



(12)发明专利

(10)授权公告号 CN 107112437 B

(45)授权公告日 2018.11.20

(21)申请号 201580057767.0

(22)申请日 2015.10.02

(65)同一申请的已公布的文献号
申请公布号 CN 107112437 A

(43)申请公布日 2017.08.29

(30)优先权数据
14003629.4 2014.10.24 EP
15180257.6 2015.08.07 EP

(85)PCT国际申请进入国家阶段日
2017.04.24

(86)PCT国际申请的申请数据
PCT/EP2015/001940 2015.10.02

(87)PCT国际申请的公布数据
W02016/062371 DE 2016.04.28

(73)专利权人 默克专利有限公司
地址 德国达姆施塔特
专利权人 欧司朗奥莱德有限公司

(72)发明人 约阿希姆·凯泽
克里斯托夫·普夫卢姆
阿恩特·耶格尔
托马斯·多布伯蒂尼
冈特·施密特

(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 王潜 郭国清

(51)Int.Cl.
H01L 51/54(2006.01)
H01L 51/50(2006.01)

(56)对比文件
CN 102822185 A,2012.12.12,
CN 103108859 A,2013.05.15,
WO 2013182389 A3,2014.01.30,
CN 101043069 A,2007.09.26,

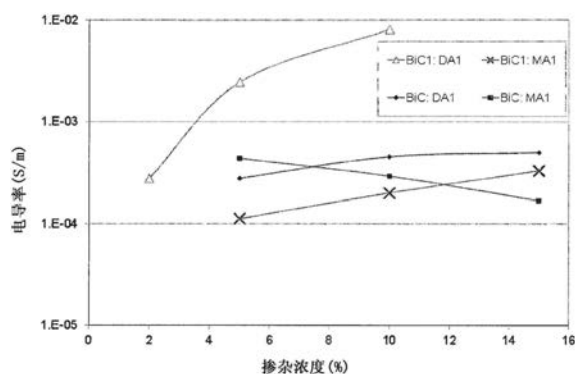
审查员 程健

权利要求书2页 说明书27页 附图1页

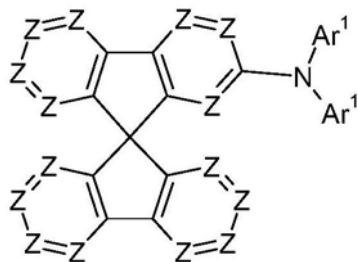
(54)发明名称
用于电子器件的材料

(57)摘要

本发明涉及包含式(A)的单芳基胺和所限定式的p型掺杂剂的材料。本发明还涉及所述材料在电子器件的有机层中的用途,所述器件优选是有机发光二极管(OLED)。



1. 一种材料,所述材料包含式(A)的化合物A



式(A)

其中存在的变量是:

Z是CR¹;

Ar¹在每种情况下是相同或不同的,并且是具有6至30个芳族环原子并且可被一个或多个R¹基团取代的芳族环系,或具有5至30个芳族环原子并且可被一个或多个R¹基团取代的杂芳族环系;此处Ar¹基团可经由R¹基团彼此键合;

R¹在每种情况下是相同或不同的,并且选自H,D,F,C(=O)R²,CN,Si(R²)₃,P(=O)(R²)₂,OR²,S(=O)R²,S(=O)₂R²,具有1至20个碳原子的直链的烷基或烷氧基基团,具有3至20个碳原子的支链或环状的烷基或烷氧基基团,具有2至20个碳原子的烯基或炔基基团,具有6至30个芳族环原子的芳族环系,和具有5至30个芳族环原子的杂芳族环系;其中两个或更多个R¹基团可彼此连接并且可形成环;其中提到的所述烷基、烷氧基、烯基和炔基基团以及提到的所述芳族环系和杂芳族环系可各自被一个或多个R²基团取代;并且其中提到的所述烷基、烷氧基、烯基和炔基基团中的一个或多个CH₂基团可被-R²C=CR²、-C≡C-、Si(R²)₂、C=O、C=NR²、-C(=O)O-、-C(=O)NR²、P(=O)(R²)、-O-、-S-、SO或SO₂代替;

R²在每种情况下是相同或不同的,并且选自H,D,F,CN,具有1至20个碳原子的烷基基团,具有6至30个芳族环原子的芳族环系和具有5至30个芳族环原子的杂芳族环系;其中两个或更多个R²基团可彼此连接并且可形成环;并且其中提到的所述烷基基团、芳族环系和杂芳族环系可被F或CN取代;

并且所述材料包含化合物P,所述化合物P是铋的络合物。

2. 根据权利要求1所述的材料,其特征在于所述化合物A不含具有多于10个芳族环原子的稠合芳基基团并且不含具有多于14个芳族环原子的稠合杂芳基基团。

3. 根据权利要求1或2所述的材料,其特征在于,在所述化合物A中,Ar¹基团在每种情况下是相同或不同的,并且是具有6至24个芳族环原子并且可被一个或多个R¹基团取代的芳族环系,或具有5至24个环原子并且可被一个或多个R¹基团取代的杂芳族环系。

4. 根据权利要求1或2所述的材料,其特征在于,在所述化合物A中,Ar¹基团是任选被一个或多个R¹基团取代的基团并且选自苯基、联苯基、三联苯基、四联苯基、萘基、菲基、荧蒽基、芴基、茚并芴基、螺二芴基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、咪唑基、吡啶基和菲啶基。

5. 根据权利要求1或2所述的材料,其特征在于,所述化合物P是呈(III)氧化态的铋的络合物。

6. 根据权利要求1或2所述的材料,其特征在于,所述化合物P是具有至少一个配体L的铋络合物,所述配体L是有机化合物。

7. 根据权利要求6所述的材料,其特征在于所述配体L带单个负电荷。
8. 根据权利要求6所述的材料,其特征在于所述配体L中的与铋原子键合的基团选自羧酸基团、硫代羧酸基团、酰胺基团和酰亚胺基团。
9. 根据权利要求6所述的材料,其特征在于所述配体L选自氟化苯甲酸衍生物、氟化或非氟化的苯乙酸衍生物和氟化或非氟化的乙酸衍生物。
10. 根据权利要求1或2所述的材料,其特征在于所述化合物P以0.1%至30%的浓度作为掺杂剂存在于所述材料中。
11. 一种用于电子器件中的层,所述层包含根据权利要求1至10中的任一项所述的材料。
12. 一种制剂,所述制剂包含根据权利要求1至10中的任一项所述的材料和至少一种溶剂。
13. 一种用于制造根据权利要求11所述的层的方法,其特征在于化合物A和化合物P从气相中一起施加,或者其特征在于包含根据权利要求1至10中的任一项所述的材料的制剂从液相中施加。
14. 一种根据权利要求1至10中的任一项所述的材料在电子器件中的用途,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、有机光学检测器、有机光感受器、有机场猝熄器件、有机发光电化学电池和有机激光二极管。
15. 一种电子器件,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、有机光学检测器、有机光感受器、有机场猝熄器件、有机发光电化学电池和有机激光二极管,所述电子器件包含根据权利要求1至10中的任一项所述的材料。
16. 根据权利要求15所述的电子器件,所述电子器件选自有机电致发光器件,其特征在于所述有机电致发光器件在设置于阳极与发光层之间的空穴传输层中包含所述材料,其中在包含所述材料的层与所述发光层之间存在一个或多个其它层。
17. 根据权利要求16所述的电子器件,所述电子器件选自有机电致发光器件,其特征在于所述空穴传输层 (HTL) 和在空穴传输层与发光层之间的一个EBL层的HOMO能级满足以下条件:
$$\text{HOMO (HTL)} \leq \text{HOMO (EBL)}。$$
18. 根据权利要求16或17所述的电子器件,所述电子器件选自有机电致发光器件,其特征在于设置在包含所述材料的层与所述发光层之间的所述一个或多个其它层包含一种或多种相同或不同的式 (A) 化合物。
19. 根据权利要求15至17中的任一项所述的电子器件,所述电子器件选自有机电致发光器件,其特征在于所述有机电致发光器件在与所述阳极直接相邻的层中包含所述材料。

用于电子器件的材料

技术领域

[0001] 本申请涉及包含所限定式(A)的单芳基胺和铋的络合物的材料。本申请还涉及所述材料在电子器件的有机层中的用途,所述器件优选是有机电致发光器件(OLED)。

背景技术

[0002] 术语“包含”/“包括”在本申请的上下文中被理解是指可存在其它的成分或步骤。不定冠词“一个”/“一种”并不排除多个/种。

[0003] 电子器件在本申请的上下文中被理解是指所谓的有机电子器件,其包含有机半导体材料作为功能材料。

[0004] 将有机化合物用作功能材料的OLED的结构描述于例如US 4539507、US 5151629、EP 0676461和WO 98/27136中。通常,术语OLED被理解是指具有一个或多个包含有机化合物的层并且在施加电压时发光的电子器件。

[0005] 具有空穴传输功能的层(空穴传输层),例如空穴注入层、空穴传输层和电子阻挡层,对电子器件的性能数据具有很大的影响。

[0006] 现有技术公开了单芳基胺作为空穴传输层的材料的用途。这种单芳基胺描述于例如JP 1995/053955、WO 2006/123667、JP 2010/222268、WO 2012/034627、WO 2013/120577、WO 2014/015938和WO 2014/015935中。

[0007] 此外,现有技术公开了在OLED的空穴传输层中使用p型掺杂剂与空穴传输材料的组合。这里的p型掺杂剂应理解是指当作为次要成分添加到主要成分时显著提高其电导率的化合物。

[0008] 现有技术中已知的p型掺杂剂是有机电子受体化合物,例如7,7,8,8-四氰基-2,3,5,6-四氟醌二甲烷(F4TCNQ)。例如在WO 2011/33023和WO 2013/182389中,现有技术还公开了过渡金属阳离子和主族金属阳离子的金属络合物作为p型掺杂剂。

[0009] 现有技术中已知的空穴传输材料和现有技术中已知的p型掺杂剂导致了多种潜在可能的组合。其中,在现有技术中仅公开了几种。这里在OLED的空穴传输层中可举例提及及作为p型掺杂剂的主族金属络合物与四胺(例如2,2',7,7'-四(N,N-二对甲苯基)氨基-9,9-螺二芴)的组合。这在WO 2013/182389中公开。来自现有技术的另一个实例是在OLED的空穴传输层中F4TCNQ与单芳基胺(例如三-对联苯胺)的组合。这在WO 2013/135352中公开。

[0010] 然而,在空穴传输层中包含这些材料的OLED在寿命和效率方面需要改进。

[0011] 另外需要能够高效掺杂具有低HOMO的空穴传输材料、特别是具有-5.0至-5.4eV范围内的HOMO的空穴传输材料的p型掺杂剂,使得可以获得具有合适电导率和低HOMO能级的掺杂剂-空穴传输材料组合。这里通过实施例中的方法来确定HOMO能量。合适且优选的电导率在 10^{-4} S/m至 10^{-3} S/m范围内,该值由实施例中的方法确定。使用具有低HOMO的空穴传输材料是非常需要的,因为这不需要在空穴传输层与发光层之间插入具有低HOMO的另一个层。这使得能够更简单地构造OLED并因此实现更有效的生产过程。如果在空穴传输层与发光层之间插入另一个层,则在空穴传输层具有低HOMO的期望情况下,由于空穴传输层

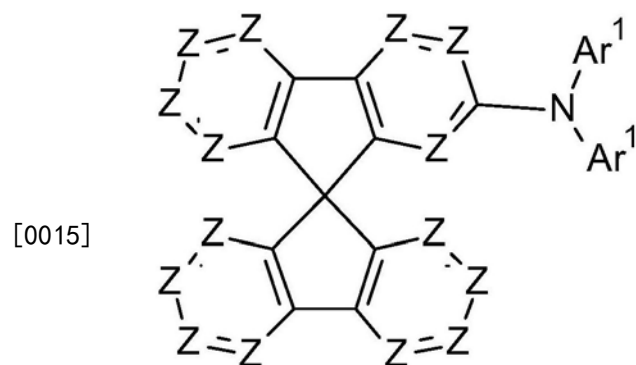
的HOMO不高于空穴传输层与发光层之间的层的HOMO,可以避免空穴势垒并因此避免空穴传输层与发光层之间的电压降。这可例如通过在空穴传输层和空穴传输层与发光层之间的另一个层中使用相同的材料来实现。

[0012] 另外需要在可见区(VIS区)中仅具有低吸收的空穴传输材料-掺杂剂组合。现有技术中已知的p型掺杂剂例如NDP-2(可从Novaled AG购得)或氧化钼掺杂剂与标准的空穴传输材料组合在VIS区中具有吸收。在VIS区中不存在显著吸收带是非常需要的,因为在VIS区中的吸收影响OLED的发光特性并使其效率劣化。

[0013] 在空穴传输层中使用的p型掺杂剂和空穴传输材料的可能组合的研究中,现在已经出乎意料地发现,包含特定式(A)的单芳基胺和铋的络合物的材料与现有技术相比,提供了与寿命和效率有关的优异值。此外,本发明的材料在OLED中使用相比根据现有技术的材料具有更低的漏电流。不受这种理论束缚,这可能是由OLED的掺杂层的较低横向电导率造成的。随着显示器中的像素变得越来越小,漏电流是一个很大的问题,因为它们可能导致像素之间的串扰。因此,需要避免这种情况。本发明材料的另一个特征是在VIS区中仅低的吸收带。另一个特征在于,由于单芳基胺的低HOMO位置,利用本发明材料可以生产如下的OLED,其在包含本发明材料的空穴传输层与发光层之间不需要具有任何另外的层并且因此能够以更有效的方式制造。

发明内容

[0014] 因此,本申请提供一种材料,其包含化合物P和式(A)的化合物A,



式(A)

[0016] 其中存在的变量是:

[0017] Z是CR¹;

[0018] Ar¹在每种情况下是相同或不同的,并且是具有6至30个芳族环原子并且可被一个或多个R¹基团取代的芳族环系,或具有5至30个芳族环原子并且可被一个或多个R¹基团取代的杂芳族环系;

[0019] R¹在每种情况下是相同或不同的,并且选自H,D,F,C(=O)R²,CN,Si(R²)₃,P(=O)(R²)₂,OR²,S(=O)R²,S(=O)₂R²,具有1至20个碳原子的直链的烷基或烷氧基基团,具有3至20个碳原子的支链或环状的烷基或烷氧基基团,具有2至20个碳原子的烯基或炔基基团,具有6至30个芳族环原子的芳族环系,和具有5至30个芳族环原子的杂芳族环系;其中两个或更多个R¹基团可彼此连接并且可形成环;其中提到的所述烷基、烷氧基、烯基和炔基基团以

及提到的所述芳族环系和杂芳族环系可各自被一个或多个 R^2 基团取代；并且其中提到的所述烷基、烷氧基、烯基和炔基基团中的一个或多个 CH_2 基团可被 $-R^2C=CR^2-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-Si(R^2)_2-$ 、 $-C(=O)-$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^2-$ 、 $-P(=O)(R^2)-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO-$ 或 $-SO_2-$ 代替；

[0020] R^2 在每种情况下是相同或不同的，并且选自H、D、F、CN，具有1至20个碳原子的烷基基团，具有6至30个芳族环原子的芳族环系和具有5至30个芳族环原子的杂芳族环系；其中两个或更多个 R^2 基团可彼此连接并且可形成环；并且其中提到的所述烷基基团、芳族环系和杂芳族环系可被F或CN取代；

[0021] 所述化合物P是铋的络合物。

[0022] 在本发明上下文中的芳族环系在环系中含有6至60个碳原子。其不包含任何杂原子作为芳族环原子。因此，在本发明上下文中的芳族环系不含任何杂芳基基团。在本发明上下文中的芳族环系应被理解是指的体系，其不必仅含有芳基基团，而是其中多个芳基基团还可通过单键或通过非芳族单元（例如，一个或多个任选被取代的C、Si、N、O或S原子）键合。在这种情况下，以体系中非H原子的总数计，所述非芳族单元含有优选小于10%的非H原子。例如，和其中两个或更多个芳基基团例如通过直链或环状的烷基、烯基或炔基基团或通过甲硅烷基基团连接的体系一样，诸如9,9'-螺二苎、9,9'-二苎基苎、三苎基胺、二苎基醚和茈的体系同样被认为是在本发明上下文中的芳族环系。此外，其中两个或更多个芳基基团通过单键彼此连接的体系也被认为是在本发明上下文中的芳族环系，例如，诸如联苎和三联苎的体系。

[0023] 在本发明上下文中的杂芳族环系含有5至60个芳族环原子，其中的至少一个是杂原子。杂芳族环系的杂原子优选选自N、O和/或S。杂芳族环系符合上述芳族环系的定义，但具有至少一个杂原子作为芳族环原子之一。以这种方式，其不同于在本申请定义的意义上的芳族环系，根据该定义，芳族环系不能含有任何杂原子作为芳族环原子。

[0024] 在本发明上下文中的芳基基团含有6至40个芳族环原子，其都不是杂原子。在本发明上下文中的芳基基团被理解是指简单的芳族环，即苎，或稠合芳族多环，例如茈、菲或蒽。在本申请上下文中的稠合芳族多环由彼此稠合的两个或更多个简单芳族环组成。环之间稠合在这里被理解是指所述环彼此共用至少一个边。

[0025] 在本发明上下文中的杂芳基基团含有5至40个芳族环原子，其中至少一个是杂原子。杂芳基基团的杂原子优选选自N、O和S。在本发明上下文中的杂芳基基团被理解是指简单的杂芳族环，例如吡啶、嘧啶或噻吩，或稠合杂芳族多环，例如喹啉或呋唑。在本申请上下文中的稠合杂芳族多环由彼此稠合的两个或更多个简单的杂芳族环组成。环之间稠合被理解是指所述环彼此共用至少一个边。

[0026] 具有6至40个芳族环原子的芳族环系或具有5至40个芳族环原子的杂芳族环系特别被理解是指衍生自以下的基团：上文在芳基基团和杂芳基基团下提及的基团，以及联苎、三联苎、四联苎、苎、螺二苎、二氢苎、二氢茈、四氢茈、茈并苎、三聚茈、异三聚茈、螺三聚茈、螺异三聚茈、茈并呋唑，或这些基团的组合。

[0027] 各自可被上述基团取代并且可经由任何希望的位置与芳族或杂芳族体系连接的芳基或杂芳基基团，特别被理解是指衍生自如下物质的基团：苎、茈、蒽、菲、茈、二氢茈、蒽、茈、三亚苎、茈、茈并茈、茈并菲、并四苎、并五苎、茈并茈、呋喃、茈并呋喃、异茈并呋喃、二茈并呋喃、噻吩、茈并噻吩、异茈并噻吩、二茈并噻吩、吡咯、吡啶、异吡啶、呋唑、吡啶、

喹啉、异喹啉、吡啶、菲啶、苯并-5,6-喹啉、苯并-6,7-喹啉、苯并-7,8-喹啉、吩噻嗪、吩噻嗪、吡唑、吡唑、咪唑、苯并咪唑、萘并咪唑、菲并咪唑、吡啶并咪唑、吡嗪并咪唑、喹啉并咪唑、噻唑、噻唑、苯并噻唑、萘并噻唑、蒽并噻唑、菲并噻唑、异噻唑、1,2-噻唑、1,3-噻唑、苯并噻唑、哒嗪、苯并哒嗪、嘧啶、苯并嘧啶、喹啉、吡嗪、吩噻嗪、萘啶、氮杂呋唑、苯并呋唑、菲咯啉、1,2,3-三唑、1,2,4-三唑、苯并三唑、1,2,3-噁二唑、1,2,4-噁二唑、1,2,5-噁二唑、1,3,4-噁二唑、1,2,3-噻二唑、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、吡嗪和苯并噻二唑。

[0028] 在本发明的上下文中,其中单独的氢原子或CH₂基团也可被上文在所述基团定义中提及的基团代替的、具有1至20个碳原子的直链烷基基团和具有3至20个碳原子的支链或环状的烷基基团和具有2至20个碳原子的烯基或炔基基团优选被理解是指甲基、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、己炔基或辛炔基基团。

[0029] 其中单独的氢原子或CH₂基团也可被上文在所述基团定义中提及的基团代替的具有1至20个碳原子的烷氧基或硫代烷基基团优选被理解是指甲氧基、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。

[0030] 在本申请的上下文中,两个或更多个基团一起可形成环的措词应理解为特别是指两个基团通过化学键彼此连接。然而,另外,上述措词也应理解为是指,如果两个基团之一是氢,则第二基团结合于氢原子所键合的位置,从而形成环。

[0031] 所述化合物A优选具有低HOMO,更优选地在-5.0至-5.4eV范围内的HOMO,最优选地在-5.1至-5.3eV范围内的HOMO。

[0032] 所述化合物A是单芳基胺。单芳基胺在这里被理解是指具有单个并且不超过一个芳基氨基基团的化合物。根据本发明,所述化合物A是单三芳基氨基化合物,这意味着它具有单个三芳基氨基基团。术语“三芳基氨基基团”优选也被理解是指含有与氨基氮键合的杂芳基基团的化合物。更优选地,所述化合物A具有单个氨基基团。应该注意的是,根据本申请的定义,呋唑基团不算作芳基氨基基团或氨基基团。

[0033] 根据本发明的另一个优选实施方式,所述化合物A不含具有多于10个芳族环原子的稠合芳基基团和具有多于14个芳族环原子的稠合杂芳基基团。

[0034] Ar¹优选在每种情况下是相同或不同的,并且是具有6至24个芳族环原子并且可被一个或多个R¹基团取代的芳族环系,或具有5至24个芳族环原子并且可被一个或多个R¹基团

取代的杂芳族环系。

[0035] 优选地,式(A)的化合物中的至少一个 Ar^1 基团是任选被一个或多个 R^1 基团取代的基团并且选自苯基、联苯基、三联苯基、四联苯基、萘基、菲基、荧蒽基、茚基、茚并茚基、螺二茚基、呋喃基、苯并呋喃基、异苯并呋喃基、二苯并呋喃基、噻吩基、苯并噻吩基、异苯并噻吩基、二苯并噻吩基、吡啶基、异吡啶基、咪唑基、吡啶并咪唑基、茚并咪唑基、吡啶基、喹啉基、异喹啉基、吡啶基、苯并咪唑基、嘧啶基、吡嗪基和三嗪基;其中特别优选的是苯基、联苯基、三联苯基、四联苯基、萘基、菲基、荧蒽基、茚基、茚并茚基、螺二茚基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、咪唑基、吡啶基和菲啶基。

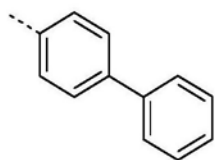
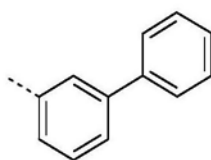
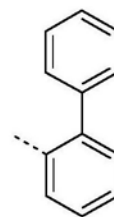
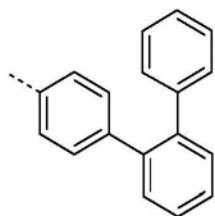
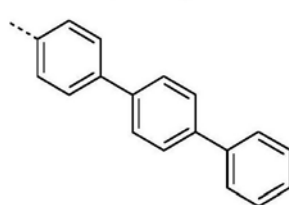
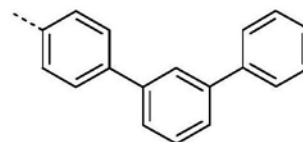
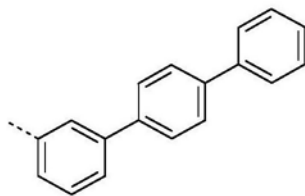
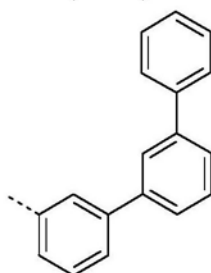
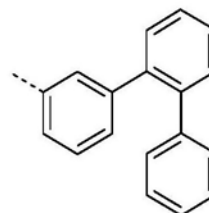
[0036] R^1 优选在每种情况下是相同或不同的,并且选自H,D,F,CN, $Si(R^2)_3$,具有1至10个碳原子的直链的烷基或烷氧基基团,具有3至10个碳原子的支链或环状的烷基或烷氧基基团,具有6至40个芳族环原子的芳族环系和具有5至40个芳族环原子的杂芳族环系;其中所述烷基和烷氧基基团、所述芳族环系和所述杂芳族环系可各自被一个或多个 R^2 基团取代;并且其中所述烷基或烷氧基基团中的一个或多个 CH_2 基团可被 $-C\equiv C-$ 、 $-R^2C=CR^2-$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^2$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)O-$ 或 $-C(=O)NR^2-$ 代替。

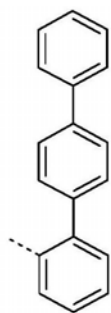
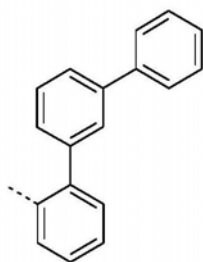
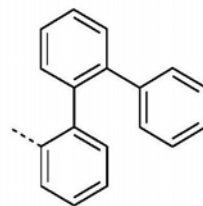
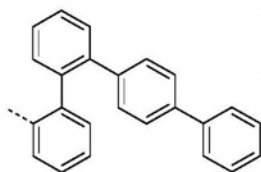
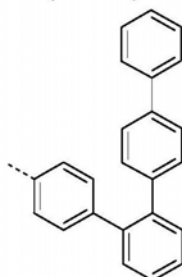
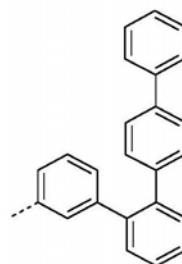
[0037] R^1 更优选在每种情况下是相同或不同的,并且选自H,F,CN,具有1至8个碳原子的直链的烷基或烷氧基基团,具有3至8个碳原子的支链或环状的烷基或烷氧基基团,具有6至24个芳族环原子的芳族环系,和具有5至24个芳族环原子的杂芳族环系,其中所述烷基基团、所述芳族环系和所述杂芳族环系可各自被一个或多个 R^2 基团取代。其中特别优选的是H、F、甲基、乙基、叔丁基和苯基。

[0038] 更优选地,所述式(A)的化合物不含非H的 R^1 基团,含有确切地一个非H的 R^1 基团,或确切地两个非H的 R^1 基团。

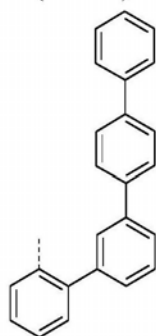
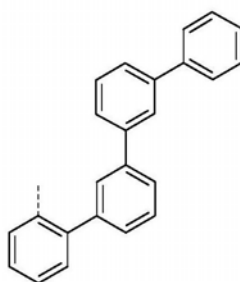
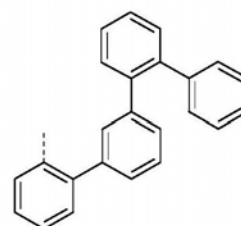
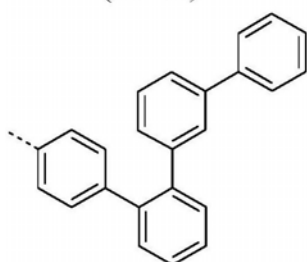
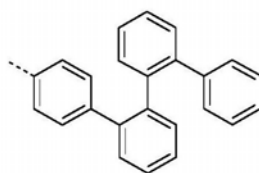
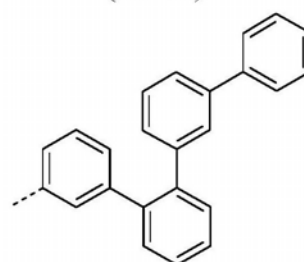
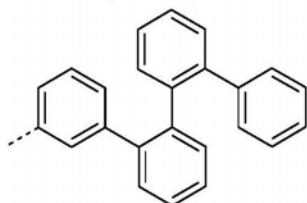
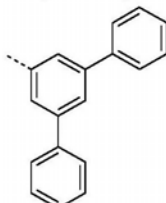
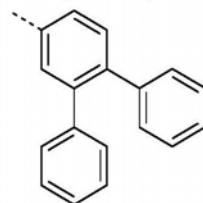
[0039] 优选地,所述式(A)的化合物中的至少一个 Ar^1 基团、更优选所有 Ar^1 基团在每种情况下是相同或不同的,并且选自以下基团,其中的每个可在所示的任何未被取代的位置被一个或多个 R^1 基团取代:

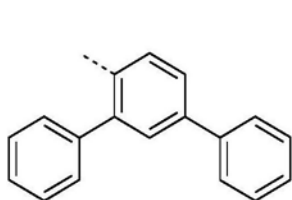
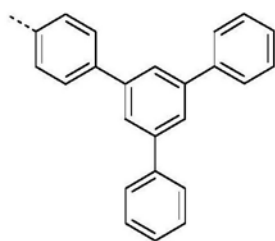
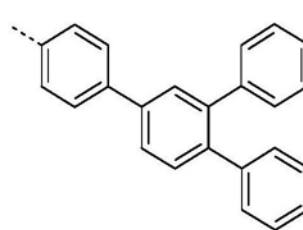
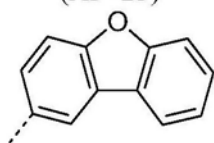
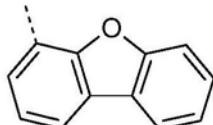
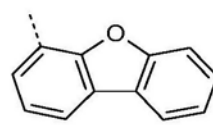
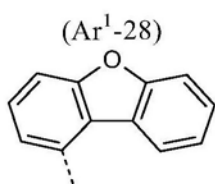
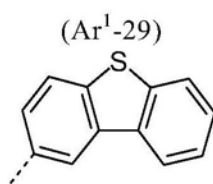
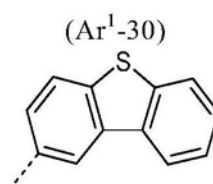
[0040]

(Ar¹-1)(Ar¹-2)(Ar¹-3)(Ar¹-4)(Ar¹-5)(Ar¹-6)(Ar¹-7)(Ar¹-8)(Ar¹-9)

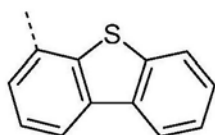
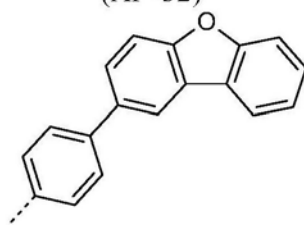
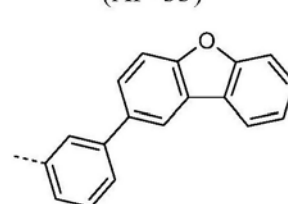
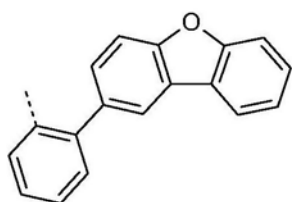
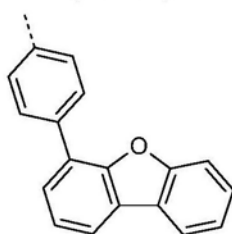
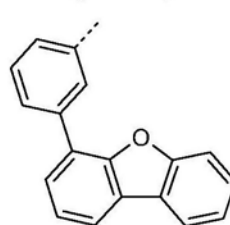
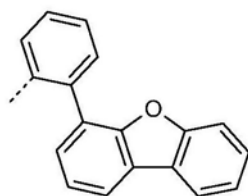
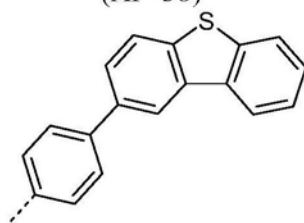
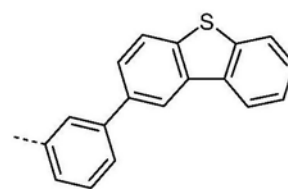
(Ar¹-10)(Ar¹-11)(Ar¹-12)(Ar¹-13)(Ar¹-14)(Ar¹-15)

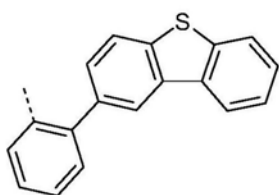
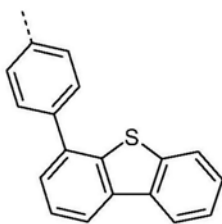
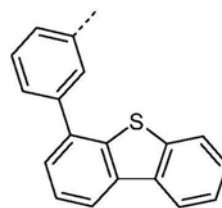
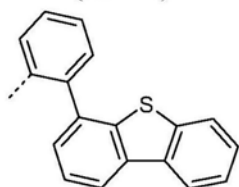
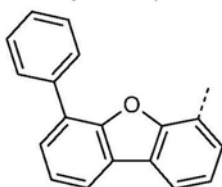
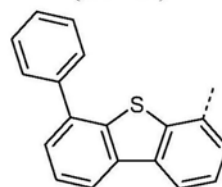
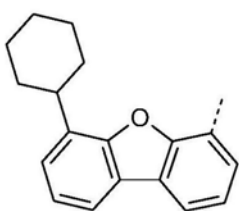
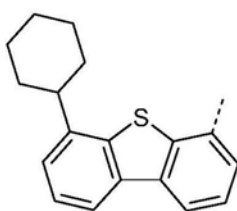
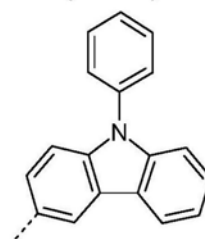
[0041]

(Ar¹-16)(Ar¹-17)(Ar¹-18)(Ar¹-19)(Ar¹-20)(Ar¹-21)(Ar¹-22)(Ar¹-23)(Ar¹-24)

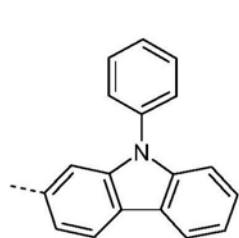
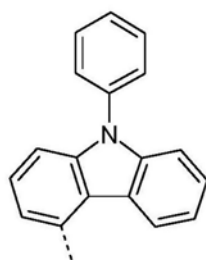
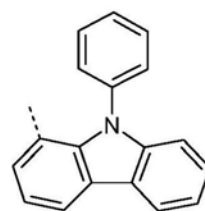
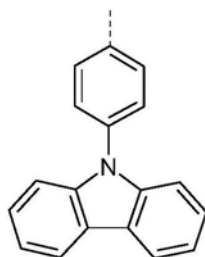
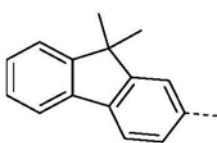
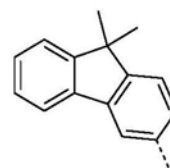
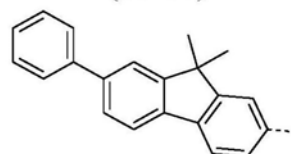
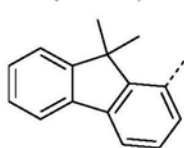
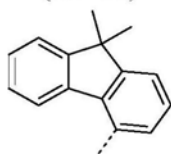
(Ar¹-25)(Ar¹-26)(Ar¹-27)(Ar¹-28)(Ar¹-29)(Ar¹-30)(Ar¹-31)(Ar¹-32)(Ar¹-33)

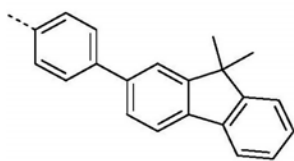
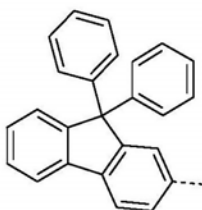
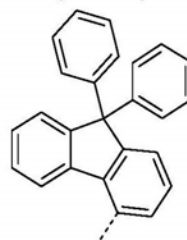
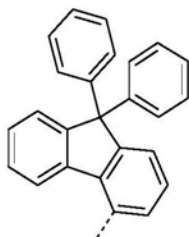
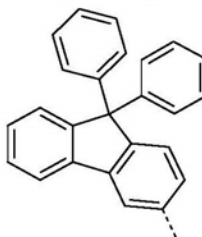
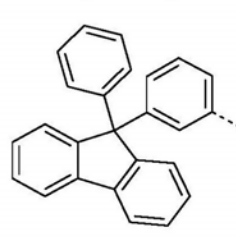
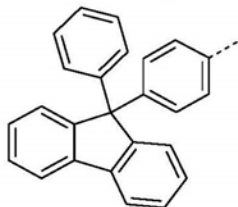
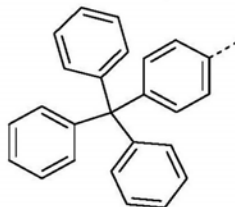
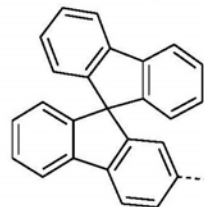
[0042]

(Ar¹-34)(Ar¹-35)(Ar¹-36)(Ar¹-37)(Ar¹-38)(Ar¹-39)(Ar¹-40)(Ar¹-41)(Ar¹-42)

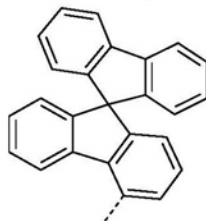
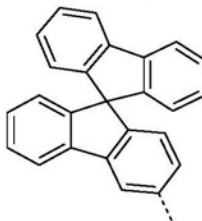
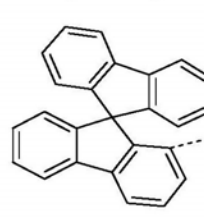
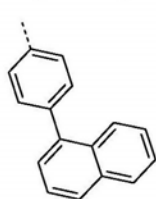
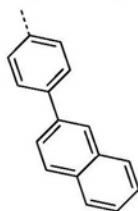
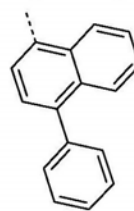
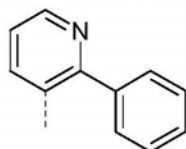
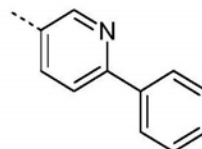
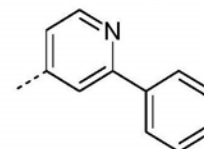
(Ar¹-43)(Ar¹-44)(Ar¹-45)(Ar¹-46)(Ar¹-47)(Ar¹-48)(Ar¹-49)(Ar¹-50)(Ar¹-51)

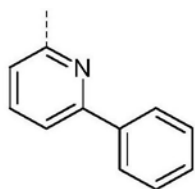
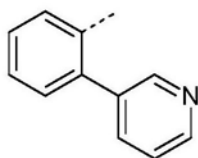
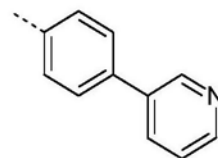
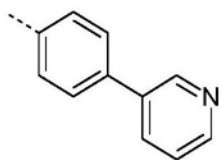
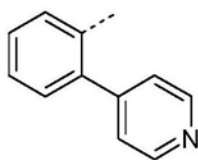
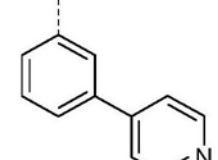
[0043]

(Ar¹-52)(Ar¹-53)(Ar¹-54)(Ar¹-55)(Ar¹-56)(Ar¹-57)

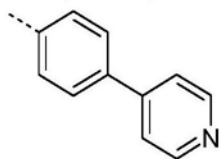
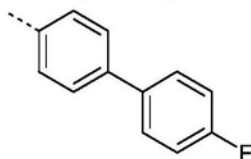
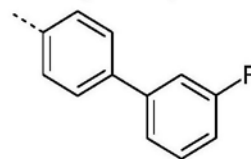
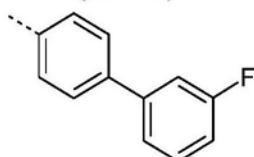
(Ar¹-58)(Ar¹-59)(Ar¹-60)(Ar¹-61)(Ar¹-62)(Ar¹-63)(Ar¹-64)(Ar¹-65)(Ar¹-66)

[0044]

(Ar¹-67)(Ar¹-68)(Ar¹-69)(Ar¹-70)(Ar¹-71)(Ar¹-72)(Ar¹-73)(Ar¹-74)(Ar¹-75)(Ar¹-76)(Ar¹-77)(Ar¹-78)

(Ar¹-79)(Ar¹-80)(Ar¹-81)(Ar¹-82)(Ar¹-83)(Ar¹-84)

[0045]

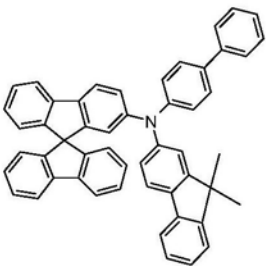
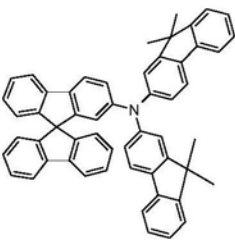
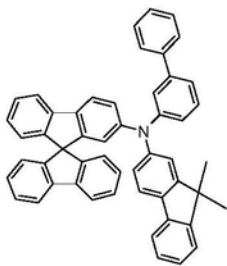
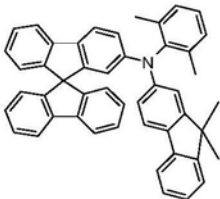
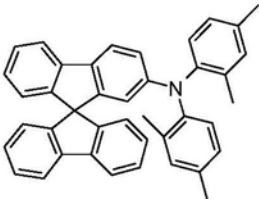
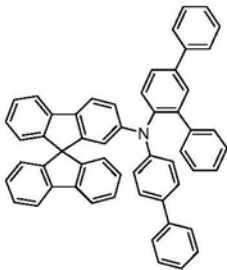
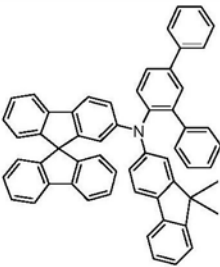
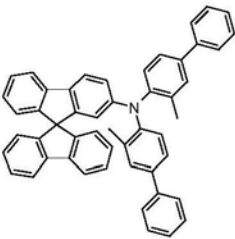
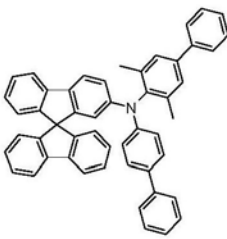
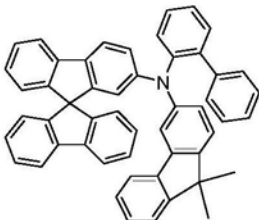
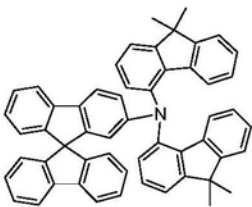
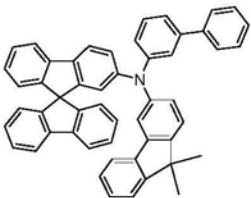
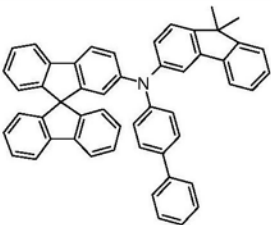
(Ar¹-85)(Ar¹-86)(Ar¹-87)(Ar¹-88)

[0046] 化合物A的优选实施方式是下列化合物：

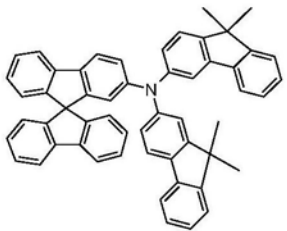
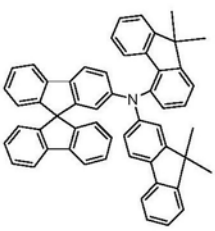
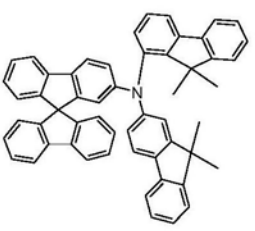
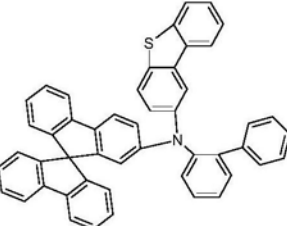
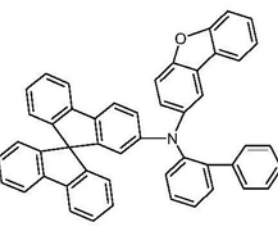
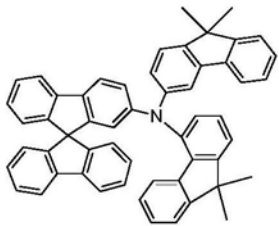
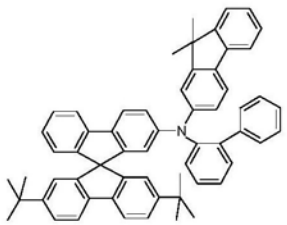
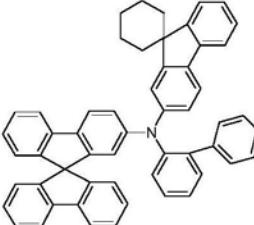
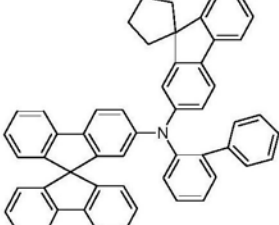
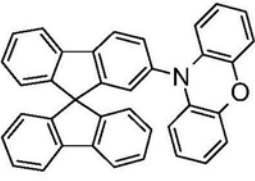
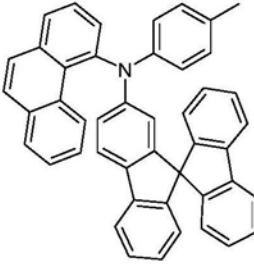
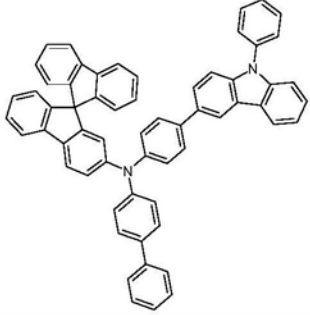
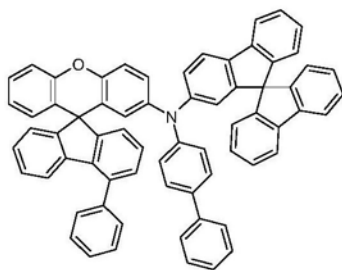
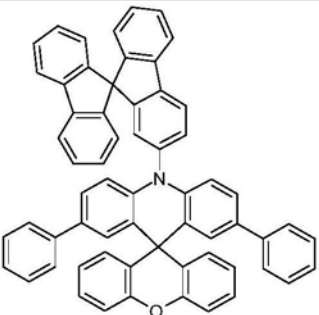
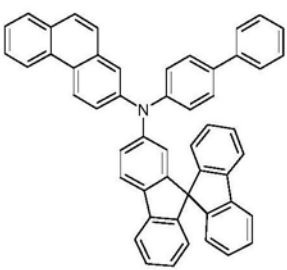
[0047]

1	2	3
4	5	6

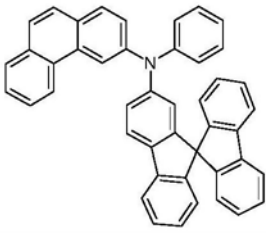
[0048]

		
7	8	9
		
10	11	12
		
13	14	15
		
16	17	18
		
19	20	21

[0049]

		
22	23	24
		
25	26	27
		
28	29	30
		
31	32	33
		
34	35	36

[0050]

		
37		

[0051] 所述式(A)的化合物的制备方法在现有技术中是已知的。特别地,本领域技术人员可参考文献W0 2012/034627的公开内容。

[0052] 所述化合物P是上述定义的意义上的p型掺杂剂。不受这种理论束缚,假设化合物P是如下的路易斯酸,当与化合物A混合存在时,其与化合物A形成络合物。化合物A在这里充当路易斯碱。不受这种理论束缚,络合物是由化合物A中的自由电子对与化合物P的铋金属原子相互作用形成的。

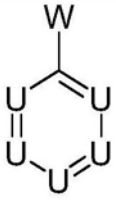
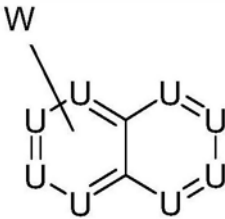
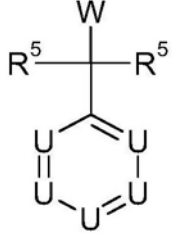
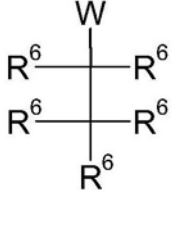
[0053] 所述化合物P可以是铋的单核络合物、铋的双核络合物或铋的多核络合物。如果化合物P以气相存在,则它可以是铋的单核络合物,并且如果它以固相存在,则可以是铋的多核络合物。这意味着化合物P可以根据物质的状态聚合或解聚。

[0054] 所述铋的络合物优选是呈(II)、(III)或(V)氧化态的铋的络合物。它更优选是呈(III)氧化态的铋的络合物。

[0055] 优选地,所述铋的络合物具有至少一个作为有机化合物的配体L。所述配体L优选选自单齿、二齿和三齿配体,更优选选自单齿配体。更优选地,所述配体L带负电荷,优选带三个、两个或单个负电荷,更优选带单个负电荷。

[0056] 配体L的与铋原子键合的基团优选选自羧酸基团、硫代羧酸基团,特别是硫羟酸基团、硫羧酸基团和二硫羟酸基团、酰胺基团(Carbonsäureamidgruppen)和酰亚胺基团(Carbonsäureimidgruppen),更优选选自羧酸基团。

[0057] 优选地,所述配体L对应于下式(L-I)、(L-II)、(L-III)和(L-IV)之一,

	
式(L-I)	式(L-II)
	
式(L-III)	式(L-IV)

[0058]

[0059] 其中:

[0060] W选自羧酸基团;硫代羧酸基团,特别是硫羟酸基团、硫羧酸基团和二硫羟酸基团;酰胺基团和酰亚胺基团,更优选选自羧酸基团;

[0061] U在每种情况下是相同或不同的,如果没有W基团与其键合,则U选自N和CR³,并且当W基团与其键合时,U是C;并且

[0062] R³在每种情况下是相同或不同的,并且选自H,D,F,Cl,Br,I,CN,NO₂,CF₃,具有1至20个碳原子的直链的烷基或烷氧基基团,具有3至20个碳原子的支链或环状的烷基或烷氧基基团,具有2至20个碳原子的烯基或炔基基团,具有6至40个芳族环原子的芳族环系,和具有5至40个芳族环原子的杂芳族环系;其中所述烷基、烷氧基、烯基和炔基基团以及所述芳族环系和杂芳族环系可各自被一个或多个R⁴基团取代;并且其中所述烷基、烷氧基、烯基和炔基基团中的一个或多个CH₂基团可被-R⁴C=CR⁴、-C≡C-、Si(R⁴)₂、C=O、C=NR⁴、-C(=O)O-、-C(=O)NR⁴、P(=O)(R⁴)、-O-、-S-、SO或SO₂代替;并且

[0063] R⁴在每种情况下是相同或不同的,并且选自H,D,F,Cl,CN,NO₂,具有1至20个碳原子的烷基基团,具有6至40个芳族环原子的芳族环系和具有5至40个芳族环原子的杂芳族环系;其中两个或更多个R⁴基团可彼此连接并且可形成环;并且其中所述烷基基团、芳族环系和杂芳族环系可被F、Cl、CN和NO₂取代;并且

[0064] R⁵在每种情况下是相同或不同的,并且选自H,D,F,C(=O)R⁴,CN,Si(R⁴)₃,P(=O)(R⁴)₂,OR⁴,S(=O)R⁴,S(=O)₂R⁴,具有1至20个碳原子的直链的烷基或烷氧基基团,具有3至20个碳原子的支链或环状的烷基或烷氧基基团,具有2至20个碳原子的烯基或炔基基团,具有6至40个芳族环原子的芳族环系,和具有5至40个芳族环原子的杂芳族环系;其中两个或更多个R¹基团可彼此连接并且可形成环;其中所述烷基、烷氧基、烯基和炔基基团以及所述芳族环系和杂芳族环系可各自被一个或多个R⁴基团取代;并且其中所述烷基、烷氧基、烯基和炔基基团中的一个或多个CH₂基团可被-R⁴C=CR⁴、-C≡C-、Si(R⁴)₂、C=O、C=NR⁴、-C(=O)O-、-C(=O)NR⁴、P(=O)(R⁴)、-O-、-S-、SO或SO₂代替;并且

[0065] R⁶在每种情况下是相同或不同的,并且选自H,D,F,Cl,Br,I,CN,NO₂,CF₃,具有1至20个碳原子的直链的烷基或烷氧基基团,具有3至20个碳原子的支链或环状的烷基或烷氧基基团,具有2至20个碳原子的烯基或炔基基团,具有6至40个芳族环原子的芳族环系,和具有5至40个芳族环原子的杂芳族环系;其中所述烷基、烷氧基、烯基和炔基基团以及所述芳族环系和杂芳族环系可各自被一个或多个R⁴基团取代;并且其中所述烷基、烷氧基、烯基和炔基基团中的一个或多个CH₂基团可被-R⁴C=CR⁴、-C≡C-、Si(R⁴)₂、C=O、C=NR⁴、-C(=O)O-、-C(=O)NR⁴、P(=O)(R⁴)、-O-、-S-、SO或SO₂代替。

[0066] 优选地,在式(L-I)至(L-III)中的每一个中,存在至少一个R³基团,其选自F、Cl、Br、I、CN、NO₂和烷基基团,所述烷基基团具有1至20个碳原子和选自F、Cl、CN和NO₂的至少一个取代基。在所述基团中,特别优选的是F、Cl、CN和CF₃。

[0067] 更优选地,存在一个、两个、三个、四个或五个,甚至更优选三个、四个或五个,最优选三个或五个这种R³基团。

[0068] 优选地,在式(L-IV)中,存在至少一个R⁶基团,其选自F、Cl、Br、I、CN、NO₂和烷基基团,所述烷基基团具有1至20个碳原子和选自F、Cl、CN和NO₂的至少一个取代基。在所述基团中,特别优选的是F、Cl、CN和CF₃。更优选地,存在一个、两个或三个,最优选地三个这种R⁶基

团。

[0069] 优选的配体L选自氟化苯甲酸衍生物、氟化或非氟化的苯乙酸衍生物和氟化或非氟化的乙酸衍生物。

[0070] 优选的氟化苯甲酸衍生物的实例是：2-(三氟甲基)苯甲酸；3,5-二氟苯甲酸；3-羟基-2,4,6-三碘苯甲酸；3-氟-4-甲基苯甲酸；3-(三氟甲氧基)苯甲酸；4-(三氟甲氧基)苯甲酸；4-氯-2,5-二氟苯甲酸；2-氯-4,5-二氟苯甲酸；2,4,5-三氟苯甲酸；2-氟苯甲酸；4-氟苯甲酸；2,3,4-三氟苯甲酸；2,3,5-三氟苯甲酸；2,3-二氟苯甲酸；2,4-双(三氟甲基)苯甲酸；2,4-二氟苯甲酸；2,5-二氟苯甲酸；2,6-双(三氟甲基)苯甲酸；2,6-二氟苯甲酸；2-氯-6-氟苯甲酸；2-氟-4-(三氟甲基)苯甲酸；2-氟-5-(三氟甲基)苯甲酸；2-氟-6-(三氟甲基)苯甲酸；3,4,5-三氟苯甲酸；3,4-二氟苯甲酸；3,5-双(三氟甲基)苯甲酸；3-(三氟甲基)苯甲酸；3-氯-4-氟苯甲酸；3-氟-5-(三氟甲基)苯甲酸；3-氟苯甲酸；4-氟-2-(三氟甲基)苯甲酸；4-氟-3-(三氟甲基)苯甲酸；5-氟-2-甲基苯甲酸；2-(三氟甲氧基)苯甲酸；2,3,5-三氯苯甲酸；4-(三氟甲基)苯甲酸；五氟苯甲酸；和2,3,4,5-四氟苯甲酸。

[0071] 氟化或非氟化的苯乙酸衍生物的实例是：2-氟苯乙酸；3-氟苯乙酸；4-氟苯乙酸；2,3-二氟苯乙酸；2,4-二氟苯乙酸；2,6-二氟苯乙酸；3,4-二氟苯乙酸；3,5-二氟苯乙酸；五氟苯乙酸；2-氯-6-氟苯乙酸；2-氯-3,6-二氟苯乙酸；3-氯-2,6-二氟苯乙酸；3-氯-4-氟苯乙酸；5-氯-2-氟苯乙酸；2,3,4-三氟苯乙酸；2,3,5-三氟苯乙酸；2,3,6-三氟苯乙酸；2,4,5-三氟苯乙酸；2,4,6-三氟苯乙酸；3,4,5-三氟苯乙酸；3-氯-2-氟苯乙酸；6-氟苯乙酸；4-氯-2-氟苯乙酸；2-氯-4-氟苯乙酸。

[0072] 氟化或非氟化的乙酸衍生物的实例是：二氟乙酸；三氟乙酸；氯二氟乙酸；(3-氯苯基)二氟乙酸；(3,5-二氟苯基)二氟乙酸；(4-丁基苯基)二氟乙酸；(4-叔丁基苯基)二氟乙酸；(3,4-二甲基苯基)二氟乙酸；(3-氯-4-氟苯基)-二氟乙酸；(4-氯苯基)-二氟乙酸；2-联苯-3',5'-二氟乙酸；3-联苯-3',5'-二氟乙酸；4-联苯-3',5'-二氟乙酸；2-联苯-3',4'-二氟乙酸；3-联苯-3',4'-二氟乙酸；4-联苯-3',4'-二氟乙酸和2,2-二氟丙酸及其高级同系物。

[0073] 上文列表中以脱质子化形式提及的化合物也可根据本发明以质子化形式存在。它们优选呈脱质子化形式。上文列表中以质子化形式提及的化合物也可以脱质子化形式存在，其根据本发明是优选的。

[0074] 本发明的材料可含有其它化合物。它优选地基本上仅包含确切一种化合物A和确切一种化合物P。如果存在其它化合物，则它们优选是根据式(A)的化合物。在本发明的一种可能的实施方式中，在本发明的材料中存在确切两种不同的化合物A和确切一种化合物P。

[0075] 所述化合物P优选作为掺杂剂存在于本发明的材料中。本发明的材料优选含有浓度为0.1%至30%、更优选0.5%至25%、甚至更优选5%至20%的化合物P。

[0076] 在本申请上下文中的百分比在气相沉积的情况下为体积%，在从液相施加的情况下为重量%。

[0077] 本发明的材料优选为薄层形式，更优选为电子器件的功能层。因此，本发明也提供了包含本发明的材料的层，优选为半导体层。

[0078] 包含本发明材料的层优选具有1至500nm、更优选5至300nm最优选8至250nm的厚度。它优选用作电子器件中的空穴传输层，优选地OLED的空穴传输层，如下文进一步详细描

述的。

[0079] 包含本发明的材料的层优选具有 10^{-2}S/m 至 10^{-5}S/m 、更优选 10^{-3}S/m 至 10^{-4}S/m 的比电导率,后者如实施例中所说明来确定。

[0080] 本发明的材料可从气相以层形式施加,例如通过OVPD(有机气相沉积)方法或借助于载气升华来施加。在这种情况下,材料在 10^{-5} 毫巴至1巴的压力下施加。该方法的特殊情况是OVJP(有机蒸气喷印)方法,其中材料通过喷嘴直接施加并且因此是结构化的(例如M.S.Arnold等,Appl.Phys.Lett.(应用物理快报)2008,92,053301)。可选地,所述材料也可以例如通过旋涂法或通过任何印刷方法从液相中制备,所述印刷方法例如是丝网印刷,柔性版印刷,喷嘴印刷或胶版印刷,优选LITI(光引发热成像、热转印)或喷墨印刷。

[0081] 为了从液相处理本发明的材料,例如通过上述方法处理,需要制剂。这些制剂可以例如是溶液、分散体或乳液。出于这个目的,可优选使用两种或更多种溶剂的混合物。合适且优选的溶剂例如是甲苯,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,邻二甲氧基苯,THF,甲基-THF,THP,氯苯,二噁烷,苯氧基甲苯,特别是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, α -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,对甲基异丙基苯,苯乙醚,1,4-二异丙基苯,二苄醚,二乙二醇丁甲醚,三乙二醇丁甲醚,二乙二醇二丁醚,三乙二醇二甲醚,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,戊苯,己苯,庚苯,辛苯,1,1-双(3,4-二甲基苯基)乙烷,或这些溶剂的混合物。

[0082] 因此,本发明还提供包含本发明材料和至少一种溶剂、优选有机溶剂的制剂,特别是溶液、分散体或乳液。可以制备这种制剂、特别是这类溶液的方式是本领域技术人员已知的,并且描述于例如W02002/072714、W0 2003/019694及其中引用的文献中。

[0083] 在气相沉积的情况下,化合物P和化合物A二者优选从不同的气相沉积源共蒸发,并且沉积为层。在从液相施加的情况下,将化合物P和化合物A溶解在溶剂中,然后通过上述印刷技术施加。最终通过蒸发溶剂获得包含本发明材料的层。

[0084] 因此,本申请还提供一种制备包含本发明材料的层的方法,其特征在于化合物A和化合物P从气相一起施加,或者特征在于从液相施加包含本发明材料的制剂。

[0085] 本发明的材料适用于电子器件中,所述电子器件优选选自有机电致发光器件(OLED)、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)和有机激光二极管(O-laser)。

[0086] 这种材料可用于不同的功能。优选的是将所述材料用于空穴传输层中,特别是空穴注入层、空穴传输层或激子阻挡层中。所述材料的上述用途同样构成本发明主题的一部分。

[0087] 根据本申请的空穴传输层在更广泛的意义上是在阳极与发光层之间具有空穴传输功能的层。具体地,根据本申请的空穴传输层是具有空穴传输功能的层,其存在于阳极与发光层之间,既不是空穴注入层,也不是电子阻挡层,也不是激子阻挡层。

[0088] 本发明还提供一种包含优选呈层形式的本发明材料的电子器件。这种电子器件优

选自上述器件。更优选地,所述电子器件是包含阳极、阴极和至少一个发光层的OLED,其特征在于,至少一个层、优选空穴传输层,包含本发明的材料。

[0089] 除了阴极、阳极和发光层之外,所述OLED优选包含其它的功能层。这些层例如在每种情况下选自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、电子阻挡层、激子阻挡层、中间层、电荷产生层(IDMC 2003,台湾;Session 210LED(5), T.Matsumoto,T.Nakada,J.Endo,K.Mori,N.Kawamura,A.Yokoi,J.Kido,Multiphoton Organic EL Device Having Charge Generation Layer(具有电荷产生层的多光子有机EL器件))和/或有机或无机p/n结。

[0090] 包含本发明材料的OLED的层顺序优选如下:

[0091] -阳极

[0092] -空穴注入层

[0093] -空穴传输层

[0094] -任选地另外的空穴传输层

[0095] -任选地电子阻挡层

[0096] -发光层

[0097] -任选地空穴阻挡层

[0098] -电子传输层

[0099] -电子注入层

[0100] -阴极。

[0101] 然而,并非所提及的所有层都必须存在,并且可另外存在其它的层。在上述层顺序中,本发明的材料优选存在于选自空穴注入层和空穴传输层的一个或多个层中,更优选存在于空穴注入层中。

[0102] 特别优选的是以下层顺序:

[0103] -阳极

[0104] -空穴注入层

[0105] -空穴传输层

[0106] -任选地电子阻挡层

[0107] -发光层

[0108] -电子传输层

[0109] -电子注入层

[0110] -阴极。

[0111] 然而,并非所提及的所有层都必须存在,并且可另外存在其它的层。在上述层顺序中,本发明的材料优选存在于选自空穴注入层和空穴传输层的一个或多个层中,更优选存在于空穴注入层中。

[0112] 本发明的OLED可包含多个发光层。更优选地,这些发光层在这种情况下总共具有多个在380nm与750nm之间的发光峰值,使得总体结果是发白光;换句话说,将可以发荧光或发磷光并且发蓝色、黄色、绿色、橙色或红色光的多种发光化合物用于所述发光层中。特别优选的是三层体系,即具有三个发光层的体系,其中所述三个层显示蓝色、绿色和橙色或红色发光(对于基本结构,例如参见W02005/011013)。

[0113] 优选地,所述OLED在设置于阳极与发光层之间的空穴传输层中包含本发明的材料,其中在包含本发明材料的层与发光层之间优选存在一个或多个另外的层。优选地,这些另外的层是空穴传输层,更优选是电子阻挡层。所提及的另外的层可以是p型掺杂的或非p型掺杂的;优选地它们是非p掺杂的。

[0114] 在本发明的一个优选实施方式中,空穴传输层(HTL)和空穴传输层与发光层之间的层(EBL)的HOMO能级满足以下条件:

[0115] $\text{HOMO (HTL)} \leq \text{HOMO (EBL)}$ 。

[0116] 以这种方式,可以避免空穴势垒并因此避免空穴传输层与发光层之间的电压降。这例如通过在空穴传输层以及空穴传输层与发光层之间的另外的层中使用相同的材料而有利地实现。

[0117] 然而,本发明的材料也可以优选设置在与发光层直接相邻的空穴传输层中。

[0118] 设置在包含本发明材料的层与发光层之间的空穴传输层优选包含一种或多种相同或不同的式(A)化合物,优选相同的式(A)的化合物。然而,它们也可以包含其它化合物。在这种情况下,所述化合物优选选自如上文所定义的单芳基胺。

[0119] 此外优选的是,所述OLED在与阳极直接相邻的层中包含本发明的材料。

[0120] 更优选地,本发明的OLED包括以下层结构之一:

[0121] a) 阳极--包含本发明材料的层--电子阻挡层--发光层;

[0122] b) 阳极--包含本发明材料的层--空穴传输层--电子阻挡层--发光层;

[0123] c) 阳极--包含本发明材料的第一层--空穴传输层--包含本发明材料的第二层--电子阻挡层--发光层。

[0124] 优选在阴极侧与发光层相邻的那些层对应于这些位置中的上述优选层,即一个或多个空穴阻挡层、电子传输层和电子注入层。

[0125] 在结构a)中,包含本发明材料的层和电子阻挡层可以包含相同的式(A)化合物。在结构c)中,包含本发明材料的层和空穴传输层都可以包含相同的式(A)化合物,和/或包含本发明材料的第二层和电子阻挡层都可以包含相同的式(A)化合物。

[0126] 优选的是本发明的材料用于包含一种或多种磷光发光化合物的OLED。术语“磷光发光化合物”通常涵盖其中通过自旋禁阻跃迁(例如从激发三重态或具有较高自旋量子数的状态例如五重态的跃迁)实现发光的化合物。

[0127] 合适的磷光发光化合物(=三重态发光体)特别是如下的化合物,其在适当激发时发光,优选在可见区发光,并且另外含有至少一种原子序数大于20、优选大于38且小于84、更优选大于56且小于80的原子。优选的磷光发光化合物是含有铜、钼、钨、铼、钕、钐、铈、铟、铊、银、金或铋的化合物,特别是含有铱、铂或铜的化合物。在本发明的上下文中,所有发光的铱、铂或铜络合物被认为是磷光发光化合物。

[0128] 上述发光化合物的实例可见于申请WO 00/70655、WO 01/41512、WO 02/02714、WO 02/15645、EP 1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 05/033244、WO 05/019373和US 2005/0258742中。一般地,根据现有技术用于磷光OLED且为有机电致发光器件领域的普通技术人员所知的所有磷光络合物,都是合适的。本领域普通技术人员也可以在不实施创造性技能的情况下将其它磷光络合物与本发明的材料组合用于OLED中。

[0129] 在一个可选实施方式中,优选将所述材料用于包含荧光发光化合物的OLED中的发

光层中。优选地,发光层在这种情况下包含作为荧光发光化合物的芳基氨基化合物,更优选所述芳基氨基化合物以与主体材料组合的方式使用。这种情况下的主体材料优选选自包含一个或多个蒽基团的化合物。

[0130] 下文列出电子器件中的不同功能材料的优选实施方式。

[0131] 优选的磷光发光化合物是上述化合物。

[0132] 优选的荧光发光化合物选自芳基胺类别。在本发明上下文中的芳基胺或芳族胺被理解是指含有三个直接键合至氮的被取代或未被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,更优选具有至少14个芳族环原子。其优选的实例是芳族蒽胺、芳族蒽二胺、芳族芘胺、芳族芘二胺、芳族蒽胺或芳族蒽二胺。其它优选的发光化合物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,和WO 2010/012328中公开的具有稠合芳基基团的茚并芴衍生物。同样优选的是WO 2012/048780和WO 2013/185871中公开的芘芳基胺。同样优选的是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中公开的扩展的苯并茚并芴。

[0133] 优选用于荧光发光化合物的有用的基质材料包括各种物质类别的材料。优选的基质材料选自如下的类别:低聚亚芳基(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亚芳基,低聚亚芳基亚乙烯基(例如根据EP 676461的DPVBi或螺-DPVBi),多足金属络合物(例如根据WO 2004/081017的),空穴传导化合物(例如根据WO 2004/058911的),电子传导化合物,特别是酮、氧化膦、亚砷等(例如根据WO 2005/084081和WO 2005/084082的),阻转异构体(例如根据WO 2006/048268的),硼酸衍生物(例如根据WO 2006/117052的),或苯并蒽(例如根据WO 2008/145239的)。特别优选的基质材料选自如下的类别:包含萘、蒽、苯并蒽和/或芘或这些化合物的阻转异构体的低聚亚芳基,低聚亚芳基亚乙烯基,酮,氧化膦和亚砷。非常特别优选的基质材料选自如下的类别:包含蒽、苯并蒽、苯并菲和/或芘或这些化合物的阻转异构体的低聚亚芳基。在本发明上下文中的低聚亚芳基应被理解是指其中至少三个芳基或亚芳基基团彼此键合的化合物。

[0134] 用于磷光发光化合物的优选的基质材料是芳族酮,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,咔唑衍生物,例如CBP(N,N-双咔唑基联苯)或公开在WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527或WO 2008/086851中的咔唑衍生物,吡啶并咔唑衍生物,例如根据WO 2007/063754或WO 2008/056746的,茚并咔唑衍生物,例如根据WO 2010/136109、WO 2011/000455或WO 2013/041176的,氮杂咔唑衍生物,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,氮杂硼杂环戊二烯或硼酸酯,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,二氮杂硅杂环戊二烯或四氮杂硅杂环戊二烯衍生物,例如根据WO 2010/054729的,二氮杂磷杂环戊二烯衍生物,例如根据WO 2010/054730的,桥连咔唑衍生物,例如根据US 2009/0136779、WO 2010/050778、WO 2011/042107、WO 2011/088877或WO 2012/143080的,三亚苯衍生物,例如根据WO 2012/048781

的,或内酰胺,例如根据WO 2011/116865或WO 2011/137951的。

[0135] 除了所述式(A)的化合物之外,如可用于本发明的电子器件的空穴注入或空穴传输层或电子阻挡层中或电子传输层中的合适的电荷传输材料是例如Y.Shirota等, Chem.Rev. (化学评论) 2007, 107 (4), 953-1010中所公开的化合物,或根据现有技术用于这些层中的其它材料。

[0136] 除了所述式(A)的化合物之外,可用于本发明的电致发光器件中的空穴传输、空穴注入或电子阻挡层的优选材料的实例是茚并芴胺衍生物(例如根据WO 06/122630或WO 06/100896的)、EP 1661888中公开的胺衍生物、六氮杂三亚苯衍生物(例如根据WO 01/049806的)、具有稠合芳族环系的胺衍生物(例如根据US 5,061,569的)、WO 95/09147中公开的胺衍生物、单苯并茚并芴胺(例如根据WO 08/006449的)、二苯并茚并芴胺(例如根据WO 07/140847的)、螺二芴胺(例如根据WO 2012/034627和WO 2013/120577的)、芴胺(例如根据WO 2014/015937、WO 2014/015938和WO 2014/015935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)。

[0137] 用于电子传输层的材料可以是如根据现有技术用作电子传输层中的电子传输材料的任何材料。特别合适的是铝络合物例如Alq₃、锆络合物例如ZrQ₄、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、喹喔啉衍生物、喹啉衍生物、咪唑衍生物、芳族酮、内酰胺、硼烷、二氮磷杂环戊二烯衍生物和氧化膦衍生物。

[0138] 所述电子器件的优选阴极是具有低逸出功的金属、金属合金或多层结构,其由不同金属例如碱土金属、碱金属、主族金属或镧系元素(例如Ca、Ba、Mg、Al、In、Mg、Yb、Sm等)构成。另外合适的是由碱金属或碱土金属和银构成的合金,例如由镁和银构成的合金。在多层结构情况下,除所述金属之外,也可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Ba/Ag。也可以优选在金属阴极和有机半导体之间引入具有高介电常数的材料的薄中间层。可用于这个目的的材料实例是碱金属或碱土金属氟化物,以及相应的氧化物或碳酸盐(例如LiF、Li₂O、BaF₂、MgO、NaF、CsF、Cs₂CO₃等)。此外,喹啉锂(LiQ)也可用于这个目的。这个层的层厚度优选为0.5至5nm。

[0139] 优选的阳极是具有高逸出功的材料。优选地,所述阳极具有相对于真空大于4.5eV的逸出功。首先,具有高氧化还原电势的金属适合于这个目的,例如Ag、Pt或Au。另一方面,也可以优选金属/金属氧化物电极(例如Al/Ni/NiO_x、Al/PtO_x)。对于一些应用,至少一个电极必须是透明的或部分透明的,以实现有机材料辐射(有机太阳能电池)或发光(OLED、O-LASER)。此处优选的阳极材料是导电性混合金属氧化物。特别优选的是氧化铟锡(ITO)或氧化铟锌(IZO)。此外优选的是导电的掺杂有机材料,特别是导电的掺杂聚合物。此外,所述阳极也可由两个或更多个层组成,例如由ITO的内层和金属氧化物、优选地氧化钨、氧化钼或氧化钒的外层组成。

[0140] 所述器件被适当地(根据应用)结构化,接触连接并最后被密封,以排除水和空气的损害作用。

[0141] 在一个优选的实施方式中,所述电子器件的特征在于,通过升华方法涂布一个或多个层。在这种情况下,在真空升华系统中,在小于10⁻⁵毫巴、优选小于10⁻⁶毫巴的初始压力下通过气相沉积施加所述材料。然而,在这种情况下,所述初始压力也可甚至更低,例如小于10⁻⁷毫巴。从气相中施加层的优选方法被进一步描述,并且通常适用于本发明的OLED中的

层的产生。

[0142] 在一个可选实施方式中,所述电子器件的特征在于,从溶液中施加一个或多个层。从溶液中施加层的优选方法被进一步描述,并且通常适用于本发明的OLED中的层的产生。

[0143] 本发明的OLED可用于显示器中,用作照明应用中的光源以及用作医疗和/或美容应用(例如光疗法)中的光源。

附图说明

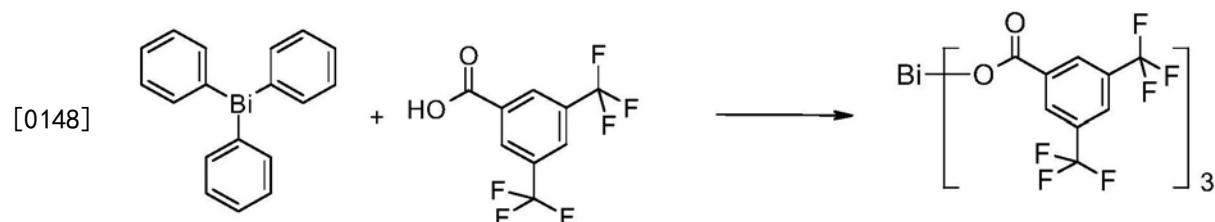
[0144] 图1示出在对于以下主体/掺杂剂组合的每种情况下,相对于掺杂剂的体积比例,对于比电导率获得的值:i) BipFBz (=BiCl)₃:DA1; ii) BipFBz (=BiCl)₃:MA1; iii) BiC:DA1; 和iv) BiC:MA1。

具体实施方式

[0145] 实施例

[0146] A) 合成

[0147] 1) BiC的合成



[0149] 首先将50g (113.56mmol) 的三苯基铋烷 (CAS号:603-33-8) 和89.40g的3,5-双(三氟甲基)苯甲酸 (340.36mmol) 装入在氩气下惰性的烧瓶中,并加入1升干燥甲苯。将混合物逐渐加热至80℃,然后在该温度下再搅拌12小时。然后将混合物冷却至室温并通过保护气体玻璃料过滤,用甲苯洗涤三次,在真空泵下干燥,然后在高真空下升华。

[0150] 2) 三(五氟苯甲酸)铋Bi[OOC-C₆F₅]₃的合成 (BipFBz=BiCl)₃

[0151] 与上述合成类似地进行合成,其中相应使用五氟苯甲酸作为配体代替3,5-双(三氟甲基)苯甲酸。

[0152] B) 电导率测量

[0153] 将化合物DA1和MA1各自与掺杂剂BiC和BipFBz之一(关于结构,参见下表2)以1体积%至15体积%的体积比例共蒸发。这产生不同的层厚度。

[0154] 然后测量所述层的比电导率。为此,使用以下方法:

[0155] 通过所谓的手指结构来确定掺杂层的电导率。这涉及到形状像手指的两个相互啮合的结构化ITO电极。手指电极之间是具有厚度d的(掺杂)有机层。电极之间的间隙宽度具有值S。电源与ITO电极之间的安全裕度确保了所测量的电流来自ITO指状物之间的电流。对于S(通常为几μm)和d(通常为120nm)的各种值,测量I(U)(电流-电压特性)。由此,可以通过下式明确地确定掺杂层的电导率:

[0156]

$$\sigma = \frac{I}{L \cdot d} \cdot \frac{S}{U}$$

[0157] 这种方法在金属掺杂层/ITO结构上的优点在于,欧姆特性在宽电压范围上延伸并

且两个触点由相同的材料组成,使得触点与有机物之间的电荷载流子注入的势垒高度在正反方向上相同。在对于以下主体/掺杂剂组合的每种情况下,对于比电导率获得的值相对于掺杂剂的体积比例绘制在图1中:i) BipFBz (=BiCl):DA1;ii) BipFBz (=BiCl):MA1;iii) BiC:DA1;和iv) BiC:MA1。本发明的组合是ii)和iv)。

[0158] 已发现,在本发明的情况下, 10^{-4}S/m 至 10^{-3}S/m 之间的所需比电导率可以在5体积%至14体积%的宽范围内实现。在5体积%至14体积%范围内的掺杂剂浓度是实用的并且可以容易地建立。

[0159] 因此本发明的Bi掺杂剂BiC和BipFBz的一个特别优点在于,不仅可以掺杂具有高HOMO的空穴传输材料如DA1 (HOMO约-4.83eV),而且可以掺杂具有低HOMO的空穴传输材料如MA1 (HOMO约-5.18eV),以达到所期望的比电导率(关于空穴传输材料MA1,参见上文组合ii)和iv))。使用具有低HOMO的空穴传输材料是非常需要的,因为这不需要在空穴传输层与发光层之间插入具有低HOMO的另一个层。这使得能够更简单地构造OLED并因此实现更有效的生产过程。

[0160] C) 本发明的掺杂剂的吸收性质的测量

[0161] 对于B)中说明的主体/掺杂剂组合ii)和iv)以及根据现有技术的NDP-2:NHT-5组合(2体积%的NDP-2)分析其在VIS范围中的吸收。发现包含Bi掺杂剂的本发明组合在VIS范围内仅具有低吸收。相比之下,对于根据现有技术的材料NHT-5和NDP-2的组合,在可见光区中观察到吸收带,吸收最大值在约500nm处。在可见光区中没有显著的吸收带,这是本发明的空穴传输材料与Bi掺杂剂的组合的重要的使用优点。VIS范围中的吸收影响OLED的发光特性,并使其效率劣化。

[0162] D) 器件实施例

[0163] 在下面的实施例I1至I4和C1至C4中,呈现了各种OLED的数据。实施例C1至C4是根据现有技术的比较例;实施例I1至I4显示本发明的OLED的数据。

[0164] 通过根据WO 2004/058911的一般方法制造本发明的OLED和根据现有技术的OLED,此处将该方法调整以适应所述情形(层厚度、材料的改变)。已经涂覆有厚度为50nm的结构化ITO(氧化铟锡)的玻璃板是用于OLED的基底。对基底进行湿式清洁(清洗机,洗涤剂:MerckExtran),然后在250°C下烘烤15分钟,然后在涂覆之前用氧等离子体处理。

[0165] 将各种层施加至预处理的基底:第一空穴传输层(HTL1)/第二空穴传输层(HTL2)/任选的第三空穴传输层(HTL3)/发光层(EML)/电子传输层(ETL)/电子注入层(EIL)和最后的100nm厚铝阴极。所述OLED的确切结构可见于表1。用于制造所述OLED的材料示于表2中。

[0166] 在真空室中通过热气相沉积施加所有材料。在这种情况下,发光层总是由至少一种基质材料和发光化合物组成,通过共蒸发将所述发光化合物以特定的体积比例加入所述基质材料中。此处以例如M1:D1(95%:5%)的形式给出的细节是指,材料M1以95%的体积比例存在于该层中,而D1以5%的体积比例存在于该层中。类似地,所述电子传输层也可以由两种材料的混合物组成。

[0167] 以标准方式表征所述OLED。为此目的,确定电致发光光谱和外量子效率(EQE,以百分比测量),其作为发光亮度的函数,根据呈现朗伯发射特征的电流-电压-亮度特征(IUL特征)来计算,以及确定寿命。在 1000cd/m^2 的亮度下测定电致发光光谱,并且自其计算CIE 1931x和y颜色坐标。寿命LT80定义为在恒定电流密度下在操作过程中亮度从起始亮度降至

起始值的80%后的时间。

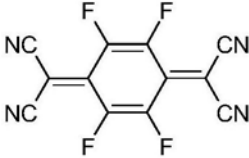
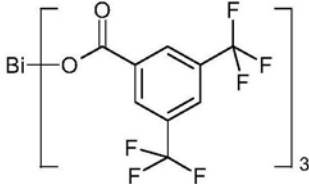
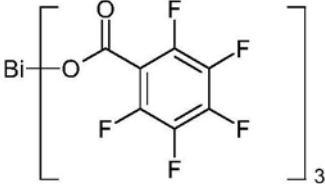
[0168] 表1:OLED的结构

[0169]

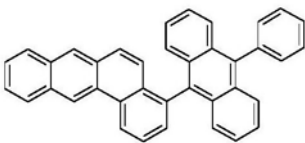
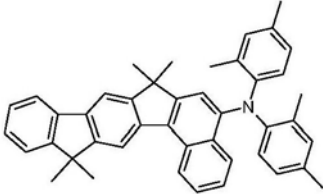
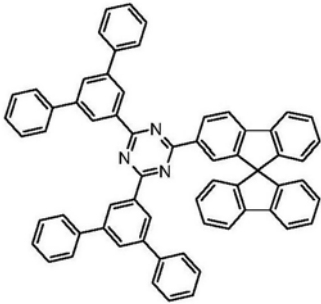
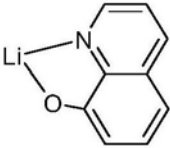
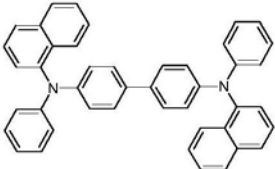
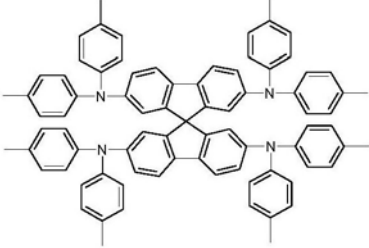
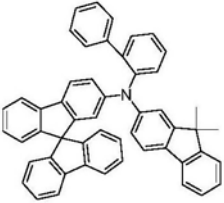
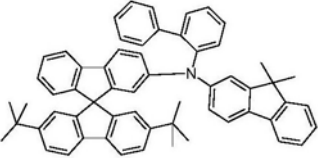
实施例	HTL1 厚度	HTL2 厚度	HTL3 厚度	EML 厚度	ETL 厚度	EIL 厚度
C1	MA1:F4TCNQ (95%:5%) 20nm	MA1:F4TCNQ (95%:5%) 155nm	MA1 20nm	M1:D1 (95%:5%) 20nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
C2	MA1:F4TCNQ (95%:5%) 20nm	MA1 155nm	MA1 20nm	M1:D1 (95%:5%) 20nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
C3	NPB:BiC (95%:5%) 20nm	NPB 180NM		M1:D1 (95%:5%) 20nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
C4	DA1:BiC (95%:5%) 20nm	DA2 180nm		M1:D1 (95%:5%) 20nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I1	MA1:BiC (95%:5%) 20nm	MA1:BiC (95%:5%) 155nm	MA1 20nm	M1:D1 (95%:5%) 20nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I2	MA1:BiC (95%:5%) 20nm	MA1 155nm	MA1 20nm	M1:D1 (95%:5%) 20nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I3	MA1:BiC (95%:5%) 20nm	MA1 180nm		M1:D1 (95%:5%) 20nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I4	MA3:BiC (95%:5%) 20nm	MA3 180nm		M1:D1 (95%:5%) 20nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm

[0170] 表2:用于OLED的材料的结构式

[0171]

	
F4TCNQ	BiC
	

[0172]

BipFBz (=BiC1)	
	
M1	D1
	
ST1	LiQ
	
NPB	DA1
	
MA1	MA3
可商购(Novaled 公司)	可商购(Novaled 公司)
NDP-2	NHT-5

[0173] 为了示例本发明的OLED的优点,下文详细说明实施例。

[0174] 实施例1:

[0175] 将本发明样品I1与比较样品C1进行比较。前者与C1的不同之处在于,其在HTL1和HTL2中含有p型掺杂剂BiC而不是p型掺杂剂F4TCNQ。I1和C1的比较显示,在1V的施加电压下,在当前样品几何形状和 $2 \times 2\text{mm}^2$ 的像素尺寸下,漏电流低得多,为 $7.9\text{E}-6\text{mA}/\text{cm}^2$ 相比于 $1.6\text{E}-4\text{mA}/\text{cm}^2$ 。漏电流被理解是指不流过OLED的有机层的、阳极与阴极之间的电流。其原因之一可能是OLED的p型掺杂层中的高横向电导率。漏电流是显示器中关于降低像素尺寸的重大问题,因为它们可能导致像素之间的串扰。

[0176] 实施例2:

[0177] 将本发明样品I2与比较样品C2进行比较。前者与C2的不同之处在于,它在HTL1中含有p型掺杂剂BiC而不是p型掺杂剂F4TCNQ。I2和C2的比较显示了两种样品在 $10\text{mA}/\text{cm}^2$ 下的电压类似,为3.8V。然而,与比较样品C2(在 $10\text{mA}/\text{cm}^2$ 下EQE为8.5%)相比,在I2的情况下效率高得多(在 $10\text{mA}/\text{cm}^2$ 下EQE为8.9%)。在 $60\text{mA}/\text{cm}^2$ 下,两种样品的寿命LT80约为300小时。

[0178] 实施例3:

[0179] 将本发明样品I4与比较样品C3和C4进行比较。前者与C3和C4的不同之处在于,它含有特定的式(A)的化合物作为用于HTL的材料,而不是从现有技术已知的空穴传输化合物。p型掺杂剂BiC始终用于所存在的两个空穴传输层中的第一个中。本发明样品I4相比于比较样品C3和C4具有更好的寿命和效率(表3),具有相似的电压值。

[0180] 表3:OLED的结果

[0181]	实施 例	在 $10\text{ mA}/\text{cm}^2$ 下的 U	在 $10\text{ mA}/\text{cm}^2$ 下 的 EQE	在 $60\text{ mA}/\text{cm}^2$ 下的 LT80
	C3	4.3	5.7	195
	C4	3.8	4.1	50
	I4	4.1	8.1	355

[0183] 所示的实施例示例了本发明的铋络合物与式(A)化合物的组合作为OLED中空穴传输材料的优点。它们不应以限制性的方式进行解释。本发明组合的优点适用于在权利要求书中限定的材料组合的整个范围内。

[0184] E) 用于确定轨道能量的量子化学方法

[0185] 经由量子化学计算确定所述材料的HOMO和LUMO能量。在本发明情况下,使用软件包“Gaussian09,修订版D.01”(高斯公司)。为了计算没有金属的有机物质(称为“org.”方法),首先通过具有电荷0和多重性1的半经验方法AM1(高斯输入行“#AM1opt”)进行几何结构优化。然后,基于优化的几何结构,实现对于电子基态和三重态能级的单点能量计算。这是使用具有6-31G(d)基组的TDDFT(含时密度泛函理论)方法B3PW91(高斯输入行“#B3PW91/6-31G(d) td=(50-50,nstates=4)”) (电荷0,多重性1)进行的。对于有机金属化合物(称为“M-org.”方法),通过Hartree-Fock方法和LanL2MB基组(高斯输入行“#HF/LanL2MB opt”) (电荷0,多重性1)优化几何结构。如上所述与有机物质类似地实现能量计算,不同之处在于对于金属原子使用“LanL2DZ”基组,而对于配体使用“6-31G(d)”基组(高斯输入行“#B3PW91/gen pseudo=lanl2td=(50-50,nstates=4)”)。根据能量计算,获得HOMO作为被两个电子占用的最后一个轨道(α_{occ} .特征值)并且获得LUMO作为第一个未占用轨道(α_{virt} .特征值)(以哈特里为单位),其中HEh和LEh分别表示以哈特里单位计的HOMO能量和以

哈特里单位计的LUMO能量。这用于计算HOMO和LUMO值,以电子伏特计,通过循环伏安法测量校准,如下所示:

[0186]
$$\text{HOMO (eV)} = (\text{HEh} * 27.212) - 0.9899 / 1.1206$$

[0187]
$$\text{LUMO (eV)} = (\text{LEh} * 27.212) - 2.0041 / 1.385$$

[0188] 在本申请的上下文中,这些值被视为所述材料的HOMO和LUMO。

[0189] 本文描述的方法与使用的软件包无关,并且总是给出相同的结果。为此目的经常利用的程序的实例是“Gaussian09”(高斯公司)和Q-Chem4.1(Q-Chem公司)。在本情况下,使用软件包“Gaussian09,修订版D.01”来计算能量。

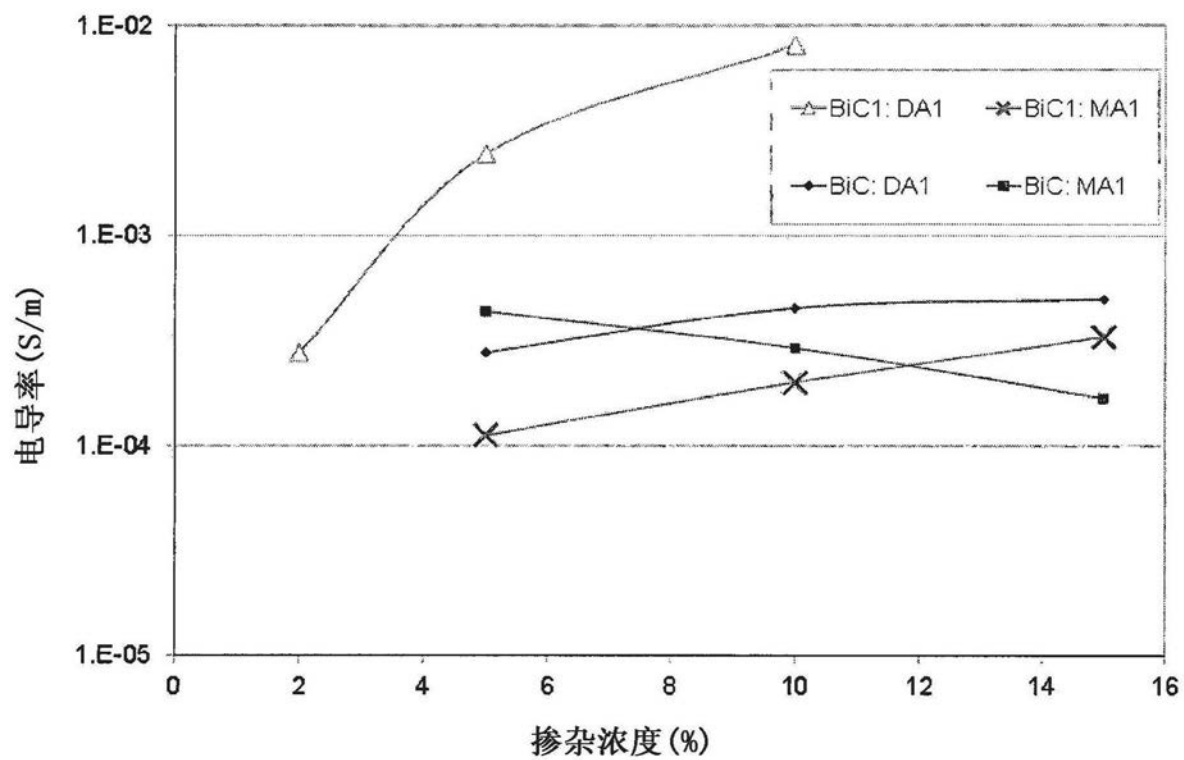


图1

专利名称(译)	用于电子器件的材料		
公开(公告)号	CN107112437B	公开(公告)日	2018-11-20
申请号	CN201580057767.0	申请日	2015-10-02
申请(专利权)人(译)	默克专利有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	默克专利有限公司		
[标]发明人	约阿希姆凯泽 克里斯托夫普夫卢姆 阿恩特耶格尔 托马斯多布伯蒂尼 冈特施密特		
发明人	约阿希姆·凯泽 克里斯托夫·普夫卢姆 阿恩特·耶格尔 托马斯·多布伯蒂尼 冈特·施密特		
IPC分类号	H01L51/54 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0058 H01L51/006 H01L51/0077 H01L51/5012 Y02E10/549		
代理人(译)	王潜 郭国清		
审查员(译)	程健		
优先权	2014003629 2014-10-24 EP 2015180257 2015-08-07 EP		
其他公开文献	CN107112437A		
外部链接	Espacenet SIPO		

摘要(译)

本发明涉及包含式(A)的单芳基胺和所限定式的p型掺杂剂的材料。本发明还涉及所述材料在电子器件的有机层中的用途，所述器件优选是有机发光二极管(OLED)。

