OEE | 光电工程 Opto-Electronic Engineering

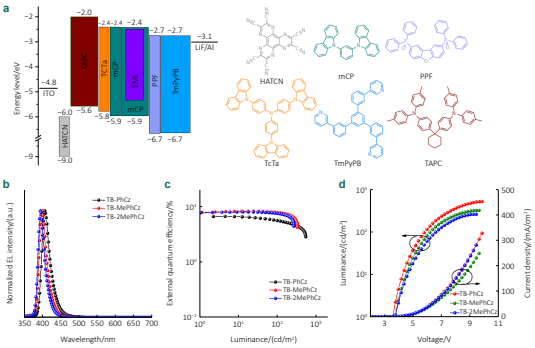
Article

2026 年 5 月, 第 53 卷, 第 5 期

叔丁基硼氧衍生物作为发光材料实现近紫外 OLED

娄敬丽[1], 陈　涛[1], 唐本忠[2,3], 王志明[1*]

[1]华南理工大学发光材料与器件全国重点实验室, 广东 广州 510640;
[2]香港中文大学理工学院, 广东 深圳 518172;
[3]香港科技大学化学系, 香港 999077



摘要： 有机发光二极管 (Organic light-emitting diode, OLED) 凭借质量轻、响应快、功耗低以及可柔性显示等优势，成为新一代显示技术。目前，基于显示三基色的红光、绿光和蓝光 OLED 已经实现了商业化。然而，紫外光 OLED 相比于其他可见光区的 OLED 发展较为缓慢。本文基于氧/硼/氧多重共振分子骨架设计合成了三种近紫外有机发光材料，TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz。理论计算表明，三个分子均表现出多重共振分布的特点。三个分子具有良好的热稳定性，溶液状态下呈现出强烈的近紫外光发光，其发光峰位分别为 402 nm、399 nm 和 395 nm。基于三个分子制备的 OLED 都表现出非常优异的电致发光性能，其中，基于 TB-MePhCz 的 OLED 器件最大外量子效率达到了 8.05%；三个分子均实现了较好的色纯度，其中，TB-2MePhCz 则表现出最紫的发光，光谱发光峰位为 396 nm (半峰宽为 20 nm)，CIE 坐标为 (0.169, 0.012)，为开发更多性能优异的紫外光 OLED 提供了参考。

关键词： 有机发光二极管；紫外光；窄发射；多重共振效应

The English title and abstract appear at the end of the paper.

DOI: 10.12086/oee.2026.250331 | CSTR: 32245.14.oee.2026.250331 | 中图分类号：TN383 | 文献标识码：A

娄敬丽，陈涛，唐本忠，等. 叔丁基硼氧衍生物作为发光材料实现近紫外 OLED[J]. 光电工程，2026，**53**(5): 250331

Lou J L, Chen T, Tang B Z, et al. Realization of near ultraviolet OLED with *tert*-butyl boron oxide derivatives as emitting materials[J]. *Opto-Electron Eng*, 2026, **53**(5): 250331

1　引　言

有机发光二极管 (Organic light-emitting diode, OLED) 是一种电致发光器件，在外加电场的作用下，电子和空穴分别从器件的金属阴极和氧化铟锡 (indium tin oxide, ITO) 阳极注入，然后穿过能垒向发光层移动，二者在发光层复合形成激子，激子从高能的激发态辐射跃迁到低能的基态产生光子[1]。早在 1987 年，邓青云教授等制备出了第一个高性能 OLED 器件并引起了科研界广泛关注[2]，越来越多的科学家参与其中，经历了近四十年的发展，OLED 基本上实现了从基础科学研究到商业化应用的全过程。其中，基于三元色的可见光红光、绿光、蓝光材料已经层出不穷，种类繁多，已达到商业化的要求[3-6]。紫外 OLED 是 OLED 在短波长 (400 nm 以下) 范围的进一步延伸，因其在生物/化学传感，激发光源和高密度信息存储方面的应用而受到科研人员的广泛关

收稿日期：2025-11-03；修回日期：2026-01-31；录用日期：2026-02-02；网络出版日期：2026-05-25

基金项目：国家自然科学基金项目 (52473173)；广东省自然科学基金 (2022B1515020084)；广东省基础与应用基础研究基金 (2023B1515040003)；云南省科技厅重点项目 (202303AC100021)；发光材料与器件国家重点实验室自主研究项目 (Skllmd-2024-10，Skllmd-20125-05)；广州市科技计划 (2023A04J0988)；广东省重点领域研究发展计划 (2024B0101040001)

*通信作者：王志明，wangzhiming@scut.edu.cn

版权所有©2026 中国科学院光电技术研究所

注[7-9]。但高性能的紫外 OLED 并不常见，这一方面可能是由于紫外光材料本身分子设计较为困难，大的共轭结构往往会使光色红移而偏离紫光区，因此，需要严格限制分子的有效共轭程度[10-11]；另一方面，紫外有机发光材料本身固有的宽带隙会大大增加器件制备的难度，过深的最高占据分子轨道 (highest occupied molecular orbital, HOMO) 能级或者过浅的最低未占据分子轨道 (lowest unoccupied molecular orbital, LUMO) 能级会使得载流子的注入变得困难，导致器件的启亮电压较高，器件的稳定性较差[12-15]。目前，已报道的紫外 OLED 的最大外量子效率 (maximum external quantum efficiency, EQE_{max}) 很少超过 5%，并且色纯度较低[16-19]。因此，开发出具有高发光效率和窄发射特性的新型紫外有机发光材料迫在眉睫。

2016 年，Hatakeyama 课题组报道了一类 B 和 O 掺杂的多元芳香稠环超纯蓝光热活化延迟荧光 (thermally activated delayed fluorescence, TADF) 分子 DABNA-1[20]，理论计算结果表明，其 HOMO 轨道主要分布在 N 原子及其邻位和对位的 C 原子上，LUMO 轨道主要分布在 B 原子及其邻位和对位的 C 原子上，这种特殊的前线轨道分布是由于 B 原子和 N 原子具有相反的电负性，诱导了前线分子轨道 HOMO 和 LUMO 在分子骨架上原子层级的交替分布，与传统给-受体型 TADF 材料有很大的不同。他们基于此现象提出了多重共振 (multiple resonance, MR) 效应。由于具备刚性的分子结构和特殊的前线轨道分布，DABNA-1 表现出非常窄的光谱半峰宽 (33 nm)，并且具有非常高的绝对量子效率，在溶液态和掺杂薄膜态的光致发光量子效率都接近 90%。此开创性工作为有机发光材料提供了有效的窄化光谱的办法，并引起了广泛关注。越来越多的科研工作者参与其中，但是高性能的含 B 的紫外光多重共振材料仍然较少[21-23]。

在 2015 年，Hatakeyama 等人[24] 通过一步硼化法合成了含 B 和 O 的多元芳香稠环结构 O/BO，理论计算结果表明其前线轨道分布也满足多重共振效应。其中，化合物 5,9-二氧-1,3b-"并 [3,2,1-de] 蒽 (该文献中命名为 **2a**，下文称 **2a**) 在二氯甲烷中表现出 398 nm 的紫外光发光，由于其具有较高的三线态能级，被作为绿光磷光材料 ($Ir(ppy)_3$) 的主体材料，应用在 OLED 中并取得了不错的效果，但并未直接被当做发光层材料来探究其电致发光性能。虽然 O/B/O 结构具有很小的单三线态能极差 (ΔE_{ST})，但是其最低单线态 (S_1) 和最低三线态 (T_1) 之间的旋轨耦合效应较小，TADF 性质很弱，化合物 **2a** 仅有 4% 的延迟比例。因此，目前多数的研究工作都是将其作为具有刚性结构的受体基元来构筑给-受体型 TADF 材料[25-31]，用于高效率 OLED 的发光层。但是，强分子内电荷转移 (charge transfer, CT) 效应使得此类材料光色最蓝只能做到深蓝光，并且具有较宽的半峰宽。

近年来，Lee 教授等人报道了紫外窄发光基元吲哚咔唑，其大平面的芳香结构、刚性的平面结构和弱的给电子能力，使其成为了构筑紫外、近紫外发光材料的热门基元[32]。由于引入的 CT 组分会诱导光谱展宽，目前报道的吲哚咔唑衍生物多为蓝光发光材料[33-35]。赵祖金教授等人报道了紫外窄谱带发光材料 BO-MX-ICz 和 tBO-MX-ICz，通过构筑空间电荷转移结构，增强三线态激子利用的同时限制共轭程度，实现了最大 EQE 为 5.03% 的紫外光发光，其对应的 CIE_y 值为 0.016[36]。闫寿科教授等人通过在不同取代位置将 O/B/O MR 分子骨架与二苯并噻吩进行耦合。其中，基于 BO-2DBT 分子制备的 OLED 实现了 7.90% 的最大外量子效率，对应的 CIE_y 值为 0.014[37]。综上所述，目前 CIE_y 值≤0.02 的高效率紫外光 OLED 十分稀少。

基于上述考虑，本文选择在 O/B/O MR 分子骨架中 B 原子所连中心苯环的对位接入弱给体-苯咔唑，来抑制前线轨道的分离程度，并通过在苯桥的侧边引入甲基来增大 O/B/O 与苯桥之间的二面角，进一步将电子限域在 O/B/O 结构上。采用此分子设计策略，成功设计合成了两个近紫外发光材料 TB-PhCz，TB-MePhCz 和一个紫外发光材料 TB-2MePhCz。三个分子的掺杂器件都表现出非常优异的电致发光性能，其中基于 TB-MePhCz 的掺杂 OLED 器件 EQE_{max} 达到了 8.05%，CIE 坐标为 (0.169, 0.013)。TB-2MePhCz 则表现出最紫的发光，CIE 坐标为 (0.169, 0.012)，CIE_y 值逼近了 0.01，这也是目前文献报道的 CIE_y 值最小，光色最深的紫光 OLED 器件，且器件的 EQE_{max} 达到了 7.81%，说明此分子设计策略能有效限制分子共轭，实现发光分子的蓝移，为开发更多性能优异的紫外光材料提供指导。

2 实验材料与方法

2.1 实验材料

2,5-二溴-1,3-二氟苯购于上海毕得医药有限公司，4-叔丁基苯酚和 *N*-甲基吡咯烷酮购于上海萨恩化学技术有限公司；正丁基锂购于百灵威科技有限公司；三溴化硼

二氯甲烷溶液 (2 mol/L) 购于上海迈瑞尔化学技术有限公司；*N*,*N*-二异丙基乙胺购于上海泰坦科技股份有限公司；2-溴-5 碘甲苯、2-溴-5 碘-1,3-二甲苯、咔唑、叔丁醇钠、碘化亚铜、1,2-环己二胺和超干间二甲苯均购于安耐吉化学；双联频哪醇硼酸酯购于上海麦克林生化科技股份有限公司；1,1'-二 (二苯膦基) 二茂铁二氯化钯 (II) 和四 (三苯基) 磷钯由柏卡化学专供；4- (9H-咔唑-9-基) 苯硼酸购于苏州苏凯路化学；K_2CO_3，无水 Na_2SO_4 和 KOAc 购于上海润捷化学试剂有限公司；有机合成实验中所用到的溶剂：二氯甲烷、石油醚、四氢呋喃、正己烷、甲苯和 1,4-二氧六环均购于广州化学试剂厂；光物理测试实验中所用的光谱纯溶剂：正己烷、甲苯、二氯甲烷、乙酸乙酯、四氢呋喃、*N*,*N*-二甲基甲酰胺和氯仿购于阿法埃莎或者阿拉丁；核磁共振氢谱和碳谱测试所用的氘代试剂购于美国 CIL 公司。

2.2 表征设备与仪器

核磁共振氢谱、碳谱测试在 Bruker 500 MHz 核磁共振波谱仪进行，以四甲基硅烷 (TMS) 为化学位移的内标，测试使用的氘代试剂为氘代二氯甲烷 (CD_2Cl_2)。质谱测试仪器为 Bruker Agilent1290/maXis impact 超高压液相色谱-高分辨质谱联用仪，测试用溶剂为 1 mL 四氢呋喃+0.5 mL 乙腈，模式为 HRMS 正模式。紫外-可见吸收光谱测试仪器为 Shimadzu UV-2600 分光光度计，荧光光谱测试仪器为 Horiba Fluoromax-4 分光光度计。溶液和薄膜的光致发光量子产率测试仪器为 Hamamatsu C11347 绝对荧光量子效率仪。瞬态荧光光谱测试仪器为爱丁堡 FLS1000 荧光寿命测试系统。材料的电化学测试在上海辰华 CHI 610E 电化学工作站进行，测试采用三电极体系，其中玻碳电极为工作电极，铂丝电极为对电极，Ag/$AgNO_3$ 电极为参比电极。氧化电势和还原电势分别在 0.1 mol/L 四丁基六氟磷酸铵的超干二氯甲烷和超干 *N*, *N* 二甲基甲酰胺溶液中测试，扫描速率都是 100 mV/s，标定物都使用二茂铁进行标定，计算能级使用的近似公式是 E (eV) = – (4.8 + $E_{ox\ (red)}$ – E_{Fc/Fc^+})。热重分析和差示扫描量热分析仪器分别为 TA TGA 550 和 TA DSC 2500，测试在氮气氛围下进行，升温速率为 10 ℃/min。升华提纯仪器为 SAVC-sub100 有机小分子升华提纯仪。

2.3 合成路线

图 1 为三个分子的合成路线。首先通过硼化反应得到 TB-Br 分子，带有不同甲基的碘衍生物通过 Ullmann 偶联反应、硼酯化反应得到硼酸频哪醇酯，最终与 TB-Br 通过 Suzuki 偶联反应得到终产物 TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz。

2.4 理论计算方法

基于密度泛函理论和含时密度泛函理论分别优化叔丁基硼氧衍生物的基态 (S_0 态) 和 S_1 态分子构型，所有的计算任务都在 Gaussian 16 安装包中进行。计算得到的结果在 Multiwfn 3.6 上进行分析，所呈现的前线分子轨道图是在 VMD 中进行绘制。所选的泛函是 M062x，基组是 6-31G (d,p)。

2.5 电致发光器件的制备

使用 ITO 作为器件的阳极材料，在使用涂有 ITO 的透明玻璃前先用丙酮、异丙醇、表面活性剂、去离子水清洗三次，然后放入烘箱。待烘干后，用氧等离子体处理 5 min，目的是提高 ITO 阳极的空穴注入能力。器件的阴极材料采用的是 Al，电子注入材料为 LiF。器件中各层材料均采用真空蒸镀沉积法，通过调控功率的大小和时间来控制膜厚。所制备的器件均未进行封装处理，测试环境为室温、空气环境。

3 结果与分析

3.1 热稳定性和电化学性质

良好的热稳定性和相稳定性是制备蒸镀型 OLED 以及提高 OLED 器件稳定性的前提，所以，在制备 OLED 器件之前对叔丁基硼氧衍生物进行了热失重分析和差式扫描量热测试。如图 2 所示，TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 的热分解温度分别为 400 ℃、379 ℃ 和 381 ℃，均具有很优异的热稳定性。此外，这三个分子还具有很高的玻璃化转变温度，分别为 139 ℃、137 ℃ 和 161 ℃，说明三个分子具有很好的相稳定性。值得注意的是，TB-PhCz 分子在 228 ℃ 时还具有很强的结晶放热峰，而 TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 在 250 ℃ 以内并未观测到结晶放热现象，这可能是因为 TB-PhCz 分子结构具有较好的平面性，TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 由于在苯桥侧边接入了甲基，增大了给体/受体之间的扭转角，分子结构较为扭曲，所以导致结晶性下降。以上结果说明，TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 具有制备蒸镀型 OLED 的条件。

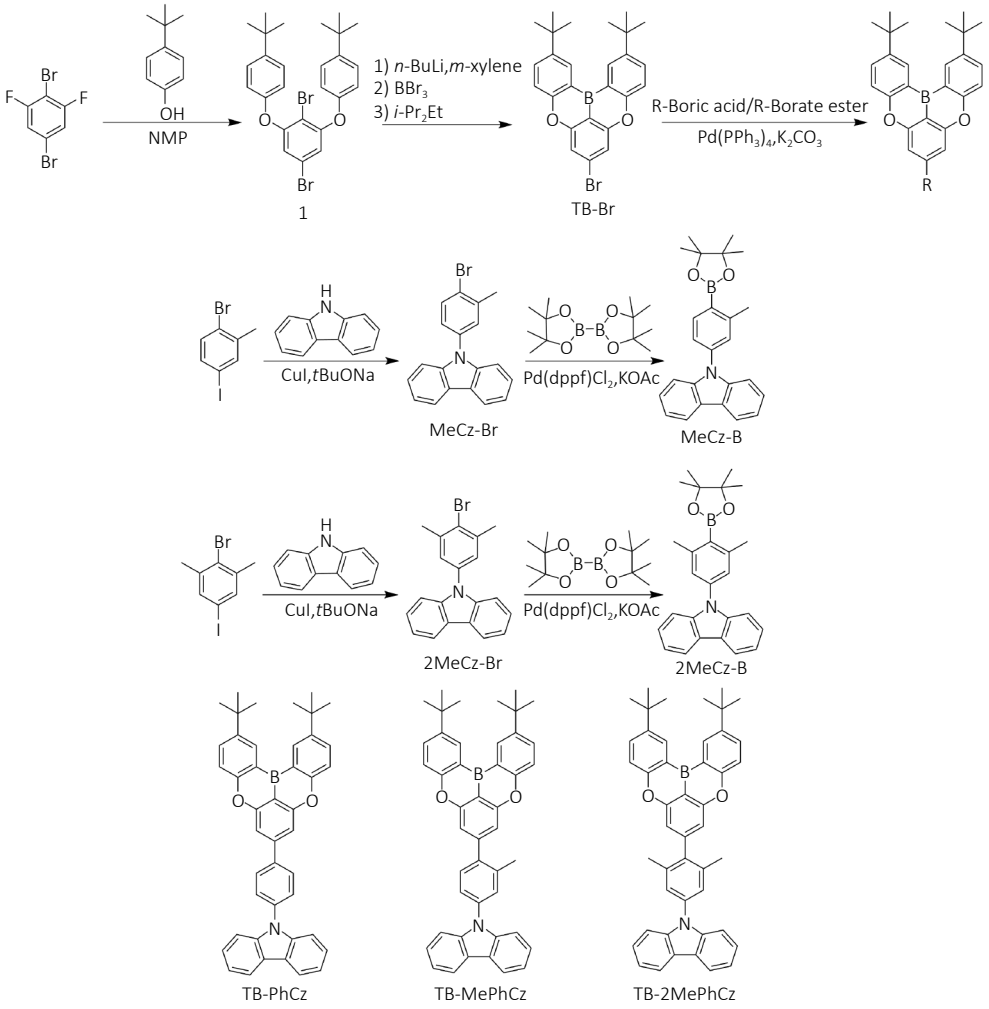


图 1 叔丁基硼氧衍生物的合成 (R 为 MeCz-B、MeCz-B 和 MeCz-B)

Fig. 1 The synthesis of *tert*-butyl boron oxide derivatives (R represent MeCz-B, MeCz-B, and MeCz-B, respectively)

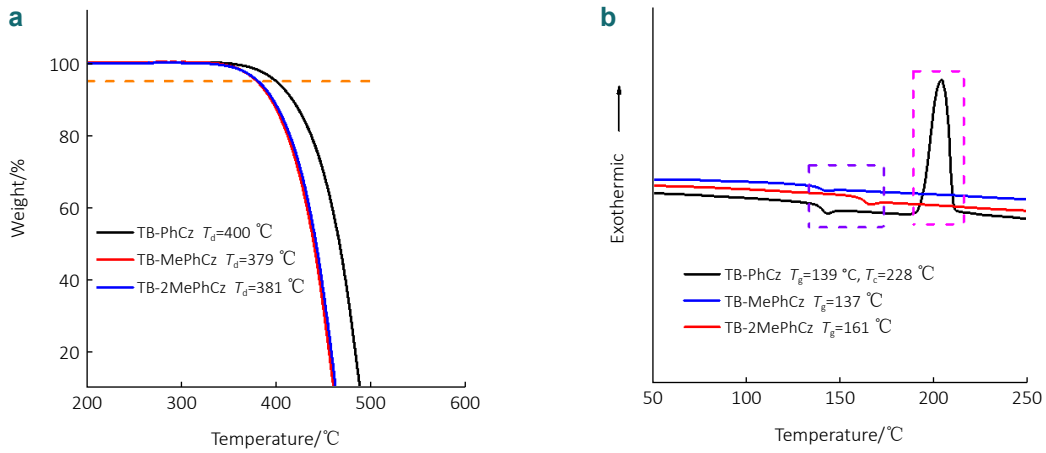


图 2 叔丁基硼氧衍生物的热稳定性能。(a) 热失重曲线 (橙色虚线：重量损失 5% 时); (b) 差式扫描量热曲线 (紫色虚线：玻璃化转变过程；粉色虚线：结晶过程)

Fig. 2 Thermal stability of *tert*-butyl boron oxide derivatives. (a) thermogravimetric analysis curves (orange dashed line: 5% weight loss); (b) Differential scanning calorimetry curves (purple dashed line: the glass transition process; pink dashed line: the crystallization process)

其次，为了方便后续 OLED 器件的结构优化，筛选合适的功能层和主体材料需要与发光层材料的 HOMO、LUMO 能级匹配，这将有利于载流子的注入、传输以及复合。通过循环伏安法测定了化合物 TBNO-tCz 和 TBNO-tDPA 的起始氧化电位和还原电位，如图 3 所示，再通过经验公式 E (eV) = – (4.8 + $E_{ox\ (red)}$ – E_{Fc/Fc^+}) 近似计算得到三个分子的 HOMO 能级分别为–5.22 eV，–5.18 eV 和–5.16 eV，LUMO 能级分别为–2.71 eV，–2.64 eV 和–2.64 eV。

3.2 理论计算

为了深入理解引入甲基对叔丁基硼氧衍生物的分子结构和前线轨道分布的影响，首先对 TB-PhCz，TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 进行了理论计算。为了方便叙述，本文将咔唑用 Cz 表示，中间苯桥用 Ph 表示，硼氧多重共振骨架用 BO 表示。从图 4 可以看到，随着引入甲基个数的增加，Ph 与 BO 之间的二面角逐渐从 29.58° 增加到 66.91°，而 Cz 与 Ph 之间的二面角变化不大。从这三个分子 S_1 态的空穴和电子分布来看，三个分子的空穴都是分布在 BO 上的，但三个分子的电子分布却有细微的差别，TB-PhCz 的电子主要在 BO 和 Ph 上，Cz 上也有少量分布，与此相比，TB-MePhCz 的电子仅分布在 BO 和 Ph 上，而 TB-2MePhCz 的电子却只分布在 BO 上。所以，随着引入甲基个数的增加，TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 的电子离域程度逐渐减小，同时对应的长程 CT 也受到限制，这有利于光谱的蓝移和窄化。

3.3 光物理性质

测试了三个分子的光物理性质，如图 5 和表 1 所示，

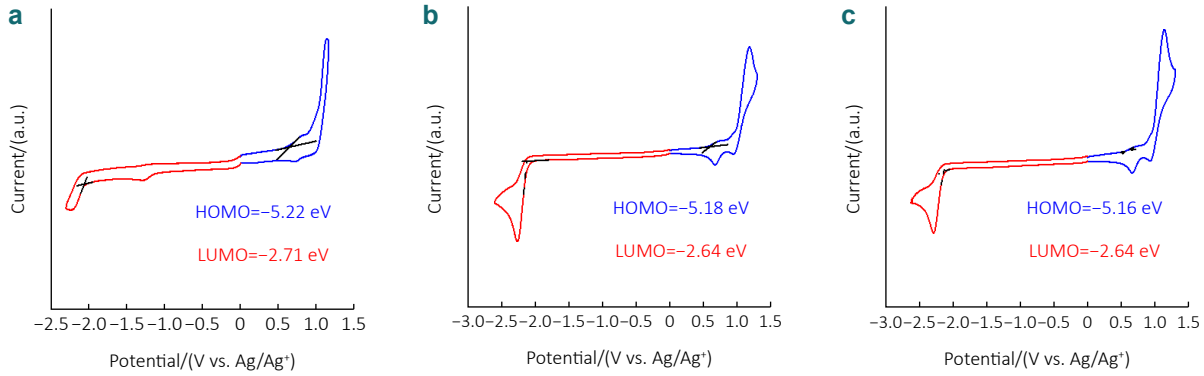


图 3 (a) TB-PhCz、(b) TB-MePhCz 和 (c) TB-2MePhCz 的电化学性能 (黑色实线交点对应的电势为氧化或还原电势)

Fig. 3 Electrochemical performances of (a) TB-PhCz, (b) TB-MePhCz, and (c) TB-2MePhCz (the potential corresponding to the intersection of the black solid line is the oxidation or reduction potential)

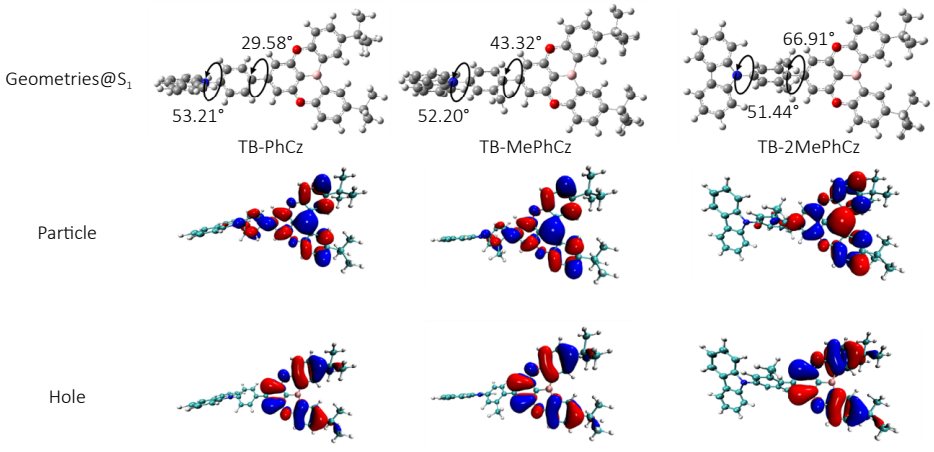


图 4 叔丁基硼氧衍生物的优化的 S_1 构型及空穴和电子分布

Fig. 4 Optimized configuration of S_1 state and hole and electron distribution of *tert*-butyl boron oxide derivatives

TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 在四氢呋喃中的最大吸收峰分别为 387 nm、383 nm 和 382 nm，表现为逐渐蓝移的趋势，说明三者的光学带隙逐渐增大，这与前面理论计算得到三个分子共轭程度逐渐减小的结论是对应的。三个分子在四氢呋喃中的最大发光波长分别为 402 nm、399 nm 和 395 nm，从近紫外光蓝移至紫外光，表现出明显的发光蓝移的趋势，且半峰宽分别仅有 26 nm、27 nm 和 27 nm，具有非常明显的多重共振效应诱导的窄发光特性，这也与理论计算的空穴和电子分布是对应的。此外，三个分子的四氢呋喃溶液表现出较高的光致发光量子效率，在氮气氛围下分别为 47.3%、45.9% 和 59.6%。进一步探究了 TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 在掺杂薄膜下的光物理性质，将这三个分子以 3 wt% 的浓度掺杂到 mCP 主体材料中，三个分子的掺杂薄膜最大发光峰分别位于 413 nm、405 nm 和 400 nm，表现出与四氢呋喃溶液同样的逐渐蓝移的趋势，但是与四氢呋喃溶液相比都发生了一定程度的红移，分别红移了 11 nm、6 nm 和 5 nm，红移程度逐渐减小。此外，化合物 TB-PhCz、TB-MePhCz 半峰宽相对于四氢呋喃溶液也发生了轻微的展宽，分别展宽到了 31 nm 和 29 nm。惊喜的是，TB-2MePhCz 的掺杂薄膜相对于溶液并未发生展宽，半峰宽仍为 27 nm。同时，三者的量子效率也轻微地降低，分别为 38.2%、34.4% 和 49.1%。以上数据的分析表明三个分子在掺杂薄膜中仍然存在一定程度的分子间相互作用，但是由于甲基的引入，分子的扭曲程度逐渐增加，聚集态时相互作用逐渐减小，引起的光谱变化也就逐渐减小。

由于 TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 在溶

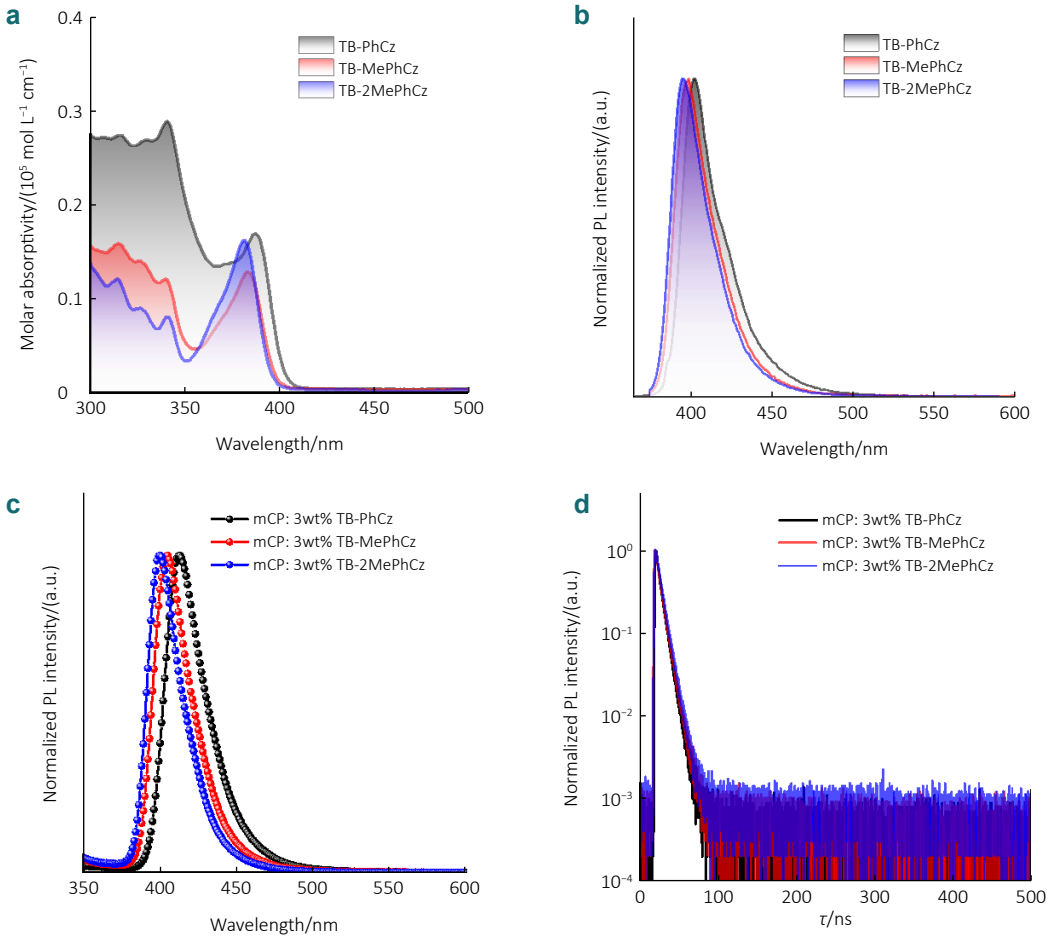


图 5 化合物 TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 的光致发光性能。(a) 四氢呋喃溶液 (10^{-5} mol/L) 下的紫外-可见吸收光谱和 (b) 荧光发光光谱；mCP 为主体 (掺杂浓度为 3 wt%) 的掺杂薄膜的 (c) 荧光发光光谱和 (d) 瞬态荧光光谱

Fig. 5 The photoluminescence properties of TB-PhCz, TB-MePhCz, and TB-2MePhCz. (a) UV-visible absorption spectra and (b) fluorescence emission spectra in tetrahydrofuran solution (10^{-5} mol/L); (c) Fluorescence emission spectra and (d) transient fluorescence spectra of doped films (3 wt% doping in mCP)

表 1 化合物 TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 的光物理数据

Table 1 The photoluminescence data of TB-PhCz, TB-MePhCz, and TB-2MePhCz

Emitter	THF solution					Doped film			
	λ_{abs} i)/nm	λ_{em} ii)/nm	FWHM iii)/nm	Φ iv)/%	ΔE_{ST} v)/eV	λ_{em} ii)/nm	FWHM iii)/nm	Φ iv)/%	τ vi)/ns
TB-PhCz	387	402	26	47.3	0.47	413	31	38.2	6.83
TB-MePhCz	383	399	27	45.9	0.23	405	29	34.4	7.45
TB-2MePhCz	382	395	27	59.6	0.22	400	27	49.1	8.24

i)最大吸收波长；ii)最大发光波长；iii)半峰宽；iv)光致发光绝对量子效率 (N_2氛围)；v)由低温 (77 K)荧光和磷光发光峰的最大发光波长计算得到；vi)荧光寿命 (N_2氛围)。

液态和掺杂薄膜态都表现出窄发光特性，根据理论计算认为是多重共振效应引起的，而多重共振效应所产生的激发态特性是短程 CT，所以，为了验证理论计算的结果，对这三个分子进行了溶剂化效应测试。如图 6 所示，从低极性正己烷到高极性氯仿，TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 分别只红移了 7 nm、10 nm 和 11 nm，这是典型的短程 CT 特性所表现的溶剂化效应，进一步证明了 TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 都是短程 CT 主导的发光。

为了确定 TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 的 S_1 能级和 T_1 能级的位置，为了避免溶剂极性对能级的影响，选择测试三个分子在低极性甲苯中的低温荧光和磷光光谱。如图 7 所示，测得三个分子的低温荧光/磷光发光峰分别在 399/470 nm、396/428 nm 和 394/423 nm，然后根据发光峰位计算得到的 S_1/T_1 能级分别是 3.11/2.64 eV、3.13/2.90 eV 和 3.15/2.90 eV，对应的 S_1 与 T_1 的能级差 ΔE_{ST} 分别为 0.47 eV、0.23 eV 和 0.22 eV。三个分子的 ΔE_{ST} 有依次减小的趋势，说明甲基的引入除了能抑制分子间相互作用，还可以减小 S_1 与 T_1 的能级差，小的能级差有利于反向系间窜越 (reverse intersystem crossing, RISC) 过程，因此，TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 可能存在 TADF 特性。为了验证 TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 分子是否具有 TADF 性质，进一步测试了这三个分子掺杂薄膜在氮气氛围下的瞬态荧光光谱，遗憾的是，并未观测到任何长寿命的延迟组分，仅观测到数个纳米级的瞬时短寿命衰减，TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 的荧光寿命分别为 6.83 ns、7.45 ns 和 8.24 ns，这说明即使 TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 具有较小的 ΔE_{ST}，三个分子也并不一定存在 RISC 过程，或者说 RISC 过程非常慢，延迟占比非常小，以至于观测不到长寿命的存在。根据费米黄金法则[38]，RISC 过程的速率除了与 ΔE_{ST} 有关，还与 T_1 与 S_1 之间的自旋轨道耦合效应有关，所以，这可能是 TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 具有较小的自旋轨道耦合效应导致的。

3.4 OLED 器件性能

对 TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 三个化合物的电致发光性能展开研究。根据这三个分子的 HOMO 和 LUMO 能级的位置，经过一系列器件各功

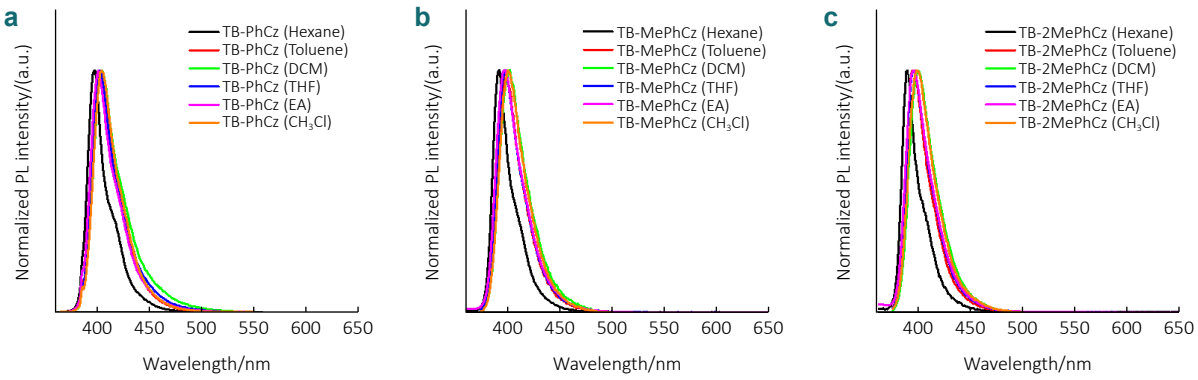


图 6 (a) TB-PhCz、(b) TB-MePhCz 和 (c) TB-2MePhCz 在不同极性溶剂下的光谱

Fig. 6 PL spectra of (a) TB-PhCz, (b) TB-MePhCz, and (c) TB-2MePhCz in different solvents with various polarities

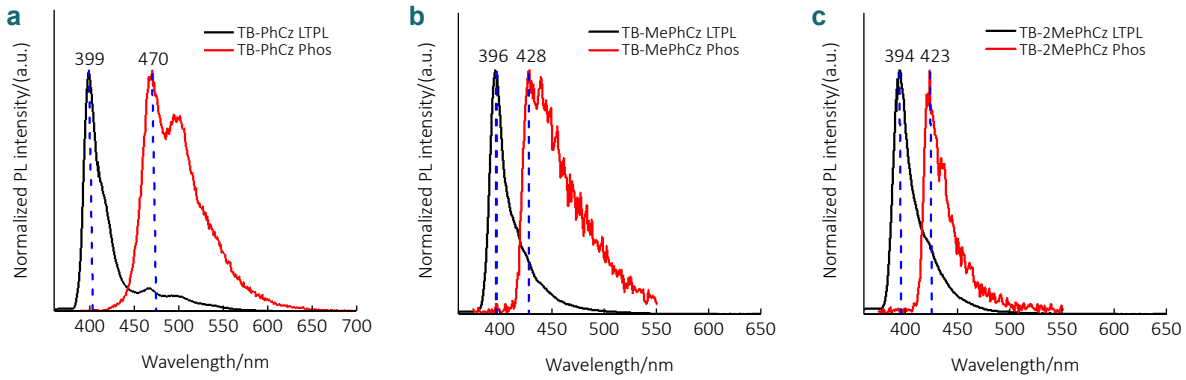


图 7 (a) TB-PhCz、(b) TB-MePhCz 和 (c) TB-2MePhCz 三个分子在甲苯中的低温 (77 K) 荧光 (延迟 0 ms) 和磷光光谱 (延迟 5 ms)

Fig. 7 Fluorescence (delay of 0 ms) and phosphorescence (delay of 5 ms) spectra of (a) TB-PhCz, (b) TB-MePhCz and (c) TB-2MePhCz in toluene at 77 K

能层材料的优化及厚度的优化，最终确定的器件结构是：ITO/HATCN (5 nm)/TAPC (50 nm)/TcTa (15 nm)/mCP (10 nm)/发光层 (20 nm)/PPF (10 nm)/TmPyPB (30 nm)/LiF (1nm)/Al (120 nm)。其中，ITO 作为阳极材料，HATCN 和 TAPC 分别作为空穴注入层和空穴传输层，TcTa 充当空穴传输层和电子阻挡层的作用，mCP 作为电子阻挡层，PPF 作为空穴阻挡层，TmPyPB 作为电子传输层，LiF 和 Al 分别作为电子注入层和阴极材料，考虑到分子的刚性，所以发光层是以这三个化合物 3 wt% 的低浓度掺杂到 mCP 主体中。如图 8 和表 2 所示，基于 TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 的掺杂器件都有不超过 4 V 的启亮电压 (3.8 V)，说明器件结构是合理的。三个分子的电致发光峰位分别在 408 nm、402 nm 和 396 nm，与光致发光光谱的发光峰位是对应的且同样表现出逐渐蓝移的趋势，光色从近紫外到紫外，说明器件的发光峰均来自客体，主体材料的选择是合适的，主客体之间存在着充分的能量转移。TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 的电致发光峰表现出比光致发光光谱更窄的半峰宽，分别只有 25 nm、23 nm 和 20 nm，甚至比三个分子在四氢呋喃中的发光光谱还要窄，这说明电致发光过程与光致发光过程的差异性，一方面可能是在电场的极化作用下，抑制了分子间的相互作用，另一方面可能是在掺杂薄膜态分子的构象变化相比于溶液态更小，这非常有利于进一步提升 OLED 器件的色纯度。由于 TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 的电致发光峰位逐渐蓝移且依次拥有更窄的半峰宽，所以三个分子的色坐标表现出越来越紫的光色，分别为 (0.166, 0.014)、(0.169, 0.013) 和 (0.169, 0.012)，可以明显看到三个分子的 CIE_y 值逐渐向着 0.01 逼近，这是目前报道的 CIE_y 值最小的紫外 OLED 器件，也是色纯度最高、最紫的 OLED 器件。此外，器件的最大外量子效率都超过了 5%，分别达到了 6.50%、8.05% 和 7.81% 的优异性能，而且具有很低的效率滚降，在 100 cd m^{-2} 下仍各自保留 5.48%、7.64% 和 7.35% 的高 EQE。

4 结 论

本文基于叔丁基硼氧多重共振分子骨架在 B 原子所连中心苯环的对位接入苯咔唑，并在中间苯桥的侧边引入甲基增大其与叔丁基硼氧多重共振分子骨架之间的二面角来探究其对发光性质的影响。首先，通过系统地理论计算，发现随着引入甲基个数的增加，TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 的 S_1 态空穴分布无变化，但是电子分布却存在着明显的区别。三个分子的电子分布依次从咔唑单元、中间苯桥和叔丁基硼氧多重共振分子骨架上的分布限域到仅在叔丁基硼氧多重共振分子骨架上分布，分子的共轭程度在逐渐减小，并且表现出多重共振分布的特点，三个分子的光色从近紫外光区蓝移至紫外光区，说明甲基的引入有效地限制了分子的共轭程度。最终，TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 的掺杂 OLED 器件表现出非常优异的电致发光性能。其中，基于 TB-MePhCz 的掺杂 OLED 器件 EQE 达到了 8.05%，并且具有很高的色纯度 (半峰宽为 23 nm)，CIE 坐标为 (0.169, 0.013)；TB-2MePhCz 则表现出最紫的发光，发光峰位为 396 nm (半峰宽为 20 nm)，CIE 坐标为 (0.169, 0.012)，CIE_y 值逼近了 0.01，这是目前文献报道的最深

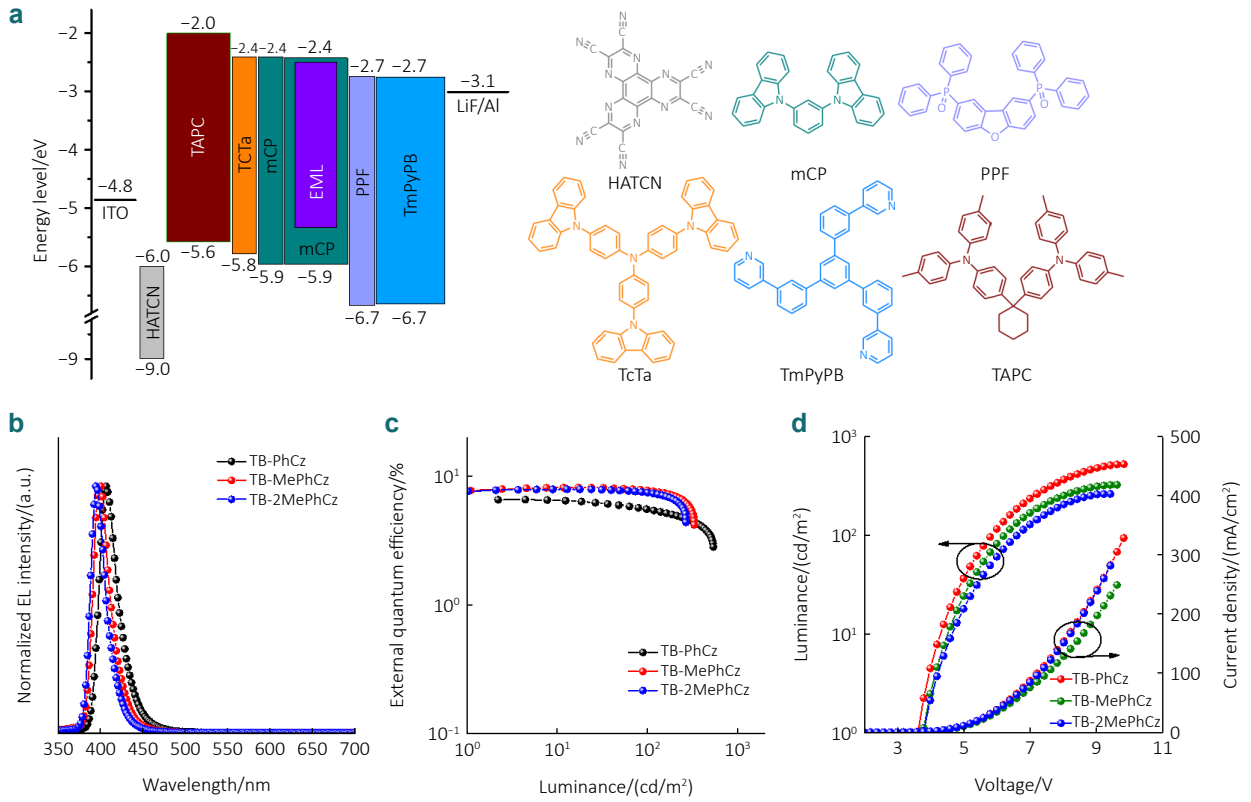


图 8 TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 掺杂器件的电致发光性能。(a) 器件结构及各功能层化学结构式；(b) 电致发光光谱；(c) 外量子效率-亮度关系曲线；(d) 亮度-电压-电流密度关系曲线

Fig. 8 Electroluminescence properties of the OLEDs based on TB-PhCz, TB-MePhCz, and TB-2MePhCz. (a) Device structure and chemical formula of each functional layer; (b) Electroluminescence spectra; (c) External quantum efficiency-luminance curve; (d) Luminance-voltage-current density curves

表 2 TB-PhCz、TB-MePhCz 和 TB-2MePhCz 的电致发光性能

Table 2 Electroluminescence properties of TB-PhCz, TB-MePhCz, and TB-2MePhCz

EML	λ_{EL}/nm[i]	FWHM/nm[ii]	V_{on}/V[iii]	L/(cd/m^2)[iv]	η_C/(cd/A)[v]	η_P/(lm/W)[vi]	EQE_{max}/EQE_{100} /(cd/m^2)[vii]	CIE (x,y)[viii]
mCP: 3 wt% TB-PhCz	408	25	3.8	518	0.37	0.30	6.50/5.48	0.166, 0.014
mCP: 3 wt% TB-MePhCz	402	23	3.8	320	0.25	0.20	8.05/7.64	0.169, 0.013
mCP: 3 wt% TB-2MePhCz	396	20	3.8	259	0.17	0.13	7.81/7.35	0.169, 0.012

i)电致发光波长；ii)半峰宽；iii)启亮电压；iv)最大亮度；v)最大电流效率；vi)最大功率效率；vii)最大外量子效率；viii)色坐标。

的紫光 OLED 器件，且器件的 EQE 达到了 7.81%。

作者贡献

娄敬丽、陈涛：研究资料的收集、分析，论文写作；唐本忠、王志明：指导论文选题、论文修改。

利益冲突

所有作者声明无利益冲突

参考文献

1. Huang W, Mi B X, Gao Z Q. Organic Electronics[M]. Beijing: Science Press, 2011.
黄维, 密保秀, 高志强. 有机电子学[M]. 北京: 科学出版社, 2011.
2. Tang C W, Vanslyke S A. Organic electroluminescent diodes[J]. *Appl Phys Lett*, 1987, **51**(12): 913−915.
3. Lou J L, Li G G, Wang Z M, et al. Excited state regulation based on phenanthrimidazole derivatives and its application in blue/white light OLED[J]. *Mater Res Appl*, 2023, **17**(5): 773−786.
娄敬丽, 黎刚刚, 王志明, 等. 基于菲并咪唑衍生物的激发态调控及其在蓝光/白光 OLED 中的应用[J]. 材料研究与应用, 2023, **17**(5): 773−786.
4. He J C, Wu J Q, Wang J H, et al. Blue aggregation-induced delayed fluorescence materials with 5, 10-dihydrodibenzo[*b, e*][1, 4]azasiline as donor[J]. *Chin J Org Chem*, 2024, **44**(8): 2513−2522.
何俊初, 伍俊琪, 王江辉, 等. 以二苯基硅杂吖啶为电子给体的蓝色聚集诱导延迟荧光材料[J]. 有机化学, 2024, **44**(8): 2513−2522.
5. Chen J H, Feng Q, Zhang C F, et al. High-efficiency red fluorescent organic light-emitting devices based on multiple sensitization

effects[J]. *Infrared Laser Eng*, 2025, **54**(11): 20250236.
陈金辉, 冯旗, 张春芳, 等. 基于多重敏化效应的高效红光荧光有机发光二极管[J]. 红外与激光工程, 2025, **54**(11): 20250236.

6. Zhang Y, Du C Z, Li J S, et al. Recent advances in multi-resonance thermally activated delayed fluorescence materials based on B, N-heteroarenes[J]. *Chin J Org Chem*, 2023, **43**(5): 1645−1690.
张祎, 杜呈卓, 李继坤, 等. 基于硼氮杂稠环芳烃的多重共振热活化延迟荧光材料研究进展[J]. 有机化学, 2023, **43**(5): 1645−1690.
7. Zhao T F, Zhang G, Rong K X, et al. Control method for anti-collision formation of UAVs in cooperation with ultraviolet communication[J]. *Laser Technol*, 2023, **47**(1): 32−40.
赵太飞, 张港, 容开新, 等. 紫外光通信协作无人机防撞编队的控制方法[J]. 激光技术, 2023, **47**(1): 32−40.
8. Jiang K, Liang SM, Sun XJ, Ben JW, Qu L et al. Rapid inactivation of human respiratory RNA viruses by deep ultraviolet irradiation from light-emitting diodes on a high-temperature-annealed AlN/Sapphire template[J]. *Opto-Electron Adv*, 2023, **6**(9): 230004.
9. Sharbirin A S, Kong R E, Mato W B, et al. Highly enhanced UV absorption and light emission of monolayer WS_2 through hybridization with Ti_2N MXene quantum dots and g-C_3N_4 quantum dots[J]. *Opto-Electron Adv*, 2024, **7**(6): 240029.
10. Lou J L, Guo X C, Chen Y C, et al. Realization of high-efficiency UV-OLED used as excitation light sources via referenceable crossed long-short axis lighting emitter design strategy[J]. *Chem Eng J*, 2025, **515**: 163817.
11. Lou J L, Li G G, Guo X C, et al. Creation of high-quality deep-blue AIE emitter with a crossed long-short axis structure for efficient and versatile OLEDs[J]. *Small*, 2024, **20**(18): 2308468.
12. Liu R, Zhang D D, Zhang H, et al. Effects of the thickness of the hole transport layer on the performance of graphene-based organic light-emitting diodes[J]. *Chin J Mater Res*, 2024, **38**(3): 168−176.
刘锐, 张鼎冬, 张辉, 等. 空穴传输层的厚度对石墨烯基有机发光二极管性能的影响[J]. 材料研究学报, 2024, **38**(3): 168−176.
13. Ren X, Yu H Y, Zhang Y. Electroluminescence efficiency and stability of near ultraviolet organic light-emitting diodes based on BCPO luminous materials[J]. *Acta Phys Sin*, 2024, **73**(4): 047801.
任兴, 于宏宇, 张勇. 基于 BCPO 发光材料近紫外有机发光二极管的电致发光效率与稳定性[J]. 物理学报, 2024, **73**(4): 047801.
14. Yu H Y, Zhang B W, Chen P, et al. Boosting electroluminescence efficiency and stability of near ultraviolet organic light-emitting diodes by using tandem structure[J]. *Chin J Lumin*, 2025, **46**(2): 315−325.
于宏宇, 张宝文, 陈平, 等. 利用叠层结构提高近紫外有机发光二极管的电致发光效率与稳定性[J]. 发光学报, 2025, **46**(2): 315−325.
15. Niu Q, Hao H M, Lin W X, et al. Degradation mechanism of organic light-emitting diodes[J]. *Chin J Lumin*, 2023, **44**(1): 186−197.
牛泉, 郝洪敏, 林雯欣, 等. 有机发光二极管老化机制[J]. 发光学报, 2023, **44**(1): 186−197.
16. Lou J L, Guo X C, Chen Y C, et al. Construction of a high color-purity deep-blue emitter based on an indolo[3, 2, 1-*jk*]carbazole center using a crossed long-short axis (CLSA) molecular design strategy[J]. *J Mater Chem C*, 2025, **13**(37): 19168−19173.
17. Lou J L, Li G G, Wang Z M, et al. Progress of ultraviolet/deep-blue OLED luminescent materials[J]. *Chin J Lumin*, 2023, **44**(1): 37−60.
娄敬丽, 黎刚刚, 王志明, 等. 紫外/深蓝 OLED 发光材料研究进展[J]. 发光学报, 2023, **44**(1): 37−60.
18. Tan W L, Yu Y, Hu D H, et al. Recent progress of blue-light emitting materials for organic light-emitting diodes[J]. *Chin J Lumin*, 2023, **44**(1): 1−11.
谭文乐, 俞越, 胡德华, 等. 有机发光二极管蓝光材料研究进展[J]. 发光学报, 2023, **44**(1): 1−11.
19. Li G J, Xu K W, Zheng J B, et al. High-performance ultraviolet organic light-emitting diodes enabled by double boron-oxygen-embedded benzo[*m*]tetraphene emitters[J]. *J Am Chem Soc*, 2024, **146**(2): 1667−1680.
20. Lee J H, Huang J X, Chen C H, et al. Classic fluorophores with a horizontal alignment for enhancing light outcoupling efficiency (≈30%) and external quantum efficiency (≈7%) of near ultraviolet (λ_{max}<400 nm) organic light-emitting diodes[J]. *Ad Opt Mater*, 2023, **11**(8): 2202666.
21. Wei Y, Zhong C X, Sun Y, et al. C-H-activated Csp^2-Csp^3 diastereoselective gridization enables ultraviolet-emitting stereo-molecular nanohydrocarbons with mulitple H···H interactions[J]. *Nat Commun*, 2024, **15**(1): 5438.
22. Li B X, Qu Y D, Lou J L, et al. Negatively curved diaza-octagon heterocycle fused with polycyclic aromatic hydrocarbons for ultra-narrowband deep-blue emission[J]. *Angew Chem Int Ed*, 2025, **64**(31): e202506504.
23. Ma P, Chen Y Y, Man Y, et al. High-efficiency ultraviolet electroluminescence from multi-resonance phosphine oxide polycyclic aromatics[J]. *Angew Chem Int Ed*, 2024, **63**(5): e202316479.
24. Hirai H, Nakajima K, Nakatsuka S, et al. One-step borylation of 1, 3-diaryloxybenzenes towards efficient materials for organic light-emitting diodes[J]. *Angew Chem Int Ed*, 2015, **127**(46): 13581−13585.
25. Chen F, Zhao L, Wang X D, et al. Novel boron- and sulfur-doped polycyclic aromatic hydrocarbon as multiple resonance emitter for ultrapure blue thermally activated delayed fluorescence polymers[J]. *Sci China Chem*, 2021, **64**(4): 547−551.
26. Kim H J, Kang H, Jeong J E, et al. Ultra-deep-blue aggregation-induced delayed fluorescence emitters: achieving nearly 16% EQE in solution-processed nondoped and doped OLEDs with CIE$_y$< 0.1[J]. *Adv Funct Mater*, 2021, **31**(33): 2102588.
27. Park S I, Min H, Kim J U, et al. Deep-blue OLEDs based on organoboron-phenazasiline-hybrid delayed fluorescence emitters concurrently achieving 30% external quantum efficiency and small efficiency roll-off[J]. *Adv Opt Mater*, 2021, **9**(24): 2101282.
28. Ahn D H, Kim S W, Lee H, et al. Highly efficient blue thermally activated delayed fluorescence emitters based on symmetrical and rigid oxygen-bridged boron acceptors[J]. *Nat Photonics*, 2019, **13**(8): 540−546.
29. Kim H J, Godumala M, Kim S K, et al. Color-tunable boron-based emitters exhibiting aggregation-induced emission and thermally activated delayed fluorescence for efficient solution-processable nondoped deep-blue to sky-blue OLEDs[J]. *Adv Opt Mater*, 2020, **8**(14): 1902175.
30. Lee Y, Hong J I. High-efficiency thermally activated delayed fluorescence emitters with high horizontal orientation and narrow deep-blue emission[J]. *Adv Opt Mater*, 2021, **9**(15): 2100406.
31. Du B Y, Wang X D, Chen F, et al. Through-space charge transfer dendrimers employing oxygen-bridged triarylboron acceptors for efficient deep-blue electroluminescence[J]. *Chem Commun*, 2021, **57**(58): 7144−7147.
32. Lee H L, Chung W J, Lee J Y. Narrowband and pure violet organic emitter with a full width at half maximum of 14 nm and *y* color coordinate of below 0.02[J]. *Small*, 2020, **16**(14): 1907569.
33. Kang J, Jeon S O, Kim I, et al. Color stable deep blue multi-resonance organic emitters with narrow emission and high efficiency[J]. *Adv Sci*, 2023, **10**(26): 2302619.

34. Lee H L, Jeon S O, Kim I, et al. Multiple-resonance extension and spin-vibronic-coupling-based narrowband blue organic Fluorescence emitters with over 30% quantum efficiency[J]. *Adv Mater*, 2022, **34**(33): 2202464.
35. Kang J, Jeon S O, Lee H L, et al. Expanded multiple-resonance structure for highly efficient narrowband deep-blue organic light-emitting diodes[J]. *Mater Today*, 2023, **69**: 88−96.
36. Dong X B, Zeng J J, Sun R Q, et al. Achieving efficient narrow-spectrum violet organic light-emitting diodes based on through-space charge transfer molecules[J]. *ACS Mater Lett*, 2025, **7**(2): 457−464.
37. Chen R, Li S Y, Huang H, et al. Achieving high efficiency ultrapure violet OLEDs with a CIE_y coordinate of below 0.015 through precise manipulation of peripheral heavy atom sulfur[J]. *Chem Sci*, 2025, **16**(35): 16304−16313.
38. Samanta P K, Kim D, Coropceanu V, et al. Up-conversion intersystem crossing rates in organic emitters for thermally activated delayed fluorescence: impact of the nature of singlet vs triplet excited states[J]. *J Am Chem Soc*, 2017, **139**(11): 4042−4051.

作者简介



娄敬丽 (1999-)，女，博士研究生，主要从事有机电致发光二极管的研究。

E-mail：superwomanljl@163.com



【通信作者】王志明 (1983-)，男，博士，研究员，主要从事芳基杂环高效率深蓝光材料的设计及新型 AIE 荧光探针的研究。

E-mail：wangzhiming@scut.edu.cn

Realization of near ultraviolet OLED with *tert*-butyl boron oxide derivatives as emitting materials

Lou Jingli[1], Chen Tao[1], Tang Benzhong[2,3], Wang Zhiming[1*]

[1] State Key Laboratory of Luminescent Materials and Devices, South China University of Technology, Guangzhou, Guangdong 510640, China;
[2] School of Science and Engineering, the Chinese University of Hong Kong, Shenzhen, Guangdong 518172, China;
[3] Department of Chemistry, the Hong Kong University of Science and Technology, Hong Kong 999077, China

Abstract

Objective Organic light-emitting diode (OLED) is a new generation of display technology following LCD display, which has many advantages and has received widespread attention from researchers. OLED has been developing over thirty years, and emitters based on the three primary colors of red, green, and blue have met the requirements of commercialization. However, the latest Broadcast Television 2020 (BT.2020) display standard defines the color coordinates of blue emission as (0.131, 0.046), indicating higher requirements for the saturation of blue emission. Commercialized blue emitters are no longer able to meet the requirements of the BT.2020 display standard. Some studies have shown that color purity is not only related to the emission wavelength, but also to the full width at half maximum (FWHM) of the emission spectrum. Therefore, deep blue materials with narrow emission are the object of current research workers' pursuit, which is crucial for achieving ultra-high definition and full color with wide color gamut displays. Moreover, ultraviolet light, as the extension of deep blue toward the short-wavelength direction, is also widely concerned by researchers because of its scarcity. Therefore, developing high-efficiency near ultraviolet and ultraviolet luminescent materials with narrow half peak width is of great significance for academic research and commercial applications

Methods All chemicals and reagents were purchased from commercial sources and used as received. The final product underwent vacuum sublimation to improve purity. All density functional theory (DFT) calculations were performed using the Gaussian 16 package. The theoretical calculation was completed at the M06-2X/6-31G (d,p) level. Solutions with a concentration of 1×10^{-5} mol/L were prepared for the solution measurements. All organic films used for the photoluminescence measurements were deposited onto clean quartz substrates via

Foundation item: the National Natural Science Foundation of China (52473173), Natural Science Foundation of Guangdong Province (2022B1515020084), Guangdong Basic and Applied Basic Research Foundation (2023B1515040003), Key Project of Yunnan Provincial Department of Science and Technology (202303AC100021), Independent Research Project of State Key Lab of Luminescent Materials and Devices (SCUT) (Skllmd-2024-10, Skllmd-2025-05), Science and Technology Program of Guangzhou (2023A04J0988) and Key-Area Research and Development Program of Guangdong Province (2024B0101040001)

*Correspondence: Wang Z M, E-mail: wangzhiming@scut.edu.cn

thermal evaporation at 1–1.5 Å s^{-1} under high vacuum with a base pressure of < 10^{-5} torr (1 Å = 0.1 nm, 1 torr = 133.322 Pa). Ultraviolet-visible absorption spectra were measured on a Shimadzu UV-2600 spectrophotometer. PL spectra were recorded on a Horiba Fluoromax-4 spectrofluorometer. PLQYs were measured using a Hamamatsu absolute PL quantum yield spectrometer (C11347 Quantaurus_QY). Transient PL decay curves were measured using an Edinburgh Instrument FLS1000 spectrometer.

Cyclic voltammetry was conducted on a CHI 610E A14297 using a solution of tetra-*n*-butylammonium hexafluorophosphate (Bu_4NPF_6) (0.1 mol/L) in dichloromethane or dimethylformamide at a scan rate of 100 mV s^{-1}. A platinum wire was used as the auxiliary electrode, a glass carbon disk as the working electrode, and Ag/Ag^+ as the reference electrode, with the redox couple ferricenium/ferrocene (Fc/Fc^+) serving as the calibration standard. The ionization potential (IPCV) and electron affinities (EACV) of these molecules were calculated using the following formulas: $IPCV = (E_{ox} - E_{1/2}(Fc/Fc^+) + 4.8)$ eV and $EACV = (E_{red} - E_{1/2}(Fc/Fc^+) + 4.8)$ eV, where E_{ox} and E_{red} represent the onset oxidation potential and reduction potential relative to Fc/Fc^+ (4.8 eV), respectively. Thermogravimetric analysis was performed on a Netzsch TG 209 under nitrogen flow at a heating rate of 10℃ min^{-1}. Differential scanning calorimetric was performed on a Netzsch DSC 200 F3 under nitrogen flow at a heating rate of 10 ℃ min^{-1}.

The glass substrates, precoated with a 90 nm layer of ITO with a sheet resistance of 15 to 20 ohms per square, were successively cleaned in ultrasonic bath of acetone, isopropanol, detergent, and deionized water, respectively, with each step lasting 10 min. Then, the substrates were completely dried in a 70 ℃ oven. To improve the hole injection ability of ITO, the substrates underwent O_2 plasma treatment for 6 min before fabrication. The vacuum-deposited OLEDs were fabricated under a pressure of < 5×10^{-4} Pa in the Suzhou Fangsheng FS-380 vacuum deposition system. Organic materials, LiF, and Al were deposited at rates of 0.5 to 1.5 A, 0.1, and 3 Å s^{-1}, respectively. The effective emitting area of the device was 9 mm^2, determined by the overlap between the anode and cathode. The luminance-voltage-current density characteristics and EL spectra were obtained via a PIN-25D silicon photodiode and Luminance Meter and an Ocean Optics USB 2000+ spectrometer, along with a Keithley 2400 Source Meter.

Results and Discussions Based on the O/B/O multiple resonance molecular framework, benzocarbazole derivatives were introduced in the para position of the central benzene ring connected to B atom. By introducing methyl groups on the side of the intermediate benzene bridge, the emissions of the TB-PhCz, TB-MePhCz, and TB-2MePhCz were shifted from near ultraviolet to ultraviolet. Theoretical calculations indicate that a gradual decrease in the electron delocalization degree of S_1 states of TB-PhCz, TB-MePhCz, and TB-2MePhCz with an increase in the number of methyl groups introduced, exhibiting a characteristic of multiple resonance distribution. This is consistent with the gradual blue shift of their fluorescence emission peak positions, shifting from near ultraviolet to ultraviolet. Their doped devices all exhibit excellent electroluminescence performance, the maximum external quantum efficiency of TB-MePhCz based OLED device reaches 8.05% and thedevice has a high color purity (the full width at half maxima is 23 nm); TB-2MePhCz based OLED exhibits the deepest violet emission, thepeak of which is at 396 nm (the full width at half maxima is 20 nm), the CIE coordinates are (0.169, 0.012), and the CIE_y value approaches 0.01, which is currently the lowest CIE_y value reported in the literature, and the external quantum efficiency of the device reaches 7.81%, indicating that this molecular design strategy can effectively limit molecular conjugation and achieve blue shift of luminescent molecules, providing guidance for the development of more high-performance ultraviolet emitters.

Conclusions Three ultraviolet-emitting molecules, TB-PhCz, TB-MePhCz, and TB-2MePhCz were designed and synthesized by tuning molecular torsion based on tert-butyl boron-oxygen multiple resonance skeletons. These molecules exhibit multiple resonance characteristics, achieving emission blue shift from near-ultraviolet to ultraviolet region. High-efficiency narrowband violet OLEDs were fabricated using the three molecules, respectively.

Keywords: organic light-emitting diode; ultraviolet; boron oxide derivatives; external quantum efficiency

Lou J L, Chen T, Tang B Z, et al. Realization of near ultraviolet OLED with *tert*-butyl boron oxide derivatives as emitting materials[J]. *Opto-Electron Eng*, 2026, **53**(5): 250331; DOI: 10.12086/oee.2026.250331

Opto-Electronic Journals Group
www.oejournal.org
扫描二维码，获取 PDF 全文