



(10) 授权公告号 CN 109721606 B

(45) 授权公告日 2023. 09. 05

(21) 申请号 201811073194.2

(22) 申请日 2018.09.14

(65) 同一申请的已公布的文献号  
申请公布号 CN 109721606 A

(43) 申请公布日 2019.05.07

(30) 优先权数据  
10-2017-0144162 2017.10.31 KR

(73) 专利权人 三星显示有限公司  
地址 韩国京畿道

(72) 发明人 宫崎祐树

(74) 专利代理机构 北京德琦知识产权代理有限公司 11018  
专利代理师 赵嫦 王珍仙

(51) Int. Cl.  
C07D 487/08 (2006.01)  
C07D 487/18 (2006.01)  
C07D 491/18 (2006.01)  
C07D 498/18 (2006.01)

C07D 513/18 (2006.01)

C07F 7/08 (2006.01)

C09K 11/06 (2006.01)

H10K 50/11 (2023.01)

H10K 50/12 (2023.01)

H10K 85/60 (2023.01)

H10K 101/20 (2023.01)

(56) 对比文件

CN 106467522 A, 2017.03.01

US 2015287931 A1, 2015.10.08

US 2016285009 A1, 2016.09.29

US 2017186977 A1, 2017.06.29

CN 105340100 A, 2016.02.17

US 2013234119 A1, 2013.09.12

WO 2016046034 A1, 2016.03.31

谭继华等. 电子给体-受体型热活化延迟荧光蓝光材料研究进展.《有机化学》.2017, 第37卷第2457-2480页.

审查员 杨晨辰

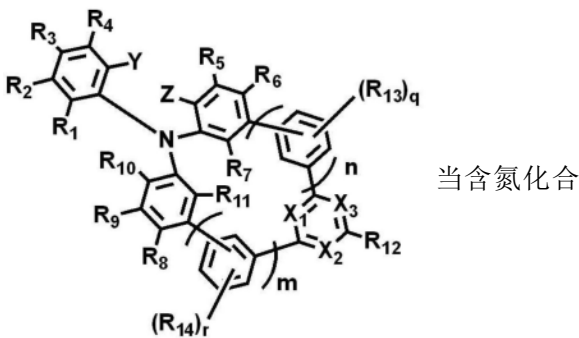
权利要求书4页 说明书39页 附图2页

(54) 发明名称

含氮化合物和包括该含氮化合物的有机电致发光装置

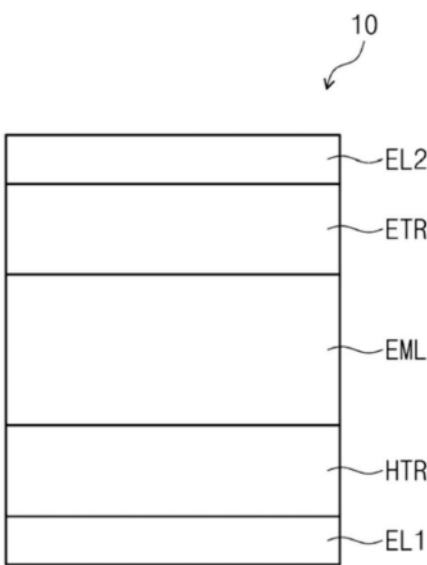
(57) 摘要

提供了一种改善发光效率的含氮化合物, 和包括该含氮化合物的有机电致发光装置。根据本公开的含氮化合物由式1表示: 式1



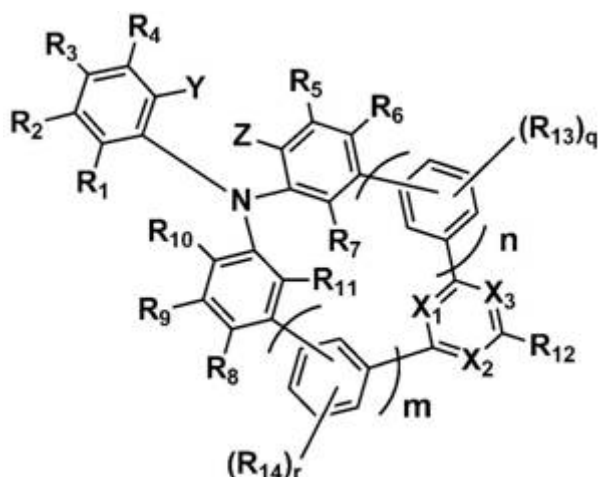
物具有合适的或适当的环状分子结构时, 可获得小的  $\Delta E_{ST}$  值, 并且在发光层中包括该含氮化

物的有机电致发光装置可展现热激活延迟荧光发射并具有改善的外部量子效率。



1. 一种含氮化合物, 所述含氮化合物由式1表示:

式1



其中在式1中,

$X_1$ 、 $X_2$ 和 $X_3$ 中的至少两个为N, 并且其余为 $CR_{15}$ ,

Y和Z各自独立地为氢原子、氘原子、 $OR_{16}$ 、 $SR_{17}$ 或 $SiR_{21}R_{22}R_{23}$ ,

$R_1$ 至 $R_{14}$ 各自独立地为氢原子、氘原子、 $OR_{24}$ 、 $SR_{25}$ 、 $NR_{27}R_{28}$ 、取代的或未取代的具有6至15个成环碳原子的芳基或取代的或未取代的具有2至20个成环碳原子的杂芳基, 可选地,  $R_2$ 和 $R_3$ 结合而形成环,  $R_3$ 和 $R_4$ 结合而形成环,  $R_5$ 和 $R_6$ 结合而形成环, 且 $R_8$ 和 $R_9$ 结合而形成环,

$R_{15}$ 至 $R_{17}$ 、 $R_{21}$ 至 $R_{25}$ 、 $R_{27}$ 和 $R_{28}$ 各自独立地为氢原子、氘原子、卤素原子、氰基或取代的或未取代的具有6至30个成环碳原子的芳基,

n和m各自独立地为1或2, 并且

q和r各自独立地为选自0至4的整数,

其中术语“取代的或未取代的”指未取代的或被选自由以下组成的组中的至少一个取代基取代的选择: 氘原子、卤素原子、氰基、硝基、氨基、甲硅烷基、碳数为1至10的烷基、碳数为2至10的烯基、具有6至30个成环碳原子的芳基和具有2至30个成环碳原子的杂环基。

2. 根据权利要求1所述的含氮化合物, 其中 $X_1$ 为N, 并且 $X_2$ 和 $X_3$ 中的至少一个为N。

3. 根据权利要求1所述的含氮化合物, 其中n和m为1。

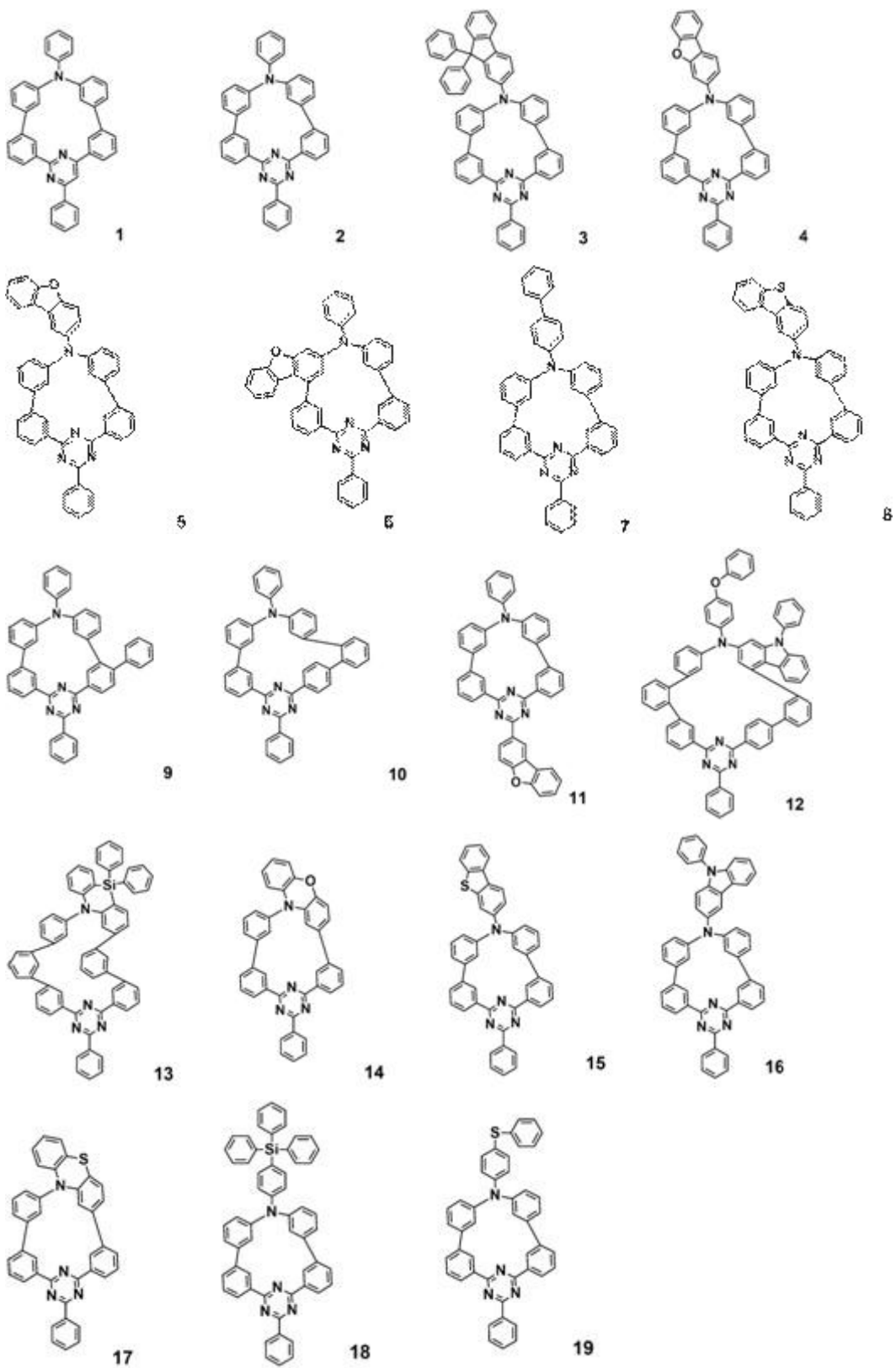
4. 根据权利要求1所述的含氮化合物, 其中m为1, 并且n为1或2。

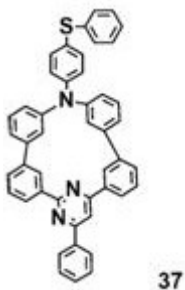
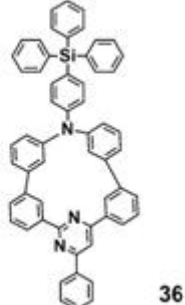
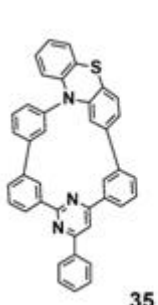
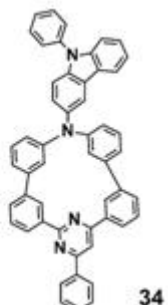
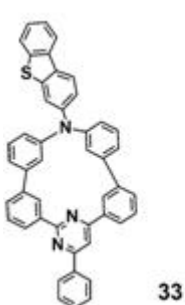
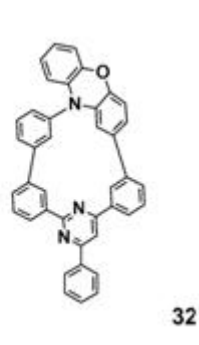
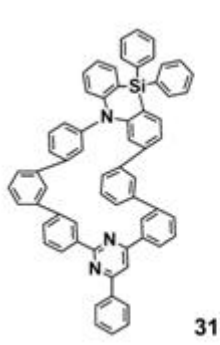
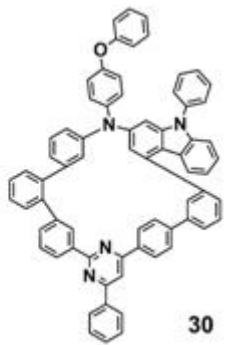
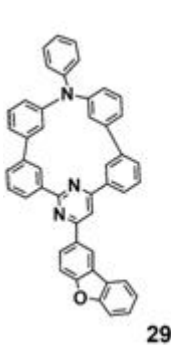
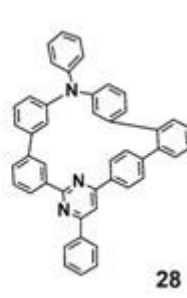
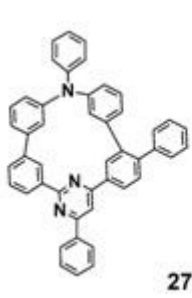
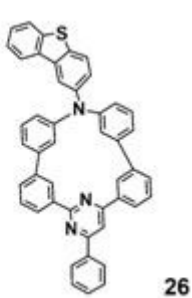
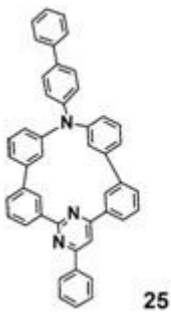
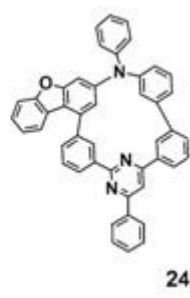
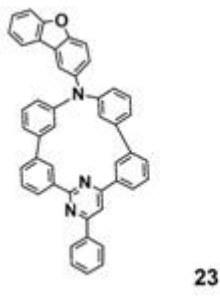
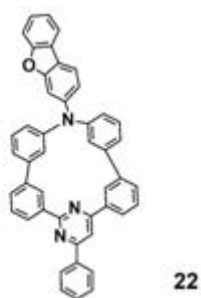
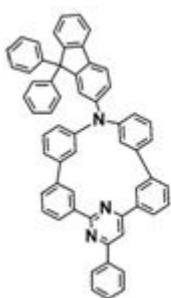
5. 根据权利要求1所述的含氮化合物, 其中 $R_{12}$ 为取代的或未取代的苯基或取代的或未取代的二苯并呋喃基。

6. 根据权利要求1所述的含氮化合物, 其中由式1表示的所述含氮化合物的最低激发单重态能级S1和最低激发三重态能级T1之间的差为0.2 eV或更小。

7. 一种含氮化合物, 选自由化合物组1中表示的化合物:

化合物组1





8. 一种有机电致发光装置,其包括:

第一电极;

在所述第一电极上的空穴传输区;

在所述空穴传输区上并且包括权利要求1至7中任一项所述的含氮化合物的发光层;

在所述发光层上的电子传输区;和  
在所述电子传输区上的第二电极,  
其中所述第一电极和所述第二电极各自独立地包括Ag、Mg、Cu、Al、Pt、Pd、Au、Ni、Nd、  
Ir、Cr、Li、Ca、LiF/Ca、LiF/Al、Mo、Ti、其化合物或其混合物。

9.根据权利要求8所述的有机电致发光装置,其中所述发光层是热激活延迟荧光的发光层,所述发光层发射蓝光。

10.根据权利要求8所述的有机电致发光装置,其中所述发光层包括主体和掺杂剂,并且  
所述掺杂剂为所述含氮化合物。

## 含氮化合物和包括该含氮化合物的有机电致发光装置

[0001] 相关申请的交叉引用

[0002] 本专利申请要求2017年10月31日提交的韩国专利申请号10-2017-0144162的优先权和权益,其全部内容通过引用并入本文。

### 技术领域

[0003] 本公开涉及含氮化合物和包括该含氮化合物的有机电致发光装置,并且例如,涉及用作延迟荧光发射材料的含氮化合物和包括该含氮化合物的有机电致发光装置。

### 背景技术

[0004] 最近,正积极开发作为图像显示装置的有机电致发光显示装置。有机电致发光显示装置与液晶显示装置的区别在于它们是所谓的自发光显示装置。在自发光显示装置中,分别从第一电极和第二电极注入的空穴和电子在发光层中复合,并且当空穴-电子复合时发光层中包括有机化合物的发光材料发光,从而显示图像。

[0005] 在有机电致发光装置作为显示装置的应用中,期望有机电致发光装置降低驱动电压和提高发光效率和寿命。也期望继续开发用于可稳定获得这种特征的有机电致发光装置的材料。

[0006] 最近,为了实现具有高效率的有机电致发光装置,正开发依赖于使用三重态能量的磷光发射,或使用通过三重态激子的碰撞(三重态-三重态湮灭,TTA)产生单重态激子的现象的延迟荧光发射的策略。此外,也正在开发利用经由热激活延迟荧光(TADF)材料的延迟荧光现象的策略。

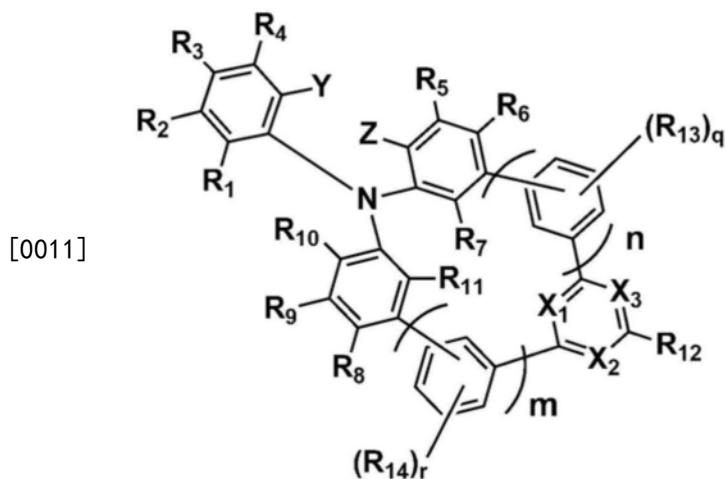
### 发明内容

[0007] 本公开的实施方式的一个或多个方面提供含氮化合物,其是用于有机电致发光装置并且能够改善发光效率的发光(luminescence)(例如,发光(luminescent))材料。

[0008] 本公开还提供了通过包括该含氮化合物具有改善的发光效率的有机电致发光装置。

[0009] 本公开的一个或多个实施方式提供了由式1表示的含氮化合物:

[0010] 式1



[0012] 式1中,  $X_1$ 、 $X_2$ 和 $X_3$ 中的至少两个可为N, 并且其余可为 $CR_{15}$ ; Y和Z可各自独立地为氢原子、氘原子、 $OR_{16}$ 、 $SR_{17}$ 、 $CR_{18}R_{19}R_{20}$ 或 $SiR_{21}R_{22}R_{23}$ , 可选地, Y和Z可彼此结合(例如, 连接)而形成环;  $R_1$ 至 $R_{14}$ 可各自独立地为氢原子、氘原子、 $OR_{24}$ 、 $SR_{25}$ 、 $(C=O)R_{26}$ 、 $NR_{27}R_{28}$ 、 $CR_{29}R_{30}R_{31}$ 、 $SiR_{32}R_{33}R_{34}$ 、取代的或未取代的具有1至20个碳原子的烷基、取代的或未取代的具有6至30个成环碳原子的芳基或取代的或未取代的具有2至30个成环碳原子的杂芳基, 可选地,  $R_1$ 至 $R_{14}$ 可各自独立地与相邻基团结合(例如, 连接)而形成环;  $R_{15}$ 至 $R_{34}$ 可各自独立地为氢原子、氘原子、卤素原子、氰基、取代的或未取代的甲硅烷基、取代的或未取代的具有1至20个碳原子的烷基、取代的或未取代的具有6至30个成环碳原子的芳基或取代的或未取代的具有2至30个成环碳原子的杂芳基, 可选地,  $R_{15}$ 至 $R_{34}$ 可各自独立地与相邻基团结合(例如, 连接)而形成环; n和m可各自独立地为1或2; 并且q和r可各自独立地为选自0至4的整数。

[0013] 在一些实施方式中,  $X_1$  可为N, 并且  $X_2$  和  $X_3$  中的至少一个可为N。

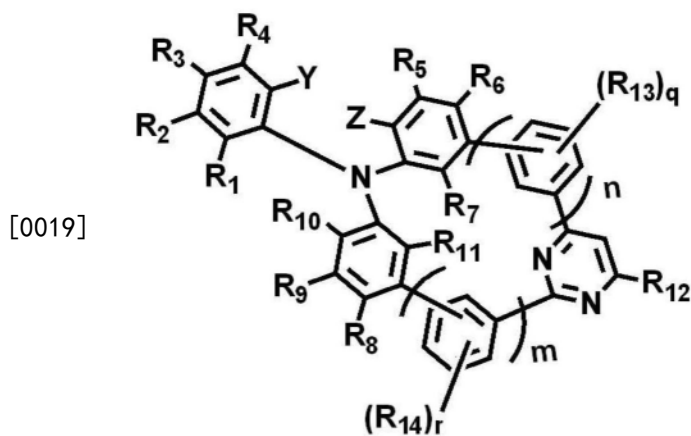
[0014] 在一些实施方式中,n和m可为1。

[0015] 在一些实施方式中,  $m$  可为 1, 并且  $n$  可为 1 或 2。

[0016] 在一些实施方式中, R<sub>12</sub>可为取代的或未取代的苯基或取代的或未取代的二苯并呋喃基。

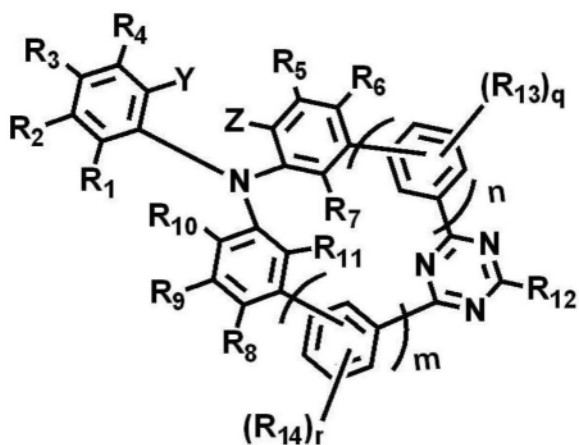
[0017] 在一些实施方式中,式1可为由式1-1或式1-2表示的含氮化合物:

[0018] 式1-1



[0020] 式1-2

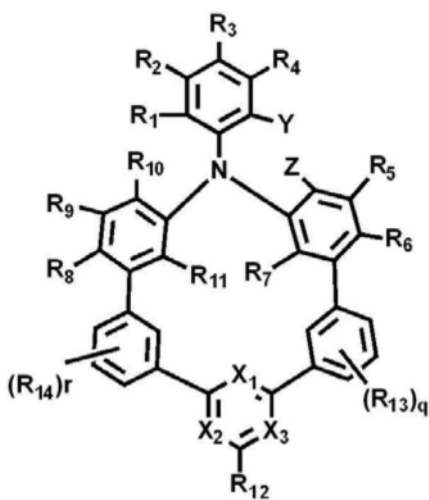
[0021]

[0022] 在式1-1和式1-2中, Y、Z、n、m、R<sub>1</sub>至R<sub>34</sub>、q和r可各自独立地与式1中的定义相同。

[0023] 在一些实施方式中, 式1可为由式1-3或式1-4表示的含氮化合物:

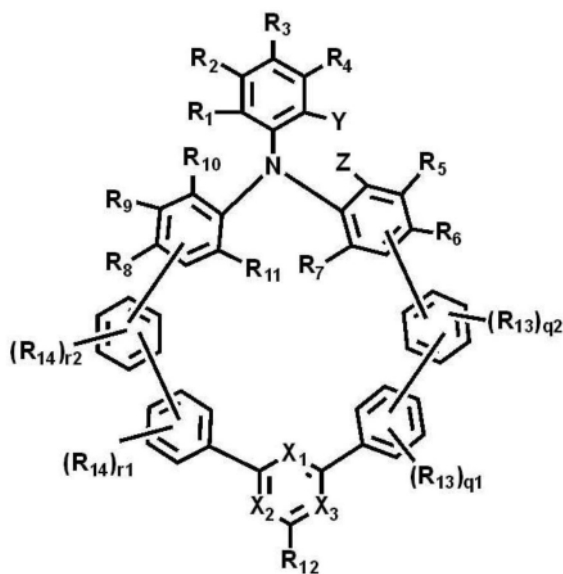
[0024] 式1-3

[0025]



[0026] 式1-4

[0027]

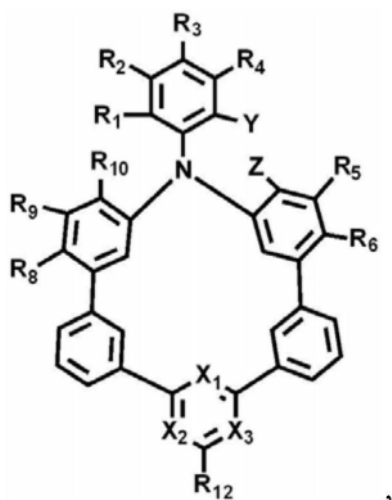
[0028] 在式1-4中, q<sub>1</sub>、q<sub>2</sub>、r<sub>1</sub>和r<sub>2</sub>可各自独立地为选自0至4的整数; 并且在式1-3和式1-4中, X<sub>1</sub>至X<sub>3</sub>、Y、Z、R<sub>1</sub>至R<sub>34</sub>、q和r可各自独立地与式1中的定义相同。



[0029] 在一些实施方式中,式1可为由式1-5或式1-6表示的含氮化合物:

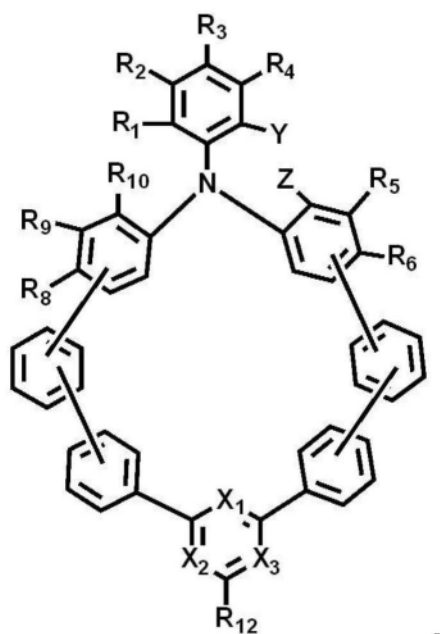
[0030] 式1-5

[0031]



[0032] 式1-6

[0033]



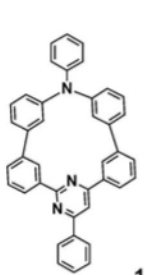
[0034] 在式1-5和式1-6中,  $X_1$  至  $X_3$ 、Y、Z、 $R_1$  至  $R_6$ 、 $R_8$ 、 $R_9$ 、 $R_{10}$  和  $R_{12}$  可各自独立地与式1中的定义相同。

[0035] 在一些实施方式中,由式1表示的含氮化合物的最低激发单重态能级(S1)和最低激发三重态能级(T1)之间的差可为约0.2eV或更小。

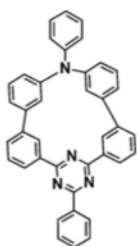
[0036] 在一些实施方式中,由式1表示的含氮化合物可为热激活延迟荧光发射材料。

[0037] 在一些实施方式中,由式1表示的含氮化合物可为由化合物组1中表示的化合物:

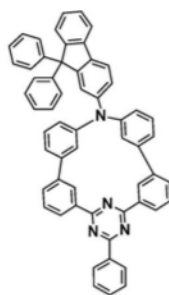
[0038] 化合物组1



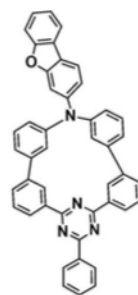
1



2

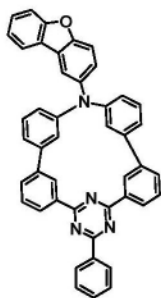


3

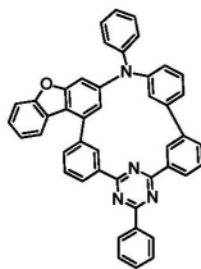


4

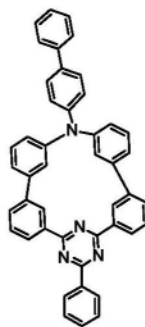
[0039]



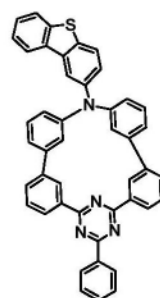
5



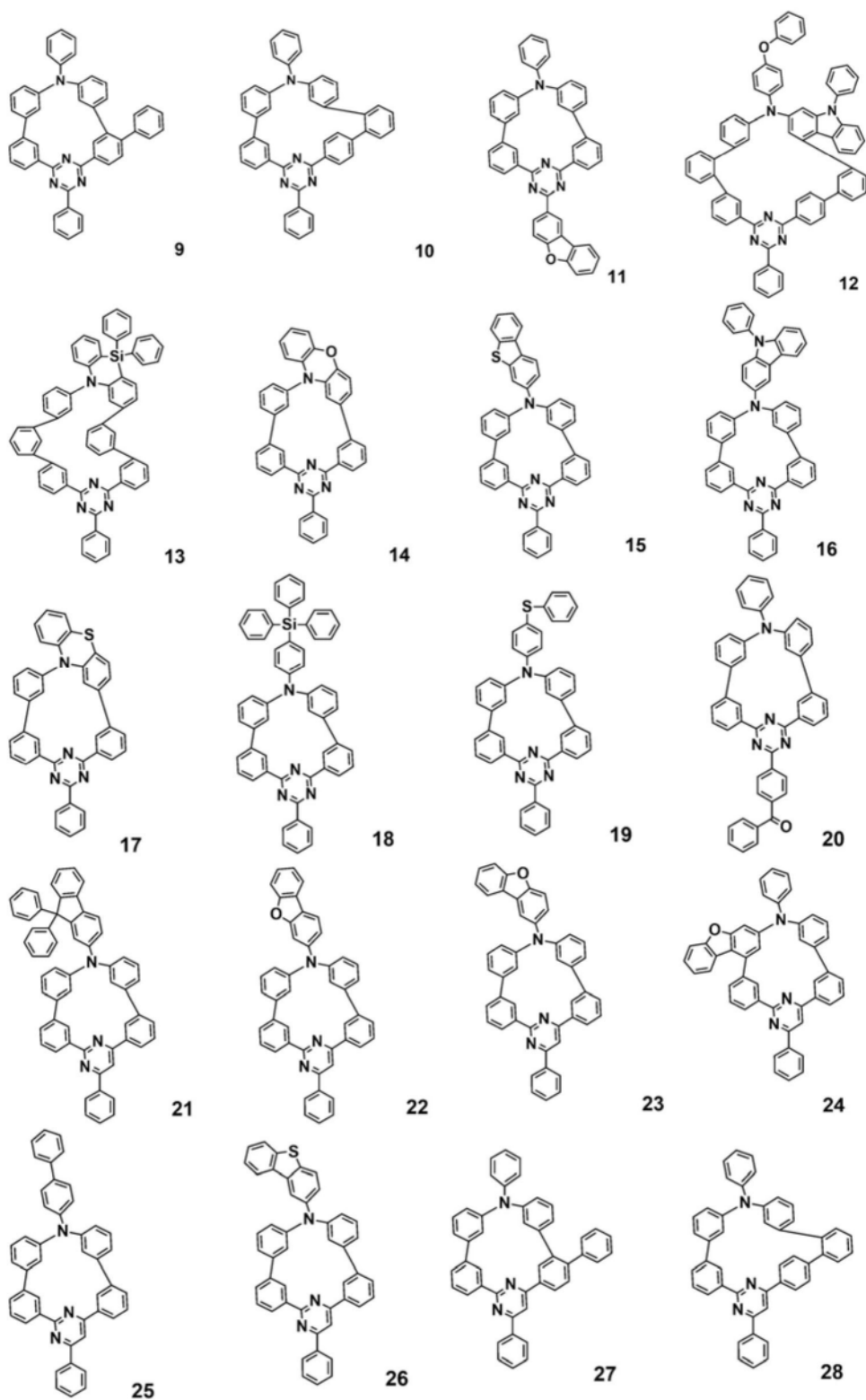
6



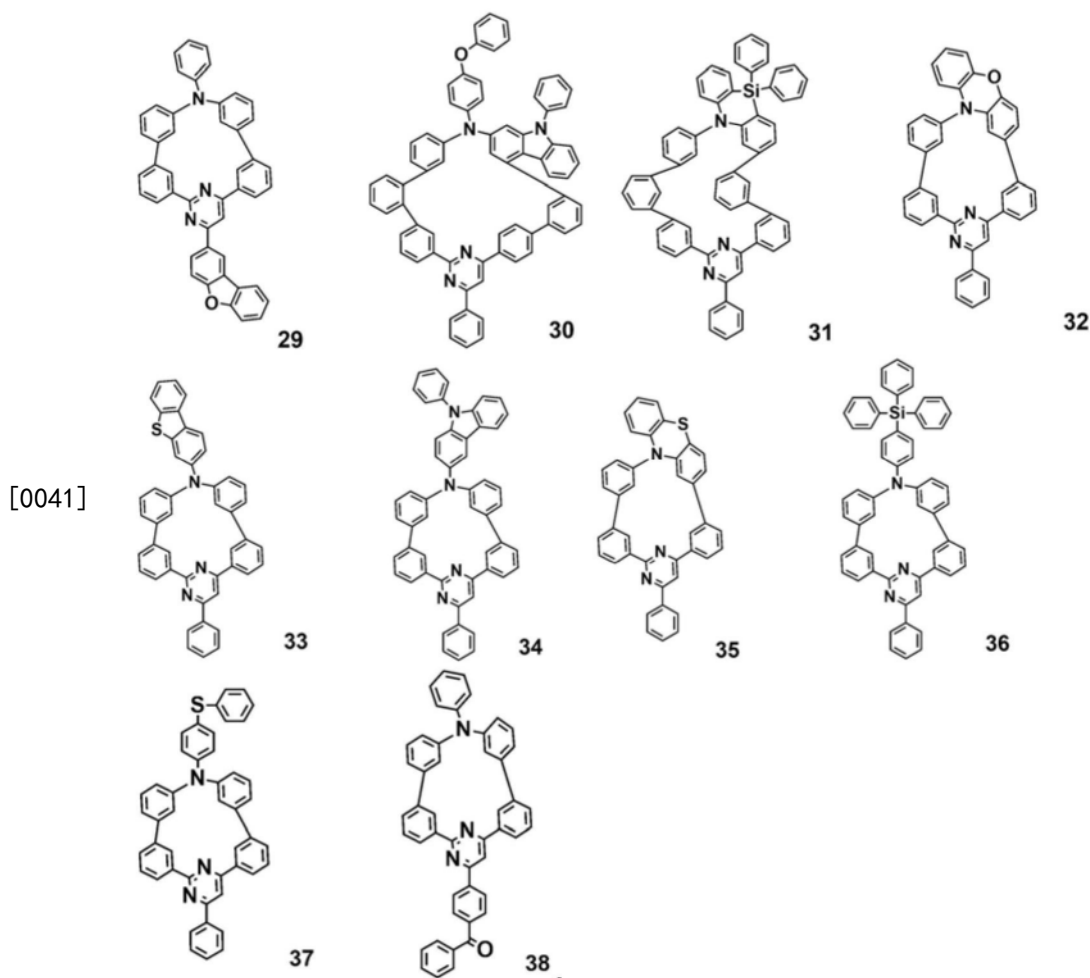
7



8



[0040]



[0042] 在本公开的一些实施方式中,有机电致发光装置包括第一电极、在第一电极上的空穴传输区、在空穴传输区上并且包括根据本公开的实施方式的含氮化合物的发光层、在发光层上的电子传输区和在电子传输区上的第二电极。并且第一电极和第二电极各自独立地包括Ag、Mg、Cu、Al、Pt、Pd、Au、Ni、Nd、Ir、Cr、Li、Ca、LiF/Ca、LiF/Al、Mo、Ti、其化合物或其混合物;或其氧化物。

[0043] 在一些实施方式中,发光层可发射延迟荧光。

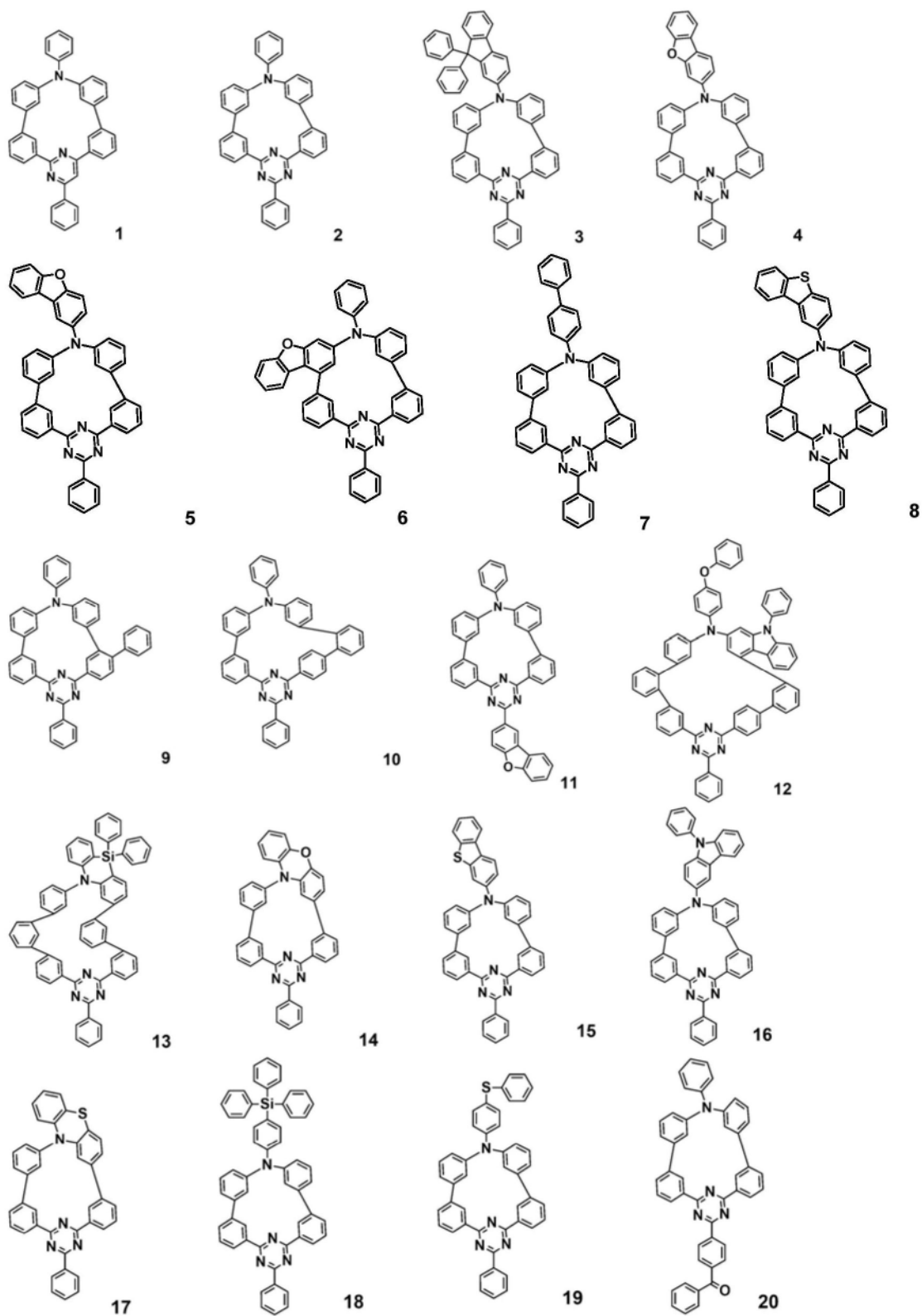
[0044] 在一些实施方式中,发光层可以是热激活延迟荧光的发光层,其可发射蓝光。

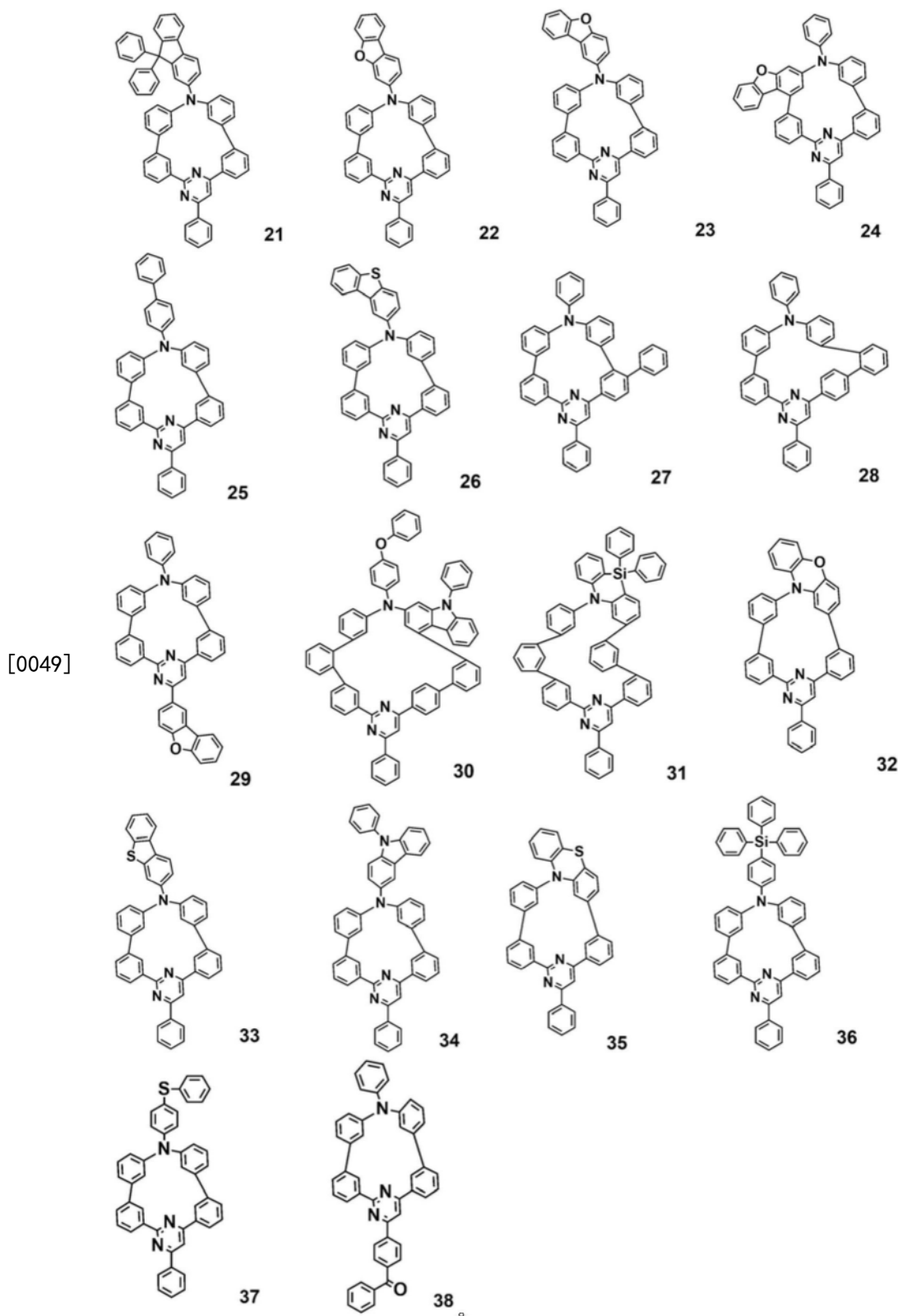
[0045] 在一些实施方式中,发光层可包括主体和掺杂剂,并且掺杂剂可为由式1表示的含氮化合物。

[0046] 在一些实施方式中,主体可包括下述中的至少一种:双[2-(二苯基膦)苯基]醚氧化物(DPEPO)、4,4'-双(咔唑-9-基)联苯(CBP)、1,3-双(咔唑-9-基)苯(mCP)、2,8-双(二苯基磷酰基)二苯并[b,d]呋喃(PPF)、4,4',4''-三(咔唑-9-基)-三苯胺(TcTa)、1,3,5-三(N-苯基苯并咪唑-2-基)苯(TPBi)、3,3'-二(9H-咔唑-9-基)-1,1'-联苯(mCBP)和2,4,6-三(联苯-3-基)-1,3,5-三嗪(T2T)。

[0047] 在一些实施方式中,发光层可包括化合物组1中表示的至少一种含氮化合物:化合物组1

[0048]





### 附图说明

[0050] 包括附图以使能够进一步理解本公开,并且该附图被并入且构成本说明书的一部分。附图图示了本公开的示例性实施方式,并且与说明书一起,用于阐释本公开的原理。附图中:

- [0051] 图1是示意性图解根据本公开的实施方式的有机电致发光装置的截面图；  
[0052] 图2是示意性图解根据本公开的实施方式的有机电致发光装置的截面图；和  
[0053] 图3是示意性图解根据本公开的实施方式的有机电致发光装置的截面图。

### 具体实施方式

[0054] 本公开的方面可具有各种修饰并且可体现为不同的形式，并且将详细参考附图来阐释示例性实施方式。但是，本公开可体现为不同的形式并且不应解释为限于本文列举的实施方式。相反，本公开的精神和技术范围中包括的所有的修饰、等同物和替换物理解为包括在本公开中。

[0055] 通篇相同的附图标记指示相同的元件，并且可不提供其重复说明。附图中，为了图解的清楚，可放大结构、层、膜、板、区域等的尺寸。应当理解，尽管术语第一、第二等可在本文用于描述各种元件，但是这些元件不应受这些术语的限制。这些术语仅仅用于区分一个元件与另一元件。因此，第一元件可以可替换地称为第二元件而不背离本公开的教导。类似地，第二元件可以可替换地称为第一元件。如本文所使用，单数形式旨在也包括复数形式，除非上下文另外明确指出。

[0056] 将进一步理解，术语“包括(comprises)”和/或“包括(comprising)”当在本说明书中使用，指存在叙述的特征、数值、步骤、操作、元件、部件，或其组合，但是不排除存在或增加一个或多个其他特征、数值、步骤、操作、元件、部件，或其组合。也将理解，当层、膜、区域、板等被称为“在另一部件上”时，其可“直接在另一部件上”，或也可存在中间层。相反，当元件被称为“直接在另一元件上”时，不存在中间元件。

[0057] 比如“……中的至少一个”、“……中的一个”、“选自”、“选自……中的至少一个”和“选自……中的一个”的表述，当在一系列要素之前时，修饰整列要素而不修饰列表中的单个要素。

[0058] 在说明书中，-\*指连接位置。

[0059] 在说明书中，术语“取代的或未取代的”指未取代的或被选自由以下组成的组中的至少一个取代基取代的选择：氘原子、卤素原子、氰基、硝基、氨基、甲硅烷基、硼基、氧化膦基、硫化膦基、烷基、烯基、芳基和杂环基。另外，每个取代基本身可以是取代的或未取代的。例如，联苯基可视为芳基，或可以可替换地称为用苯基取代的苯基。

[0060] 在说明书中，提及卤素原子可包括氟原子、氯原子、溴原子和碘原子。

[0061] 在说明书中，烷基可以是直链、支链或环状类型或种类的烷基。烷基的碳数(例如，烷基中包括的碳原子数)可以是1至50、1至30、1至20、1至10或1至6。烷基的非限制性实例可包括甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、仲丁基、叔丁基、异丁基、2-乙基丁基、3,3-二甲基丁基、正戊基、异戊基、新戊基、叔戊基、环戊基、1-甲基戊基、3-甲基戊基、2-乙基戊基、4-甲基-2-戊基、正己基、1-甲基己基、2-乙基己基、2-丁基己基、环己基、4-甲基环己基、4-叔丁基环己基、正庚基、1-甲基庚基、2,2-二甲基庚基、2-乙基庚基、2-丁基庚基、正辛基、叔辛基、2-乙基辛基、2-丁基辛基、2-己基辛基、3,7-二甲基辛基、环辛基、正壬基、正癸基、金刚烷基、2-乙基癸基、2-丁基癸基、2-己基癸基、2-辛基癸基、正十一烷基、正十二烷基、2-乙基十二烷基、2-丁基十二烷基、2-己基十二烷基、2-辛基十二烷基、正十三烷基、正十四烷基、正十五烷基、正十六烷基、2-乙基十六烷基、2-丁基十六烷基、2-己基十六烷基、2-辛基十六

烷基、正十七烷基、正十八烷基、正十九烷基、正二十烷基、2-乙基二十烷基、2-丁基二十烷基、2-己基二十烷基、2-辛基二十烷基、正二十一烷基、正二十二烷基、正二十三烷基、正二十四烷基、正二十五烷基、正二十六烷基、正二十七烷基、正二十八烷基、正二十九烷基、正三十烷基等。

[0062] 在说明书中,芳基可为源自或包括芳族烃环的官能团或取代基。芳基可为单环芳基或多环芳基。芳基中用于成环的碳数(例如,芳基环中包括的碳数)可为6至30、6至20或6至15。芳基的非限制性实例可包括苯基、萘基、茚基、蒽基、菲基、联苯基、三联苯基、四联苯基、五联苯基、六联苯基、苯并菲基、苝基、苯并荧蒽基、屈基等。

[0063] 在说明书中,茚基可以是取代的(例如,在9碳位),并且两个取代基可彼此结合而形成螺环结构。

[0064] 在说明书中,杂芳基可以是包括O、N、P、Si和S中的至少一个作为杂原子的杂芳基。用于形成杂芳基的环的碳数(例如,杂芳基环中包括的碳数)可以是2至30或2至20。杂芳基可以为单环杂芳基或多环杂芳基。例如,多环杂芳基可具有双环结构或三环结构。杂芳基的非限制性实例可包括噻吩基、呋喃基、吡咯基、咪唑基、噻唑基、噁唑基、噁二唑基、三唑基、吡啶基、联吡啶基、嘧啶基、三嗪基、吡啶基、哒嗪基、吡嗪基、喹啉基、喹唑啉基、喹喔啉基、吩噻嗪基、酞嗪基、吡啶并嘧啶基、吡啶并吡嗪基、吡嗪并吡嗪基、异喹啉基、吲哚基、呋唑基、N-芳基呋唑基、N-杂芳基呋唑基、N-烷基呋唑基、苯并噁唑基、苯并咪唑基、苯并噻唑基、苯并呋唑基、苯并噻吩基、二苯并噻吩基、噻吩并噻吩基、苯并呋喃基、菲咯啉基、异噻唑基、噻二唑基、吩噻嗪基、二苯并噻咯基、二苯并呋喃基等。

[0065] 在说明书中,甲硅烷基可以是烷基甲硅烷基或芳基甲硅烷基。甲硅烷基的非限制性实例可包括三甲基甲硅烷基、三乙基甲硅烷基、叔丁基二甲基甲硅烷基、乙烯基二甲基甲硅烷基、丙基二甲基甲硅烷基、三苯基甲硅烷基、二苯基甲硅烷基、苯基甲硅烷基等。

[0066] 在说明书中,硼基可以是烷基硼基或芳基硼基。硼基的非限制性实例可包括三甲基硼基、三乙基硼基、叔丁基二甲基硼基、三苯基硼基、二苯基硼基、苯基硼基等。

[0067] 在说明书中,烯基可为直链或支链的。烯基的碳数不具体限制,并且可为2至30、2至20或2至10。烯基的非限制性实例可包括乙烯基、1-丁烯基、1-戊烯基、1,3-丁二烯基芳基、苯乙烯基、苯乙炔基乙烯基等。

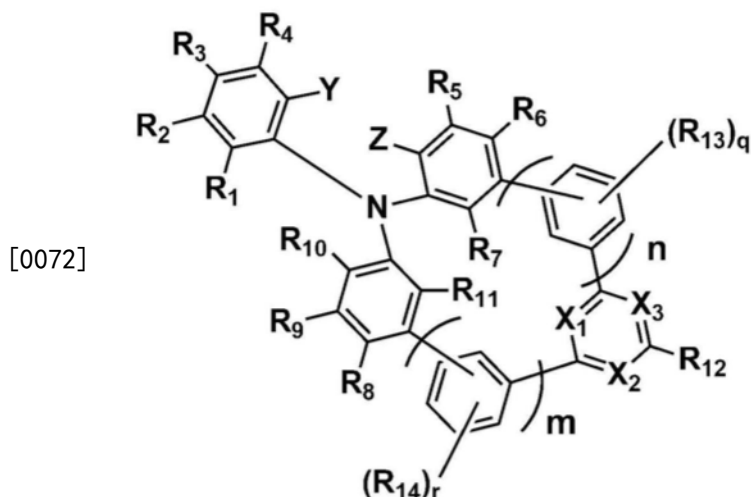
[0068] 杂环基可包括脂族杂环基和/或芳族杂环基。烃环和杂环基可为单环或多环。另外,通过相邻基团彼此结合而形成的环可以与另一个环连接以形成螺环结构。杂环基的成环碳原子数(例如,杂环基的环中包括的碳原子数)可为2至30或2至20。

[0069] 下文,将阐释根据本公开的实施方式的含氮化合物。

[0070] 根据本公开的实施方式的含氮化合物可由式1表示:

[0071] 式1



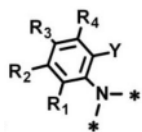


[0073] 在式1中,  $X_1$ 、 $X_2$ 和 $X_3$ 中的至少两个可为N,并且其余可为 $CR_{15}$ 。 $Y$ 和 $Z$ 可各自独立地为氢原子、氘原子、 $OR_{16}$ 、 $SR_{17}$ 、 $CR_{18}R_{19}R_{20}$ 或 $SiR_{21}R_{22}R_{23}$ ,可选地, $Y$ 和 $Z$ 可彼此结合(例如,连接)而形成环。在式1中, $R_1$ 至 $R_{14}$ 可各自独立地为氢原子、氘原子、 $OR_{24}$ 、 $SR_{25}$ 、 $(C=O)R_{26}$ 、 $NR_{27}R_{28}$ 、 $CR_{29}R_{30}R_{31}$ 、 $SiR_{32}R_{33}R_{34}$ 、取代的或未取代的具有1至20个碳原子的烷基、取代的或未取代的具有6至30个成环碳原子的芳基或取代的或未取代的具有2至30个成环碳原子的杂芳基,可选地, $R_1$ 至 $R_{14}$ 可各自独立地与相邻基团结合(例如,连接)而形成环。另外, $R_{15}$ 至 $R_{34}$ 可各自独立地为氢原子、氘原子、卤素原子、氰基、取代的或未取代的甲硅烷基、取代的或未取代的具有1至20个碳原子的烷基、取代的或未取代的具有6至30个成环碳原子的芳基或取代的或未取代的具有2至30个成环碳原子的杂芳基,可选地, $R_{15}$ 至 $R_{34}$ 可各自独立地与相邻基团结合(例如,连接)而形成环。

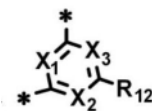
[0074] 在式1中, $n$ 和 $m$ 可各自独立地为1或2,且 $q$ 和 $r$ 可各自独立地为选自0至4的整数。

[0075] 由式1表示的根据本公开的实施方式的含氮化合物可具有环状分子结构,其在环中包括氮原子。根据本公开的实施方式的含氮化合物可为具有环状分子结构的化合物,其包括芳基氨基和在其芳族环中包括两个或三个氮原子的吡嗪基。在根据本公开的实施方式的环状含氮化合物中,多个取代的或未取代的亚芳基可位于芳基氨基氮原子和吡嗪基之间。取代的或未取代的亚芳基可为连接芳基氨基氮原子和吡嗪基的连接基团。

[0076] 在根据本公开的实施方式的含氮化合物中,如由式1表示,相当于芳基氨基的部分



可为或充当电子供体,并且相当于吡嗪基的部分



可为或充当电子受体。

但是,本公开的实施方式不限于此。

[0077] 在式1中, $Y$ 和 $Z$ 可各自独立地为氢原子、氘原子、 $OR_{16}$ 、 $SR_{17}$ 、 $CR_{18}R_{19}R_{20}$ 或 $SiR_{21}R_{22}R_{23}$ 。在一些实施方式中,例如, $Y$ 和 $Z$ 都(例如,同时)可为氢原子。另外, $R_{16}$ 至 $R_{23}$ 可各自独立地为取代的或未取代的苯基。

[0078] 在一些实施方式中,当 $Y$ 和 $Z$ 各自独立地为 $CR_{18}R_{19}R_{20}$ 或 $SiR_{21}R_{22}R_{23}$ 时, $R_{18}$ 、 $R_{19}$ 和 $R_{20}$ 中两个相邻的取代基可彼此结合(例如,连接)而形成环,或 $R_{21}$ 、 $R_{22}$ 和 $R_{23}$ 中两个相邻的取代基可彼此结合(例如,连接)而形成环。另外, $Y$ 和 $Z$ 可彼此结合(例如,连接)而形成环。例如, $Y$ 和 $Z$ 的相邻的取代基可彼此结合而形成杂环。

[0079] 式1的 $R_1$ 至 $R_{14}$ 可各自独立地为氢原子、氘原子、 $OR_{24}$ 、 $SR_{25}$ 、 $(C=O)R_{26}$ 、 $NR_{27}R_{28}$ 、 $CR_{29}R_{30}R_{31}$ 、 $SiR_{32}R_{33}R_{34}$ 、取代的或未取代的具有1至20个碳原子的烷基、取代的或未取代的具有6至30个成环碳原子的芳基或取代的或未取代的具有2至30个成环碳原子的杂芳基。例如, $R_1$ 至 $R_{14}$ 可各自独立地为氢原子、 $OR_{24}$ 、 $SR_{25}$ 、 $(C=O)R_{26}$ 、 $NR_{27}R_{28}$ 、 $CR_{29}R_{30}R_{31}$ 、 $SiR_{32}R_{33}R_{34}$ 或取代的或未取代的苯基。

[0080] 在一些实施方式中, $R_{24}$ 至 $R_{34}$ 可与相邻取代基结合而形成环。在一些实施方式中,例如, $R_{24}$ 至 $R_{34}$ 可各自独立地为氢原子、取代的或未取代的具有1至20个碳原子的烷基或取代的或未取代的具有6至30个成环碳原子的芳基。例如, $R_{24}$ 至 $R_{34}$ 可各自独立地为氢原子、甲基或苯基。

[0081] 在一些实施方式中,在式1的 $R_1$ 至 $R_{14}$ 中,相邻取代基可彼此结合(例如,连接)而形成环。例如, $R_1$ 至 $R_{14}$ 中,相邻取代基可彼此结合(例如,连接)而形成取代的或未取代的茚、取代的或未取代的二苯并噻吩、取代的或未取代的二苯并呋喃或取代的或未取代的咔唑。

[0082] 在式1中, $R_{12}$ 可为取代的或未取代的苯基。在一些实施方式中,例如, $R_{12}$ 可为未取代的苯基。在一些实施方式中, $R_{12}$ 可为取代的或未取代的二苯并呋喃基,例如, $R_{12}$ 可为未取代的二苯并呋喃基。

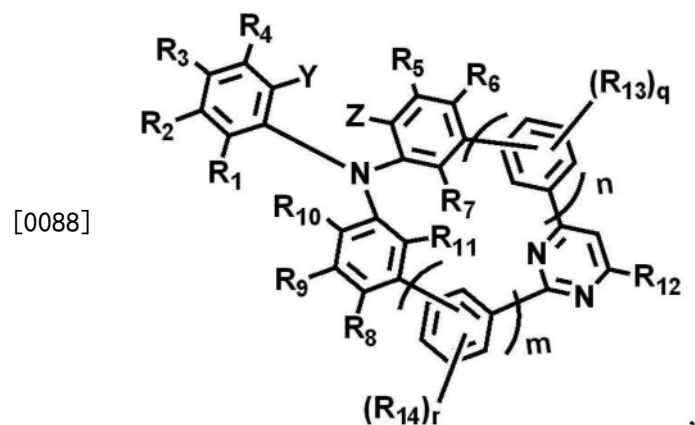
[0083] 在一些实施方式中,在式1中, $q$ 和 $r$ 可各自独立地为选自0至4的整数。当 $q$ 和 $r$ 各自为2或更大的整数时,多个 $R_{13}$ 和多个 $R_{14}$ 可各自独立地是相同或不同的。

[0084] 在式1中, $X_1$ 至 $X_3$ 中的至少两个可为N。在一些实施方式中,例如, $X_1$ 可为N,并且 $X_2$ 和 $X_3$ 中的至少一个可为N。在一些实施方式中, $X_1$ 和 $X_2$ 可为N,并且 $X_3$ 可为 $CR_{15}$ ;  $X_1$ 和 $X_3$ 可为N并且 $X_2$ 可为 $CR_{15}$ ;或所有的 $X_1$ 至 $X_3$ 可为N。例如,在式1中,包括 $X_1$ 至 $X_3$ 的杂环可为嘧啶或三嗪。

[0085] 在式1中,当 $X_1$ 至 $X_3$ 中的两个为N,并且剩余的为 $CR_{15}$ 时, $R_{15}$ 可为氢原子、氘原子、 $OR_{24}$ 、 $SR_{25}$ 、 $CR_{26}R_{27}R_{28}$ 、 $SiR_{29}R_{30}R_{31}$ 、取代的或未取代的具有1至20个碳原子的烷基、取代的或未取代的具有6至30个成环碳原子的芳基或取代的或未取代的具有2至30个成环碳原子的杂芳基。在一些实施方式中, $R_{15}$ 可为氢原子。

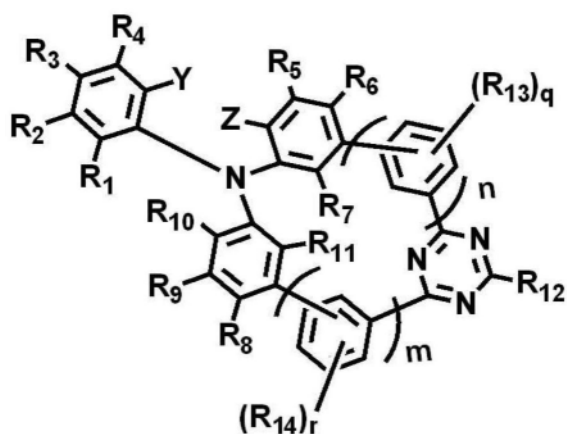
[0086] 在一些实施方式中,由式1表示的含氮化合物可进一步由式1-1或式1-2表示。式1-1相当于其中 $X_1$ 和 $X_2$ 为N的情况,并且式1-2相当于其中所有的 $X_1$ 至 $X_3$ 为N的情况:

[0087] 式1-1



[0089] 式1-2

[0090]



[0091] 在式1-1和式1-2中, Y、Z、n、m、R<sub>1</sub>至R<sub>34</sub>、q和r可各自独立地与式1中的定义相同。

[0092] 在根据本公开的实施方案的含氮化合物中, 如由式1表示, n和m可各自独立地为1或2。在一些实施方式中, 例如, n和m可都(例如, 同时)为1, 或n和m中的一个可为1并且其余可为2, 或n和m都可为2。

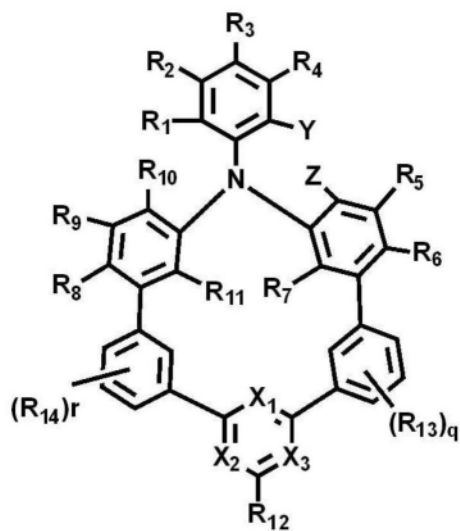
[0093] 在式1中, 当n和m都为1时, 根据本公开的实施方案的含氮化合物可为包括五个连接环的环状化合物。另外, 当n和m中的一个为1并且另一个为2时, 根据本公开的实施方案的含氮化合物可为包括六个连接环的环状化合物, 并且当n和m都为2时, 根据本公开的实施方案的含氮化合物可为包括七个连接环的环状化合物。

[0094] 在一些实施方式中, 由式1表示的含氮化合物可进一步由式1-3或式1-4表示。

[0095] 式1-3相当于其中n和m都为1的情况, 并且式1-4表示其中n和m都为2的情况:

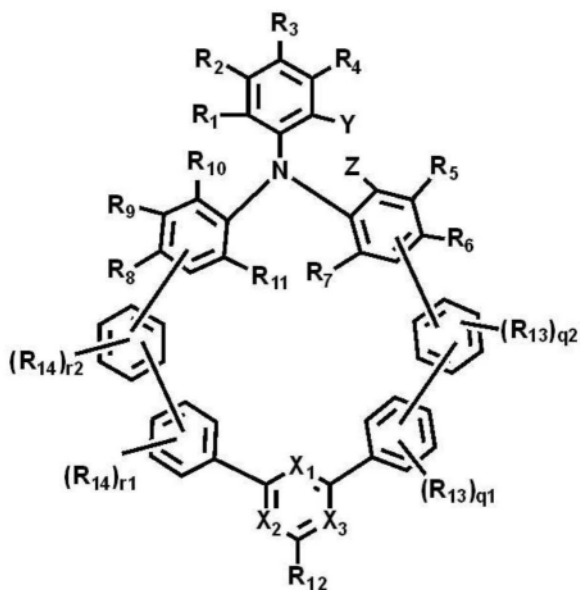
[0096] 式1-3

[0097]



[0098] 式1-4

[0099]



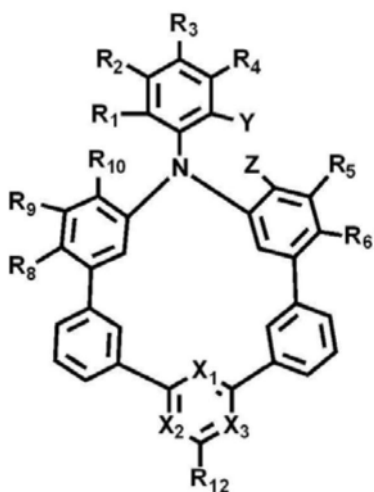
[0100] 在式1-3和式1-4中,  $q_1$ 、 $q_2$ 、 $r_1$ 和 $r_2$ 可各自独立地为选自0至4的整数。另外,在式1-3和式1-4中,  $X_1$ 至 $X_3$ 、 $Y$ 、 $Z$ 、 $R_1$ 至 $R_{34}$ 、 $q$ 和 $r$ 可各自独立地与式1中的定义相同。

[0101] 在式1-3和式1-4中,当 $q_1$ 、 $q_2$ 、 $r_1$ 和 $r_2$ 各自独立地为2或更大的整数时,多个 $R_{13}$ 和多个 $R_{14}$ 可各自独立地是相同的或不同的。

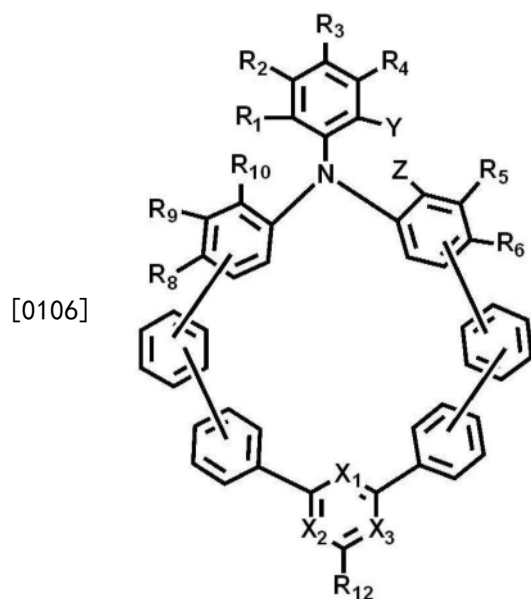
[0102] 在一些实施方式中,由式1表示的含氮化合物可进一步由式1-5或式1-6表示。式1-5相当于其中 $n$ 和 $m$ 都(例如,同时)为1的情况,并且式1-6相当于其中 $n$ 和 $m$ 都为2的情况。式1-5相当于其中 $q$ 和 $r$ 都为0的情况,并且式1-6相当于其中 $q_1$ 、 $q_2$ 、 $r_1$ 和 $r_2$ 都为0的情况。另外,式1-5和式1-6相当于其中 $R_7$ 和 $R_{11}$ 都为氢原子的情况。

[0103] 式1-5

[0104]



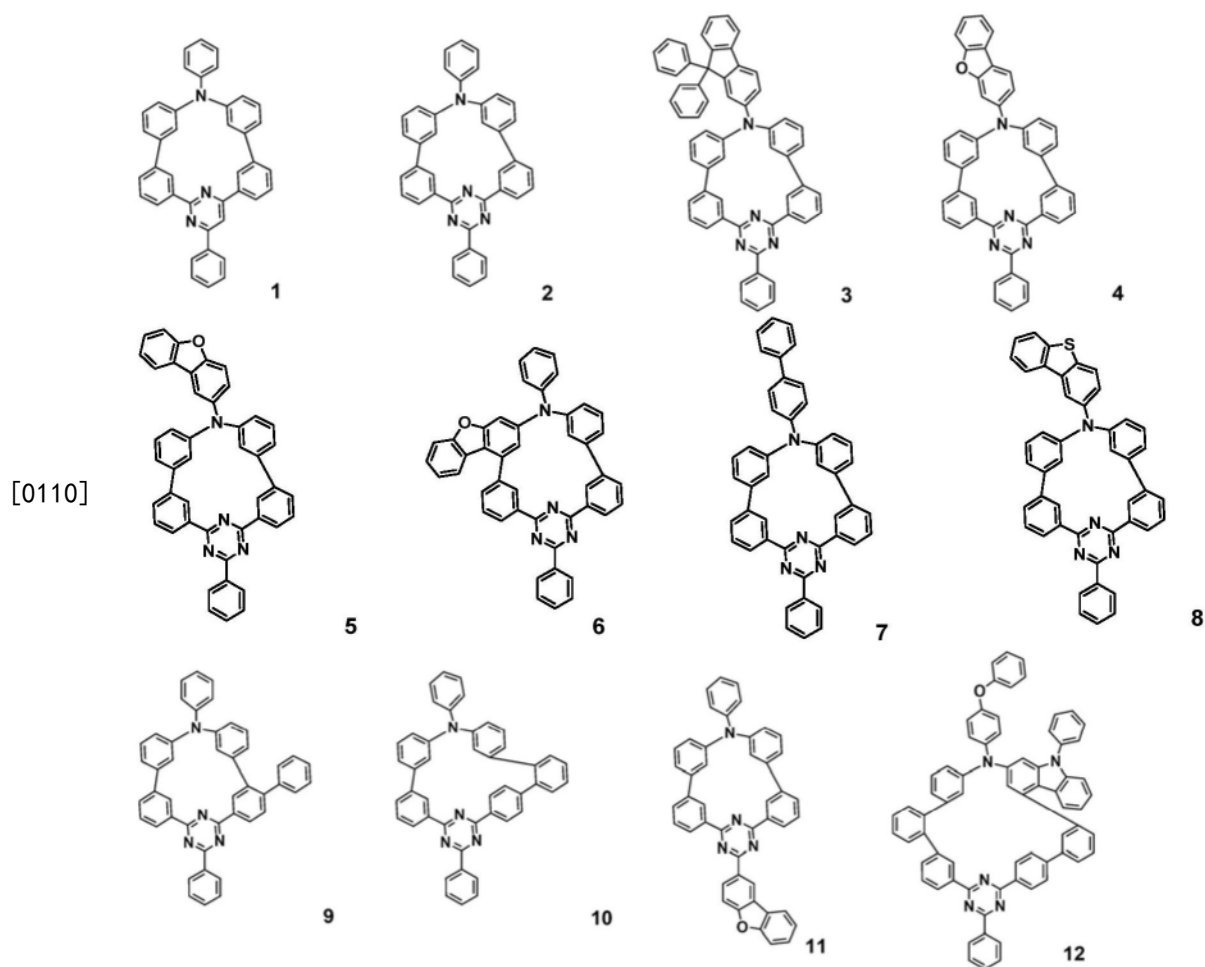
[0105] 式1-6



[0107] 在式1-5和式1-6中,  $X_1$ 至 $X_3$ 、Y、Z、 $R_1$ 至 $R_6$ 、 $R_8$ 、 $R_9$ 、 $R_{10}$ 和 $R_{12}$ 可各自独立地与式1中的定义相同。

[0108] 如由式1表示的根据本公开的实施方式的含氮化合物可为由化合物组1中表示的化合物中的一个:

[0109] 化合物组1



**13**

**16**


17

20

24


c1ccc(cc1)-c2cc(ccc2N2C3=CC=CC=C3C=C4C(=N2)C(=C5C=CC(=C6C=CC(=CC=C6)C=C5)C=C4)C3=CC=CC=C3

25



27

28

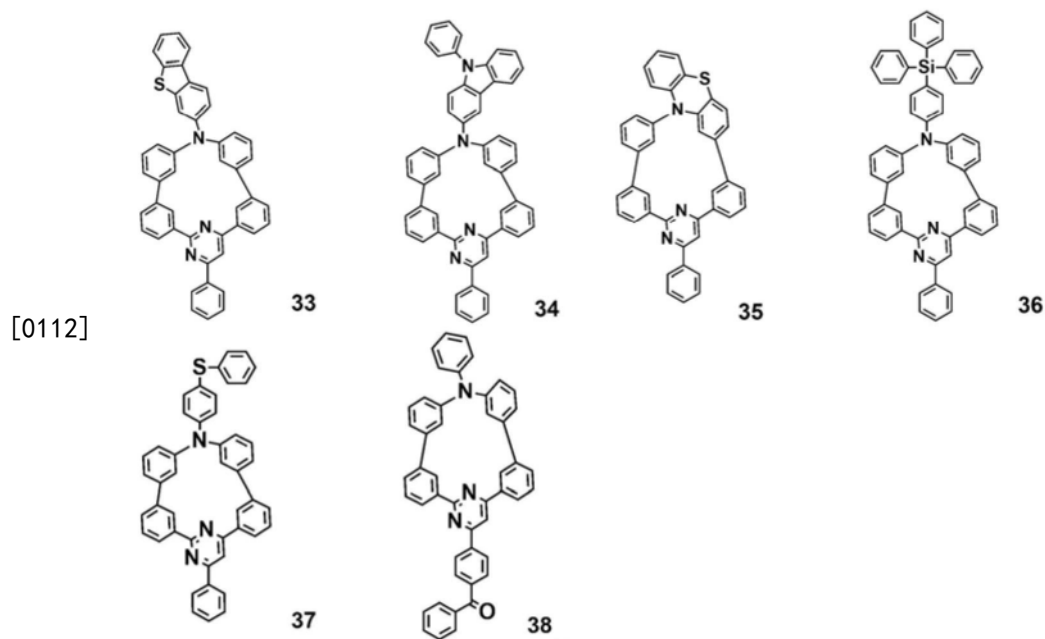


**29**

c1ccc(cc1)Oc2ccc(cc2)N(c3ccccc3)c4ccccc4c5ccccc5c6ccccc6c7ccccc7c8ccccc8c9ccccc9c10ccccc10c11ccccc11c12ccccc12c13ccccc13c14ccccc14c15ccccc15c16ccccc16c17ccccc17c18ccccc18c19ccccc19c20ccccc20c21ccccc21c22ccccc22c23ccccc23c24ccccc24c25ccccc25c26ccccc26c27ccccc27c28ccccc28c29ccccc29c30ccccc30c31ccccc31c32ccccc32c33ccccc33c34ccccc34c35ccccc35c36ccccc36c37ccccc37c38ccccc38c39ccccc39c40ccccc40c41ccccc41c42ccccc42c43ccccc43c44ccccc44c45ccccc45c46ccccc46c47ccccc47c48ccccc48c49ccccc49c50ccccc50c51ccccc51c52ccccc52c53ccccc53c54ccccc54c55ccccc55c56ccccc56c57ccccc57c58ccccc58c59ccccc59c60ccccc60c61ccccc61c62ccccc62c63ccccc63c64ccccc64c65ccccc65c66ccccc66c67ccccc67c68ccccc68c69ccccc69c70ccccc70c71ccccc71c72ccccc72c73ccccc73c74ccccc74c75ccccc75c76ccccc76c77ccccc77c78ccccc78c79ccccc79c80ccccc80c81ccccc81c82ccccc82c83ccccc83c84ccccc84c85ccccc85c86ccccc86c87ccccc87c88ccccc88c89ccccc89c90ccccc90c91ccccc91c92ccccc92c93ccccc93c94ccccc94c95ccccc95c96ccccc96c97ccccc97c98ccccc98c99ccccc99c100ccccc100c101ccccc101c102ccccc102c103ccccc103c104ccccc104c105ccccc105c106ccccc106c107ccccc107c108ccccc108c109ccccc109c110ccccc110c111ccccc111c112ccccc112c113ccccc113c114ccccc114c115ccccc115c116ccccc116c117ccccc117c118ccccc118c119ccccc119c120ccccc120c121ccccc121c122ccccc122c123ccccc123c124ccccc124c125ccccc125c126ccccc126c127ccccc127c128ccccc128c129ccccc129c130ccccc130c131ccccc131c132ccccc132c133ccccc133c134ccccc134c135ccccc135c136ccccc136c137ccccc137c138ccccc138c139ccccc139c140ccccc140c141ccccc141c142ccccc142c143ccccc143c144ccccc144c145ccccc145c146ccccc146c147ccccc147c148ccccc148c149ccccc149c150ccccc150c151ccccc151c152ccccc152c153ccccc153c154ccccc154c155ccccc155c156ccccc156c157ccccc157c158ccccc158c159ccccc159c160ccccc160c161ccccc161c162ccccc162c163ccccc163c164ccccc164c165ccccc165c166ccccc166c167ccccc167c168ccccc168c169ccccc169c170ccccc170c171ccccc171c172ccccc172c173ccccc173c174ccccc174c175ccccc175c176ccccc176c177ccccc177c178ccccc178c179ccccc179c180ccccc180c181ccccc181c182ccccc182c183ccccc183c184ccccc184c185ccccc185c186ccccc186c187ccccc187c188ccccc188c189ccccc189c190ccccc190c191ccccc191c192ccccc192c193ccccc193c194ccccc194c195ccccc195c196ccccc196c197ccccc197c198ccccc198c199ccccc199c200ccccc200c201ccccc201c202ccccc202c203ccccc203c204ccccc204c205ccccc205c206ccccc206c207ccccc207c208ccccc208c209ccccc209c210ccccc210c211ccccc211c212ccccc212c213ccccc213c214ccccc214c215ccccc215c216ccccc216c217ccccc217c218ccccc218c219ccccc219c220ccccc220c221ccccc221c222ccccc222c223ccccc223c224ccccc224c225ccccc225c226ccccc226c227ccccc227c228ccccc228c229ccccc229c230ccccc230c231ccccc231c232ccccc232c233ccccc233c234ccccc234c235ccccc235c236ccccc236c237ccccc237c238ccccc238c239ccccc239c240ccccc240c241ccccc241c242ccccc242c243ccccc243c244ccccc244c245ccccc245c246ccccc246c247ccccc247c248ccccc248c249ccccc249c250ccccc250c251ccccc251c252ccccc252c253ccccc253c254ccccc254c255ccccc255c256ccccc256c257ccccc257c258ccccc258c259ccccc259c260ccccc260c261ccccc261c262ccccc262c263ccccc263c264ccccc264c265ccccc265c266ccccc266c267ccccc267c268ccccc268c269ccccc269c270ccccc270c271ccccc271c272ccccc272c273ccccc273c274ccccc274c275ccccc275c276ccccc276c277ccccc277c278ccccc278c279ccccc279c280ccccc280c281ccccc281c282ccccc282c283ccccc283c284ccccc284c285ccccc285c286ccccc286c287ccccc287c288ccccc288c289ccccc289c290ccccc290c291ccccc291c292ccccc292c293ccccc293c294ccccc294c295ccccc295c296ccccc296c297ccccc297c298ccccc298c299ccccc299c300ccccc300c301ccccc301c302ccccc302c303ccccc303c304ccccc304c305ccccc305c306ccccc306c307ccccc307c308ccccc308c309ccccc309c310ccccc310c311ccccc311c312ccccc312c313ccccc313c314ccccc314c315ccccc315c316ccccc316c317ccccc317c318ccccc318c319ccccc319c320ccccc320c321ccccc321c322ccccc322c323ccccc323c324ccccc324c325ccccc325c326ccccc326c327ccccc327c328ccccc328c329ccccc329c330ccccc330c331ccccc331c332ccccc332c333ccccc333c334ccccc334c335ccccc335c336ccccc336c337ccccc337c338ccccc338c339ccccc339c340ccccc340c341ccccc341c342ccccc342c343ccccc343c344ccccc344c345ccccc345c346ccccc346c347ccccc347c348ccccc348c349ccccc349c350ccccc350c351ccccc351c352ccccc352c353ccccc353c354ccccc354c355ccccc355c356ccccc356c357ccccc357c358ccccc358c359ccccc359c360ccccc360c361ccccc361c362ccccc362c363ccccc363c364ccccc364c365ccccc365c366ccccc366c367ccccc367c368ccccc368c369ccccc369c370ccccc370c371ccccc371c372ccccc372c373ccccc373c374ccccc374c375ccccc375c376ccccc376c377ccccc377c378ccccc378c379ccccc379c380ccccc380c381ccccc381c382ccccc382c383ccccc383c384ccccc384c385ccccc385c386ccccc386c387ccccc387c388ccccc388c389ccccc389c390ccccc390c391ccccc391c392ccccc392c393ccccc393c394ccccc394c395ccccc395c396ccccc396c397ccccc397c398ccccc398c399ccccc399c400ccccc400c401ccccc401c402ccccc402c403ccccc403c404ccccc404c405ccccc405c406ccccc406c407ccccc407c408ccccc408c409ccccc409c410ccccc410c411ccccc411c412ccccc412c413ccccc413c414ccccc414c415ccccc415c416ccccc416c417ccccc417c418ccccc418c419ccccc419c420ccccc420c421ccccc421c422ccccc422c423ccccc423c424ccccc424c425ccccc425c426ccccc426c427ccccc427c428ccccc428c429ccccc429c430ccccc430c431ccccc431c432ccccc432c433ccccc433c434ccccc434c435ccccc435c436ccccc436c437ccccc437c438ccccc438c439ccccc439c440ccccc440c441ccccc441c442ccccc442c443ccccc443c444ccccc444c445ccccc445c446ccccc446c447ccccc447c448ccccc448c449ccccc449c450ccccc450c451ccccc451c452ccccc452c453ccccc453c454ccccc454c455ccccc455c456ccccc456c457ccccc457c458ccccc458c459ccccc459c460ccccc460c461ccccc461c462ccccc462c463ccccc463c464ccccc464c465ccccc465c466ccccc466c467ccccc467c468ccccc468c469ccccc469c470ccccc470c471ccccc471c472ccccc472c473ccccc473c474ccccc474c475ccccc475c476ccccc476c477ccccc477c478ccccc478c479ccc1ccc(cc1)-c2cc(ccc2)-c3cc(ccc3)-c4cc(ccc4)-c5cc(ccc5)-c6cc(ccc6)-c7cc(ccc7)-c8cc(ccc8)-c9cc(ccc9)-c10cc(ccc10)-c11cc(ccc11)-c12cc(ccc12)-c13cc(ccc13)-c14cc(ccc14)-c15cc(ccc15)-c16cc(ccc16)-c17cc(ccc17)-c18cc(ccc18)-c19cc(ccc19)-c20cc(ccc20)-c21cc(ccc21)-c22cc(ccc22)-c23cc(ccc23)-c24cc(ccc24)-c25cc(ccc25)-c26cc(ccc26)-c27cc(ccc27)-c28cc(ccc28)-c29cc(ccc29)-c30cc(ccc30)-c31cc(ccc31)-c32cc(ccc32)-c33cc(ccc33)-c34cc(ccc34)-c35cc(ccc35)-c36cc(ccc36)-c37cc(ccc37)-c38cc(ccc38)-c39cc(ccc39)-c40cc(ccc40)-c41cc(ccc41)-c42cc(ccc42)-c43cc(ccc43)-c44cc(ccc44)-c45cc(ccc45)-c46cc(ccc46)-c47cc(ccc47)-c48cc(ccc48)-c49cc(ccc49)-c50cc(ccc50)-c51cc(ccc51)-c52cc(ccc52)-c53cc(ccc53)-c54cc(ccc54)-c55cc(ccc55)-c56cc(ccc56)-c57cc(ccc57)-c58cc(ccc58)-c59cc(ccc59)-c60cc(ccc60)-c61cc(ccc61)-c62cc(ccc62)-c63cc(ccc63)-c64cc(ccc64)-c65cc(ccc65)-c66cc(ccc66)-c67cc(ccc67)-c68cc(ccc68)-c69cc(ccc69)-c70cc(ccc70)-c71cc(ccc71)-c72cc(ccc72)-c73cc(ccc73)-c74cc(ccc74)-c75cc(ccc75)-c76cc(ccc76)-c77cc(ccc77)-c78cc(ccc78)-c79cc(ccc79)-c80cc(ccc80)-c81cc(ccc81)-c82cc(ccc82)-c83cc(ccc83)-c84cc(ccc84)-c85cc(ccc85)-c86cc(ccc86)-c87cc(ccc87)-c88cc(ccc88)-c89cc(ccc89)-c90cc(ccc90)-c91cc(ccc91)-c92cc(ccc92)-c93cc(ccc93)-c94cc(ccc94)-c95cc(ccc95)-c96cc(ccc96)-c97cc(ccc97)-c98cc(ccc98)-c99cc(ccc99)-c100cc(ccc100)-c101cc(ccc101)-c102cc(ccc102)-c103cc(ccc103)-c104cc(ccc104)-c105cc(ccc105)-c106cc(ccc106)-c107cc(ccc107)-c108cc(ccc108)-c109cc(ccc109)-c110cc(ccc110)-c111cc(ccc111)-c112cc(ccc112)-c113cc(ccc113)-c114cc(ccc114)-c115cc(ccc115)-c116cc(ccc116)-c117cc(ccc117)-c118cc(ccc118)-c119cc(ccc119)-c120cc(ccc120)-c121cc(ccc121)-c122cc(ccc122)-c123cc(ccc123)-c124cc(ccc124)-c125cc(ccc125)-c126cc(ccc126)-c127cc(ccc127)-c128cc(ccc128)-c129cc(ccc129)-c130cc(ccc130)-c131cc(ccc131)-c132cc(ccc132)-c133cc(ccc133)-c134cc(ccc134)-c135cc(ccc135)-c136cc(ccc136)-c137cc(ccc137)-c138cc(ccc138)-c139cc(ccc139)-c140cc(ccc140)-c141cc(ccc141)-c142cc(ccc142)-c143cc(ccc143)-c144cc(ccc144)-c145cc(ccc145)-c146cc(ccc146)-c147cc(ccc147)-c148cc(ccc148)-c149cc(ccc149)-c150cc(ccc150)-c151cc(ccc151)-c152cc(ccc152)-c153cc(ccc153)-c154cc(ccc154)-c155cc(ccc155)-c156cc(ccc156)-c157cc(ccc157)-c158cc(ccc158)-c159cc(ccc159)-c160cc(ccc160)-c161cc(ccc161)-c162cc(ccc162)-c163cc(ccc163)-c164cc(ccc164)-c165cc(ccc165)-c166cc(ccc166)-c167cc(ccc167)-c168cc(ccc168)-c169cc(ccc169)-c170cc(ccc170)-c171cc(ccc171)-c172cc(ccc172)-c173cc(ccc173)-c174cc(ccc174)-c175cc(ccc175)-c176cc(ccc176)-c177cc(ccc177)-c178cc(ccc178)-c179cc(ccc179)-c180cc(ccc180)-c181cc(ccc181)-c182cc(ccc182)-c183cc(ccc183)-c184cc(ccc184)-c185cc(ccc185)-c186cc(ccc186)-c187cc(ccc187)-c188cc(ccc188)-c189cc(ccc189)-c190cc(ccc190)-c191cc(ccc191)-c192cc(ccc192)-c193cc(ccc193)-c194cc(ccc194)-c195cc(ccc195)-c196cc(ccc196)-c197cc(ccc197)-c198cc(ccc198)-c199cc(ccc199)-c200cc(ccc200)-c201cc(ccc201)-c202cc(ccc202)-c203cc(ccc203)-c204cc(ccc204)-c205cc(ccc205)-c206cc(ccc206)-c207cc(ccc207)-c208cc(ccc208)-c209cc(ccc209)-c210cc(ccc210)-c211cc(ccc211)-c212cc(ccc212)-c213cc(ccc213)-c214cc(ccc214)-c215cc(ccc215)-c216cc(ccc216)-c217cc(ccc217)-c218cc(ccc218)-c219cc(ccc219)-c220cc(ccc220)-c221cc(ccc221)-c222cc(ccc222)-c223cc(ccc223)-c224cc(ccc224)-c225cc(ccc225)-c226cc(ccc226)-c227cc(ccc227)-c228cc(ccc228)-c229cc(ccc229)-c230cc(ccc230)-c231cc(ccc231)-c232cc(ccc232)-c233cc(ccc233)-c234cc(ccc234)-c235cc(ccc235)-c236cc(ccc236)-c237cc(ccc237)-c238cc(ccc238)-c239cc(ccc239)-c240cc(ccc240)-c241cc(ccc241)-c242cc(ccc242)-c243cc(ccc243)-c244cc(ccc244)-c245cc(ccc245)-c246cc(ccc246)-c247cc(ccc247)-c248cc(ccc248)-c249cc(ccc249)-c250cc(ccc250)-c251cc(ccc251)-c252cc(ccc252)-c253cc(ccc253)-c254cc(ccc254)-c255cc(ccc255)-c256cc(ccc256)-c257cc(ccc257)-c258cc(ccc258)-c259cc(ccc259)-c260cc(ccc260)-c261cc(ccc261)-c262cc(ccc262)-c263cc(ccc263)-c264cc(ccc264)-c265cc(ccc265)-c266cc(ccc266)-c267cc(ccc267)-c268cc(ccc268)-c269cc(ccc269)-c270cc(ccc270)-c271cc(ccc271)-c272cc(ccc272)-c273cc(ccc273)-c274cc(ccc274)-c275cc(ccc275)-c276cc(ccc276)-c277cc(ccc277)-c278cc(ccc278)-c279cc(ccc279)-c280cc(ccc280)-c281cc(ccc281)-c282cc(ccc282)-c283cc(ccc283)-c284cc(ccc284)-c285cc(ccc285)-c286cc(ccc286)-c287cc(ccc287)-c288cc(ccc288)-c289cc(ccc289)-c290cc(ccc290)-c291cc(ccc291)-c292cc(ccc292)-c293cc(ccc293)-c294cc(ccc294)-c295cc(ccc295)-c296cc(ccc296)-c297cc(ccc297)-c298cc(ccc298)-c299cc(ccc299)-c300cc(ccc300)-c301cc(ccc301)-c302cc(ccc302)-c303cc(ccc303)-c304cc(ccc304)-c305cc(ccc305)-c306cc(ccc306)-c307cc(ccc307)-c308cc(ccc308)-c309cc(ccc309)-c310cc(ccc310)-c311cc(ccc311)-c312cc(ccc312)-c313cc(ccc313)-c314cc(ccc314)-c315cc(ccc315)-c316cc(ccc316)-c317cc(ccc317)-c318cc(ccc318)-c319cc(ccc319)-c320cc(ccc320)-c321cc(ccc321)-c322cc(ccc322)-c323cc(ccc323)-c324cc(ccc324)-c325cc(ccc325)-c326cc(ccc326)-c327cc(ccc327)-c328cc(ccc328)-c329cc(ccc329)-c330cc(ccc330)-c331cc(ccc331)-c332cc(ccc332)-c333cc(ccc333)-c334cc(ccc334)-c335cc(ccc335)-c336cc(ccc336)-c337cc(ccc337)-c338cc(ccc338)-c339cc(ccc339)-c340cc(ccc340)-c341cc(ccc341)-c342cc(ccc342)-c343cc(ccc343)-c344cc(ccc344)-c345cc(ccc345)-c346cc(ccc346)-c347cc(ccc347)-c348cc(ccc348)-c349cc(ccc349)-c350cc(ccc350)-c351cc(ccc351)-c352cc(ccc352)-c353cc(ccc353)-c354cc(ccc354)-c355cc(ccc355)-c356cc(ccc356)-c357cc(ccc357)-c358cc(ccc358)-c359cc(ccc359)-c360cc(ccc360)-c361cc(ccc361)-c362cc(ccc362)-c363cc(ccc363)-c364cc(ccc364)-c365cc(ccc365)-c366cc(ccc366)-c367cc(ccc367)-c368cc(ccc368)-c369cc(ccc369)-c370cc(ccc370)-c371cc(ccc371)-c372cc(ccc372)-c373cc(ccc373)-c374cc(ccc374)-c375cc(ccc375)-c376cc(ccc376)-c377cc(ccc377)-c378cc(ccc378)-c379cc(ccc379)-c380cc(ccc380)-c381cc(ccc381)-c382cc(ccc382)-c383cc(ccc383)-c384cc(ccc384)-c385cc(ccc385)-c386cc(ccc386)-c387cc(ccc387)-c388cc(ccc388)-c389cc(ccc389)-c390cc(ccc390)-c391cc(ccc391)-c392cc(ccc392

32

[0111]



[0113] 根据本公开的实施方案的含氮化合物可具有环状分子结构,其中多个芳族环彼此连接,并且该化合物可具有卓越的耐热性和/或化学抗性。另外,根据本公开的实施方案的含氮化合物在环状分子结构中可包括充当供电子基团的芳基氨基和充当电子接受基团的吡嗪基,并且由此,可获得具有小的最低激发单重态能级(S1)和最低激发三重态能级(T1)之间能级差的发光材料。

[0114] 根据本公开的实施方案的含氮化合物的最低激发单重态能级(S1)和最低激发三重态能级(T1)之间的单重态-三重态能级差( $\Delta E_{ST}$ )可为约0.2eV或更小。根据本公开的实施方案的含氮化合物可用作作用于发射延迟荧光的材料。在一些实施方式中,含氮化合物可具有小的 $\Delta E_{ST}$ 值,并且可作用于热激活延迟荧光(TADF)的材料。

[0115] 根据本公开的实施方案的含氮化合物可用于有机电致发光装置中,并且可从而改善有机电致发光装置的发光效率。根据本公开的实施方案的含氮化合物可用作有机电致发光装置的位于相对的电极之间的发光层中的材料。在一些实施方式中,根据本公开的实施方案的含氮化合物可包括在发光层中作为热激活延迟荧光掺杂剂,以进一步改善有机电致发光装置的发光效率,例如,包括在发光层中以发射蓝光,以进一步改善发光效率。

[0116] 下文,将进一步详细阐释根据本公开的实施方案的有机电致发光装置。对上述根据本公开的实施方案的含氮化合物的提及将在根据本公开的实施方案的含氮化合物的以上描述的上下文中理解。

[0117] 图1至图3是示意性图解根据本公开的一个或多个示例性实施方案的有机电致发光装置的截面图。参考图1至图3,根据本公开的实施方案的有机电致发光装置10可包括可逐个层压(例如,以所述顺序堆叠)的第一电极EL1、空穴传输区HTR、发光层EML、电子传输区ETR和第二电极EL2。

[0118] 第一电极EL1和第二电极EL2可彼此相对设置(例如,可在沿着装置10的厚度方向堆叠的层的相对端上),并且多个有机层可位于第一电极EL1和第二电极EL2之间。多个有机层可包括空穴传输区HTR、发光层EML和电子传输区ETR。根据本公开的实施方案的有机电致发光装置10在发光层EML中可包括根据本公开的实施方案的含氮化合物。

[0119] 图2显示了根据本公开的实施方式的有机电致发光装置的截面图,其中空穴传输区HTR包括空穴注入层HIL和空穴传输层HTL,并且电子传输区ETR包括电子注入层EIL和电子传输层ETL。图3显示了根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10的截面图,其中空穴传输区HTR包括空穴注入层HIL、空穴传输层HTL和电子阻挡层EBL,并且电子传输区ETR包括电子注入层EIL、电子传输层ETL和空穴阻挡层HBL。

[0120] 第一电极EL1可具有导电性(例如,可以是导电的)。第一电极EL1可使用金属合金和/或导电化合物形成。在一些实施方式中,第一电极EL1可以是阳极。

[0121] 第一电极EL1可为透射电极、半反射电极或反射电极。当第一电极EL1为透射电极时,第一电极EL1可使用透明的金属氧化物形成,例如,氧化铟锡(ITO)、氧化铟锌(IZO)、氧化锌(ZnO)、氧化铟锡锌(ITZO)等。当第一电极EL1是半反射电极或反射电极时,第一电极EL1可包括银(Ag)、镁(Mg)、铜(Cu)、铝(Al)、铂(Pt)、钯(Pd)、金(Au)、镍(Ni)、钕(Nd)、铱(Ir)、铬(Cr)、锂(Li)、钙(Ca)、LiF/Ca、LiF/Al、钼(Mo)、钛(Ti)、其化合物或其混合物(例如,Ag和Mg的混合物)。在一些实施方式中,第一电极EL1可具有多层的结构,该多层的结构包括使用上述材料形成的反射层或半反射层,和/或使用ITO、IZO、ZnO、ITZO等形成的透射导电层。在一些实施方式中,第一电极EL1可包括ITO/Ag/ITO的多层。

[0122] 空穴传输区HTR可在第一电极EL1上。空穴传输区HTR可包括空穴注入层HIL、空穴传输层HTL、空穴缓冲层和电子阻挡层中的至少一个。

[0123] 空穴传输区HTR可具有使用单种材料形成的单层结构、使用多种不同材料形成的单层结构或包括使用多种不同材料形成的多个层的多层结构。

[0124] 在一些实施方式中,例如,空穴传输区HTR可具有包括例如空穴注入层HIL或空穴传输层HTL的单层结构,并且该单层可使用空穴注入材料和空穴传输材料形成。在一些实施方式中,空穴传输区HTR可具有使用多种不同材料形成的单层结构,或包括但不限于在下述之一下方的第一电极EL1的多层层压结构:空穴注入层HIL/空穴传输层HTL、空穴注入层HIL/空穴传输层HTL/空穴缓冲层、空穴注入层HIL/空穴缓冲层、空穴传输层HTL/空穴缓冲层,或空穴注入层HIL/空穴传输层HTL/电子阻挡层EBL。

[0125] 空穴传输区HTR可使用一种或多种适当的方法形成,比如真空沉积法、旋转涂布法、浇铸法、朗缪尔-布罗基特(LB)法、喷墨打印法、激光打印法和/或激光诱导的热成像(LITI)法。

[0126] 根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10的空穴注入层HIL可包括任何适当的空穴注入材料。在一些实施方式中,例如,空穴注入层HIL可包括含三苯胺的聚醚酮(TPAPEK)、4-异丙基-4'-甲基二苯基碘鎓四(五氟苯基)硼酸盐(PPBL)、N,N'-二苯基-N,N'-双-[4-(苯基-间甲苯基-氨基)-苯基]-4,4'-二胺(DNTPD)、酞菁化合物(比如,酞菁铜)、4,4',4''-三(3-甲基苯基苯基氨基)三苯胺(m-MTDATA)、N,N'-二(1-萘基)-N,N'-二苯基联苯胺(NPB)、N,N'-双(1-萘基)-N,N'-二苯基-4,4'-二胺( $\alpha$ -NPD)、4,4',4''-三(N,N-二苯基氨基)三苯胺(TDATA)、4,4',4''-三(N,N-2-萘基苯基氨基)三苯胺(2-TNATA)、聚苯胺/十二烷基苯磺酸(PANI/DBSA)、聚(3,4-乙撑二氧噻吩)/聚(4-苯乙烯磺酸酯)(PEDOT/PSS)、聚苯胺/樟脑磺酸(PANI/CSA)、聚苯胺/聚(4-苯乙烯磺酸酯)(PANI/PSS)、二吡嗪并[2,3-f:2',3'-h]喹喔啉-2,3,6,7,10,11-六腈(HAT-CN)等。但是,本公开的实施方式不限于此。

[0127] 根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10的空穴传输层HTL可包括任何适当



的空穴传输材料。例如,空穴传输层HTL可包括1,1-双[(2-4-甲基氨基)苯基]环己烷(TAPC)、咪唑衍生物(比如N-苯基咪唑和/或聚乙烯咪唑)、N,N'-双(3-甲基苯基)-N,N'-二苯基-[1,1-联苯]-4,4'-二胺(TPD)、4,4',4''-三(N-咪唑基)三苯胺(TCTA)、N,N'-二(1-萘基)-N,N'-二苯基联苯胺(NPB)、N,N'-双(1-萘基)-N,N'-二苯基-4,4'-二胺( $\alpha$ -NPD)等。但是,本公开的实施方式不限于此。

[0128] 电子阻挡层EBL可包括本领域可用的任何适当的材料。电子阻挡层EBL可包括例如咪唑类衍生物(比如N-苯基咪唑)、茈类衍生物、N,N'-双(3-甲基苯基)-N,N'-二苯基-[1,1-联苯]-4,4'-二胺(TPD)、三苯胺类衍生物(比如4,4',4''-三(N-咪唑基)三苯胺(TCTA))、N,N'-二(萘-1-基)-N,N'-二苯基-联苯胺(NPD)、4,4'-亚环己基双[N,N-双(4-甲基苯基)苯胺](TAPC)、4,4'-双[N,N-(3-甲基苯基)氨基]-3,3'-二甲基联苯(HMTPD)、mCP等。另外,如上所述,电子阻挡层EBL可包括根据本公开的实施方式的含氮化合物。

[0129] 在一些实施方式中,空穴传输区HTR的厚度可为约100 Å至约10,000 Å,例如,约100 Å至约5,000 Å。在一些实施方式中,空穴注入层HIL的厚度可为,例如,约30 Å至约1,000 Å,并且空穴传输层HTL的厚度可为约30 Å至约1,000 Å。在一些实施方式中,例如,电子阻挡层EBL的厚度可为约10 Å至约1,000 Å。当空穴传输区HTR、空穴注入层HIL、空穴传输层HTL和电子阻挡层EBL的厚度满足上述范围时,在不显著增加驱动电压的情况下,可实现满意的空穴传输特性。

[0130] 在一些实施方式中,除了上述材料,空穴传输区HTR可进一步包括电荷产生材料,以便增加导电性。电荷产生材料可基本上均匀或非均匀地分散在空穴传输区HTR中。在一些实施方式中,电荷产生材料可为例如p型掺杂剂。p型掺杂剂可为但不限于醌衍生物、金属氧化物或含氰基的化合物。p型掺杂剂的非限制性实例可包括醌衍生物(比如四氰基醌二甲烷(TCNQ)和/或2,3,5,6-四氟-7,7,8,8-四氰基醌二甲烷(F4-TCNQ))、金属氧化物(比如钨氧化物和/或钼氧化物)等。

[0131] 如上所述,除了空穴注入层HIL和空穴传输层HTL,空穴传输区HTR可进一步包括空穴缓冲层和电子阻挡层EBL中的至少一个。空穴缓冲层可根据从发光层EML发射的光的波长补偿光学共振距离,并且可从而增加发光效率。空穴传输区HTR中包括的材料可用作空穴缓冲层中的材料。

[0132] 在一些实施方式中,空穴传输区HTR可进一步包括电子阻挡层EBL,并且电子阻挡层EBL可在空穴传输层HTL和发光层EML之间。电子阻挡层EBL是可起到阻止来自电子传输区ETR的电子注入至空穴传输区HTR的作用的层。

[0133] 发光层EML可在空穴传输区HTR上。发光层EML的厚度可为例如,约100 Å至约300 Å。发光层EML可具有使用单种材料形成的单层结构、使用多种不同材料形成的单层结构,或具有使用多种不同材料形成的多个层的多层结构。

[0134] 发光层EML可发射红色、绿色、蓝色、白色、黄色和/或青色光。发光层EML可包括荧光发射材料和/或磷光发射材料。

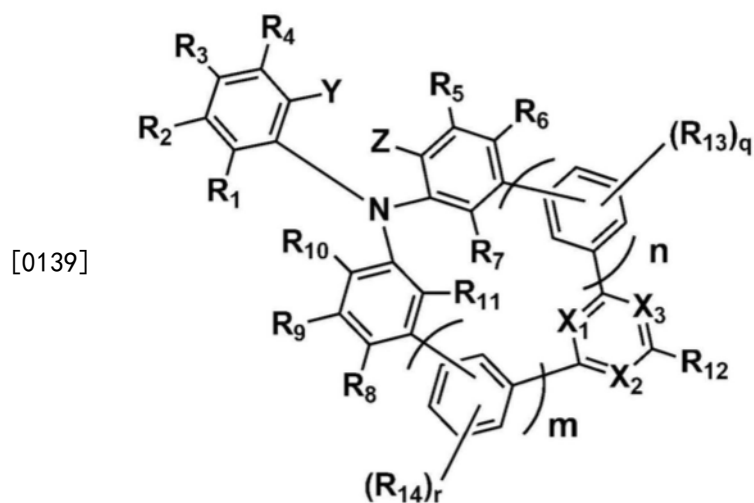
[0135] 根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10中的发光层EML可为荧光发光层。根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10中的发光层EML可为发射蓝光的荧光发光层。例如,可从发光层EML发射的一部分光可由于热激活延迟荧光。在一些实施方式中,根据

本公开的实施方式的有机电致发光装置10的发光层EML可包括发射热激活延迟荧光的发光组分,并且根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10的发光层EML可为发射热激活延迟荧光的蓝色发光层。

[0136] 在一些实施方式中,在根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10中,发光层EML可包括主体和掺杂剂。掺杂剂可包括根据本公开的实施方式的含氮化合物。在该情况下,发光层EML可具有约100 Å至约600 Å的厚度。

[0137] 在根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10中,发光层EML可包括根据本公开的实施方式的含氮化合物。根据本公开的实施方式的有机电致发光装置在发光层EML中可包括由式1表示的含氮化合物,该发光层EML可发射荧光:

[0138] 式1



[0140] 在式1中, $X_1$ 、 $X_2$ 和 $X_3$ 中的至少两个可为N,并且其余可为 $CR_{15}$ 。 $Y$ 和 $Z$ 可各自独立地为氢原子、氘原子、 $OR_{16}$ 、 $SR_{17}$ 、 $CR_{18}R_{19}R_{20}$ 或 $SiR_{21}R_{22}R_{23}$ ,可选地, $Y$ 和 $Z$ 可彼此结合(例如,连接)而形成环。在式1中, $R_1$ 至 $R_{14}$ 可各自独立地为氢原子、氘原子、 $OR_{24}$ 、 $SR_{25}$ 、 $(C=O)R_{26}$ 、 $NR_{27}R_{28}$ 、 $CR_{29}R_{30}R_{31}$ 、 $SiR_{32}R_{33}R_{34}$ 、取代的或未取代的具有1至20个碳原子的烷基、取代的或未取代的具有6至30个成环碳原子的芳基或取代的或未取代的具有2至30个成环碳原子的杂芳基,可选地, $R_1$ 至 $R_{14}$ 可各自独立地与相邻基团结合(例如,连接)而形成环。另外, $R_{15}$ 至 $R_{34}$ 可各自独立地为氢原子、氘原子、卤素原子、氰基、取代的或未取代的甲硅烷基、取代的或未取代的具有1至20个碳原子的烷基、取代的或未取代的具有6至30个成环碳原子的芳基或取代的或未取代的具有2至30个成环碳原子的杂芳基,可选地, $R_{15}$ 至 $R_{34}$ 可各自独立地与相邻基团结合(例如,连接)而形成环。

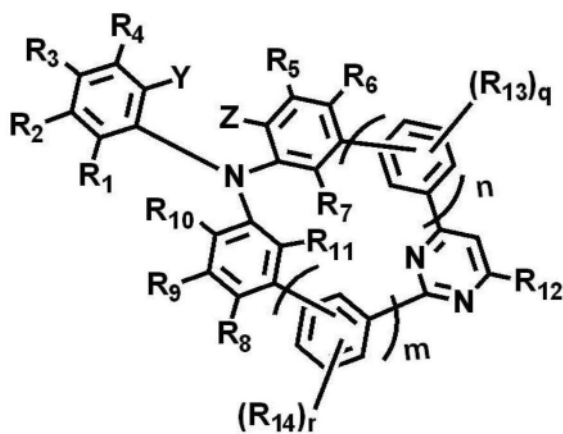
[0141] 在式1中, $n$ 和 $m$ 可各自独立地为1或2,且 $q$ 和 $r$ 可各自独立地为选自0至4的整数。

[0142] 在描述根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10中使用的由式1表示的含氮化合物时, $X_1$ 至 $X_3$ 、 $Y$ 、 $Z$ 、 $R_1$ 至 $R_{34}$ 、 $n$ 、 $m$ 、 $q$ 和 $r$ 可各自独立地与上述相同。

[0143] 在一些实施方式中,在根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10中,发光层EML可包括由式1-1或式1-2表示的含氮化合物:

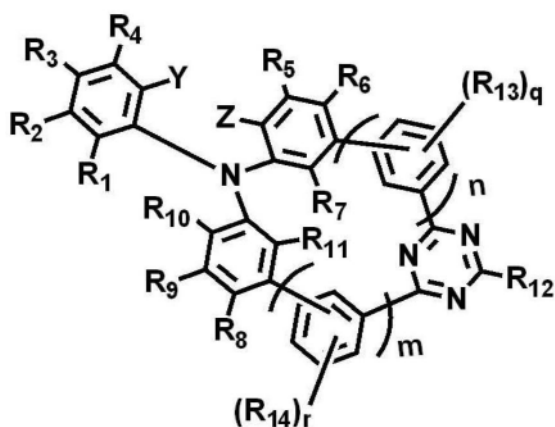
[0144] 式1-1

[0145]



[0146] 式1-2

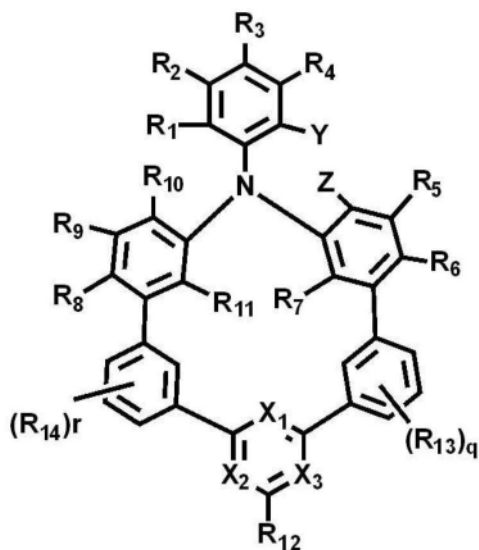
[0147]

[0148] 在式1-1和式1-2中, Y、Z、n、m、R<sub>1</sub>至R<sub>34</sub>、q和r可各自独立地与式1中的定义相同。

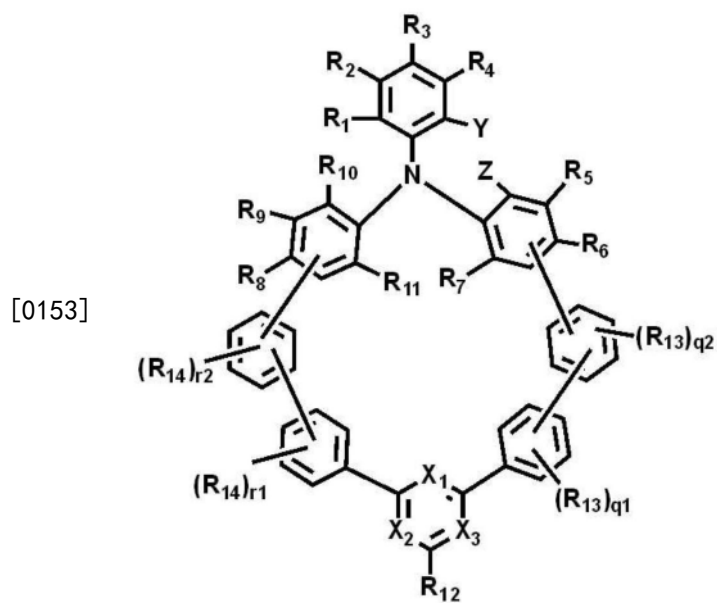
[0149] 在一些实施方式中, 在根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10中, 发光层EML可包括由式1-3至式1-6中的一个表示的含氮化合物:

[0150] 式1-3

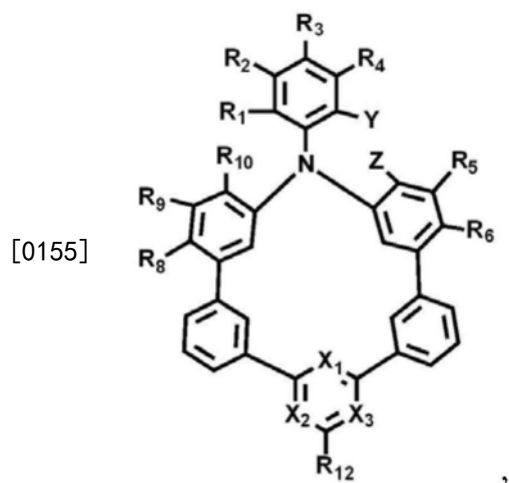
[0151]



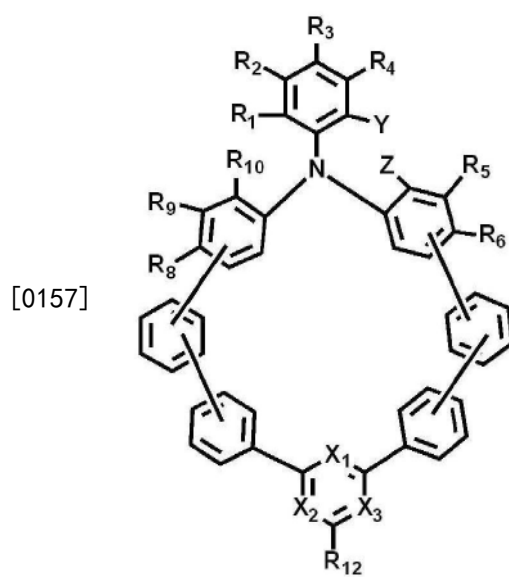
[0152] 式1-4



[0154] 式1-5



[0156] 式1-6



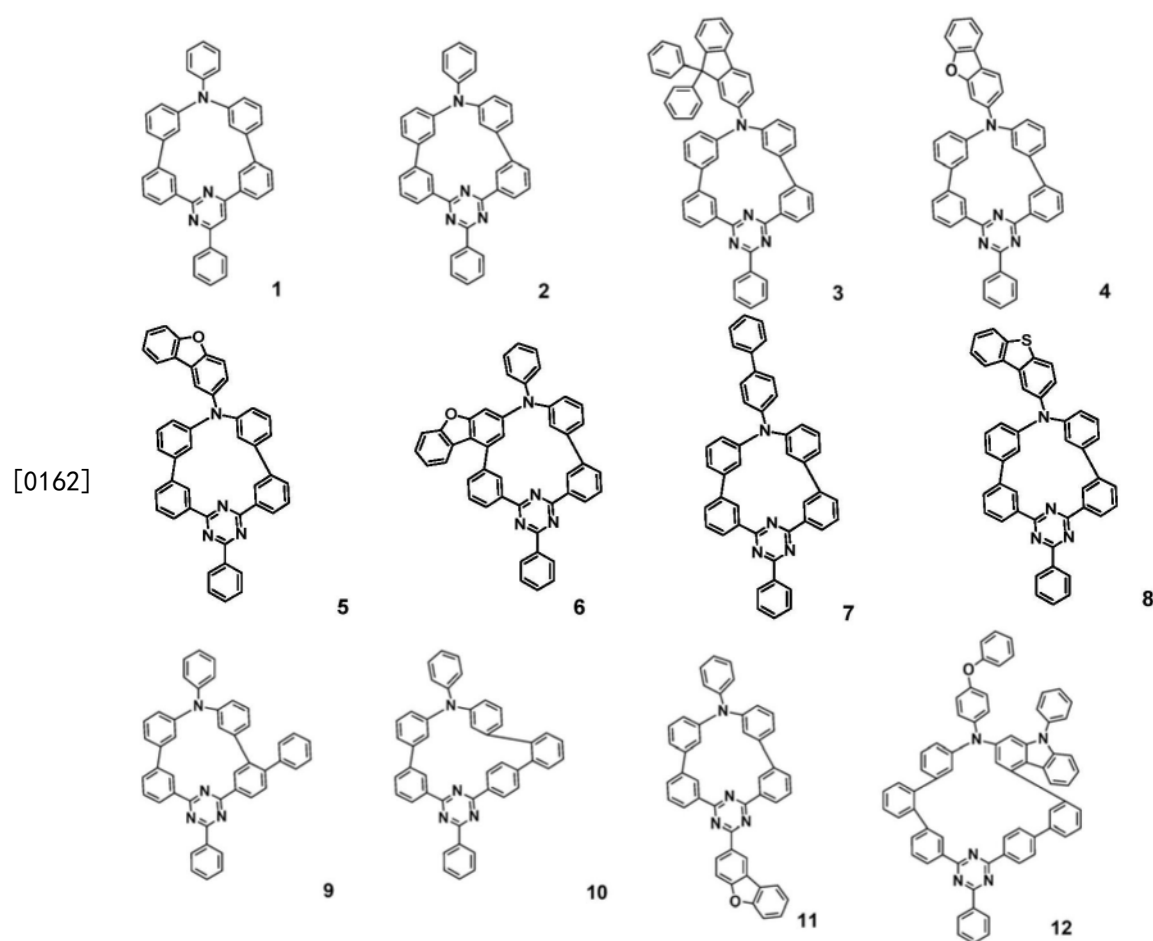
[0158] 式1-3和式1-4中, q1、q2、r1和r2可各自独立地为选自0至4的整数。另外, 在式1-3

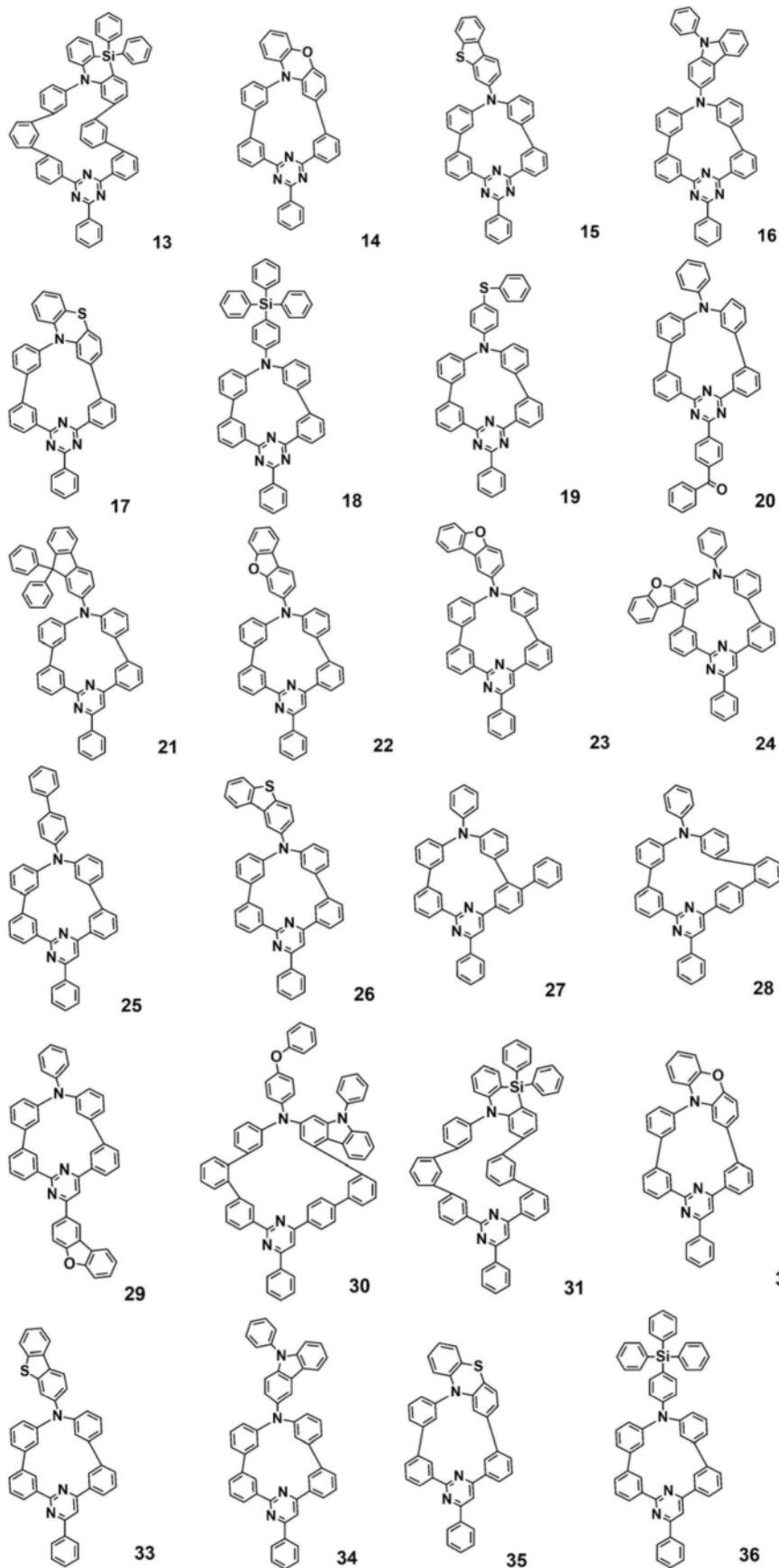
至式1-6中,  $X_1$ 至 $X_3$ 、Y、Z、 $R_1$ 至 $R_{34}$ 、q和r可各自独立地与结合式1的描述相同。

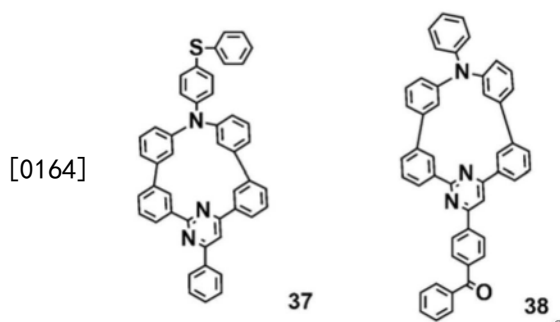
[0159] 根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10在发光层EML中可包括由式1表示的含氮化合物, 并且可发射延迟荧光。例如, 根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10在发光层EML中可包括根据本公开的实施方式的如由式1表示的含氮化合物, 并且可发射热激活延迟荧光。根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10的发光层EML可包括由式1表示的含氮化合物作为掺杂剂材料, 用于发射热激活延迟荧光。

[0160] 根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10在发光层EML中可包括化合物组1中表示的至少一种化合物。例如, 根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10在发光层EML中可包括化合物组1中表示的至少一种化合物作为掺杂剂材料。根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10的发光层EML中可包括选自化合物组1表示的化合物中的至少一种含氮化合物作为掺杂剂材料用于热激活延迟荧光:

[0161] 化合物组1







[0165] 在一些实施方式中,根据本公开的实施方式的有机电致发光装置中的发光层EML可包括根据本公开的实施方式的含氮化合物作为掺杂剂用于热激活延迟荧光,并且可进一步包括主体材料用于热激活延迟荧光。在一些实施方式中,例如,根据本公开的实施方式的发光层EML可包括下述至少一种作为主体材料:双[2-(二苯基膦)苯基]醚氧化物(DPEPO)、4,4'-双(咔唑-9-基)联苯(CBP)、1,3-双(咔唑-9-基)苯(mCP)、2,8-双(二苯基磷酰基)二苯并[b,d]呋喃(PPF)、4,4',4''-三(咔唑-9-基)-三苯胺(TcTa)、1,3,5-三(N-苯基苯并咪唑-2-基)苯(TPBi)、3,3'-双(N-咔唑基)-1,1'-联苯(mCBP)和/或2,4,6-三(联苯-3-基)-1,3,5-三嗪(T2T)。在一些实施方式中,根据本公开的实施方式的有机电致发光装置中的发光层EML可进一步包括任何适当的主体材料,例如,三(8-羟基喹啉)铝( $\text{Alq}_3$ )、聚(正乙烯基咔唑)(PVK)、9,10-二(萘-2-基)蒽(ADN)、3-叔丁基-9,10-二(萘-2-基)蒽(TB ADN)、二苯乙烯基芳烃(DSA)、4,4'-双(9-咔唑基)-2,2'-二甲基-联苯(CDBP)、2-甲基-9,10-双(萘-2-基)蒽(MADN)、六苯基环三磷腈(CP1)、1,4-双(三苯基甲硅烷基)苯(UGH2)、六苯基环三硅氧烷( $\text{DPSiO}_3$ )和八苯基环四硅氧烷( $\text{DPSiO}_4$ )。

[0166] 在一些实施方式中,除了根据本公开的实施方式的含氮化合物,发光层EML可进一步包括用于发射延迟荧光的任何适当的掺杂剂。例如,根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10的发光层EML可进一步包括下述中的至少一种作为掺杂剂:10-苯基-10H,10'H-螺[吡啶-9,9'-蒽]-10'-酮(ACRSA)、3,4,5,6-四-9H-咔唑-9-基-1,2-苯二腈(4CzPN)、2,4,5,6-四-9H-咔唑-9-基-间苯二腈(4CzIPN)、双[4-9,9-二甲基-9,10-二氢吡啶]苯基]砜(DMAC-DPS)和2-吩噻嗪-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(PSZ-TRZ)。在一些实施方式中,发光层EML可进一步包括任何适当的掺杂剂材料,例如,苯乙烯基衍生物(比如1,4-双[2-(3-N-乙基咔唑基)乙烯基]苯(BCzVB)、4-(二-对甲苯基氨基)-4'-[(二-对甲苯基氨基)苯乙烯基]芪(DPAVB)和/或N-(4-((E)-2-(6-((E)-4-(二苯基氨基)苯乙烯基)萘-2-基)乙烯基)苯基)-N-苯基苯胺(N-BDAVB))、茈和其衍生物(比如2,5,8,11-四-叔丁基茈(TBP))、茈和其衍生物(比如1,1-二茈、1,4-二茈基苯和/或1,4-双(N,N-二苯基氨基)茈)等。

[0167] 在一些实施方式中,根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10的发光层EML可发射蓝光。发光层EML可发射波长为约450nm至约490nm的光。

[0168] 在根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10中,电子传输区ETR可在发光层EML上。电子传输区ETR可包括空穴阻挡层HBL、电子传输层ETL和电子注入层EIL中的至少一个。但是,本公开的实施方式不限于此。

[0169] 电子传输区ETR可具有使用单种材料形成的单层结构、使用多种不同材料形成的单层结构或具有使用多种不同材料形成的多个层的多层结构。

[0170] 在一些实施方式中,例如,电子传输区ETR可具有包括电子注入层EIL或电子传输

层ETL的单层结构,并且单层结构可使用电子注入材料和电子传输材料形成。在一些实施方式中,在发光层EML上电子传输区ETR可具有包括多种不同材料的单层结构或层压的多层结构,包括但不限于电子传输层ETL/电子注入层EIL,或空穴阻挡层/电子传输层ETL/电子注入层EIL。在一些实施方式中,电子传输区ETR的厚度可为例如约100 Å至约1,500 Å。

[0171] 电子传输区ETR可使用一种或多种适当的方法(比如真空沉积法、旋转涂布法、浇铸法、朗缪尔-布罗基特(LB)法、喷墨打印法、激光打印法,和/或激光诱导的热成像(LITI)法)形成。

[0172] 当电子传输区ETR包括电子传输层ETL时,电子传输区ETR可包括但不限于例如三(8-羟基喹啉)铝( $\text{Alq}_3$ )、1,3,5-三[(3-吡啶基)-苯-3-基]苯、2,4,6-三(3'-(吡啶-3-基)联苯-3-基)-1,3,5-三嗪、2-(4-(N-苯基苯并咪唑基-1-基)苯基)-9,10-二萘基蒽、1,3,5-三(1-苯基-1H-苯并[d]咪唑-2-基)苯(TPBi)、2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-菲咯啉(BCP)、4,7-二苯基-1,10-菲咯啉(Bphen)、3-(4-联苯基)-4-苯基-5-叔丁基苯基-1,2,4-三唑(TAZ)、4-(萘-1-基)-3,5-二苯基-4H-1,2,4-三唑(NTAZ)、2-(4-联苯基)-5-(4-叔丁基苯基)-1,3,4-噁二唑(tBu-PBD)、双(2-甲基-8-羟基喹啉-N1,08)-(1,1'-联苯基-4-羟基)铝( $\text{BALq}$ )、双(苯并喹啉-10-羟基)铍( $\text{Bebq}_2$ )、9,10-二(萘-2-基)蒽(ADN),或其混合物。

[0173] 当电子传输区ETR包括电子传输层ETL时,电子传输层ETL的厚度可为约100 Å至约1,000 Å,例如,约150 Å至约500 Å。当电子传输层ETL的厚度满足上述范围时,在不显著增加驱动电压的情况下,可获得满意的电子传输特性。

[0174] 当电子传输区ETR包括电子注入层EIL时,电子传输区ETR可包括例如LiF、8-羟基喹啉锂(LiQ)、 $\text{Li}_2\text{O}$ 、BaO、NaCl、CsF、镧系金属(比如Yb)或金属卤化物(比如RbCl、RbI和/或KI)。但是,本公开的实施方式不限于此。在一些实施方式中,电子注入层EIL可使用电子传输材料和绝缘有机金属盐的混合物形成。有机金属盐可为能带隙为约4eV或更大的材料。在一些实施方式中,有机金属盐可包括例如金属乙酸盐、金属苯甲酸盐、金属乙酰乙酸盐、金属乙酰丙酮和/或金属硬脂酸盐。

[0175] 当电子传输区ETR包括电子注入层EIL时,电子注入层EIL的厚度可为约1 Å至约100 Å,和约3 Å至约90 Å。当电子注入层EIL的厚度满足上述范围时,在不诱导显著增加的驱动电压的情况下,可获得满意的电子注入特性。

[0176] 电子传输区ETR可包括如上述的空穴阻挡层。空穴阻挡层可包括例如2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-菲咯啉(BCP)和4,7-二苯基-1,10-菲咯啉(Bphen)中的至少一种。但是,本公开的实施方式不限于此。

[0177] 第二电极EL2可在电子传输区ETR上。第二电极EL2可具有导电性(例如,可为导电的)。第二电极EL2可使用金属合金和/或导电化合物形成。第二电极EL2可为阴极。第二电极EL2可为透射电极、半反射电极或反射电极。当第二电极EL2是透射电极时,第二电极EL2可包括透明的金属氧化物,例如,ITO、IZO、ZnO、ITZO等。

[0178] 当第二电极EL2是半反射电极或反射电极时,第二电极EL2可包括Ag、Mg、Cu、Al、Pt、Pd、Au、Ni、Nd、Ir、Cr、Li、Ca、LiF/Ca、LiF/Al、Mo、Ti、其化合物或其混合物(例如,Ag和Mg的混合物)。在一些实施方式中,第二电极EL2可具有多层结构,其包括使用上述材料形成的反射层或半反射层和使用ITO、IZO、ZnO、ITZO等形成的透明的导电层。



[0179] 在一些实施方式中,第二电极EL2可连接辅助电极。当第二电极EL2连接辅助电极时,第二电极EL2的电阻可下降。

[0180] 在有机电致发光装置10中,当电压施加至第一电极EL1和第二电极EL2中的每个时,从第一电极EL1注入的空穴可经空穴传输区HTR移动至发光层EML中,并且从第二电极EL2注入的电子可经电子传输区ETR移动至发光层EML中。电子和空穴可在发光层EML中复合,以产生激子,并且当从激发态跃迁至基态时,激子可发光(例如,使发出光)。

[0181] 当有机电致发光装置10为顶部发射类型(例如,顶部发射OLED)时,第一电极EL1可为反射电极且第二电极EL2可为透射电极或半反射电极。当有机电致发光装置10为底部发射类型(例如,底部发射OLED)时,第一电极EL1可为透射电极或半反射电极且第二电极EL2可为反射电极。

[0182] 根据本公开的实施方式的有机电致发光装置可在发光层中包括根据本公开的实施方式的含氮化合物,并且可具有改善的发光效率。例如,根据本公开的实施方式的有机电致发光装置可在发光层中包括根据本公开的实施方式的含氮化合物作为掺杂剂材料,从而发光层可经热激活延迟荧光组分发光,从而显示改善的发光效率。

[0183] 下文,将更详细参考实施方式和比较实施方式阐释根据本公开的实施方式的含氮化合物和包括含氮化合物的有机电致发光装置。说明下述实施方式以帮助理解本公开,而不限本公开的范围。

[0184] 实施例

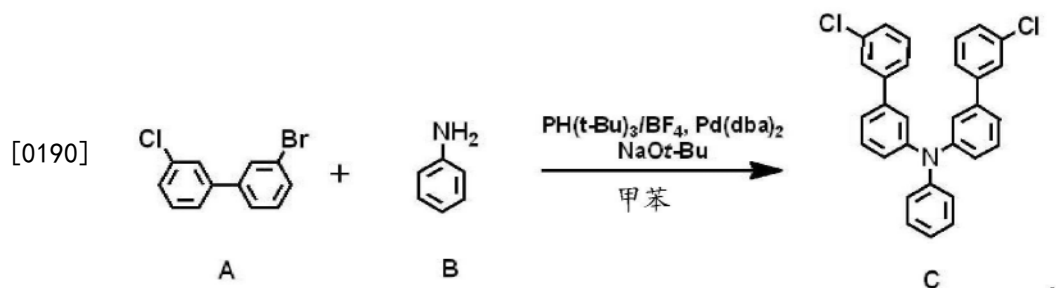
[0185] 1. 合成含氮化合物

[0186] 首先,将参考化合物1、化合物2、化合物3、化合物4和化合物11的合成方法阐释根据本公开的实施方式的含氮化合物的合成方法。本文呈现的含氮化合物的合成方法仅仅是示例性实施方式,并且用于产生根据本公开的实施方式的含氮化合物的合成方法不限于此。

[0187] 合成化合物1

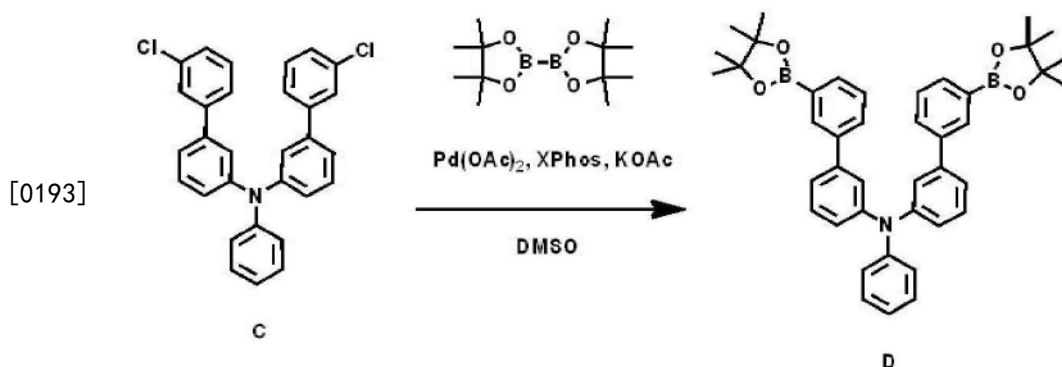
[0188] 可通过进行例如反应1-1至反应1-3的步骤合成据本公开的实施方式的含氮化合物1:

[0189] 反应1-1



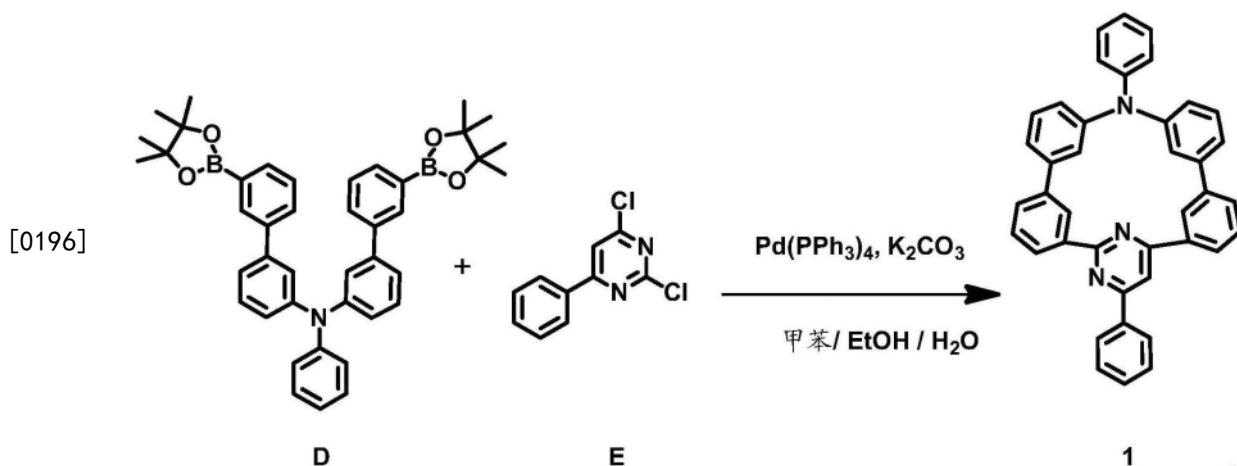
[0191] 通过反应1-1的过程合成化合物C。在反应1-1中,在氩气氛下,将6.3g的化合物A、1.1g的化合物B、0.27g的 $\text{Pd(dba)}_2$ 、0.14g的 $\text{PH(t-Bu)}_3/\text{BF}_4^-$ 和2.3g的 $\text{NaOt-Bu}$ 添加至500mL三颈烧瓶,随后在200ml的甲苯中加热和回流约15小时。在空气中冷却之后,添加水,分离有机层,并且去除溶剂。通过二氧化硅凝胶色谱(使用甲苯/己烷的混合溶剂)分离因此获得的粗产物,并且使用己烷重结晶而获得4.6g(产率83%)作为白色固体的目标产物。通过FAB-MS测量的目标产物的分子量为466。从结果中,目标产物被鉴定为化合物C。

## [0192] 反应1-2



[0194] 然后,通过反应1-2的过程由化合物C合成化合物D。在氩气氛下,将3.0g的化合物C、5.0g的双(频哪醇)二硼、0.15g的Pd(OAc)<sub>2</sub>、0.32g的XPhos和2.6g的KOAc添加至300mL三颈烧瓶,随后在60mL的DMSO溶剂中加热和回流约15小时。在空气中冷却之后,添加水,分离有机层,并且去除溶剂。通过二氧化硅凝胶色谱(使用甲苯)分离因此获得的粗产物,并且使用己烷重结晶而获得4.0g(产率87%)作为白色固体的目标产物。通过FAB-MS测量的目标产物的分子量为689。从结果中,目标产物被鉴定为化合物D。

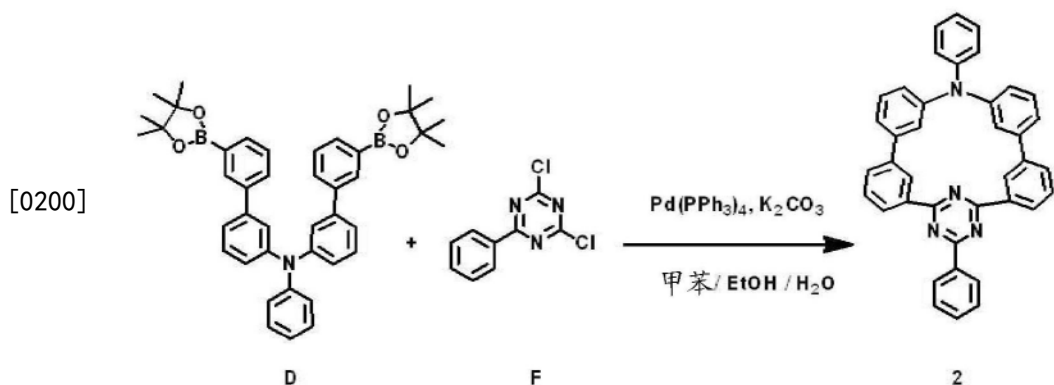
## [0195] 反应1-3



[0197] 通过反应1-3的过程合成化合物1。在氩气氛下,将1.4g的化合物D、0.5g的化合物E、0.26g的Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>和0.92g的K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>添加至300mL三颈烧瓶,随后在100mL甲苯、5mL乙醇和10mL蒸馏水的混合溶剂中加热和回流约15小时。在空气中冷却之后,添加水,分离有机层,并且去除溶剂。通过二氧化硅凝胶色谱(使用甲苯/己烷的混合溶剂)分离因此获得的粗产物,并且使用己烷重结晶而获得0.61g(产率50%)作为白色固体的目标产物。通过FAB-MS测量的目标产物的分子量为550。从结果中,目标产物被鉴定为化合物1。

## [0198] 合成化合物2

## [0199] 反应2

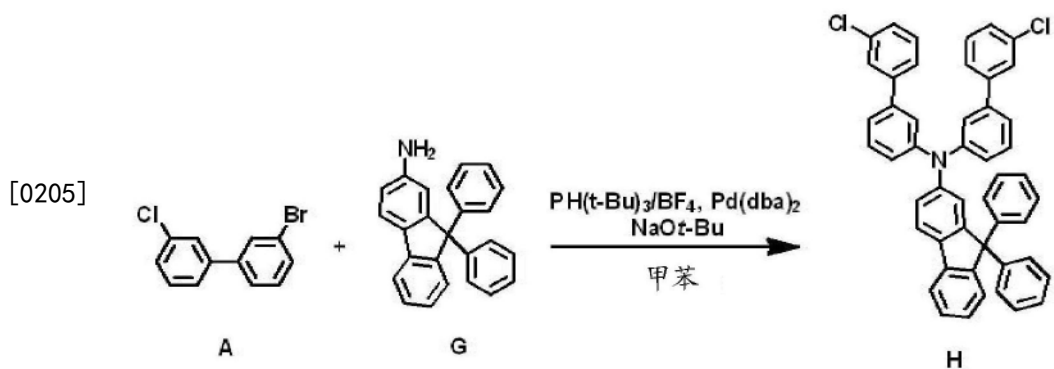


[0201] 根据本公开的实施方式的含氮化合物2可通过例如反应2的过程合成。在化合物2的合成方法中,进行与化合物1的合成方法相同的方法,不同之处是使用化合物F代替化合物E,而获得0.63g(产率73%)的目标产物,化合物2。通过FAB-MS测量的目标产物的分子量为551。从结果中,目标产物被鉴定为化合物2。

[0202] 合成化合物3

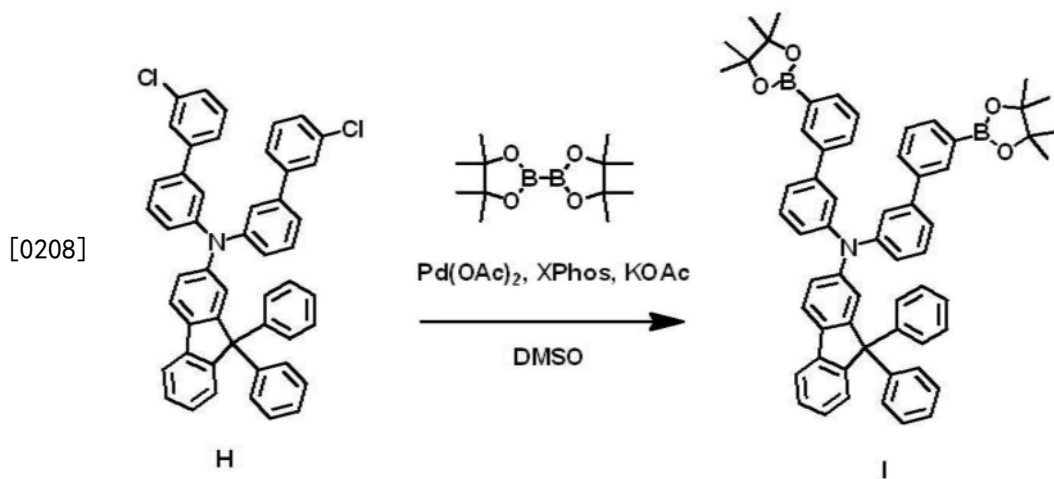
[0203] 根据本公开的实施方式的含氮化合物3可通过例如进行反应3-1至反应3-3的步骤合成:

[0204] 反应3-1



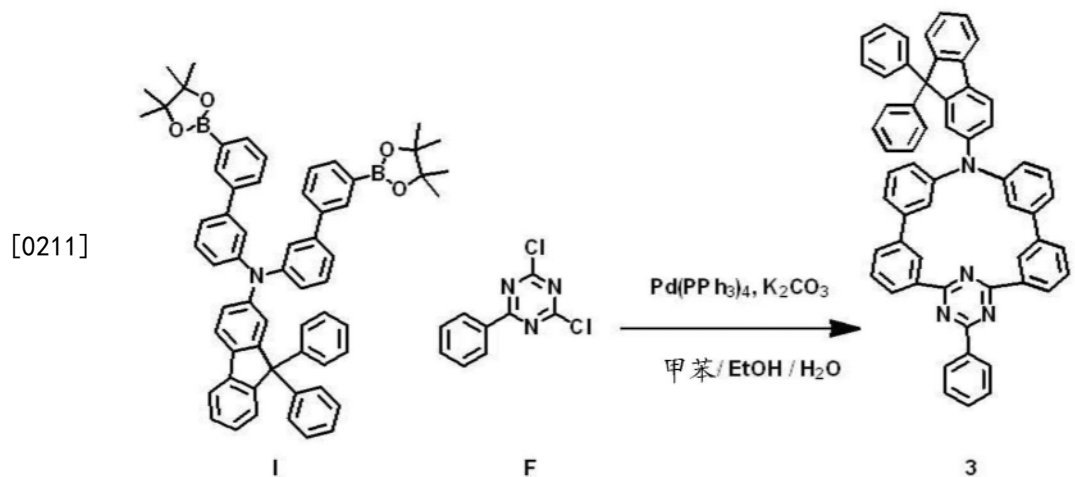
[0206] 通过反应3-1的过程合成化合物H。在化合物H的合成中,进行与反应1-1的化合物C的合成方法相同的方法,不同之处是使用化合物G代替化合物B而获得6.4g(产率78%)的目标产物,化合物H。通过FAB-MS测量的化合物H的分子量为707。

[0207] 反应3-2



[0209] 然后,通过反应3-2的过程由化合物H合成化合物I。在化合物I的合成中,进行与反应1-2的化合物D的合成方法相同的方法,不同之处是使用化合物H代替化合物C而获得3.4g (产率91%)的目标产物,化合物I。通过FAB-MS测量的化合物I的分子量为890,并且从结果中,目标产物被鉴定为化合物I。

[0210] 反应3-3

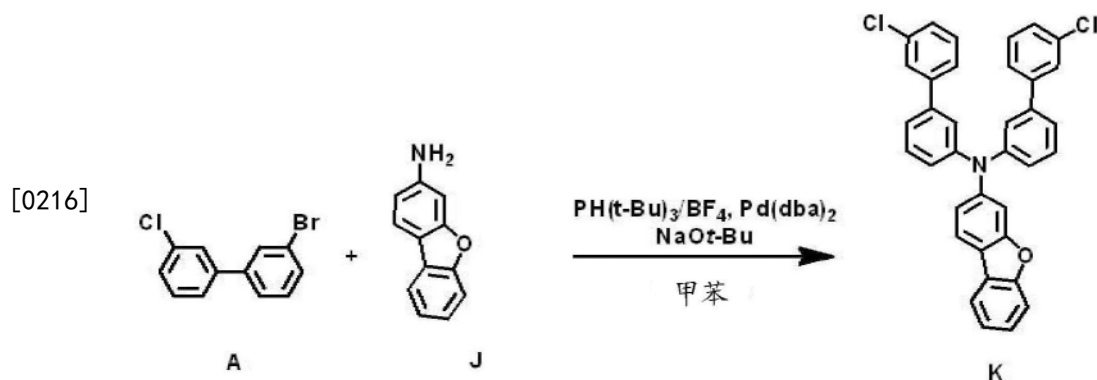


[0212] 然后,通过反应3-3的过程合成化合物3。在化合物3的合成中,进行与反应1-3的化合物I的合成方法相同的方法,不同之处是使用化合物I代替化合物D以及化合物F代替化合物E,而获得0.74g (产率43%)的目标产物,化合物3。通过FAB-MS测量的化合物3的分子量为778,并且从结果中,目标产物被鉴定为化合物3。

[0213] 合成化合物4

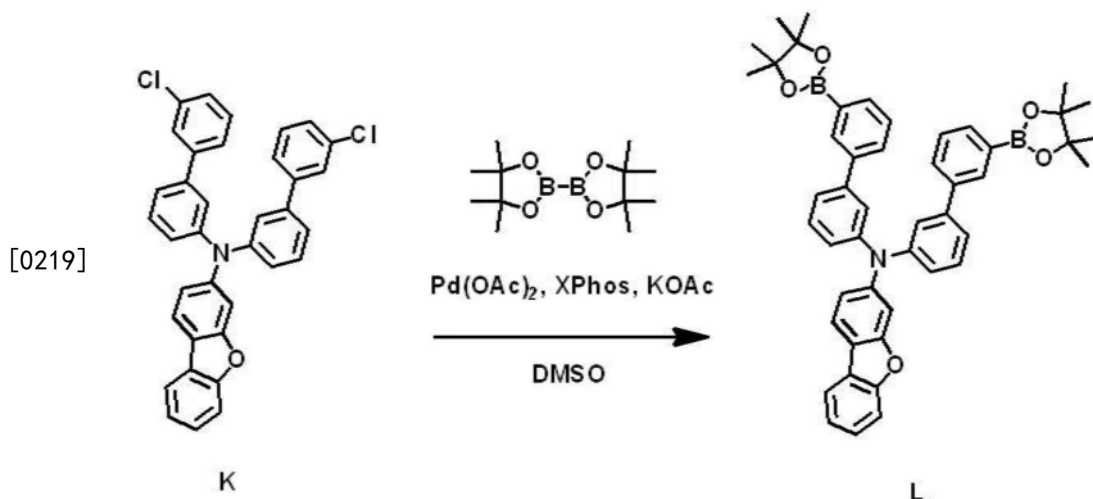
[0214] 可通过例如进行反应4-1至反应4-3的步骤合成根据本公开的实施方式的含氮化合物4:

[0215] 反应4-1



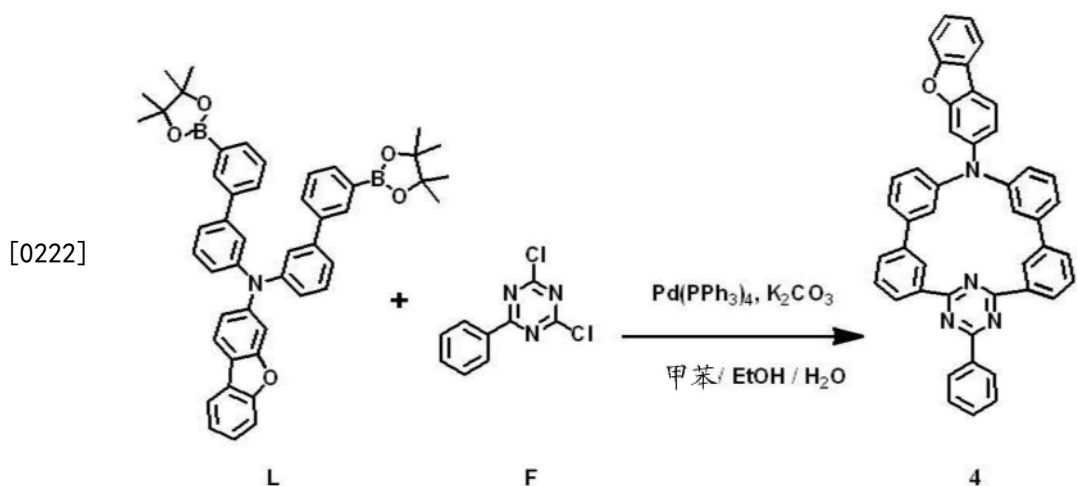
[0217] 通过反应4-1的过程合成化合物K。在化合物K的合成中,进行与反应1-1的化合物C的合成方法相同的方法,不同之处是使用化合物J代替化合物B,而获得6.2g (产率95%)的目标产物,化合物K。通过FAB-MS测量的化合物K的分子量为557。

[0218] 反应4-2



[0220] 然后,通过反应4-2的过程由化合物K合成化合物L。在化合物L的合成中,进行与反应1-2的化合物D的合成方法相同的方法,不同之处是使用化合物K代替化合物C,而获得3.7g(产率93%)的目标产物,化合物L。通过FAB-MS测量的化合物L的分子量为740,并且从结果中,目标产物被鉴定为化合物L。

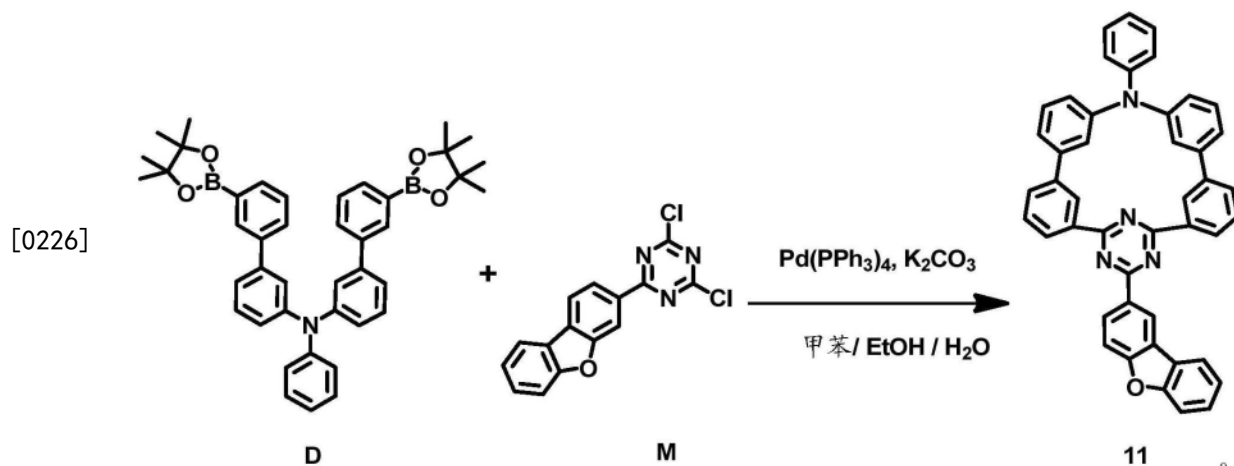
[0221] 反应4-3



[0223] 然后,通过反应4-3的过程合成化合物4。在化合物4的合成中,进行与反应1-3的化合物1的合成方法相同的方法,不同之处是使用化合物L代替化合物D并且使用化合物F代替化合物E,而获得0.51g(产率36%)的目标产物,化合物4。通过FAB-MS测量的化合物4的分子量为641,并且从结果中,目标产物被鉴定为化合物4。

[0224] 合成化合物11

[0225] 反应5



[0227] 可例如通过反应5合成根据本公开的实施方式的含氮化合物11。在化合物11的合成中,进行与反应1-3的化合物1的合成方法相同的方法,不同之处是使用化合物M代替化合物E,而获得0.42g(产率41%)的目标产物,化合物11。通过FAB-MS测量的目标产物的分子量为641,并且从结果中,目标产物被鉴定为化合物11。

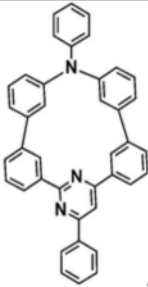
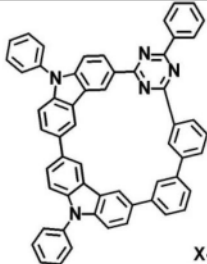
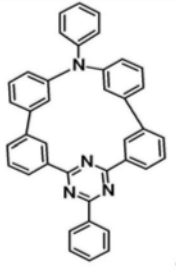
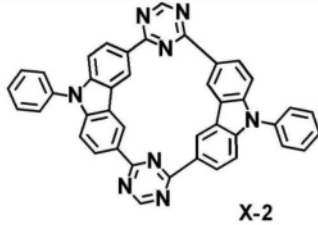
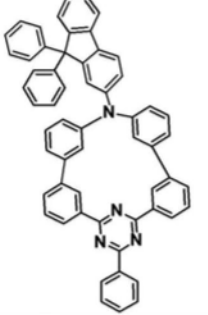
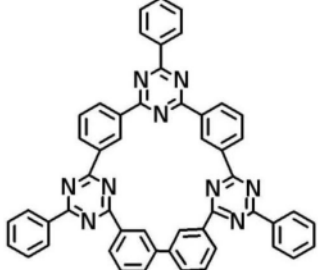
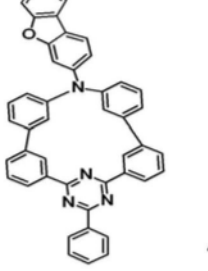
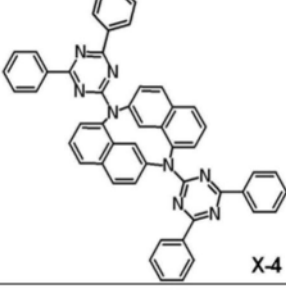
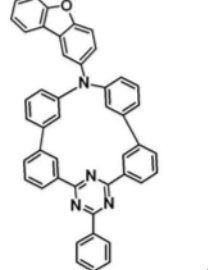
[0228] 2. 计算含氮化合物的能级

[0229] 使用非经验分子轨道方法计算示例性实施方式的各个含氮化合物和比较化合物的最低激发单重态能级(S1能级)和最低激发三重态能级(T1能级)。

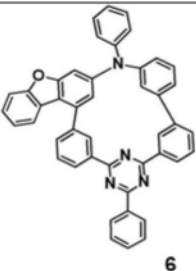
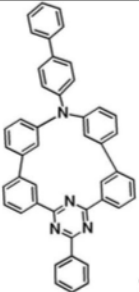
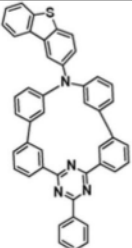
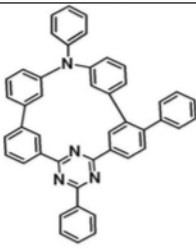
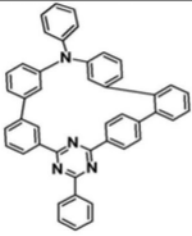
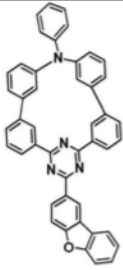
[0230] 表1显示了用于计算能级的实施例化合物和比较化合物,并且表2显示了表1中显示的各个化合物的S1能级、T1能级和 $\Delta E_{ST}$ (S1能级和T1能级之间的差,S1-T1)(单位为eV)。使用B3LYP泛函和6-31G(d)基组使用Gaussian 09(Gaussian Inc., Wallingford, CT)计算表2中显示的能级。

[0231] 表1

[0232]

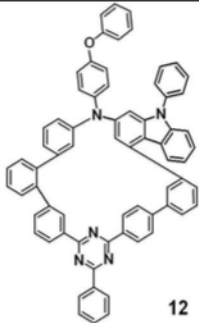
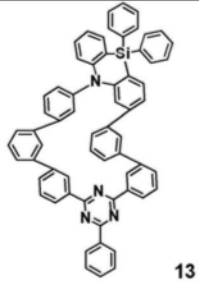
实施例化合物 1	 1	比较化合物 X-1	 X-1
实施例化合物 2	 2	比较化合物 X-2	 X-2
实施例化合物 3	 3	比较化合物 X-3	 X-3
实施例化合物 4	 4	比较化合物 x-4	 X-4
实施例化合物 5	 5		

[0233]

实施例化合物 6	 6		
实施例化合物 7	 7		
实施例化合物 8	 8		
实施例化合物 9	 9		
实施例化合物 10	 10		
实施例化合物 11	 11		



[0234]

实施例化合物 12			
实施例化合物 13			

[0235] 表2

[0236]

化合物	S1能级	T1能级	$\Delta E_{ST}$
实施例化合物1	2.96	2.90	0.06
实施例化合物2	2.86	2.79	0.07
实施例化合物3	2.81	2.75	0.06
实施例化合物4	2.86	2.79	0.07
实施例化合物5	2.85	2.78	0.07
实施例化合物6	2.78	2.63	0.15
实施例化合物7	2.84	2.78	0.06
实施例化合物8	2.85	2.78	0.07
实施例化合物9	2.76	2.70	0.06
实施例化合物10	2.83	2.75	0.06
实施例化合物11	2.85	2.78	0.07
实施例化合物12	2.52	2.50	0.02
实施例化合物13	2.98	2.98	0.00
比较化合物X-1	3.06	2.76	0.30
比较化合物X-2	3.18	2.78	0.40
比较化合物X-3	3.88	2.97	0.91
比较化合物X-4	2.71	2.16	0.55

[0237] 参考表2,发现各个实施例化合物比所有的比较化合物具有更小的  $\Delta E_{ST}$  值。发现实施例化合物1至13的  $\Delta E_{ST}$  值为约0.2eV或更小。相比之下,发现比较化合物X-1至X-4的  $\Delta E_{ST}$  值大于约0.2eV,其不同于(例如,大于)实施例化合物。

[0238] 因此,实施例化合物具有与比较化合物不同的环状结构(例如,可充当电子供体的氨基通过两个或更多个环与可充当电子受体的吡嗪基成环连接),并且当与比较例相比时还具有有效分开的HOMO和LUMO能级(例如,具有高程度的HOMO和LUMO空间分离,和/或较低

程度的HOMO和LUMO轨道重叠),导致小的 $\Delta E_{ST}$ 值。

[0239] 3. 包括含氮化合物的有机电致发光装置的制造和评估

[0240] 有机电致发光装置的制造

[0241] 通过下面描述的方法制造根据本公开的实施方式的有机电致发光装置,其中根据本公开的实施方式的含氮化合物和延迟荧光发射组分包括在发光层中。将作为说明阐释其中根据本公开的实施方式的有机电致发光装置的发光层包括含氮化合物作为荧光掺杂剂的情况。

[0242] 分别使用化合物1、化合物2、化合物3、化合物4和化合物11的含氮化合物作为发光层材料制造根据实施例1至5的有机电致发光装置;并且分别使用比较化合物X-1至X-4作为发光层材料制造根据比较例1至4的有机电致发光装置。

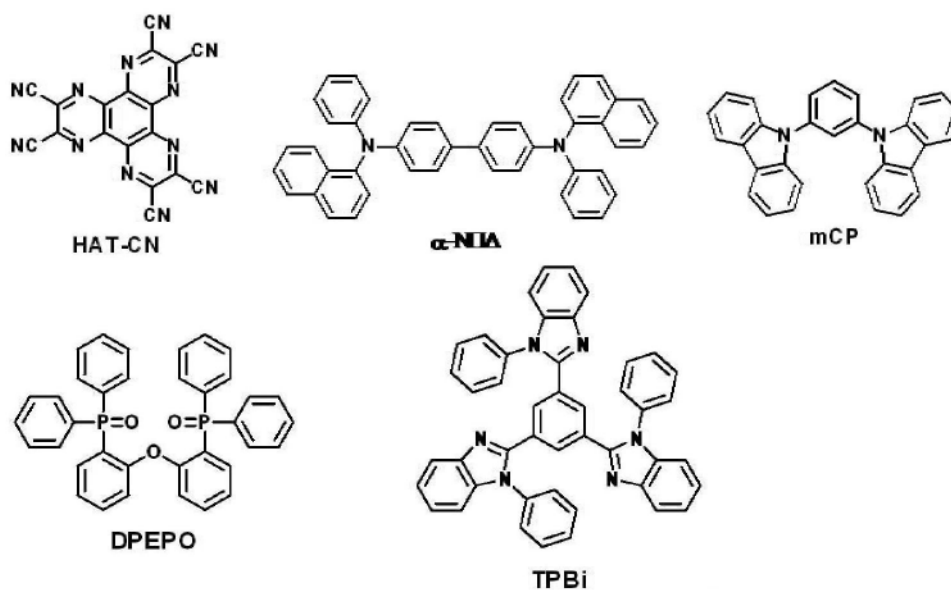
[0243] 在玻璃基板上,将ITO图案化至约1,500 Å的厚度并且用超纯水洗涤,以及进行UV臭氧处理约10分钟。然后,将HAT-CN沉积至约100 Å的厚度,将 $\alpha$ -NPD沉积至约800 Å的厚度,并且将mCP沉积至约50 Å的厚度以形成空穴传输区。

[0244] 然后,在形成发光层期间,将根据本公开的实施方式的含氮化合物或比较化合物与DPEPO以18:82的比例共沉积至约200 Å的厚度。例如,在实施例1至实施例5中分别通过沉积化合物1、化合物2、化合物3、化合物4或化合物11各自与DPEPO的混合物,或在比较例1至比较例4中分别通过沉积比较化合物X-1、X-2、X-3或X-4各自与DPEPO的混合物,获得了通过共沉积形成的发光层。

[0245] 在形成发光层之后,使用DPEPO形成厚度约100 Å的层。然后,使用TPBi形成厚度约300 Å的层,并且使用LiF形成厚度约5 Å的电子传输区层。然后,使用铝(Al)形成厚度约1000 Å的第二电极。

[0246] 在本公开的实施方式中,使用真空沉积装置形成空穴传输区、发光层、电子传输区和第二电极。

[0247] 用于制造有机电致发光装置的材料可由下述式表示:



[0249] 有机电致发光装置的特性的评估

[0250] 表3中,显示了实施例1至5和比较例1至4的有机电致发光装置的评估结果。表3中, $\lambda_{\max}$ 表示从有机电致发光装置发射的光的最大发光波长,并且 $\eta_{\text{ext}}$ 表示外部量子效率。使用C9920-12亮度光分布特征测量系统(HAMAMATSU Photonics Co.,Ltd.,Hamamatsu,日本)测量根据实施例和比较例的有机电致发光装置的发光特性。

[0251] 表3

装置制造实施例	掺杂剂材料	$\lambda_{\max}$ (nm)	$\eta_{\text{ext}}$ (%)
实施例1	化合物1	456	8.3
实施例2	化合物2	479	10.6
实施例3	化合物3	483	11.5
实施例4	化合物4	482	12.6
实施例5	化合物11	468	10.3
比较例1	比较化合物X-1	482	2.5
比较例2	比较化合物X-2	476	2.2
比较例3	比较化合物X-3	412	1.6
比较例4	比较化合物X-4	435	3.7

[0253] 参考表3的结果,可发现使用根据本公开的实施方式的含氮化合物作为发光层中材料的有机电致发光装置的实施例,在蓝色发光区域中显示高的外部量子效率。例如,发现根据实施例1至5的有机电致发光装置的最大发光波长为约450nm至约490nm,并且发现根据实施例1至5的有机电致发光装置发射蓝光。

[0254] 另外,发现根据实施例1至实施例5的有机电致发光装置显示比根据比较例1至比较例4的有机电致发光装置更高的外部量子效率。如在表2的评估结果中,当根据本公开的实施方式的含氮化合物具有合适的或适当的环状分子结构时,可获得小的 $\Delta E_{\text{ST}}$ 值,并且从结果中,可发现在发光层中包括根据本公开的实施方式的含氮化合物的根据本公开的实施方式的有机电致发光装置可展示热激活延迟荧光发射并且显示改善的外部量子效率。相比之下,在比较例中,因为发光层中使用的比较化合物没有小的 $\Delta E_{\text{ST}}$ 值(其与展示热延迟荧光相关),所以外部量子效率低。

[0255] 例如,可通过在发光层中使用根据本公开的实施方式的含氮化合物改善有机电致发光装置的发光效率。

[0256] 根据本公开的实施方式的含氮化合物具有含氮原子的环状分子结构,并且展示热和/或化学稳定特性。另外,当根据本公开的实施方式的含氮化合物在环状分子结构中具有芳基胺部分和吡嗪部分(例如,三嗪或嘧啶)时,分子的HOMO和LUMO可被有效分开(例如,空间上分开),导致小的 $\Delta E_{\text{ST}}$ 值,并且含氮化合物可作用于发射延迟荧光的材料。

[0257] 根据本公开的实施方式的有机电致发光装置在发光层中包括根据本公开的实施方式的含氮化合物,并且可展示热激活延迟荧光发射,从而确保改善的发光效率。

[0258] 根据本公开的实施方式的含氮化合物可改善有机电致发光装置的发光效率。

[0259] 根据本公开的实施方式的有机电致发光装置可在发光层中包括根据本公开的实施方式的含氮化合物,并且可实现高效率。

[0260] 如本文所使用,表述,比如“……中的至少一个”、“……的一个”和“选自”,当在一列要素之前时,修饰整列要素而不是修饰列表的单个要素。此外,当描述本公开的实施方式

时使用“可”指“本公开的一个或多个实施方式”。

[0261] 另外,如本文所使用,术语“使用(use)”、“使用(using)”和“使用(used)”可视为分别与术语“利用(utilize)”“利用(utilizing)”和“利用(utilized)”同义。

[0262] 如本文所使用,术语“基本上”、“约”和类似术语用作近似的术语而不是关于程度的术语,并且旨在考虑本领域普通技术人员将认识到的测量值或计算值的固有偏差。

[0263] 而且,本文叙述的任何数值范围旨在包括落在所叙述的范围内的相同数值精度的所有子范围。例如,“1.0至10.0”的范围旨在包括叙述的最小值1.0和叙述的最大值10.0之间(并包括叙述的最小值和最大值)的,即,具有等于或大于1.0的最小值和等于或小于10.0的最大值的所有子范围,比如,例如,2.4至7.6。本文叙述的任何最大数值界限旨在包括落在其中的所有较低的数值界限并且本说明书中叙述的任何最小数值界限旨在包括落在其中的所有较高数值界限。因此,申请人保留修改本说明书,包括权利要求的权利,以明确叙述落在本文明确叙述的范围内的任何子范围。

[0264] 尽管已经描述了本公开的示例性实施方式,但是,应理解,本公开不应限于这些示例性实施方式,而是本领域普通技术人员在如下述权利要求书和其等同物所限定的本公开的精神和范围内可进行各种改变和修饰。

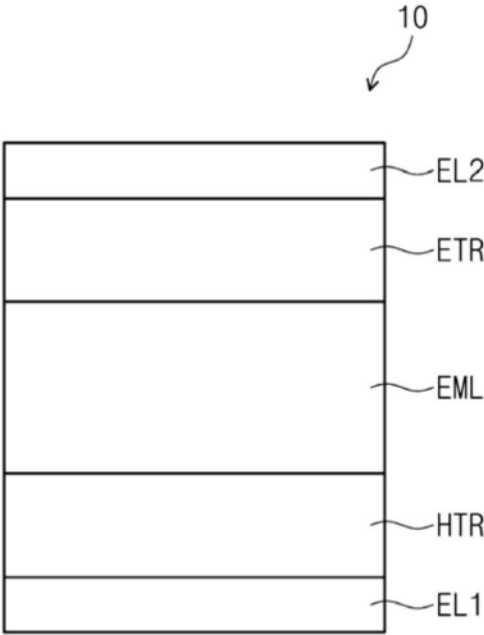


图1

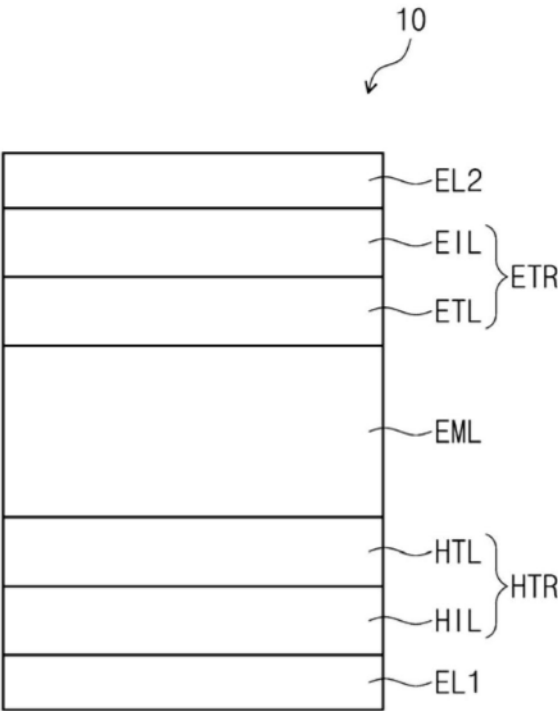


图2

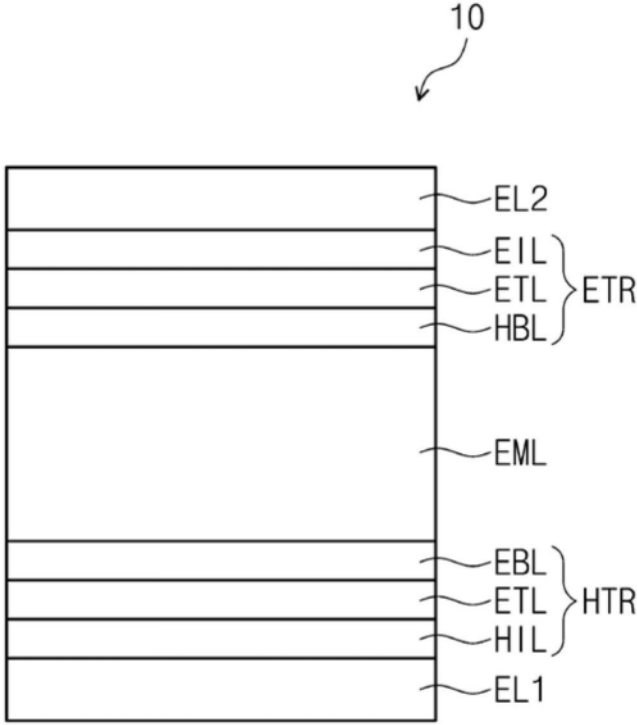


图3