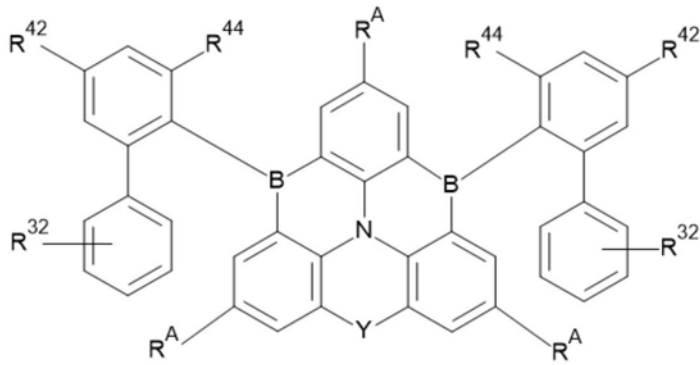


[0182] 其中符号具有与上文相同的含义。

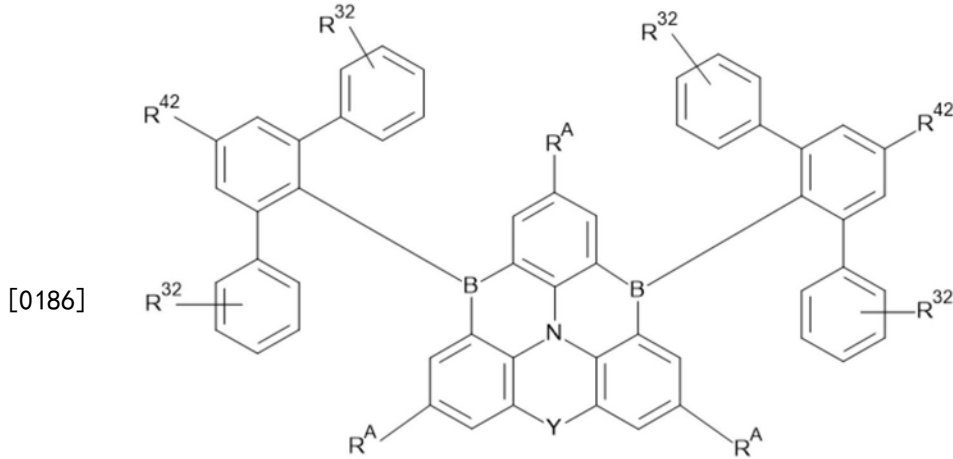
[0183] 基团 $R^{42}$ 在每次出现时相同地或不同地选自H, 具有1至10个碳原子的直链烷基基团, 或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团, 其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代, 或具有6至30个芳族环原子的芳族环系, 所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代, 并且基团 $R^{40}$ 、 $R^{44}$ 在每次出现时相同地或不同地选自具有6至30个芳族环原子的芳族环系, 所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代。

[0184] 根据一个优选的实施方式, 式(5)、(5-Y1)、(5-Y2)和(5-Y3)中的基团 $R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$ 在每次出现时相同地或不同地选自具有1至10个碳原子的直链烷基基团, 或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团, 其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代。更优选地, 基团 $R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$ 在每次出现时相同地或不同地选自具有1至10个、优选1至5个、更优选1至3个碳原子的直链烷基基团, 其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代。在这种情况下, 合适的基团 $R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$ 的实例是甲基、乙基和丁基。

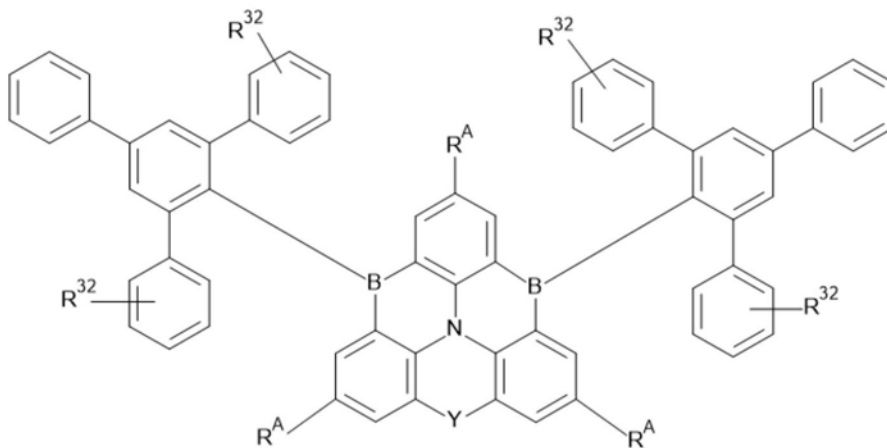
[0185] 根据另一个优选的实施方式, 基团 $R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$ 在每次出现时相同地或不同地选自具有6至30个芳族环原子的芳族环系, 所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代。优选地, 式(1)化合物选自式(5-1)、(5-2)和(5-3)化合物,



式(5-1)



式(5-2)



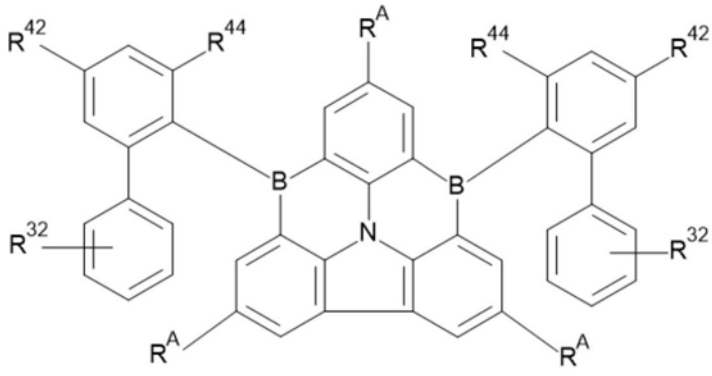
式(5-3)

[0187] 其中

[0188] 在式(5-1)、(5-2)和(5-3)中的每一个中,用 $-R^{32}$ 指出的苯基基团未被取代或被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代;

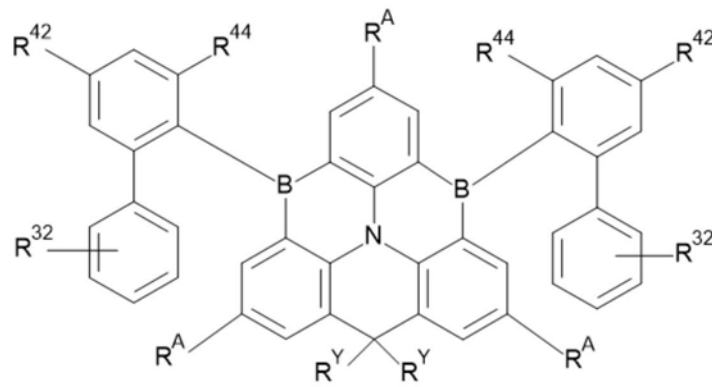
[0189]  $R^{42}$ 和 $R^{44}$ 在每次出现时相同地或不同地选自H,具有1至10个碳原子的直链烷基基团,或具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基基团,其中上述基团可以各自被一个或多个基团 $R^{32}$ 取代;其中 $R^{32}$ 如上文所定义。

[0190] 更优选地,式(5-1)、(5-2)和(5-3)的化合物对应于式(5-1-Y1)、(5-1-Y2)、(5-1-Y3)、(5-2-Y1)、(5-2-Y2)、(5-2-Y3)以及(5-3-Y1)、(5-3-Y2)和(5-3-Y3)的化合物,

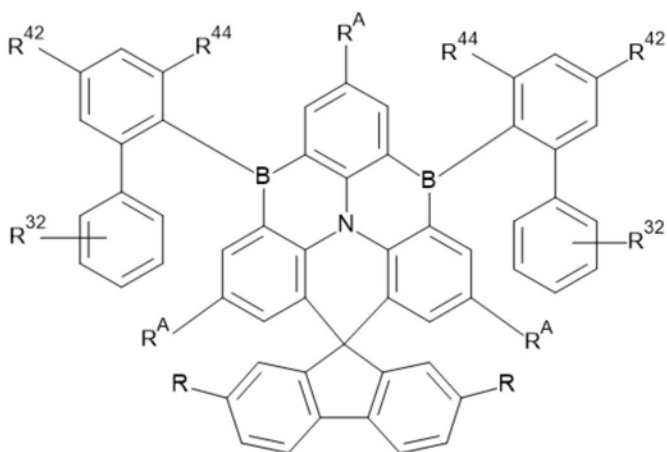


式(5-1-Y1)

[0191]

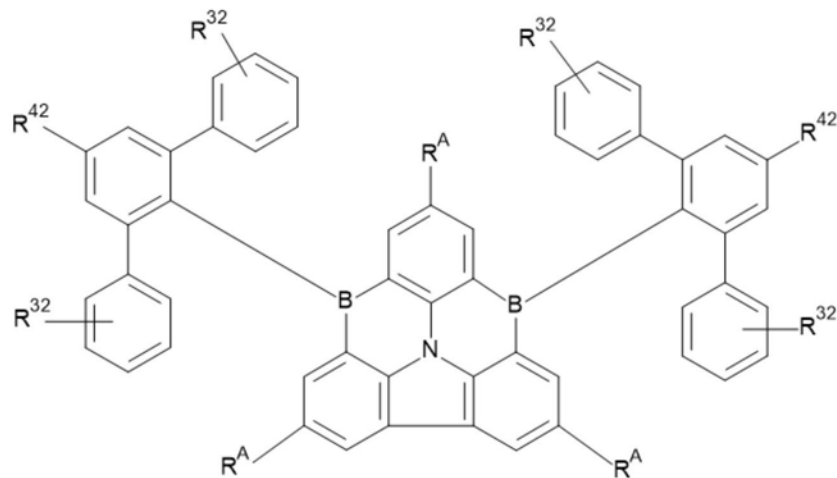


式(5-1-Y2)

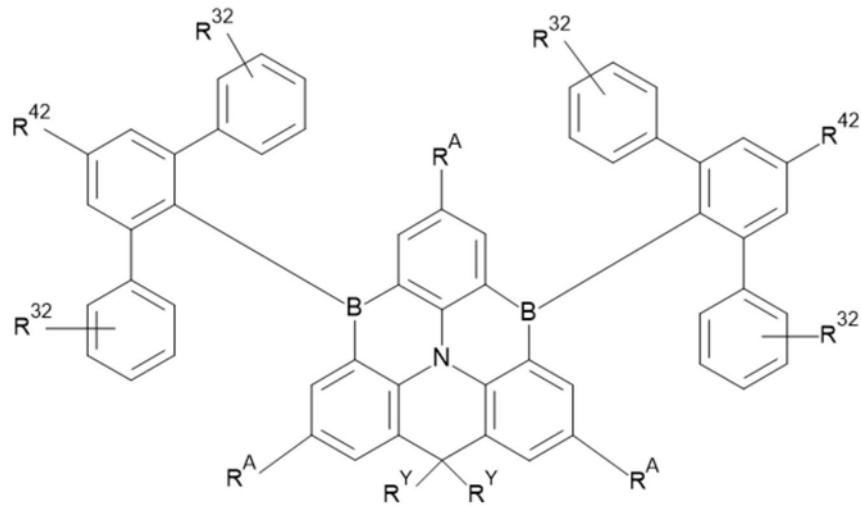


式(5-1-Y3)

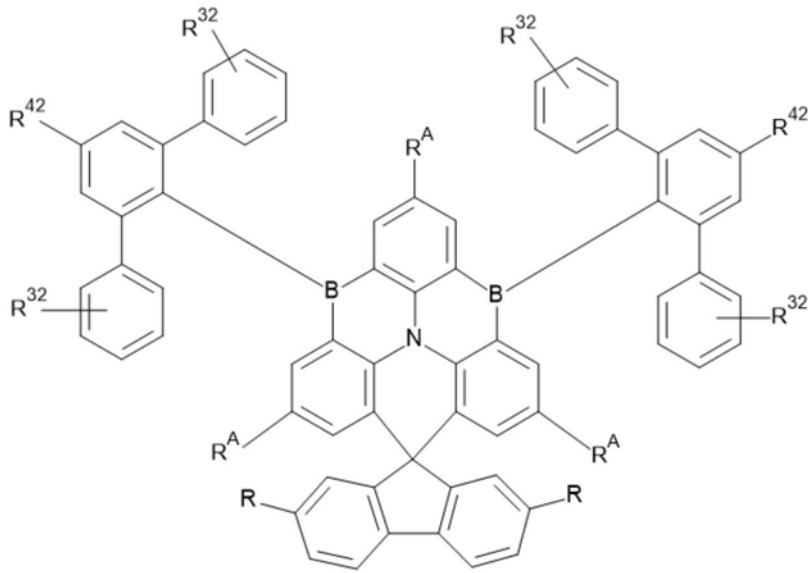
[0192]



式(5-2-Y1)

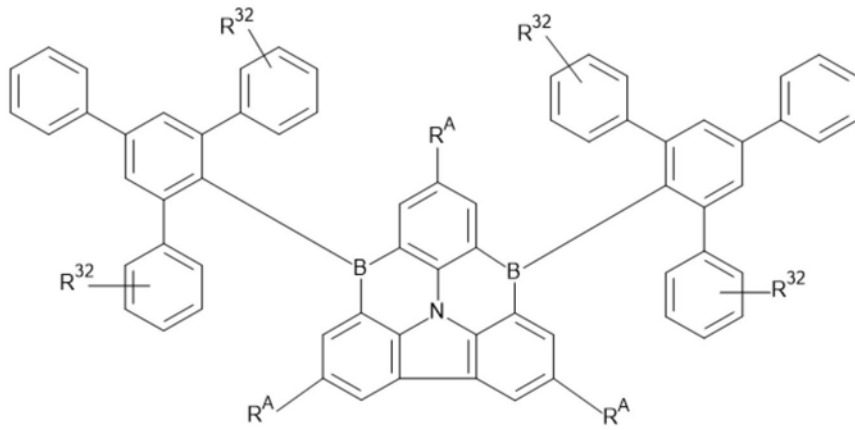


式(5-2-Y2)

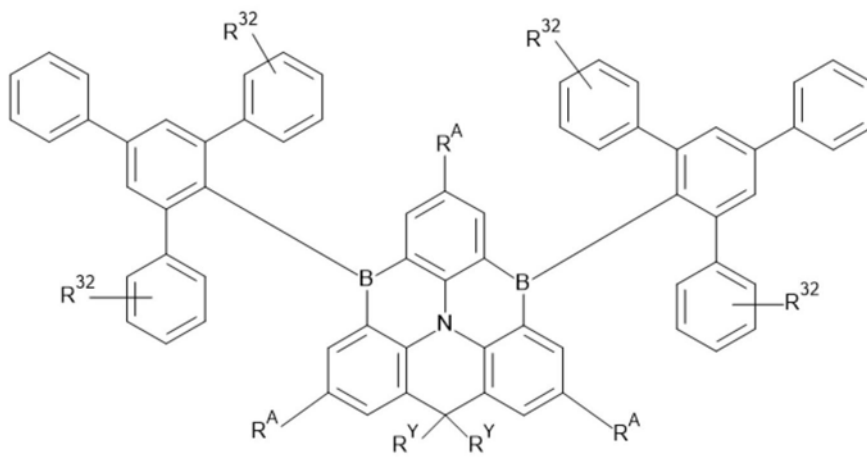


式(5-2-Y3)

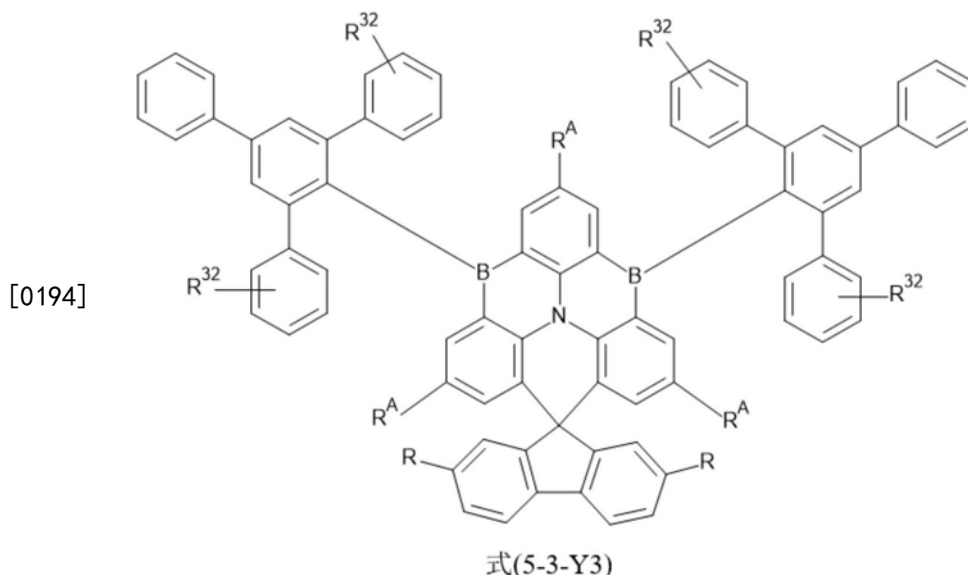
[0193]



式(5-3-Y1)



式(5-3-Y2)



[0195] 其中符号具有与上文相同的含义。

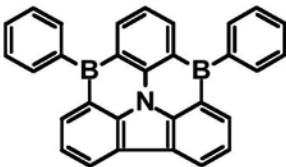
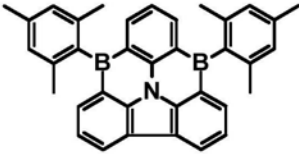
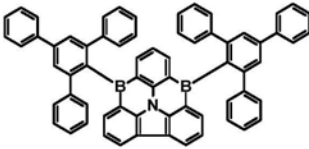
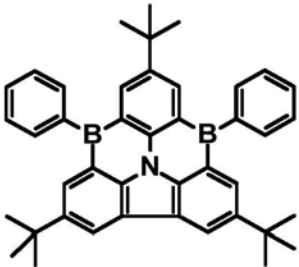
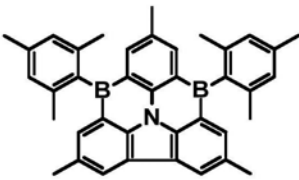
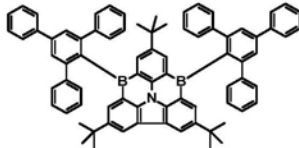
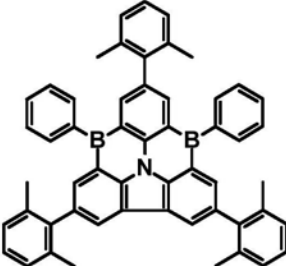
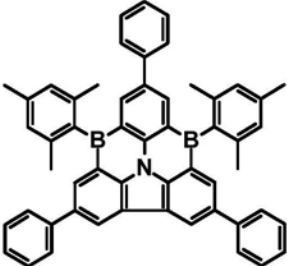
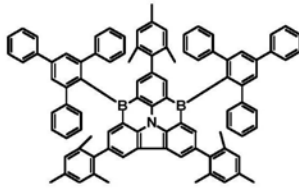
[0196] 优选地,基团R在每次出现时相同地或不同地代表H,D,F,Cl,Br,I,CHO,CN,N(Ar)<sub>2</sub>,Si(R')<sub>3</sub>,具有1至40个、优选1至20个、更优选1至10个C原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,或具有3至40个、优选3至20个、更优选3至10个C原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,所述基团中的每个可以被一个或多个基团R'取代,其中在每种情况下一个或多个非相邻的CH<sub>2</sub>基团可以被R' C=CR'、O或S代替并且其中一个或多个H原子可以被D、F或CN代替,具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述环系在每种情况下可以被一个或多个基团R'取代,或具有5至60个、优选5至40个、更优选5至30个、非常优选5至18个芳族环原子的芳氧基基团,所述基团可以被一个或多个基团R'取代,其中两个相邻基团R可以形成单环或多环的脂族环系或芳族环系,所述环系可以被一个或多个基团R'取代。当R选自芳族和杂芳族环系时,其优选地选自具有5至40个、优选5至30个、更优选5至18个芳族环原子的芳族和杂芳族环系或选自具有5至60个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,对应于如上定义的式(ArL-1)的基团。

[0197] 优选地,基团Ar在每次出现时相同地或不同地是具有5至18个、优选6至18个芳族环原子的芳族或杂芳族环系,所述环系在每种情况下也可以被一个或多个基团R'取代。

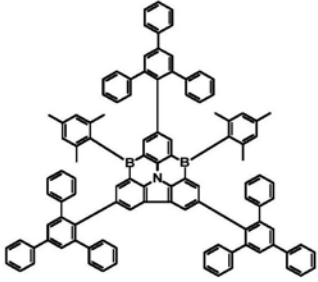
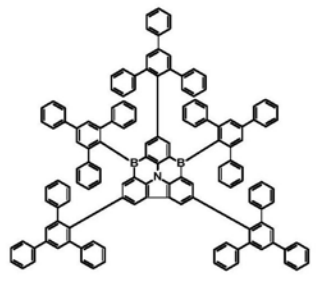
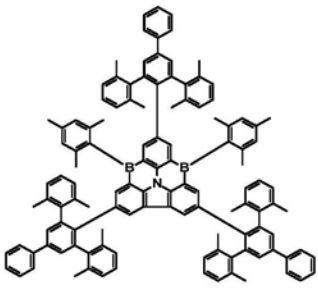
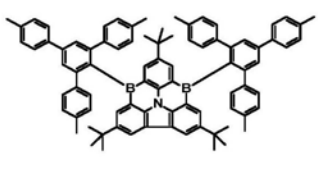
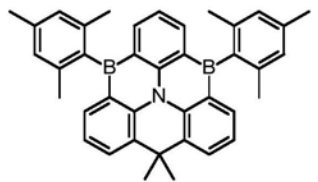
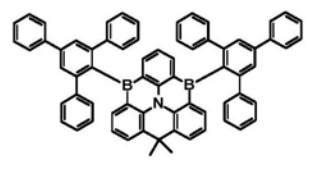
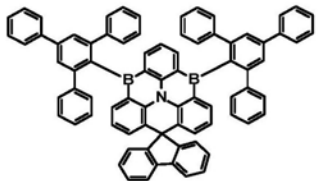
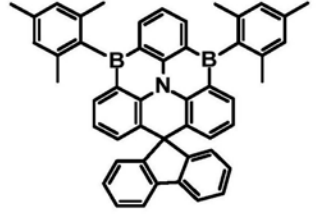
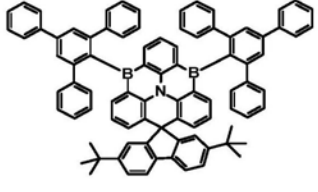
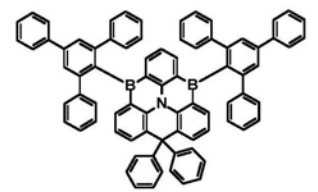
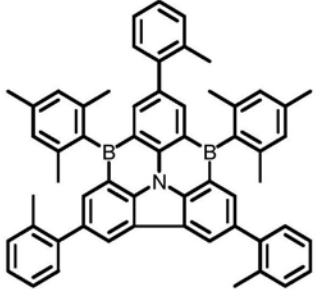
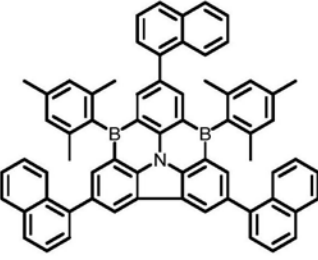
[0198] 优选地,R'在每次出现时相同地或不同地代表H,D,F,Cl,Br,I,CN,具有1至10个C原子的直链的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,或具有3至10个C原子的支链或环状的烷基、烷氧基或硫代烷基基团,其中一个或多个H原子可以被D或F代替,或具有5至18个、优选6至18个C原子的芳族或杂芳族环系。

[0199] 以下化合物是式(1)化合物的实例:

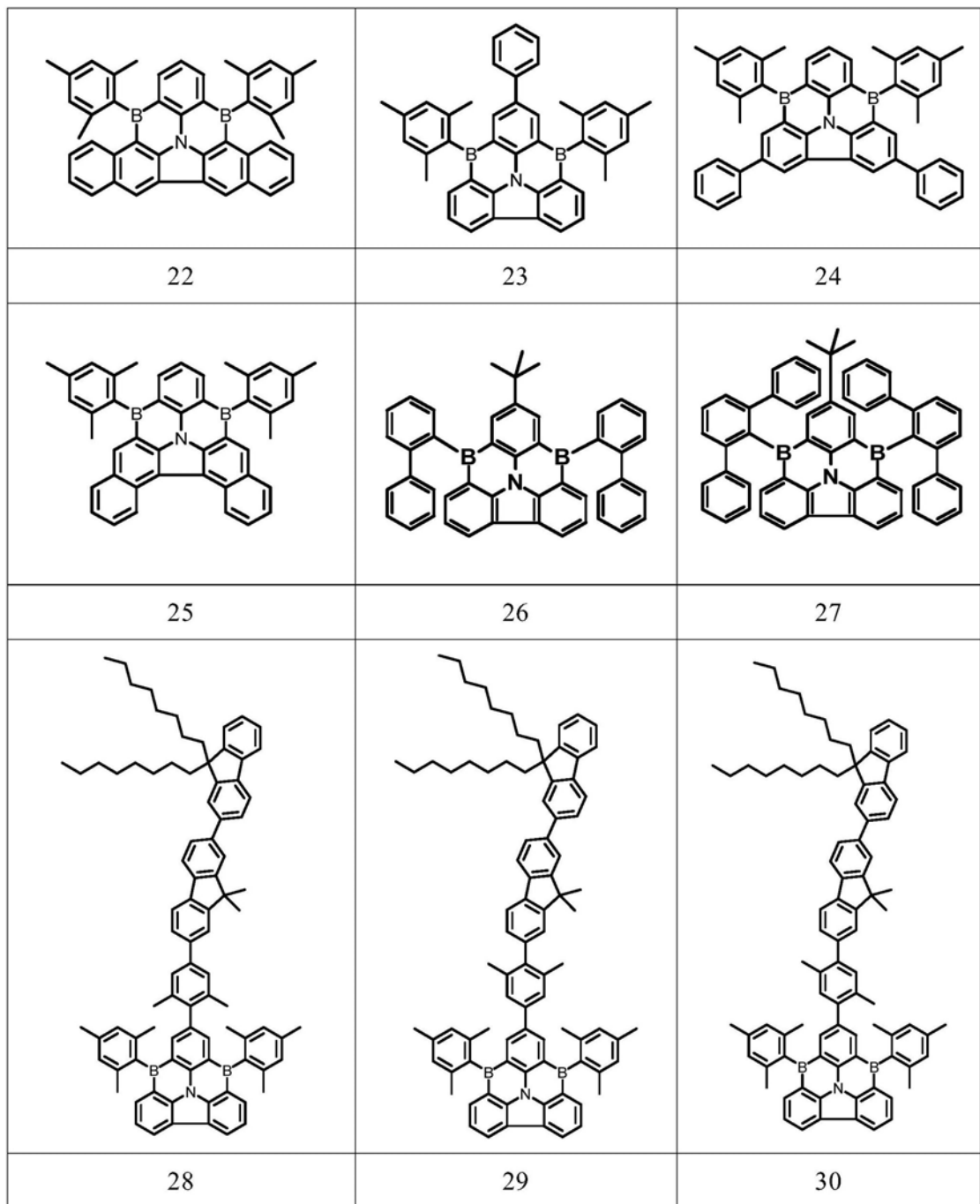
[0200]

		
<p>1</p>	<p>2</p>	<p>3</p>
		
<p>4</p>	<p>5</p>	<p>6</p>
		
<p>7</p>	<p>8</p>	<p>9</p>

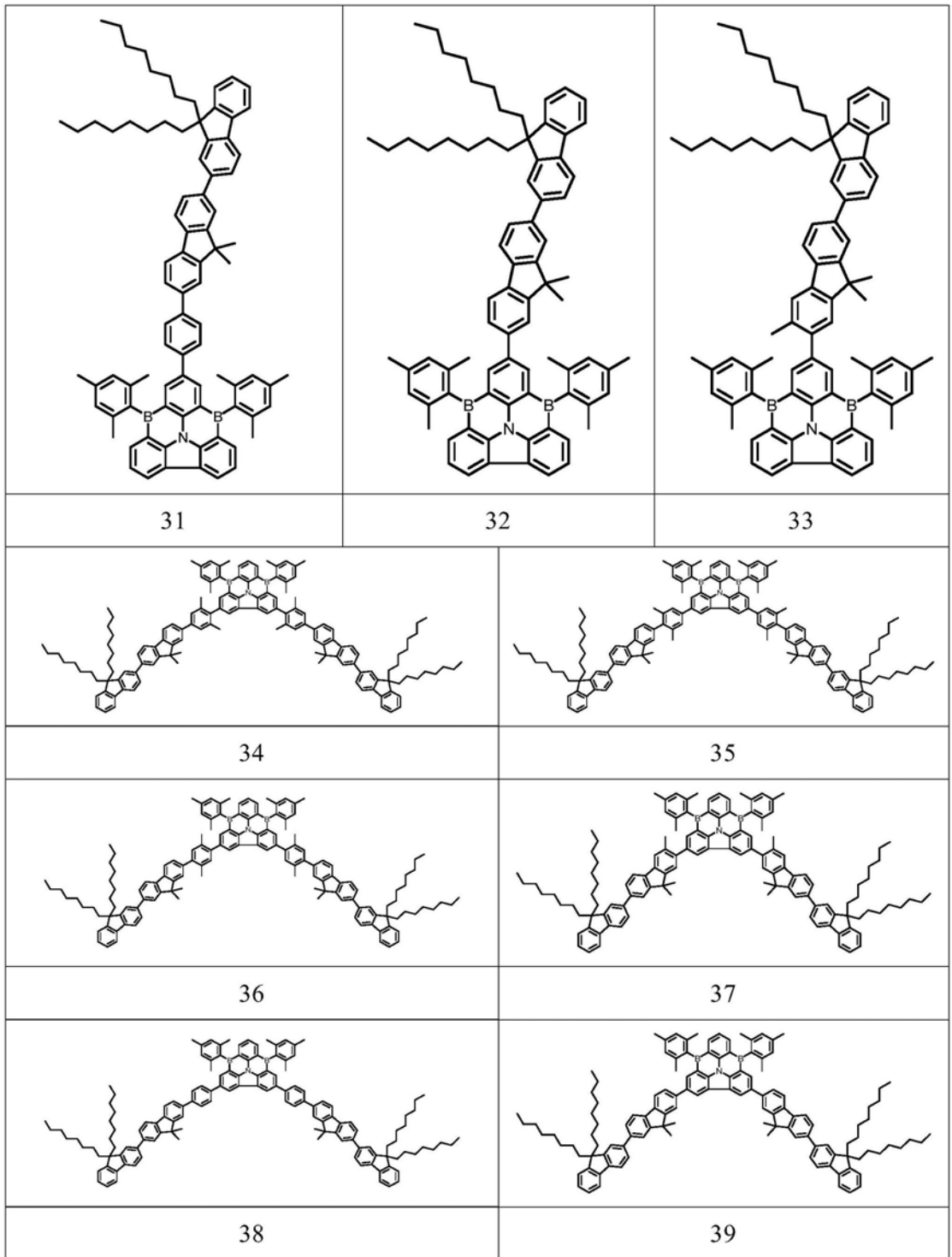


		
10	11	12
		
13	14	15
		
16	17	18
		
19	20	21

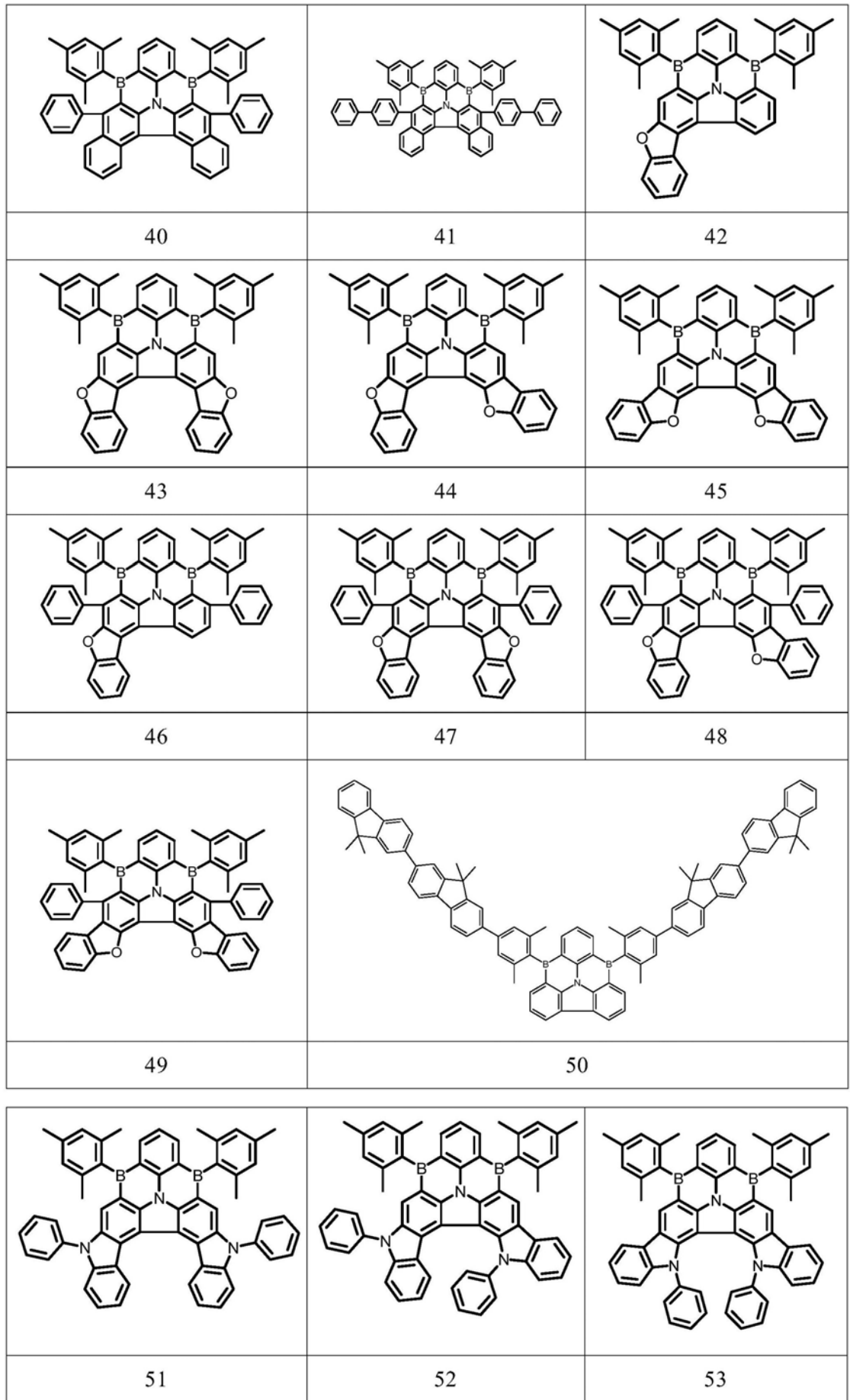
[0201]



[0202]



[0203]

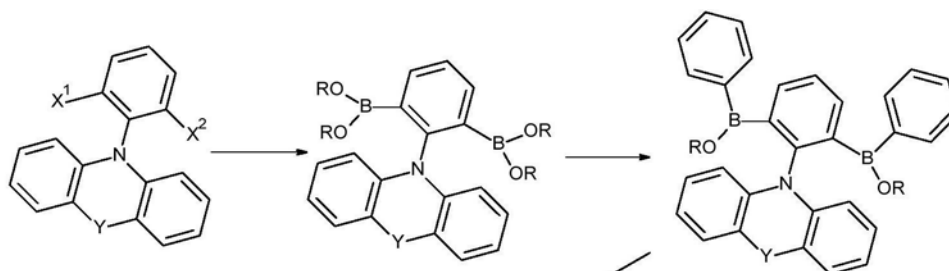


[0204]

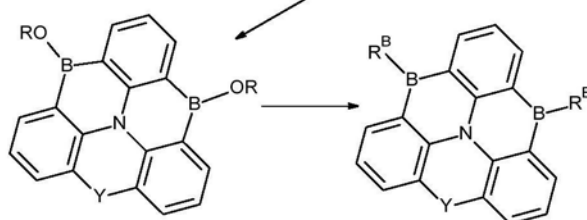
[0205]

[0206] 根据本发明的化合物可以通过本领域技术人员已知的合成步骤例如溴化、Suzuki偶联、Ullmann偶联、Hartwig-Buchwald偶联等来制备。合适的合成方法的实例在下面的方案1和2中用一般术语描述。

[0207] 方案1

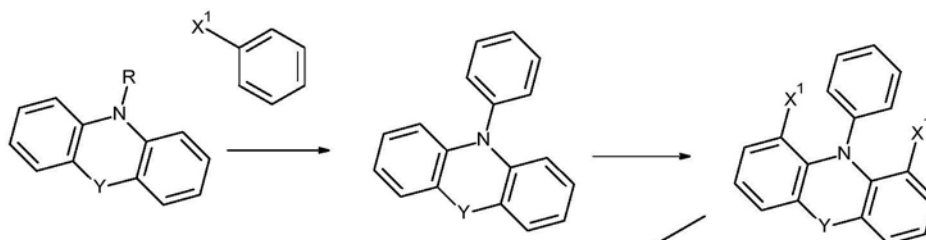


[0208]

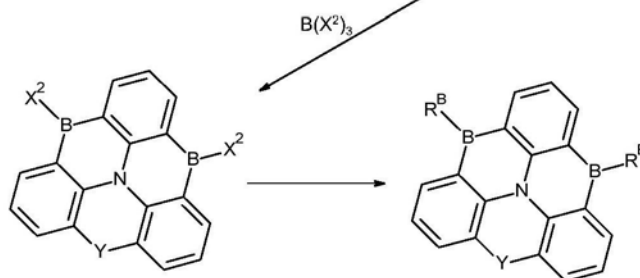


[0209] 其中 $X^1$ 和 $X^2$ 是离去基团,优选选自卤素如Br、Cl、I,优选选自Br,其中存在于同一硼酸或酯基团中的两个基团R可以彼此键合并形成环,其中符号Y和 $R^B$ 具有与上文相同的含义并且其中方案1中描述的化合物还可以被如上定义的基团 $R^1$ 、 $R^2$ 和 $R^A$ 取代。

[0210] 方案2



[0211]



[0212] 其中 $X^1$ 和 $X^2$ 是离去基团,优选选自卤素如Br、Cl、I,优选选自Br,其中符号Y和 $R^B$ 具有与上文相同的含义,并且其中方案2中描述的化合物还可以被如上定义的基团 $R^1$ 、 $R^2$ 和 $R^A$ 取代。

[0213] 因此,本发明涉及合成根据本发明的化合物的方法,所述方法包括其中三芳基胺被至少两个硼酸或酯基团取代的步骤,其中发生环化反应使得硼酸或酯基团与三芳基胺中存在的相邻芳族或杂芳族基团形成6元环。

[0214] 因此,本发明还涉及合成根据本发明的化合物的方法,所述方法包括其中三芳基胺被至少两种硼-卤素化合物取代的步骤,其中发生环化反应使得硼-卤素化合物与三芳基胺中存在的相邻芳族或杂芳族基团形成6元环。

[0215] 为了从液相中例如通过旋涂或通过印刷方法加工根据本发明的化合物,根据本发明的化合物的制剂是必要的。这些制剂可以是例如溶液、分散体或乳液。为此目的,可以优选使用两种或更多种溶剂的混合物。合适且优选的溶剂是例如甲苯,苯甲醚,邻二甲苯,间二甲苯或对二甲苯,苯甲酸甲酯,均三甲苯,萘满,藜芦醚,THF,甲基-THF,THP,氯苯,二噁烷,苯氧基甲苯,尤其是3-苯氧基甲苯,(-)-葑酮,1,2,3,5-四甲基苯,1,2,4,5-四甲基苯,1-甲基萘,2-甲基苯并噻唑,2-苯氧基乙醇,2-吡咯烷酮,3-甲基苯甲醚,4-甲基苯甲醚,3,4-二甲基苯甲醚,3,5-二甲基苯甲醚,苯乙酮, $\alpha$ -萘品醇,苯并噻唑,苯甲酸丁酯,异丙苯,环己醇,环己酮,环己基苯,十氢化萘,十二烷基苯,苯甲酸乙酯,茛满,苯甲酸甲酯,NMP,对伞花烃,苯乙醚,1,4-二异丙基苯,二苄基醚,二乙二醇丁基甲基醚,三乙二醇丁基甲基醚,二乙二醇二丁基醚,三乙二醇二甲基醚,二乙二醇单丁醚,三丙二醇二甲醚,四乙二醇二甲醚,2-异丙基萘,戊基苯,己基苯,庚基苯,辛基苯,1,1-双(3,4-二甲基-苯基)乙烷或这些溶剂的混合物。

[0216] 因此,本发明还涉及一种包含根据本发明的化合物和至少一种另外的化合物的制剂。所述另外的化合物可以是例如溶剂,特别是上述溶剂中的一种或这些溶剂的混合物。然而,另外的化合物也可以是同样用于电子器件中的至少一种另外的有机或无机化合物,例如发光化合物,特别是磷光掺杂剂,和/或另外的基质材料。合适的发光化合物和另外的基质材料在下面结合有机电致发光器件进行说明。这种另外的化合物也可以是聚合的。

[0217] 根据本发明的化合物和混合物适用于电子器件。此处的电子器件被认为是指包括至少一个层的器件,所述层包含至少一种有机化合物。然而,此处的组件也可以包括无机材料或者完全由无机材料构成的层。

[0218] 因此,本发明还涉及根据本发明的化合物或混合物在电子器件中、特别是在有机电致发光器件中的用途。

[0219] 此外,本发明还涉及一种包含至少一种上述根据本发明的化合物或混合物的电子器件。上文关于化合物所述的优选特征也适用于电子器件。

[0220] 电子器件优选地选自有机电致发光器件(OLED、PLED)、有机集成电路(O-IC)、有机场效应晶体管(O-FET)、有机薄膜晶体管(O-TFT)、有机发光晶体管(O-LET)、有机太阳能电池(O-SC)、有机染料敏化太阳能电池、有机光学检测器、有机光感受器、有机场猝熄器件(O-FQD)、发光电化学电池(LEC)、有机激光二极管(O-激光器)和“有机等离激元发光器件”(D.M.Koller等人,Nature Photonics 2008,1-4),优选有机电致发光器件(OLED、PLED),特别是磷光OLED。

[0221] 有机电致发光器件包括阴极、阳极和至少一个发光层。除了这些层之外,它还可以包括另外的层,例如在每种情况下一个或多个空穴注入层、空穴传输层、空穴阻挡层、电子传输层、电子注入层、激子阻挡层、电子阻挡层和/或电荷产生层。同样可以在两个发光层之间引入具有例如激子阻挡功能的中间层。然而,应该指出的是,这些层中的每一个都不一定必须存在。此处的有机电致发光器件可以包括一个发光层或多个发光层。如果存在多个发光层,则这些发光层优选地总共具有多个在380nm与750nm之间的发光最大值,从而总体上

产生白色发光,即能够发荧光或发磷光的各种发光化合物用于发光层。特别优选具有三个发光层的体系,其中三个层显示蓝色、绿色和橙色或红色发光(关于基本结构,参见例如W0 2005/011013)。这些可以是荧光或磷光发光层或混合体系,其中荧光和磷光发光层彼此组合。

[0222] 根据上述实施方式的本发明化合物可以用于多种层,这取决于精确的结构和取代。

[0223] 优选的是包含式(1)或根据优选实施方式的化合物作为荧光发光体或TADF(热激活延迟荧光)发光体的有机电致发光器件。更特别地,式(1)或根据优选实施方式的化合物优选用作显示瞬发荧光的蓝色荧光发光体或用作蓝色TADF发光体。

[0224] 根据本发明的另一个优选实施方式,式(1)或根据优选实施方式的化合物用于如例如W02015/135624中所述的超荧光体系中,其包含式(1)化合物作为荧光发光体和选自热激活延迟荧光化合物(TADF化合物)的敏化剂化合物,其中敏化剂的能量经由福斯特(Förster)共振能量转移而转移到荧光发光体。

[0225] 根据本发明的又一个优选实施方式,式(1)或根据优选实施方式的化合物用于如例如W02001/08230A1中所述的超磷光体系中,其包含式(1)化合物作为荧光发光体和选自磷光化合物的敏化剂化合物,其中敏化剂的能量经由福斯特共振能量转移而转移到荧光发光体。

[0226] 式(1)化合物也可以用于电子传输层和/或电子阻挡或激子阻挡层和/或空穴传输层,这取决于精确的取代。上述优选实施方式也适用于所述材料在有机电子器件中的用途。

[0227] 式(1)化合物特别适合作为蓝色发光体化合物。所涉及的电子器件可以包括包含根据本发明的化合物的单个发光层,或者所述电子器件可以包括两个或更多个发光层。此处的另外的发光层可以包含一种或多种根据本发明的化合物或者其它化合物。

[0228] 如果根据本发明的化合物用作发光层中的荧光发光体或TADF发光体,则其优选与一种或多种基质材料组合使用。基质材料在此被认为是指存在于发光层中,优选作为主要组分,并且在器件操作时不发光的材料。

[0229] 优选地,基质化合物具有大于70°C、更优选大于90°C、最优选大于110°C的玻璃化转变温度 $T_g$ 。

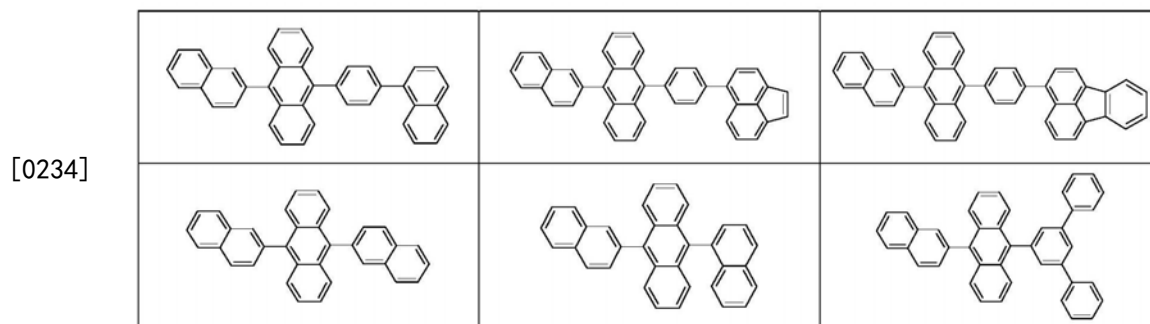
[0230] 发光层混合物中发光化合物的比例在0.1%和50.0%之间,优选在0.5%和20.0%之间,特别优选在1.0%和10.0%。相应地,一种或多种基质材料的比例在50.0%和99.9%之间,优选在80.0%和99.5%之间,特别优选在90.0%和99.0%之间。

[0231] 为了本申请的目的,以%为单位的比例的说明,如果化合物是从气相施加的,则被认为是指体积%,并且如果化合物是从溶液施加的,则为重量%。

[0232] 如果式(1)或根据优选实施方式的化合物在发光层中用作荧光发光体(瞬发荧光),则与荧光发光体组合使用的优选基质材料选自以下类别:低聚芳亚基(例如根据EP 676461的2,2',7,7'-四苯基螺二芴,或二萘基蒽),特别是含有稠合芳族基团的低聚芳亚基,低聚芳亚基乙烯亚基(例如根据EP 676461的DPVBi或螺-DPVBi),多足金属络合物(例如根据W0 2004/081017),空穴传导化合物(例如根据W0 2004/058911),电子传导化合物,特别是酮、氧化膦、亚砷等(例如根据W0 2005/084081和W0 2005/084082),阻转异构体(例如根据W0 2006/048268),硼酸衍生物(例如根据W0 2006/117052)或苯并蒽(例如根据W0

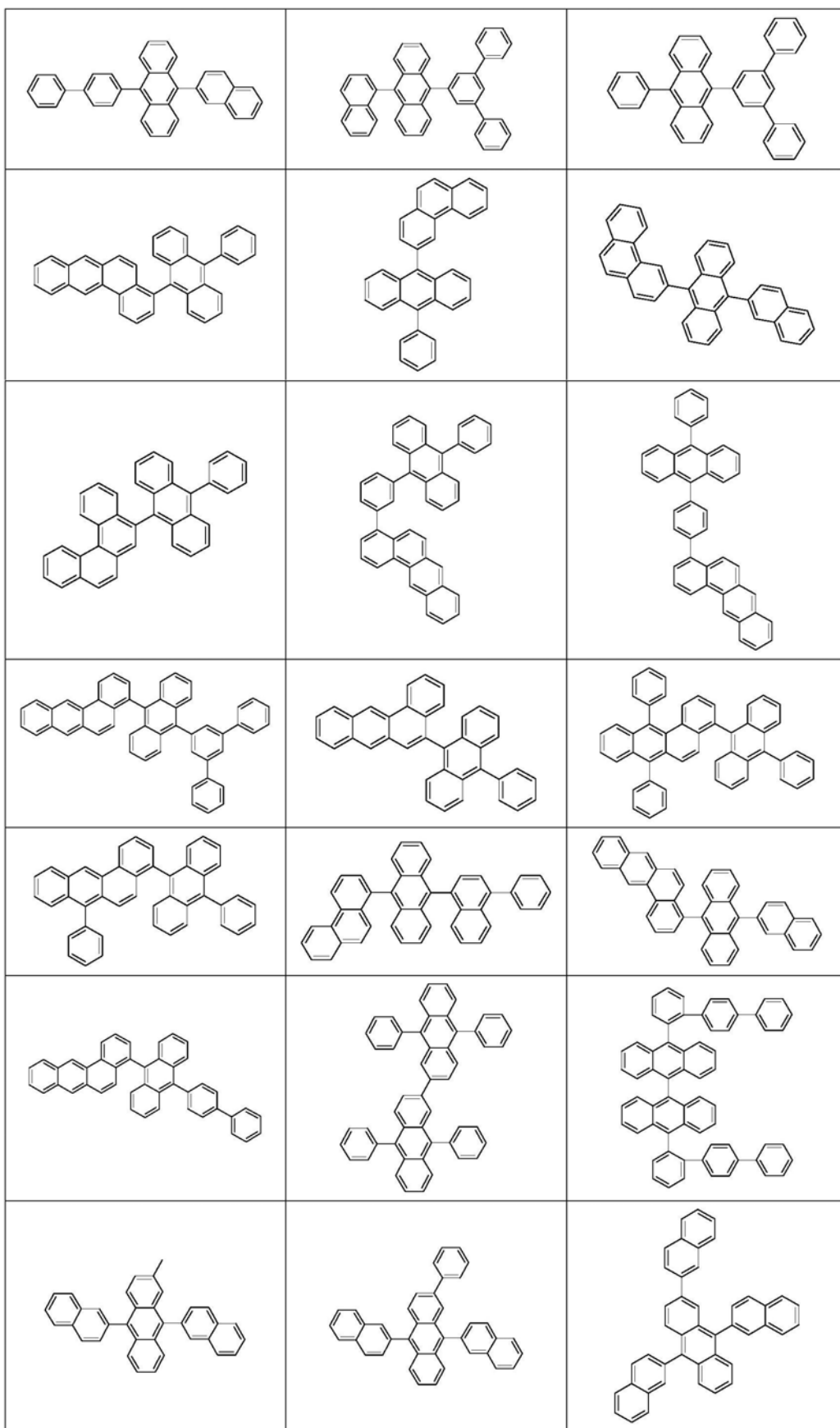
2008/145239)。特别优选的基质材料选自如下类别：低聚芳亚基，包括萘、蒽、苯并蒽和/或芘或这些化合物的阻转异构体，低聚芳亚基乙烯亚基，酮，氧化膦和亚砷。非常特别优选的基质材料选自如下类别：低聚芳亚基，包括蒽、苯并蒽、苯并菲和/或芘或这些化合物的阻转异构体。在本发明意义上的低聚芳亚基旨在被认为是指其中至少三个芳基或芳亚基基团彼此键合的化合物。

[0233] 与用作发光层中的荧光发光体的式(1)化合物组合使用的特别优选的基质材料描述于下表中：

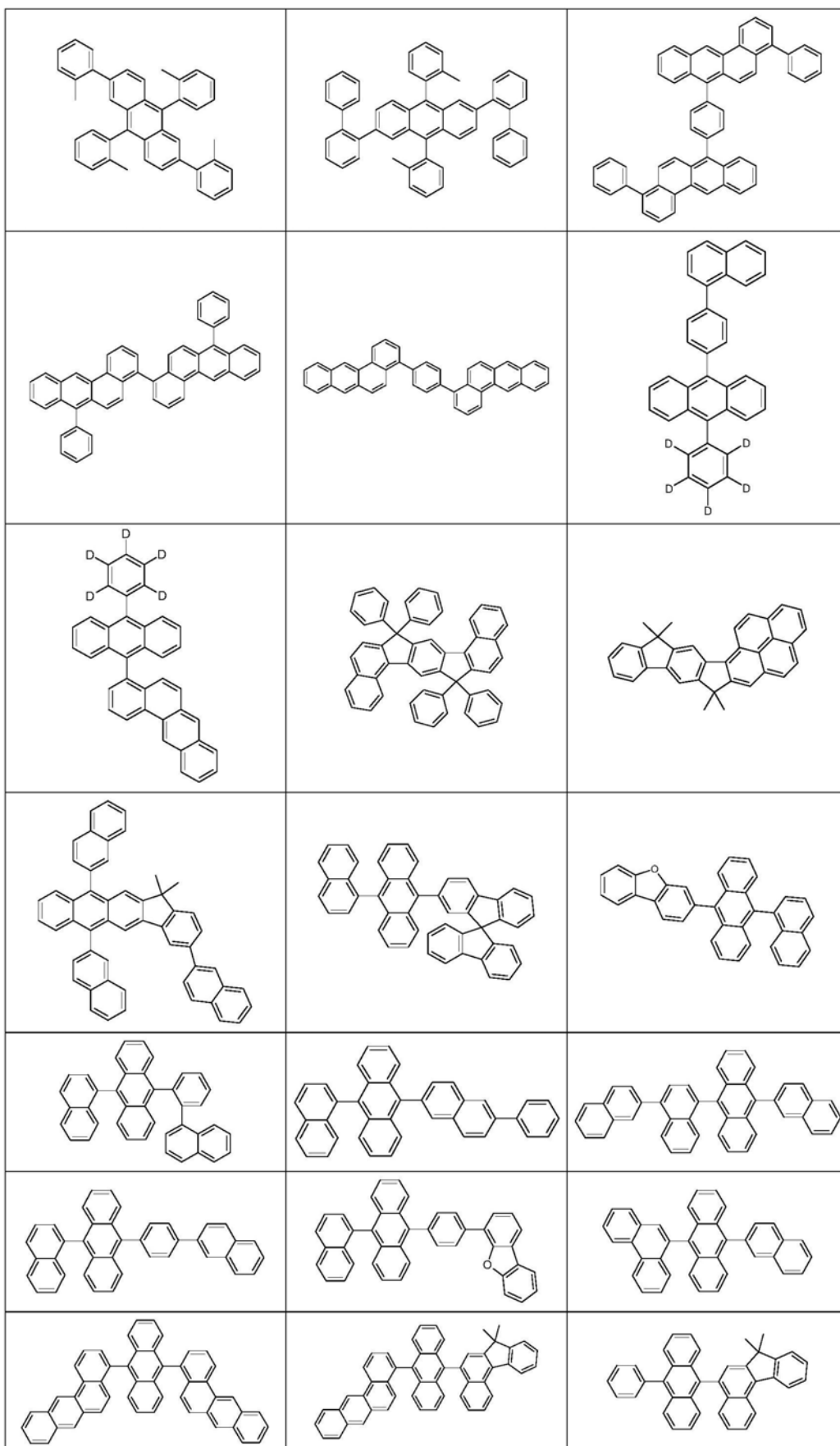




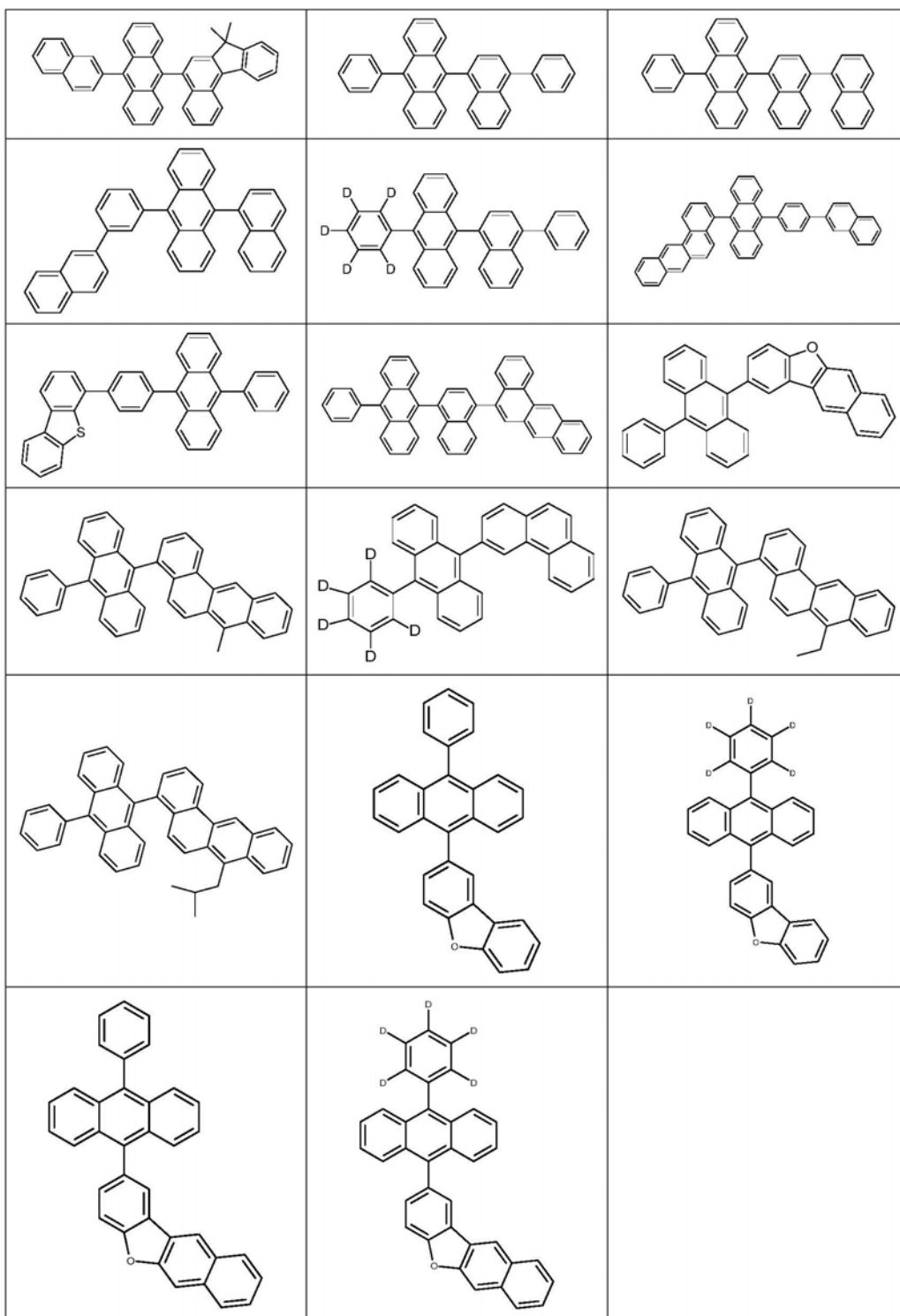
[0235]



[0236]



[0237]



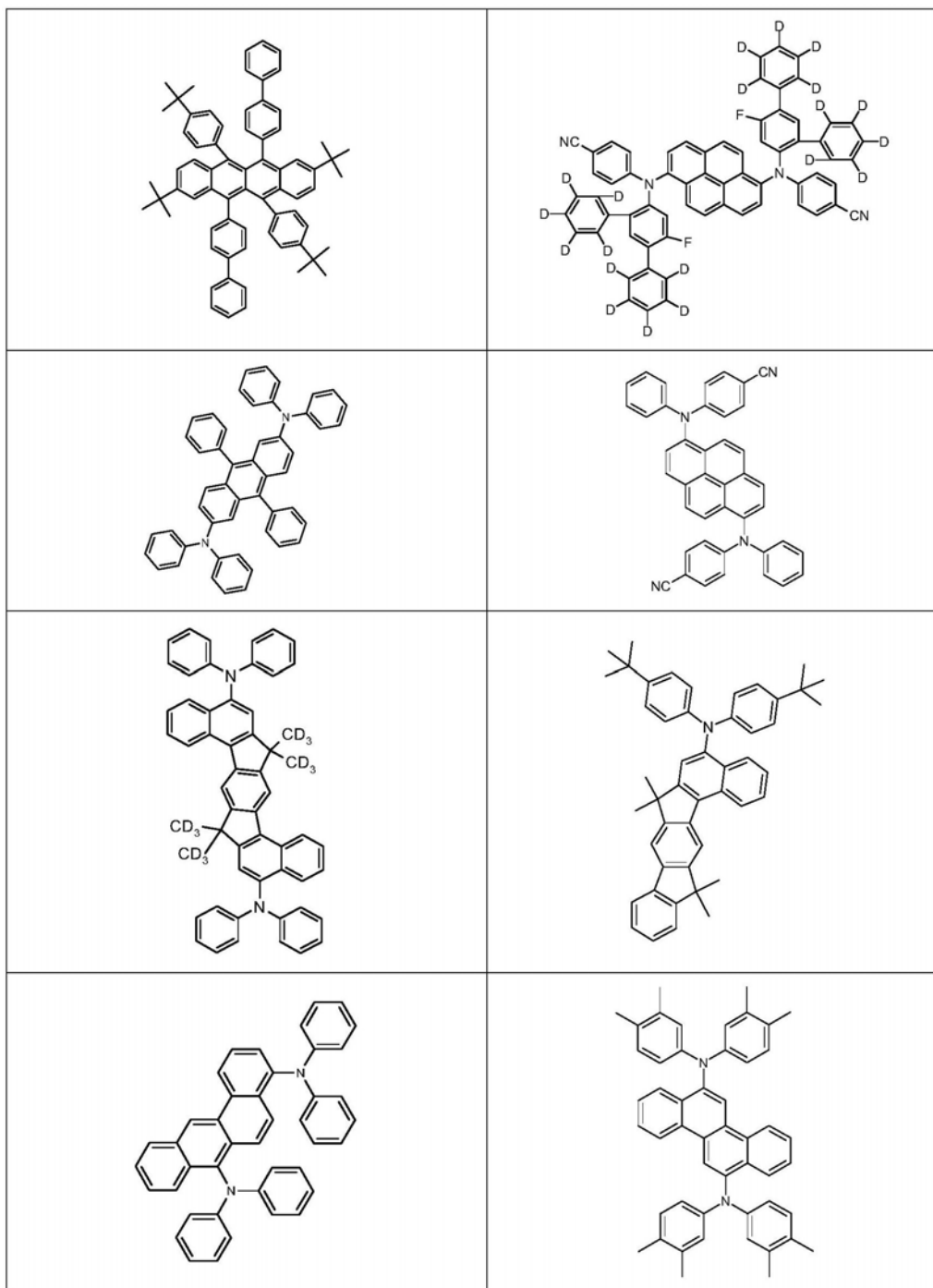
[0238] 如果根据本发明的化合物用作发光层中的荧光发光化合物,则它可以与一种或多种其它荧光发光化合物组合使用。

[0239] 除了根据本发明的化合物之外,优选的荧光发光体选自芳基胺类别。在本发明意义上的芳基胺被认为是指含有三个直接键合到氮上的取代或未取代的芳族或杂芳族环系的化合物。这些芳族或杂芳族环系中的至少一个优选是稠合环系,特别优选具有至少14个芳族环原子。其优选实例是芳族葱胺、芳族葱二胺、芳族芘胺、芳族芘二胺、芳族苝胺或芳族苝二胺。芳族葱胺被认为是指其中一个二芳基氨基基团直接与葱基团键合,优选在9位键合

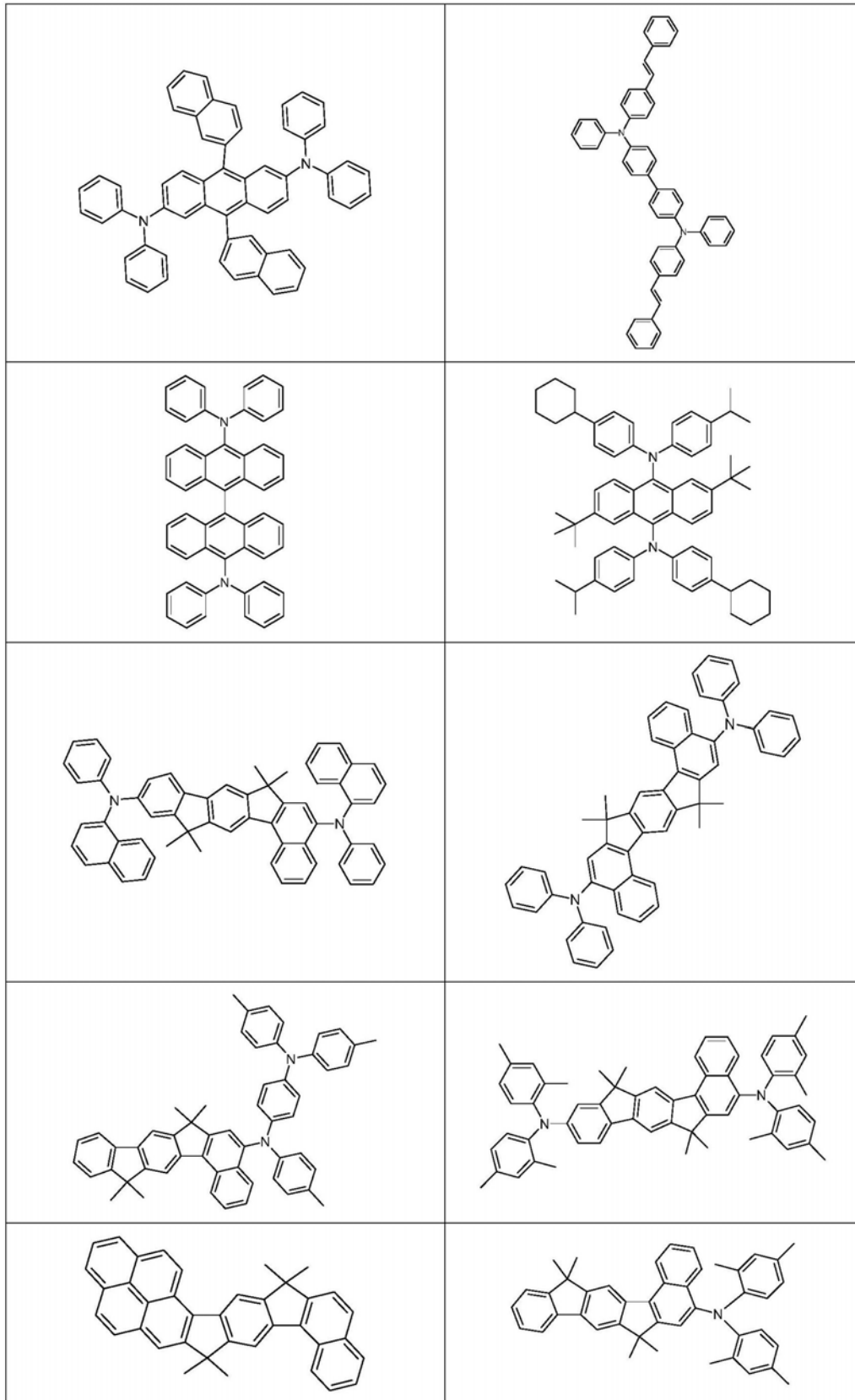
的化合物。芳族蒽二胺被认为是指其中两个二芳基氨基基团直接与蒽基团键合,优选在2,6位或9,10位键合的化合物。与此类似的方式定义芳族的芘胺、芘二胺、苝胺和苝二胺,其中所述二芳基氨基基团优选与芘在1位或在1,6位键合。另外优选的发光体是茚并芴胺或茚并芴二胺,例如根据WO 2006/108497或WO 2006/122630的,苯并茚并芴胺或苯并茚并芴二胺,例如根据WO 2008/006449的,和二苯并茚并芴胺或二苯并茚并芴二胺,例如根据WO 2007/140847的,以及在WO 2010/012328中公开的含有稠合芳基基团的茚并芴衍生物。还另外优选的发光体是如WO 2015/158409中公开的苯并蒽衍生物、如WO 2017/036573中公开的蒽衍生物、如WO 2016/150544中的芴二聚体或如WO 2017/028940和WO 2017/028941中公开的吩噻嗪衍生物。同样优选WO 2012/048780和WO 2013/185871中公开的芘芳基胺。同样优选WO 2014/037077中公开的苯并茚并芴胺、WO 2014/106522中公开的苯并芴胺和WO 2014/111269或WO 2017/036574中公开的茚并芴。

[0240] 除了根据本发明的化合物之外,可以与本发明的化合物组合用于发光层中或者可以用于同一器件的另一发光层中的优选荧光发光化合物的实例描绘于下表中:

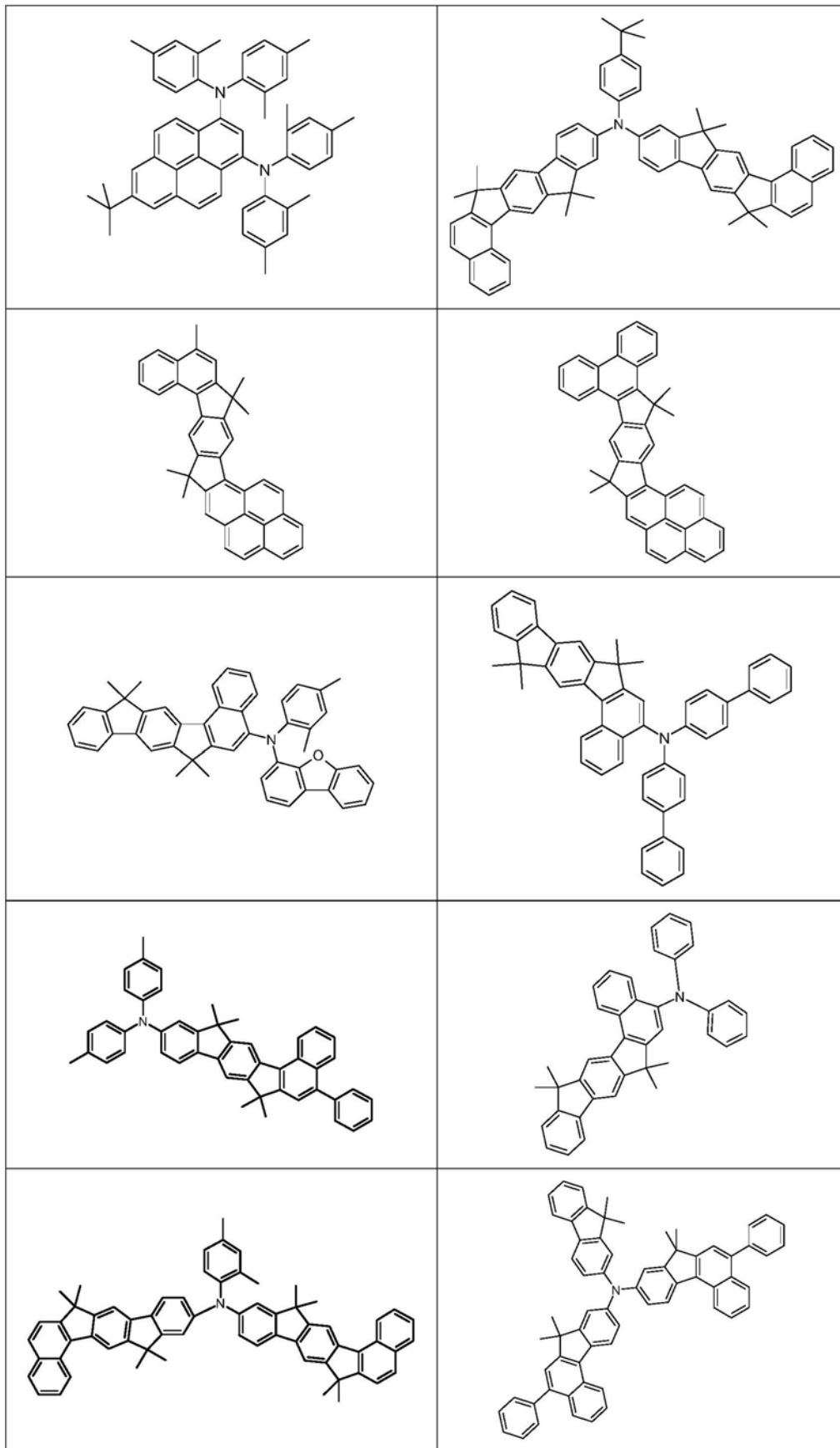
[0241]



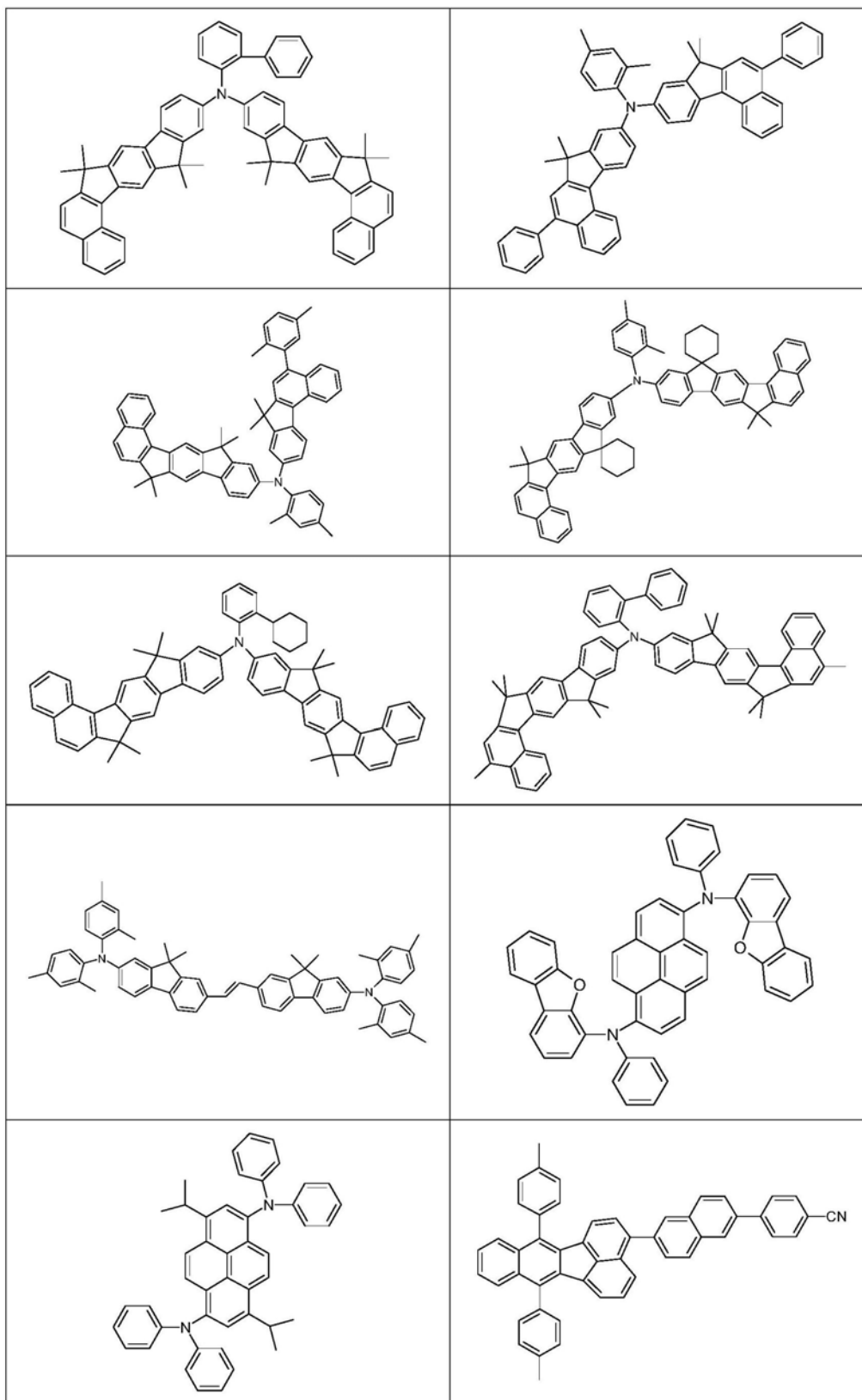
[0242]



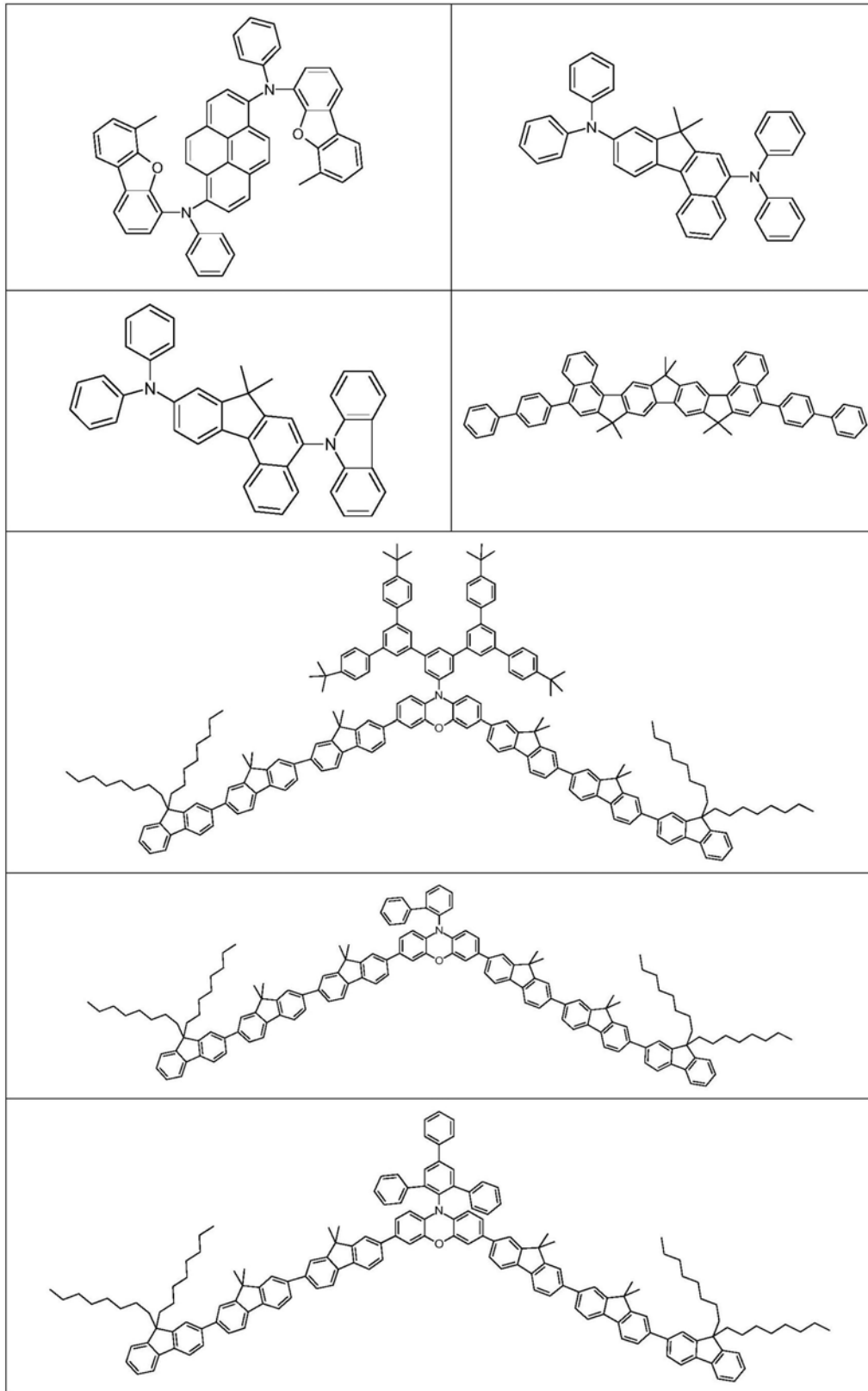
[0243]



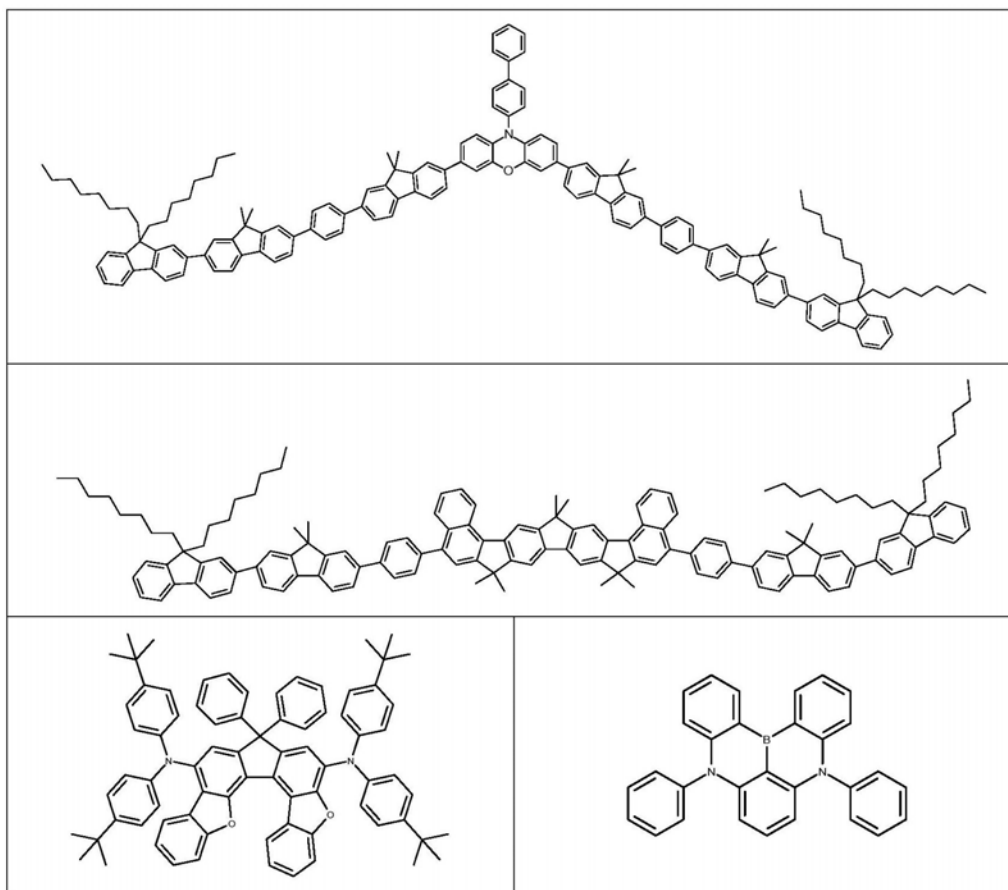
[0244]







[0246]



[0247] 如果式(1)或根据优选实施方式的化合物在发光层中用作TADF发光体,则与TADF发光体组合使用的优选基质材料选自如下类别:酮、氧化膦、亚砷和砷,例如根据WO 2004/013080、WO 2004/093207、WO 2006/005627或WO 2010/006680的,三芳基胺,咪唑衍生物,例如CBP(N,N-双咪唑基联苯),m-CBP或公开在WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527、WO 2008/086851或US 2009/0134784中的咪唑衍生物,二苯并咪唑衍生物,吡啶并咪唑衍生物,例如根据WO 2007/063754或WO 2008/056746的;茚并咪唑衍生物,例如根据WO 2010/136109和WO 2011/000455的;氮杂咪唑衍生物,例如根据EP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160的;双极性基质材料,例如根据WO 2007/137725的;硅烷,例如根据WO 2005/111172的,硼氮杂环戊烷或硼酸酯,例如根据WO 2006/117052的;硅二氮杂环戊烷衍生物,例如根据WO 2010/054729的;磷二氮杂环戊烷衍生物,例如根据WO 2010/054730的;三嗪衍生物,例如根据WO 2010/015306,WO 2007/063754或WO 2008/056746的;嘧啶衍生物,喹啉衍生物,Zn络合物,Al络合物或Be络合物,例如根据EP 652273或WO 2009/062578的;或桥连咪唑衍生物,例如根据US 2009/0136779、WO 2010/050778、WO 2011/042107或WO 2011/088877的。合适的基质材料也是WO 2015/135624中描述的那些。这些通过引用并入本发明中。也可以使用两种或更多种这些基质材料的混合物。

[0248] 用于TADF发光体的基质化合物优选是电荷传输性的,即电子传输性或空穴传输性,或双极性化合物。在本申请的上下文中,所使用的基质化合物还可以另外是既不传输空穴也不传输电子的化合物。本发明上下文中的电子传输化合物是LUMO $\leq$ -2.50eV的化合物。优选地,LUMO $\leq$ -2.60eV,更优选 $\leq$ -2.65eV,最优选 $\leq$ -2.70eV。LUMO是最低未占分子轨道。

化合物的LUMO值通过量子化学计算确定,如在后面实施例部分中大体描述。本发明上下文中的空穴传输化合物是具有HOMO $\geq$ -5.5eV的化合物。HOMO优选 $\geq$ -5.4eV,更优选 $\geq$ -5.3eV。HOMO是最高占据分子轨道。化合物的HOMO值通过量子化学计算确定,如在后面实施例部分中大体描述。本发明上下文中的双极性化合物是既传输空穴又传输电子的化合物。

[0249] 适用于TADF发光体的电子传导基质化合物选自以下物质类别:三嗪,嘧啶,内酰胺,金属络合物,尤其是Be、Zn和Al络合物,芳族酮,芳族氧化膦,磷氮杂环戊烷,被至少一个电子传导取代基取代的硼氮杂环戊烷,和喹啉。在本发明的一个优选的实施方式中,导电化合物是纯有机化合物,即不含金属的化合物。

[0250] 此外,除了敏化剂和荧光发光体之外,如上所述的超荧光和超磷光体系优选包含至少一种基质材料。在这种情况下,优选的是基质化合物的最低三重态能量比敏化剂化合物的三重态能量低不超过0.1eV。

[0251] 尤其优选地, $T_1$ (基质) $\geq T_1$ (敏化剂)。

[0252] 更优选地: $T_1$ (基质)- $T_1$ (敏化剂) $\geq$ 0.1eV;

[0253] 最优选地: $T_1$ (基质)- $T_1$ (敏化剂) $\geq$ 0.2eV。

[0254] 这里的 $T_1$ (基质)是基质化合物的最低三重态能量并且 $T_1$ (敏化剂)是敏化剂化合物的最低三重态能量。基质化合物 $T_1$ (基质)的三重态能量在这里由在4K的纯膜测量的光致发光光谱的边缘确定。 $T_1$ (敏化剂)由室温下在甲苯溶液中测量的光致发光光谱的边缘确定。

[0255] 适用于超荧光或超磷光体系的基质材料是与上述相同的基质材料,更优选的是也优选用于TADF材料的基质材料。

[0256] 合适的磷光发光体特别是在合适的激发下发光,优选在可见光区中发光并且另外含有至少一个原子序数大于20,优选大于38且小于84,特别优选大于56且小于80的原子的化合物。所使用的磷光发光体优选是含有铜、钼、钨、铼、钒、钽、铋、铟、铊、银、金或铀的化合物,特别是含有铋、铟或铜的化合物。

[0257] 为了本发明的目的,所有发光的铋、铟或铜络合物都被认为是磷光化合物。

[0258] 上述磷光发光体的实例由申请WO 2000/70655、WO 2001/41512、WO 2002/02714、WO 2002/15645、EP 1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 2005/033244、WO 2005/019373和US 2005/0258742公开。一般而言,根据现有技术用于磷光OLED的和在有机电致发光器件领域中的技术人员所知的所有磷光络合物都适合用于根据本发明的器件。本领域技术人员也将能够在不付出创造性劳动的情况下将另外的磷光络合物与根据本发明的化合物组合用于OLED。

[0259] 用于磷光发光体的优选基质材料是芳族酮、芳族氧化膦或芳族亚砷或砷,例如根据WO 2004/013080、WO 2004/093207、WO 2006/005627或WO 2010/006680的;三芳基胺,咪唑啉衍生物,例如CBP(N,N-双咪唑基联苯)或公开在WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527或WO 2008/086851中的咪唑啉衍生物;吡啶并咪唑啉衍生物,例如根据WO 2007/063754或WO 2008/056746的;茚并咪唑啉衍生物,例如根据WO 2010/136109、WO 2011/000455或WO 2013/041176的;氮杂咪唑啉衍生物,例如根据EP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160的;双极性基质材料,例如根据WO 2007/137725的;硅烷,例如根据WO 2005/111172的;硼氮杂环戊烷或硼酸酯,例如根据WO 2006/117052的;三嗪衍生物,例如根据WO 2010/015306、WO 2007/063754或WO 2008/056746的;锌络合物,例如根据EP

652273或WO 2009/062578的；硅二氮杂环戊烷或硅四氮杂环戊烷衍生物，例如根据WO 2010/054729的；磷二氮杂环戊烷衍生物，例如根据WO 2010/054730的；桥连咪唑衍生物，例如根据US 2009/0136779、WO 2010/050778、WO 2011/042107、WO 2011/088877或WO 2012/143080的；联三苯叉衍生物，例如根据WO 2012/048781的；或内酰胺，例如根据WO 2011/116865或WO 2011/137951的。

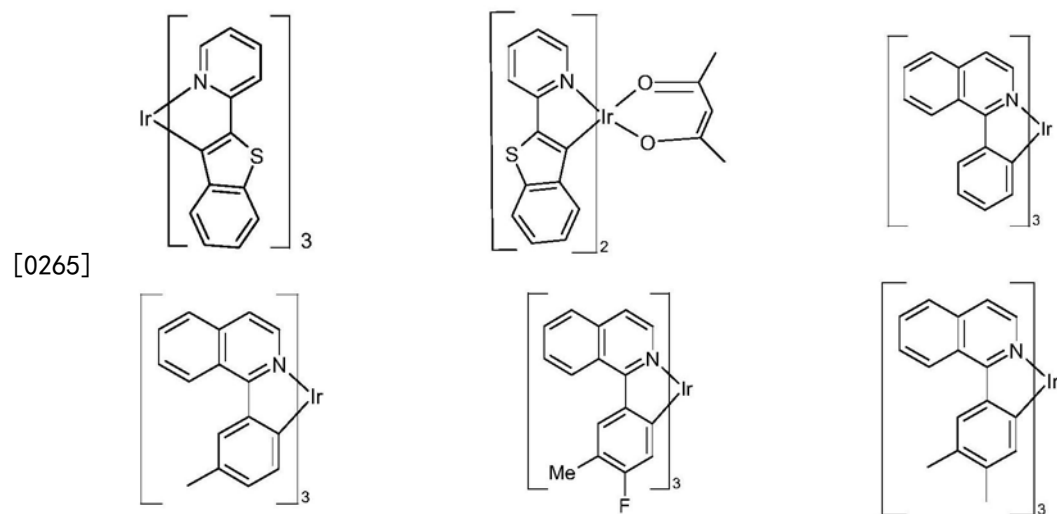
[0260] 更特别是，当磷光化合物用于如上所述的超磷光体系时，磷光化合物优选地选自磷光有机金属络合物，其例如描述于WO2015/091716中。此外特别优选的是磷光有机金属络合物，其描述于WO2000/70655、WO2001/41512、WO2002/02714、WO2002/15645、EP1191612、WO2005/033244、WO2005/019373、US2005/0258742、WO2006/056418、WO2007/115970、WO2007/115981、WO2008/000727、WO2009/050281、WO2009/050290、WO2011/051404、WO2011/073149、WO2012/121936、US2012/0305894、WO2012/170571、WO2012/170461、WO2012/170463、WO2006/121811、WO2007/095118、WO2008/156879、WO2008/156879、WO2010/068876、WO2011/106344、WO2012/172482、EP3126371、WO2015/014835、WO2015/014944、WO2016/020516、US20160072081、WO2010/086089、WO2011/044988、WO2014/008982、WO2014/023377、WO2014/094961、WO2010/069442、WO2012/163471、WO2013/020631、US20150243912、WO2008/000726、WO2010/015307、WO2010/054731、WO2010/054728、WO2010/099852、WO2011/032626、WO2011/157339、WO2012/007086、WO2015/036074、WO2015/104045、WO2015/117718、WO2016/015815中，其优选是铱和铂络合物。

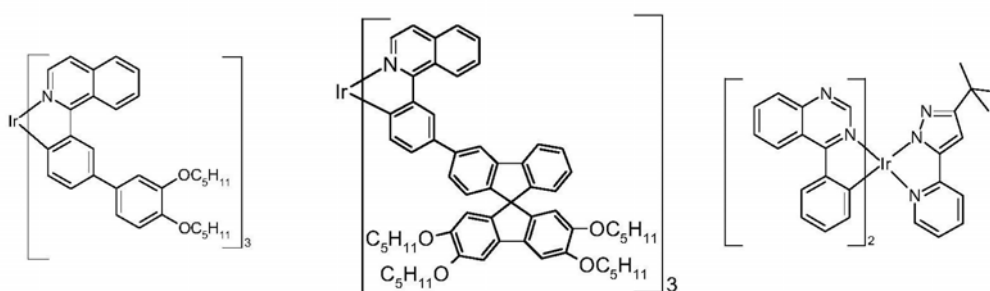
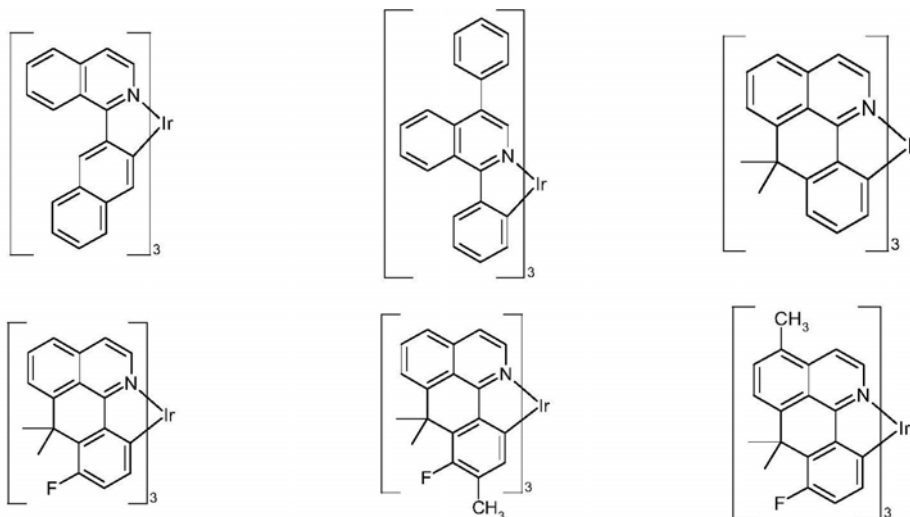
[0261] 还特别优选的是具有多足配体的磷光有机金属络合物，如例如WO2004/081017、WO2005/042550、US2005/0170206、WO2009/146770、WO2010/102709、WO2011/066898、WO2016124304、WO2017/032439、WO2018/019688、EP3184534和WO2018/011186中所述。

[0262] 还特别优选的是磷光双核有机金属络合物，如例如WO2011/045337、US20150171350、WO2016/079169、WO2018/019687、WO2018/041769、WO2018/054798、WO2018/069196、WO2018/069197、WO2018/069273中所述。

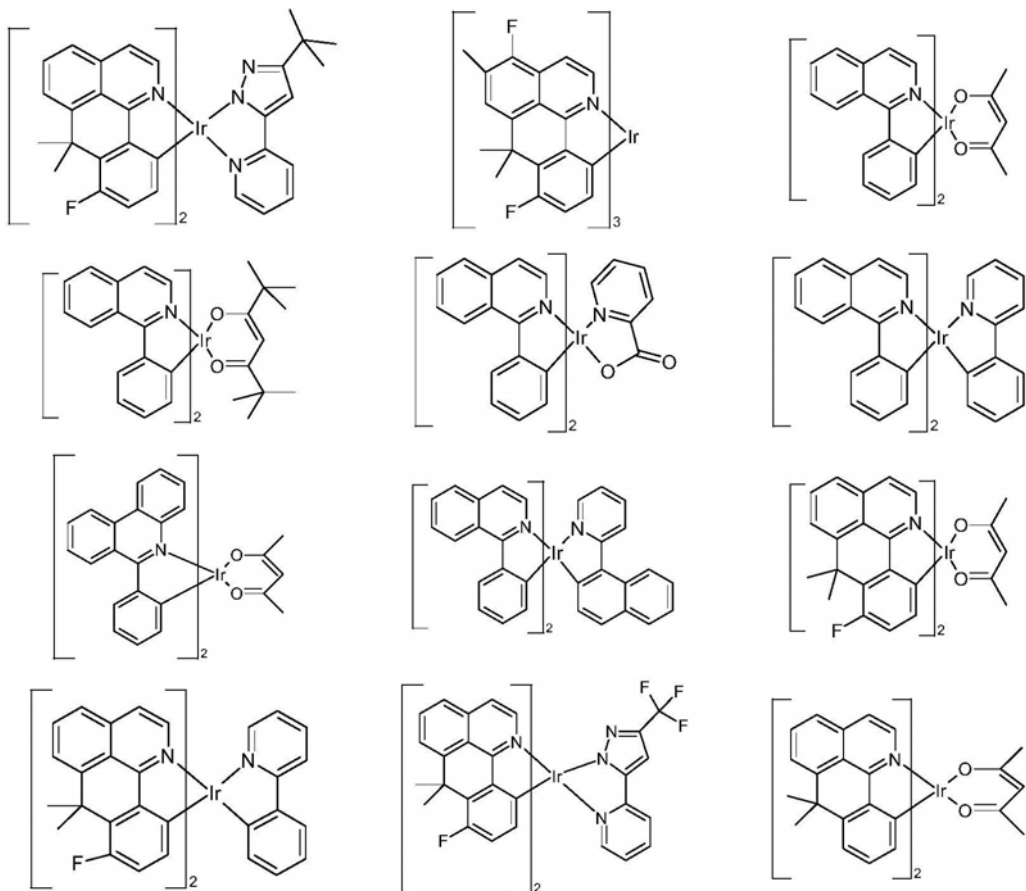
[0263] 还特别优选的是铜络合物，如例如WO2010/031485、US2013150581、WO2013/017675、WO2013/007707、WO2013/001086、WO2012/156378、WO2013/072508、EP2543672中所述。

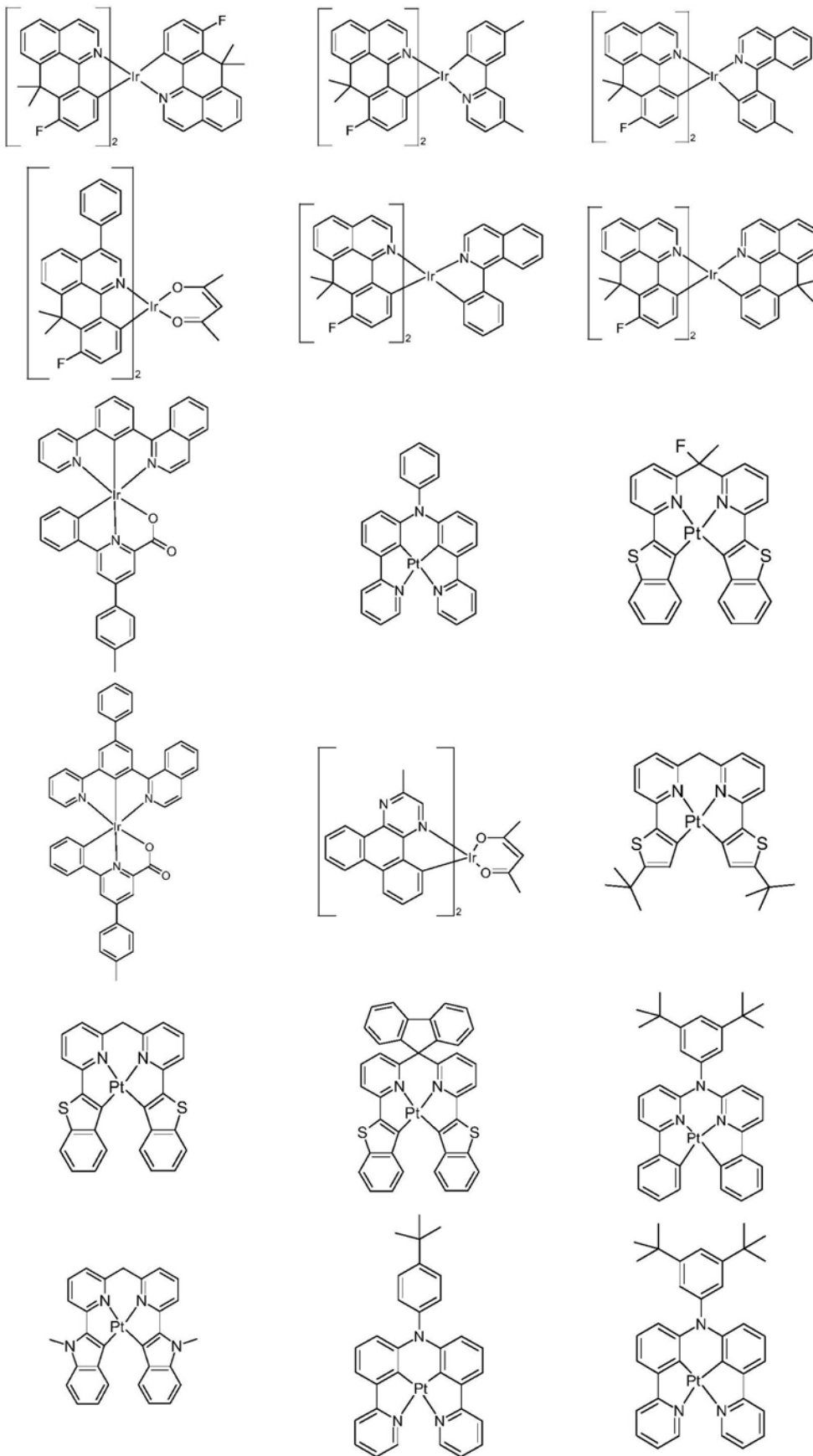
[0264] 磷光敏化剂的具体实例是Ir(ppy)<sub>3</sub>及其衍生物以及下面列出的结构：



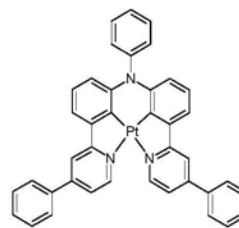
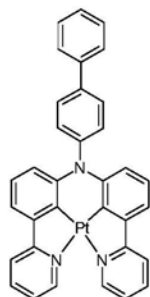
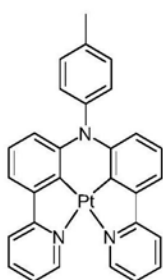
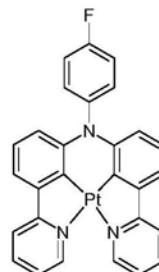
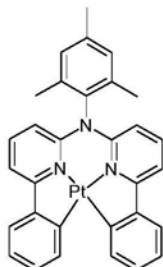
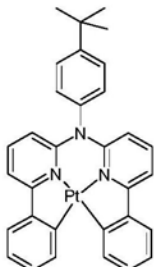
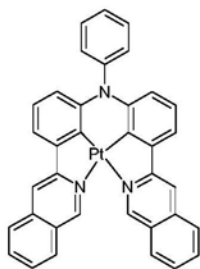
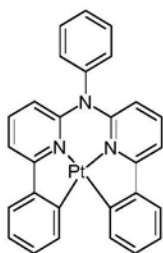


[0266]

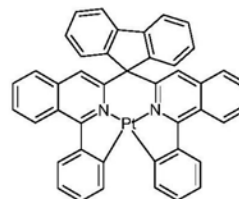
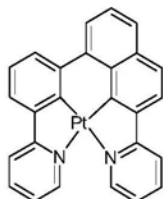
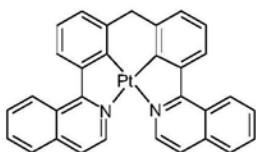
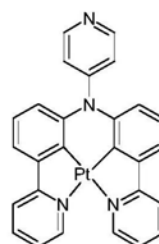
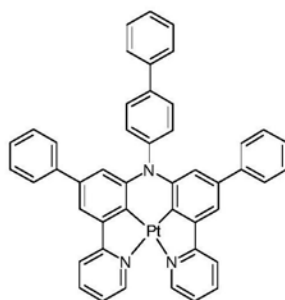
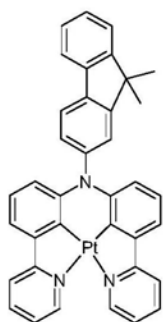
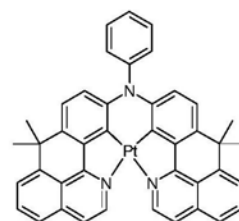
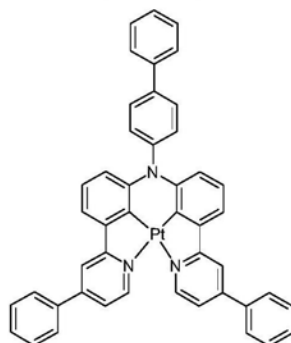
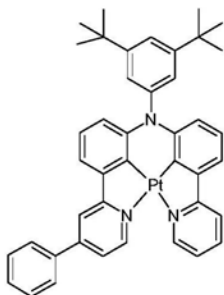




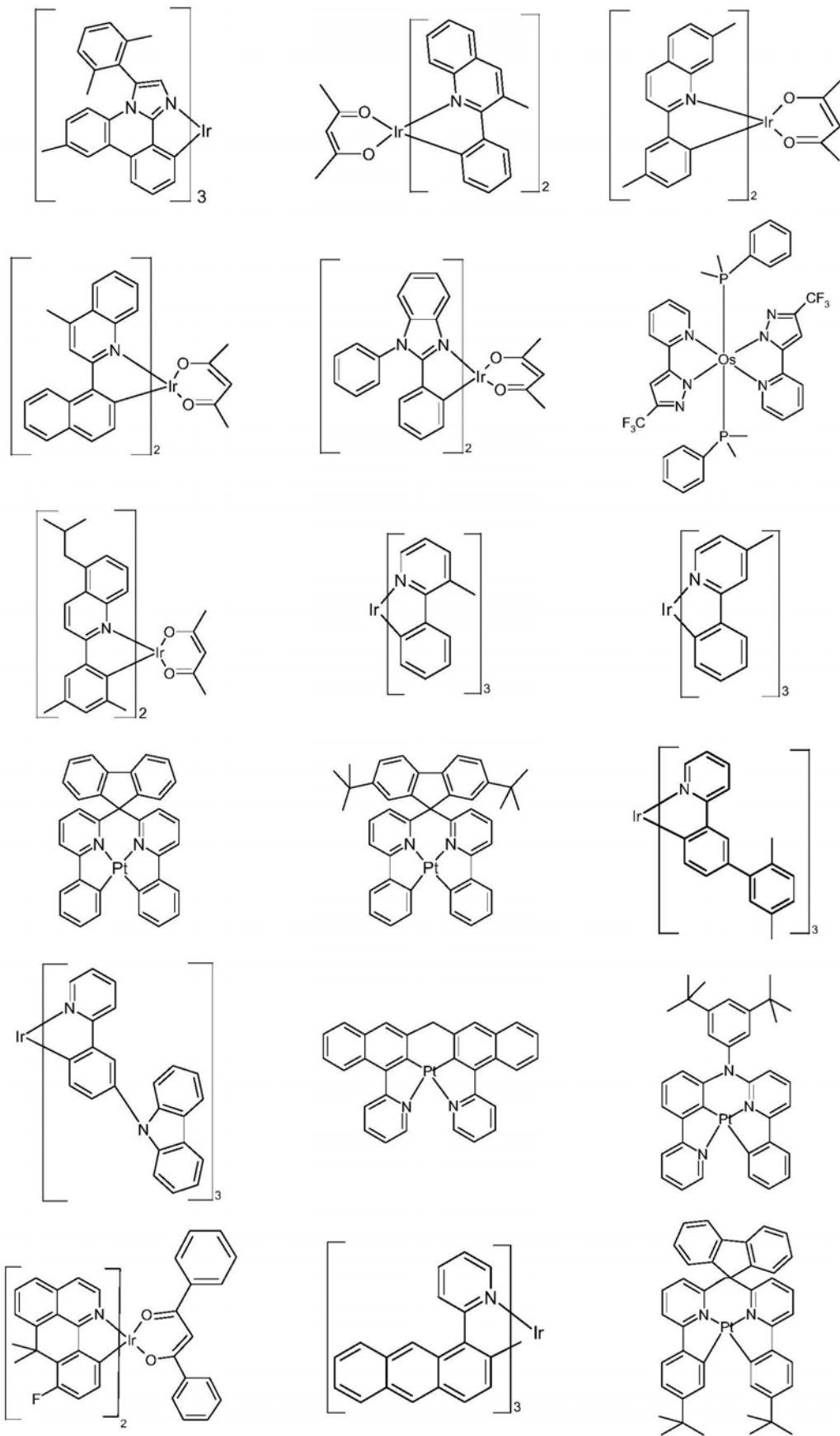
[0267]



[0268]

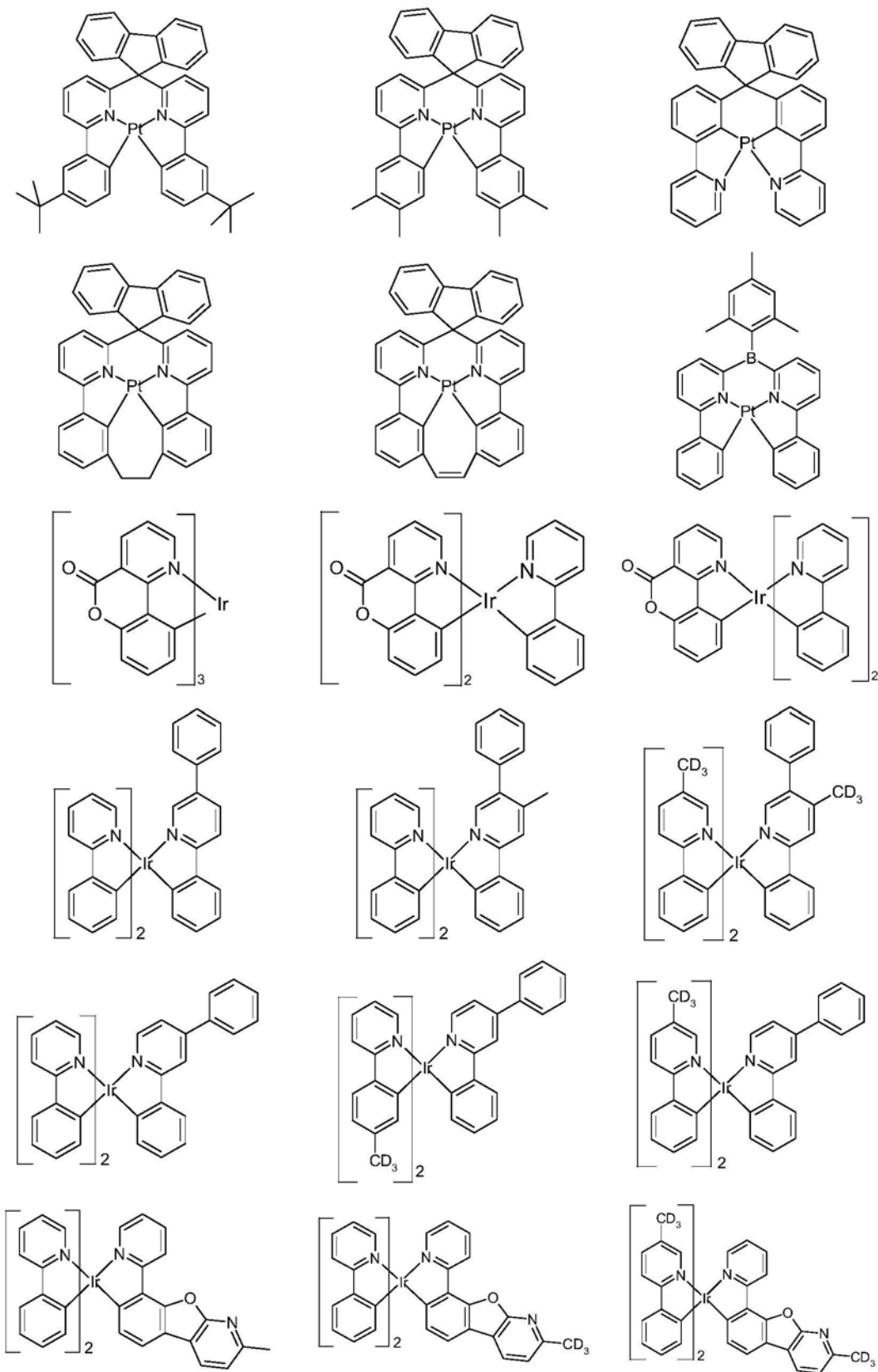


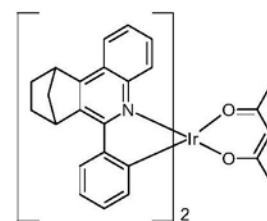
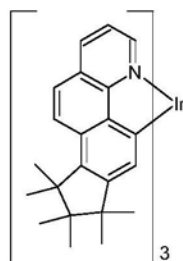
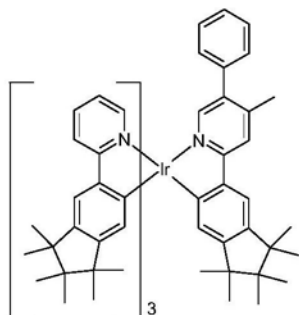
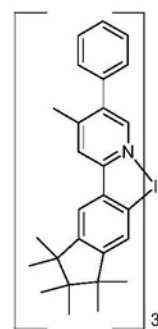
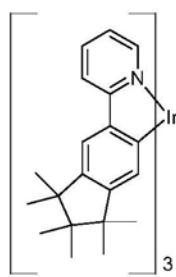
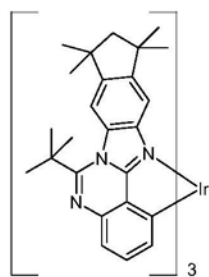
[0269]



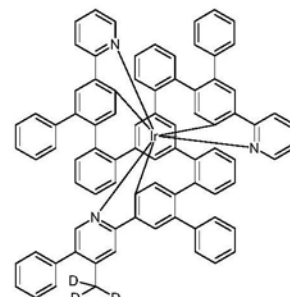
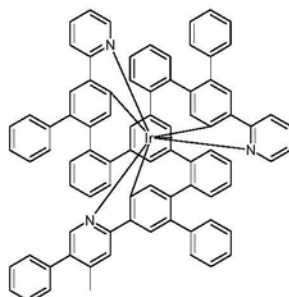
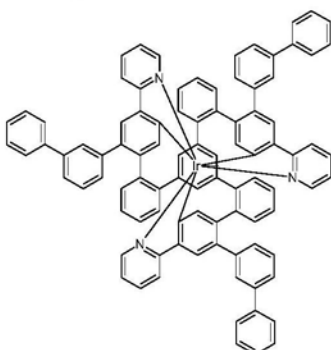
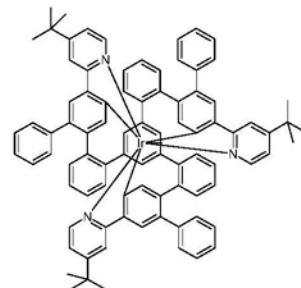
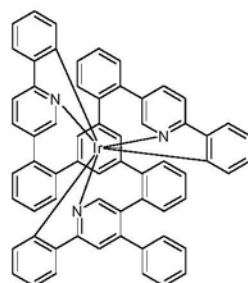
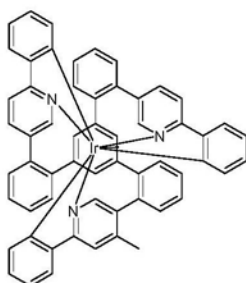


[0270]

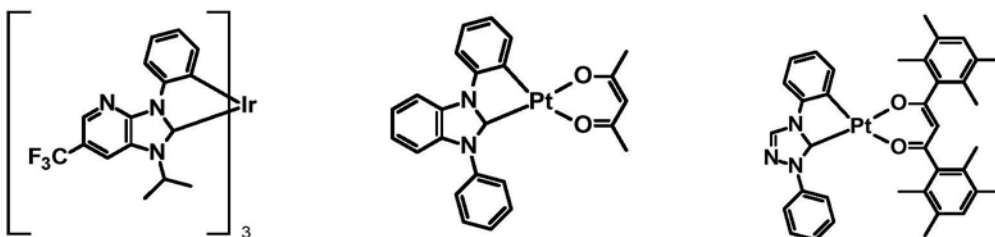
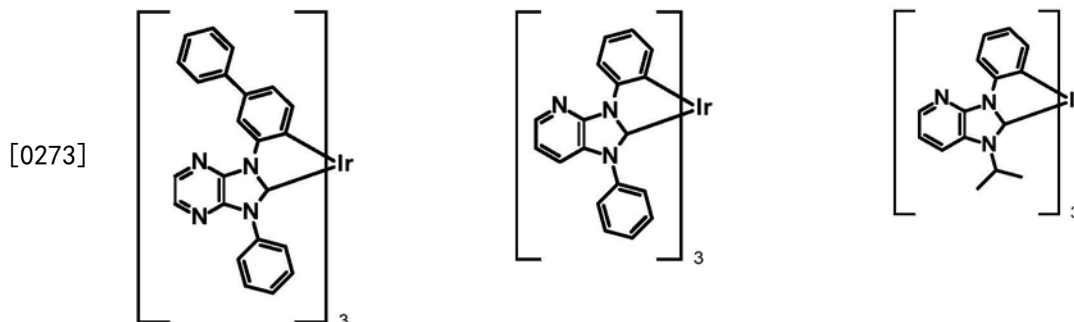
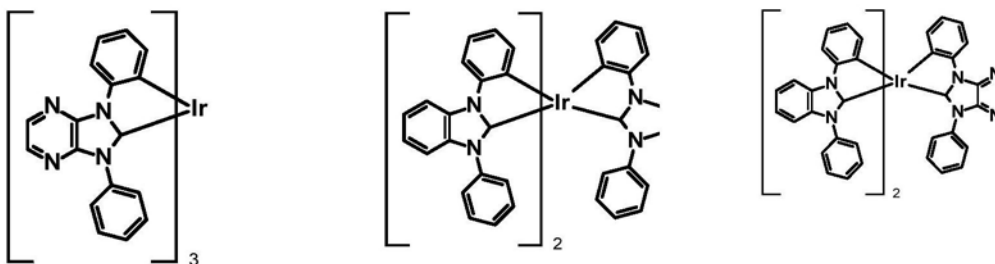




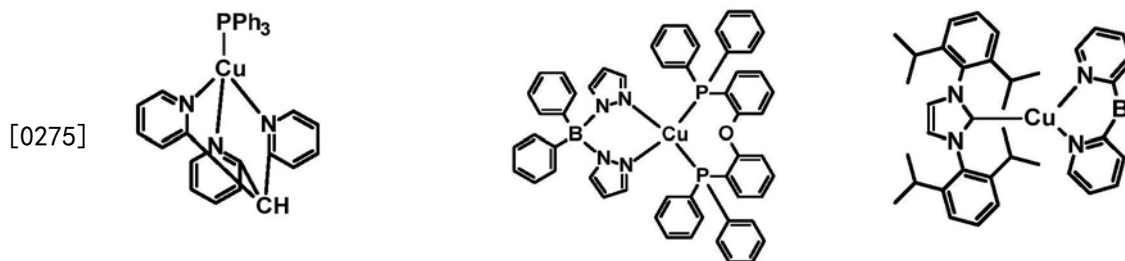
[0271]



[0272] 磷光敏化剂的其它具体实例是含有碳烯配体的铱和铂络合物和下文列出的结构，其中均配和杂配络合物以及经式和面式异构体可以是合适的：



[0274] 磷光敏化剂的其它具体实例还有铜络合物和下文列出的结构：



[0276] 除了根据本发明的化合物之外，合适的TADF化合物是其中最低三重态 $T_1$ 与第一激发单重态 $S_1$ 之间的能隙足够小以使得可从 $T_1$ 态以热方式达到 $S_1$ 态的化合物。优选地，TADF化合物在最低三重态 $T_1$ 与第一激发单重态 $S_1$ 之间的能隙 $\leq 0.30\text{eV}$ 。更优选地， $S_1$ 与 $T_1$ 之间的能隙 $\leq 0.20\text{eV}$ ，甚至更优选 $\leq 0.15\text{eV}$ ，尤其更优选 $\leq 0.10\text{eV}$ 并且甚至更尤其优选 $\leq 0.08\text{eV}$ 。

[0277] 最低激发单重态( $S_1$ )和最低三重态( $T_1$ )的能量以及HOMO和LUMO值由量子化学计算确定。使用Gaussian09程序包(修订版D或更高版本)。所有纯有机分子的中性基态几何结构都在AM1理论水平上进行了优化。随后，B3PW91/6-31G(d)单点计算包括使用TD-B3PW91/6-31G(d)计算最低单重态和三重态激发态。HOMO和LUMO值以及 $S_1$ 和 $T_1$ 激发能量取自B3PW91/6-31G(d)理论水平的这种单点计算。

[0278] 类似地，对于金属有机化合物，中性基态几何结构在HF/LANL2MB理论水平上进行了优化。随后使用B3PW91/6-31G(d)+LANL2DZ(LANL2DZ用于所有金属原子，6-31G(d)用于所有低重量元素)用于计算HOMO和LUMO值以及TD-DFT激发能量。

[0279] 根据计算的HOMO (HEh) 和LUMO (LEh) 值以哈特里 (Hartree) 为单位给出。参考循环伏安法测量校准的HOMO和LUMO能级由此以电子伏特为单位确定如下：

[0280]  $\text{HOMO (eV)} = (\text{HEh} * 27.212) - 0.9899 / 1.1206$

[0281]  $\text{LUMO (eV)} = (\text{LEh} * 27.212) - 2.0041 / 1.385$

[0282] 这些值在本发明的意义上被视为材料的HOMO和LUMO能级。

[0283] 最低三重态 $T_1$ 定义为最低TD-DFT三重态激发能量的能量。

[0284] 最低激发单重态 $S_1$ 定义为最低TD-DFT单重态激发能量的能量。

[0285] 优选地，TADF化合物是有机化合物。在本发明上下文中的有机化合物是不含任何金属的含碳化合物。更特别是，有机化合物由元素C、H、D、B、Si、N、P、O、S、F、Cl、Br和I形成。

[0286] TADF化合物更优选是具有供体和受体取代基的芳族化合物，在化合物的LUMO和HOMO之间仅具有轻微的空间重叠。供体和受体取代基所理解的内容原则上是本领域技术人员已知的。合适的供体取代基尤其是二芳基氨基或二杂芳基氨基和咪唑基团或咪唑衍生物，各自优选经由N键合到芳族化合物上。这些基团还可以具有进一步的取代。合适的受体取代基尤其是氰基基团，但还有例如缺电子杂芳基基团，所述缺电子杂芳基基团也可具有另外的取代，例如取代或未取代的三嗪基团。

[0287] 发光层中TADF化合物的优选掺杂剂浓度在下文中描述。由于有机电致发光器件的生产差异，在通过气相沉积生产发光层的情况下，掺杂剂浓度以体积%报告，而在从溶液生产发光层的情况下，掺杂剂浓度以重量%报告。以体积%和重量%表示的掺杂剂浓度通常非常相似。

[0288] 在本发明的一个优选的实施方式中，在通过气相沉积制造发光层的情况下，TADF化合物以1体积%至70体积%、更优选5体积%至50体积%、甚至更优选5体积%至30体积%的掺杂剂浓度存在于发光层中。

[0289] 在本发明的一个优选的实施方式中，在从溶液制造发光层的情况下，TADF化合物以1重量%至70重量%、更优选5重量%至50重量%、甚至更优选5重量%至30重量%的掺杂剂浓度存在于发光层中。

[0290] 本领域技术人员的一般技术知识包括哪些材料通常适合作为TADF化合物的知识。举例来说，以下参考文献公开了可以适合用作TADF化合物的材料：

[0291] -Tanaka等人, *Chemistry of Materials* 25 (18), 3766 (2013)。

[0292] -Lee等人, *Journal of Materials Chemistry C* 1 (30), 4599 (2013)。

[0293] -Zhang等人, *Nature Photonics* advance online publication, 1 (2014), doi: 10.1038/nphoton.2014.12。

[0294] -Serevicius等人, *Physical Chemistry Chemical Physics* 15 (38), 15850 (2013)。

[0295] -Li等人, *Advanced Materials* 25 (24), 3319 (2013)。

[0296] -Youn Lee等人, *Applied Physics Letters* 101 (9), 093306 (2012)。

[0297] -Nishimoto等人, *Materials Horizons* 1, 264 (2014), doi:10.1039/C3MH00079F。

[0298] -Valchanov等人, *Organic Electronics*, 14 (11), 2727 (2013)。

[0299] -Nasu等人, *ChemComm*, 49, 10385 (2013)。

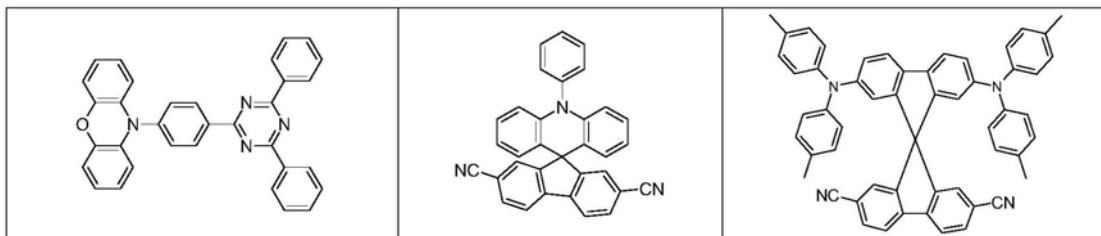
[0300] 另外，下面的专利申请公开了潜在的TADF化合物：US2019058130、W018155642、

W018117179A1、US2017047522、US2016372682A、US2015041784、US2014336379、US2014138669、WO 2013/154064、WO 2013/133359、WO 2013/161437、WO 2013/081088、WO 2013/081088、WO 2013/011954、JP 2013/116975和US 2012/0241732。

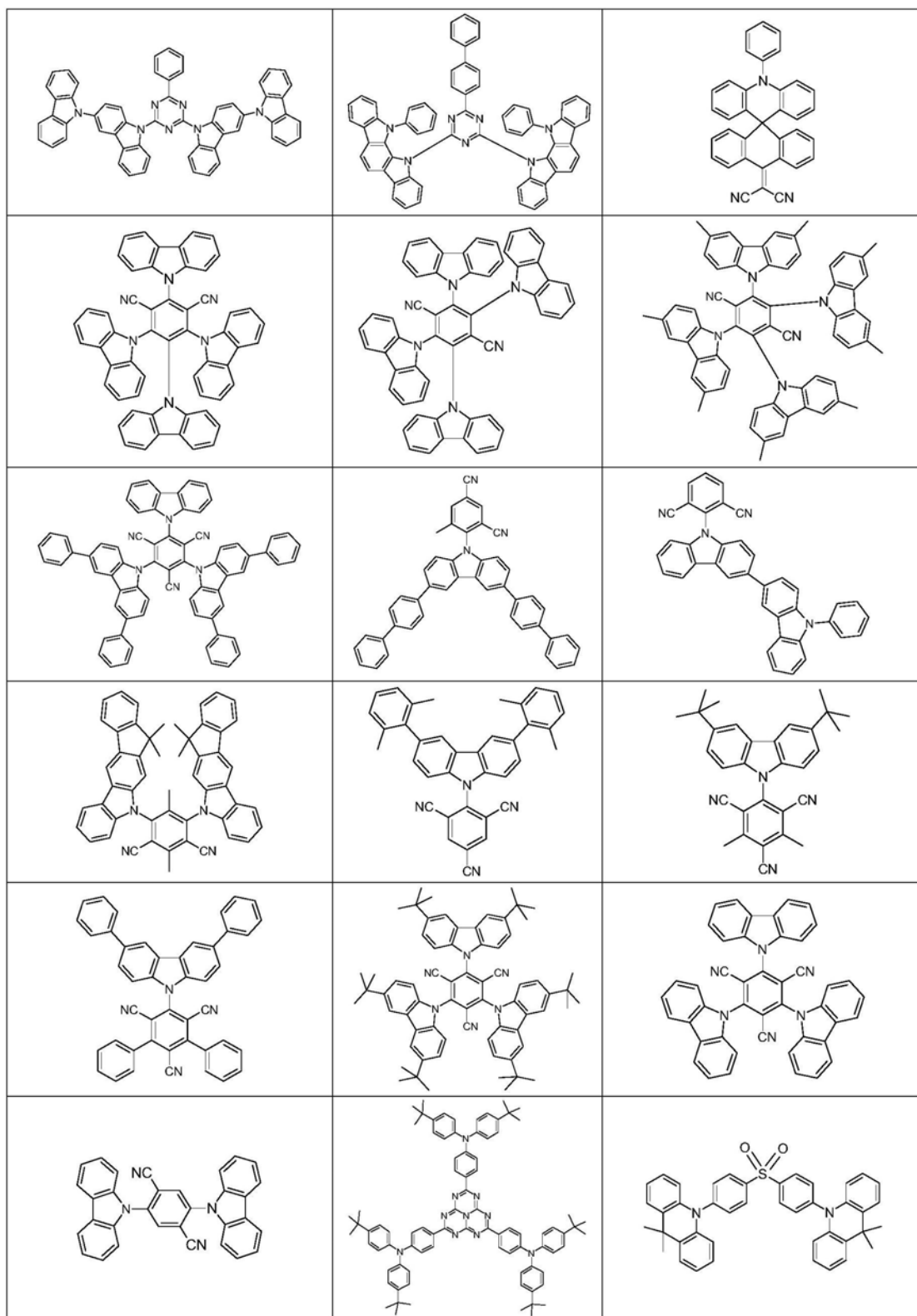
[0301] 另外,本领域技术人员能够从这些出版物中推断出TADF化合物的设计原则。例如,Valchanov等人展示可以如何调整TADF化合物的颜色。

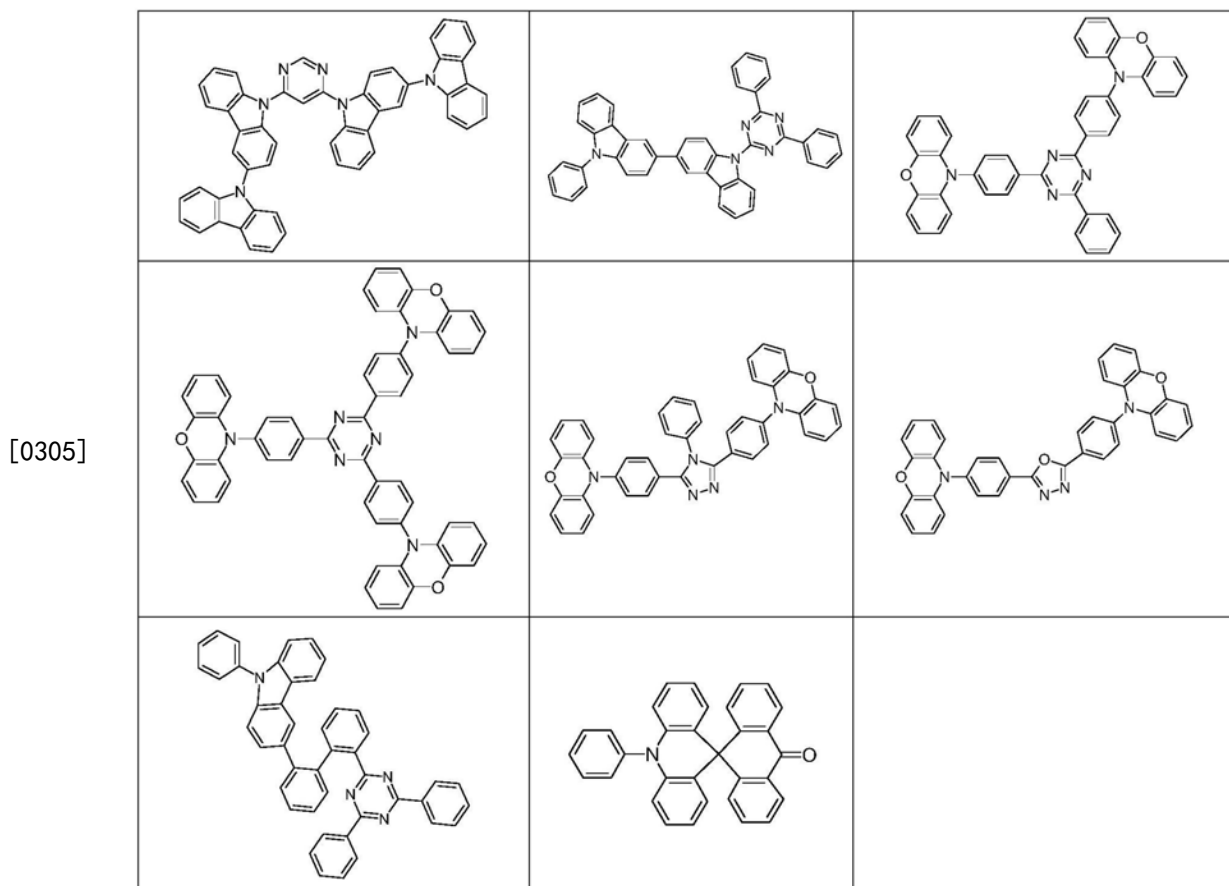
[0302] 显示TADF的合适分子的实例是下表中所示的结构:

[0303]



[0304]





[0306] 如上所述,式(1)或根据优选实施方式的化合物可以与敏化剂组合用作超荧光或超磷光体系中的荧光发光体。在这种情况下,优选式(1)化合物是空间屏蔽的。例如,对应于式(5)和(6)的化合物、更特别是(5-1)至(5-3)的式(1)化合物非常适合与选自TADF化合物和磷光化合物的敏化剂组合用作发光层中的空间屏蔽荧光发光体。优选地,发光层还包括至少一种选自基质材料的有机功能材料。

[0307] 式(1)或根据优选实施方式的化合物也可以与选自以下的另外的化合物组合使用:HTM(空穴传输材料)、HIM(空穴注入材料)、HBM(空穴阻挡材料)、p型掺杂剂、ETM(电子传输材料)、EIM(电子注入材料)、EBM(电子阻挡材料)、n型掺杂剂、荧光发光体、磷光发光体、延迟荧光发光体、基质材料、主体材料、宽带隙材料和量子材料,如量子点和量子棒。

[0308] 式(1)或根据优选实施方式的化合物也可以用于其它层,例如作为空穴注入或空穴传输层或电子阻挡层中的空穴传输材料或作为发光层中的基质材料。

[0309] 在根据本发明的有机电致发光器件中用作相应功能材料的材料的一般优选类别如下所示。

[0310] 可以用于根据本发明的电子器件的空穴注入层或空穴传输层或电子阻挡层或电子传输层中的合适的电荷传输材料是例如Y. Shirota等人,Chem.Rev.2007,107(4),953-1010中公开的化合物,或根据现有技术在这些层中采用的其它材料。

[0311] 可以用于电子传输层的材料是根据现有技术用作电子传输层中的电子传输材料的所有材料。特别合适的是铝络合物例如 $Alq_3$ 、锆络合物例如 $Zrq_4$ 、锂络合物例如LiQ、苯并咪唑衍生物、三嗪衍生物、嘧啶衍生物、吡啶衍生物、吡嗪衍生物、喹啉衍生物、喹啉衍生物、咪唑二唑衍生物、芳族酮、内酰胺、硼烷、磷二氮杂环戊烷衍生物和氧化磷衍生物。此外,合

适的材料是上述化合物的衍生物,如JP 2000/053957、WO 2003/060956、WO 2004/028217、WO 2004/080975和WO 2010/072300中所公开的。

[0312] 可以用于根据本发明的电致发光器件中的空穴传输层、空穴注入层或电子阻挡层的优选空穴传输材料是茛苳胺衍生物(例如根据WO 06/122630或WO 06/100896的)、EP 1661888中公开的胺衍生物、六氮杂苯并菲衍生物(例如根据WO 01/049806的)、含有稠合芳族环的胺衍生物(例如根据US 5,061,569的)、公开于WO 95/09147中的胺衍生物、单苯并茛苳胺(例如根据WO 08/006449的)、二苯并茛苳胺(例如根据WO 07/140847的)、螺二茛苳胺(例如根据WO 2012/034627或WO 2013/120577的)、茛苳胺(例如根据申请EP 2875092、EP 2875699和EP 2875004的)、螺二苯并吡喃胺(例如根据WO 2013/083216的)和二氢吡啶衍生物(例如根据WO 2012/150001的)。根据本发明的化合物也可以用作空穴传输材料。

[0313] 有机电致发光器件的阴极优选包含以下:具有低逸出功的金属,包含多种金属的金属合金或多层结构,所述金属例如碱土金属、碱金属、主族金属或镧系元素(例如Ca、Ba、Mg、Al、In、Mg、Yb、Sm等)。另外合适的是包含碱金属或碱土金属和银的合金,例如包含镁和银的合金。在多层结构的情况下,除了所述金属之外,还可以使用具有相对高逸出功的其它金属,例如Ag或Al,在这种情况下,通常使用金属的组合,例如Ca/Ag、Mg/Ag或Ag/Ag。还可以优选在金属阴极与有机半导体之间引入具有高介电常数的材料的薄中间层。适用于此目的的是例如碱金属氟化物或碱土金属氟化物,以及相应的氧化物或碳酸盐(例如LiF、Li<sub>2</sub>O、BaF<sub>2</sub>、MgO、NaF、CsF、Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>等)。此外,喹啉锂(LiQ)可以用于此目的。该层的层厚优选在0.5nm和5nm之间。

[0314] 阳极优选包含具有高逸出功的材料。阳极优选具有相对于真空大于4.5eV的逸出功。适合于此目的的一方面是具有高氧化还原电位的金属,例如Ag、Pt或Au。另一方面,金属/金属氧化物电极(例如Al/Ni/NiO<sub>x</sub>、Al/PtO<sub>x</sub>)也可以是优选的。对于一些应用,电极中的至少一个必须是透明的或部分透明的,以促进有机材料的照射(有机太阳能电池)或光的耦合输出(OLED、O-激光器)。这里优选的阳极材料是导电的混合金属氧化物。特别优选氧化锡铟(ITO)或氧化铟锌(IZO)。此外优选导电掺杂有机材料,特别是导电掺杂聚合物。

[0315] 所述器件被适当地(取决于应用)结构化,提供接触连接并最终密封,因为根据本发明的器件的寿命在水和/或空气的存在下缩短。

[0316] 在一个优选的实施方式中,根据本发明的有机电致发光器件的特征在于通过升华工艺涂覆一个或多个层,其中材料在真空升华单元中在小于10<sup>-5</sup>毫巴、优选小于10<sup>-6</sup>毫巴的初始压力下通过气相沉积施加。然而,初始压力也可以更低,例如小于10<sup>-7</sup>毫巴。

[0317] 同样优选这样的有机电致发光器件,其特征在于通过OVPD(有机气相沉积)工艺或借助于载气升华涂覆一层或多个层,其中材料是在10<sup>-5</sup>毫巴和1巴之间的压力下施加。该方法的一个特例是OVJP(有机蒸气喷射印刷)工艺,其中材料直接通过喷嘴施加并因此结构化(例如M.S.Arnold等人,Appl.Phys.Lett.2008,92,053301)。

[0318] 此外优选这样的有机电致发光器件,其特征在于一层或多层是从溶液中例如通过旋涂,或通过任何希望的印刷方法例如丝网印刷、柔版印刷、喷嘴印刷或胶版印刷,但特别优选LITI(光诱导热成像、热转移印刷)或喷墨印刷制造。出于这个目的,需要可溶性式(I)化合物。通过化合物的适当取代可以实现高溶解性。

[0319] 也可以是混合工艺,其中例如从溶液施加一个或多个层并且通过气相沉积施加一



个或多个另外的层。因此,例如可以从溶液施加发光层并通过气相沉积施加电子传输层。

[0320] 这些方法对于本领域技术人员来说通常是已知的并且可以由其在不付出创造性劳动的情况下应用于包含根据本发明的化合物的有机电致发光器件。

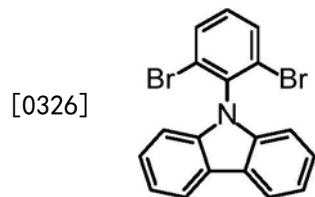
[0321] 根据本发明,包含一种或多种根据本发明的化合物的电子器件可以用于显示器中,用作照明应用中的光源以及用作医疗和/或美容应用(例如光疗)中的光源。

[0322] 现在将通过以下实施例更详细地解释本发明,但不希望由此限制本发明。

[0323] A) 合成例

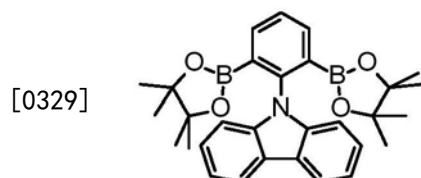
[0324] 实施例1:化合物1

[0325] 溴化物[1]



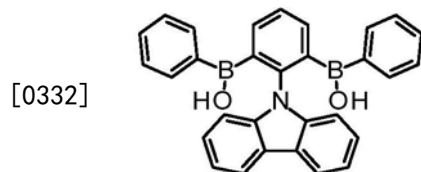
[0327] 根据文献合成。J.Mater.Chem.C,2018,6,4300-4307

[0328] 硼酸酯[2]



[0330] 在Ar气氛下向烧瓶中装入溴化物[1] (8.0g,20.0mmol,1.0当量)和THF(100mL)。将混合物冷却至-78℃。然后加入叔丁基锂(1.7M于戊烷中,49.0mL,4.2当量)。1小时后,加入2-异丙氧基-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂环戊硼烷(20.0mL,18.2g,97.8mmol,4.9当量)。将反应混合物缓慢升温至室温(rt)。通过加入1N HCl(50mL)淬灭反应并用乙酸乙酯(200mL)稀释。分离有机层并真空干燥。残余物用甲醇洗涤。获得呈白色固体状的所需产物(4.9g,9.9mmol,49.6%)。

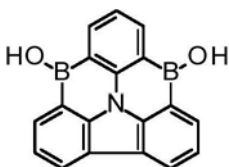
[0331] 硼酸[3]



[0333] 在Ar气氛下向烧瓶中装入硼酸酯[2] (6.8g,13.6mmol,1.0当量)和二乙醚(50mL)。将混合物冷却至-78℃。然后加入苯基锂(1.9M于二丁醚中,28.6mmol,2.1当量)并将混合物升温至室温。反应混合物用1N HCl(50mL)淬灭并用乙酸乙酯(200mL)稀释。分离有机层并真空干燥。获得呈无色油状的所需产物(5.5g,12.2mmol,89.4%)。

[0334] 硼酸[4]

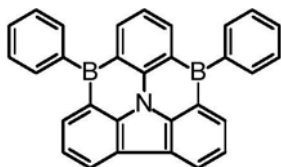
[0335]



[0336] 在Ar气氛下向烧瓶中装入硼酸[3] (3.5g, 7.8mmol, 1.0当量)、N,N-二异丙基乙胺 (5.0g, 6.6ml, 38.8mmol, 5.0当量)、氯化铝 (10.3g, 77.6mmol, 10.0当量) 和甲苯 (30mL)。将混合物回流24小时。然后通过加入水 (100mL) 淬灭反应混合物。过滤出固体并用庚烷和甲苯洗涤。分离出呈白色固体状的所需产物 (1.5g, 5.1mmol, 65.6%)。

[0337] 化合物1[5]

[0338]

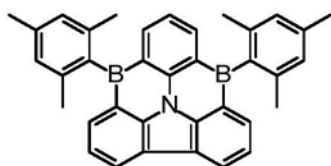


[0339] 在Ar气氛下向烧瓶中装入硼酸[4] (975mg, 3.31mmol, 1.0当量)、2-丙醇 (80mL) 和苯 (20mL)。将混合物回流48小时。然后真空除去溶剂。将残余物溶解在THF (10mL) 中并冷却至-78℃。然后加入苯基锂 (1.8M于二丁醚中, 3.4mL, 6.45mmol, 2.0当量)。将反应缓慢升温至室温。真空除去溶剂。将残余物溶于DCM中并经硅胶过滤。粗产物用乙醇洗涤。分离出呈黄色固体状的所需产物 (140mg, 0.34mmol, 10.2%)。

[0340] 实施例2: 化合物2

[0341] 化合物2[6]

[0342]

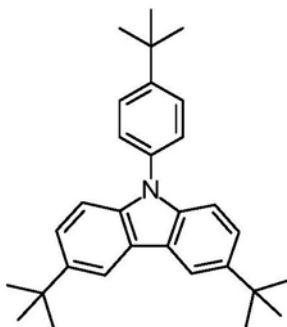


[0343] 在Ar气氛下向烧瓶中装入硼酸[4] (236mg, 0.8mmol, 1.0当量)、2-丙醇 (80mL) 和苯 (20mL)。将混合物回流48小时。然后真空除去溶剂。将残余物溶解在THF (2mL) 中并冷却至-78℃。然后加入在THF (10mL) 中的均三甲苯锂 (200mg, 1.6mmol, 2.0当量)。将反应缓慢升温至室温。真空除去溶剂。将残余物溶于DCM并经硅胶过滤。粗产物用乙醇洗涤。分离出呈黄色固体状的所需产物 (240mg, 0.48mmol, 60.7%)。

[0344] 实施例3: 化合物3

[0345] 咪唑[7]

[0346]

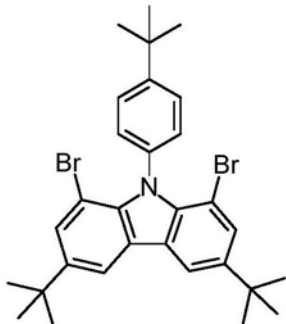


[0347] 在Ar气氛下向烧瓶中装入3,6-二叔丁基-9H-咪唑 (50.0g, 179.0mmol, 1.0当量)、

1-溴-4-叔丁基苯 (38.1g, 31.0mL, 179.0mmol, 1.0当量)、叔丁醇钠 (43.0g, 447.4mmol, 2.5当量)、P(tBu)<sub>3</sub>Pd G4 (4.2g, 7.2mmol, 0.04当量) 和甲苯 (500mL)。将反应混合物回流2小时, 然后冷却至室温。通过加入水 (200mL) 淬灭反应。分离有机层并真空浓缩。残余物用乙醇洗涤。获得呈白色固体状的所需产物 (60.0g, 145.8mmol, 81.5%)。

[0348] 溴化物[8]

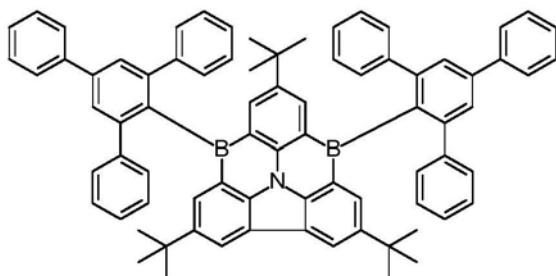
[0349]



[0350] 向烧瓶中装入咪唑 [7] (55.0g, 133.6mmol, 1.0当量)、乙酸 (1000mL) 和二氯甲烷 (1000mL)。缓慢加入溴 (14.4mL, 280.6mmol, 2.1当量)。将反应混合物搅拌24小时。然后通过加入Na<sub>2</sub>SO<sub>3</sub>水溶液 (500mL) 淬灭反应。分离有机层并真空干燥。残余物用乙醇洗涤。获得呈白色固体状的所需产物 (72.0g, 126.5mmol, 94.6%)。

[0351] 化合物3[9]

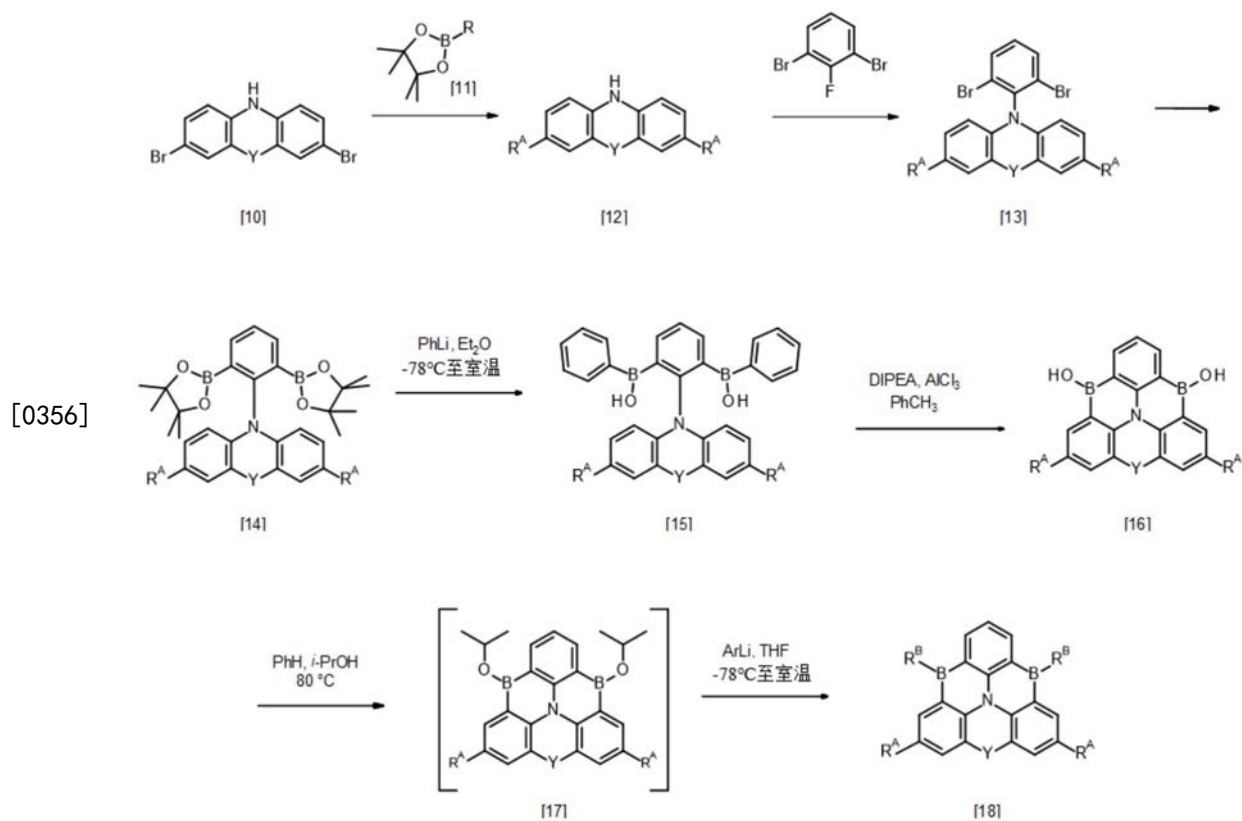
[0352]



[0353] 在Ar气氛下向烧瓶中装入溴化物 [8] (4.9g, 8.6mmol, 1.0当量) 和叔丁基苯 (150mL)。将混合物冷却至-41℃。然后加入叔丁基锂 (1.7M于戊烷中, 21.5mL, 36.6mmol, 4.2当量)。使反应混合物升温至室温。然后将反应混合物加热至70℃保持2小时。将反应混合物冷却回-41℃并加入BBr<sub>3</sub> (2.0mL, 20.7mmol, 2.4当量)。使反应混合物升温至0℃。在此温度下搅拌反应混合物1小时, 然后加入N,N'-二异丙基乙胺 (3.0mL, 17.2mmol, 2.0当量)。将反应混合物回流16小时。然后将反应混合物冷却至-78℃并加入1-锂-2,4,6-三苯基-苯 (10.8g, 34.4mmol, 4.0当量)。使所得混合物升温至室温。除去溶剂, 并且通过柱色谱纯化粗产物。分离出呈黄色固体状的所需产物 (3.6g, 3.4mmol, 40%)。

[0354] 实施例4-6:

[0355] 可以应用上述方法使用如下一般合成路线1合成其它实施例:

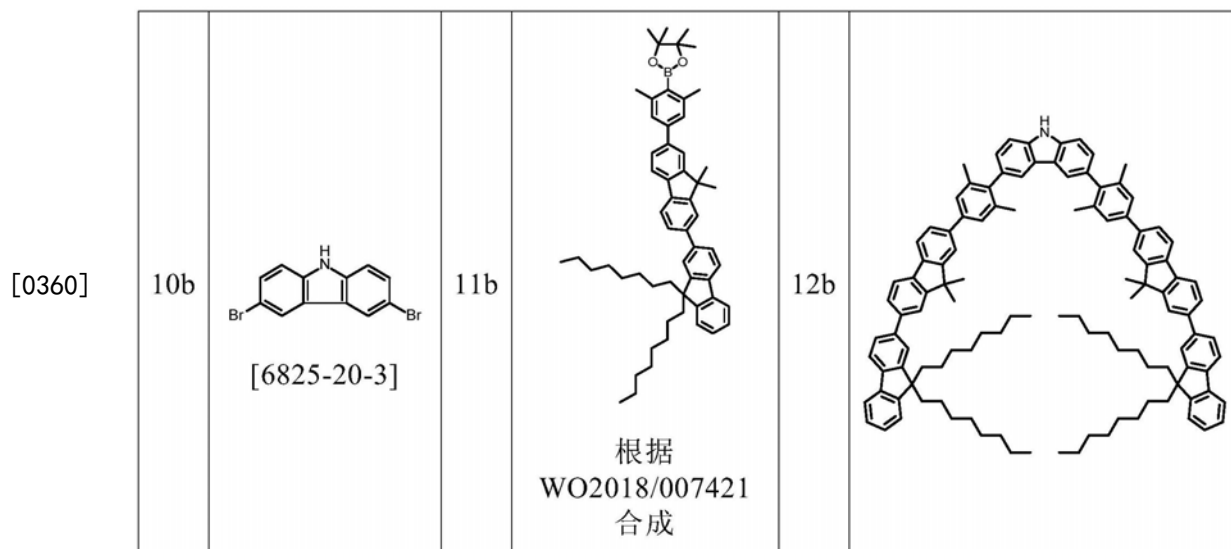


[0357] 根据W02018/007421,可以使用相应的起始材料[10]和[11]获得表1中所示的产物[12]。

[0358] 表1:式[12]中涵盖的中间体的合成

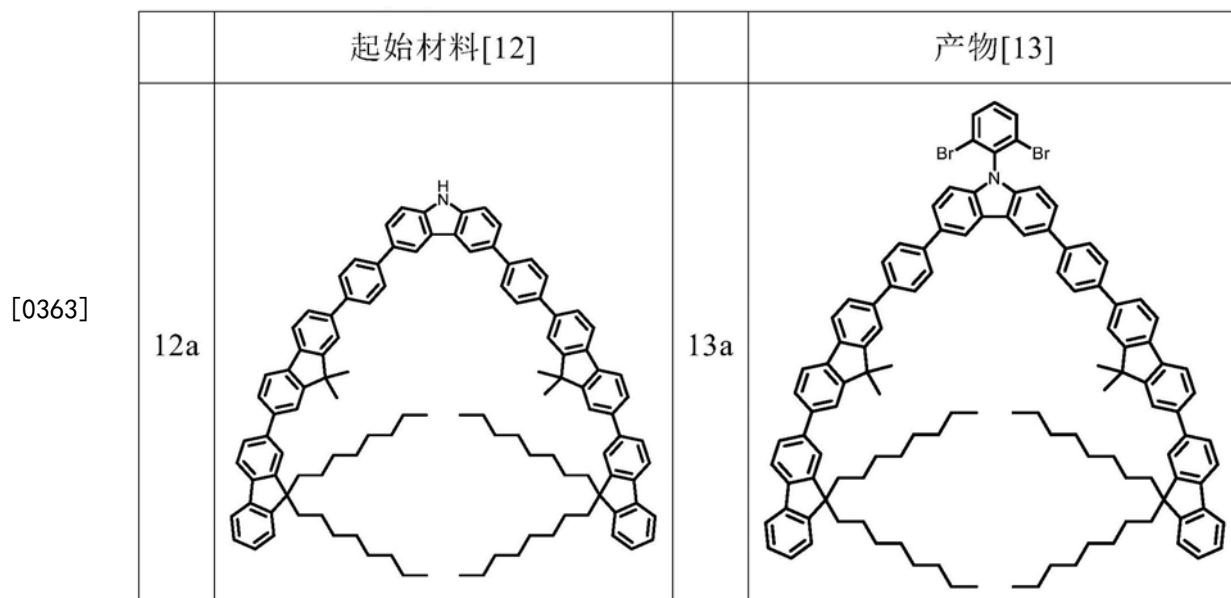
[0359]

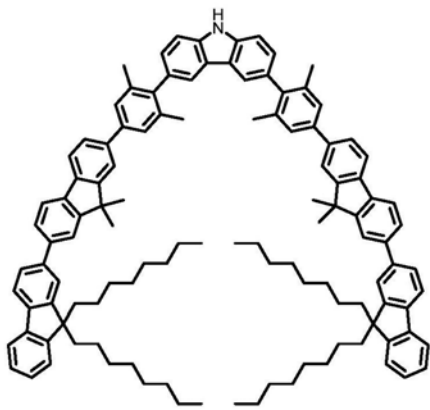
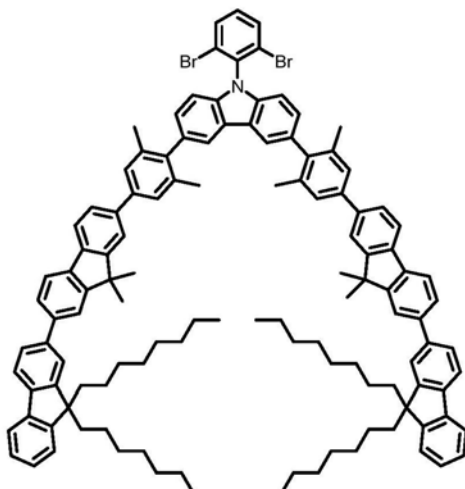
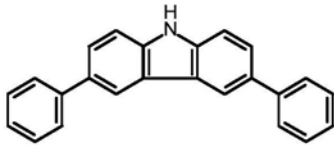
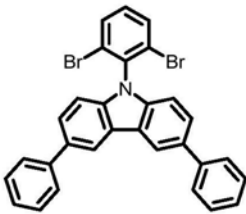
	起始材料[10]		起始材料[11]		产物[12]
	<p>10a</p> <p>[6825-20-3]</p>		<p>11a</p> <p>[2171483-97-7]</p>		<p>12a</p>



[0361] 第二步骤类似于溴化物[1]的合成进行。表2中所示的产物[13]可以使用相应的起始材料[12]获得。

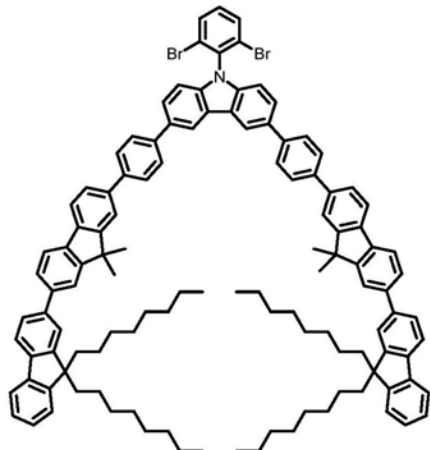
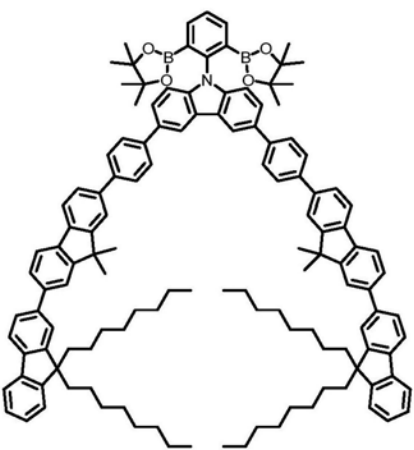
[0362] 表2:式[13]中涵盖的中间体的合成

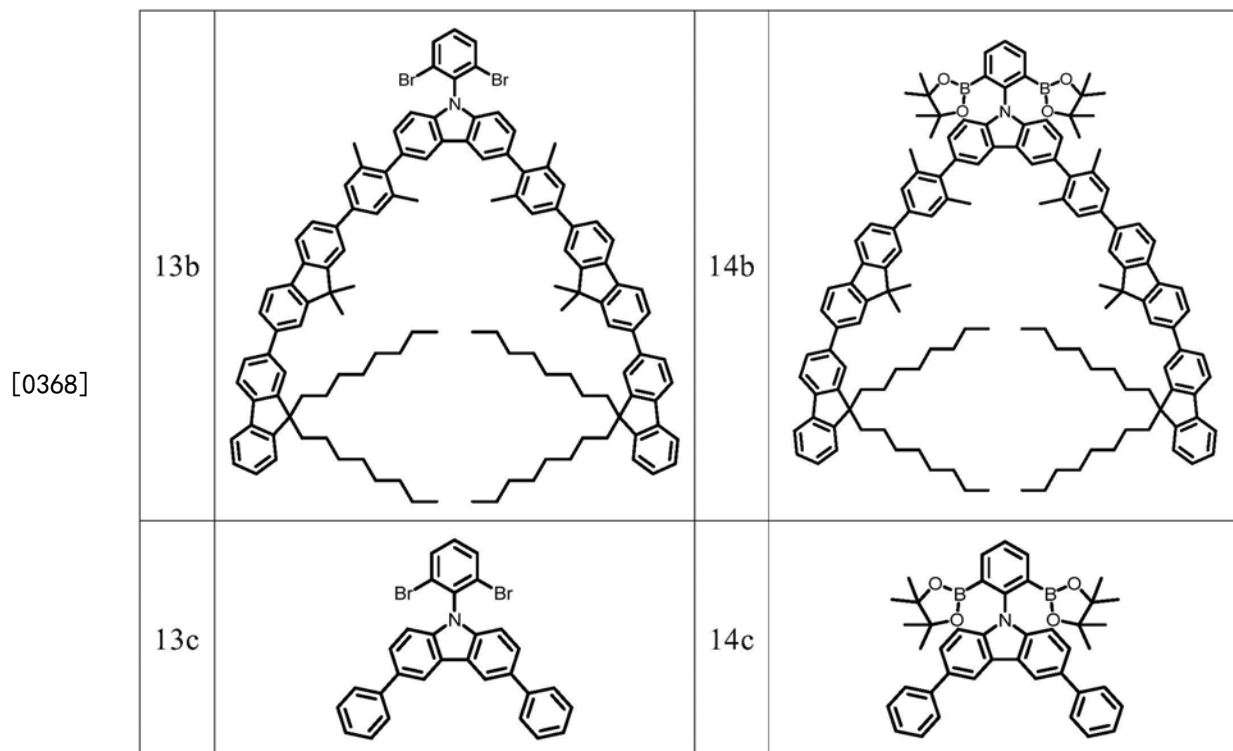


[0364]	<p>12b</p> 	<p>13b</p> 
	<p>12c</p>  <p>[56525-79-2]</p>	<p>13c</p> 

[0365] 第三步骤类似于硼酸酯[2]的合成进行。表3中所示的产物[14]可以使用相应的起始材料[13]获得。

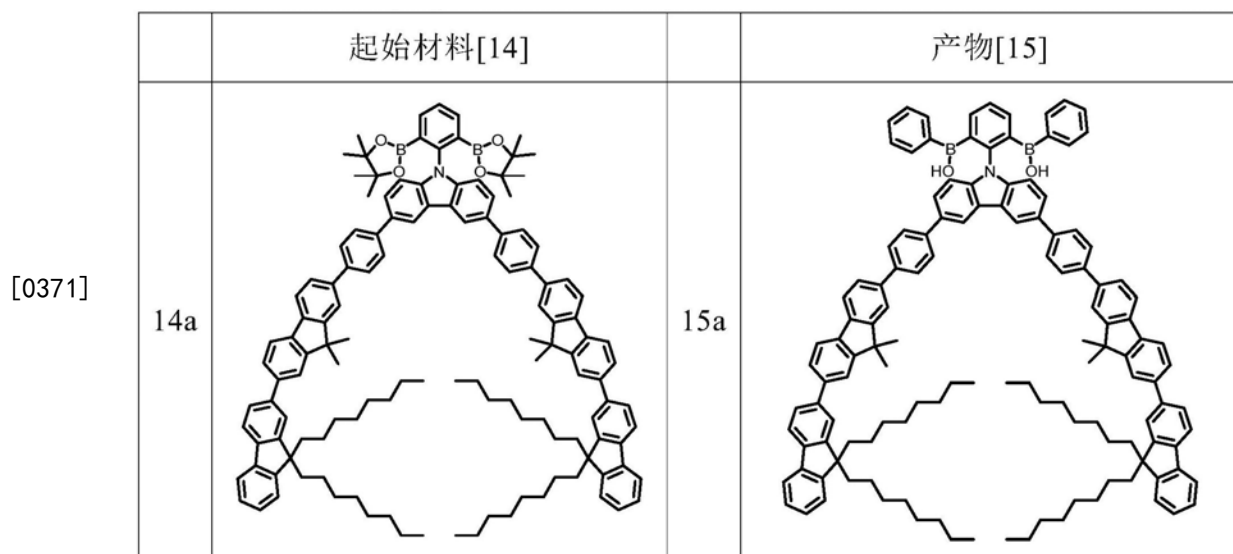
[0366] 表3:式[14]中涵盖的中间体的合成

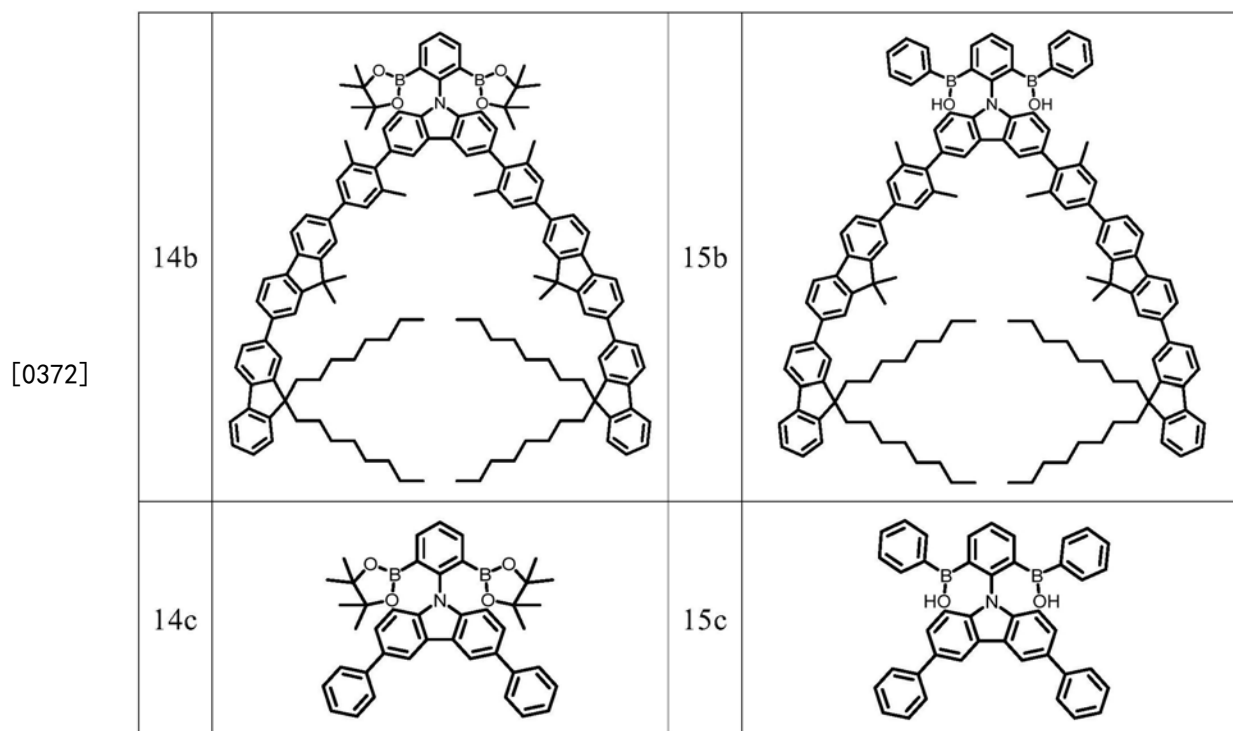
	起始材料[13]	产物[14]
[0367]	<p>13a</p> 	<p>14a</p> 



[0369] 第四步骤类似于硼酸[3]的合成进行。表4中所示的产物[15]可以使用相应的起始材料[14]获得。

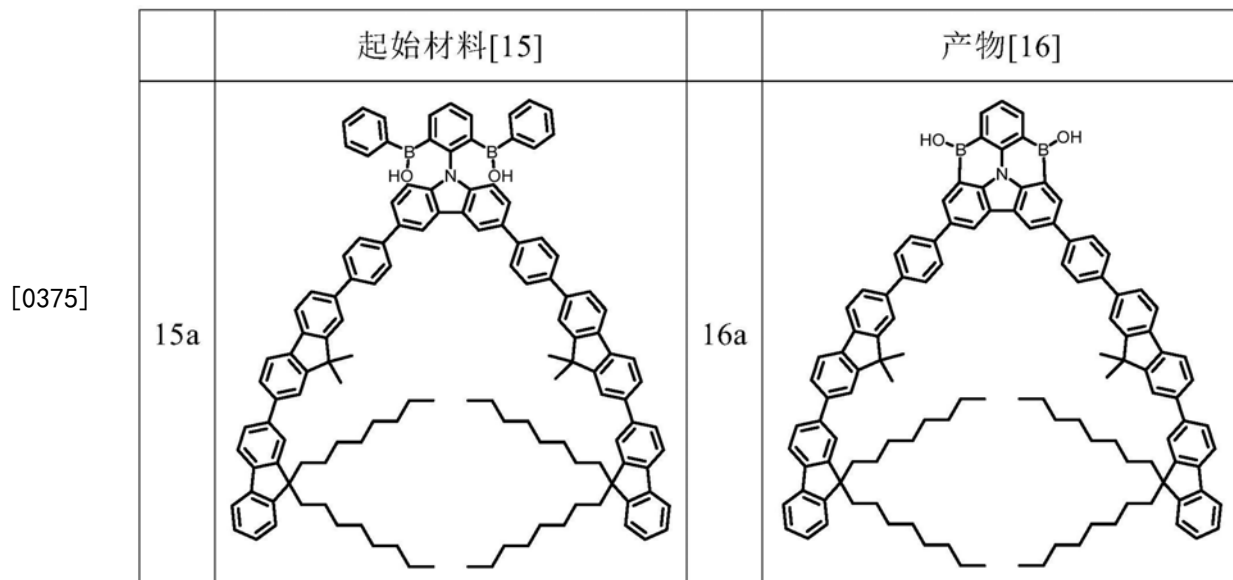
[0370] 表4:式[15]中涵盖的中间体的合成



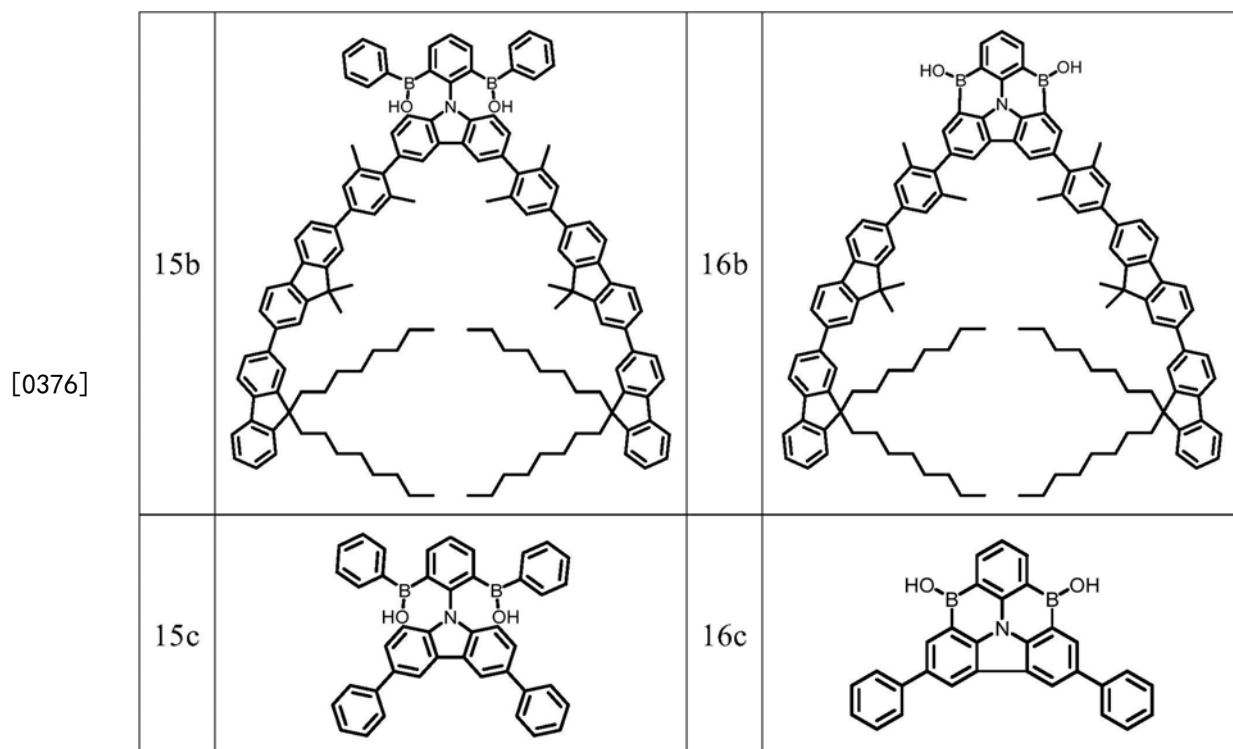


[0373] 第五步骤类似于硼酸[4]的合成进行。表5中所示的产物[16]可以使用相应的起始材料[15]获得。

[0374] 表5:式[16]中涵盖的中间体的合成

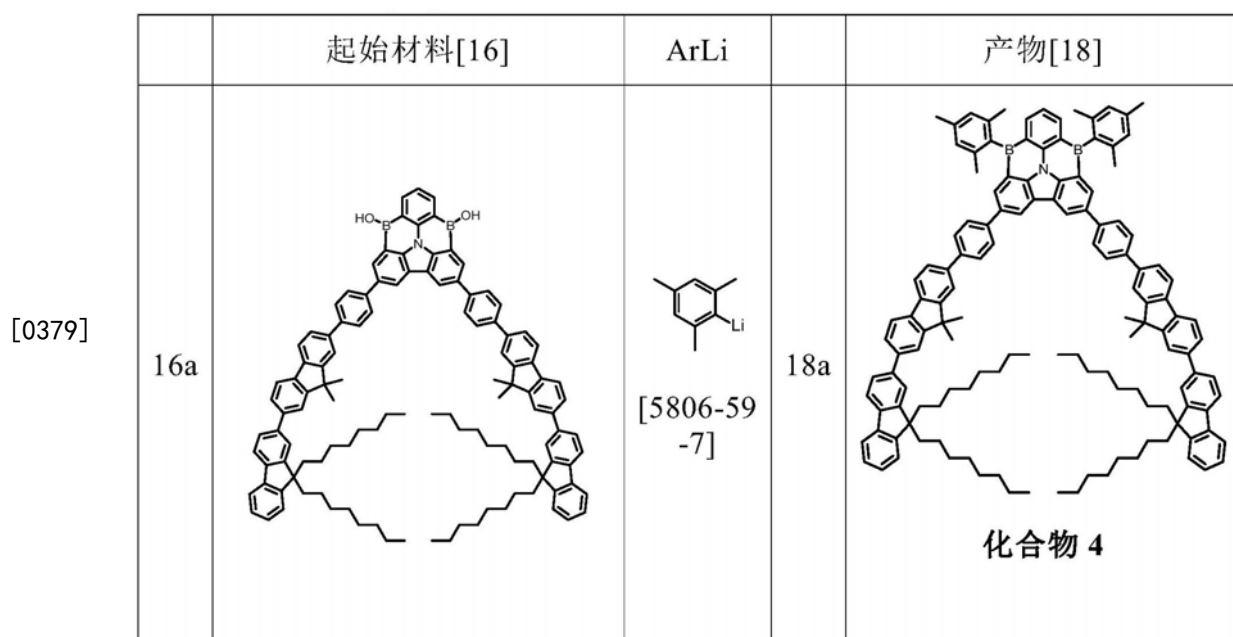


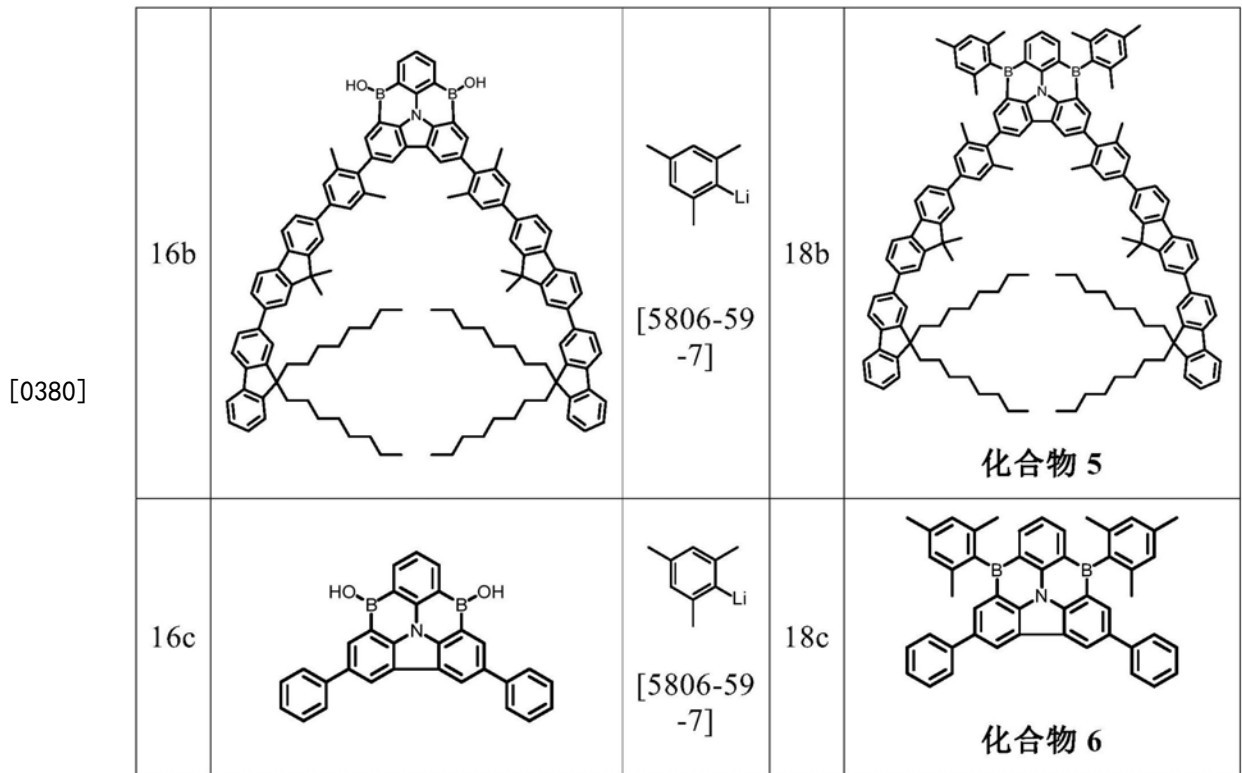




[0377] 第六步骤类似于化合物1[5]的合成进行。表6中所示的产物[18]可以使用相应的起始材料[16]和锂化芳基取代基ArLi获得。

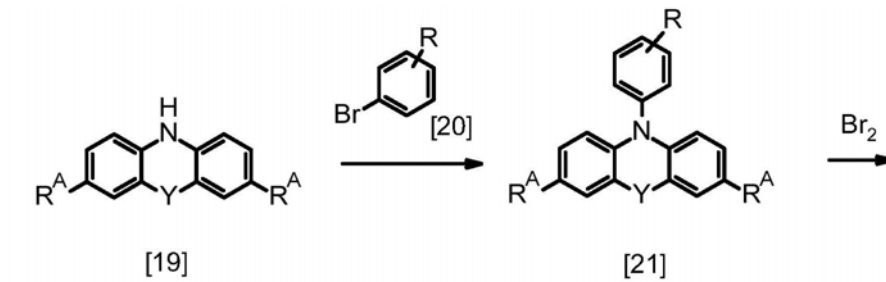
[0378] 表6:式[18]中涵盖的化合物4-6的合成



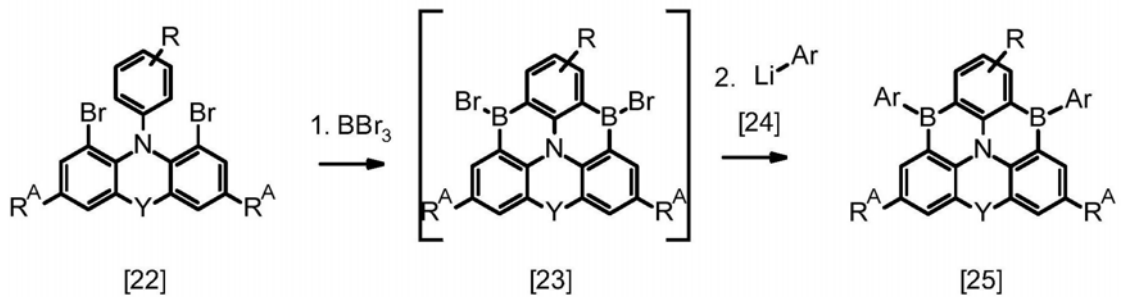


[0381] 实施例7-9:

[0382] 可以应用上述方法使用如下一般合成路线2合成其它实施例:

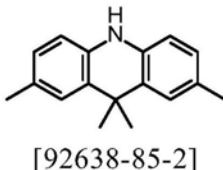
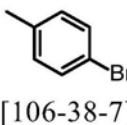
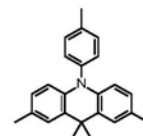
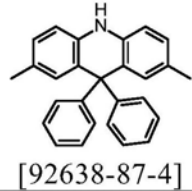
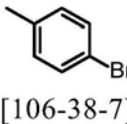
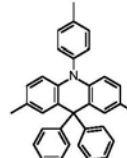
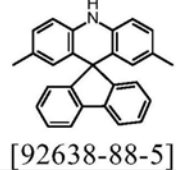
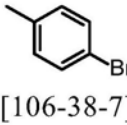
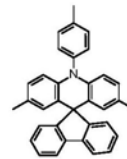


[0383]



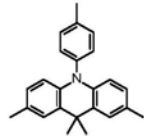
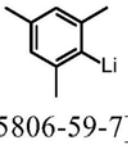
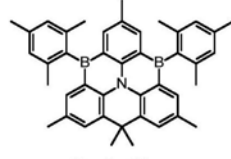
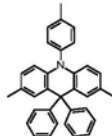
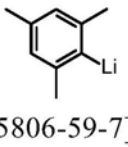
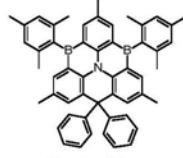
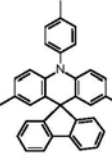
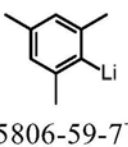
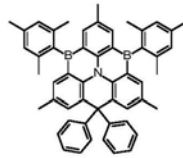
[0384] 表7中列出的产物[21]可以类似于如上所述的咪唑[7]进行合成。

[0385] 表7: 式[21]中涵盖的中间体的合成

	起始材料[19]		起始材料[20]		产物[21]
[0386]	 [92638-85-2]	20a	 [106-38-7]	21a	
	 [92638-87-4]	20b	 [106-38-7]	21a	
	 [92638-88-5]	20c	 [106-38-7]	21c	

[0387] 表8中列出的产物[25]可以类似于如上所述的溴化物[8]和化合物3[9]进行合成。

[0388] 表8:式[25]中涵盖的化合物7-9的合成

	起始材料[21]		起始材料[24]		产物[25]
[0389]		24a	 [5806-59-7]	25a	 化合物 7
		24b	 [5806-59-7]	25b	 化合物 8
[0390]		24c	 [5806-59-7]	25c	 化合物 9

[0391] 实施例10:光物理测量

[0392] 1.) 峰值发光波长 $\lambda_{\max}$ 的测定

[0393] 为了确定荧光发光体的峰值发光波长,将荧光发光体溶解在甲苯中。使用的浓度为1mg/100mL。溶液在荧光光谱仪Hitachi F-4500中用波长匹配的材料激发。测量在室温下进行。峰值发光波长 $\lambda_{\max}$ 是发光光谱的第一个最大值的波长(图1)。通常,第一最大值也是光谱的全局最大值。

[0394] 2.) 光谱宽度(半峰全宽(FWHM))的测定

[0395] 为了确定荧光发光体的光谱宽度,对峰值发光波长最大值的一半 ( $y=0.5$ ) 处的波长值 ( $X1$ 、 $X2$ ) 进行减法运算 (图2)。根据公式 (1) 计算半峰全宽:

$$[0396] \quad FWHM=X2-X1 \quad (1)$$

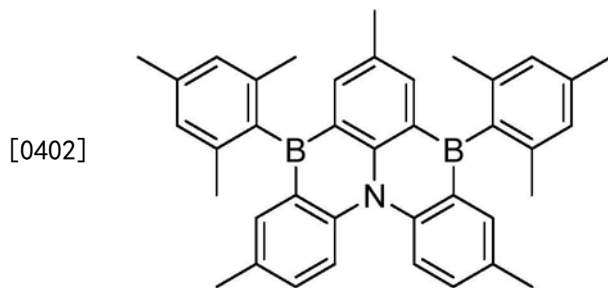
[0397] 根据所描述的方法,获得了荧光发光体的以下特性并描绘于表9中。

[0398] 表9:荧光发光体的特性

材料	$\lambda_{\max}$ [nm]	FWHM [nm]	CIE $y$
化合物1	422	17	0.03
化合物2	416	15	0.01
化合物3	448	14	0.04
Ex-1-3-2	478	37	0.19

[0400] 来自JNC的W018047639A1中显示了如下所示的Ex-1-3-2的特性。所有本发明的化合物都显示出更窄的光谱并因此具有更高的色纯度。

[0401] 来自W018047639A1的Ex-1-3-2的化学结构:



[0403] 3.) OLED的制造

[0404] 涂覆有结构化ITO (50nm, 氧化锡铟) 的玻璃板经过湿洗 (洗碗机, Merck Extran清洁剂)。然后将基底在氮气下在250°C下加热15分钟。

[0405] 所有材料都在真空室中热蒸发。在这种情况下,发光层总是由两种材料组成。例如H-01 (95%) :C-3 (5%) 的指示表示在发光层中材料H-01以95%的体积分数存在并且材料化合物3 (C-3) 以5%的体积分数存在。

[0406] OLED由以下层顺序组成,其在热处理后施加于基底:20nm HTM (95%) :p-D (5%)、160nm HTM、20nm发光层、10nm ETM、20nm ETM (50%) :LiQ (50%)、1nm LiQ、100nm铝。发光层的组成在表10中给出。用于OLED制造的材料在表11中列出。

[0407] OLED通过标准方法表征。为此目的,记录电致发光光谱并测量电流-电压-发光密度特性 (IUL)。(发光密度是垂直于基底测量的)。外量子效率 (EQE) 计算为假定朗伯发光的发光密度的函数。指示U100表示发光密度为100cd/m<sup>2</sup>所需的电压。EQE100是指工作发光密度为100cd/m<sup>2</sup>时的外量子效率。

[0408] 此外,CIE 1931  $x$ 和 $y$ 颜色坐标 (CIE  $x$ 和CIE  $y$ ) 是根据电致发光光谱计算的。OLED性能数据在表10中给出。

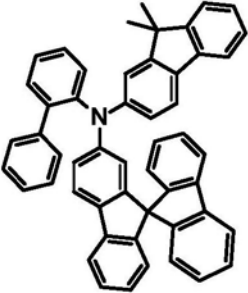
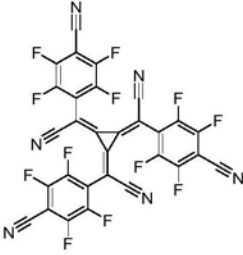
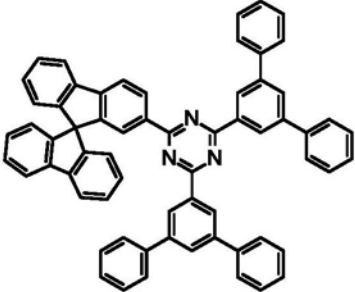
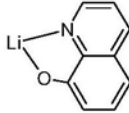
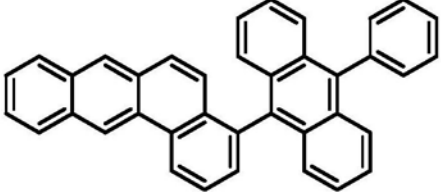
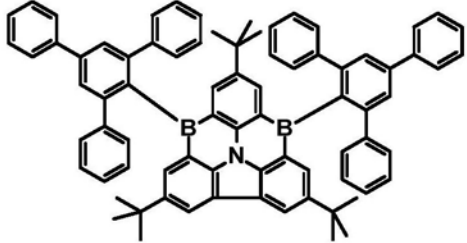
[0409] 在表10中显示,通过使用本发明的化合物3 (C-3) 作为发光层中的发光体,获得非常好的EQE和低电压。

[0410] 所述OLED显示深蓝色。性能数据几乎不依赖于发光层中发光体的浓度。因此,加工窗口大,这在器件生产和显示应用方面是有利的。

[0411] 表10:单个器件实验的发光层组成和OLED性能结果。

编号	发光层	EQE100[%]	U100[V]	CIE x	CIE y
1	H-01 (99%) :C-3 (1%)	9.6	3.2	0.151	0.030
2	H-01 (98%) :C-3 (2%)	9.8	3.2	0.151	0.030
3	H-01 (97%) :C-3 (3%)	10.0	3.2	0.151	0.030
4	H-01 (95%) :C-3 (5%)	9.7	3.1	0.150	0.031
5	H-01 (93%) :C-3 (7%)	9.7	3.1	0.150	0.031
6	H-01 (90%) :C-3 (10%)	9.0	3.1	0.150	0.031
7	H-01 (85%) :C-3 (15%)	8.3	3.0	0.150	0.031
8	H-01 (80%) :C-3 (20%)	7.7	3.0	0.150	0.031

[0413] 表11:用于OLED制造的材料的结构

	
<p>HTM</p>	<p>p-D [US2010102709A1; WO2015007729A1]</p>
	
<p>ETM</p>	<p>LiQ</p>
	
<p>H-01</p>	<p>C-3</p>

[0414]

化合物3的发光光谱

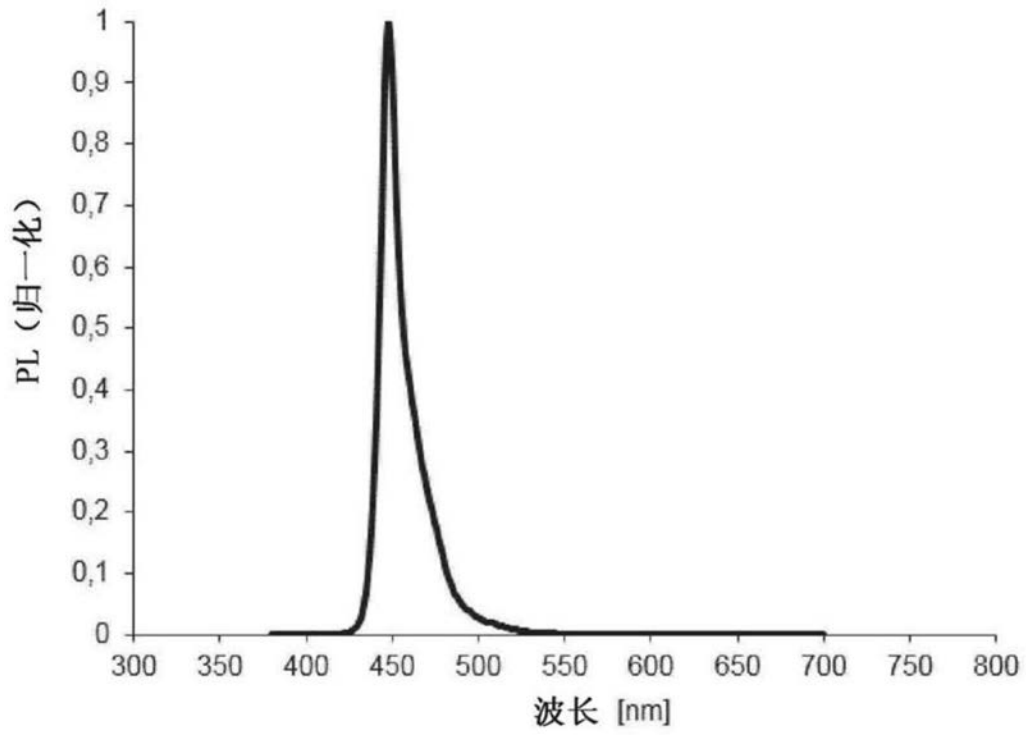


图1

用于FWHM计算的X1和X2的确定

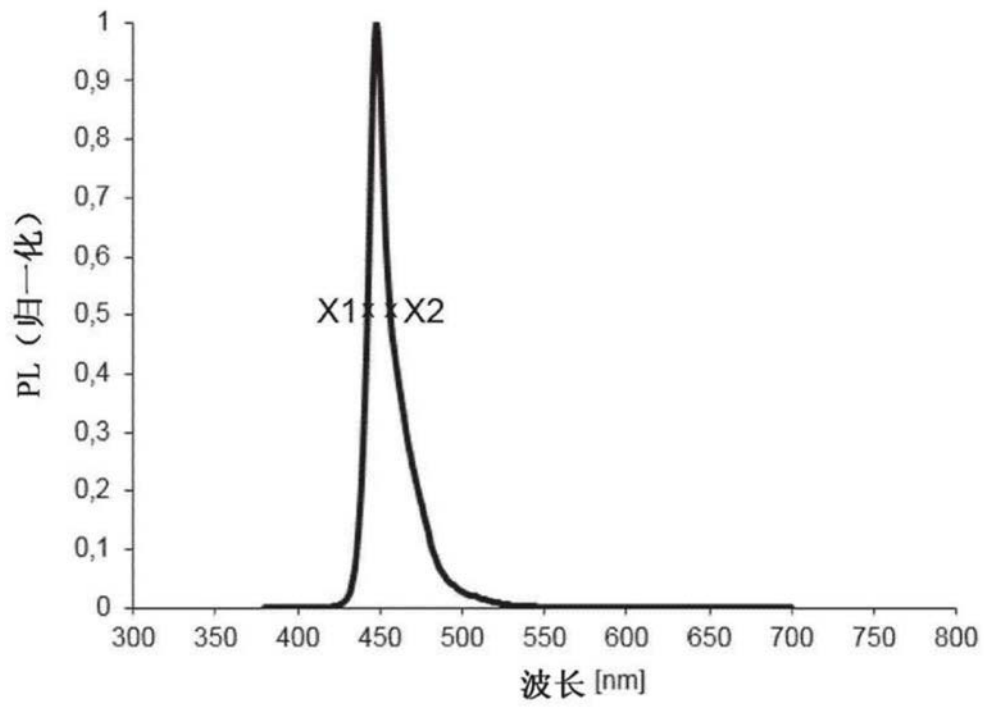


图2